

* Salvador Camacho Sandoval es candidato a Doctor en Historia de América Latina por la Universidad de Illinois en Chicago y profesor en la Maestría en Educación de la UAA. El autor agradece los comentarios de Claudio H. Vargas.

¹ Primer Simposio Estatal. La investigación y el desarrollo tecnológico en Aguascalientes, 1994. Memorias, Instituciones participantes, Aguascalientes, México, agosto de 1994.

² Trubulso, Elías; Los orígenes de la ciencia moderna en México (1630-1680), FCE, México, 1994.

³ UNESCO; "Primer reportemundial sobre la ciencia", Ciencia y Desarrollo, N: 116, CONACYT, México, mayo/junio de 1994, pp. 8-11.

⁴ *idem*, p. 9.

⁵ James, Dilmus; "Science, Technology, and Development", Dietz, James & Dilmus D. James (ed); Progress Toward Development in Latin America. From Prebisch to Technological Autonomy, Lynne Rienner Publishers, Boulder & London, 1990, pp. 159-176.

⁶ Los datos nacionales fueron obtenidos de SEP-CONACYT; Indicadores de actividades de ciencia y tecnología, 1993, CONACYT, México, 1993.

⁷ Pérez Tamayo, Ruy; "Ciencia: lo que no se hizo en el sexenio", La Jornada, México, 29-VIII, 5-IX, 12-IX, 19-IX, 26-IX-1994.

⁸ UAA; Sistema Regional de Información de las Actividades Científicas y Tecnológicas. Actualización 1993, UAA, Aguascalientes, México, 1994.

⁹ Camacho, Salvador; "La UAA, veinte años después", Espacios, N: 14, ICA, Aguascalientes, México, marzo-abril de 1994, pp. 5-17.

¹⁰ Ortiz, Yolanda; "La ciencia: un apasionante riesgo. Entrevista a Elías Trubulso", Información Científica y Tecnológica, Vol. 13, No. 177, junio 1991, pp. 51-58.

DISEÑO OPTIMO DE TRES REACTORES BIOCATALITICOS EN SERIE MEDIANTE UN METODO NUMERICO

Dr. Jorge Medina Valtierra/Departamento de Ingeniería Química/Instituto Tecnológico de Aguascalientes

RESUMEN

Como una alternativa a la evaluación gráfica se presenta un método analítico para el diseño óptimo de reactores tipo tanque en serie y su aplicación al diseño de reactores biocatalíticos. El procedimiento numérico usado se basa en ciertas consideraciones geométricas de las gráficas velocidad-conversión para una cinética específica de la reacción involucrada. Cuando se tienen programas de cómputo apropiados que facilitan la labor y dan una mayor precisión a los cálculos, el método puede resultar ventajoso con respecto a los métodos gráficos directo e indirecto.

INTRODUCCION

Recientemente se ha visto un aumento considerable en la aplicación de reactores tipo tanque provistos de un lecho biocatalítico donde se inmovilizan enzimas o microorganismos con el fin de realizar reacciones biológicas. El propósito principal es descomponer contaminantes orgánicos¹ o inorgánicos² en aguas residuales con la formación final de compuestos volátiles como NH₃, CH₄ y CO₂ que son eliminados fácilmente del fluido líquido.

El objetivo de este escrito es analizar el uso de tres reactores en serie debido a que se logra reducir notablemente el volumen o peso del biocatalizador para una misma eficiencia con respecto al uso de un solo tanque y porque no se justifica la compra de equipo auxiliar necesario para equipar un número mayor de tres reactores. Esto resulta aún mejor si se logra optimizar el peso de biocatalizador en cada reactor al

considerar la cinética de la reacción bioquímica involucrada, esto nos lleva a obtener la minimización del peso total del material biocatalítico requerido.

METODOLOGIA ANALITICA

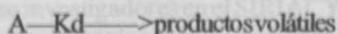
Fundamentos Teóricos

El tiempo-peso en el bioreactor con lecho inmovilizado (T) está dado por²;

$$T = m / F_s = (C_{s0} - C_s) / r \quad (1)$$

En este caso, T es un concepto análogo al manejado en un reactor químico catalítico³.

La descomposición del sustrato se ilustra así;



donde la expresión cinética que define la velocidad con que se realiza la descomposición se puede representar de una manera general como:

$$r = K_d [C_{s0}(1-X)]^n \quad (2)$$

Esta última se puede aplicar si el cambio de concentración del sustrato lleva una trayectoria constante para poder determinar K_d a partir de datos experimentales. Esto evita manejar cinéticas complejas que son necesarias cuando se consideran los probables mecanismos de descomposición.

En la optimización de un sistema de tres bioreactores puestos en serie el objetivo es minimizar la suma de los tiempos-peso;

$$T_t = T_1 + T_2 + T_3 \quad (3)$$

los tiempos-peso están relacionados con el avance de la reacción del sustrato por medio de una ecuación de diseño semejante a la usada para reactores químicos tipo tanque en serie:

$$T_t = C_{so} [X_{s1}/r_1 + (X_{s2} - X_{s1})/r_2 + (X_{s3} - X_{s2})/r_3] \quad (4)$$

donde los conceptos y símbolos no definidos en las ecuaciones anteriores, se dan en la nomenclatura

El Método de Levenspiel

En la figura 1 se muestra el método gráfico indirecto propuesto por Levenspiel en 1979 para el caso de tres reactores tipo tanque en serie³; las áreas de los rectángulos relacionan los valores de T_1 , T_2 y T_3 de tal manera que existe una única posición para los valores X_2 y X_1 donde la suma de la área de los rectángulos es un mínimo y que se cumple cuando las diagonales LM y MN son paralelas de una manera respectiva, a las pendientes de la curva cinética en los puntos P y Q.

Procedimiento Numérico para el caso de Tres Reactores en Serie

El análisis numérico se puede iniciar desde un punto medio en la gráfica dado por $X_f/2$, lo cual es lo más práctico. Tal punto lo llamaremos X_{r1} como referencia, y dando una posición "i" antes y después de X_{r1} . El parámetro "i" indica la modificación de las dos líneas de operación de acuerdo a la figura 1, de tal manera que una posición única para X_1 y X_2 dan el resultado de $(T_t)_{min}$. Usar incrementos pequeños (1% de índice de descomposición) evita estar probando diferentes incrementos y/o usar tolerancias preestablecidas.

El procedimiento para evaluar este caso es el siguiente:

1.- Con X_f se calcula la velocidad de reacción en el último reactor que llamaremos r_3 o r_f .

2.- Tomando como referencia X_r se inician los cálculos con un primer valor de $I = i$, determinando así X_1 y X_2 .

$$X_1 = X_r - i$$

$$X_2 = X_r + i$$

3.- Con X_1 y X_2 calcular r_1 y r_2 de la expresión cinética que representa la reacción.

4.- Estimar T_t con los valores anteriores.

5.- Incrementar "i" con I, tal que; $i = i + I$

para obtener el nuevo valor de X_1 y X_2 .

6.- Seguir con los pasos 3 y 4.

7.- a) Si $(T_t)_{i-1} - (T_t)_i > 0$; establecer $i+1 = i$ y continuar con los pasos 5 y 6.

b) Si $(T_t)_{i-1} - (T_t)_i < 0$, entonces continuar con el paso 8.

8.- a) Definir $(X_1)_{i-1}$ como un parámetro constante y continuar incrementando "i" como se estableció en el paso 5 para obtener los nuevos valores de X_2 y T_t que son $(X_2)_{i+1}$ y $(T_t)_{i+1}$, como quedó descrito en el paso 7. Cuando;

$$(T_t)_{i-1} - (T_t)_i < 0$$

entonces $(X_2)_i$ es el parámetro que define el tamaño mínimo del reactor 3 y es un valor óptimo $(X_2)_{opt}$.

b) Una vez que se obtiene $(X_2)_{opt}$, este valor se mantiene fijo para continuar incrementando "i" a partir de $(X_1)_i$ para obtener los nuevos valores de X_1 y T_t que son $(X_1)_{i+1}$ y $(T_t)_{i+1}$ para cumplir con el paso 7. Cuando:

$$(T_t)_{i-1} - (T_t)_i < 0$$

entonces $(X_1)_i$ es el parámetro que define el tamaño mínimo del reactor 1, siendo $(X_1)_{opt}$ y que se usa conjuntamente con $(X_2)_{opt}$ para definir el tamaño mínimo del reactor 2, de tal manera que, $(T_t)_i$ relaciona el tamaño total mínimo de los tres reactores en este sistema.

EJEMPLO

Con el fin de ilustrar el método numérico propuesto se toman como referencia los datos cinéticos y resultados parciales presentados por S. Cizinská para la desnitrificación de agua usando un lecho biocatalítico inmovilizado a 20°C⁸:

r; mg/g.h	2.3	2.2	2.0	1.7	1.5	1.2	0.9	0.6
Cs; mg/l	140	120	100	80	60	40	20	10

Al aplicar el método diferencial para la evaluación de los parámetros cinéticos⁴, se encontró que K_d tiene un valor de 0.1653 y el orden de la reacción n igual a 0.55. ¿Cuál es el peso total mínimo de biocatalizador repartido en tres etapas para lograr un índice de descomposición de 80% si $C_{so} = 22.5$ mg/l y $F_s = 18$ l/h?

Cuando se tiene una reacción con cinética conocida y sin cambio en el volumen de mezcla, como en este caso, los datos cinéticos que requiere el método son solicitados por el programa de cómputo que se propone en lenguaje TurboC llamado BIOCAT3.C y están señalados en el desplegado de los resultados.

Solución para los Tres Reactores Biocatalíticos en Serie

Una vez que el programa de optimización es ejecutado con los datos del problema, los resultados desplegados nos indican que las cantidades de biocatalizador optimizadas en cada reactor son:

$$m_1 = 0.122 \text{ Kg}; \quad m_2 = 0.256 \text{ Kg}; \\ m_3 = 0.225 \text{ Kg}$$

y una cantidad total mínima de 0.603 Kg de biocatalizador.

Un resultado bastante mejorado cuando se compara con el obtenido para una sola etapa (cc. 2) donde se requiere un peso de biocatalizador de 0.86 Kg.

COMENTARIOS

El método es aplicado a un gran número de reacciones, ya sean reversibles o irreversibles e inclusive cinéticas no lineales y su aplicación es una alternativa muy atractiva en el análisis de reactores químicos sustentada en los modernos programas de computación, y es una alternativa al método gráfico directo el cual es usado cuando no se conoce la cinética de la reacción 5.

REFERENCIAS

- 1.- J.P. Guyot, "Introducción a la Microbiología de los Digestores Anaerobios", IMP (México, D.F., 1992).
- 2.- S. Cizinská et. al., J. Chem. Tech. Biotechnol., 55, 33-38 (1992).
- 3.- O. Levenspiel, "The Chemical Reactor Omnibook" Oregon State University (1979).
- 4.- O. Levenspiel, "Ingeniería de las reacciones químicas", Ed. Reverté, Barcelona (1978).
- 5.- J. Medina, Inv. y Ciencia No. 9, 54 - 58 (Agosto 1993).

NOMENCLATURAS

- Fs = Flujo volumétrico del líquido, l/h.
- mi = Masa del biocatalizador en base seca en el reactor i, Kg.
- Cs = Concentración del sustrato a eliminar en el agua residual, mg/l.
- Kd = Constante global de velocidad de descomposición.
- Xsi = Índice de descomposición del sustrato en el reactor i, (Cso - Cs)/Cs.
- n = orden de la velocidad de descomposición.

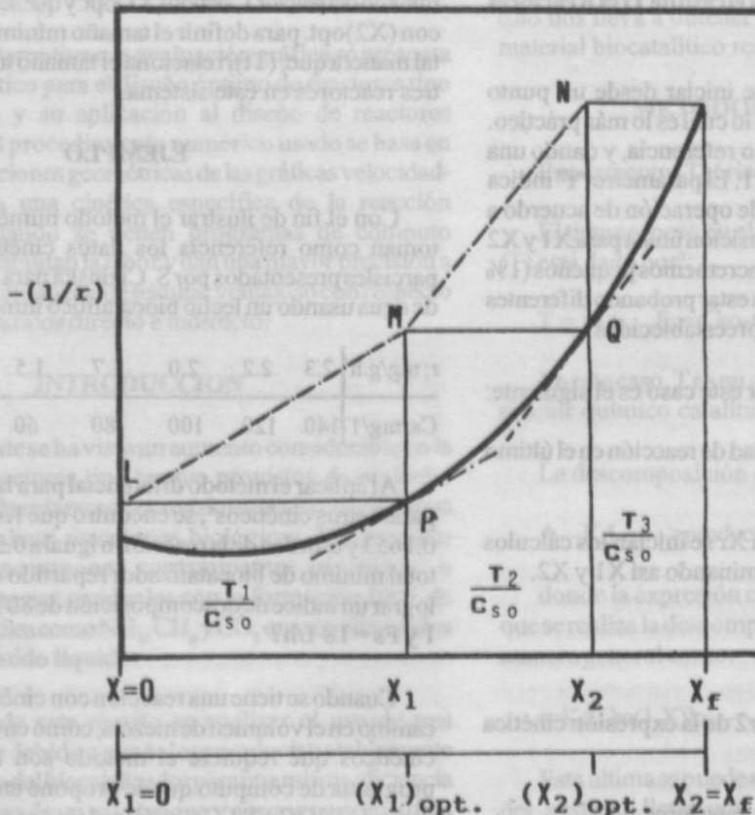


Figura 1.- Gráfica típica (1/r) vs. X que muestra la optimización de tres reactores en serie.

```

/*****
* PROGRAMA * OPTIMIZACION DE REACTORES *
* ARCHIVO * BIOCAT3.C *
* AUTOR * JORGE MEDINA *
* FUNCION * El programa optimiza el peso de biocatalizador *
* * en tres reactores tipo tanque puestos en serie *
* * El programa necesita los datos cineticos de la *
* * la reaccion bioquimica en particular. *
*****/
#include<stdio.h>
#include<math.h>
#include<conio.h>
#include<stdlib.h>
main()
{
float cinet(float x, float c1, float n, float cs, float kd, float r);
float xf, c1, f1, k1, k2, x01, x02, cs, x, r, rf, v, xr1;
float xr2, x1, x2, r1, r2, z[100], m1, m2, m3, n, kd, m;
int i;
/***** ENTRADA DE DATOS *****/
clrscr();
printf("\n----- DATOS CINETICOS -----");
printf("\n Dame los datos cineticos (con espacios) de la reaccion:");
printf("\n aA <=> productos ;con cinetica: -r=k1Cs^n");
printf("\n Xf(en %), Cso(mg/l), Fao(l/hr) ");
scanf("%f%f%f", &xf, &c1, &f1);
printf("\n Dame la constante Kd y el orden de la reaccion n: ");
scanf("%f%f", &kd, &n);
/***** INICIO DE LAS ITERACIONES PARA TRES REACTORES *****/
xr1=xf/2;
for (i=0; i<100; i++) {
if(i<=0) {
x=xf;
r=cinet(x, c1, kd, cs, n, r);
rf=r; z[0]=5000;
}
else {
x1=xr1-i; x=x1;
r=cinet(x, c1, kd, cs, n, r);
r1=r; x1=x; x2=xr1+i; x=x2;
}
}
}
}

```


----- DATOS CINETICOS -----

Dame los datos cineticos (con espacios) de la reaccion:
 aA <=> productos ; con cinetica: $-r=k_1C_s^n$
 Xf(en %), Cso(mg/l), Fao(l/hr) 80 22.5 18

Dame la constante Kd y el orden de la reaccion n:
 0.1653 0.55

```
*****
----RESULTADOS DE LA OPTIMIZACION----
*--> x1(optima) es:0.240000
    El peso del lecho biocatalitico (gr)
    en el reactor 1 es:122.496338
    El no. de iteraciones=17
-----
*--> x2(optima) es:0.590000
    El peso del lecho biocatalitico (gr)
    en el reactor 2 es:256.104279
-----
El peso del lecho biocatalitico (gr)
en el reactor 3 es:224.975220
-----
El peso minimo de biocatalizador (gr):603.575806
Iteraciones adicionales=4
```

La investigación que realizó con el doctor Urdín, se inició a determinar la base teórica del impuesto al Valor Agregado, en base a una metodología de tipo económico. Interactuó con las investigaciones externas muy laboriosas, pues el hecho de que el impuesto tenga distintos tipos (incluidas excepciones) hace que la estimación tenga que ajustarse a nivel de tasas en las cuentas nacionales.

Tuvo la oportunidad de exponer dichos resultados en un congreso realizado a finales del mes de agosto en Mérida, Puebla, entre los demás participantes del evento.

Como conclusión podría decir que fue una experiencia muy satisfactoria, que generó conocimientos y oportunidades de trabajar con investigadores de alto nivel, de alto nivel académico y valioso en el fortalecimiento económico.

Por último me permito hacer una invitación a todo aquel miembro de la comunidad estudiantil de la Universidad Autónoma de Aguascalientes, que se interesa por la investigación científica, en aprovechar este tipo de eventos, puesto que da la oportunidad de aprender y conocer de primera mano más acerca del mundo científico, además de la satisfacción de trabajar al lado de los mejores investigadores del país.

RICARDO RODRIGUEZ VARGAS
 Estudiante del 2º Semestre de
 I.E.C. en Economía

A los estudiantes de economía, la carrera más fascinante y vocación por la investigación científica; ya que la economía es una ciencia dinámica, que se caracteriza por un proceso continuo de apariciones de nuevas teorías que sustituyen a aquellas que ya no son capaces de explicar la realidad, de aquí surge un imperativo de adaptación en el campo de la investigación.

A través de ciertos pagados en los modelos de (Unidad) Universitaria, me enteré de la existencia de un programa mediante el cual yo podía realizar mis investigaciones de los trabajos de investigación científica, los cuales se realizaban desde 1990 con apoyo del CONAHC y de la Academia de la Investigación Científica. Después de el otorgamiento de 200 pesos a nivel nacional, dirigidos a estudiantes de licenciatura, para que éstos convivieran con los investigadores más reconocidos del país durante dos meses y conocer sus experiencias de trabajo, además de realizar un trabajo propio relacionado con ellos, que se expone al finalizar el verano en un congreso, todo esto con el fin de fortalecer el programa.

Una vez que solicité la inscripción sobre la mencionada oportunidad para participar en dicho evento, me fue asignado un tema de investigación, en el cual incluía una constante de calificación, una carta de recomendación de un profesor-investigador (en mi caso el M.C.2. Arturo Razo Vázquez, catedrático e investigador del departamento de Economía, fin que me dio la carta antes mencionada), luego una solicitud y además una carta de exposición de motivos por los cuales debía participar en el Verano de Investigación.

Las razones que expuse para participar fueron:

- 1) Trabajar al lado de uno de los mejores investigadores en la esfera económica.
- 2) Aprender cada vez más en este momento tan complejo como es la economía.
- 3) Desarrollar habilidades para resolver problemas y problemas por los cuales se vive la economía mexicana y proponer una posible solución.

Una vez que se recibió la documentación por parte del departamento de apoyo a la investigación, a finales del mes de febrero, se recibió el resultado de la selección y participación del mes de mayo obtuve una respuesta positiva por parte de la Academia de la Investigación Científica.

Para mi estancia en el verano de la investigación fui asignado a una institución de gran prestigio y nombre en