

# UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

# FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO

# "MODELADO DE LAS ETAPAS INICIALES DEL PROCESO DE COMPOSTEO EN UN BIORREACTOR POR LOTES"

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE: MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA: I.B.P. RAÚL SERGIO MARTÍNEZ HERNÁNDEZ

> DIRECTOR: DR. OMAR GONZÁLEZ ORTEGA

CO-DIRECTOR: DR. RAÚL OCAMPO PÉREZ

SAN LUIS POTOSI. S.L.P. 2020



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOS



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO

# MODELADO DE LAS ETAPAS INICIALES DEL PROCESO DE COMPOSTEO EN UN BIORREACTOR POR LOTES

# TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

# PRESENTA:

# I.B.P. RAÚL SERGIO MARTÍNEZ HERNÁNDEZ

DIRECTORES:

# DR. OMAR GONZÁLEZ ORTEGA DR. RAÚL OCAMPO PÉREZ

SINODALES

Dr. Omar González Ortega Presidente

Dr. Raúl Ocampo Pérez Secretario

Dr. Raúl González García Vocal

Dr. Nahúm Andrés Medellín Castillo Vocal Firma

Firma

Firma

Firma

# AGRADECIMIENTOS A LAS INSTITUCIONES

Centro de Investigación y Estudios de Posgrado Facultad de Ciencias Químicas Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) CVU: 931339



MODELADO DE LAS ETAPAS INICIALES DEL PROCESO DE COMPOSTEO EN UN BIORREACTOR POR LOTES por Raúl Sergio Martínez Hernández se distribuye bajo una <u>Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-</u> <u>SinDerivadas 4.0 Internacional</u>.

# **DEDICATORIAS Y AGRADECIMIENTOS**

# A mis padres,

Por todo su apoyo en este trayecto. Por lo que me han enseñado y lo que aún no comprendo.

## A la familia Galindo de Dios,

Por su apoyo en los últimos años y por aceptarme en sus vidas.

## A Viridiana,

Porque puedo no solo hasta dos o hasta tres, sino contar contigo. Gracias por emprender este camino conmigo.

#### **RESUMEN EN ESPAÑOL**

El presente trabajo propone un modelo matemático para el proceso de composteo en un biorreactor tubular basado en el trabajo desarrollado por Vidriales-Escobar et al. (2017). El biorreactor se considera un sistema bifásico en donde la fase gas aporta el oxígeno y en la fase sólido-líquido crecen los microorganismos tras consumir el sustrato y el oxígeno disuelto.

El modelo matemático propuesto describe las variaciones temporales y espaciales (i.e., variaciones axial y radial) de la temperatura, las concentraciones de oxígeno y agua en ambas fases, así como las concentraciones de microorganismos y sustrato en la fase sólido-líquido. La limitación del crecimiento microbiano por consumo de sustrato se modeló mediante la ecuación de Contois, mientras que la ecuación de Monod se empleó para describir la limitación por consumo de oxígeno soluble. Además, el crecimiento microbiano se encuentra acotado por temperaturas y humedades críticas del sistema.

El modelo propuesto se resolvió en COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> mediante el método de elemento finito y fue sensible a las variaciones de la velocidad máxima de crecimiento microbiano (µm), el rendimiento de sustrato-biomasa (Ys/x), la temperatura ambiente (T<sub>amb</sub>) y la concentración inicial de agua en la fase sólido-líquido (w<sub>s0</sub>). La modificación del rendimiento oxígeno-sustrato (Yo/s) sólo afectó el consumo de oxígeno por parte de los microorganismos.

Finalmente se realizó un análisis de diseño del biorreactor para tres casos en los que el volumen total fue constante. En el análisis se modeló el decaimiento logarítmico decimal teórico de *Salmonella* para cada caso y se estudió la modificación de: i) la velocidad intersticial de la fase gas (v<sub>i</sub>), ii) la fracción másica de agua inicial en la fase sólido líquido a partir del cambio de la concentración de agua inicial (w<sub>s0</sub>) y la relación inicial biomasa-sustrato (X<sub>0</sub>/S<sub>0</sub>) y iii) el coeficiente global de transferencia de calor (U). Considerando el material del reactor modelado (i.e., PVC), el aumento en el grado de aislamiento del reactor resultó ser la opción más adecuada para obtener un apropiado grado de higienización del sistema bajo las condiciones originales de operación.

Palabras clave: Modelo matemático, Proceso de composteo, Biorreactor tubular, Simulación, Análisis de sensibilidad.

#### **RESUMEN EN INGLÉS**

A mathematical model to describe a composting process in a tubular bioreactor is proposed in this work. This model is based on the previous work by Vidriales-Escobar et al. (2017) and it considers the bioreactor as a biphasic system in which the gas phase provides the oxygen, whereas in the solid-liquid phase the microorganisms grow by consuming the substrate and dissolved oxygen.

The mathematic model describes temperature, oxygen, and water concentrations changes in both phases, as well as microorganisms and substrate concentrations in solid-liquid phase as a function of time and position in the reactor (i.e., axial and radial variations). Contois-type relation was employed to model substrate concentration inhibition, while for the oxygen concentration a Monod-type was used. In addition, microbial growth is a function of critical temperature and humidity of the composting system.

The composting model proposed was solved in COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> by finite element method. It was sensitive to the changes of maximum growth rate ( $\mu_m$ ), substrate to biomass yield (Ys/x), ambient temperature (T<sub>amb</sub>) and initial concentration of water in the solid-liquid phase (w<sub>s0</sub>). The modification of oxygen-substrate yield (Yo/s) influenced merely the consumption of oxygen by microorganisms.

Finally, a design analysis of the bioreactor was performed for three cases, in which the total volume was constant. In the analysis, a theoretical logarithmic decimal decay of *Salmonella* was performed for each case. The study consisted in the change of: i) the interstitial gas velocity (v<sub>i</sub>), ii) the initial mass fraction of water in the solid-liquid phase by varying the initial concentration of water ( $w_{s0}$ ) and the initial biomass-substate relation (X<sub>0</sub>/S<sub>0</sub>) and iii) the global heat transfer coefficient (U).

Considering the material of the bioreactor (i.e., PVC), the increase of its isolation was the most proper alternative to achieve an adequate sanitization of the composting system, under the original operation condition.

Keywords: Mathematical model, Composting process, Tubular bioreactor, Simulation, Sensitivity analysis.

# Índice general

1.	Introducción	.1
2.	Antecedentes	.3
	2.1 Generalidades del composteo	.3
	2.2 Etapas del composteo	.4
	2.2.1 Etapa mesofílica	.5
	2.2.2 Etapa termofílica	.5
	2.2.3 Etapa de enfriamiento	.6
	2.2.4 Etapa de maduración	.7
	2.3 Factores importantes durante el proceso de composteo	.7
	2.3.1 Limitación por sustrato	.7
	2.3.2 Temperatura	.9
	2.3.3 Humedad	.9
	2.3.4 Oxígeno disuelto	10
	2.3.5 Relación C/N	10
	2.4 Sistemas de composteo	11
	2.4.1 Sistemas de composteo a escala industrial	12
	2.4.2 Sistemas de composteo a escala laboratorio y piloto	14
	2.5 Estrategias para modelar el proceso de composteo	17
	2.6 Cinética de crecimiento microbiano	21
	2.6.1 Dependencia de la velocidad de crecimiento y muerte celular con la temperatura	27
	2.6.2 Dependencia de la velocidad de crecimiento celular con la humedad del sistema su descripción	y 30
	2.6.2.1 Modelos basados en balances de masa de agua y su producción biológica	37
	2.6.2.2 Modelos basados en transferencia líquido-gas y producción biológica de agu	a 38
	2.6.2.3 Modelos empíricos	39
	2.6.2.4 Modelo temporal y espacial bifásico	40
	2.7 Solución de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs)	44
3.	Modelo Teórico	48
	3.1 Modelo base	53
	3.1.1 Generalidades del modelo base	53

3.1.2 Consideraciones del modelo base	54
3.1.3 Ecuaciones del modelo base	54
3.1.3.1 Cinética de crecimiento celular	55
3.1.3.2 Cinética de consumo de sustrato	55
3.1.3.3 Transferencia de oxígeno en la fase gas	56
3.1.3.4 Transferencia de oxígeno en la fase sólido-líquido	56
3.1.3.5 Descripción de la temperatura en la fase gas	57
3.1.3.6 Descripción de la temperatura en la fase sólido-líquido	57
3.1.4 Condiciones iniciales y de frontera	57
3.1.5 Adimensionalización del modelo base	61
3.1.5.1 Cinética de crecimiento celular adimensional.	62
3.1.5.2 Cinética de consumo de sustrato adimensional	63
3.1.5.3 Concentración de oxígeno adimensional en la fase gas.	63
3.1.5.4 Descripción de la temperatura adimensional en la fase gas	64
3.1.5.5 Descripción de la temperatura adimensional en la fase sólido-líquido	64
3.1.5.6 Condiciones iniciales y de frontera adimensionales	64
3.2 Modelo de composteo propuesto	66
3.2.1 Generalidades del modelo de composteo propuesto	66
3.2.2 Ecuaciones del modelo de composteo propuesto	67
3.2.2.1 Cinética de crecimiento celular	67
3.2.2.2 Transferencia de oxígeno en la fase gas	68
3.2.2.3 Transferencia de oxígeno en la fase sólido-líquido	68
3.2.2.4 Descripción de la temperatura en la fase sólido-líquido	69
3.2.2.5 Transferencia de vapor de agua en la fase gas	69
3.2.2.6 Transferencia de agua en la fase sólido líquido	70
3.2.3 Condiciones iniciales y de frontera del modelo de composteo propuesto	70
3.2.3 Adimensionalización del modelo de composteo propuesto	71
3.2.3.1 Cinética de crecimiento celular adimensional	72
3.2.3.2 Concentración de oxígeno adimensional en la fase gas	73
3.2.3.3 Descripción de la temperatura adimensional en la fase sólido-líquido	73
3.2.3.4 Concentración de vapor de agua adimensional en la fase gas	74
3.2.3.5 Concentración de agua adimensional en la fase sólido-líquido	74
3.2.3.6 Condiciones iniciales y de frontera adimensionales	74

4. Justificación e Hipótesis76							
5. Objetivos77							
6. Material y métodos77							
6.1 Valoración del modelo base	78						
6.1.1 Análisis de las ecuaciones adimensionales del modelo base	78						
6.1.2 Corroboración del código original para la solución del modelo base	78						
6.1.3 Solución del modelo base en COMSOL Multiphysics <sup>®</sup>	79						
6.1.4 Análisis dimensional de las ecuaciones del modelo base	81						
6.2 Desarrollo del modelo de composteo propuesto	81						
6.2.1 Modificaciones del modelo base	81						
6.2.2 Adición de las variaciones de la concentración de agua en las fases gas y sólic líquido	do- 82						
6.3 Análisis del modelo de composteo propuesto	84						
6.3.1 Análisis de sensibilidad	84						
6.3.2 Análisis de diseño	85						
7. Resultados y Discusión	88						
7.1 Resultados de la valoración del modelo base	88						
7.2 Desarrollo del modelo de composteo propuesto	94						
7.3 Análisis del modelo de composteo propuesto	100						
7.3.1 Análisis de sensibilidad del modelo propuesto	100						
7.3.2 Estudio de diseño del modelo propuesto	108						
7.3.2.1 Caso 1: Sistema de composteo original	108						
7.3.2.2 Caso 2: Reducción del radio del sistema de composteo	115						
7.3.2.3 Caso 3: Ampliación del radio del sistema de composteo	120						
8. Conclusiones y perspectivas	126						
Bibliografía129							
Anexo A	134						
Anexo B	137						

## 1. Introducción

El composteo es el proceso mediante el cual se degrada la materia orgánica residual procedente de diversas actividades humanas, agrícolas y/o ganaderas para obtener un producto denominado composta, el cual es empleado principalmente como suplemento de nutrientes en cultivos agrícolas. La degradación de la materia orgánica durante el proceso de composteo es resultado de la actividad metabólica de los microorganismos presentes en el sistema y ocurre primordialmente en condiciones aerobias.

La composta disminuye la erosión del suelo, actúa como pesticida contra ciertos insectos (Walling et al., 2020) y es empleada en la biorremediación de suelos contaminados con metales pesados (Onwosi et al., 2017). Además, el composteo constituye un método más sustentable para la disposición de los desechos generados en las urbes y en otras áreas ya que reemplaza a los rellenos sanitarios; lo cuales suelen ser altamente contaminantes para los mantos acuíferos y las zonas aledañas, producen grandes cantidades de gases de efecto invernadero y ocupan vastas extensiones de tierra (Kiyasudeen et al., 2016; Walling et al., 2020).

La aplicación mundial del proceso de composteo se ha incrementado de forma significativa en las últimas décadas, al igual que la investigación científica del tema; especialmente en relación al desarrollo de modelos matemáticos para su descripción (Walling et al., 2020). Aunque estos modelos matemáticos son altamente heterogéneos, el modelado permite ahorrar recursos económicos y tiempo mediante la simulación del proceso de composteo y la evaluación de modificaciones al proceso (I. Mason, 2006; Vidriales-Escobar et al., 2017). En México, el modelado matemático permitiría identificar las modificaciones relevantes para mejorar la eliminación de microorganismos patógenos en las principales plantas de composteo de una de las ciudades más pobladas del mundo (Alvarez Zeferino et al., 2017).

Algunos modelos propuestos en la literatura establecen consideraciones que se alejan significativamente de la naturaleza biológica del proceso y/u omiten procesos

biológicos relevantes, por lo que la descripción de un proceso tan complejo como el composteo es sesgada y limitada. Pese a ello, todos los modelos matemáticos son susceptibles a mejoras. Por lo anterior, la presente Tesis plantea el desarrollo de un modelo matemático basado en la cinética de crecimiento microbiano y que contempla los cambios temporales y espaciales de las variables de interés. Además, el modelo propuesto resalta el efecto de la concentración de agua en el desarrollo de los microorganismos del sistema de composteo.

#### 2. Antecedentes

#### 2.1 Generalidades del composteo

El composteo es una práctica ancestral cuyo principal objetivo ha sido el enriquecimiento de suelos en la agricultura. El desarrollo de esta práctica fue mayoritariamente empírico hasta 1973, cuando comenzó a adoptar un sentido más técnico fundamentado en estudios académicos (Epstein, 2011).

Actualmente, se reconoce que el composteo es un proceso derivado de la descomposición de materia orgánica procedente de diversas fuentes (e.g., desechos municipales, agrícolas o ganaderos) por actividad de un consorcio diverso de microorganismos presentes en el sistema en condiciones naturales o controladas. Debido a su factibilidad termodinámica dicho proceso de degradación suele ser aerobio (Onwosi et al., 2017), es decir los microorganismos requieren de la presencia de oxígeno para llevar a cabo el metabolismo de la materia orgánica; aunque también puede realizarse en condiciones anaerobias (Insam et al., 2009).

En condiciones aerobias, el proceso de degradación de la materia orgánica suele ser exotérmico debido al metabolismo microbiano; con la consecuente emisión de energía en forma de calor hacia el medio (Insam et al., 2009; Onwosi et al., 2017). Lo anterior es una de las características más atractivas del proceso ya que el aumento de temperatura en el sistema conlleva a la destrucción gradual de organismos patógenos y de semillas de maleza (Epstein, 2011).

En general los productos finales del composteo son CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O y una mezcla compleja denominada composta que suele contener minerales como nitrógeno, fósforo y potasio; así como compuestos húmicos (Insam et al., 2009) que representan la fracción orgánica que no puede degradarse por actividad microbiana debido a su alto peso molecular, a sus características aromáticas y a la presencia de grupos funcionales (Kiyasudeen et al., 2016). Por su composición, algunos autores sostienen que la composta es un material apropiado para su uso en prácticas agrícolas como sustituto de fertilizantes inorgánicos comerciales y que además puede contribuir a la

disminución de la tasa de enfermedades en plantas, puesto que el consorcio microbiano también es capaz de producir compuestos inhibidores del crecimiento de patógenos en el suelo (Onwosi et al., 2017).

La calidad de la composta se suele definir de acuerdo con criterios físicos, químicos y biológicos destacándose el contenido de nutrientes, la formación de humus, el contenido de materia orgánica estabilizada (i.e., relación entre la clase de materia orgánica remanente y la actividad microbiana), el grado de maduración asociado a la fitotoxicidad y la presencia de organismos patógenos o grado de higienización (Kiyasudeen et al., 2016).

Cabe señalar que el composteo es considerado como una de las prácticas más atractivas para reducir el impacto ambiental asociado al tratamiento de desechos; ya que permite obtener un producto de valor agregado y su higienización. Debido al aumento poblacional a nivel global se requieren métodos más sustentables para la disposición de los desechos generados en las urbes y en otras áreas que sustituyan la incineración o el confinamiento en rellenos sanitarios; actividades que conllevan a la generación de grandes cantidades de gases de efecto invernadero y el uso de vastas extensiones de tierra con potencial para desarrollar la agricultura (Onwosi et al., 2017).

Además del impacto medio ambiental inmediato asociado al proceso de composteo, éste también se ha evaluado en la biorremediación de suelos contaminados con metales pesados ya que propicia la inmovilización del contaminante. Así mismo, algunos estudios sugieren que el composteo puede emplearse en la reducción de compuestos orgánicos recalcitrantes como los farmacéuticos empleados en veterinaria, además de fungir como una fuente para la detección de enzimas termoestables o compuestos de interés industrial mediante la bioprospección (Onwosi et al., 2017).

#### 2.2 Etapas del composteo

En general, el proceso de composteo se suele diferenciar en cuatro etapas características: mesofílica, termofílica, de enfriamiento y de maduración. Cada etapa

se distingue por la variación de la temperatura del sistema (Figura 1), así como la modificación de las condiciones químicas del mismo. Lo anterior propicia que la composición microbiana del sistema sea constantemente renovada; por lo que el composteo es considerado como un proceso dinámico desde el punto de vista microbiológico (Onwosi et al., 2017).



Figura 1. Variación de la temperatura en las distintas etapas del composteo.

#### 2.2.1 Etapa mesofílica

La primera etapa del proceso de composteo es la mesofílica. En esta etapa se presentan temperaturas moderadas en el sistema; típicamente en el rango de 25 a 30°C. En estas condiciones la microbiota del sistema se compone principalmente de bacterias y hongos que compiten para degradar compuestos solubles como proteínas o carbohidratos; lo que conlleva a un aumento sustancial y acelerado de la temperatura del sistema (Onwosi et al., 2017). Sin embargo, debido a que la velocidad de crecimiento de las bacterias supera a la de los hongos, este primer grupo de microorganismos suele encontrarse en mayor proporción durante la etapa mesofílica (Insam et al., 2009).

#### 2.2.2 Etapa termofílica

Al consumir los nutrientes o sustratos del sistema los microorganismos obtienen la energía necesaria para su crecimiento y reproducción a través de una serie de reacciones bioquímicas que en su conjunto se denominan metabolismo. Sin embargo, parte de esa energía es liberada al entorno (reacción exotérmica) y la temperatura aumenta gradualmente. Esto propicia la aparición de microorganismos termófilos (i.e., microorganismos cuyo crecimiento óptimo requiere de temperaturas superiores a la ambiental) que degradan a los microorganismos inhibidos por efecto térmico del consorcio inicial, así como el sustrato soluble remanente.

La actividad metabólica de la renovada microbiota permite que la temperatura del sistema alcance un valor superior a los 50°C; lo que favorece la actividad bacteriana del género *Bacillus* (Insam et al., 2009) y promueve la muerte de organismos patógenos de humanos y plantas que pudieran estar presentes, así como de las semillas de maleza. De acuerdo con diversos autores, la duración de esta fase varía en función de la composición del sistema y la microbiota presente (Onwosi et al., 2017).

Por otra parte, aunque no existe un consenso respecto a la temperatura óptima para la actividad microbiana de los microorganismos termófilos; algunos investigadores suelen establecerla entre 52 y 60°C (Onwosi et al., 2017).

En la práctica, la temperatura del sistema puede exceder los 80°C; lo que se atribuye a la actividad de enzimas termoestables libres. Sin embargo, cuando la temperatura es tan elevada la mayoría de los organismos mesófilos mueren; lo que aumenta el tiempo de recuperación de la comunidad microbiana en la etapa de enfriamiento (Insam et al., 2009). Además, la generación excesiva de calor durante el proceso puede resultar en incendios no programados (Onwosi et al., 2017).

#### 2.2.3 Etapa de enfriamiento

Debido al consumo de sustratos solubles y la disminución de la población microbiana la temperatura del sistema disminuye gradualmente, permitiendo la recolonización de organismos mesófilos como bacterias del género *Clostridium* u hongos del género *Aspergillus* capaces de degradar almidón y/o celulosa (Insam et al., 2009).

6

### 2.2.4 Etapa de maduración

La última etapa del composteo se denomina de maduración y se caracteriza por la disminución de la calidad del sustrato disponible para los microorganismos debido a la formación de complejos de lignina-humus. En esta etapa los hongos comienzan a proliferar debido a su ventaja competitiva sobre las bacterias para adaptarse a medios menos húmedos y carentes de nutrientes (Insam et al., 2009).

# 2.3 Factores importantes durante el proceso de composteo

El estudio del proceso de composteo ha permitido identificar diversos factores que pueden influir en su eficiencia, particularmente en la actividad microbiana. Algunos factores que suelen limitar el crecimiento microbiano y por ende la velocidad de degradación de la materia orgánica son:

- i. Ausencia de materia orgánica (sustrato).
- ii. Muy altas o bajas temperaturas del sistema.
- iii. Bajas o altas condiciones de humedad.
- iv. Baja concentración de oxígeno disuelto en el medio acuoso.

Por otra parte, existen factores cuyo desequilibrio suele asociarse principalmente a la generación de composta de baja calidad; este es el caso de la relación C/N en el sistema de composteo.

# 2.3.1 Limitación por sustrato

En la práctica la mezcla de materia orgánica en el sistema de composteo no es homogénea y presenta compuestos con distintos niveles de biodegradabilidad, como se observa en la Tabla 1. Tabla 1. Nivel de biodegradabilidad de compuestos orgánicos en el proceso de composteo (Adaptado de Epstein, 2011).

Compuesto orgánico	Nivel de biodegradabilidad				
Carbohidratos					
Almidón, glucógeno, pectina					
Ácidos grasos, glicerol, lípidos, fosfolípidos	Alto. Se degrada en poco tiempo.				
Aminoácidos					
Ácidos nucleicos					
Proteínas					
Hemicelulosa	Madia. Ca dagradan lantamanta				
Celulosa	Medio. Se degradan ientamente.				
Quitina					
Compuestos aromáticos y alifáticos de bajo					
peso molecular					
Lignocelulosa	Bajo. Se degradan con baja eficiencia.				
Lignina					

La escasez de compuestos orgánicos solubles (i.e., compuestos con un nivel alto de biodegradabilidad) en el sistema de composteo condiciona la obtención de moléculas base que los microorganismos emplean para diversas funciones vitales como son el crecimiento y la reproducción.

#### 2.3.2 Temperatura

La temperatura del sistema es quizás el factor más relevante durante el composteo ya que no sólo es una consecuencia de la actividad microbiana; sino que también determina dicha actividad al propiciar la renovación de la microbiota (Insam et al., 2009). Por lo anterior, se sugiere que la regulación de la temperatura es crucial para el control del proceso de composteo (Kiyasudeen et al., 2016).

El estrés causado por una baja temperatura del sistema conlleva a que los microorganismos ralenticen su crecimiento y alarguen la etapa de adaptación a su entorno; ya que desarrollan únicamente aquellas funciones básicas que garanticen su supervivencia. Por otra parte, si la temperatura del sistema es considerablemente elevada se propicia la desnaturalización proteica; imposibilitando toda actividad metabólica (Haug, 1993). Además, la eficiencia de la descomposición de la materia orgánica disminuye conforme la temperatura aumenta (Onwosi et al., 2017) ya que, en interrelación con otros factores, suele conducir a la pérdida de nutrientes (Kiyasudeen et al., 2016).

#### 2.3.3 Humedad

La humedad es un factor crucial en el proceso de composteo ya que los microorganismos requieren de un ambiente acuoso donde los nutrientes se solubilicen y sean accesibles para realizar su metabolismo. Algunos autores consideran que el valor óptimo de humedad para el composteo depende de las propiedades fisicoquímicas y las características biológicas del sistema. Sin embargo, es común que se proponga un rango de porcentaje másico de humedad entre 40-70% (respecto al peso del sistema) para que los microorganismos crezcan adecuadamente (Onwosi et al., 2017; Haug, 1993).

El exceso de humedad en el sistema se asocia a la disminución del espacio libre para que circule el aire en el sistema (i.e., bloqueo de poros en el sistema), lo que conduce a un ambiente anaerobio y la producción de gases como metano o amoniaco (Epstein, 2011). Además, la presión osmótica generada por esta condición puede conducir a la destrucción de los microorganismos.

Por otra parte, una humedad baja del sistema propicia limitaciones en el transporte de componentes solubles como el oxígeno (Haug, 1993). En la práctica, esto ocurre conforme la temperatura aumenta en el proceso, por lo que suele ser necesario humedecer constantemente el sistema (Onwosi et al., 2017).

#### 2.3.4 Oxígeno disuelto

Dado que el composteo es un proceso aerobio, los microorganismos requieren de oxígeno soluble en el medio acuoso para que éste actúe como último aceptor de electrones de su cadena energética; con la consecuente formación de agua. Este gas suele administrarse al sistema mediante aireación natural o forzada (I. G. Mason & Milke, 2005).

La tasa de aireación influye no solo en el metabolismo de la materia orgánica, sino también en la distribución de la temperatura en el sistema. Un exceso en la tasa de aireación conlleva al secado del sistema y su enfriamiento; mientras que la baja aireación del sistema propicia un ambiente anaerobio (Onwosi et al., 2017).

#### 2.3.5 Relación C/N

Los microorganismos degradan la materia orgánica del sistema con la finalidad de obtener nutrientes para desarrollarse. Dos de los principales nutrientes para los microorganismos son el carbono, utilizado como fuente de energía, y el nitrógeno, que es mayormente empleado en la generación de estructuras celulares. Existe una relación C/N en el sistema que típicamente se establece entre 25:1, en este rango se ha determinado que el proceso metabólico ocurre sin limitación por alguno de estos dos nutrientes (Insam et al., 2009). Dicha relación implica que los microorganismos emplean el carbono disponible en el sistema mucho más rápido que el nitrógeno.

Cuando la relación C/N es mayor, el nitrógeno se vuelve un factor limitante del proceso y la velocidad de degradación disminuye. Por otra parte, si la relación es

menor el nitrógeno se encuentra en exceso y puede perderse mediante la volatilización de amoniaco a valores de pH superiores a 7.5 (Insam et al., 2009).

La relación C/N suele disminuir conforme ocurre el proceso de degradación de materia orgánica, lo que conlleva a la pérdida de nitrógeno por volatilización de amoniaco y a la generación de malos olores; así como la liberación de grandes concentraciones de sales básicas solubles debido a la descomposición de materia orgánica compleja. Esto último tendría un efecto negativo en el crecimiento de una planta a la que se le adiciona una composta con estas características. Por lo anterior, se suelen añadir al sistema cáscaras de arroz, pedazos de madera, aserrín o cáscaras de cacahuate que, además de mejorar la porosidad del sistema, permiten ajustar la relación C/N al ser también degradados durante el composteo. Así mismo, se ha observado que el uso de estos agentes contribuye al control de malos olores ya que absorben la humedad en exceso (Onwosi et al., 2017).

### 2.4 Sistemas de composteo

Los sistemas de composteo pueden diferenciarse con base en distintos criterios. Una clasificación general de estos sistemas se fundamenta en el volumen de procesamiento. Así, se pueden establecer las escalas laboratorio, piloto y gran escala o industrial (Tabla 2).

Tabla 2. Características físicas de los sistemas de reacción empleados para composteo (adaptado de Mason & Milke, 2005).

Escala del reactor	Volumen (L)	Área superficial/volumen (m²/m³)			
Laboratorio	0.4-50	14.5-88.0			
Piloto	>500	5.0-12.7			
Industrial	>5000	0.4-3.8			

### 2.4.1 Sistemas de composteo a escala industrial

El proceso de composteo a escala industrial tiene como finalidad generar grandes cantidades de composta de calidad de acuerdo con criterios físicos y químicos. Estos procesos pueden ocurrir en un dispositivo físico de dimensiones definidas (i.e., reactor) o en ausencia de éste. Por lo anterior, el composteo a escala industrial se puede clasificar en dos categorías:

- 1. Procesos de sistema libre (aquellos que no ocurren en un reactor).
- 2. Procesos de sistema delimitado (aquellos que ocurren en un reactor).

Cuando el composteo no ocurre en un reactor, el sistema suele presentar una geometría menos definida y estar expuesto al ambiente. Así mismo, los sistemas empleados en este tipo de proceso pueden clasificarse con base en la existencia o ausencia de un proceso de agitación periódica; usualmente mecánica (Figura 2). El ejemplo más común de composteo en un sistema libre con agitación es el proceso de hilera en el que la materia prima se mezcla y se coloca en pilas o hileras poco uniformes que son agitadas periódicamente. Por otra parte, el sistema de pila estática es el ejemplo más común de un sistema libre sin agitación en donde la materia prima se mezcla con pedazos de madera que mantienen la porosidad del medio y disminuyen la necesidad de agitación (Haug, 1993).



Figura 2. Clasificación de sistemas libres para composteo.

Puesto que el proceso de composteo requiere la presencia de oxígeno en el medio, los sistemas libres se airean de forma natural como resultado de la flotabilidad de los gases calientes generados o mediante un sistema de aireación forzada donde se emplean sopladores.

Por otra parte, los sistemas delimitados suelen catalogarse de acuerdo con el flujo del material orgánico en reactores de flujo vertical y de flujo horizontal o inclinado (Figura 3). A diferencia de los sistemas libres, estos requieren necesariamente de un sistema de aireación forzada (Haug, 1993).

Como se aprecia en la Figura 3, los reactores de flujo vertical pueden clasificarse a su vez en reactores de lecho agitado y lecho empacado móvil. En el primer caso, el material sólido es agitado a medida que fluye por los canales internos del reactor; mientras que en los reactores de lecho empacado móvil la mezcla sólida ocupa todo el volumen disponible en el reactor y es agitado mediante recirculación de los sólidos.



Por su parte, los reactores de flujo horizontal o inclinado se clasifican con base en las características de agitación del sistema. Uno de los reactores representativos de este tipo es el de lecho descendente o de tambor giratorio en el que el material sólido es depositado dentro de un cilindro inclinado con agitación radial. Otro ejemplo dentro de esta categoría es el reactor de lecho agitado donde el contenedor (de distintas geometrías) presenta un sistema de agitación que consiste en uno o varios barrenos. Finalmente, la última clasificación de estos reactores son los de lecho estático en los que la mezcla de sólidos es confinada y retirada mediante empuje mecánico o una cinta transportadora (Haug, 1993).

#### 2.4.2 Sistemas de composteo a escala laboratorio y piloto

Los procesos de composteo a escala laboratorio y piloto suelen emplearse con fines de investigación de diversos factores relacionados al proceso. Aunque las condiciones sin mezclado (i.e., simulación de la operación de reactores de lecho estático) han sido mayormente estudiadas, también se han realizado esfuerzos por emular el mezclado del sistema al implementar diversas estrategias o dispositivos en los sistemas de reacción. Además, debido a que se trata de un proceso aerobio, en estos reactores se adicionan mecanismos de aireación forzada continua. El aire que ingresa es previamente acondicionado mediante calentamiento y humidificación con la finalidad de disminuir los efectos de secado de la fase sólida y facilitar el monitoreo de los gases generados durante el proceso de degradación de la materia orgánica (I. G. Mason & Milke, 2005).

Una clasificación de los reactores a escala laboratorio y piloto se basa en el mecanismo de control de pérdidas de calor (I. G. Mason & Milke, 2005), lo que resulta muy conveniente dada la naturaleza del proceso de composteo y el rol crucial de la temperatura del sistema como mecanismo de control. Dicha clasificación consiste en cuatro categorías: i) Reactores de temperatura fija, ii) Reactores con autogeneración de calor, iii) Reactor controlado por diferencia de temperatura (CTD) y iv) Reactor controlado por flujo de calor (CHF).

Sólo en los reactores de la primera categoría la temperatura se determina al inicio del proceso, mientras que en el resto se permite que el sistema alcance la temperatura deseada a partir del calor generado por la actividad microbiana. La Tabla 3 expone las principales características de estos reactores, así como los factores que más se suelen estudiar con ellos.

Aunque los reactores con autogeneración de calor suelen aislarse con distintos materiales poliméricos, es frecuente el empleo de sistemas de aireación u otros dispositivos de intercambio de calor para controlar la temperatura. Así mismo, estos reactores suelen ser utilizados para modelar el proceso de composteo empleando distintas estrategias de modelado dinámico de procesos, como el método de diferencias finitas. Cabe señalar que existe un compromiso entre la relación área superficial/volumen y la cantidad de material aislante necesaria para mantener las pérdidas de calor en condiciones estacionarias. Por lo anterior en los sistemas de autogeneración de calor existen gradientes de temperatura en dirección radial (I. G. Mason & Milke, 2005), lo cual podría tener un efecto negativo en la acumulación de calor y acortar la duración de la fase termofílica.

Por otra parte, la principal diferencia entre los reactores CTD y CHF es la base del control de las pérdidas de calor en el sistema. Sin embargo, algunos autores sugieren que el control basado en el cálculo de flujos de calor es más efectivo para disminuir dichas pérdidas (I. G. Mason & Milke, 2005).

Tabla 3. Características y usos generales de reactores para composteo a escala laboratorio y piloto (Adaptado de Mason & Milke, 2005).

Tipo de reactor	Control de pérdida de calor	Estudios realizados			
		Velocidad de reacción.			
		Temperatura óptima.			
		Actividad microbiana.			
Do tomporatura fija	Sistema externo de	Degradación de compuestos específicos y tóxicos.			
De temperatura ilja	intercambio de calor	Condición del sistema en una determinada temperatura.			
		Composición del gas de salida.			
		Análisis factorial.			
		"Compostabilidad" de un sustrato.			
		Composición del gas de salida.			
Con autogeneración de	Aislamiento	Evaluación general del proceso de composteo.			
Calor		Supervivencia microbiana.			
		Validación de modelos matemáticos			
		Degradación de compuestos tóxicos.			
	Sistema de control de	Composición del gas de salida.			
Controlado por diferencia	lazo cerrado basado en	"Compostabilidad" de un sustrato.			
de temperatura	diferencias de temperatura	Evaluación general del proceso de composteo.			
Controlado por flujo de calor	Sistema de control de lazo cerrado basado en el cálculo de flujos de calor.	Degradación de sustratos.			

Dependiendo del objetivo del estudio se preferirá un tipo de reactor sobre los otros. En general, si se pretende determinar factores específicos del proceso de composteo, el sistema de temperatura fija es adecuado. Mientras que los sistemas de autogeneración de calor: CTD y CHF; permiten estudiar el proceso completo en condiciones más cercanas a las de los reactores industriales.

Cabe señalar que los reactores a escala laboratorio y piloto presentan muy bajas similitudes dimensionales con los reactores industriales. Lo anterior suele manifestarse en distintos efectos del flujo lateral de la corriente de aire. Para tratar estas discrepancias se han adoptado diversas estrategias prácticas como la determinación de tamaños de partícula promedios y su relación con el diámetro del reactor que minimice los efectos de flujo lateral. Así, para fluidos newtonianos se ha aceptado que una relación de diámetro del reactor/diámetro de partícula > 10 disminuye considerablemente estos efectos. Empleando estas recomendaciones, estudios a escala piloto con reactores tubulares sugieren que el flujo de aire en este sistema puede describirse adecuadamente mediante el modelo de flujo pistón con dispersión (I. G. Mason & Milke, 2005).

#### 2.5 Estrategias para modelar el proceso de composteo

Si bien el proceso de composteo es complejo en muchos aspectos y se encuentra a merced de las condiciones ambientales, se han implementado diversas estrategias para comprender las relaciones entre los parámetros del proceso y modelarlo. El modelado del proceso de composteo es una herramienta útil para comprender las causas de bajos rendimientos, reducir el costo de los experimentos (Onwosi et al., 2017) y fungir como referencia para el escalamiento del sistema (Vidriales-Escobar et al., 2017). Sin embargo, el grado de complejidad del modelo para conseguir una descripción del proceso a un nivel específico es proporcional a la cantidad de parámetros a estimar y que deberán ser validados mediante información experimental. Las estrategias empleadas para modelar el proceso de composteo incluyen aproximaciones estadísticas como el análisis de factores multinivel uno a la vez o el empleo de técnicas optimizadas como los diseños factoriales o los modelos estocásticos con procesos de corrección y aprendizaje. Sin embargo, los modelos más recurrentes en la literatura son los matemáticos basados en cinéticas de degradación de biomasa, en la degradación de materia orgánica o en el crecimiento celular. Aunque estos modelos presentan poca uniformidad (pues constan de Ecuaciones para estimaciones empíricas) comúnmente incluyen la descripción del balance de energía durante el composteo, así como la predicción de la cantidad de oxígeno consumido por los microorganismos. Lo anterior permite comprender la dinámica del proceso para aplicar un adecuado control de temperatura y un sistema de aireación óptimo (Onwosi et al., 2017).

En general, los modelos matemáticos basados en cinéticas que se han desarrollado pueden clasificarse en dos categorías: temporales y temporales-espaciales.

Los modelos temporales de composteo son aquellos que suelen considerar únicamente la variación de los factores estudiados en el tiempo (e.g., temperatura, concentración de oxígeno, concentración de sustrato y humedad). Tal es el caso del modelo desarrollado por Petric y Mustafić (2015) para un reactor en lote a escala laboratorio en el que se describe la cinética microbiana de dos poblaciones diferentes, así como la variación en el tiempo de dos distintos tipos de sustratos en el medio y la humedad del sistema. Sin embargo, este tipo de modelos supone un mezclado perfecto del sistema, lo cual es una simplificación irreal del proceso.

Por otra parte, los modelos temporal-espacial contemplan las variaciones en el tiempo y la posición de los factores de control del proceso de composteo, lo que plantea un área de oportunidad para mejorar su descripción (Vidriales-Escobar et al., 2017). Tal es el caso de los modelos desarrollados por Kuwahara et al. (2009) y Zambra et al. (2011) en los que además se realiza la distinción de fases del sistema; especialmente Kuwahara et al. (2009) quienes establecen la existencia de una fase

gaseosa y otra sólida-húmeda. Si bien estos modelos aparentan ser más robustos, la Tabla 4 señala que muchos de ellos adolecen en diversos aspectos como la poca claridad en las condiciones de frontera empleadas para la solución del modelo, la inclusión arbitraria de parámetros de inhibición del crecimiento microbiano sin algún sustento de la literatura o la ausencia de descripciones fundamentales como la cinética de crecimiento microbiano.

	Sustrato	Escala	Tipo de sistema	Cinética microbiana				Delenes					
Variación				Тіро	Efecto de humedad	Efecto O <sub>2</sub>	Efecto de temperatura	Balances de masa	de energía	Fases	Cond. Frontera	Observaciones	Referencia
Temporal	Estiércol de aves y paja de trigo	Teórico/ laboratorio	Batch	Monod (Sustrato)	Sí (función)	Sí (función)	Sí (función)	O <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub> , Agua	Sí	1	No	Modelo para 2 poblaciones microbianas y 2 sustratos.	(Ivan Petric & Mustafić, 2015)
	General	Teórico	Pila abierta	Contois (Sustrato)	Sí (función)	No	Sí (función)	Agua	Sí	2	Sí	No hay una distinción de temperaturas de cada fase (criterio de igualdad). Considera saturación de oxígeno en el sistema.	(Kuwahara et al., 2009)
	Estiércol de pollo, arroz y aserrín.	Laboratorio	Reactor tubular	3er orden	Sí (función)	Sí (Monod)	Sí (función)	O <sub>2</sub> , Agua	Sí	1	Sí	Modelo para 4 tipos de sustrato.	(Shishido & Seki, 2015)
Temporal	General	Teórico	Gran escala (General)	Contois (Sustrato)	Sí (función)	Sí (Monod)	Sí (función)	O <sub>2</sub> , Agua	Sí	1	No	Incluye efecto de inhibición con parámetros de definidos arbitrariamente.	(Bongochgetsakul & Ishida, 2008)
espacial	General	Teórico/ industrial	Pila abierta					O <sub>2</sub> , Agua	Sí	2	Sí	Realiza un balance hidráulico en el medio poroso. No existe una cinética microbiana. No distingue la temperatura de las fases.	(Zambra et al., 2011)
	General (modelo)	laboratorio (validado)/ teórico	Batch	Contois (Sustrato)	No	Sí (Monod)	Sí (crecimiento y muerte)	0 <sub>2</sub>	Si	2	Sí	No distingue temperaturas ni oxígeno entre fases. No contempla la distribución de oxígeno entre las fases (Ley de Henry).	(He et al., 2018)

Tabla 4. Comparación de algunos modelos matemáticos para el proceso de composteo a partir del año 2009.

En general, los modelos matemáticos para el proceso de composteo contemplan una cinética de orden fijo (i.e., orden cero, primer o segundo orden, orden n) o modelos específicos para el crecimiento microbiano como el modelo de Monod o Contois. Estos últimos modelos cinéticos suelen contemplar la limitación del crecimiento por un sustrato genérico o el oxígeno (Bongochgetsakul & Ishida, 2008; I. Mason, 2006(I. Mason, 2006); Kuwahara et al., 2009; Shishido & Seki, 2015; Vidriales-Escobar et al., 2017) y sus parámetros de crecimiento microbiano (y la de muerte celular, si la hay) presente una dependencia explícita con la temperatura y la humedad (Bongochgetsakul & Ishida, 2008; Kuwahara et al., 2009; Shishido & Seki, 2009; Shishido & Seki, 2015; Vidriales-Escobar et al., 2017; Walling et al., 2020).

Pese a la basta existencia de modelos matemáticos para el composteo, los análisis de sensibilidad y de diseño han sido poco abordados en los estudios desarrollados en las últimas décadas (Walling et al., 2020).

#### 2.6 Cinética de crecimiento microbiano

El crecimiento microbiano es resultado del aumento de los constituyentes celulares y se manifiesta como un incremento en el número de células. Para analizar este proceso de forma práctica se estudia el cambio en el número total de la población y no la multiplicación de microorganismos individuales. En un cultivo discontinuo de volumen constante y con una concentración inicial de nutrientes definida se pueden diferenciar cuatro fases características del crecimiento microbiano: de latencia, exponencial, estacionaria y de muerte. La cinética correspondiente se muestra en la Figura 4.

La fase de latencia es la condición que antecede a la división celular y suele presentarse cuando los microorganismos se adaptan a un medio de cultivo de características distintas a otro anterior; su duración depende del estado del microorganismo y la naturaleza del medio. Posterior a la fase de latencia comienza la exponencial en la que los microorganismos crecen a una velocidad constante (µ) y se

dividen hasta un nivel máximo ( $\mu_m$ ) definido por su potencial genético, el tipo de medio y sus condiciones; en esta etapa la producción de compuestos (metabolitos) aumenta considerablemente. En la fase exponencial se consume la mayor cantidad de nutrientes (sustratos) y se pueden generar metabolitos tóxicos; lo que influye significativamente en la transición a una nueva fase (Díaz & Fernández, 2012).

Cuando la cantidad máxima de microorganismos es constante en el tiempo se ha alcanzado la fase estacionaria donde la generación de nuevos microorganismos se iguala a la muerte de sus predecesores. Esta etapa es consecuencia de la limitación de nutrientes y/o la acumulación de compuestos tóxicos. Finalmente, la población microbiana no puede subsistir más y comienza la fase de muerte.





La cinética de crecimiento de una población microbiana se fundamenta en la necesidad del microorganismo de consumir nutrientes para crecer y reproducirse, así como en la existencia de un sustrato limitante (i.e., la concentración insuficiente de un nutriente esencial para el crecimiento y reproducción microbiana). Con base en el comportamiento clásico de la evolución de la población microbiana en el tiempo, en 1942 Monod propuso un modelo hiperbólico muy similar al de Michaelis-Menten para la actividad enzimática que relacionaba el consumo de un sustrato limitante con la concentración de microorganismos (Ecuación 1).

$$\frac{\mathrm{dS}}{\mathrm{dt}} = -\frac{\mathrm{k_m}\mathrm{SX}}{\mathrm{K_s} + \mathrm{S}} \tag{1}$$

Donde:

La Ecuación 1 supone que la cinética es controlada únicamente por la concentración del sustrato limitante y contempla todas las limitaciones de transferencia de masa a través de la membrana celular o en el citoplasma (Haug, 1993).

Si se establece la cinética de crecimiento microbiano considerando que ésta depende del consumo de sustrato se obtiene la Ecuación 2.

$$\frac{\mathrm{dX}}{\mathrm{dt}} = Y_{\mathrm{X}} \left( -\frac{\mathrm{dS}}{\mathrm{dt}} \right) - k_{\mathrm{d}} \mathrm{X}$$
<sup>(2)</sup>

Donde:

 $\frac{dX}{dt}$  = Velocidad de crecimiento neto microbiano

 $\frac{Y_X}{s}$  = Rendimiento de crecimiento microbiano respecto al consumo de sustrato

k<sub>d</sub> = Coeficiente de muerte celular

El coeficiente  $k_d$  representa el decremento de los microorganismos cuando existen concentraciones ínfimas de sustrato (S  $\rightarrow$  0) y éstos comienzan a metabolizar

sus reservas hasta agotarse. Por otra parte, el factor de proporcionalidad  $Y_{X_{/s}}$  permite relacionar las cinéticas de crecimiento celular y de consumo de sustrato.

Si se sustituye la Ecuación 1 en la 2 se obtiene la Ecuación 3a.

$$\frac{\mathrm{dX}}{\mathrm{dt}} = \frac{\mathrm{Y}_{\mathrm{X}/_{S}} \,\mathrm{k_{m}}\,\mathrm{S}}{\mathrm{K_{s} + S}} - \mathrm{k_{d}} \tag{3a}$$

El término de la izquierda representa la velocidad de crecimiento neto específico ( $\mu$ ) y el producto  $Y_{X_{/S}} k_m$  la velocidad máxima de crecimiento neto ( $\mu_m$ ) cuando la concentración de sustrato es alta y la tasa de muerte celular baja ( $k_d = 0$ ). Así, el modelo de Monod puede expresarse de acuerdo con la Ecuación 3b.

$$\mu = \frac{\mu_{\rm m}S}{K_{\rm s} + S} \tag{3b}$$

La Ecuación 3b es el modelo más empleado para describir la velocidad de crecimiento microbiano en la fase exponencial, considerando el consumo de sustrato en solución acuosa. El comportamiento típico del modelo de Monod a diferentes concentraciones del sustrato limitante se muestra en la Figura 5.



Figura 5. Variación de la velocidad de crecimiento en la fase exponencial a diferentes concentraciones de sustrato limitante (adaptado de Díaz & Fernández, 2012).

La Figura 5, junto con la Ecuación 3b permiten definir dos aspectos interesantes del comportamiento cinético a concentraciones de sustrato características:

- 1. Si S  $\gg$  K<sub>s</sub> , entonces  $\mu = \mu_m$  (Cinética de orden 0)
- 2. Si S  $\ll {\rm K}_{s}$  , entonces  $\mu = \frac{\mu_{\rm m}S}{{\rm K}_{s}}$  (Cinética de orden 1)

A pesar de que el modelo de Monod es ampliamente usado para representar la cinética de crecimiento microbiano, existen otros modelos empíricos no estructurados y no segregados (i.e., que no distinguen compartimentos ni la viabilidad celular) para describir el crecimiento microbiano limitado por sustrato o por inhibición de un compuesto. La Tabla 5 señala algunos de los modelos de crecimiento microbiano más comunes.

Tabla 5. Modelos para describir el crecimiento microbiano (adaptado de Díaz & Fernández, 2012).

	M	onod	$\mu = \frac{\mu_{\rm m}S}{K_{\rm s} + S}$			
Crecimiento limitado por	М	oser	$\mu = \frac{\mu_{\rm m} S^{\rm n}}{K_{\rm s} + S^{\rm n}}$			
un sustrato	Co	ontois	$\mu = \frac{\mu_{\rm m}S}{K_{\rm s}X + S}$			
	Te	ssier	$\mu = \mu_{\rm m} (1 - e^{-\rm KS})$			
Crecimiento	Consumo	competitivo	$\mu = \frac{\mu_{m1}S_1}{K_1 + S_1 + a_1S_2} + \frac{\mu_{m2}S_2}{K_2 + S_2 + a_2S_1}$			
limitado por varios sustratos	Consumo r	no competitivo	$\mu = \frac{\mu_{m1}S_1}{K_1 + S_1} + \frac{\mu_{m2}S_2}{K_2 + S_2}$			
50510105		·	$\mu = \mu_m \left(\frac{S_1}{K_1 + S_1}\right) \left(\frac{S_2}{K_2 + S_2}\right)$			
	Sustrato	No competitiva	$\mu = \frac{\mu_{\rm m}S}{(K_{\rm s} + S)\left(1 + \frac{S}{K_{\rm i}}\right)}$			
		Competitiva	$\mu = \frac{\mu_{\rm m}S}{K_{\rm s}\left(1 + \frac{S}{K}\right) + S}$			
-------------	----------	-------------------	---	--	--	--
		Haldane	μ <sub>m</sub> S			
		$(K_s \ll K_i)$	$\mu = \frac{1}{K_s + S + \frac{S^2}{K_i}}$			
	Producto	No competitiva	$\mu = \frac{\mu_{\rm m}S}{(K_{\rm s} + S)\left(1 + \frac{P}{K_{\rm p}}\right)}$			
Crecimiento		Competitiva	$\mu = \frac{\mu_{\rm m}S}{K_{\rm s}\left(1 + \frac{P}{K_{\rm p}}\right) + S}$			
inhibición		De aiuste	$\mu = \frac{\mu_{\rm m}S}{K_{\rm s}+S} \left(1 - \frac{P}{P^*}\right)^{\rm n}$			
		,	$\mu = \left(\frac{\mu_{\rm m}S}{K_{\rm s}+S}\right) e^{-\frac{P}{K_{\rm p}}}$			
		No competitiva	$\mu = \frac{\mu_{\rm m}S}{\left(K_{\rm s}+S\right)\left(1+\frac{\rm I}{K_{\rm i}}\right)}$			
	Tóxico	Competitiva	$\mu = \frac{\mu_{m}S}{K_{s}\left(1 + \frac{I}{K_{i}}\right) + S}$			
		Acompetitiva	$\mu = \frac{\mu_{m}S}{\left(\frac{K_{s}}{1 + \frac{I}{K_{i}}} + S\right)\left(1 + \frac{I}{K_{i}}\right)}$			

I: Inhibidor, P: Producto de interés, P\*: Concentración de producto que detiene totalmente el crecimiento, K<sub>i</sub>, K<sub>p</sub>: Concentración de inhibidor y producto donde  $\mu = \frac{1}{2}\mu_m$ 

En la fase estacionaria del crecimiento celular coexisten los procesos de reproducción celular y de muerte. Así, una cinética que contemple las fases exponencial, estacionaria y de muerte puede expresarse mediante la adición del término de velocidad de muerte celular representado por el coeficiente de muerte celular (k<sub>d</sub>).

$$\frac{\mathrm{dX}}{\mathrm{dt}} = \mu \mathbf{X} - \mathbf{k}_{\mathrm{d}} \mathbf{X} = (\mu - \mathbf{k}_{\mathrm{d}})\mathbf{X} \tag{4}$$

# 2.6.1 Dependencia de la velocidad de crecimiento y muerte celular con la temperatura

Para establecer la dependencia de las velocidades específicas de crecimiento neto ( $\mu$ ) y de muerte ( $k_d$ ) con la temperatura se suelen establecer distintas funciones. Dado que el proceso de muerte celular no es muy estudiado, dicha dependencia suele establecerse mediante la Ecuación de Arrhenius (Ecuación 5).

$$k_{d} = \mu_{d} \exp\left[-\frac{E_{Ad}}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{m}}\right)\right]$$
(5)

Donde:

 $\mu_d$  = Tasa específica de muerte celular

E<sub>Ad</sub> = Energía de activación del proceso de muerte

T = Temperatura del sistema o fase sólida

T<sub>m</sub> = Temperatura óptima de crecimiento

Por otra parte, se han propuesto distintas Ecuaciones polinomiales para modelar la dependencia de la velocidad de crecimiento con la temperatura, como las señaladas en la Tabla 6. Estas Ecuaciones emplean temperaturas características como las temperaturas mínima, máxima y óptima de crecimiento ( $T_{max}$ ,  $T_{min}$  y  $T_{opt}$ ; respectivamente) de una población microbiana específica.

Tabla 6. Modelos polinomiales para determinar el valor de  $\mu_m$  en función de la temperatura (adaptado de Rosso et al., 1993).

Modelo	Ecuación
Ratkowsky	$\mu_{\rm m} = (b(T - T_{\rm min})\{1 - \exp[c(T - T_{\rm max})]\})^2$
Zwietering	$\mu_{\rm m} = [b(T - T_{\rm min})]^2 \{1 - \exp[c(T - T_{\rm max})]\}$
Huang	$\mu_{m} = [b(T - T_{min})]^{1.5} \{1 - exp[c(T - T_{max})]\}$
СТМІ	$\mu_{\rm m} = \frac{\mu_{\rm opt(T-T_{\rm max})(T-T_{\rm min})^2}}{(T_{\rm opt} - T_{\rm min})[(T_{\rm opt} - T_{\rm min})(T - T_{\rm opt}) - (T_{\rm opt} - T_{\rm max})(T_{\rm opt} + T_{\rm min} - 2T)]}$

El desarrollo histórico de estos modelos obedeció principalmente a la mejor adecuación de la dependencia de la temperatura con los datos experimentales de la velocidad de crecimiento. Así, el modelo de Zwietering surge de una corrección al modelo de Ratkowsky en el que se resuelve la inconsistencia física de evaluar este último cuando T >  $T_{max}$  (Zwietering et al., 1991). Cabe señalar que en ambos modelos los factores b y c son parámetros de ajuste y que la temperatura mínima de crecimiento ( $T_{min}$ ) no representa necesariamente el valor de temperatura al que no existe crecimiento microbiano, sino simplemente a una estimación matemática del primer valor mínimo de la curva típica de velocidad máxima de crecimiento respecto a la temperatura (Figura 6); que suele ser inferior al valor mínimo real de acuerdo con Huang et al. (2011). Estos últimos autores establecieron un modelo semejante al de Zwietering que permite estimar un valor de Tmin más cercano al experimental para ciertos microorganismos psicrófilos y mesófilos (i.e., microorganismos capaces de crecer en un rango de 15-20 y 15-35°C, respectivamente).



Figura 6. Curva típica de la evolución de  $\mu_{max}$  respecto a la temperatura.

Por otra parte, el modelo de temperatura cardinal con inflexión (CTMI) emplea no sólo las dos temperaturas características del crecimiento microbiano de los otros 3 modelos anteriores sino también la temperatura de crecimiento óptimo. Sin embargo, la adición de este parámetro implica la estimación experimental de la velocidad de crecimiento a la temperatura óptima ( $\mu_{opt}$ ) o su obtención de la bibliografía.

Más recientemente, diversos autores como Kuwahara et al. (2009) y Vidriales-Escobar et al. (2017) han adoptado un factor ( $\alpha_T$ ) para establecer la dependencia de la velocidad de crecimiento con la temperatura; modelo que ha sido corroborado experimentalmente.

$$\alpha_{\rm T} = \begin{cases} \exp\left[-\frac{E_{\rm A}}{R}\left(\frac{1}{\rm T} - \frac{1}{\rm T_{\rm m}}\right)\right] & : {\rm T} \leq {\rm T_{\rm m}} \\ \frac{{\rm T_{\rm h}} - {\rm T}_{\rm m}}{{\rm T_{\rm h}} - {\rm T_{\rm m}}} & : {\rm T_{\rm m}} \leq {\rm T} \leq {\rm T_{\rm h}} \\ 0 & : {\rm T} > {\rm T_{\rm h}} \end{cases}$$
(6)

Donde:

- E<sub>A</sub> = Energía de activación del crecimiento microbiano
- T<sub>h</sub> = Temperatura máxima viable de crecimiento

La Ecuación 6 señala que la velocidad específica de crecimiento neto se ajusta al comportamiento descrito por Arrhenius hasta alcanzar la temperatura óptima de crecimiento (T<sub>m</sub>) y posteriormente disminuye conforme la temperatura del sistema tiende a T<sub>h</sub>. Finalmente, el crecimiento microbiano se inhibe al exceder esta temperatura a causa de la muerte celular por efecto térmico. Diversos estudios de simulación del proceso de composteo a partir de datos experimentales sugieren valores de T<sub>m</sub>=60°C y T<sub>h</sub>=80°C (Kuwahara et al., 2009). Así es posible expresar la velocidad de crecimiento neto de la forma  $\mu = \alpha_T \cdot f(S, X \circ P)$ .

# 2.6.2 Dependencia de la velocidad de crecimiento celular con la humedad del sistema y su descripción

A pesar del rol crucial que desempeña la humedad en el proceso de composteo, no todos los modelos matemáticos cuentan con una expresión que establezca la variación de este factor ya sea sólo en el tiempo o también con la posición, tampoco de la humedad generada por la actividad metabólica de los microorganismos y mucho menos del efecto del grado de humedad en el sistema sobre la velocidad de crecimiento celular.

Uno de los primeros modelos en incluir la descripción de humedad en un sistema de composteo, así como su efecto sobre la velocidad de crecimiento celular fue el desarrollado por Mohee et al. (1998); quienes desarrollaron un modelo temporal para el composteo de material celulósico en reactores a escala laboratorio. Dicho modelo empleaba una cinética de crecimiento de primer orden en la que el efecto de la humedad sobre la velocidad de crecimiento se establecía mediante una Ecuación exponencial de la humedad en el sistema (Mohee et al., 1998). Así mismo, este modelo fue uno de los primeros en incorporar la humedad generada por actividad metabólica de los microorganismos mediante un rendimiento másico de agua/sustrato.

A partir de 2007 los modelos para composteo comenzaron a proliferar en la literatura. Sin embargo, existe una notable heterogeneidad entre aquellos modelos que describen la humedad en el sistema. Como se observa en la Tabla 7 la descripción de la humedad y sus implicaciones en modelos matemáticos para composteo suele ser

ambigua o no contemplar procesos de naturaleza biológica como la generación de agua por actividad metabólica o su efecto en la velocidad de crecimiento.

Tabla	7 Elementos	de los modelo	s de composteo	aue describen	la humedad en el	proceso
rubiu			5 uo oompooloo	que december	ia namoada on oi	p100000.

Variación	Intercambio de humedad entre fases	Humedad generada por actividad microbiana	Efecto de humedad en cinética de crecimiento microbiano	Referencia
Temporal	Sí, mediante fracciones de humedad en aire basadas en temperaturas de bulbo seco y húmedo. Sí, dependiente de la tasa de consumo de sustrato.	Sí, mediante un rendimiento másico agua/sustrato consumido. Sí, mediante un rendimiento másico agua/sustrato consumido.	Sí, mediante una función exponencial ajustada con datos experimentales. No.	(Mohee et al., 1998) (Neves et al., 2007)
	Sí, mediante un coeficiente de transferencia de masa y la diferencia de presiones entre fases.	No.	Sí, mediante una función discontinua de valores fijos y una Ecuación no lineal dependiente de humedades críticas del sistema.	(Sole-Mauri et al., 2007)

Variación	Intercambio de humedad entre fases	Humedad generada por actividad microbiana	Efecto de humedad en cinética de crecimiento microbiano	Referencia
Temporal	Sí, mediante una función de conservación de masa y energía en función de las presiones de saturación.	No.	Sí, mediante una función discontinua dependiente de humedades críticas del sistema.	(Qin et al., 2007)
	Sí mediante una tasa de intercambio de agua entre fases arbitraria.	Sí, mediante un rendimiento molar biomasa generada/agua.	No.	(Lin et al., 2008)
	Sí, mediante un coeficiente de transferencia de masa y la diferencia de presiones entre fases.	Sí, mediante un coeficiente estequiométrico másico agua/sustrato consumido.	Sí, mediante una función exponencial dependiente del contenido de sólidos en el sustrato.	(I Petric & Selimbašić, 2008)

Variación	Intercambio de humedad entre fases	Humedad generada por actividad microbiana	Efecto de humedad en cinética de crecimiento microbiano	Referencia
	Sí, mediante el flujo de aire y la diferencia de las fracciones másicas de humedad en el aire a la entrada y la salida del reactor.	Sí, mediante un coeficiente estequiométrico másico agua/sustrato consumido.	Sí, mediante una función exponencial dependiente la fracción másica de humedad en la composta.	(Ivan Petric & Mustafić, 2015)
Temporal	Sí, mediante la diferencia de fracciones másicas de humedad en el gas a temperatura ambiente y la temperatura de la composta.	Sí, mediante un rendimiento másico biomasa generada/agua.	Sí, mediante una función exponencial dependiente del porcentaje de humedad en la composta.	(Vasiliadou et al., 2015)

Variación	Intercambio de humedad	Humedad generada por	Efecto de humedad en cinética	Referencia
Variation	entre fases	actividad microbiana	de crecimiento microbiano	Referencia
Temporal y espacial	Sí, mediante un balance de masa en la interfase. Emplea un coeficiente de transferencia de masa y la diferencia de las humedades en la fase gas y de saturación en función de la temperatura.	No.	Sí, mediante una función discontinua dependiente de humedades críticas del sistema.	(Kuwahara et al., 2009)
	Sí, mediante un balance en la interfase. Emplea un coeficiente de transferencia de masa y la diferencia de humedades relativas superficial y ambiental.	Sí, mediante estequiometría.	Sí, mediante una función discontinua dependiente de humedades críticas del sistema	(Bongochgetsakul & Ishida, 2008)

Variación	de cresimiente microbiano	Referencia
entre fasesactividad microbianaSí, mediante un balance en la interfase. Emplea unIa interfase. Emplea unTemporalcoeficiente de transferenciaSí, mediante un rendimiey espacialde masa y la diferencia de las humedades en la fase gas y de saturación.másico agua/sustrato consu	a de crecimiento microbiano Sí, mediante una función exponencial dependiente de la humedad en la composta.	(Shishido & Seki, 2015)

Como señala la Tabla 7, la descripción de la humedad en el sistema de composteo suele ser más frecuente en modelos temporales que en los temporales y espaciales. Así mismo, las diferentes expresiones matemáticas para ello son muy diversas.

Wang et al. (2015) describieron los tres tipos de modelos más frecuentes en la literatura para describir la variación de la humedad durante el composteo. Estos pueden catalogarse en modelos basados en balances de masa de agua y su producción biológica, modelos basados en transferencia líquido-gas y producción biológica de agua y, finalmente, modelos empíricos.

#### 2.6.2.1 Modelos basados en balances de masa de agua y su producción biológica.

Los modelos para describir la variación de humedad en el proceso de composteo suelen presentar la forma general de la Ecuación 7.

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}t} = w_{\mathrm{bio}} + w_{\mathrm{in}} - w_{\mathrm{out}} \tag{7}$$

Donde w representa la concentración de agua en el sistema de composteo,  $w_{bio}$  es la generación de agua por actividad metabólica y  $w_{in}$  y  $w_{out}$  representan el flujo de agua en el gas de entrada y salida del reactor; respectivamente

Frecuentemente la generación se agua por actividad metabólica se relaciona con el consumo de sustrato (S) mediante un rendimiento de agua por unidad de sustrato consumido ( $Y_{W_{/s}}$ ). Así, se puede establecer la Ecuación 8.

$$w_{bio} = -Y_{w_{/s}} \frac{dS}{dt}$$
(8)

Así mismo, debido a la relación de consumo de sustrato y generación de biomasa (X) es posible incorporar alguna de las funciones de las Tablas 5 y 6 para la corrección por concentración de sustrato u oxígeno disuelto y temperatura, respectivamente. De igual forma, existen diversas Ecuaciones para la corrección del proceso de composteo debido al grado de humedad en el proceso. Son comunes las

ecuaciones exponenciales, como la Ecuación 9, que dependen de la fracción másica de humedad en el sistema sólido (fmh).

$$f(fmh) = \frac{1}{e^{-17.648 \, fmh + 7.0622} + 1}$$
(9)

Finalmente, como se indica en las Ecuaciones 10 a 12 los flujos de agua a la entrada y salida se pueden determinar mediante el flujo másico de aire ( $F_m$ ), el volumen de la composta (V) y las fracciones de humedad a la entrada y salida del reactor ( $x_{in}, x_{out}$ ); mismas que se estiman mediante una relación de gases ideales para el aire seco y el vapor con humedades relativas (Hr), así como la Ecuación de Antoine para la presión de saturación (Ps).

$$w_{in,out} = \frac{(F_m)(x_{in,out})}{V}$$
(10)

$$x_{in,out} = 0.622 \frac{(Hr_{in,out})(Ps)}{P - (Hr_{in,out})(Ps)}$$
(11)

$$Ps = \exp\left(A - \frac{B}{T+D}\right)$$
(12)

#### 2.6.2.2 Modelos basados en transferencia líquido-gas y producción biológica de agua

A partir del modelo desarrollado por Petric y Selimbašić (2008), la descripción de la diferencia del flujo de agua a la entrada y la salida del reactor en la Ecuación 7 se ha establecido en otros modelos mediante el flujo volumétrico del aire que ingresa al sistema ( $F_v$ ), un coeficiente de transferencia de masa para el agua ( $k_La_w$ ) y la diferencia entre las presiones de saturación a la temperatura del sistema ( $P_{sat}$ ) y del vapor de agua en la entrada del reactor a temperatura ambiente ( $P_{in}$ ).

$$w_{in} - w_{out} = (F_v)(k_L a_w)(P_{sat} - P_{in})$$
 (13)

El término de generación de agua por actividad metabólica se continúa determinando mediante la Ecuación 8.

#### 2.6.2.3 Modelos empíricos

Existen algunas Ecuaciones empíricas como la Ecuación 14 para describir la variación de la humedad en el proceso de composteo.

$$\frac{\mathrm{dw}}{\mathrm{dt}} = \frac{-(\lambda)(w_{\mathrm{sat}})(F_{\mathrm{v}})(w)}{m_{\mathrm{c}}}$$
(14)

Donde  $\lambda$  representa la fracción promedio de saturación de agua durante el proceso de composteo,  $F_v$  es el flujo volumétrico de aire que ingresa al reactor,  $m_c$  es la masa total de composta y  $w_{sat}$ es una relación de conservación de masa y energía basada en la consideración de que el vapor de agua y el resto de los gases en el aire que ingresa al reactor se comportan de acuerdo con la idealidad. Así, la presión de saturación del vapor de agua se expresa conforme a la Ecuación 15.

$$Psat = (C_w)(R)(T)$$
(15)

Donde C<sub>w</sub> representa la concentración de agua  $\left(\frac{\text{mol H}_2 O}{m_{gas}^3}\right)$ , R la constante de los gases ideales y T la temperatura.

Además, la presión parcial del resto de los gases se establece mediante la Ecuación 16 a partir de la definición de 1 mol para condiciones ideales.

$$P - Psat = \frac{1}{22.4 \frac{m^3 gas}{kmol gas}} (R)(T)$$
(16)

Donde P representa la presión total del sistema.

Resolviendo para la constante de los gases ideales en la Ecuación 16 y sustituyéndola en la Ecuación 15.

$$Psat = (C_w) \left( 22.4 \ \frac{m^3 \ gas}{kmol \ gas} \right) (P - Psat)$$
(17)

Resolviendo para  $C_w$  y multiplicando la ecuación por la masa molar promedio del agua se obtiene la Ecuación 18 para  $w_{sat}$ .

$$w_{sat} = \left(\frac{18 \frac{\text{kg H}_2 \text{O}}{\text{kmol H}_2 \text{O}}}{22.4 \frac{\text{m}^3 \text{ gas}}{\text{kmol gas}}}\right) \left(\frac{\text{Psat}}{\text{P} - \text{Psat}}\right) [=] \left(\frac{\text{kg H}_2 \text{O}}{\text{m}^3 \text{ gas}}\right)$$
(18)

## 2.6.2.4 Modelo temporal y espacial bifásico

Kuwahara et al. (2009) desarrollaron un modelo para el proceso de composteo que caracteriza el sistema en dos fases: una fase gaseosa y otra sólida compuesta por agua, sustrato biodegradable y microorganismos. Este modelo se estableció para una pila abierta (Figura 7) y describe la variación temporal y con la posición de la temperatura, la humedad en el sistema, el consumo de sustrato biodegradable y la generación de biomasa en un medio poroso (Tabla 4).



Figura 7. Esquema del sistema desarrollado por Kuwahara et al. (2009).

Para la descripción de la humedad en el sistema, los autores desarrollaron una Ecuación diferencial parcial para describir la variación de la masa de agua en la fase sólida ( $w_s$ ) y otra para el vapor de agua en la fase gas ( $w_f$ ) de acuerdo con las Ecuaciones 19 y 20.

$$(1-\varepsilon)\frac{\partial w_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (1-\varepsilon)D_{se}\frac{\partial w_s}{\partial x_j} \right) + a_{sf}h_D\frac{w_s}{w_s + S_s + X_s + U_s} \left( w_{f,sat} - w_f \right)$$
(19)

$$\varepsilon \frac{\partial w_f}{\partial t} + u_j \frac{\partial w_f}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \varepsilon D_{fe} \frac{\partial w_f}{\partial x_j} \right) - a_{sf} h_D \frac{w_s}{w_s + S_s + X_s + U_s} \left( w_{f,sat} - w_f \right)$$
(20)

Donde

$$\epsilon = Porosidad del sistema [=] \frac{m_{gas}^3}{m_{Total}^3}$$

$$1 - \epsilon = Fracción másica de sólido [=] \frac{m_{sólido}^3}{m_{Total}^3}$$

$$u_j = Velocidad promedio [=] \frac{m}{s}$$

$$D_{se} = Coeficiente de dispersión en fase sólida [=] \frac{m^2}{s}$$

$$D_{fe} = Coeficiente de dispersión en fase gas [=] \frac{m^2}{s}$$

$$a_{sf}h_D = Coeficiente de transferencia de masa [=] \frac{m_{gas}^3}{m_{Total}^3}s$$

$$S_s = Sustrato biodegradable [=] \frac{kg S}{m_{sólido}^3}$$

$$X_s = Microorganismos [=] \frac{kg X}{m_{sólido}^3}$$

$$U_s = Material no biodegradable [=]  $\frac{kg U}{m_{solido}^3}$   
 $w_{f,sat} = Humedad de saturación [=]  $\frac{kg H_2 0}{m_{gas}^3}$$$$

En ambas Ecuaciones el primer término del lado derecho de la igualdad representa el proceso dispersivo en el medio poroso o el gas (i.e., transporte másico promedio debido a la variación del campo de velocidad en el sistema), mientras que el segundo término define el proceso de transferencia de masa interfacial caracterizado por un coeficiente de transferencia de masa y la fracción másica de agua en la fase sólida (Tabla 7). Además, puesto que el gas ingresa al sistema de composteo con una velocidad dada, el lado izquierdo de la Ecuación 20 presenta, además del término de acumulación, el transporte convectivo asociado. Cabe señalar que en la Ecuación 19 no se contempla la generación de agua por actividad metabólica de los microorganismos en la fase sólida.

Por otra parte, para determinar la humedad de saturación los autores consideraron una presión total equivalente a 1 atmósfera y emplearon la Ecuación de Antoine en la Ecuación 18 para expresar la presión de saturación en términos de la temperatura de la fase sólida en °C.

$$w_{sat} = \left(\frac{18 \frac{\text{kg H}_2 0}{\text{kmol H}_2 0}}{22.4 \frac{\text{m}^3 \text{ gas}}{\text{kmol gas}}}\right) \left(\frac{\exp\left(11.96 - \frac{3994}{\text{T}_s + 233.9}\right)}{1 - \exp\left(11.96 - \frac{3994}{\text{T}_s + 233.9}\right)}\right) [=] \left(\frac{\text{kg H}_2 0}{\text{m}^3 \text{ gas}}\right)$$
(21)

Finalmente, el modelo establece el efecto de la humedad sobre la velocidad de crecimiento de la forma  $\mu = \alpha_w \cdot f(S, X \circ P)$  mediante una función discontinua dependiente de humedades críticas del sistema y la fracción másica de agua (fmw) en la fase sólida (Ecuaciones 22 a 24).

$$fmw = \frac{(1-\varepsilon)w_s}{\rho_{ap}}$$
(22)

$$\rho_{\rm ap} = (1 - \varepsilon)(w_{\rm s} + S_{\rm s} + X_{\rm s} + U_{\rm s}) \tag{23}$$

$$\alpha_{w} = \begin{cases}
0 & : \text{fmw} < w_{c1} \\
\frac{\text{fmw} - w_{c1}}{k_{a} + \text{fmw}} & : w_{c1} \le \text{fmw} \le w_{opt} \\
\frac{w_{opt} - w_{c1}}{k_{a} + w_{opt}} \frac{w_{c2} - \text{fmw}}{w_{c2} - w_{opt}} : w_{opt} \le \text{fmw} \le w_{c2} \\
0 & : \text{fmw} > w_{c2}
\end{cases}$$
(24)

De acuerdo con la Ecuación 24 el crecimiento microbiano es nulo cuando la humedad de la fase sólida es inferior a un valor crítico mínimo ( $w_{c1}$ ) o superior un valor máximo ( $w_{c2}$ ), mientras se encuentre en ese rango la velocidad de crecimiento microbiano se comportará de acuerdo con la Figura 8.





Las humedades críticas propuestas por Kuwahara et al. (2009) fueron  $w_{c1} = 0.15$ ,  $w_{opt} = 0.6$  y  $w_{c2} = 0.8$ . Sin embargo, diversos estudios señalan que los valores críticos de humedad dependen considerablemente de los microorganismos presentes en el sistema, así como de las condiciones operacionales y la composición de la

materia orgánica. Aunque es evidente que existe un rango razonable para cada valor crítico (Figura 9).



Figura 9. Efecto del porcentaje de humedad en distintos sistemas de composteo sobre la velocidad de consumo de oxígeno (adaptado de Haug, 1993).

## 2.7 Solución de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs)

Los modelos temporales y espaciales de cualquier proceso natural, como el composteo, consisten en un sistema de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) comúnmente interrelacionadas. La solución analítica de dicho sistema es compleja y comúnmente requiere d un proceso de dos etapas: i) Discretización de las EDPs y las condiciones de frontera y ii) Solución mediante métodos numéricos<sup>1</sup>.

La discretización consiste en la transformación total o parcial del sistema de EDPs para obtener un sistema de ecuaciones algebraicas o de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs). Los métodos más empleados para discretizar son las diferencias finitas y el elemento finito (Fletcher, 1998).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Los métodos numéricos son procedimientos lógicos de operaciones aritméticas sucesivas que aproximan el resultado de un problema complejo con base en un error predefinido. Comúnmente se desarrollan empleando un programa computacional.

El método de diferencias finitas es la estrategia más sencilla para discretizar, ya que se efectúan aproximaciones de las ecuaciones diferenciales a partir del truncamiento de la serie de Taylor (Ecuación 71); la cual se basa en la idea de que cualquier función continua puede ser aproximada mediante un polinomio.

$$f(x_{i+1}) \cong f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}h^3 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}h^n + O(h^{n+1})$$
(71)

En la Ecuación 71, h representa la distancia entre el punto  $x_i y x_{i+1}$ , n el orden y  $O(h^{n+1})$  el error de truncamiento. Este error de truncamiento es proporcional a la distancia h, por lo que el aumento o disminución de h tendrá un efecto significativo en el error de la aproximación.

Para aproximar una derivada de orden específico se trunca la serie de Taylor en el término subsecuente a la derivada de interés y se resuelve para ésta (Chapra, 2018); lo que resulta en una ecuación algebraica. Además, para estimar la derivada en un punto particular se pueden emplear el punto de interés y un punto "hacia adelante" o "hacia atrás" en la función continua; también es posible aproximar la derivada en un punto que se encuentra "centrado" por otros dos (Figura 10).



Figura 10. Representación gráfica de la aproximación a) hacia adelante, b) hacia atrás y c) centrada de una diferencia finita para una derivada de primer orden (adaptado de Chapra, 2018).

Dependiendo del punto de truncamiento, los puntos de la función seleccionados y la sustitución de diferencias finitas para derivadas de órdenes superiores; el orden del error de truncamiento puede aumentar; por lo que la aproximación se vuelve más precisa. La Tabla 8 muestra la estimación por diferencias finitas para la primera y segunda derivada con un error de truncamiento de segundo orden.

Tabla 8. Diferencias finitas para la primera y segunda derivada con un error de truncamiento de segundo orden,  $O(h^2)$  (obtenido de Chapra, 2018).

Hacia adelante				
$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h}$	$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) - 5f(x_{i+1}) + 2f(x_i)}{h^2}$			
H	Hacia atrás			
$f'(x_i) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{2h}$	$f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^2}$			
Centrado				
$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}$	$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2}$			

La discretización de derivadas por el método de diferencias finitas genera un conjunto de puntos discretos del dominio que comprende la variable independiente de dicha diferencial.

Si sólo se discretizan las derivadas espaciales se crea un mallado en dos dimensiones donde cada intersección o nodo representa un punto de aproximación de la variable (Figura 11); a este método se le conoce como el método de líneas (Davis, 1984). Dicho método transforma un sistema de EDPs a uno de EDOs.



Figura 11. Representación del mallado generado por el método de líneas en dos dimensiones.

Para incluir las condiciones de frontera en el método cada nodo ubicado en los límites del mallado se expresa mediante su correspondiente condición de frontera discretizada. Los vértices del mallado son los únicos nodos en los que son válidas dos condiciones de frontera por lo que se suele seleccionar una de ellas para representar ese punto en particular.

Una vez que el sistema de EDPs se discretiza se puede resolver mediante métodos numéricos. Existen múltiples métodos numéricos desarrollados y programados en distintas plataformas computacionales como MATLAB<sup>®</sup> o COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>. MATLAB<sup>®</sup> cuenta con una serie de funciones programadas para

resolver tanto EDOs rígidas<sup>2</sup> como no rígidas. Este programa es muy versátil y permite un alto control de la programación.

Por su parte, COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> emplea el método numérico de elemento finito. Dicho método se basa en el álgebra lineal donde un dominio físico se divide en elementos más pequeños (mallado) que comprenden un subespacio vectorial para cada variable de respuesta. La solución obtenida será una combinación lineal de las proyecciones finitas de cada subespacio. Aunque el programa COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> permite visualizar una amplia gama de geometrías y resuelve sistemas donde ocurren múltiples fenómenos simultáneamente, es considerado una "caja negra" en la que el usuario ingresa datos de entrada y refina algunas características del método.

## 3. Modelo Teórico

En el presente trabajo se desarrolló un modelo matemático para describir el proceso de composteo en un biorreactor tubular de policloruro de vinilo (PVC) aislado de acuerdo con los fenómenos de transferencia de calor y masa a partir del modelo desarrollado por Vidriales-Escobar et al. (2017), al cual se le denominó modelo base.

El modelo base y el modelo de composteo propuesto son modelos matemáticos fundamentados en la cinética de crecimiento microbiano que consideran la aproximación de continuidad<sup>3</sup> y las variaciones temporal y espacial de las variables de interés. Ambos modelos describen al reactor como un sistema bifásico en el que la fase gas aporta el oxígeno requerido para el metabolismo de los microorganismos, mientras que en la fase sólido-líquido (lodo, agua, madera y pasto) se desarrollan los

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Una EDO o sistema de EDOs es rígido cuando la escala de la variable independiente es considerablemente distinta a la escala de soluciones de la ecuación. Es común que la escala más pequeña determine el paso de solución del método numérico en función de la estabilidad (Fletcher, 1998).

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> La aproximación de continuidad es una idealización matemática para el modelado de sistemas discretos en la que la unidad de análisis del sistema se considera lo suficientemente reducida para que sus propiedades no fluctúen por movimientos moleculares y puedan ser representadas mediante derivadas (Bishop Joseph E. y Lim, 2016).

microorganismos y ocurre la degradación de la materia orgánica. La nomenclatura del modelo se muestra en la Tabla 9.

Parámetro	Descripción	Unidades
L	Longitud del reactor	m
а	Radio interno del reactor	m
v <sub>i</sub>	Velocidad intersticial del gas	m s
X	Concentración de microorganismos	$\frac{\text{kg X}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
X <sub>0</sub>	Concentración inicial de microorganismos	$\frac{\text{kg X}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
S	Concentración de sustrato	$\frac{\text{kg S}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
S <sub>0</sub>	Concentración inicial de sustrato	$\frac{\text{kg S}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
C <sub>a</sub>	Concentración de oxígeno en la fase gas	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{m}_{\text{gas}}^3}$
C <sub>a0</sub>	Concentración inicial de oxígeno en la fase gas	$\frac{\text{kg O}_2}{m_{\text{gas}}^3}$
Cs	Concentración de oxígeno en la fase sólido-líquido	$\frac{\text{kg } \text{O}_2}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
T <sub>a</sub>	Temperatura en la fase gas	K
T <sub>s</sub>	Temperatura en la fase sólido-líquido	К
T <sub>amb</sub>	Temperatura ambiente	К
w <sub>a</sub>	Concentración de vapor de agua en la fase gas	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{m}_{\text{gas}}^3}$

Tabla 9. Nomenclatura del modelo teórico.

w <sub>a0</sub>	Concentración inicial de vapor de agua en la fase gas	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{m}_{\text{gas}}^3}$
ws	Concentración de agua en la fase sólido-líquido	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
w <sub>s0</sub>	Concentración inicial de agua en la fase sólido- líquido	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
C <sub>pa</sub>	Capacidad calorífica de la fase gas	J kg <sub>gas</sub> K
C <sub>psl</sub>	Capacidad calorífica de la fase sólido-líquido	J kg <sub>sól-líq</sub> K
D <sub>eL</sub>	Coeficiente de dispersión axial de oxígeno en la fase gas	$\frac{m^2}{s}$
D <sub>eT</sub>	Coeficiente de dispersión radial de oxígeno en la fase gas	$\frac{m^2}{s}$
$D_{wL}$	Coeficiente de dispersión axial de vapor de agua	$\frac{m^2}{s}$
D <sub>wT</sub>	Coeficiente de dispersión radial de vapor de agua	$\frac{m^2}{s}$
Ea	Energía de activación para crecimiento microbiano	J mol
E <sub>ad</sub>	Energía de activación para la muerte microbiana	J mol
h	Coeficiente de transferencia de calor	$\frac{W}{m^2 K}$
h <sub>L</sub> ā	Coeficiente volumétrico de transferencia de calor	$\frac{W}{m_{total}^3 K}$
k <sub>L</sub> ā	Coeficiente volumétrico de transferencia de masa	$\frac{m_{gas}^3}{m_{total}^3 s}$
H <sub>rxn</sub>	Entalpía de reacción	$\frac{J}{\text{kg S}}$

Hw	Calor latente de evaporización	$\frac{J}{kg H_2 0}$
Нсс	Constante de la ley de Henry para el oxígeno en términos de concentración	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{m}^3}$
Нср	Constante de la ley de Henry para el oxígeno en términos de concentración de líquido y presión del gas	$\frac{mol \ O_2}{m_{s \acute{o}l}^3 - líq} \ Pa$
Hvv	Constante de la ley de Henry para el oxígeno en términos volumétricos	$\frac{m_{gas}^3}{m_{sol-liq}^3}$
k <sub>er</sub>	Conductividad térmica radial de la fase gas	W m K
k <sub>ez</sub>	Conductividad térmica axial de la fase gas	W m K
k <sub>sl</sub>	Conductividad térmica de la fase sólido-líquido	W m K
К	Constante de inhibición de Oxígeno	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{m}^3}$
K <sub>c</sub>	Constante cinética de vida media	kg S kg X
R	Constante de los gases ideales	J mol K
T <sub>h</sub>	Temperatura máxima viable	K
T <sub>m</sub>	Temperatura óptima de crecimiento	К
W <sub>c1</sub>	Humedad crítica mínima	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}$
W <sub>opt</sub>	Humedad óptima de crecimiento	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}$
w <sub>c2</sub>	Humedad crítica máxima viable	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}$
k <sub>a</sub>	Constante de corrección de humedad	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}$

fmw	Fracción másica de agua en la fase sólido-líquido	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}$
$\rho_{ap}$	Densidad aparente de la fase sólido-líquido	$\frac{\text{kg sol} - \text{liq}}{\text{m}_{\text{sol}-\text{liq}}^3}$
ρ <sub>a</sub>	Densidad de la fase gas	$\frac{\text{kg gas}}{\text{m}_{\text{gas}}^3}$
$\rho_{sl}$	Densidad de la fase sólido-líquido	$\frac{kg_{s\delta l-líq}}{m_{s\delta l-líq}^3}$
U	Coeficiente global de transferencia de calor radial	$\frac{W}{m^2 K}$
Y <sub>S/X</sub>	Rendimiento sustrato-biomasa	kg S kg X
Y <sub>O/S</sub>	Rendimiento oxígeno-sustrato	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{kg S}}$
Y <sub>O/X</sub>	Rendimiento oxígeno-biomasa	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{kg X}}$
Y <sub>w/S</sub>	Rendimiento agua-sustrato	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg S}}$
α <sub>ez</sub>	Difusividad térmica axial de la fase gas	$\frac{m^2}{s}$
α <sub>er</sub>	Difusividad térmica radial de la fase gas	$\frac{m^2}{s}$
$\alpha_{sl}$	Difusividad térmica de la fase sólido-líquido	$\frac{m^2}{s}$
ε <sub>a</sub>	Fracción volumétrica de gas (Porosidad)	$\frac{m_{gas}^3}{m_{total}^3}$
$1 - \varepsilon_a$	Fracción volumétrica de la fase sólido-líquido	$\frac{m_{sol-liq}^3}{m_{total}^3}$
μ <sub>m</sub>	Velocidad específica de crecimiento microbiano	s <sup>-1</sup>
μ <sub>d</sub>	Velocidad específica de muerte microbiana	s <sup>-1</sup>

V <sub>mCa</sub>	Volumen molar específico promedio para oxígeno	$\frac{m^3O_2}{kgO_2}$
V <sub>mwa</sub>	Volumen molar específico promedio para vapor de agua	$\frac{\mathrm{m}^{3}\mathrm{H}_{2}\mathrm{O}}{\mathrm{kg}\mathrm{H}_{2}\mathrm{O}}$

## 3.1 Modelo base

## 3.1.1 Generalidades del modelo base

Como señala la Figura 12 el modelo base describe el proceso de composteo a través de seis variables: i) Concentración de microorganismos X  $\left(\frac{\text{kg X}}{\text{m}^3}\right)$ ; ii) Concentración de sustrato, S  $\left(\frac{\text{kg S}}{\text{m}^3}\right)$ ; iii) Concentración de oxígeno en la fase gas, C<sub>a</sub>  $\left(\frac{\text{kg O}_2}{\text{kg gas}}\right)$ ; iv) Concentración de oxígeno en la fase sólido-líquido, C<sub>s</sub>  $\left(\frac{\text{kg O}_2}{\text{m}^3}\right)$ ; v) Temperatura de la fase gas, T<sub>a</sub> (K) y vi) Temperatura de la sólido-líquido, T<sub>s</sub> (K).



Figura 12. Variables del modelo base. T: Temperatura; C: Concentración de O<sub>2</sub>; X: Concentración de biomasa; S: Concentración de sustrato. Subíndices a, s: fase gas y fase sólido-líquido, respectivamente.

## 3.1.2 Consideraciones del modelo base

En el desarrollo del modelo base los autores realizaron las siguientes consideraciones:

- La materia orgánica se mezcló lo más homogéneamente posible previo a su carga en el reactor. Por lo tanto, se consideró que el biorreactor contiene una mezcla uniforme de materia orgánica.
- Las propiedades termofísicas de la fase sólido-líquido permanecen constantes, al igual que su porosidad. Si bien la porosidad del medio cambia conforme se desarrolla el proceso, los autores consideraron un valor promedio de la literatura.
- 3) Las propiedades termofísicas de la fase gas corresponden a las del aire.
- La humedad en el sistema es constante debido a la adición continua de aire húmedo.
- 5) Simetría respecto a la coordenada angular.
- 6) El consumo de oxígeno ocurre principalmente en la región externa de la fase sólido-líquido. Por lo tanto, no es necesario modelar el consumo de oxígeno al interior de esta fase.
- Las dos fases presentan un equilibrio local en la concentración de oxígeno; lo que se establece mediante la ley de Henry.
- 8) La fase sólido-líquido presenta un equilibrio local de temperatura. Por lo que no es necesario modelar la transferencia de energía al interior de dicha fase.
- La transferencia de calor en dirección radial se caracteriza mediante un coeficiente global de transferencia de calor dominado por la resistencia del aislamiento.

## 3.1.3 Ecuaciones del modelo base

El modelo base predice el proceso de composteo mediante seis diferentes descripciones matemáticas: i) Cinética de crecimiento celular, ii) Cinética de consumo de sustrato iii) Transferencia de oxígeno en la fase gas, iv) Transferencia de oxígeno

en la fase sólido-líquido, v) Descripción de la temperatura en la fase gas, vi) Descripción de la temperatura en la fase sólido-líquido.

### 3.1.3.1 Cinética de crecimiento celular

A pesar del dinamismo del proceso de composteo desde el punto de vista biológico, los microorganismos que llevan a cabo la degradación de la materia orgánica suelen considerarse como un conjunto global de ellos (X). La cinética de crecimiento celular propuesta en el modelo base contempla las fases de crecimiento y muerte celular caracterizadas por velocidades de crecimiento ( $\mu$ ) y de muerte ( $k_d$ ) que a su vez son dependientes de la temperatura de la fase sólido-líquido mediante los términos  $\alpha_T$  y  $\alpha_2$ , respectivamente. Además, la velocidad de crecimiento celular contempla las limitaciones del proceso por concentración de sustrato y oxígeno; la primera mediante el modelo de Contois y la segunda empleando el modelo de Monod (Ecuación 25).

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \alpha_{\rm T} \mu_{\rm m} \left( \frac{S}{K_{\rm c} X + S} \right) \left( \frac{C_{\rm s}}{K + C_{\rm s}} \right) X - \mu_{\rm d} \alpha_{\rm 2} X$$
(25)

Donde:

$$\begin{split} \alpha_2 &= & \exp\left[-\frac{E_{Ad}}{R} \Big(\frac{1}{T_s} - \frac{1}{T_m}\Big)\right] \\ \alpha_T &= & \begin{cases} \exp\left[-\frac{E_A}{R} \Big(\frac{1}{T_s} - \frac{1}{T_m}\Big)\right] &: T_s \leq T_m \\ \\ \frac{T_h - T_s}{T_h - T_m} &: T_m \leq T_s \leq T_h \\ 0 &: T_s > T_h \end{cases} \end{split}$$

## 3.1.3.2 Cinética de consumo de sustrato

Las cinéticas de consumo de sustrato y crecimiento celular se relacionan mediante la Ecuación 26 a través de un coeficiente de rendimiento sustrato-biomasa  $(Y_{S/X})$ .

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -Y_{S/X} \frac{\partial X}{\partial t}$$
(26)

55

En el modelo base se consideró un valor constante de  $Y_{S/X}$  basado en información bibliográfica, por lo que al integrar la Ecuación 26 se obtuvo la Ecuación 27.

$$S = S_0 - Y_{S/X}(X - X_0)$$
(27)

### 3.1.3.3 Transferencia de oxígeno en la fase gas

Efectuando un balance en estado no estacionario de oxígeno en la fase gas dentro del reactor se determinó la Ecuación 28, en la que los autores consideraron que la variación de la concentración de oxígeno era representativa en la dirección axial debido a los procesos de convección y dispersión. Además, el consumo de oxígeno se relacionó a través de un coeficiente de rendimiento oxígeno-sustrato ( $Y_{O/S}$ ).

$$\frac{\partial C_a}{\partial t} + v_i \frac{\partial C_a}{\partial z} = D_{eL} \frac{\partial^2 C_a}{\partial z^2} + \frac{Y_{O/S}}{\varepsilon_a} \frac{\partial S}{\partial t}$$
(28)

Cabe señalar que la velocidad intersticial ( $v_i$ ) es la velocidad promedio de un fluido en el espacio poroso cuando el elemento de análisis se considera un elemento continuo (Saez & Baygents, 2014).

#### 3.1.3.4 Transferencia de oxígeno en la fase sólido-líquido

De acuerdo con la séptima consideración para el modelo existe un equilibrio de la concentración de oxígeno entre las dos fases; lo que se establece mediante la ley de Henry (Ecuación 29).

$$C_{s} = (Hcc)(C_{a})$$
<sup>(29)</sup>

Si bien la constante de proporcionalidad de Henry (Hcc) es función de la temperatura principalmente, para el establecimiento de la Ecuación 29 se consideró un valor promedio en el rango de 25 a 60°C (Sander, 2015).

#### 3.1.3.5 Descripción de la temperatura en la fase gas

Al efectuar un balance microscópico en estado no estacionario de energía en la fase gas dentro del reactor se determinó la Ecuación 30, misma que considera la variación radial y axial de la temperatura.

$$\frac{\partial T_{a}}{\partial t} + v_{i}\frac{\partial T_{a}}{\partial z} = \alpha_{ez}\frac{\partial^{2} T_{a}}{\partial z^{2}} + \alpha_{er}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T_{a}}{\partial r}\right) + \frac{h_{L}\bar{a}}{\epsilon_{a}\rho_{a}C_{pa}}(T_{s} - T_{a})$$
(30)

La Ecuación 30 contempla que la transferencia convectiva de calor ocurre principalmente en dirección axial. Además, esta ecuación supone que la pérdida de energía a través de la superficie lateral del reactor propicia gradientes de temperatura no despreciables, por lo que incluye el término difusivo en dirección radial. Finalmente, el último término del lado derecho de la Ecuación 30 describe la transferencia de energía entre las fases mediante un coeficiente volumétrico de transferencia de calor.

#### 3.1.3.6 Descripción de la temperatura en la fase sólido-líquido

Al efectuar un balance microscópico en estado no estacionario de energía en la fase sólido-líquido dentro del reactor se determinó la Ecuación 31.

$$\frac{\partial T_{s}}{\partial t} = \alpha_{sl} \left[ \frac{\partial^{2} T_{s}}{\partial z^{2}} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_{s}}{\partial r} \right) \right] + \frac{H_{rxn}}{\rho_{sl} C_{psl}} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{h_{L} \bar{a}}{\rho_{sl} C_{psl}} (T_{a} - T_{s})$$
(31)

La Ecuación 31 describe la variación de la temperatura de la fase sólido-líquido en función del tiempo y las direcciones axial y radial. Además, similar a la Ecuación 30, establece el intercambio de calor entre las dos fases. Cabe señalar que la Ecuación 31 considera la energía generada por los microorganismos debido al consumo de la materia orgánica (sustrato); representada mediante la entalpía de reacción.

## 3.1.4 Condiciones iniciales y de frontera

Las condiciones iniciales requeridas en los balances de energía y masa corresponden a las condiciones ambientales a las que ocurre el proceso de composteo. Así, las temperaturas de ambas fases al inicio son iguales a la temperatura ambiental, lo mismo que la concentración de oxígeno en condiciones normales (Ecuaciones 32 a 34).

Para t = 0

$$C_a = C_{a0} \tag{32}$$

$$T_a = T_{amb}$$
(33)

$$T_{s} = T_{amb}$$
(34)

De acuerdo con la primera consideración del modelo, las concentraciones de sustrato y microorganismos en cada punto del reactor al inicio del proceso son valores fijos (Ecuaciones 35 y 36). Las determinaciones experimentales de sustrato y microorganismos en el sistema de composteo suelen ser limitadas por lo que es común que en los distintos modelos matemáticos se estimen, asuman u optimicen estos parámetros. Sin embargo, la concentración másica de sustrato es mucho mayor que la de los microorganismos.

Para t = 0

$$X = X_0 \tag{35}$$

$$S = S_0 \tag{36}$$

De acuerdo con la quinta consideración del modelo base, la descripción del proceso de composteo establece un problema bidimensional (direcciones radial y axial) por lo que para cada ecuación diferencial parcial (EDP) se establecen dos condiciones de frontera por cada descripción dimensional que contemplen.

En el caso de cilindros o esferas es común establecer simetría térmica y másica en su interior con respecto al plano central, por lo que la derivada correspondiente con respecto a la posición radial es nula (Figura 13).



Figura 13. Condición de frontera por simetría con el plano central.

Así, puesto que sólo las Ecuaciones 30 y 31 describen la variación radial de la temperatura se establecen las Ecuaciones 37 y 38 para el centro del reactor.

Para r = 0

$$\frac{\partial T_a}{\partial r} = 0 \tag{37}$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial r} = 0 \tag{38}$$

Por otra parte, en la frontera donde r equivale a su valor físico (r = a) se establece la condición de pérdida de energía por intercambio con los alrededores (Ecuaciones 39 y 40). Para ello se iguala la transferencia de calor en la superficie por conducción con la energía intercambiada por el gradiente generado con el exterior, el cual es controlado por la resistencia del aislante; caracterizado mediante un coeficiente global de transferencia de calor.

Para r = a

$$-k_{\rm er}\frac{\partial T_a}{\partial r} = U(T_a - T_{\rm amb})$$
(39)

$$-k_{sl}\frac{\partial T_s}{\partial r} = U(T_s - T_{amb})$$
(40)

Dado que las Ecuaciones 28, 30 y 31 contemplan las variaciones axiales de la concentración de oxígeno en la fase gas y las temperaturas en ambas fases, se establecen las condiciones de frontera pertinentes en la base (z = 0) y superficie (z = L) del reactor.

En la base del reactor la concentración de oxígeno que ingresa al sistema es igual a la concentración inicial; mientras que la temperatura de la fase sólido-líquido se mantiene en equilibrio con la temperatura ambiental (Ecuaciones 41 y 42). Por otra parte, la ecuación de energía de la fase gas considera el cambio de transporte convectivo del interior al conductivo en el exterior del reactor (Ecuación 43).

Para z = 0

$$C_a = C_{a0} \tag{41}$$

$$T_{s} = T_{amb}$$
(42)

$$-k_{ez}\frac{\partial T_a}{\partial z} = v_i \rho_a C_{pa} (T_{amb} - T_a)$$
(43)

En la superficie del reactor es común emplear la condición de Danckwerts (Mott & Green, 2014) para la transferencia de masa en un reactor de flujo pistón (Ecuación 44). Además, en esta frontera las ecuaciones de energía establecen el transporte con el exterior a través de un coeficiente convectivo de transferencia de calor (Ecuaciones 45 y 46).

Para z = L

$$\frac{\partial C_a}{\partial z} = 0 \tag{44}$$

$$-k_{sl}\frac{\partial T_s}{\partial z} = h(T_s - T_{amb})$$
(45)

$$v_i \rho_a C_{pa} T_a - k_{ez} \frac{\partial T_a}{\partial z} = h(T_a - T_{amb})$$
(46)

60

## 3.1.5 Adimensionalización del modelo base

La adimensionalización es una estrategia ampliamente usada en ingeniería para la resolución de problemas de forma práctica. Dicha estrategia consiste en definir nuevas variables del modelo que matemáticamente carezcan de unidades. Así, para la adimensionalización del modelo base se definieron las Ecuaciones 47 a 54.

$$\overline{\mathbf{X}} = \frac{\mathbf{X}}{\mathbf{X}_0} \tag{47}$$

$$\overline{S} = \frac{S}{S_0} \tag{48}$$

$$\overline{C_a} = \frac{C_a}{C_{a0}}$$
(49)

$$\overline{T_a} = \frac{T_a}{T_{amb}}$$
(50)

$$\overline{T}_{s} = \frac{T_{s}}{T_{amb}}$$
(51)

$$\bar{t} = \frac{(t)(v_i)}{L}$$
(52)

$$\overline{z} = \frac{z}{L}$$
(53)

$$\bar{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{a}} \tag{54}$$
Las variables adimensionales de respuesta del modelo (Ecuaciones 47 a 51) se establecen a partir de sus valores iniciales; mientras que las variables adimensionales de posición axial y radial (Ecuaciones 53 y 54) implican la longitud total del sistema de composteo (L) y su radio (a), respectivamente. Por otra parte, el tiempo adimensional suele establecerse en función del fenómeno de transferencia que domina el proceso; en el modelo base se sugiere un dominio de los procesos de convección sobre los dispersivos (Ecuación 52).

Con base en las variables adimensionales, se definieron las siguientes ecuaciones adimensionales en el modelo base (Ecuaciones 55 a 59).

## 3.1.5.1 Cinética de crecimiento celular adimensional.

$$\frac{\partial \overline{X}}{\partial \overline{t}} = \frac{(Da_g)(\overline{\alpha_T})(\overline{X})(\overline{S})(\overline{C_a})}{[(d)(\overline{X}) + \overline{S}](c + \overline{C_a})} - (Da_d)(\overline{\alpha_2})(\overline{X})$$
(55)

Donde:

$$Da_{g} = \frac{L}{v_{i}} \mu_{m}$$

$$d = \frac{X_{0}}{S_{0}} K_{c}$$

$$c = \frac{K}{(H_{cc})(C_{a0})}$$

$$Da_{d} = \frac{L}{v_{i}} \mu_{b}$$

$$\overline{\alpha_{2}} = \exp\left[-\frac{E_{Ad}}{R}\left(\frac{1}{\overline{T_{s}}} - \frac{T_{amb}}{T_{m}}\right)\right]$$

$$\overline{\alpha}_{\overline{T}} = \begin{cases} \exp\left[-\frac{E_A}{R}\left(\frac{1}{\overline{T_s}} - \frac{T_{amb}}{T_m}\right)\right] &: \overline{T_s} \leq \frac{T_m}{T_{amb}} \\ \frac{T_h}{T_{amb}} - \overline{T_s} &: \frac{T_m}{T_{amb}} < \overline{T_s} \leq \frac{T_h}{T_{amb}} \\ \frac{T_h - T_m}{T_{amb}} &: \overline{T_s} > \frac{T_h}{T_{amb}} \end{cases}$$

3.1.5.2 Cinética de consumo de sustrato adimensional.

$$\overline{S} = 1 - e(\overline{X} - 1) \tag{56}$$

Donde:

$$e = \frac{X_0}{S_0} Y_{S/X}$$

# 3.1.5.3 Concentración de oxígeno adimensional en la fase gas.

$$\frac{\partial \overline{C_a}}{\partial \overline{t}} + \frac{\partial \overline{C_a}}{\partial \overline{z}} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 \overline{C_a}}{\partial \overline{z}^2} - f \frac{\partial \overline{X}}{\partial \overline{t}}$$
(57)

Donde:

$$Pe = \frac{(v_i)(L)}{D_{eL}}$$
$$f = \frac{(Y_{O/X})(X_0)}{(\varepsilon_a)(C_{a0})}$$

Pe se conoce como el número de Peclet y relaciona el transporte convectivo y el dispersivo.

3.1.5.4 Descripción de la temperatura adimensional en la fase gas.

$$\frac{\partial \overline{T}_{a}}{\partial \overline{t}} + \frac{\partial \overline{T}_{a}}{\partial \overline{z}} = \frac{1}{Pe_{z}} \frac{\partial^{2} \overline{T}_{a}}{\partial \overline{z}^{2}} + \frac{1}{Pe_{r}} \frac{1}{\overline{r}} \frac{\partial}{\partial \overline{r}} \left(\overline{r} \frac{\partial \overline{T}_{a}}{\partial \overline{r}}\right) + St_{sa}(\overline{T}_{s} - \overline{T}_{a})$$
(58)

Donde:

$$Pe_{z} = \frac{(v_{i})(L)}{\alpha_{ez}}$$

$$Pe_{r} = \frac{(v_{i})(a^{2})}{(\alpha_{er})(L)}$$

$$St_{sa} = \frac{(h_{L}\bar{a})(L)}{(\varepsilon_{a})(\rho_{a})(C_{pa})(v_{i})}$$

3.1.5.5 Descripción de la temperatura adimensional en la fase sólido-líquido.

$$\frac{\partial \overline{T}_{s}}{\partial \overline{t}} = \frac{1}{Pe_{sz}} \frac{\partial^{2} \overline{T}_{s}}{\partial \overline{z}^{2}} + \frac{1}{Pe_{sr}} \frac{1}{\overline{r}} \frac{\partial}{\partial \overline{r}} \left(\overline{r} \frac{\partial \overline{T}_{s}}{\partial \overline{r}}\right) - g \frac{\partial \overline{X}}{\partial \overline{t}} + St_{as}(\overline{T}_{a} - \overline{T}_{s})$$
(59)

Donde:

$$Pe_{sz} = \frac{(v_i)(L)}{\alpha_{sl}}$$

$$Pe_{sr} = \frac{(v_i)(a^2)}{(\alpha_{sl})(L)}$$

$$g = \frac{(Y_{S/X})(H_{rxn})(S_0)}{(\rho_{sl})(C_{psl})(T_{amb})}$$

$$St_{as} = \frac{(h_L\bar{a})(L)}{(\rho_{sl})(C_{psl})(v_i)}$$

3.1.5.6 Condiciones iniciales y de frontera adimensionales.

Para  $\overline{t} = 0$ 

$$\overline{X} = 1, \overline{S} = 1, \overline{C_a} = 1, \overline{T_a} = 1, \overline{T_s} = 1$$
 (60)

Para  $\bar{r} = 0$  $\frac{\partial \overline{T_a}}{\partial \bar{r}} = 0$  (61)

$$\frac{\partial \bar{\mathrm{T}}_{\mathrm{s}}}{\partial \bar{\mathrm{r}}} = 0 \tag{62}$$

Para  $\bar{r} = 1$ 

$$-\frac{1}{\mathrm{Bi}_{\mathrm{r}}}\frac{\partial \overline{\mathrm{T}}_{\mathrm{a}}}{\partial \overline{\mathrm{r}}} = \overline{\mathrm{T}}_{\mathrm{a}} - 1 \tag{63}$$

$$-\frac{1}{\mathrm{Bi}_{\mathrm{sr}}}\frac{\partial \overline{\mathrm{T}}_{\mathrm{s}}}{\partial \overline{\mathrm{r}}} = \overline{\mathrm{T}}_{\mathrm{s}} - 1 \tag{64}$$

Donde:

$$Bi_{r} = \frac{(U)(a)}{k_{er}}$$
$$Bi_{sr} = \frac{(U)(a)}{k_{sl}}$$
$$Para \bar{z} = 0$$

$$\overline{C_a} = 1 \tag{65}$$

$$-\frac{1}{\operatorname{Pe}_{z}}\frac{\partial \overline{T}_{a}}{\partial \overline{z}} = 1 - \overline{T}_{a}$$
(66)

$$\overline{T}_{s} = 1 \tag{67}$$

Para  $\overline{z} = 1$ 

$$\frac{\partial \overline{C_a}}{\partial \overline{z}} = 0 \tag{68}$$

$$\overline{T}_{a} - \frac{1}{Pe_{z}} \frac{\partial \overline{T}_{a}}{\partial \overline{z}} = St(\overline{T}_{a} - 1)$$
(69)

$$-\frac{1}{\mathrm{Bi}_{\mathrm{sz}}}\frac{\partial \overline{\mathrm{T}}_{\mathrm{s}}}{\partial \overline{\mathrm{z}}} = \overline{\mathrm{T}}_{\mathrm{s}} - 1 \tag{70}$$

Donde:

St = 
$$\frac{h}{(\rho_a)(C_{pa})(v_i)}$$
  
Bi<sub>sz</sub> =  $\frac{(h)(L)}{k_{sl}}$ 

Los números St,  $St_{as}$ , y  $St_{sa}$  se conocen como el número adimensional de Stanton. Este número relaciona la transferencia de calor en un fluido con su capacidad térmica.

Por otra parte, los números  $Bi_r$ ,  $Bi_{sr}$  y  $Bi_{sz}$  se denominan número de Biot y relaciona la transferencia de calor por convección con el fenómeno conductivo.

### 3.2 Modelo de composteo propuesto

#### 3.2.1 Generalidades del modelo de composteo propuesto

Como señala la Tabla 10 el modelo de composteo propuesto en este trabajo describe las seis variables del modelo base más la concentración de vapor de agua en la fase gas  $(w_a)$  y la concentración de agua líquida en la fase sólido-líquido  $(w_s)$ .

Variable	Definición	Unidades
X	Concentración de microorganismos	$\frac{\text{kg X}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
S	Concentración de sustrato	$\frac{\text{kg S}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
Cs	Concentración de oxígeno en la fase sólido-líquido	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
C <sub>a</sub>	Concentración de oxígeno en la fase gas	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{m}_{\text{gas}}^3}$
T <sub>a</sub>	Temperatura en la fase gas	К
T <sub>s</sub>	Temperatura en la fas sólido-líquido	К
w <sub>a</sub>	Concentración de vapor de agua en la fase gas	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{m}_{\text{gas}}^3}$
ws	Concentración de agua en la fase sólido- líquido	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$

Tabla 10. Variables del modelo de composteo propuesto.

## 3.2.2 Ecuaciones del modelo de composteo propuesto

Para describir la cinética de consumo de sustrato, así como la temperatura en la fase gas se emplean las mismas ecuaciones del modelo base (Ecuaciones 27 y 30, respectivamente).

## 3.2.2.1 Cinética de crecimiento celular

La concentración de agua en la fase-sólido líquido suele ser un factor condicionante de la velocidad de crecimiento celular ( $\mu$ ). Para expresar dicha dependencia se incluyó el término  $\alpha_w$  a la Ecuación 25 del modelo base y así obtener la Ecuación 71.

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \alpha_{\rm T} \alpha_{\rm w} \mu_{\rm m} \left( \frac{S}{K_{\rm c} X + S} \right) \left( \frac{C_{\rm s}}{K + C_{\rm s}} \right) X - \mu_{\rm d} \alpha_{\rm 2} X$$
(71)

Donde:

$$\begin{aligned} \alpha_{2} &= \exp\left[-\frac{E_{Ad}}{R}\left(\frac{1}{T_{s}}-\frac{1}{T_{m}}\right)\right] \\ \alpha_{T} &= \begin{cases} \exp\left[-\frac{E_{A}}{R}\left(\frac{1}{T_{s}}-\frac{1}{T_{m}}\right)\right] &: T_{s} \leq T_{m} \\ \frac{T_{h}-T_{s}}{T_{h}-T_{m}} &: T_{m} \leq T_{s} \leq T_{h} \\ 0 &: T_{s} > T_{h} \end{cases} \\ \alpha_{w} &= \begin{cases} 0 &: \text{fmw} < w_{c1} \\ \frac{\text{fmw}-w_{c1}}{k_{a}+\text{fmw}} &: w_{c1} \leq \text{fmw} < w_{opt} \\ \frac{w_{opt}-w_{c1}}{k_{a}+w_{opt}} \frac{w_{c2}-\text{fmw}}{w_{c2}-w_{opt}} :: w_{opt} \leq \text{fmw} < w_{c2} \\ 0 &: \text{fmw} \geq w_{c2} \end{cases} \end{aligned}$$

fmw = 
$$\frac{(1 - \varepsilon_a)w_s}{\rho_{ap}}$$

$$\rho_{ap} = (1 - \varepsilon_a)(w_s + S + X)$$

## 3.2.2.2 Transferencia de oxígeno en la fase gas

Efectuando un balance en estado no estacionario de oxígeno en la fase gas dentro del reactor se determinó la Ecuación 72, en la que se contemplan los procesos dispersivos axial y radial.

$$\frac{\partial C_{a}}{\partial t} + v_{i}\frac{\partial C_{a}}{\partial z} = D_{eL}\frac{\partial^{2}C_{a}}{\partial z^{2}} + D_{eT}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C_{a}}{\partial r}\right) + \frac{(1-\varepsilon_{a})Y_{O/S}}{\varepsilon_{a}}\frac{\partial S}{\partial t}$$
(72)

## 3.2.2.3 Transferencia de oxígeno en la fase sólido-líquido

La concentración de oxígeno en la fase sólido-líquido sigue siendo descrita mediante la ley de Henry (Ecuación 73). Sin embargo, la constante de proporcionalidad

de dicha ley (Hvv) es función de la temperatura en la fase gas (Ecuaciones 74) y las concentraciones de oxígeno y vapor de agua en la misma fase (Ecuación 75).

$$C_{s} = (Hvv)(C_{a})$$
(73)

$$Hvv = \left(\frac{1}{fv}\right)(Hcp)(R)(T)$$
(74)

$$fv = \frac{(C_a) (V_{mCa})}{(C_a) (V_{mCa}) + (w_a) (V_{mwa})}$$
(75)

En la Ecuación 75  $V_{mCa}$  y  $V_{mwa}$  representan los volúmenes molares específicos promedio para oxígeno y vapor de agua en un rango de 20 a 75°C, respectivamente.

#### 3.2.2.4 Descripción de la temperatura en la fase sólido-líquido

Al efectuar un balance microscópico en estado no estacionario de energía en la fase sólido-líquido dentro del reactor se determinó la Ecuación 76. El tercer término del lado derecho de la igualdad establece la energía perdida por evaporación del agua en la fase sólido-líquido.

$$\frac{\partial T_{s}}{\partial t} = \alpha_{sl} \left[ \frac{\partial^{2} T_{s}}{\partial z^{2}} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_{s}}{\partial r} \right) \right] + \frac{H_{rxn}}{\rho_{sl} C_{psl}} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{H_{w}}{\rho_{sl} C_{psl}} \frac{\partial w_{s}}{\partial t} + \frac{h_{L} \bar{a}}{(1 - \varepsilon_{a}) \rho_{sl} C_{psl}} (T_{a} - T_{s})$$
(76)

## 3.2.2.5 Transferencia de vapor de agua en la fase gas

Mediante un balance microscópico en estado no estacionario del vapor de agua en la fase gaseosa se obtuvo la Ecuación 77. En esta ecuación se contempla el fenómeno convectivo, además de los procesos dispersivos en dirección axial y radial; así como el intercambio de agua entre las fases en la capa límite.

$$\frac{\partial w_a}{\partial t} + v_i \frac{\partial w_a}{\partial z} = D_{wL} \frac{\partial^2 w_a}{\partial z^2} + D_{wT} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial w_a}{\partial r} \right) + \frac{k_L \bar{a}}{\epsilon_a} (w_{sat} - w_a)$$
(77)

Para estimar la concentración de saturación se empleó la Ecuación 78.

$$w_{sat} = \left(\frac{18 \frac{\text{kg H}_2 0}{\text{kmol H}_2 0}}{22.4 \frac{\text{m}^3 \text{ gas}}{\text{kmol gas}}}\right) \left(\frac{\exp\left(13.97 - \frac{5336.96}{\text{T}_{s} + 9.28}\right)}{1 - \exp\left(13.97 - \frac{5336.96}{\text{T}_{s} + 9.28}\right)}\right)$$
(78)

## 3.2.2.6 Transferencia de agua en la fase sólido líquido

Al efectuar un balance microscópico en estado no estacionario para el agua en la fase sólido-líquido se obtuvo la Ecuación 79. El primer término del lado derecho de la igualdad describe la generación de agua debido a la actividad metabólica de los microorganismos a través de un rendimiento agua-sustrato obtenido de Wang et al. (2015), mientras que el último término expresa la transferencia de masa entre ambas fases en la capa límite.

$$\frac{\partial w_{s}}{\partial t} = Y_{w/S} \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{k_{L} \bar{a}}{1 - \varepsilon_{a}} (w_{sat} - w_{a})$$
(79)

#### 3.2.3 Condiciones iniciales y de frontera del modelo de composteo propuesto

Las condiciones iniciales y de frontera del modelo son las mismas que las establecidas en el modelo base (Ecuaciones 32 a 46). Para la concentración de agua en la fase sólido-líquido y de vapor de agua en la fase gas se determinaron las condiciones iniciales apropiadas (Ecuación 80).

Para t = 0

$$w_a = w_{a0}, w_s = w_{s0}$$
 (80)

El valor  $w_{a0}$  corresponde a la humedad absoluta promedio de la región centro de México mientras que  $w_{s0}$  es un valor cercano a las estimaciones realizadas por Rentería-Tamayo et al. (2018) para el modelo base.

Así mismo, las dos condiciones de frontera radiales para la transferencia de oxígeno en la fase gas establecen que no existe intercambio de materia en las paredes del sistema (Ecuación 81). Para r = 0 y r = a

$$\frac{\partial C_a}{\partial r} = 0 \tag{81}$$

Por otra parte, las condiciones de frontera para la transferencia de vapor de agua en la fase gas son equivalentes a las correspondientes a la transferencia de oxígeno en la fase gas (Ecuaciones 82 a 84).

Para z = 0

$$w_a = w_{a0} \tag{82}$$

Para z = L

$$\frac{\partial w_a}{\partial r} = 0 \tag{83}$$

Para r = 0 y r = a

$$\frac{\partial w_a}{\partial r} = 0 \tag{84}$$

## 3.2.3 Adimensionalización del modelo de composteo propuesto

La adimensionalización de las ecuaciones del modelo de composteo propuesto se basa en las mismas definiciones adimensionales del modelo base (Ecuaciones 47 a 54) junto a las Ecuaciones 85 a 87; donde  $w_{sat0}$  representa la humedad de saturación a temperatura ambiente.

$$\overline{w_a} = \frac{w_a}{w_{a0}}$$
(85)

$$\overline{w_s} = \frac{w_s}{w_{s0}}$$
(86)

$$\overline{w_{\text{sat}}} = \frac{w_{\text{sat}}}{w_{\text{sat0}}}$$
(87)

Sólo la cinética de consumo de sustrato y la descripción adimensional de la temperatura en la fase gas (Ecuaciones 56 y 58) son iguales para el modelo base y el modelo de composteo propuesto.

#### 3.2.3.1 Cinética de crecimiento celular adimensional

El efecto de la concentración de agua sobre la velocidad de crecimiento microbiano modifica ligeramente la cinética de crecimiento celular adimensional (Ecuación 88).

$$\frac{\partial \overline{X}}{\partial \overline{t}} = \frac{(\mathrm{Da}_{\mathrm{g}})(\overline{\alpha}_{\mathrm{T}})(\overline{\alpha}_{\mathrm{w}})(\overline{X})(\overline{S})(\overline{C}_{\mathrm{a}})}{[(\mathrm{d})(\overline{X}) + \overline{S}](\mathrm{c} + \overline{C}_{\mathrm{a}})} - (\mathrm{Da}_{\mathrm{d}})(\overline{\alpha}_{\mathrm{2}})(\overline{X})$$
(88)

Donde:

$$\overline{\alpha_{w}} = \begin{cases} 0 & : \text{fmw} < w_{c1} \\ \frac{\overline{\text{fmw}} - w_{c1}}{k_{a} + \overline{\text{fmw}}} & : w_{c1} \leq \overline{\text{fmw}} < w_{opt} \\ \frac{w_{opt} - w_{c1}}{k_{a} + w_{opt}} \frac{w_{c2} - \text{fmw}}{w_{c2} - w_{opt}} & : w_{opt} \leq \overline{\text{fmw}} < w_{c2} \\ 0 & : \overline{\text{fmw}} \geq w_{c2} \end{cases}$$

$$\overline{\text{fmw}} = \frac{(1 - \varepsilon) w_{s0} \overline{w_{s}}}{\overline{\rho_{ap}}}$$

 $\overline{\rho_{ap}} = (1 - \epsilon)(w_{s0}\overline{w_s} + S_0\overline{S} + X_0\overline{X})$ 

3.2.3.2 Concentración de oxígeno adimensional en la fase gas

$$\frac{\partial \overline{C_a}}{\partial \overline{t}} + \frac{\partial \overline{C_a}}{\partial \overline{z}} = \frac{1}{\varepsilon_a \operatorname{Pe}} \frac{\partial^2 \overline{C_a}}{\partial \overline{z}^2} + \frac{1}{\varepsilon_a \operatorname{Pe_T}} \frac{1}{\overline{r}} \frac{\partial}{\partial \overline{r}} \left( \overline{r} \frac{\partial}{\partial \overline{r}} \right) - \frac{f}{\varepsilon_a} \frac{\partial \overline{X}}{\partial \overline{t}}$$
(89)

Donde:

$$Pe = \frac{(v_i)(L)}{D_{eL}}$$

$$P_{eT} = \frac{(v_i)(a^2)}{D_{eT} L}$$

$$f = \frac{(1 - \varepsilon_a)(Y_{O/X})(X_0)}{C_{a0}}$$

3.2.3.3 Descripción de la temperatura adimensional en la fase sólido-líquido

$$\frac{\partial \overline{T}_{s}}{\partial \overline{t}} = \frac{1}{Pe_{sz}} \frac{\partial^{2} \overline{T}_{s}}{\partial \overline{z}^{2}} + \frac{1}{Pe_{sr}} \frac{1}{\overline{r}} \frac{\partial}{\partial \overline{r}} \left( \overline{r} \frac{\partial \overline{T}_{s}}{\partial \overline{r}} \right) - g \frac{\partial \overline{X}}{\partial \overline{t}} + g_{w} \frac{\partial \overline{w_{s}}}{\partial \overline{t}} + St_{as} (\overline{T}_{a} - \overline{T}_{s})$$
(90)

Donde:

$$Pe_{sz} = \frac{(v_i)(L)}{\alpha_{sl}}$$

$$Pe_{sr} = \frac{(v_i)(a^2)}{(\alpha_{sl})(L)}$$

$$g = \frac{(Y_{S/X})(H_{rxn})(S_0)}{(\rho_{sl})(C_{psl})(T_{amb})}$$

$$g_w = \frac{(H_w)(w_{s0})}{(\rho_{sl})(C_{psl})(T_{amb})}$$

$$(h, \bar{z})(L)$$

$$St_{as} = \frac{(h_L\bar{a})(L)}{(1-\varepsilon_a)(\rho_{sl})(C_{psl})(v_i)}$$

3.2.3.4 Concentración de vapor de agua adimensional en la fase gas

$$\frac{\partial \overline{w_a}}{\partial \overline{t}} + \frac{\partial \overline{w_a}}{\partial \overline{z}} = \frac{1}{\varepsilon_a P_{ewL}} \frac{\partial^2 \overline{w_a}}{\partial \overline{z}^2} + \frac{1}{\varepsilon_a P_{ewT}} \frac{1}{\overline{r}} \frac{\partial}{\partial} \overline{r} \left( \overline{r} \frac{\partial \overline{w_a}}{\partial \overline{r}} \right) + K_H \left( \overline{w_{sat}} - \overline{w_a} \right)$$
(91)

Donde:

$$P_{ewL} = \frac{(v_i)(L)}{D_{wL}}$$

$$P_{ewT} = \frac{(v_i)(a^2)}{D_{wT} L}$$

$$K_H = \frac{(L)(k_L \overline{a})}{(\epsilon_a)(v_i)(w_{a0})}$$

3.2.3.5 Concentración de agua adimensional en la fase sólido-líquido

$$\frac{\partial \overline{w_s}}{\partial \overline{t}} = h_w \frac{\partial \overline{X}}{\partial \overline{t}} - K_{Hs} \left( \overline{w_{sat}} - \overline{w_a} \right)$$
(92)

Donde:

$$h_w = \frac{(Y_{w/X})(X_0)}{W_{s0}}$$

$$K_{Hs} = \frac{(L)(k_L\bar{a})}{(1-\varepsilon_a)(v_i)(w_{s0})}$$

## 3.2.3.6 Condiciones iniciales y de frontera adimensionales

Las condiciones iniciales y de frontera adimensionales en el modelo de composteo propuesto son iguales a las del modelo base (Ecuaciones 60 a 70); sólo se agregan las correspondientes de acuerdo con las modificaciones efectuadas (Ecuaciones 93 a 97).

Para  $\overline{t} = 0$ 

$$\overline{w_a} = 1, \, \overline{w_s} = 1 \tag{93}$$

Para  $\overline{z} = 0$ 

$$\overline{w_a} = 1 \tag{94}$$

Para  $\overline{z} = 1$ 

$$\frac{\partial \overline{w_a}}{\partial \overline{r}} = 0 \tag{95}$$

Para  $\bar{r} = 0$  y  $\bar{r} = 1$ 

$$\frac{\partial \overline{C_a}}{\partial \overline{r}} = 0 \tag{96}$$

$$\frac{\partial \overline{w_a}}{\partial \overline{r}} = 0 \tag{97}$$

# 4. Justificación e Hipótesis

# Justificación

El composteo es una estrategia sustentable para el tratamiento de desechos que permite obtener un producto con valor agregado. El desarrollo de un modelo matemático capaz de describir apropiadamente un proceso tan complejo como éste permite predecir la variación de los factores de interés y definir las condiciones adecuadas para un propósito en particular; como la obtención de temperaturas elevadas y uniformes en el sistema que propicien su higienización. Además, el modelado de sistemas a escala laboratorio establece un punto de referencia para mejorar la comprensión del proceso de composteo, su control y la posibilidad de escalarlo.

Si bien los modelos temporales y espaciales más recientes establecen una descripción más realista del proceso de composteo, la vasta heterogeneidad de estos para describir procesos relevantes en el composteo (e.g., la variación de la concentración de agua en el sistema o las funciones para indicar los efectos de factores ambientales) resulta un área de oportunidad para mejorarlos y que sean más consistentes con la naturaleza biológica del proceso. Esto se lograría en el modelo base mediante la inclusión de la descripción de la humedad en el sistema y su efecto sobre la cinética microbiana.

## Hipótesis

La inclusión de la descripción de la humedad en el sistema será importante para el proceso de composteo en el modelo desarrollado. Este modelo describirá adecuadamente distintas variables de interés para interpretar y predecir el proceso; especialmente la variación espacial y temporal de la temperatura en el sistema. Mediante esta aportación se desarrollará un modelo matemático más consistente con la naturaleza biológica del proceso que contribuya al entendimiento del composteo.

# 5. Objetivos

# **Objetivo General**

Desarrollar y resolver un modelo matemático temporal y espacial que considere la humedad en el sistema para describir las etapas iniciales de un proceso de composteo en un biorreactor por lotes.

# **Objetivos particulares**

Los objetivos particulares del proyecto son:

- 1. Realizar una evaluación del modelo base de la literatura.
- Comparar la descripción del modelo base en MATLAB<sup>®</sup> y COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>.
- Proponer mejoras al modelo base para obtener uno más robusto; especialmente la incorporación de la descripción de la humedad en el sistema.
- 4. Resolver el modelo propuesto en el programa computacional más apropiado (MATLAB<sup>®</sup> o COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>).
- 5. Efectuar un análisis de sensibilidad y de diseño del modelo propuesto.
- 6. Analizar el grado de higienización en el reactor.

# 6. Material y métodos

El presente proyecto se desarrolló en una computadora con procesador Intel<sup>®</sup> Core<sup>™</sup> i7 de 2.40 GHz. Así mismo, se emplearon los programas MATLAB<sup>®</sup> R2019 y COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> v4.0.

La metodología desarrollada en el proyecto se dividió en tres etapas. La primera corresponde a la valoración del modelo base, la segunda al desarrollo del modelo de composteo propuesto y la tercera a su análisis.

# 6.1 Valoración del modelo base

## 6.1.1 Análisis de las ecuaciones adimensionales del modelo base

Se realizó un análisis del proceso de adimensionalización de las ecuaciones. Esto con la finalidad de corroborar si las ecuaciones adimensionales eran correctas desde la definición inicial del modelo base.

## 6.1.2 Corroboración del código original para la solución del modelo base

Se analizó el código original para la solución de las EDPs adimensionales del modelo base (Ecuaciones 55 a 70) en MATLAB<sup>®</sup> con una discretización mediante el método de líneas. Este estudio se realizó a dos niveles: i) evaluación de la pertinencia de los números adimensionales y ii) confirmación de la estructura de las ecuaciones discretizadas.

Para confirmar la estructura de las ecuaciones discretizadas se desarrollaron las mismas ecuaciones y se compararon con las descritas en el código original. Puesto que el número de nodos empleado en el modelo base propicia un mallado extenso (21 nodos en la dirección radial y 49 en la dirección axial), se empleó la Figura 14 como guía para la categorización de los nodos del sistema y su posterior generalización por indexación en una matriz <u>Y</u> de variables de respuesta donde cada columna representa una variable distinta y los renglones la posición dentro del mallado.

	Tar0(7)	Taz1(1)	Taz1(2)	Taz1(3)	Taz1(4)	Taz1(5)	Taz1(6)	Taz1(7)	Tar1(7)	_
Ē	Tar0(6)	29	30	31	32	33	34	35	Tar1(6)	Ù
nt.	Tar0(5)	22	23	24	25	26	27	28	Tar1(5)	nt
Fro	Tar0(4)	15	16	17	18	19	20	21	Tar1(4)	E L
	Tar0(3)	8	9	10	11	12	13	14	Tar1(3)	p.
Sor	Tar0(2)	1	2	3	4	5	6	7	Tar1(2)	Jo Lo
0	Tar0(1)	Taz0(1)	Taz0(2)	Taz0(3)	Taz0(4)	Taz0(5)	Taz0(6)	Taz0(7)	Tar1(1)	
^z	<b>^z &gt;r</b> Cond. Front. z=0									

Cond. Front. z=1

Figura 14. Ejemplo de categorización de nodos totales de la variable adimensional  $\overline{T_a}$  para un mallado generado con 6 nodos axiales y 8 radiales.

Para ejemplificar el desarrollo de las ecuaciones discretizadas se expone la discretización del valor central (nodo 18 de la Figura 14) de la temperatura adimensional en la fase gas (Ecuación 58). Nótese que debido a la ubicación del nodo se emplearon diferencias finitas centradas (Tabla 8) para discretizar los diferenciales de posición.

$$\frac{\partial \overline{T_a}}{\partial \overline{t}} = -\frac{\partial \overline{T_a}}{\partial \overline{z}} + \frac{1}{Pe_z} \frac{\partial^2 \overline{T_a}}{\partial \overline{z}^2} + \frac{1}{Pe_r} \left[ \frac{1}{\overline{r}} \frac{\partial \overline{T_a}}{\partial \overline{r}} + \frac{\partial^2 \overline{T_a}}{\partial \overline{r}^2} \right] + St_{sa}(\overline{T_s} - \overline{T_a})$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -\frac{Y(25,1) - Y(11,1)}{2h_z} + \frac{1}{Pe_z} \frac{Y(25,1) - 2Y(18,1) + Y(11,1)}{h_z^2} + \frac{1}{Pe_r} \left[ \frac{1}{4h_r} \frac{Y(19,1) - Y(17,1)}{2h_r} + \frac{Y(19,1) - 2Y(18,1) + Y(17,1)}{h_r^2} \right] + St_{sa}[Y(18,2) - Y(18,1)]$$

Finalmente se resolvió el modelo base codificado en MATLAB<sup>®</sup> de acuerdo con las especificaciones originales de solución (i.e., discretización por el método de líneas y solución del sistema de EDOs mediante la función ode15s con un mallado de 21 nodos en la posición radial y 49 en la dirección axial).

#### 6.1.3 Solución del modelo base en COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>

El modelo base adimensional se resolvió mediante el método de elemento finito en COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>. La Tabla 11 detalla los lineamientos en cada etapa desarrollada.

Para el análisis de los resultados se compararon tres nodos del sistema con lo descrito en MATLAB<sup>®</sup> a partir de las especificaciones originales de solución.

Finalmente, se seleccionó el programa computacional más adecuado para desarrollar los estudios posteriores de acuerdo con los siguientes criterios:

 Descripción lógica de las variaciones de temperatura y concentración de oxígeno adimensional durante el proceso de composteo simulado. 2. Ventajas operacionales para el análisis de la información simulada.

Tabla 11. Lineamientos para la solución del modelo base adimensional en COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>.

Etapa	Ca	ategoría	Especificación
	Dimensión espacial del sistema		2D
del caso de estudio	Módulos	físicos	4 Módulos <i>Coefficient form</i> <i>PDE</i> (X, C <sub>a</sub> , T <sub>a</sub> , T <sub>s</sub> )
	Tipo de e	studio	Dependiente del tiempo
	Sistema	de unidades	Ninguno
	Geometri	a del sistema	Cuadrado unitario
	Parámet	os globales	Los mostrados en el Anexo A y los números adimensionales de las ecuaciones.
	Variables		Cinética adimensional de consumo de sustrato (S), factores $\alpha_T$ y $\alpha_2$
Estructuración del caso		Coeficientes	d <sub>a</sub> y f
de estudio	Módulo X	Condiciones de frontera	4 condiciones Zero flux
		Condición inicial	1
		Coeficientes	d <sub>a</sub> , c <sub>zz</sub> , y f
	Módulo	Condiciones	3 condiciones Zero flux
	C <sub>a</sub>	de frontera	1 condición Dirichlet ( $\overline{z} = 0$ )
		Condición inicial	1
		Coeficientes	$d_a, c_{rr}, c_{zz}, \beta_r, \beta_z, a y f$

	Módulo	Condiciones de frontera	1 condición Zero flux ( $\bar{r} = 0$ ) 3 condiciones Flux/Source
	la	Condición inicial	1
	Módulo T <sub>s</sub>	Coeficientes	$d_a$ , $c_{rr}$ , $c_{zz}$ , $\beta_r$ , a y f
		Condiciones de frontera	1 condición Zero flux ( $\bar{r} = 0$ )
			1 condición Dirichlet ( $\overline{z} = 0$ )
			2 condiciones Flux/Source
		Condición inicial	1
	Mallado del sistema		Normal
	Perfiles adimensionales $T_s$ y $C_a$		3 puntos de prueba:
Análisis del caso de			• $\bar{z} = 0.1, \bar{r} = 0.5$
estudio			• $\bar{z} = 0.5, \bar{r} = 0.5$ • $\bar{z} = 0.9, \bar{r} = 0.5$

# 6.1.4 Análisis dimensional de las ecuaciones del modelo base

Para concluir con la valoración del modelo base se efectuó el análisis dimensional de las Ecuaciones 25-31 para resolver ambigüedades evidentes en la descripción del modelo; especialmente respecto al volumen de referencia de las concentraciones de microorganismos, sustrato y oxígeno. En este sentido, se definió como volumen de referencia al de la fase donde la variable de interés era válida (fase gas o fase sólido-líquido).

# 6.2 Desarrollo del modelo de composteo propuesto

## 6.2.1 Modificaciones del modelo base

Una vez realizada la valoración del modelo base se establecieron diversas modificaciones al mismo. En primera instancia se estableció la constante de proporcionalidad de la ley de Henry como una función de la temperatura y la concentración en la fase gas; de acuerdo con la metodología de Sander, (2015).

Adicionalmente, se analizó la pertinencia de incluir la dispersión radial para la transferencia de oxígeno en la fase gas mediante la estimación del coeficiente de dispersión radial; de acuerdo con la metodología de Delgado, (2006).

# 6.2.2 Adición de las variaciones de la concentración de agua en las fases gas y sólido-líquido

Se incluyeron las ecuaciones para la descripción de la transferencia de vapor de agua en la fase gas y de agua líquida en la fase sólido-líquido; considerando también la producción de agua por consumo de sustrato y la energía consumida por el cambio de fase. Así mismo, se desarrolló el efecto de la humedad de la fase sólidolíquido en la velocidad de crecimiento celular con base en lo establecido por Kuwahara et al. (2009).

El modelo de composteo propuesto se resolvió en COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> para analizar el comportamiento global del sistema y el efecto de la velocidad intersticial del gas. Las especificaciones de la solución se muestran la Tabla 12.

Tabla 12. Lineamientos para la solución del modelo de composteo propuesto en COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>.

Etapa	Categoría	Especificación
	Dimensión espacial del sistema	2D
del caso de estudio	Módulos físicos	6 Módulos <i>Coefficient form</i> <i>PDE</i> (X, C <sub>a</sub> , T <sub>a</sub> , T <sub>s</sub> , w <sub>a</sub> , w <sub>s</sub> )
	Tipo de estudio	Dependiente del tiempo
	Sistema de unidades	Ninguno
Estructuración dol caso	Geometría del sistema	Cuadrado unitario
de estudio	Parámetros globales	Los mostrados en el Anexo B y los números adimensionales de las ecuaciones.

	Variables		Cinética adimensional de consumo de sustrato (S), factores $\alpha_T$ , $\alpha_2$ y $\alpha_w$
		Coeficientes	d <sub>a</sub> y f
	Módulo X	Condiciones de frontera	4 condiciones Zero flux
		Condición inicial	1
		Coeficientes	$d_a,c_{rr},c_{zz},\beta_r,\beta_z\;y\;f$
	Módulo	Condiciones	3 condiciones Zero flux
	C <sub>a</sub>	de frontera	1 condición Dirichlet ( $\overline{z} = 0$ )
		Condición inicial	1
	Módulo T <sub>a</sub>	Coeficientes	$d_a$ , $c_{rr}$ , $c_{zz}$ , $\beta_r$ , $\beta_z$ , a y f
		Condiciones de frontera	1 condición Zero flux ( $\bar{r} = 0$ )
			3 condiciones Flux/Source
		Condición inicial	1
		Coeficientes	$d_a$ , $c_{rr}$ , $c_{zz}$ , $\beta_r$ , a y f
		Condiaianaa	1 condición Zero flux ( $\bar{r} = 0$ )
	Módulo _	de frontera	1 condición Dirichlet ( $\bar{z} = 0$ )
	T <sub>s</sub>		2 condiciones Flux/Source
		Condición inicial	1
		Coeficientes	$d_a, c_{rr}, c_{zz}, \beta_r, \beta_z, a y f$
	Módulo	Condiciones	3 condiciones Zero flux
	w <sub>a</sub>	de trontera	1 condición Dirichlet ( $\overline{z} = 0$ )
		Condición inicial	1

		Coeficientes	d <sub>a</sub> y f
	Módulo w <sub>s</sub>	Condiciones de frontera	4 condiciones Zero flux
		Condición inicial	1
	Mallado c	lel sistema	Normal
	Gráfica d	e superficie 2D	Comportamiento de cada variable de interés en el sistema mediante una escala de colores.
Análisis del caso de estudio	Gráficas globales		Comportamiento global de los perfiles de temperatura, oxígeno y concentraciones de agua para distintas velocidades intersticiales del gas.

# 6.3 Análisis del modelo de composteo propuesto

## 6.3.1 Análisis de sensibilidad

Se realizó un análisis de sensibilidad a las variaciones en la velocidad de crecimiento máxima de los microorganismos ( $\mu_m$ ), los rendimientos  $Y_{O/S}$  y  $Y_{S/X}$ , así como la concentración inicial de agua en la fase sólido-líquido ( $w_{S0}$ ); cuatro parámetros importantes de acuerdo con un análisis preliminar. Los rangos analizados se muestran en la Tabla 13.

Parámetro	Valor mínimo	Valor máximo
$\mu_m\left(\frac{1}{s}\right)$	$3.89 \times 10^{-5}$	$1.0 \times 10^{-4}$
$Y_{O/S}\left(\frac{\text{kg }O_2}{\text{kg }S}\right)$	1.5	3.0
$Y_{S/X}\left(\frac{\text{kg S}}{\text{kg X}}\right)$	1.0	2.5
T <sub>amb</sub> (K)	278.15	303.15
$w_{S0}\left(\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}\right)$	69	480

Tabla 13. Parámetros del análisis de sensibilidad del modelo de composteo propuesto.

# 6.3.2 Análisis de diseño

Se desarrolló un análisis de diseño variando las dimensiones del reactor (i.e., longitud y radio) para un mismo volumen total del sistema (0.137 m<sup>3</sup>). Se analizaron tres casos: i) Condición original ii) Reducción del radio del reactor a la mitad y iii) Ampliación del radio del reactor al doble. La Tabla 14 señala las especificaciones para cada caso de estudio.

Caso de estudio	Radio (m)	Longitud (m)
1	0.127	2.7
2	0.0635	10.8
3	0.254	0.675

Tabla 14. Especificaciones de los casos para el análisis de diseño.

Para cada caso de estudio se evaluó el efecto de modificar la velocidad intersticial del aire (v<sub>i</sub>), la fracción másica de agua en la fase sólido-líquido (fmw) y el coeficiente global de transferencia de transferencia de energía en dirección radial (U), el cual es gobernado por la resistencia del aislante colocado al reactor.

La fracción másica de agua en la fase sólido-líquido se varió mediante la modificación de la concentración inicial de agua en dicha fase ( $w_{s0}$ ) y la relación inicial biomasa-sustrato  $\binom{X_0}{S_0}$  como señalan las Tablas 15 y 16.

$fmw\left(\frac{kgH_2O}{kg_{sol-liq}}\right)$	$w_{s0}  \left( rac{\mathrm{kg}\mathrm{H}_2\mathrm{O}}{\mathrm{m}_{\mathrm{sol-liq}}^3}  ight)$
0.45	169.0
0.55	252.0
0.64	361.25

Tabla 15. Variación de fmw a través del cambio de  $w_{s0}$ .

Tabla 16. Variación de fmw a través de la modificación de la relación  $X_0/S_0$ 

$fmw\left(\frac{kg H_2 O}{kg_{sol-liq}}\right)$	$X_0\left(rac{\mathrm{kg}X}{\mathrm{m}^3_{\mathrm{sol-liq}}} ight)$	$S_0\left(rac{\mathrm{kg}\mathrm{S}}{\mathrm{m}^3_{\mathrm{sol-liq}}} ight)$	$X_0/S_0\left(\frac{\log X}{\log S}\right)$
0.45	40	400	0.10
0.55	15	280	0.054
0.64	8	198	0.040

Para evaluar el efecto del coeficiente global de transferencia de energía en dirección radial (U) se varió el valor propuesto en el modelo base  $(i. e., 2.4 \frac{W}{m^2 K})$  al reducirlo por la mitad y duplicarlo.

Los resultados de cada valoración consistieron en los perfiles promedio de temperatura y concentración de agua en la fase sólido-líquido, la concentración de oxígeno en la fase gas y la variación del índice logarítmico de decaimiento para la reducción de un patógeno modelo como *Salmonella*. Para esta última determinación se empleó la Ecuación 98 propuesta por Vidriales-Escobar et al. (2017), donde n

representa la población viable del patógeno,  $k_{0s}$  la constante de decaimiento y  $E_{as}$  la energía de inactivación de *Salmonella*.

$$\log_{10}\left(\frac{n}{n_0}\right) = -\frac{1}{2.303} \int_0^t k_{0s} \exp\left(-\frac{E_{as}}{R T_s}\right)$$
(98)

De acuerdo con los autores del modelo base  $k_{0s} = 5.058 \times 10^{68} h^{-1}$  y  $E_{as} = 430115 \frac{J}{mol}$ . Gea et al. (2007) proponen que valores inferiores a -10 propician un nivel apropiado de sanitización del sistema de composteo ya que equivale a una reducción de al menos  $10^{10}$  veces en la concentración de *Salmonella*.

# 7. Resultados y Discusión

## 7.1 Resultados de la valoración del modelo base

Durante el análisis de las ecuaciones adimensionales del modelo base se identificó una inconsistencia en una de las constantes de la descripción de la temperatura adimensional en la fase sólido-líquido (Ecuación 59). Así mismo, al analizar los números adimensionales en el código original del modelo base en MATLAB<sup>®</sup> se detectaron dos anomalías adicionales relacionadas con la cinética de crecimiento microbiano adimensional y la transferencia de oxígeno adimensional en la fase gas (Ecuaciones 55 y 57, respectivamente). En la Tabla 17 se señalan las inconsistencias mencionadas.

Código original	Ecuación renderizada	Ecuación correcta	Variable adimensional directamente afectada
g = Ysx*Hrx*S0/rhosl/cpsl/Tamb;	$g = \frac{Y_{S/X} H_{rxn} S_0}{\rho_{sl} C_{psl} T_{amb}}$	$g = \frac{Y_{S/X} H_{rxn} X_0}{\rho_{sl} C_{psl} T_{amb}}$	$\overline{T_s}$
f = Yos*Ysx*X0/epsa;	$f = \frac{Y_{O/S} Y_{S/X} X_0}{\epsilon_a}$	$f = \frac{Y_{O/S} Y_{S/X} X_0}{C_{a0} \varepsilon_a}$	$\overline{C_a}$
d = Kc*X0/S0/Ca0;	$d = \frac{X_0}{S_0 C_{a0}} K_c$	$d = \frac{X_0}{S_0} K_c$	X

Tabla 17. Inconsistencias identificadas en el código original del modelo base y su corrección.

Puesto que todas las ecuaciones del modelo base se encuentran interrelacionadas era razonable suponer que la corrección de las constantes señaladas en la Tabla 17 modificaría la descripción del proceso de composteo. Esto fue vidente al comparar los perfiles adimensionales de temperatura en la fase sólido-líquido ( $\overline{T_s}$ ) y la concentración de oxígeno en la fase gas ( $\overline{C_a}$ ) en tres nodos del biorreactor obtenidos en MATLAB®, como lo señala la Tabla 18. La simulación se realizó para un tiempo

total de 120 horas (i.e.,  $\bar{t} = 640$ ) de acuerdo con los parámetros indicados en el Anexo A.

Tabla 18. Comparación de los perfiles adimensionales de temperatura en la fase sólido-líquido (línea sólida azul) y de concentración de oxígeno en la fase gas (línea verde discontinua) obtenidos con los códigos original y modificado del modelo base en MATLAB<sup>®</sup>.



De acuerdo con la Tabla 18 la descripción del proceso de composteo fue más coherente tras la modificación de las inconsistencias del código original. Con ambos códigos la temperatura del sistema aumentó paulatinamente al inicio del proceso como resultado de la actividad metabólica de los microorganismos. Sin embargo, con el código original la concentración adimensional de oxígeno en la fase gas fue insensible a los cambios de temperatura a lo largo de la simulación. Esto no fue así con el código modificado donde claramente el consumo de oxígeno en la fase gas mostró un acoplamiento cualitativamente simétrico con la variación de la temperatura durante la simulación ya que el oxígeno de la fase gas se transfiere a la fase sólido-líquido para incorporarse al proceso metabólico de los microorganismos. Por lo anterior, es razonable que al alcanzarse la temperatura máxima del sistema la concentración de oxígeno alcance su valor mínimo debido a su alta demanda. Además, conforme la actividad metabólica mengua, la temperatura del sistema decreció y la concentración de oxígeno en fase gas tendió a su valor original ya que el ingreso de aire al reactor es constante.

Cabe señalar que el nodo inferior se encuentra muy cerca de la entrada constante de aire, el cual ingresa a temperatura ambiente; por lo que es comprensible que el gradiente de intercambio de energía entre fases propicie que esta región muestre un aumento no considerable de la temperatura y una concentración de oxígeno prácticamente constante.

En relación con la solución del modelo base corregido en COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> se empleó el mallado normal ya que con los subtipos de mallado grueso los perfiles de concentración adimensional en el centro del reactor presentaron distintas perturbaciones al inicio y final de la simulación. Por otra parte, los perfiles obtenidos con los subtipos de mallado fino fueron homogéneos, pero el tiempo de solución aumentó notoriamente con respecto al mallado normal (Tabla 19).

Mallado		Tiempo de solución (s)	Perfiles adimensionales en el centro del reactor
Extremadamente grueso		7	1.20 1.15 1.05 1.05 0.90 0.95 0.90 0.95 0.90 0.95 0.90 0.95 0.90 0.95 0.90 0.95 0.90 0.95 0.90 0.95 0.90 0.95 0.90 0.95 0.90 0.95 0.95 0.90 0.95
Extra grueso		9	1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15 1.10 1.15
Más grueso		9	1.20 1.15 1.00 1.05 0.90 0.85 0.80 0.75 0.80 160 240 320 40 480 560 640 Tiempo adimensional
Grueso		9	120 1.15 1.05 1.05 1.00 1.05 0.990 0.95 0.900 0.85 0.80 0.75 0.80 1.60 240 320 400 480 560 640 Tiempo adimensional

Tabla 19. Análisis del mallado para la solución del modelo base en COMSOL Multiphysics®.

Normal	11	120 1.15 1.10 1.05 1.05 1.05 0.99 0.95 0.80 0.75 0.80 160 240 320 400 480 560 640 Tiempo adimensional
Fino	13	1.20 1.15 1.00 1.05 0.80 0.75 0.80 160 240 320 400 480 560 640 Tiempo adimensional
Más fino	19	120 1.15 1.05 1.05 1.05 1.05 0.95 0.95 0.95 0.80 0.60 0.80 160 240 320 400 480 560 640 Tiempo adimensional
Extra fino	57	1.20 1.15 1.00 1.05 0.90 0.95 0.80 0.80 1.60 240 320 400 480 560 640 Tiempo adimensional
Extremadamente fino	228	1.20 1.15 1.00 1.05 0.80 0.75 0.80 1.60 2.40 3.20 4.00 4.80 5.60 6.40 Tiempo adimensional

Finalmente, al comparar las simulaciones del modelo base corregido en MATLAB<sup>®</sup> y COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> se observó que los perfiles adimensionales eran totalmente consistentes en los nodos inferior y central con ambos programas. En el caso del nodo superior existió una ligera variación en el perfil de temperatura adimensional que se atribuyó a la estrategia de solución en las zonas cercanas a las fronteras del sistema por el método de elemento finito (Tabla 20). No obstante, se consideró que la solución en este último programa era equivalente a la obtenida en MATLAB<sup>®</sup>. Por lo anterior y debido a las facilidades operacionales se optó por continuar con COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> para los estudios posteriores.

Tabla 20. Comparación de la solución del modelo base en MATLAB<sup>®</sup> y COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>.





Finalmente, al realizar un análisis dimensional de las ecuaciones del modelo base se identificó una ambigüedad con relación al volumen de referencia en las concentraciones másicas de microorganismos y sustrato. Además, la concentración de oxígeno en la fase gas del modelo base se expresa en fracción másica, lo que conllevaba a una inconsistencia dimensional al emplear la ley de Henry. Por lo anterior, se estableció la referencia volumétrica de las concentraciones de microorganismos, sustrato y oxígeno respecto a la fase donde dichas variables son válidas (gas o sólidolíquido). Este análisis condujo a la modificación de las ecuaciones de transferencia de oxígeno en la fase gas y la descripción de la temperatura en la fase sólido-líquido.

## 7.2 Desarrollo del modelo de composteo propuesto.

Además de la aclaración de las referencias volumétricas, el modelo de composteo propuesto desarrollado presenta variaciones con relación a la transferencia de oxígeno en la fase sólido-líquido mediante la ley de Henry, la transferencia de oxígeno en la fase y la cinética de crecimiento celular del modelo base. Así mismo, este modelo contempla la transferencia de agua en las fases gas y sólido-líquido (Tabla 21).

Tabla 21. Principales diferencias entre el modelo base y el modelo de composteo propuesto.

Descripción	Modelo base	Modelo de composteo
Transferencia de oxígeno en la fase sólido-líquido	La constante de proporcionalidad de la ley de Henry es un valor promedio.	La constante de proporcionalidad de la ley de Henry es función de la temperatura y las concentraciones de oxígeno y vapor de agua en la fase gas.
Transferencia de oxígeno en la fase gas	Supone que la dispersión sólo es relevante en la dirección axial.	Considera la dispersión en dirección radial y axial.
Transferencia de vapor de agua en la fase gas	No la describe.	La describe de forma similar al oxígeno en la fase gas.
Transferencia de agua en la fase sólido-líquido	No la describe.	La describe considerando la generación de agua por actividad metabólica.
Cinética de crecimiento celular	La velocidad de crecimiento microbiano es función de la temperatura en la fase sólido-líquido.	La velocidad de crecimiento microbiano es función de la temperatura y la concentración de agua en la fase sólido-líquido.

De acuerdo con las correlaciones propuestas por Delgado, (2006) los coeficientes dispersivos radial y axial para el oxígeno son del mismo orden de magnitud para un tamaño promedio de partícula inerte de 2 cm de diámetro (Vidriales-Escobar et al., 2017). Además, puesto que los coeficientes difusivos no difieren considerablemente entre gases se empleó el mismo valor propuesto en el modelo base para cada coeficiente dispersivo del modelo (i.e., los coeficientes dispersivos son un orden de magnitud menor que el coeficiente difusivo molecular para el oxígeno).

Para expresar la dependencia de la velocidad de crecimiento microbiano con la humedad del sistema se empleó el factor  $\alpha_w$  cuya definición fue realizada por Kuwahara et al. (2009). De acuerdo con datos experimentales presentados por Haug, (1993) se definieron las humedades críticas del sistema de composteo como  $w_{c1} = 0.2 \frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}, w_{\text{opt}} = 0.6 \frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}} \text{y} w_{c2} = 0.7 \frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}.$ 

La Figura 15 muestra el comportamiento global del sistema de composteo en coordenadas adimensionales de acuerdo con los parámetros del Anexo B. En dicha simulación se asumieron las concentraciones iniciales de microorganismos y sustrato de tal forma que  $X_0 = 4.04\%$  S<sub>0</sub>. Además, la humedad inicial en la fase sólido-líquido corresponde al valor teórico reportado por Rentería-Tamayo et al. (2018)  $\left(i. e., 361.25 \frac{\text{kg H}_20}{\text{m}_{\text{sol-ling}}^2}\right)$ .

De acuerdo con la Figura 15 el modelo de composteo propuesto mostró una relación coherente entre las distintas variables analizadas. Al inicio del proceso la temperatura de la fase sólido-líquido ( $T_s$ ) incrementa en el sistema debido a la actividad metabólica de los microorganismos, quienes consumen el sustrato (S) y oxígeno ( $C_a$ ) para reproducirse. Al mismo tiempo la humedad en la fase sólido-líquido cambia de acuerdo con la variación de la concentración de microorganismos; incluso permanece prácticamente constante en la mayor parte del sistema debido a un equilibrio entre la producción de agua y el intercambio con la fase gas.

Así mismo, la Figura 15 señala que el aire a temperatura ambiente que ingresa al sistema ( $\overline{z} = 0$ ) conlleva a un enfriamiento en la región inmediata y los microorganismos no se logran reproducir. En la misma zona el aire produce una disminución de la humedad en la fase sólido-líquido, la cual se exacerba por el aumento de la temperatura en las regiones más internas del sistema.



Figura 15. Comportamiento general del sistema de composteo en coordenadas adimensionales descrito mediante el modelo de composteo propuesto.
Las Figuras 16 y 17 muestran los perfiles promedio de algunas variables del modelo de composteo propuesto a distintas velocidades intersticiales del gas. Los perfiles para  $v_i = 4x10^{-3} \frac{m}{s}$  representan los valores globales del sistema de composteo simulados de acuerdo con las condiciones del Anexo B. Así, de acuerdo con la Figura 16 cuando el aire ingresa a una velocidad intersticial superior  $(e.g., 1 \times 10^{-2} \frac{m}{s})$  el sistema se enfría y el oxígeno es poco consumido por los microorganismos ya que el tiempo de residencia de este nutriente en el biorreactor es bajo. Sin embargo, si la temperatura no decrece significativamente los microorganismos pueden encontrar condiciones favorables para su reproducción y mantener la humedad de la fase sólido-líquido (Figura 17).



Figura 16. Perfiles de temperatura (a) y consumo de oxígeno promedio (b) en el sistema de composteo para distintas velocidades intersticiales del gas.

Por otra parte, la Figura 16 señala que si el aire ingresa al sistema a una velocidad inferior  $(e.g., 4 \times 10^{-4} \frac{m}{s})$  el oxígeno se consume rápidamente ya que su mayor tiempo de residencia lo vuelve altamente disponible para los microorganismos; sin embargo, cada vez habrá menos oxígeno disponible al interior del reactor. Esto propicia que la temperatura del sistema disminuya considerablemente y se mantenga

constante durante prácticamente 100 horas simuladas. Lo anterior ocasiona que los microorganismos se reproduzcan en menor cantidad y la humedad de la fase sólidolíquido decaiga (Figura 17).



Figura 17. Perfiles de concentración promedio de agua en la fase sólido-líquido (a) y vapor en el sistema de composteo (b) para distintas velocidades intersticiales del gas.

Finalmente, la Figura 18 muestra la comparación de los perfiles predichos de temperatura, concentración de oxígeno y de la fracción másica de agua en la fase sólido-líquido con los datos experimentales obtenidos por Haibin et al. (2014) para un proceso de composteo en pilas estáticas aireadas mecánicamente. El modelo propuesto representa adecuadamente el comportamiento general de la temperatura en sistemas de composteo distintos (Figura 18a). Por su parte, la predicción del consumo de oxígeno coincide con el comportamiento general de los datos experimentales ya que el mayor consumo de oxígeno ocurre en las primeras horas del proceso (Figura 18b) en las que se presenta un mayor incremento de la temperatura.

Los sistemas de composteo suelen secarse conforme transcurre el proceso, como señalan los datos experimentales y la predicción obtenida por el modelo propuesto (Figura 18c). No obstante, en ocasiones la concentración de agua en el sistema de composteo suele aumentar en las primeras 100 horas del proceso debido a una mayor actividad biológica (Wang et al., 2015); aunque ello depende en gran medida de las condiciones operacionales del sistema de composteo.



Figura 18. Comparación de las estimaciones de los perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b) y fracción másica de agua (c) con los valores experimentales reportados por Haibin et al. (2014).

## 7.3 Análisis del modelo de composteo propuesto

#### 7.3.1 Análisis de sensibilidad del modelo propuesto

Las Figuras 19 a 23 muestran los perfiles de temperatura y concentración de agua en la fase sólido-líquido, así como la concentración de oxígeno en la fase gas como resultados del análisis de sensibilidad. Los perfiles de temperatura y oxígeno corresponden a los resultados de las simulaciones para el punto central del reactor y se comparan con los datos obtenidos experimentalmente por Rentería-Tamayo et al. (2018) en el mismo punto geométrico del sistema de composteo. Por otra parte, el perfil de concentración de agua corresponde al comportamiento promedio en el reactor.

De acuerdo con la Figura 19 cuanto mayor es la velocidad específica de crecimiento microbiano ( $\mu_m$ ), la pendiente del aumento inicial de la temperatura en la fase sólido-líquido incrementa considerablemente ya que los microorganismos no solo se reproducen más rápido, sino que consumen mayor cantidad de sustrato y oxígeno (Figura 19b). Este súbito aumento de la temperatura conlleva al secado del sistema (Figura 19c).

De acuerdo con el análisis y la comparación con los datos experimentales el valor de la velocidad específica de crecimiento en el orden de  $10^{-5} \frac{m}{s}$  es un valor apropiado para simular el proceso de composteo bajo las condiciones señaladas en el Anexo B. Si dicha velocidad se incrementa en el orden de  $10^{-4} \frac{m}{s}$  la temperatura y el consumo de sustrato aumentarían instantánea y desmedidamente; secando aún más el reactor y aumentando con ello el riesgo de incendio involuntario en la práctica.



Figura 19. Análisis de sensibilidad del modelo de composteo propuesto para distintos valores de la velocidad específica de crecimiento de los microorganismos

De manera similar a lo señalado en la Figura 19, el modelo propuesto también es altamente sensible a la variación del rendimiento sustrato-biomasa ( $Y_{S/X}$ ) como señala la Figura 20. Los efectos observados son similares a los de la variación de  $\mu_m$ ; sin embargo, el aumento de la temperatura, el consumo de oxígeno y el secado del sistema se debe a un incremento de consumo de sustrato (y por ende de oxígeno) por cada microorganismo en el sistema.



Figura 20. Análisis de sensibilidad del modelo de composteo propuesto para distintos valores de rendimiento sustrato-biomasa.

A diferencia de lo observado con el rendimiento  $Y_{S/X}$ , la Figura 21 señala que la variación del rendimiento oxígeno-sustrato  $(Y_{O/S})$  no presenta un efecto significativo en los perfiles de temperatura ni concentración de agua (Figuras 21a y 21c); algo que sí ocurre en el perfil de concentración de oxígeno (Figura 21b) donde cuanto mayor es este rendimiento, más pronunciado es el consumo. Lo anterior es coherente ya que un aumento del rendimiento  $Y_{O/S}$  implica una mayor demanda de oxígeno para metabolizar una cantidad dada de sustrato, lo que no debería alterar drásticamente el desarrollo de la temperatura en el sistema ni la cantidad de agua en él. Finalmente, el



comportamiento de los perfiles de la Figura 21b señala que tras el máximo consumo oxígeno; éste tiende a su valor inicial conforme la temperatura disminuye.

Figura 21. Análisis de sensibilidad del modelo de composteo propuesto para distintos valores de rendimiento oxígeno-sustrato.

La Figura 22 muestra que existe una relación inversa entre la temperatura ambiente y el tiempo que los microorganismos requieren para reproducirse. Conforme la temperatura ambiente tiende a 25°C (298.15 K) los microorganismos encuentran condiciones más favorables para su crecimiento y para la degradación de la materia orgánica del medio. Es importante destacar que si la temperatura ambiente es superior a los 25°C los microorganismos comienzan a desarrollarse en las primeras horas del

proceso; sin embargo, el secado de la fase sólido-líquido se exacerba y limita ligeramente el desarrollo de los microorganismos.



Figura 22. Análisis de sensibilidad del modelo de composteo propuesto para distintos valores de temperatura ambiente.

Finalmente, la variación de la concentración inicial de agua en la fase sólidolíquido conlleva a la modificación de la fracción másica inicial de agua en dicha fase  $(fmw_0)$ . La Tabla 22 señala las equivalencias entre ambos parámetros de acuerdo con las concentraciones iniciales de sustrato y microorganismos del Anexo B. Además, con la finalidad de mejorar el análisis de la variación de la concentración de agua en la fase sólido-líquido la Figura 23 contempla la variación de dicha concentración en términos adimensionales.

Concentración inicial de agua en la	Fracción másica inicial de agua en
fase sólido-líquido, $ws_0 \left(\frac{kg H_2 O}{m_{sol-liq}^3}\right)$	la fase sólido-líquido, fmw <sub>0</sub> $\left(\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}\right)$
480	0.70
361.25	0.64
252	0.55
180	0.47
69	0.25

Tabla 22. Equivalencias de concentración y fracción iniciales de agua en la fase sólidolíquido.

En el Anexo B se señala que las humedades críticas del modelo de composteo propuesto son  $w_{c1} = 0.2 \frac{kg H_2 O}{kg_{sol-liq}}$ ,  $w_{opt} = 0.6 \frac{kg H_2 O}{kg_{sol-liq}}$  y  $w_{c2} = 0.7 \frac{kg H_2 O}{kg_{sol-liq}}$ . Es decir, los microorganismos no pueden crecer si la fracción másica de agua en la fase sólido-líquido (fmw) es inferior a 0.2 o superior a 0.7; mientras que un valor de 0.6 es óptimo para su desarrollo.

Considerando lo anterior y de acuerdo con la Figura 23 el modelo de composteo propuesto es altamente sensible a la variación de la concentración inicial de agua en la fase sólido líquido. Si  $\text{fmw}_0 \cong \text{w}_{c1}$ las restricciones en la transferencia de masa conllevan a que los microorganismos apenas sean capaces de consumir el sustrato y oxígeno (nutrientes solubles en el medio) y el sistema pierda casi el 40% del agua en la fase sólido-líquido como consecuencia del leve aumento de la temperatura y el ingreso de aire.

Por otra parte, conforme  $fmw_0 \rightarrow w_{opt}$  la temperatura del sistema aumenta abruptamente en las primeras horas del proceso ya que las condiciones de humedad son propicias para que los microorganismos consuman los nutrientes sin restricción de transferencia alguna. El aumento de la temperatura en el sistema conduce a un secado de este; sin embargo, el proceso conlleva a una disminución cercana al 20% de agua ya que su generación por parte de los microorganismos compensa la pérdida por evaporación.

Si  $fmw_0$  es superior a  $w_{opt}$  los microorganismos consumen menor cantidad de sustrato y oxígeno y no se replican tanto en comparación con la condición anterior. Para las condiciones del Anexo B esta condición favorece la representación de los datos experimentales.

Finalmente, si en la práctica  $fmw_0 = w_{c2}$  la disminución de la porosidad y la presión osmótica conllevan a que los microorganismos no sean capaces de crecer, el sistema de composteo se enfría y se seca ligeramente debido al ingreso de aire.



Figura 23. Análisis de sensibilidad del modelo de composteo propuesto para distintos valores de la fracción másica inicial de agua en la fase sólido-líquido como resultado de la variación de  $ws_0$ .

### 7.3.2 Estudio de diseño del modelo propuesto

### 7.3.2.1 Caso 1: Sistema de composteo original

Las Figuras 24 a 27 muestran los estudios de diseño para el sistema composteo original señalado en el Anexo B.

De acuerdo con la Figura 24b, el oxígeno será consumido por los microorganismos más próximos a la zona de ingreso del aire conforme aumenta el tiempo de residencia del gas a velocidades bajas (i.e., velocidades intersticiales del

orden 10<sup>-4</sup> m s<sup>-1</sup>); por lo que el oxígeno disponible al interior del reactor será limitado. Lo anterior conduce a un bajo desarrollo de la temperatura en el sistema (Figura 24a) y que la fase sólido-líquido se seque gradualmente (Figura 24c) como resultado del aire que ingresa, la temperatura y la poca generación de agua por parte de los microorganismos. Estas condiciones no propician la disminución considerable de un microorganismo patógeno como *Salmonella* (Figura 24d).

A velocidades intersticiales del orden  $10^{-2} \frac{m}{s}$  el sistema se enfría en comparación con lo ocurrido a  $10^{-3} \frac{m}{s}$ . Sin embargo, estas dos últimas condiciones permiten que los microorganismos se reproduzcan y mitiguen el secado de la fase sólido-líquido. Pese a que la temperatura del sistema es superior a los 55°C durante más de 50 horas de simulación, la concentración de *Salmonella* apenas se reduce 10 veces para velocidades de  $10^{-2} \frac{m}{s}$  y poco más de 100 veces para el caso de  $10^{-3} \frac{m}{s}$  (Figura 24d); disminuciones por debajo del  $10^{10}$  señalado por Gea et al. (2007) para garantizar un saneamiento adecuado del sistema de composteo.



Figura 24. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintas velocidades intersticiales en el caso 1 del estudio de diseño.

De acuerdo con la Figura 25a cuando la fracción másica de agua inicial de la fase sólido-líquido se modifica debido al cambio en la concentración inicial de agua en dicha fase, la temperatura promedio del sistema de composteo incrementa conforme  $fmw_0 \rightarrow w_{opt}$  y disminuye al sobrepasar este parámetro. Cuanto más favorable sea la concentración de agua en la fase sólido-líquido los microorganismos consumen más oxígeno (Figura 25b). El sistema se secará en mayor medida conforme la pendiente inicial de incremento de la temperatura sea mayor (Figura 25c) y la generación de agua por actividad metabólica no mitigue el proceso.

Así mismo, de acuerdo con la Figura 25d conforme  $\text{fmw}_0 \rightarrow \text{w}_{opt}$  la reducción de *Salmonella* es adecuada e incluso excede el valor mínimo propuesto por Gea et al. (2007). Para ello se requieren temperaturas superiores a los 60°C en el sistema de composteo.



Figura 25. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintos valores de fracción másica de agua tras modificar la concentración de agua inicial en el caso 1 del estudio de diseño.

Cuando la variación de la fracción másica de agua en la fase sólido líquido se debe a la modificación de la relación de biomasa y sustrato iniciales  $\binom{X_0}{S_0}$  los perfiles

promedio de temperatura (Figura 26a) son similares a los obtenidos con la variación de  $w_{s0}$  de la Figura 25a salvo por un incremento en la pendiente durante las primeras horas del proceso cuando  $fmw_0 \rightarrow w_{opt}$ . Lo anterior es resultado de una mayor concentración inicial de microorganismos, lo que incrementa el consumo de oxígeno (Figura 26b) y disminuye la cantidad de agua acumulada en la fase sólido-líquido (Figura 26c). Resulta interesante que dicha concentración de agua disminuye en menor cantidad a lo señalado en la Figura 25c debido a que la mayor cantidad de agua generada por la actividad metabólica de los microorganismos mitiga el proceso de secado.

Por otra parte, de acuerdo con la Figura 26d cuando  $\operatorname{fmw}_0 \to \operatorname{w}_{opt}$  mediante la modificación de la relación  $X_0/S_0$  el saneamiento del sistema de composteo aumenta respecto al caso anterior y resulta adecuado para prácticamente todo el tiempo de simulación.



Figura 26. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintos valores de fracción másica de agua tras modificar la relación de biomasa y sustrato iniciales en el caso 1 del estudio de diseño.

Finalmente, una modificación del aislamiento del reactor supone variar el coeficiente global de transferencia de calor en dirección radial (U). Así, si la pérdida de calor radial es la mitad del valor original indicado en el Anexo B (i.e.,  $1.2 \frac{W}{m^2 K}$ ) la temperatura promedio del sistema de composteo se mantiene por encima de 60°C durante la mayor parte del tiempo de simulación (Figura 27a), lo que conlleva no solo a un mayor consumo de oxígeno (Figura 27b) por parte de los microorganismos y a un mayor secado del sistema (Figura 27c); sino también a una mayor reducción del

microorganismo patógeno *Salmonella* (Figura 27d). A pesar de que el grado de sanitización del sistema supera la reducción de  $10^{10}$  durante poco más del 60% del tiempo simulado, el efecto es menor al conseguido con la variación de fmw<sub>0</sub>.



Figura 27. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintos coeficientes globales de transferencia de calor en dirección radial en el caso 1 del estudio de diseño.

### 7.3.2.2 Caso 2: Reducción del radio del sistema de composteo

Las Figuras 28 a 31 corresponden al caso 2 del estudio de diseño donde el radio del reactor se reduce a la mitad y su longitud se cuadruplica respecto a las condiciones originales indicadas en el Anexo B. Bajo estas condiciones el perfil de temperatura en la fase sólido-líquido disminuye considerablemente respecto a las condiciones originales ya que para un flujo constante de aire la velocidad promedio del gas aumenta conforme el diámetro disminuye; lo que conlleva al enfriamiento del sistema.

La Figura 28b señala un mayor consumo de oxígeno conforme aumenta el tiempo de residencia del gas a velocidades bajas. Lo anterior, aunado al secado generado por el aumento en la velocidad promedio tras disminuir el radio del reactor (Figura 28c); conduce a un bajo desarrollo de la temperatura en el sistema de composteo (Figura 28a). Al aumentar la velocidad intersticial del gas el tiempo de residencia del oxígeno disminuye y más microorganismos al interior del reactor pueden consumirlo, lo que incrementa la temperatura promedio del sistema. Sin embargo, esta apenas supera los 30°C por lo que prácticamente no hay una disminución de la población de *Salmonella* (Figura 28d).



Figura 28. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintas velocidades intersticiales del caso 2 del estudio de diseño.

De acuerdo con las Figuras 29a y 29b el comportamiento de la temperatura y el consumo de oxígeno cuando la fracción másica de agua inicial de la fase sólido-líquido se modifica, debido al cambio en la concentración inicial de agua en dicha fase, es similar al observado para el caso de diseño 1. Resulta interesante que el sistema aumenta ligeramente su concentración de agua conforme fmw<sub>0</sub>  $\rightarrow$  w<sub>opt</sub> (Figura 29c) lo que sugiere que la generación de agua por actividad metabólica de los microorganismos es mayor a la cantidad de agua evaporada ya que una disminución

en el radio del sistema reduce también el área de transferencia de calor con el aire ambiental. Por otra parte, aunque el índice de decaimiento de *Salmonella* aumentó respecto a la condición de la Figura 28, aún se encuentra muy lejos de un valor aceptable (i.e.,  $\log_{10}\left(\frac{n}{n_0}\right) < -10$ ).



Figura 29. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintos valores de fracción másica de agua tras modificar la concentración de agua inicial para el caso 2 del estudio de diseño.

De forma similar a lo observado en el caso de diseño 1, cuando la variación de la fracción másica de agua en la fase sólido líquido se debe a la modificación de la relación de biomasa y sustrato iniciales la pendiente de la temperatura y el consumo de oxígeno aumentan en las etapas iniciales del proceso de composteo (Figuras 30a y 30b) en comparación con la variación de la Figura 29. A pesar de ello la sanitización del sistema continua siendo mínima (Figura 30d).



Figura 30. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintos valores de fracción másica de agua tras modificar la relación de biomasa y sustrato iniciales para el caso 2 del estudio de diseño.

Finalmente, la Figura 31a señala que el aumento en el aislamiento del sistema de composteo propicia que la temperatura promedio se incremente hasta los 40°C. Sin embargo, 40°C no propicia una sanitización adecuada del sistema de composteo.



Figura 31. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintos coeficientes globales de transferencia de calor en dirección radial para el caso 2 del estudio de diseño.

### 7.3.2.3 Caso 3: Ampliación del radio del sistema de composteo

Las Figuras 32 a 35 corresponden al caso 3 del estudio de diseño donde el radio del reactor se duplica y la longitud es una cuarta parte del valor original. El aumento en el radio del reactor disminuye la velocidad promedio del gas que ingresa al sistema a un flujo constante, lo cual propicia que el oxígeno sea consumido por los microorganismos. Además, debido al mayor volumen de aire que ingresa al reactor el consumo de oxígeno no altera significativamente la concentración disponible de este gas al interior del reactor. Lo anterior propicia temperaturas promedio superiores a los 40°C y un mayor grado de secado de la fase sólido líquido respecto a los casos de estudio de diseño anteriores.

De acuerdo con la Figura 32b al disminuir el tiempo de residencia del oxígeno en el reactor los microorganismos no son capaces de metabolizar suficiente oxígeno y la temperatura promedio del sistema apenas alcanza los 45°C en las últimas horas de simulación (Figura 32a). Si bien esto evita un mayor secado de la fase sólido-líquido (Figura 32c), el índice de disminución para *Salmonella* es tan bajo como lo conseguido al reducir el radio del reactor a la mitad (Figura 32d). Aunque mayores tiempos de residencia del oxígeno incrementan la temperatura promedio en el sistema de composteo, el grado de sanitización mostrado en la Figura 31d no es el adecuado para garantizar la inocuidad de la composta.



Figura 32. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintas velocidades intersticiales del caso 3 del estudio de diseño.

De acuerdo con las Figuras 33a y 33c cuando  $\text{fmw}_0 \rightarrow \text{w}_{opt}$  como resultado de la modificación de la concentración inicial de agua en la fase sólido-líquido el aumento de la temperatura del sistema en las primeras horas de simulación exacerba el secado del sistema, lo cual conduce a condiciones críticas de concentración de agua y a que los microorganismos no puedan reproducirse adecuadamente; decayendo también la actividad metabólica. Lo anterior conduce a un índice adecuado de decaimiento de *Salmonella* muy corto (Figura 33d). Por otra parte, para  $\text{fmw}_0 > \text{w}_{opt}$  la temperatura del sistema de composteo es superior a 55°C durante la mayor parte del tiempo simulado (Figura 33a). Si bien esto evita un secado abrupto de la fase sólido-líquido, no garantiza un grado de saneamiento adecuado (Figuras 33c y 33d).



Figura 33. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintos valores de fracción másica de agua tras modificar la concentración de agua inicial en el caso 3 del estudio de diseño.

Similar a lo indicado en los casos de diseño precedentes, cuando la variación de la fracción másica de agua en la fase sólido líquido se debe a la modificación de la relación de biomasa y sustrato iniciales  $\binom{X_0}{S_0}$  la pendiente de la temperatura y el consumo de oxígeno aumentan en las etapas iniciales del proceso de composteo cuando fmw<sub>0</sub>  $\rightarrow$  w<sub>opt</sub> (Figuras 34a y 34b). Sin embargo, la mayor cantidad de agua generada por actividad metabólica evita un secado crítico de la fase sólido-líquido (Figura 34c) por lo que la población microbiana y por ende la temperatura del sistema no decaen sustancialmente durante el tiempo de simulación. Lo anterior aumenta el grado de sanitización del sistema de composteo (Figura 34d).

Finalmente, de acuerdo con la Figura 35a un mayor aislamiento del sistema de composteo aumenta la temperatura promedio hasta 60°C. Aunque no hay cambios sustanciales en el grado de secado de la fase sólido-líquido (Figura 35c), el nivel de saneamiento del sistema es mantiene una relación directa con el aislamiento. Sin embargo, se requeriría un aislamiento superior para conseguir niveles de decaimiento de *Salmonella* adecuados (Figura 35d).



Figura 34. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintos valores de fracción másica de agua tras modificar la relación de biomasa y sustrato iniciales en el caso 3 del estudio de diseño.



Figura 35. Perfiles promedio de temperatura (a), concentración de oxígeno (b), concentración de agua (c) y decaimiento de *Salmonella* (d) para distintos coeficientes globales de transferencia de calor en dirección radial en el caso 3 del estudio de diseño.

## 8. Conclusiones y perspectivas

### Conclusiones

Se desarrolló un modelo matemático para describir el proceso de composteo con base en el trabajo desarrollado por Vidriales-Escobar et al. (2017) para un reactor cilíndrico bifásico. El modelo propuesto describe coherentemente los cambios temporal y espacial de la temperatura y las concentraciones de oxígeno y agua en las fases gas y sólido-líquido; así mismo se describen los cambios de la concentración de microorganismos y sustrato en la fase sólido-líquido.

El modelo de composteo propuesto en este trabajo resuelve distintas inconsistencias detectadas en el modelo base e incorpora la descripción de la concentración de agua en las fases gas y sólido-líquido, así como el efecto de la fracción másica de agua en la velocidad de crecimiento microbiano; basado en humedades críticas en el sistema de composteo. De tal forma que el presente proyecto propone un modelo de composteo en el que el crecimiento de los microorganismos se encuentra condicionado por la temperatura del sistema y la fracción másica de agua en la fase sólido-líquido.

Durante el análisis del modelo base se resolvió el sistema de ecuaciones mediante los métodos de líneas en MATLAB<sup>®</sup> y elemento finito en COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> con lo que se corroboró que la descripción con ambos métodos es equivalente. Para fines prácticos se desarrolló el modelo propuesto en COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> con la salvedad de ser un programa de "caja negra".

El modelo de composteo propuesto en este trabajo fue capaz de representar cualitativamente el comportamiento general de datos experimentales recabados por Haibin et al. (2014) y Rentería-Tamayo et al. (2018). Además, la descripción del modelo fue altamente sensible a velocidad intersticial del aire que ingresa al sistema, el rendimiento sustrato-biomasa, la temperatura ambiental y la fracción másica inicial de agua en la fase sólido-líquido. El rendimiento oxígeno-sustrato alteró de forma

importante el perfil de consumo de oxígeno en la fase gas, mas no los perfiles de temperatura ni de concentración de agua promedio.

En el análisis de diseño del reactor se determinó que con las dimensiones originales del sistema de composteo se requería que la fracción másica inicial de agua en la fase sólido-líquido sea cercana al valor óptimo  $w_{opt} \left(i. e., 0.6 \frac{kg H_2 O}{kg_{sol-liq}}\right)$  para obtener un índice de decaimiento logarítmico aceptable y garantizar una adecuada higienización del material. Esto es posible lograrlo mediante la disminución del valor original de la concentración inicial de agua en dicha fase o con una relación inicial biomasa-sustrato cercana a 0.054. Sin embargo, en la práctica es posible que temperaturas cercanas a 65°C durante periodos sostenidos de tiempo aumenten el riesgo de incendios no programados; dado que el material del reactor es policloruro de vinilo (PVC). Por lo anterior, un incremento en el aislamiento del reactor propició una temperatura cercana a 60°C, lo que generó un grado de sanitización adecuado durante la mayor parte del proceso de composteo y disminuye el riesgo de incendio espontáneo.

De acuerdo con el análisis de diseño la modificación del radio del reactor afectó la descripción del comportamiento general del sistema de composteo. Así, al disminuir el radio del reactor se redujo la temperatura promedio del sistema y la sanitización de éste fue mínima; lo que no garantiza la inocuidad de la composta. Pese a las variaciones operacionales que se establecieron, el desarrollo del proceso de composteo continuó siendo limitado.

Por otra parte, al aumentar el radio del reactor la temperatura promedio del sistema de composteo incrementó respecto a las condiciones originales; lo mismo que el grado de sanitización. En este sentido nuevamente la fracción másica inicial de agua en la fase sólido-líquido cercana a w<sub>opt</sub> mediante la modificación de la concentración inicial de agua o la relación inicial biomasa-sustrato garantizó una adecuada higienización del material. Sin embargo, la mayor cantidad de aire que ingresa al sistema y el aumento en la temperatura favorecieron el secado de la fase sólido-

127

líquido; lo que exacerba el riesgo de incendio involuntario. Para alcanzar una sanitización adecuada del sistema bajo estas condiciones se requeriría un aumento sustancial en el aislamiento del reactor; lo cual representaría una desventaja económica.

Finalmente, todos los modelos matemáticos son susceptibles a mejoras que incrementen la comprensión del fenómeno que pretenden describir y éste no es la excepción; especialmente cuando se trata de procesos biológicos complejos. La principal condicionante es que la descripción sea coherente con la naturaleza del fenómeno.

### Perspectivas

A continuación, se enumeran algunas perspectivas a futuro para mejorar la descripción del proceso de composteo mediante el modelo matemático propuesto en este trabajo y así continuar aportando a la comprensión de este fenómeno.

- 1. Llevar a cabo un proceso de optimización de los rendimientos  $Y_{S/X}$  y  $Y_{O/S}$ , la velocidad específica de crecimiento microbiano ( $\mu_m$ ) y otros parámetros relacionados con el efecto de la concentración de agua en la fase sólidolíquido (e.g.,  $w_{c1}$ ,  $w_{c2}$  o  $w_{s0}$ ) empleando no sólo datos experimentales de temperatura y oxígeno, sino también de humedad en el sistema. Para ello es importante conocer con cierta precisión las concentraciones iniciales de biomasa y sustrato biodegradable.
- Modelar el efecto de la variación temporal de la temperatura ambiente durante el proceso de composteo.
- Para que el proceso descrito sea más realista, diferenciar en el modelo las poblaciones microbianas y tipos de sustrato para las primeras etapas del composteo. Esto requeriría diferenciar las velocidades de crecimiento microbiano y posiblemente el factor de dependencia de la temperatura y la humedad.

# Bibliografía

- Alvarez Zeferino, J., Espinosa-Valdemar, R., Vazquez, A., Cano, E., Beltrán-Villavicencio, M., Zavaleta, H., Velasco, E., & Lima, M. (2017). *Producción de composta en la ciudad de méxico: realidad y desafíos* [conferencia]. En VII Simposio Iberoamericano en Ingeniería de Residuos. Santander, España.
- Bishop Joseph E. y Lim, H. (2016). Continuum Approximations. En C. R. Weinberger
  & G. J. Tucker (Eds.), *Multiscale Materials Modeling for Nanomechanics* (pp. 89– 129). Suiza: Springer International Publishing.
- Bongochgetsakul, N., & Ishida, T. (2008). A new analytical approach to optimizing the design of large-scale composting systems. *Bioresource Technology*, 99(6), 1630– 1641. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.biortech.2007.04.016
- Chapra, S. (2018). Applied Numerical Methods with Matlab for Engineers and Scientists. Nueva York: McGrawHill Education.
- Díaz, M., & Fernández, M. D. (2012). Ingenieria de bioprocesos. Madrid: Paraninfo.
- Davis, M. (1984). *Numerical Methods & Modeling for Chemical Engineers*. California: John Wiley & Sons, Inc.
- Delgado, J. (2006). A Critical Review of Dispersion in Packed Beds. *Heat and Mass Transfer*, *42*, 279–310. https://doi.org/10.1007/s00231-005-0019-0
- Epstein, E. (2011). Industrial composting: Environmental engineering and facilities management. Boca Ratón: CRC Press.
- Fletcher, C. (1998). Computational Techniques for Fluid Dynamics 1: Fundamental and General Techniques. Berlín: Springer Berlin Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-58229-5
- Gea, T., Barrena, R., Artola, A., & Sánchez, A. (2007). Optimal bulking agent particle size and usage for heat retention and disinfection in domestic wastewater sludge composting. *Waste management*, 27, 1108–1116.

https://doi.org/10.1016/j.wasman.2006.07.005

- Haibin, Z., Chen, T.-B., Gao, D., ZHENG, G., Pan, T.-H., Liu, H.-T., & Gu, R.-Y. (2014).
  Simulation of water removal process and optimization of aeration strategy in sewage sludge composting. *Bioresource technology*, *171C*, 452–460. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2014.07.006
- Haug, R. T. (1993). *The Practical Handbook of Compost Engineering*. Boca Ratón: CRC Press.
- He, X., Han, L., Ge, J., & Huang, G. (2018). Modelling for reactor-style aerobic composting based on coupling theory of mass-heat-momentum transport and Contois equation. *Bioresource Technology*, 253, 165–174. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.biortech.2018.01.040
- Insam, H., Franke-Whittle, I., & Goberna, M. (2009). *Microbes at Work: From Wastes to Resources*. Berlin: Springer Berlin Heidelberg.
- Kiyasudeen, K., Ibrahim, M., Quaik, S., & Ismail, S. A. (2016). Prospects of Organic Waste Management and the Significance of Earthworms. Suiza: Springer Berlin Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-319-24708-3
- Kuwahara, F., Sano, Y., Nakayama, A., Nakasaki, K., & Fukazawa, T. (2009).
   Numerical Modeling of a Composting Process with Aeration. *Journal of Porous Media*, 12, 927–938. https://doi.org/10.1615/JPorMedia.v12.i10.10
- Lin, Y. P., Huang, G. H., Lu, H. W., & He, L. (2008). Modeling of substrate degradation and oxygen consumption in waste composting processes. *Waste Management*, 28(8), 1375–1385. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.wasman.2007.09.016
- Mason, I. (2006). Mathematical modelling of the composting process: A review. *Waste management*, *26*, 3–21. https://doi.org/10.1016/j.wasman.2005.01.021
- Mason, I. G., & Milke, M. W. (2005). Physical modelling of the composting environment: A review. Part 1: Reactor systems. *Waste Management*, 25(5), 481–500.

https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.wasman.2005.01.015

- Mohee, R., White, R. K., & Das, K. C. (1998). Simulation Model for Composting Cellulosic (Bagasse) Substrates. *Compost Science & Utilization*, 6(2), 82–92. https://doi.org/10.1080/1065657X.1998.10701923
- Mott, H., & Green, Z. (2014). On Danckwerts' Boundary Conditions for the Plug-Flow with Dispersion/Reaction Model. *Chemical Engineering Communications*, 202, 739-745. https://doi.org/10.1080/00986445.2013.871708
- Neves, D., Gomes, A., TarelhoO, L., & Matos, M. (2007). Application of a dynamic model to the simulation of the composting process [Conferencia]. En Eleventh International Waste Management and Landfill Symposium. Sardinia, Italia.
- Onwosi, C. O., Igbokwe, V. C., Odimba, J. N., Eke, I. E., Nwankwoala, M. O., Iroh, I. N., & Ezeogu, L. I. (2017). Composting technology in waste stabilization: On the methods, challenges and future prospects. *Journal of Environmental Management*, 190, 140–157. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2016.12.051
- Petric, I, & Selimbašić, V. (2008). Development and validation of mathematical model for aerobic composting process. *Chemical Engineering Journal*, 139(2), 304–317. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.cej.2007.08.017
- Petric, Ivan, & Mustafić, N. (2015). Dynamic modeling the composting process of the mixture of poultry manure and wheat straw. *Journal of Environmental Management*, 161, 392–401. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2015.07.033
- Qin, X., Huang, G., Zeng, G., Chakma, A., & Xi, B. (2007). A Fuzzy Composting Process Model. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 57, 535– 550. https://doi.org/10.3155/1047-3289.57.5.535
- Rentería-Tamayo, R., Vidriales, G., Gonzalez-Ortega, O., & Alatriste-Mondragón, F. (2018). Mathematical Modeling of the Mesophilic and Thermophilic Stages of a

Composting Tubular Reactor for Sewage Sludge Sanitization. *Waste and Biomass Valorization*. https://doi.org/10.1007/s12649-018-0436-1

- Saez, A. E., & Baygents, J. C. (2014). *Environmental Transport Phenomena*. Boca Ratón: CRC Press.
- Sander, R. (2015). Compilation of Henry's law constants (Version 4.0) for water as solvent. Atmospheric Chemistry and Physics, 15, 4399–4981. https://doi.org/10.5194/acp-15-4399-2015
- Shishido, T., & Seki, H. (2015). Laboratory-scale Experiment for an Active-stage Composting Process under the Same Material and Operating Conditions. *Journal* of Agricultural Meteorology, 71, 111–123. https://doi.org/10.2480/agrmet.D-14-00010
- Sole-Mauri, F., Illa, J., Magrí, A., Prenafeta-Boldú, F. X., & Flotats, X. (2007). An integrated biochemical and physical model for the composting process. *Bioresource Technology*, 98(17), 3278–3293. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.biortech.2006.07.012
- Vasiliadou, I. A., Chowdhury, A. K. M. M. B., Akratos, C. S., Tekerlekopoulou, A. G., Pavlou, S., & Vayenas, D. V. (2015). Mathematical modeling of olive mill waste composting process. *Waste Management*, 43, 61–71. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.wasman.2015.06.038
- Vidriales-Escobar, G., Rentería-Tamayo, R., Alatriste-Mondragón, F., & González-Ortega, O. (2017). Mathematical modeling of a composting process in a smallscale tubular bioreactor. *Chemical Engineering Research and Design*, *120*, 360– 371. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.cherd.2017.02.006
- Walling, E., Vaneeckhaute, C., & Trémier, A. (2020). A review of mathematical models for composting. *Waste Management*, *113*, 379–394. https://doi.org/10.1016/j.wasman.2020.06.018

Wang, Y., Ai, P., Cao, H., & Liu, Z. (2015). Prediction of moisture variation during

composting process: A comparison of mathematical models. BioresourceTechnology,193,200–205.https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.biortech.2015.06.100

- Zambra, C. E., Moraga, N. O., & Escudey, M. (2011). Heat and mass transfer in unsaturated porous media: Moisture effects in compost piles self-heating. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(13), 2801–2810. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.01.031
- Zwietering, M., Koos, J., Hasenack, B. B. E., Witt, J., & Riet, K. (1991). Modeling bacterial growth as a function of temperature. *Applied and environmental microbiology*, *57*, 1094–1101. https://doi.org/10.1128/AEM.57.4.1094-1101.1991
## Anexo A

Parámetros empleados en el modelo base (adaptado de Vidriales-Escobar et al., 2017).

Parámetro	Valor	Unidades	Descripción	Observación
L	2.7	m	Longitud del reactor	
а	0.127	m	Radio interno del reactor	
vi	4x10 <sup>-3</sup>	m s	Velocidad intersticial del gas	
X <sub>0</sub>	2	$\frac{\text{kg X}}{\text{m}^3}$	Concentración inicial microorganismos	Asumido
S <sub>0</sub>	23	$\frac{\text{kg S}}{\text{m}^3}$	Concentración inicial de sustrato	Asumido
C <sub>a0</sub>	0.2275	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{kg gas}}$	Concentración inicial de oxígeno en la fase gas	Calculado
T <sub>amb</sub>	298.15	K	Temperatura ambiente	
C <sub>pa</sub>	1007	J kg <sub>gas</sub> K	Capacidad calorífica de la fase gas	Referenciado
C <sub>psl</sub>	2122	J kg <sub>sól-líq</sub> K	Capacidad calorífica de la fase sólido-líquido	Calculado
D <sub>eL</sub>	2.14x10 <sup>-6</sup>	$\frac{m^2}{s}$	Coeficiente de dispersión axial de la fase gas	Asumido
E <sub>a</sub>	41250	J mol	Energía de activación para crecimiento microbiano	Calculado
E <sub>ad</sub>	52000	J mol	Energía de activación para la muerte microbiana	Asumido
h	5	$\frac{W}{m^2 K}$	Coeficiente de transferencia de calor	Asumido
$h_L \overline{a}$	400	$\frac{W}{m^3 K}$	Coeficiente volumétrico de transferencia de calor	Calculado
H <sub>rxn</sub>	1.99x10 <sup>7</sup>	J kg <sub>s</sub>	Entalpía de reacción	Referenciado

Нсс	0.029	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{m}^3}$	Constante de la ley de Henry para el oxígeno	Referenciado
k <sub>er</sub>	0.13	W m K	Conductividad térmica radial de la fase gas	Asumido
k <sub>ez</sub>	0.15	W m K	Conductividad térmica axial de la fase gas	Calculado
k <sub>sl</sub>	0.21	W m K	Conductividad térmica de la fase sólido-líquido	Calculado
К	0.0015	$\frac{\text{kg } \text{O}_2}{\text{m}^3}$	Constante de inhibición de Oxígeno	Asumido
K <sub>c</sub>	10	kg S kg X	Constante cinética de vida media	Referenciado
R	8.314	J mol K	Constante de los gases ideales	
T <sub>h</sub>	353.15	К	Temperatura máxima viable	Referenciado
T <sub>m</sub>	333.15	К	Temperatura óptima de crecimiento	Referenciado
U	2.2	$\frac{W}{m^2 K}$	Coeficiente global de transferencia de calor radial	Asumido
Y <sub>S/X</sub>	2	kg S kg X	Rendimiento sustrato- biomasa	Referenciado
Y <sub>O/S</sub>	0.7	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{kg S}}$	Rendimiento oxígeno- sustrato	Referenciado
Y <sub>O/X</sub>	(Y <sub>S/X</sub> ) (Y <sub>O/S</sub> )	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{kg X}}$	Rendimiento oxígeno- biomasa	
$\alpha_{ez}$	$\frac{k_{ez}}{\rho_a  C_{pa}}$	$\frac{m^2}{s}$	Difusividad térmica axial de la fase gas	
α <sub>er</sub>	$\frac{k_{er}}{\rho_a  C_{pa}}$	$\frac{m^2}{s}$	Difusividad térmica radial de la fase gas	

α <sub>sl</sub>	$\frac{k_{sl}}{\rho_{sl}C_{sl}}$	$\frac{m^2}{s}$	Difusividad térmica de la fase sólido-líquido	
ε <sub>a</sub>	0.41	$\frac{m_{gas}^3}{m_{total}^3}$	Fracción volumétrica de gas (Porosidad)	Calculado
$\rho_a$	1.2	$\frac{\text{kg gas}}{\text{m}_{\text{gas}}^3}$	Densidad de la fase gas	Referenciado
$ ho_{sl}$	526	$\frac{kg_{s\delta l-líq}}{m_{s\delta l-líq}^3}$	Densidad de la fase sólido-líquido	Calculado
μ <sub>m</sub>	5.5x10 <sup>-5</sup>	s <sup>-1</sup>	Velocidad específica de crecimiento microbiano	Calculado
μ <sub>d</sub>	1.0x10 <sup>-5</sup>	s <sup>-1</sup>	Velocidad específica de muerte microbiana	Asumido

## Anexo B

Parámetros empleados en el modelo de composteo propuesto.

Parámetro	Valor	Descripción	Unidades
L	2.7	Longitud del reactor	m
а	0.127	Radio interno del reactor	m
X <sub>0</sub>	8	Concentración inicial microorganismos	$\frac{\text{kg X}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
S <sub>0</sub>	198	Concentración inicial de sustrato	$\frac{\text{kg S}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
C <sub>a0</sub>	0.273	Concentración inicial de oxígeno en la fase gas	$\frac{\text{kg } \text{O}_2}{\text{m}_{\text{gas}}^3}$
T <sub>amb</sub>	298.15	Temperatura ambiente	K
w <sub>a0</sub>	4.8x10 <sup>-3</sup>	Concentración inicial de vapor de agua en la fase gas	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{m}_{\text{gas}}^3}$
w <sub>s0</sub>	361.25	Concentración inicial de agua en la fase sólido-líquido	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{m}_{\text{sol-liq}}^3}$
v <sub>i</sub>	4x10 <sup>-3</sup>	Velocidad intersticial del gas	m s
C <sub>pa</sub>	1007	Capacidad calorífica de la fase gas	J kg <sub>gas</sub> K
C <sub>psl</sub>	2122	Capacidad calorífica de la fase sólido- líquido	J kg <sub>sol-liq</sub> K
D <sub>eL</sub>	2.14x10 <sup>-6</sup>	Coeficiente de dispersión axial de oxígeno en la fase gas	$\frac{m^2}{s}$
D <sub>eT</sub>	2.14x10 <sup>-6</sup>	Coeficiente de dispersión radial de oxígeno en la fase gas	$\frac{m^2}{s}$
D <sub>wL</sub>	2.14x10 <sup>-6</sup>	Coeficiente de dispersión axial de vapor de agua	$\frac{m^2}{s}$
D <sub>wT</sub>	2.14x10 <sup>-6</sup>	Coeficiente de dispersión radial de vapor de agua	$\frac{m^2}{s}$

Ea	41250	Energía de activación para crecimiento	J
а а		microbiano	mol
E <sub>ad</sub>	52000	Energía de activación para la muerte	J
		micropiana	mol
h	5	Coeficiente de transferencia de calor	$\frac{W}{m^2 K}$
_	400	Coeficiente volumétrico de transferencia	W
h <sub>L</sub> ā		de calor	m <sup>3</sup> <sub>total</sub> K
k,ā	2e-4	Coeficiente volumétrico de transferencia	m <sup>3</sup> <sub>gas</sub>
КĽU		de masa	m <sup>3</sup> <sub>total</sub> s
Н	-1.99x10 <sup>7</sup>	Entalnía de reacción	J
rxn			kg S
Hw	2.44x10 <sup>6</sup>	Calor latente de evaporización	J
		·	kg H <sub>2</sub> O
Uer	$1.3 \times 10^{-5}$	Constante de la ley de Henry para el	mol O <sub>2</sub>
пср		líquido y presión del gas	m <sub>sol-liq</sub> Pa
	0.13	Conductividad térmica radial de la fase	W
k <sub>er</sub>		gas	m K
k.	0.15	Conductividad térmica axial de la fase das	W
rrez			m K
k <sub>sl</sub>	0.21	Conductividad térmica de la fase sólido-	W
		liquido	m K
К	0.0015	Constante de inhibición de Oxígeno	$\frac{\text{kg } 0_2}{\text{m}^3}$
	20		III <sup>3</sup>
K <sub>c</sub>	20	Constante cinética de vida media	$\frac{\text{kg S}}{\text{kg X}}$
	8 31/		I
R	0.514	Constante de los gases ideales	mol K
T <sub>h</sub>	353.15	Temperatura máxima viable	К
T <sub>m</sub>	333.15	Temperatura óptima de crecimiento	K
1	1		1

w <sub>c1</sub>	0.2	Humedad crítica mínima	kg H <sub>2</sub> 0 kg <sub>sol-liq</sub>
W <sub>opt</sub>	0.6	Humedad óptima de crecimiento	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}$
w <sub>c2</sub>	0.7	Humedad crítica máxima viable	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}$
k <sub>a</sub>	0.04	Constante de corrección de humedad	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}_{\text{sol-liq}}}$
U	2.4	Coeficiente global de transferencia de calor radial	$\frac{W}{m^2 K}$
Y <sub>S/X</sub>	1.8	Rendimiento sustrato-biomasa	kg S kg X
Y <sub>0/S</sub>	1.92	Rendimiento oxígeno-sustrato	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{kg S}}$
Y <sub>O/X</sub>	(Y <sub>S/X</sub> ) (Y <sub>O/S</sub> )	Rendimiento oxígeno-biomasa	$\frac{\text{kg O}_2}{\text{kg X}}$
Y <sub>w/S</sub>	0.4312	Rendimiento agua-sustrato	$\frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg S}}$
α <sub>ez</sub>	$\frac{k_{ez}}{\rho_a  C_{pa}}$	Difusividad térmica axial de la fase gas	$\frac{m^2}{s}$
α <sub>er</sub>	$\frac{k_{er}}{\rho_a  C_{pa}}$	Difusividad térmica radial de la fase gas	$\frac{m^2}{s}$
α <sub>sl</sub>	$\frac{k_{sl}}{\rho_{sl}C_{sl}}$	Difusividad térmica de la fase sólido- líquido	$\frac{m^2}{s}$
ε <sub>a</sub>	0.41	Fracción volumétrica de gas (Porosidad)	$\frac{m_{gas}^3}{m_{total}^3}$
$\rho_a$	1.2	Densidad de la fase gas	$\frac{\text{kg gas}}{\text{m}_{\text{gas}}^3}$
μ <sub>m</sub>	5.5x10 <sup>-5</sup>	Velocidad específica de crecimiento microbiano	s <sup>-1</sup>

μ <sub>d</sub>	1x10 <sup>-5</sup>	Velocidad específica de muerte microbiana	s <sup>-1</sup>
V <sub>mCa</sub>	0.8222	Volumen molar específico promedio para oxígeno	$\frac{m^3O_2}{kgO_2}$
V <sub>mwa</sub>	1.4618	Volumen molar específico promedio para vapor de agua	$\frac{\text{m}^3\text{H}_2\text{O}}{\text{kg}\text{H}_2\text{O}}$