

2016

COMPARACIÓN DE DESEMPEÑO EN UN PROCESO DE DIGESTIÓN ANAEROBIA: MODELO SECUENCIAL VS NO SECUENCIAL

VICENCIO MORALES, DIEGO SEBASTIAN

<http://hdl.handle.net/11673/24370>

Repositorio Digital USM, UNIVERSIDAD TECNICA FEDERICO SANTA MARIA

Universidad Técnica Federico Santa María
Departamento de Matemática



**Comparación de desempeño en un
proceso de digestión anaerobia:
Modelo secuencial vs no secuencial**

por

Diego Sebastián Vicencio Morales

Tesis para optar al grado de

Magíster en Ciencias Mención Matemáticas

Valparaíso, Chile
Agosto, 2016

Universidad Técnica Federico Santa María
Departamento de Matemática
Valparaíso - Chile

TITULO DE LA TESIS:
**Comparación de desempeño en un proceso de digestión
anaerobia: Modelo secuencial vs no secuencial**

AUTOR:
Diego Sebastián Vicencio Morales

TRABAJO DE MAGISTER, presentado en cumplimiento parcial de los requisitos para el título de Magíster en Ciencias, Mención Matemática de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Prof. Dr. Pedro Gajardo _____
Profesor Guía

Valparaíso - Chile.
Marzo 2016.

Agradecimientos

En primer lugar, mis agradecimientos a Pedro Gajardo, quién con mucha paciencia y dedicación me ha apoyado en el desarrollo del presente trabajo, y sin su invaluable ayuda, esto no habría sido posible.

Gracias también a Andrés Donoso y a Matthieu Sebbah, quienes fueron también invaluableles en su constante apoyo para el desarrollo del presente trabajo.

Éste es mi segundo título en la Universidad Técnica Federico Santa María, mis agradecimientos a toda la Universidad en conjunto, y en particular, al Departamento de Matemática, que me aceptó para realizar este Magíster y al Departamento de Informática, mi departamento original en la Universidad.

Para mi familia, por sobre todo, a mis padres, invaluableles fuentes de apoyo, mis hermanos, mis tías, primos, sobrinos, cuyo sostén ha sido verdaderamente incalculable para lograr todo esto.

Resumen

El modelo de digestión anaerobia presenta interesantes perspectivas para el desarrollo de plantas de tratamiento de aguas, puesto que permite la recuperación de energía mediante producción de metano en la reacción. En el presente trabajo se comparan dos sistemas dinámicos que modelan diferentes configuraciones de biorreactores de digestión anaerobia, en estado estacionario, haciendo comparaciones en términos de escenarios de estabilidad, desempeño en descontaminación y producción de metano, estudio que permitirá determinar cuál es la mejor configuración de operación, dependiendo del objetivo que se desee alcanzar.

Índice general

Índice general	III
Índice de figuras	IV
Índice de cuadros	VIII
1. Introducción	1
2. Descripción del Modelo Simple	3
2.1. Escenarios de Operación	12
3. Descripción del Modelo Secuencial	31
3.1. Escenarios de Operación	39
4. Comparaciones de Condiciones de Coexistencia y Estabilidad	54
4.1. Condiciones de Coexistencia	54
4.1.1. Curva de nivel para $X_{M2S}^* \geq 0$ en el Modelo Secuencial .	57
4.1.2. Comparación entre la parametrización $(D(\theta), r(\theta))$ y el Modelo Simple	65
4.2. Condiciones de Estabilidad	67
4.2.1. Curva de nivel para Zonas de Estabilidad del Equilibrio de Coexistencia en el Modelo Secuencial	70
4.2.2. Comparaciones Cualitativas entre Zonas de Estabilidad .	74
5. Comparaciones de Desempeño en Descontaminación y Producción de Metano	75
5.1. Descontaminación	75
5.1.1. Resultados cuantitativos	79
5.2. Producción de Metano	80
5.2.1. Modelo Simple	81
5.2.2. Modelo Secuencial	82
5.2.3. Resultados Cuantitativos	83
5.3. Análisis con criterios asociados	87
5.3.1. Descontaminación bajo producción de metano óptima . .	87

5.3.2. Producción de Metano sobre áreas de estabilidad	88
6. Conclusiones Generales	91
6.1. Perspectivas de trabajo futuro	92
Bibliografía	94
7. Anexos	95
7.1. Enunciado de Teorema para Estabilidad Global	95
7.2. Enunciado del Teorema de Estabilidad para el Quimiostato Simple	97
7.3. Tabla de valores numéricos utilizados	100

Índice de figuras

2.1.	Tipos de configuración posibles de biorreactores	4
2.2.	Esquema de operación para el Modelo Simple	7
2.3.	Ejemplo de las diferencia entre escenarios III y IV. El diagrama de la izquierda muestra la situación del Escenario III, en cual solo el estado de coexistencia es alcanzable desde cada condición inicial distinta de cero. El gráfico de la derecha muestra la situación del Escenario IV, en el cual el washout del microorganismo metanogénico es alcanzable desde condiciones bajas, y en el cual el estado estacionario repulsivo E_4 es físicamente factible, pero inalcanzable.	11
2.4.	Diagrama que muestra la situación en el Escenario I. La zona blanca corresponde al Escenario I, en el cual, solo es posible alcanzar el washout de ambos microorganismos. El sector en amarillo, por lo tanto, corresponde a cuando al menos la existencia del microorganismo acidogénico está garantizada.	21
2.5.	Escenarios de operación en coexistencia para el Modelo Simple, representados en el plano (S_{AI_n}, D) . El área en amarillo corresponde al Escenario III, en el cual, coexistencia está garantizada desde cualquier condición inicial distinta de cero. El área verde corresponde al Escenario IV, en el cual, desde condiciones iniciales lo suficientemente bajas, washout del microorganismo metanogénico ocurrirá. Puede verse que mientras más crece el valor de S_{AI_n} , más grande el área correspondiente al Escenario IV es.	27
2.6.	Resumen con todos los escenarios. Las zonas en blanco corresponden al Escenario I. Las zonas en gris, corresponden al Escenario II. Las zonas en amarillo, corresponden al Escenario III, y las zonas en verde, al Escenario IV	29
3.1.	Esquema de operación para el Modelo Secuenciall	31

3.2. Diagrama mostrando las condiciones para el Escenario I, en el Modelo Secuencial, utilizando $r = 0,5$. El área en blanco corresponde al Escenario I. El área en amarillo corresponde a zonas donde la existencia del microorganismo acidogénico está garantizada. El área es claramente menor que el área correspondiente para el Modelo Simple, y puede probarse que esto es el caso para cualquier valor de r 44

3.3. Áreas correspondientes en el plano (D, r) a escenarios en el Modelo Secuencial, con $S_{AI n}$ fijo. El área en negro corresponde al Escenario I. El área en blanco corresponde al Escenario II. El área amarilla corresponde al Escenario III, coexistencia en condiciones seguras. El área verde corresponde a Escenario IV, coexistencia con riesgo de washout de microorganismo metanogénico. La condición en el diagrama de la izquierda es $S_{AI n} = 5(g/l)$, en la derecha es $S_{AI n} = 10(g/l)$. Puede verse que mientras mayor el valor de $S_{AI n}$, más área es cubierta por la correspondiente al Escenario IV. 50

4.1. Gráfica de la función $D(\theta)$ para $\theta \in [1, 1,2]$, con $S_{AI n} = 5(g/l)$. Se puede apreciar gráficamente la existencia de un valor máximo. 62

4.2. En ambas gráficas, el sector color cian representa las zonas donde es factible la coexistencia, es decir, $X_{M2S} > 0$. En el cuadro de la izquierda, tenemos un caso en que $\tau(1) < 0$, con $S_{AI n} = 1(g/l)$. A la derecha, tenemos, con $S_{AI n} = 3(g/l)$, un caso en que $\tau(1) > 0$. En dicho caso, la línea horizontal indica el valor de corte de $r(1)$, que nos indica el punto de partida de la curva $(D(\theta), r(\theta))$. Para valores de r por encima de dicha recta (marcado con la letra B), los valores de D estarán restringidos por la recta $\frac{D}{1-r} = \Lambda$ 65

4.3. La recta con pendiente negativa de color azul corresponde a $\frac{D}{1-r} = \Lambda$, la recta con pendiente positiva de color amarillo, corresponde a $\frac{D}{r} = \mu_{Amax}$. Su intersección corresponde a $D_{cota2} = \frac{\Lambda\mu_{Amax}}{\Lambda+\mu_{Amax}}$. Cuando la recta azul intersecta el eje horizontal, dicho valor corresponde a $D = \Lambda$. El área pintada en color cian corresponde a la zona donde es posible coexistencia para $S_{AI n} = 5(g/l)$. El contorno que está por debajo del área de coexistencia corresponde a la curva $(D(\theta), r(\theta))$. A medida que $S_{AI n}$ crece, el área color cian rellena todo el triángulo formado por las dos rectas. 67

4.4.	Distinción para zonas de estabilidad para $S_{AI_n} = 5(g/l)$ a la izquierda y $S_{AI_n} = 10(g/l)$ a la derecha. El sector color cyan (señalado con la letra A), corresponde a la zona de estabilidad global del equilibrio de coexistencia. El sector color amarillo (señalado con la letra B), corresponde a la zona de estabilidad local del equilibrio de coexistencia. La curva que separa estas dos áreas corresponde a la curva $(D(\theta), r(\theta))$ correspondiente a $X_{M2U}^* = 0$. Nótese como a medida que S_{AI_n} crece, el área de estabilidad global se hace menor.	73
4.5.	El gráfico de la izquierda nos muestra los escenarios de estabilidad para el Modelo Secuencial en el plano (S_{AI_n}, D) , con $r = 0,5$, junto con las del Modelo Simple a la derecha. Es notorio que las zonas de estabilidad global (correspondientes al Escenario III) son de menor tamaño que las indicadas para el Modelo Simple. .	74
5.1.	Gráfica de la función $Met(D)$ para $S_{AI_n} = 5(g/l)$. Se puede observar el aspecto cóncavo que tiene la función.	81
5.2.	Ejemplos de funciones de producción de metano para el Modelo Secuencial con $S_{AI_n} = 5(g/l)$. El gráfico de la izquierda nos muestra la producción de metano para la función $MetSec(D, r)$ dejando r fijo en 0,5. El gráfico de la derecha nos muestra a producción de metano para la función $MetSec(D, r)$, esta vez dejando D fijo en 0,1. Nótese en ambos casos la forma de aspecto cóncavo que tienen.	82
5.3.	Desempeño de producción de metano para $S_{AI_n} = 5(g/l)$ a la izquierda, y $S_{AI_n} = 10(g/l)$ a la derecha. Los sectores coloreados (en azul, cyan y amarillo) indican los valores de parámetros para los cuales hay coexistencia posible en estado estacionario. El área azul indica menor producción de metano para el Modelo Secuencial que en el Modelo Simple. El área en cyan indica mejor producción para el Modelo Secuencial para el valor de D correspondiente. El área en amarillo indica producción de metano para el Modelo Secuencial que es mejor que la alcanzada por el máximo alcanzado por el Modelo Simple.	86

- 5.4. Desempeño de producción de metano para $S_{AIn} = 4(g/l)$ a la izquierda, y $S_{AIn} = 5(g/l)$ a la derecha. Los sectores en amarillo, son sectores correspondientes al Escenario III, los sectores en verde, claro u oscuro, corresponden al Escenario IV. Los sectores que se ven en azul (marcados con un punto negro) corresponden a mejora por sobre el nivel establecido para la producción de metano dentro del Escenario III. Como se puede apreciar, para $S_{AIn} = 5(g/l)$ dicha área disminuye notablemente. 89

Índice de cuadros

2.1. Tabla Resumen de Estabilidad para los Escenarios de Operación del Modelo Simple	30
3.1. Tabla Resumen de Estabilidad para los Escenarios de Operación del Modelo Secuencial	53
5.1. Desempeño de descontaminación de sustrato acidogénico del Modelo Simple	79
5.2. Desempeño de descontaminación de sustrato metanogénico del Modelo Simple	79
5.3. Desempeño de descontaminación de sustrato acidogénico por el Modelo Secuencial	80
5.4. Desempeño de descontaminación de sustrato metanogénico por el Modelo Secuencial	80
5.5. Producción de metano para el Modelo Simple	83
5.6. Producción de metano para el Modelo Secuencial	84
5.7. Producción de metano para el Modelo Secuencial más rendimientos descontaminantes.	88
7.1. Constantes utilizadas para los modelos.	100

Capítulo 1

Introducción

La digestión anaerobia se ha vuelto un bioproceso ampliamente utilizado para obtener bioenergía de biomasa de segunda generación, haciéndolo uno de los procesos biotecnológicos más sustentables.

Como se hace usualmente para una bien establecida y consolidada tecnología, como la digestión anaerobia, el foco de actuales y futuras investigaciones está en maximizar su desempeño, en este caso, del reactor, (e.g. la producción de biogas), al evaluar diferentes configuraciones del reactor o diferentes condiciones de operación. En el caso de la digestión anaerobia, el modelo de tratamiento mesofílico es el sistema más utilizado [2]. Sin embargo, la separación del proceso en dos etapas, i.e. hidrolítica/acidogénica, seguida por una reacción metanogénica, ha mostrado interesantes resultados [4];[6]. La digestión anaerobia es un proceso complejo, compuesto de un gran número de microorganismos que llevan a cabo varias reacciones. Sin embargo, en el caso de agua de desecho, acidogenesis y metanogenesis son considerados los pasos claves de todo el proceso [3].

La práctica de modelamiento matemático es de principal importancia, puesto que permite representar el sistema bioquímico utilizando una serie de ecuaciones mecanicistas y fenomenológicas que describan el sistema. El modelo ADM1 de digestión anaerobia diseñado en [1] es la más cercana representación del proceso, que es perfecta para usarse como simulación, pero bastante compleja para su análisis matemático. De hecho, para su análisis matemático, así como para estrategias de control, aproximaciones más simples han sido usadas como se aprecia en [7], [10],[12]. Al momento de escribir la presente tesis, no se sabe sobre ningún estudio que haya sido publicado sobre el análisis matemático de una configuración en un reactor de digestión anaerobia, para compararlo con el desempeño de una sola unidad, o de dos etapas (acidogénica/metanogénica) de operación.

El modelo bioquímico descrito en [3] consiste de dos fases, como se mencionó, acidogénica y metanogénica, descrito de forma simplificada:



Es decir, el sustrato de entrada acidogénico S_A es consumido por el microorganismo correspondiente X_A , que produce sustrato metanogénico S_M , que en la segunda fase, es consumido por el organismo metanogénico X_M , produciendo metano. La reacción descrita también produce dióxido de carbono en sus dos fases, sin embargo, dicha producción no será tomada en cuenta para el presente trabajo.

El objetivo de este trabajo es analizar dos diferentes configuraciones para los biorreactores, con el objetivo de comparar sus desempeños, en estado estacionario, en términos de estabilidad, capacidad de descontaminación y producción de metano. Basados en el modelo introducido en [3], las configuraciones consideradas son: (i) Procesos de acidogénesis y metanogénesis en un solo reactor (Modelo Simple de aquí en adelante); (ii) Separación de los tratamientos de acidogénesis y metanogénesis en dos biorreactores conectados secuencialmente (Modelo Secuencial de aquí en adelante).

Capítulo 2

Descripción del Modelo Simple

La primera configuración estudiada, correspondiendo directamente al modelo presentado en [3], es lo que es referido durante este trabajo como "Modelo Simple", que consiste en la estructura en la cual ambos microorganismos (acidogénico y metanogénico), comparten un solo reactor. En este modelo, las variables principales a considerar para el análisis son D , la tasa de dilución y S_{AIn} , la concentración de sustrato acidogénico entrante. La concentración entrante de sustrato metanogénico en el influente es considerada despreciable, así que no es considerada para este modelo. A continuación se plantearán definiciones generales, y se deducirá el modelo presentado en [3] a partir de las ecuaciones correspondientes a los equilibrios de masa en el modelo.

Deducción del Modelo

Un biorreactor es un recipiente o sistema en el que se mantiene un ambiente biológicamente activo. En algunos casos, consiste en un recipiente en el cual se lleva a cabo un proceso químico que involucra organismos o sustancias bioquímicamente derivadas de dichos organismos. Estos procesos pueden ser aeróbicos o anaeróbicos, es decir, en presencia o ausencia de oxígeno.

Considerando los flujos de entrada y salida, se determina que el modelo de biorreactor considerado en el presente trabajo corresponde a una configuración de reactor de tipo continuo o llamado Quimiostato, en el cual el reactor posee tanto un flujo de líquido de entrada (Q_{in}) al reactor así como un flujo de salida (Q_{out}), a contrario de otras configuraciones posibles de biorreactor, como tipo batch, en que el cultivo no tiene flujo entrante ni saliente, o del tipo fed-batch donde no hay flujo saliente. En una operación a modo continuo se considera, además, que la magnitud de flujo de líquido de entrada es igual a la magnitud de líquido de salida.

De esta forma, para modelar la dinámica de sustrato y población acidogénicos, el sistema de ecuaciones diferenciales que describe su dinámica se puede

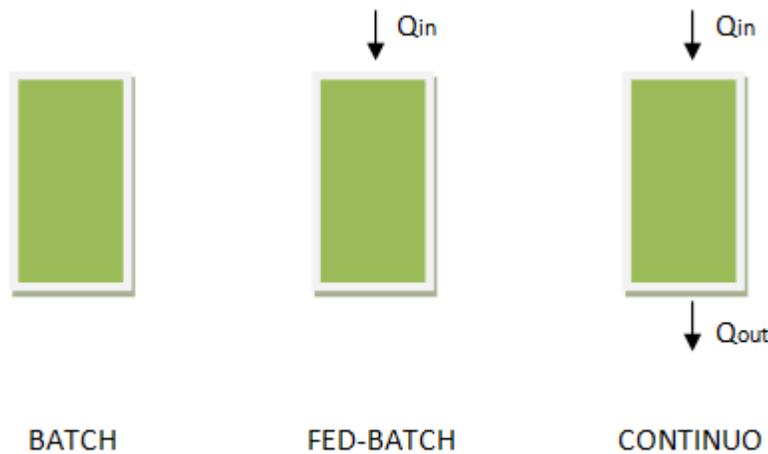


Figura 2.1: Tipos de configuración posibles de biorreactores

deducir a partir del principio de conservación de masa. Considerando un biorreactor con volumen de líquido V en su interior y concentración de población de microorganismo acidogénico X_A , que consume sustrato acidogénico, cuya concentración en el reactor se denomina S_A , que ingresa en el reactor con caudal de flujo de agua Q_{in} , y concentración entrante S_{Ain} , y el reactor tiene caudal de flujo de líquido de salida es Q_{out} . Tomando como hipótesis adicionales además:

- El recipiente se encuentra perfectamente mezclado en el medio acuoso con densidad constante, estando de esta forma los microorganismos y el sustrato uniformemente distribuidos en la solución, sin alterar la densidad de la solución acuosa.
- El consumo de sustrato es proporcional a la cantidad de microorganismos, es decir, sigue la condición: consumo = $k_1\mu_A(S_A)X_AV$ donde $\mu_A(\cdot)$ es la función de crecimiento de los microorganismos, que es mayor o igual que cero, siendo cero solo en el caso $S_A = 0$, y k_1 es un parámetro positivo de rendimiento.
- El crecimiento de los microorganismos es proporcional al consumo de sustrato.

Tomando en cuenta esas condiciones, se pueden establecer las siguientes ecuaciones diferenciales para el sistema, primero para el volumen de líquido en el reactor:

$$\dot{V} = Q_{in} - Q_{out}$$

La ecuación correspondiente para la masa de microorganismo acidogénico en el reactor:

$$(X_A \dot{V}) = \mu_A(S_A)X_A V - Q_{out}X_A,$$

donde el termino positivo corresponde a la tasa de crecimiento del microorganismo por consumo de sustrato, y el término negativo corresponde al decrecimiento causado por el flujo de líquido saliente del reactor.

Finalmente, para la masa de sustrato en el reactor se obtiene la ecuación:

$$(S_A \dot{V}) = -k_1 \mu_A(S_A)X_A + Q_{in}S_{AI n} - Q_{out}S_A,$$

donde el primer término negativo representa el consumo de sustrato por el microorganismo acidogénico, el segundo término que es positivo corresponde al crecimiento por flujo entrante de sustrato acidogénico, y el tercer término corresponde al decrecimiento causado por el flujo de líquido saliente del reactor.

Resumiendo todas las unidades del sistema, donde g corresponde a gramos, l corresponde a litros y d corresponde a día, se tiene:

- V : Volumen de agua del reactor (l).
- X_A : Concentración de población de microorganismo acidogénico (g/l).
- $X_A V$: Masa de población de microorganismo acidogénico (g).
- S_A : Concentración de sustrato acidogenico (g/l).
- $S_A V$: Masa de sustrato acidogénico (g).
- Q_{in} : Flujo de agua entrante en el reactor (l/d).
- Q_{out} : Flujo de agua saliente del reactor (l/d).
- k_1 : Tasa de cesión de consumo para sustrato acidogénico.
- $\mu_A(\cdot)$: Función de crecimiento para microorganismo acidogénico (d^{-1}).

y la función de crecimiento corresponde a una función de tipo Monod, de la forma:

$$\mu_A(S) = \mu_{Amax} \frac{S}{K_{SA} + S}$$

con sus correspondientes constantes:

- μ_{Amax} : Máxima tasa de crecimiento para microorganismo acidogénico (d^{-1}).
- K_{SA} : Constante de saturación para el microorganismo acidogénico (g/l).

Ya que se considera una operación en modo continuo: $Q_{in} = Q_{out} = Q$, de lo que se deduce:

$$\begin{aligned}\dot{X}_A V &= \mu_A(S_A) X_A V - Q X_A \\ \dot{S}_A V &= -k_1 \mu_A(S_A) X_M + Q(S_{AIn} - S_A) \\ \dot{V} &= 0\end{aligned}$$

es decir, V es constante. Dividiendo por V las ecuaciones, y definiendo la tasa de dilución $D = \frac{Q}{V}$ con unidad d^{-1} se deduce que:

$$\begin{aligned}\dot{X}_A &= \mu_A(S_A) X_A - D X_A \\ \dot{S}_A &= -k_1 \mu_A(S_A) X_M + D(S_{AIn} - S_A)\end{aligned}$$

Análogamente, para las fórmulas correspondientes al sustrato y población metanogénicas (S_M y X_M respectivamente), se puede hacer una deducción equivalente a la realizada anteriormente para la población y sustrato acidogénicos, con la salvedad de considerar que en este caso la concentración de sustrato metanogénico crecerá a partir de la producción realizada por el microorganismo acidogénico con tasa $k_2 \mu_A(S_A) X_A V$, donde k_2 es un parámetro de rendimiento para la producción del sustrato metanogénico, y no se considerará entrada de sustrato metanogénico en el flujo de líquido entrante Q_{in} . Así, se plantean hipótesis equivalentes a la descripción anterior:

- Al estar el reactor perfectamente mezclado existe densidad uniforme de las concentraciones de sustrato y población metanogénica.
- El consumo de sustrato metanogénico es proporcional a la población de microorganismo metanogénico de la forma: consumo = $k_3 \mu_M(S_M) X_M V$, donde $\mu_M(\cdot)$ es la función de crecimiento del microorganismo metanogénico que es mayor o igual que cero y sólo es cero en el caso $S_M = 0$, y con k_3 siendo un parámetro de rendimiento.
- El crecimiento de los microorganismos es proporcional al consumo de sustrato.

De esta forma, se deduce el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\dot{V} = Q_{in} - Q_{out}$$

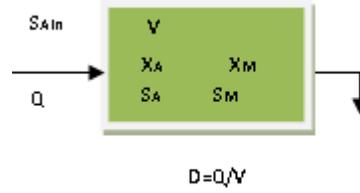


Figura 2.2: Esquema de operación para el Modelo Simple

$$\dot{(X_M V)} = \mu_M(S_M)X_M V - Q_{out}X_M$$

$$\dot{(S_M V)} = k_2\mu_A(S_A)X_A V - k_3\mu_M(S_M)X_M V - Q_{out}S_M$$

donde, resumiendo una vez más las variables:

- $X_M V$: Masa de población de microorganismo metanogénico (g).
- X_M : Concentración de población de microorganismo metanogénico (g/l).
- $S_M V$: Masa de sustrato acidogénico ($mmol$).
- S_M : Concentración de sustrato metanogénico ($mmol/l$).
- k_2 : Tasa de conversión de sustrato aciogénico a metanogénico ($mmol/g$).
- k_3 : Tasa de cesión de consumo para sustrato metanogénico ($mmol/g$).
- $\mu_M(\cdot)$: Función de crecimiento para microorganismo metanogénico (d^{-1}).

Y donde la función de crecimiento es de tipo Haldane, de la forma:

$$\mu_M(S) = \mu_{Mmax} \frac{S}{K_{SM} + S + \frac{S^2}{K_{IM}}}$$

- μ_{Mmax} : Máxima tasa de crecimiento para microorganismo metanogénico (d^{-1}).
- K_{SM} : Constante de saturación para el microorganismo metanogénico ($mmol/l$).
- K_{IM} : Constante de inhibición para el microorganismo metanogénico ($mmol/l$).

Además, al ser una operación en modo continuo, se tiene que $Q_{in} = Q_{out} = Q$, y se obtiene:

$$\dot{X}_M V = \mu_M(S_M)X_M V - QX_M$$

$$(S_M \dot{V}) = k_2 \mu_A(S_A) X_A V - k_3 \mu_M(S_M) X_M V - Q S_M V$$

al dividir por V , las ecuaciones se obtiene entonces:

$$\begin{aligned} \dot{X}_M &= \mu_M(S_M) X_M - D X_M \\ \dot{S}_M &= k_2 \mu_A(S_A) X_A - k_3 \mu_M(S_M) X_M - D S_M \end{aligned}$$

Por lo tanto, se obtiene el modelo tal como estaba presentado en [3] que es:

$$\begin{aligned} \dot{X}_A &= \mu_A(S_A) X_A - D X_A \\ \dot{S}_A &= -k_1 \mu_A(S_A) X_A + D(S_{AIn} - S_A) \\ \dot{X}_M &= \mu_M(S_M) X_M - D X_M \\ \dot{S}_M &= k_2 \mu_A(S_A) X_A - k_3 \mu_M(S_M) X_M - D S_M \end{aligned}$$

Estados Estacionarios

En la presente sección, se analizarán los estados estacionarios del modelo, que se obtienen a partir de igualar a cero las ecuaciones del sistema dinámico propuesto.

Primero, las variables acidogénicas, que están desacopladas del resto del sistema, constituyen un modelo de Quimiostato Simple [11], por lo tanto, sus estados estacionarios corresponden o bien al estado en que el microorganismo es eliminado del sistema (a esto se le denomina washout), o bien a la sobrevivencia del microorganismo:

$$\begin{aligned} \dot{X}_A &= \mu_A(S_A) X_A - D X_A \\ \dot{S}_A &= -k_1 \mu_A(S_A) X_A + D(S_{AIn} - S_A). \end{aligned}$$

Al igualar a cero estas fórmulas, se obtienen los equilibrios. En el caso correspondiente al washout del microorganismo, se cumple:

$$X_A^* = 0 \quad S_A^* = S_{AIn}.$$

Por su parte, el equilibrio donde el microorganismo sobrevive se deduce a partir de:

$$D = \mu_A(S_A^*) = \mu_{Amax} \frac{S_A^*}{K_{SA} + S_A^*},$$

esta condición es necesaria en dicho equilibrio. Por lo tanto, resolviendo se deducen las fórmulas:

$$S_A^* = K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} - D}$$

$$X_A^* = \frac{1}{k_1} (S_{AIn} - S_A^*).$$

El caso metanogénico implica mayor complejidad, al depender su valor del equilibrio del caso acidogénico. En caso que se cumpla la condición $X_A^* = 0$, es apreciable que la función de sustrato acidogénico se comportará como un Quimiostato sin tener influente de entrada, y en dicho caso, las fórmulas de equilibrio para X_M^* e S_M^* serán ambas iguales a cero.

Ahora, recordemos que las ecuaciones para las variables metanogénicas son de la forma:

$$\dot{X}_M = \mu_M(S_M)X_M - DX_M$$

$$\dot{S}_M = k_2\mu_A(S_A)X_A - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M$$

En caso de existencia de microorganismo acidogénico, pero washout de microorganismo metanogénico, se cumplirá que:

$$X_M^* = 0 \quad S_M^* = k_2 X_A^*$$

Finalmente, en caso de coexistencia, la condición

$$D = \mu_M(S_M^*) = \mu_{Mmax} \frac{S_M^*}{K_{SM} + S_M^* + \frac{S_M^{*2}}{K_{IM}}}$$

es necesaria para dicho caso, que al ser reemplazada en el sistema, se despejan los equilibrios:

$$S_M^* = K_{IM} \frac{(\frac{\mu_{Mmax}}{D} - 1) \pm \sqrt{(1 - \frac{\mu_{Mmax}}{D})^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_M^* = \frac{1}{k_3} (k_2 X_A^* - S_M^*).$$

Puede apreciarse que estas fórmulas son ambiguas, dado el signo \pm , así, considerando sólo el signo negativo, se obtiene la siguiente fórmula:

$$S_{MS}^* = K_{IM} \frac{(\frac{\mu_{Mmax}}{D} - 1) - \sqrt{(1 - \frac{\mu_{Mmax}}{D})^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_{MS}^* = \frac{1}{k_3} (k_2 X_A^* - S_{MS}^*).$$

Y para el signo positivo, se obtiene la siguiente fórmula:

$$S_{MU}^* = K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}}{D} - 1\right) + \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}}{D}\right)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_{MU}^* = \frac{1}{k_3}(k_2 X_A^* - S_{MU}^*)$$

De esta forma, se han determinado los posibles estados estacionarios que el sistema posee. Será útil establecer la siguiente notación:

$$E_i = [X_A^*, X_M^*, S_A^*, S_M^*],$$

para cada posible estado estacionario alcanzable por el sistema. De esta forma, resumiendo lo planteado anteriormente, los posibles configuraciones en estado estacionario son cuatro:

$$E_1 = [0, 0, S_{AIn}, 0]$$

$$E_2 = [X_A^*, 0, S_A^*, k_2 X_A^*]$$

$$E_3 = [X_A^*, X_{MS}^*, S_A^*, S_{MS}^*]$$

$$E_4 = [X_A^*, X_{MU}^*, S_A^*, S_{MU}^*]$$

E_1 representa el estado de washout global, que es el caso en que ambos microorganismos son eliminados del sistema. E_2 corresponde al estado de washout del microorganismo metanogénico, pero no del microorganismo acidogénico. E_3 y E_4 son ambos escenarios de coexistencia, pero poseen diferentes condiciones de estabilidad, que serán estudiadas más adelante, dadas por la función de crecimiento Haldane correspondiente al organismo metanogénico.

Dados todos estos posibles estados estacionarios, hay cuatro escenarios posibles para el sistema, cada uno dependiendo de las concentraciones iniciales S_{AIn} , y de la tasa de dilución D . Se denomina **factible** a un equilibrio cuando las fórmulas de estado estacionario que tiene asociadas son mayores o iguales que cero, dado que los valores negativos carecen de sentido en el problema, y además, como se probará más adelante, estos valores no son factibles de ser alcanzados en la práctica, por lo que carecen de interés. Los escenarios de operación determinados para el problema son:

- **Escenario I:** Sólo E_1 es factible. En este escenario se demostrará que E_1 es alcanzado desde condiciones iniciales de X_M y X_A mayores o iguales a cero.

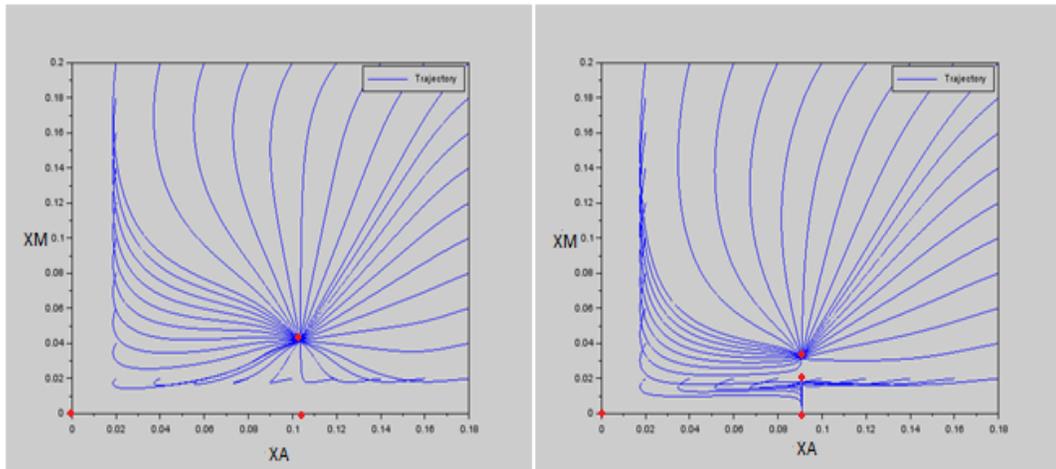


Figura 2.3: Ejemplo de las diferencia entre escenarios III y IV. El diagrama de la izquierda muestra la situación del Escenario III, en cual solo el estado de coexistencia es alcanzable desde cada condición inicial distinta de cero. El gráfico de la derecha muestra la situación del Escenario IV, en el cual el washout del microorganismo metanogénico es alcanzable desde condiciones bajas, y en el cual el estado estacionario repulsivo E_4 es físicamente factible, pero inalcanzable.

- **Escenario II:** Sólo E_1 y E_2 son factibles. En este escenario se demostrará que E_2 es alcanzado desde condiciones iniciales de X_M y X_A mayores que cero.
- **Escenario III:** Sólo E_1 , E_2 , E_3 son factibles. En este escenario se demostrará que E_3 es alcanzado desde condiciones iniciales de X_M y X_A mayores que cero.
- **Escenario IV:** Todos los estados estacionarios son factibles. En este escenario se demostrará que E_2 y E_3 , pueden ser alcanzados desde condiciones iniciales de X_M y X_A mayores que cero.

Lo que esto significa es que en los escenarios I y II hay washout de ambos microorganismos o del organismo metanogénico, por lo tanto no son considerados escenarios deseables. El Escenario III, se considera el escenario más seguro de operación, al ser sólo alcanzable E_3 , el equilibrio correspondiente a la coexistencia. El Escenario IV es peligroso, puesto que en este caso, se probará que E_2 y E_3 son alcanzables, por lo tanto, dadas ciertas condiciones iniciales, el sistema podría converger a washout del organismo metanogénico.

2.1. Escenarios de Operación

Preliminares

Antes de analizar en detalle los escenarios descritos, será útil presentar ciertos resultados y teoremas que serán utilizados más adelante.

Teorema 1. *Para condiciones iniciales no negativas, las variables de estado del modelo simple permanecen no negativas.*

Demostración. En efecto, dado que el modelo simple es de la forma:

$$\begin{aligned}\dot{X}_A &= \mu_A(S_A)X_A - DX_A \\ \dot{S}_A &= -k_1\mu_A(S_A)X_A + D(S_{AI_n} - S_A) \\ \dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= k_2\mu_A(S_A)X_A - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M\end{aligned}$$

para demostrar que valores menores de 0 son inalcanzables, se mostrará qué ocurre con la dinámica de cada variable al tener estas el valor 0.

Primero, nótese que:

$$\begin{aligned}\dot{X}_A|_{X_A=0} &= 0 \\ \dot{X}_M|_{X_M=0} &= 0\end{aligned}$$

de manera que, en caso que X_A y X_M tengan condiciones iniciales mayores que cero, eso implicará que $X_A(t) \geq 0$ y $X_M(t) \geq 0$, para cualquier t .

Por otra parte:

$$\begin{aligned}\dot{S}_A|_{S_A=0} &= DS_{AI_n} > 0 \\ \dot{S}_M|_{S_M=0} &= k_2\mu_A(S_A)X_A \geq 0\end{aligned}$$

lo que nuevamente implica que se tendrá que $S_A(t) \geq 0$, y $S_M(t) \geq 0$, para cualquier t , con lo que se demuestra que el modelo nunca adquiere valores negativos. ■

Teorema 2. *El conjunto ω -límite del Modelo Simple, definido como el conjunto donde las órbitas de un sistema dinámico tienden cuando $t \rightarrow \infty$, está dentro de un conjunto compacto.*

Demostración. Para demostrar este resultado, como ya se demostró que las variables de este modelo permanecen acotadas por debajo, será suficiente probar que también se encuentran acotadas superiormente. El modelo es:

$$\begin{aligned}\dot{X}_A &= \mu_A(S_A)X_A - DX_A \\ \dot{S}_A &= -k_1\mu_A(S_A)X_A + D(S_{AIn} - S_A) \\ \dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= k_2\mu_A(S_A)X_A - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M.\end{aligned}$$

Consideraremos las variables acidogénicas en primer lugar, que se encuentran desacopladas de las otras dos. Veremos a continuación que S_A se encuentra acotada. Notemos que la dinámica de la variable acidogénica es de la forma:

$$\dot{S}_A = -k_1\mu_A(S_A)X_A + D(S_{AIn} - S_A).$$

Haciendo el cambio de variable:

$$z = S_A - S_{AIn},$$

notamos que:

$$\dot{z} \leq -Dz.$$

Supongamos que existe $t^* \geq 0$ tal que:

$$z(t^*) \leq 0,$$

en dicho caso, dado que $\dot{z}|_{z=0} < 0$, tendremos que $z(t) \leq 0$ para todo $t \geq t^*$, y así se tendrá $S_A(t) \leq S_{AIn}$ para todo $t \geq t^*$.

Por otra parte, si es que para todo $t \geq 0$ se cumple que $z(t) > 0$, en dicho caso tenemos que:

$$\begin{aligned}\dot{z} &\leq -Dz < 0 \\ z(t) &\leq z(0)e^{-Dt},\end{aligned}$$

implicando:

$$z(t) \leq z(0).$$

En ambos casos, tendremos que S_A siempre se encuentra acotada superiormente.

Por su parte, para probar para la variable X_A se encuentra acotada superiormente, hacemos el cambio de variables:

$$z = k_1X_A + S_A - S_{AIn},$$

y observamos que esta variable se comporta de la forma:

$$\dot{z} = -Dz.$$

De esta manera, dado que S_A se encuentra acotada superiormente, y como podemos ver que z se encuentra acotada superiormente, podemos deducir a su vez que X_A se encuentra acotada superiormente.

A continuación se hará el análisis para las variables metanogénicas. El procedimiento a realizar, a semejanza de lo hecho anteriormente, será demostrar que S_M estará acotada superiormente, para a continuación demostrar que esto se cumple para ambas variables.

Primero que nada, se hará el cambio de variable:

$$z = S_M - k_2 X_A,$$

lo que implica que:

$$\dot{z} = -k_3 \mu_M(S_M) X_M - Dz,$$

es decir, se tiene que:

$$\dot{z} \leq -Dz.$$

Probaremos que z estará acotado superiormente, lo que implicará que S_M lo estará también. En efecto, supongamos que para algún $t^* \geq 0$, se cumple que $z(t^*) \leq 0$. Dado que en dicho caso se cumple que $\dot{z}|_{z=0} \leq 0$, se tendrá necesariamente que $z(t) \leq 0$, para todo $t \geq t^*$ por lo tanto $S_M \leq k_2 X_A$, concluyendo lo deseado, puesto que ya vimos anteriormente que X_A se encuentra acotado superiormente.

Por otra parte, asumiendo que $z > 0$ para todo t , se tendrá que:

$$\begin{aligned} \dot{z} &\leq -Dz \\ z &\leq z(0)e^{-Dt} \leq z(0) \end{aligned}$$

es decir, nuevamente, z estará acotado superiormente. De esta forma, en ambos casos se tiene que la variable z está acotada para todo t , lo que implica que S_M está acotada superiormente.

Finalmente, para la variable X_M , se utiliza el cambio de variable:

$$z = k_3 X_M + S_M - k_2 X_A$$

y resulta apreciable que esta variable también se comporta de la forma:

$$\dot{z} = -Dz,$$

y de manera análoga al caso anterior, podemos concluir que X_M está acotado superiormente y por lo tanto, todas las variables del Modelo Simple se encuentran acotadas inferior y superiormente. ■

Teorema 3. *Considere un modelo de Quimiostato Simple, de la forma:*

$$\begin{aligned}\dot{X} &= (\mu(S) - D)X \\ \dot{S} &= -k\mu(S)X + D(S_{In} - S),\end{aligned}$$

donde X y S corresponden a las concentraciones de microorganismo y sustrato respectivamente, $\mu(S)$ a la función de crecimiento, de tipo Monod o Haldane. Si se cumple la condición $D > \mu(S^+)$, donde:

$$S^+ = \arg \max_{S \in [0, S_{In}]} \mu(S)$$

entonces, para condiciones iniciales $S(0) \geq 0$ y $X(0) > 0$, el sistema converge globalmente asintóticamente estable al equilibrio $(0, S_{In})$, es decir, al washout del microorganismo.

Demostración. Para realizar esta demostración, tomaremos dos casos posibles. En primer lugar, supóngase que exista un t^* tal que $S(t^*) \leq S_{In}$, esto implicará que $S(t) \leq S_{In}$ para todo $t \geq t^*$. Para este caso, dado que S^+ corresponde al valor máximo alcanzado por la función de crecimiento en el intervalo $[0, S_{In}]$, tenemos que para la variable X se cumple:

$$\dot{X} = (\mu(S) - D)X \leq (\mu(S^+) - D)X \quad \forall t \geq t^*$$

Haciendo $D = \mu(S^+) + \epsilon$, quedará:

$$\dot{X} \leq (D - \epsilon - D)X = -\epsilon X \quad \forall t \geq t^*,$$

y esto claramente implica que:

$$X(t) \leq X(t^*)e^{-\epsilon(t-t^*)} \quad \forall t \geq t^*.$$

Es decir, $X(t)$ está dominada por una función que cuando $t \rightarrow \infty$, converge a 0, con lo cual se prueba que $X(t) \rightarrow 0$, cuando $t \rightarrow \infty$.

Respecto a S , se observa que haciendo el cambio de variable:

$$\begin{aligned}z &= S_{In} - kX - S \\ \dot{z} &= -Dz,\end{aligned}$$

por lo que z a su vez converge a 0 cuando $t \rightarrow \infty$, y de esta forma, es evidente notar que como $z \rightarrow 0$ y $X \rightarrow 0$, en dicho caso se debe cumplir que $S \rightarrow S_{In}$ cuando $t \rightarrow \infty$.

Ahora consideremos el caso que para todo $t \geq 0$ se cumpla $S(t) > S_{In}$. Notemos que si hacemos el cambio de variable $z = S - S_{In}$, se tendrá que:

$$\dot{z} \leq -Dz$$

donde $z(0) > 0$, y esto implica a su vez que cuando $t \rightarrow \infty$ se tendrá $z \rightarrow 0$, y por lo tanto $S \rightarrow S_{In}$.

Nuevamente, al hacer el cambio de variable:

$$z = S_{In} - kX - S$$

$$\dot{z} = -Dz.$$

se deduce $S_{In} - kX - S \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow \infty$, y como vimos $S \rightarrow S_{In}$ se concluye $X \rightarrow 0$. De ambas formas, el equilibrio $(0, S_{In})$ es alcanzado de forma global y asintóticamente estable para las condiciones iniciales indicadas. ■

Respecto a S^+ , si la función de crecimiento es Monod, en dicho caso, dado que la función es monótonamente creciente, se tiene que:

$$S^+ = S_{In}.$$

Por otra parte, en el caso de una función Haldane, el comportamiento será distinto, puesto que la función Haldane tiene un tramo donde es creciente, alcanza un máximo, y luego decrece hasta cero. En dicho caso, S^+ se encuentra definido de la forma:

$$S^+ = \begin{cases} S_{In} & S_{In} \leq S_{max} \\ S_{max} & S_{In} > S_{max} \end{cases}$$

donde S_{max} , corresponde al valor de sustrato en el cual la función Haldane alcanza su máximo valor.

Como se probó que el Modelo Simple tiene conjunto ω -límite dentro de un conjunto compacto, el siguiente teorema que se enunciará será particularmente útil a la hora de hacer demostraciones sobre estabilidad global.

Teorema 4. *Si se tiene un sistema $\dot{x} = f(t, x)$ asociado a un sistema $\dot{y} = g(y)$ por el límite $f(t, x) \rightarrow g(x)$, cuando $t \rightarrow \infty$, entonces, si es que se demuestra que el conjunto ω -límite del primer sistema se encuentra dentro de un conjunto compacto, entonces se puede deducir que el conjunto ω -límite de su sistema asociado también estará dentro de un conjunto compacto, y aún más, las soluciones de $\dot{x} = f(t, x)$ convergerán hacia las soluciones de $\dot{y} = g(y)$ cuando $t \rightarrow \infty$.*

La demostración de este teorema se encuentra en [8]. En los apéndices a este trabajo se encuentra el enunciado original. Para referirse de aquí en adelante, a un sistema $\dot{x} = f(t, x)$ cuyas trayectorias convergen cuando $t \rightarrow \infty$ a las trayectorias de $\dot{x} = g(x)$ se le denominará "sistema semiautónomo" y a g se le denominará su "sistema asociado".

A continuación se enunciará un teorema respecto a la estabilidad global en un Quimiostato Simple, sin embargo, se deberá hacer un comentario aclaratorio previo.

En un Quimiostato Simple con función de crecimiento Monod, existen dos posibles equilibrios: el washout del microorganismo, que ya fue analizado en el Teorema 3 y el equilibrio de existencia. En caso de tenerse $\mu(S^+) > D$, se puede probar que el equilibrio de existencia es localmente asintóticamente estable, al analizar los valores propios del jacobiano del modelo evaluado en el equilibrio de coexistencia.

En el Quimiostato Simple con función de crecimiento Haldane existen tres posibles equilibrios: el washout del microorganismo, y dos equilibrios de coexistencia, que los denominaremos (S_U^*, X_U^*) y (S_S^*, X_S^*) , en donde tendremos que $S_U^* \geq S_S^*$ y $X_S^* \geq X_U^*$. Suponiendo $\mu(S^+) > D$, y haciendo el análisis de estabilidad local para estos dos equilibrios, se puede probar que el equilibrio correspondiente a: (S_S^*, X_S^*) es localmente asintóticamente estable, y el equilibrio (S_U^*, X_U^*) corresponde a un punto silla.

A continuación se enunciará otro teorema, obtenido a partir de [11], que nos garantiza la estabilidad global en un Quimiostato Simple.

Teorema 5. *En un modelo de Quimiostato Simple, de la forma:*

$$\begin{aligned}\dot{X} &= (\mu(S) - D)X \\ \dot{S} &= -k\mu(S)X + D(S_{In} - S),\end{aligned}$$

se tiene que el equilibrio:

$$\begin{aligned}S^* &= \min\{S : \mu(S) = D\} \\ X^* &= \frac{1}{k}(S_{In} - S^*)\end{aligned}$$

es globalmente asintóticamente estable desde condiciones iniciales $X(0) > 0$ y $S(0) \geq 0$, cuando se cumple la condición:

$$D < \mu(S_{In}).$$

Demostración. En primer lugar, se observa que $D < \mu(S_{In})$ implica:

$$\{S : \mu(S) = D\} \neq \emptyset.$$

Para poder demostrar este resultado, se requerirá de un teorema adicional, que se encuentra enunciado en detalle en el apéndice de este trabajo, (ver la sección 7.2 del apéndice) y que se obtuvo en [11]. El Quimiostato Simple, tiene una propiedad que denominamos ser **disipativo**, es decir, sus trayectorias tienden a aproximarse hacia un conjunto que denominaremos Ω , y al entrar en dicho conjunto, las trayectorias permanecen dentro de él. Esto podemos apreciarlo a partir de la transformación:

$$\begin{aligned} z &= S_{In} - kX - S \\ \dot{z} &= -Dz \end{aligned}$$

que al hacer $t \rightarrow \infty$, tendremos que los límites de las variables X y S se encuentran dentro del conjunto $kX + S = S_{In}$. Respecto a este tipo de sistemas, el teorema enunciado en el apéndice F de [11] nos permite asegurar que si escribimos el modelo de la forma:

$$\begin{aligned} \dot{X} &= (\mu(S_{In} - z(t) - k_1X) - D)X \\ \dot{z} &= -Dz, \end{aligned} \tag{2.1}$$

donde z está restringido por: $S_{In} \geq z + kX$, y además $X > 0$. Luego, las trayectorias del modelo (2.1) tenderán a converger a las del modelo asociado al caso límite $z = 0$, es decir:

$$\dot{X} = (\mu(S_{In} - kX) - D)X, \tag{2.2}$$

donde, se tendrá que $S_{In} \geq kX$. Reduciendo el problema de esta forma a un problema unidimensional. Así, nos bastará probar que el equilibrio X^* bajo las condiciones enunciadas cumple:

$$\begin{aligned} \dot{X} &= f(X) \\ f(X^*) &= 0 \\ f(X) &< 0 \quad \forall X > X^*, X \in]0, S_{In}] \\ f(X) &> 0 \quad \forall X < X^*, X \in]0, S_{In}] \end{aligned}$$

bajo la condición $\mu(S_{In}) > D$.

Para el equilibrio X^* en el caso de la función Monod, esto es sencillo de verificar, puesto que la función $\mu(\cdot)$ es monótona creciente, lo que implica:

$$\mu(S_{In} - kX) < \mu(S_{In} - kX^*), \quad \forall X > X^*, X \in]0, S_{In}],$$

y como $\mu(S_{In} - kX^*) = D$, esto nos indica que la dinámica de la variable X se hará negativa en este caso, y respectivamente, se tendrá:

$$\mu(S_{In} - kX) > \mu(S_{In} - kX^*), \quad \forall X < X^*, X \in]0, S_{In},$$

implicando que la dinámica de la variable X se hará positiva para este caso. Así, queda demostrada la estabilidad global para el caso Monod.

El caso Haldane requiere analizarse con más cuidado, puesto que la función de crecimiento no es Monótona, sino que es una función que tiene un tramo inicial monótono creciente, alcanza un máximo, y luego decrece de forma monótona hasta cero. En el caso que se analiza, existen dos equilibrios, X_S^* y X_U^* , que cumplen:

$$(\mu(S_{In} - kX_S^*) - D) = 0$$

$$(\mu(S_{In} - kX_U^*) - D) = 0$$

donde $S_{In} - kX_U^* > S_{In} - k_1X_S^*$. De esta forma, podemos apreciar que el equilibrio X_S^* al evaluarse en $\mu(S_{In} - kX)$ se encuentra en la fase creciente, lo que implica a su vez que:

$$\mu(S_{In} - kX) - D < 0 \quad \forall X > X^*, X \in]0, S_{In}].$$

El caso para $X < X^*$ implica que $\mu(S_{In} - kX)$ puede encontrarse tanto en fase creciente, como en la decreciente de la función Haldane. Sin embargo, X no puede decrecer indefinidamente, puesto que recordemos que estamos asumiendo que $X > 0$, de esta forma, la cota para μ es $\mu(S_{In})$, que por hipótesis es mayor que D , así para todo valor de $X > 0$ se tendrá que la dinámica de X será positiva.

Por lo tanto, el comportamiento de $\mu(S_{In} - kX) - D$, para $X < X^*$, es que será positivo por todo el tramo que sea la función Haldane creciente, y al llegar al tramo decreciente, su valor decrecerá sin sobrepasar el límite $\mu(S_{In}) - D$ que es positivo. De esta forma, tenemos que la condición:

$$\mu(S_{In} - kX) - D > 0 \quad \forall X < X^*, X \in]0, S_{In}],$$

también se cumple para el caso Haldane, así, se demuestra que el equilibrio X^* para el sistema (2.2) es globalmente asintóticamente estable para las condiciones indicadas, y por lo tanto, lo es también para el sistema (2.1). ■

Como comentario final para cerrar esta sección, la restricción que se indicó para el caso Haldane en el Quimiostato Simple es equivalente a su vez a plantear la infactibilidad del equilibrio X_U^* . Es fácil verificar que cuando se cumple que $\mu(S_{In}) > D$ en el caso Haldane, en dicho caso se tendrá $X_U^* < 0$, lo que hace infactible dicho equilibrio.

Escenario I

Se recuerda que el Escenario I fue descrito como el escenario en el cual sólo el equilibrio E_1 es factible, lo que corresponde al washout de ambos microorganismos del sistema. En esta sección se enunciará la condición para este escenario, y posteriormente se estudiará la estabilidad del equilibrio E_1 bajo dicha condición.

Así, se enuncia que la condición para el Escenario I estará dada por:

$$D > \mu_A(S_{AI_n}) \quad (2.3)$$

que es la condición de washout para el microorganismo acidogénico. Veremos a continuación que esta condición implica que los escenarios II, III y IV son infactibles, dado que la expresión de X_A^* resulta arrojar un número negativo. Recordemos que los equilibrios de X_A y S_A que son distintos de $(0, S_{I_n})$ son de la forma:

$$S_A^* = K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} - D}$$

$$X_A^* = \frac{1}{k_1} (S_{AI_n} - S_A^*).$$

Con estas fórmulas, y recordando que $\mu_A(S_A^*) = D$ esto implica que la condición enunciada es equivalente a:

$$S_{AI_n} < S_A^*$$

que por su parte es equivalente a decir:

$$X_A^* = \frac{1}{k_1} (S_{AI_n} - S_A^*) < 0,$$

lo cual hace que los equilibrios $E_2 = [X_A^*, 0, S_A^*, k_2 X_A^*]$, $E_3 = [X_A^*, X_{MS}^*, S_A^*, S_{MS}^*]$ y $E_4 = [X_A^*, X_{MU}^*, S_A^*, S_{MU}^*]$ no sean factibles bajo la condición $D > \mu_A(S_{AI_n})$.

Estabilidad del equilibrio E_1 en el Escenario I

Se demostrará que el equilibrio $E_1 = [0, 0, S_{AI_n}, 0]$, correspondiente a washout de ambos microorganismos, es globalmente asintóticamente estable para cualquier condición inicial de población que sea mayor que cero, tal como sale enunciado en [9], utilizando los teoremas 3 y 4. Así, se plantea lo siguiente:

Proposición 1. *El equilibrio de washout global correspondiente a E_1 es global y asintóticamente estable bajo la condición del Escenario I correspondiente a $D > \mu_A(S_{AI_n})$, para condiciones iniciales de poblaciones de microorganismos y de sustratos mayores o iguales a cero.*

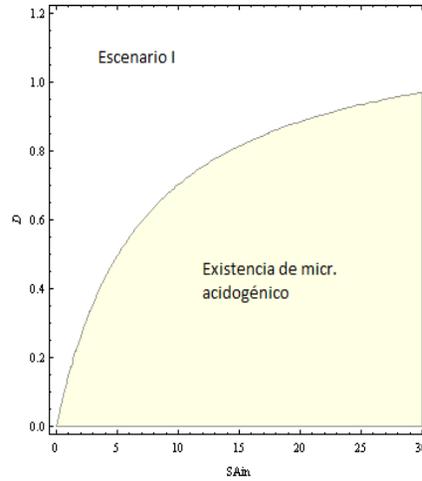


Figura 2.4: Diagrama que muestra la situación en el Escenario I. La zona blanca corresponde al Escenario I, en el cual, solo es posible alcanzar el washout de ambos microorganismos. El sector en amarillo, por lo tanto, corresponde a cuando al menos la existencia del microorganismo acidogénico está garantizada.

Demostración. Recuérdese que el modelo es de la forma:

$$\begin{aligned}\dot{X}_A &= \mu_A(S_A)X_A - DX_A \\ \dot{S}_A &= -k_1\mu_A(S_A)X_A + D(S_{AI n} - S_A) \\ \dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= k_2\mu_A(S_A)X_A - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M\end{aligned}$$

Primero que nada, se nota que si se cumple la condición $\mu_A(S_{AI n}) < D$ las variables X_A y S_A que se encuentran desacopladas de las otras, forman un Quimiostato Simple, y convergen de forma global y asintóticamente estable a 0 y $S_{AI n}$ respectivamente, gracias al Teorema 3.

Por lo visto anteriormente en el Teorema 2 sobre que el conjunto ω -límite se encuentra restringido dentro de un conjunto compacto, se podrá aplicar el Teorema 4 respecto a las variables restantes. En efecto, las variables metanogénicas se pueden escribir de forma semiautónoma:

$$\begin{aligned}\dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= k_2\mu_A(S_A(t))X_A(t) - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M\end{aligned}$$

que tiene como sistema asociado al hacer $t \rightarrow \infty$ en $S_A(t)$ y $X_A(t)$:

$$\begin{aligned}\dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= -k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M\end{aligned}$$

dado que $X_A \rightarrow 0$. Se puede apreciar en seguida que $\lim_{t \rightarrow \infty} S_M = 0$ dado que $\dot{S}_M \leq -DS_M$. Aparte, haciendo el cambio de variable $z = k_3X_M + S_M$ y viendo que su dinámica es:

$$\dot{z} = -Dz$$

Se aprecia que cuando $t \rightarrow \infty$, se cumplirá que $k_3X_M + S_M \rightarrow 0$. Como ni X_M ni S_M pueden ser menores que cero, por el Teorema 1, y dado que $S_M \rightarrow 0$, entonces se demuestra que necesariamente $X_M \rightarrow 0$ a su vez de forma global y asintóticamente estable en el sistema asociado, y por lo tanto, por el Teorema 4, esto también se cumple para el sistema semiautónomo, demostrando que bajo la condición del Escenario I, el equilibrio E_1 es global y asintóticamente estable para las condiciones iniciales enunciadas. ■

Escenario II

El Escenario II, se recuerda que fue definido como que los equilibrios E_1 y E_2 sean los únicos equilibrios factibles. Se aprecia que esto deberá implicar que las condiciones del Escenario I no se cumplan, lo que permitirá que el equilibrio $E_2 = [X_A^*, 0, S_A^*, k_2X_A^*]$, correspondiente a la sobrevivencia del microorganismo acidogénico y extinción del metanogénico, sea factible. Así, se verá que la relación principal que se debe cumplir para este escenario corresponde a:

$$\mu_A(S_{AI n}) > D > \mu_M(S^+)$$

donde:

$$S^+ = \begin{cases} k_2X_A^* & k_2X_A^* \leq S_{max} \\ S_{max} & k_2X_A^* > S_{max} \end{cases}$$

donde S_{max} , corresponde al valor de sustrato donde se alcanza el máximo de la función Haldane asociada a S_M . Se recuerda que X_A^* es de la forma:

$$\begin{aligned}X_A^* &= \frac{1}{k_1}(S_{AI n} - S_A^*) \\ S_A^* &= K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} - D}.\end{aligned}$$

De aquí en adelante se asumirá que la restricción $\mu_A(S_{AI n}) > D$ se cumple, con lo cual la condición del Escenario I no ocurre y nos centraremos en la

desigualdad $D > \mu_M(S^+)$, que implicará que el microorganismo metanogénico sea eliminado del sistema. En la demostración de la estabilidad del equilibrio de esta sección quedará explícito el motivo de la elección de S^+ .

Será útil además recordar las siguientes fórmulas de los equilibrios obtenidos a partir de hacer $\mu_M(S_M) = D$ que corresponden a:

$$X_{MS}^* = \frac{1}{k_3}(k_2 X_A^* - S_{MS}^*)$$

$$S_{MS}^* = K_{IM} \frac{(\frac{\mu_{Mmax}}{D} - 1) - \sqrt{(1 - \frac{\mu_{Mmax}}{D})^2 - 4 \frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_{MU}^* = \frac{1}{k_3}(k_2 X_A^* - S_{MU}^*)$$

$$S_{MU}^* = K_{IM} \frac{(\frac{\mu_{Mmax}}{D} - 1) + \sqrt{(1 - \frac{\mu_{Mmax}}{D})^2 - 4 \frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_A^* = \frac{1}{k_1}(S_{AIn} - S_A^*).$$

Se aprecia que $X_{MS}^* \geq X_{MU}^*$ y recordemos además que S_{MS}^* y S_{MU}^* se obtienen al despejar $D = \mu_M(S_{MS}^*) = \mu_M(S_{MU}^*)$. Se recuerdan estas fórmulas para indicar cómo las condiciones planteadas para este escenario harán no factibles los equilibrios E_3 y E_4 .

De esta forma, veremos las condiciones que determina S^+ para el washout del microorganismo metanogénico. Para $k_2 X_A^* \leq S_{max}$, la condición de washout corresponde a:

$$D > \mu_M(k_2 X_A^*), \quad (2.4)$$

que es equivalente a $D > \mu_M(\frac{k_2}{k_1}(S_{AIn} - S_A^*))$. Nuevamente, veremos que el cumplimiento de ésta condición implicará que los equilibrios E_3 y E_4 son infactibles, puesto que, por lo que vimos sobre S_{MS}^* , la condición (2.4) implicará que:

$$S_{MS}^* > \frac{k_2}{k_1}(S_{AIn} - S_A^*)$$

y así, despejando se deduce la condición:

$$S_{AIn} < S_A^* + \frac{k_1}{k_2} S_{MS}^*$$

que, por su parte, es equivalente a:

$$X_{MS}^* < 0.$$

Dado que $X_{MU}^* \leq X_{MS}^*$, esto implica que los equilibrios $E_3 = [X_A^*, X_{MS}^*, S_A^*, S_{MS}^*]$ y $E_4 = [X_A^*, X_{MU}^*, S_A^*, S_{MU}^*]$ son infactibles.

Ahora veremos la condición $D > \mu_M(S^+)$, para cuando $k_2 X_A^* > S_{max}$. En dicho caso, como se vio, la condición es sencillamente:

$$D > \mu_M(S_{max}). \quad (2.5)$$

A este valor $\mu_M(S_{max})$ se le denominará Λ , que es el valor correspondiente al máximo alcanzado por la función Haldane, y se puede probar fácilmente que corresponde a:

$$\Lambda = \mu_{Mmax} \frac{\sqrt{K_{IM}}}{\sqrt{K_{IM}} + 2\sqrt{K_{SM}}}$$

donde estos valores se obtienen a partir de la función de crecimiento Haldane:

$$\mu_M(S) = \mu_{Mmax} \frac{S}{K_{SM} + S + \frac{S^2}{K_{IM}}}.$$

Al sustituirse estos valores de $D > \Lambda$ en las fórmulas de S_{MS}^* , X_{MS}^* , S_{MU}^* , X_{MU}^* estas corresponderán a números complejos con parte imaginaria no nula, lo cual hará que los equilibrios $E_3 = [X_A^*, X_{MS}^*, S_A^*, S_{MS}^*]$ y $E_4 = [X_A^*, X_{MU}^*, S_A^*, S_{MU}^*]$ sean infactibles también bajo esta condición.

Estabilidad del equilibrio E_2 en el Escenario II

Nuevamente, el resultado presente en [9] nos asegura que el estado estacionario $E_2 = [X_A^*, 0, S_A^*, k_2 X_A^*]$, que representa la sobrevivencia del microorganismo acidogénico y el washout del microorganismo metanogénico, es globalmente asintóticamente estable desde condiciones iniciales para ambos microorganismos mayores cero, dadas las condiciones (2.4) y (2.5) anteriormente vistas. Esto se demostrará a continuación:

Proposición 2. *El equilibrio E_2 para condiciones iniciales distintas de 0 en ambos microorganismos, es globalmente asintóticamente estable para las condiciones enunciadas del Escenario II ($\mu_A(S_{AIn}) > D > \mu_M(S^+)$), y para condiciones iniciales para los microorganismos mayores que cero, y de sustratos mayores e iguales a cero.*

Demostración. Recuérdense una vez más el modelo:

$$\begin{aligned}\dot{X}_A &= \mu_A(S_A)X_A - DX_A \\ \dot{S}_A &= -k_1\mu_A(S_A)X_A + D(S_{AIn} - S_A) \\ \dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= k_2\mu_A(S_A)X_A - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M\end{aligned}$$

Las ecuaciones asociadas a X_A y S_A forman un modelo desacoplado de Quimiostato Simple. Considerando que se contempla el caso en que las condiciones de D permitan la sobrevivencia del microorganismo acidogénico en el reactor, se asume que la condición del (2.3) del Escenario I no se cumple, y por lo tanto se puede aplicar el Teorema 5, que garantiza la estabilidad global de los equilibrios X_A^* y S_A^* . Respecto a las ecuaciones asociadas a las variables metanogénicas, si se toma el subsistema semiautónomo:

$$\begin{aligned}\dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= k_2\mu_A(S_A(t))X_A(t) - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M\end{aligned}$$

Se aprecia que cuando se aplica $t \rightarrow \infty$ en $S_A(t)$ y $X_A(t)$ se obtiene el sistema asociado:

$$\begin{aligned}\dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= k_2DX_A^* - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M\end{aligned}$$

que es equivalente a un Quimiostato Simple con sustrato de entrada $k_2X_A^*$. La condición de washout en este caso para el microorganismo metanogénico es equivalente a:

$$D > \mu_M(S^+)$$

donde:

$$S^+ = \begin{cases} k_2X_A^* & k_2X_A^* \leq S_{max} \\ S_{max} & k_2X_A^* > S_{max} \end{cases}$$

que, como se ha visto por el Teorema 3, garantiza de forma global y asintóticamente estable el washout del sistema asociado, y se aprecia que estas condiciones corresponden a las fórmulas (2.4) y (2.5) del Escenario II descritas anteriormente. De esta forma, recordando que el conjunto ω -límite del modelo se encuentra dentro de un conjunto compacto, por el Teorema 2 y aplicando el Teorema 5, es posible garantizar la estabilidad global y asintóticamente estable para el equilibrio E_2 bajo las condiciones enunciadas. ■

Escenarios III y IV

En esta sección se analizarán los escenarios correspondientes a cuando las condiciones anteriormente indicadas de los escenarios I y II no se cumplen, es decir, cuando es posible la coexistencia. Se recuerda que el Escenario III corresponde a aquel en que sólo los equilibrios E_1 , E_2 y E_3 son factibles, y el Escenario IV corresponde a cuando todos los equilibrios son factibles. Ambos escenarios requieren que las condiciones enunciadas en los dos escenarios anteriores, no se cumplan, es decir:

$$\begin{aligned}\mu_A(S_{AIn}) &> D \\ \mu_M(S^+) &> D.\end{aligned}$$

Por otra parte, la distinción entre estos escenarios se obtiene a partir de la condición:

$$\mu_M(k_2 X_A^*) > D, \tag{2.6}$$

donde recordemos:

$$X_A^* = \frac{1}{k_1}(S_{AIn} - S_A^*).$$

Veremos que la condición (2.6) es equivalente a la infactibilidad del equilibrio correspondiente a E_4 .

Recordemos que $\mu_M(S_{MU}^*) = D$, y $\mu_M(S_{MU}^*)$ se encuentra en la fase decreciente de la función Haldane, así la condición (2.6) implica:

$$S_{MU}^* > k_2 X_A^*,$$

lo que a su vez implica:

$$X_{MU}^* = \frac{1}{k_3}(k_2 X_A^* - S_{MU}^*) < 0,$$

es decir, el equilibrio E_4 es infactible.

Si la condición (2.6) se cumple, en este caso el Escenario III toma lugar, y $E_3 = [X_A^*, X_{MS}^*, S_A^*, S_{MS}^*]$ es el único estado de coexistencia, el que se probará es asintóticamente globalmente estable desde cualquier condición inicial distinta de cero para ambos microorganismos, en concordancia con el resultado presentado en [9]. Si la condición (2.6) no se cumple, esto significa que el Escenario IV toma lugar, es decir, $E_4 = [X_A^*, X_{MU}^*, S_A^*, S_{MU}^*]$ es físicamente factible, pero corresponde a un punto silla, de modo que es inalcanzable en la práctica. De esta forma se verá que en dicha situación, desde casi todas las condiciones iniciales distintas de cero para ambos microorganismos se convergerá a E_2 o E_3 , y por lo tanto, existe riesgo de washout de microorganismo metanogénico cuando las condiciones iniciales son lo suficientemente bajas, como se indica en [9].

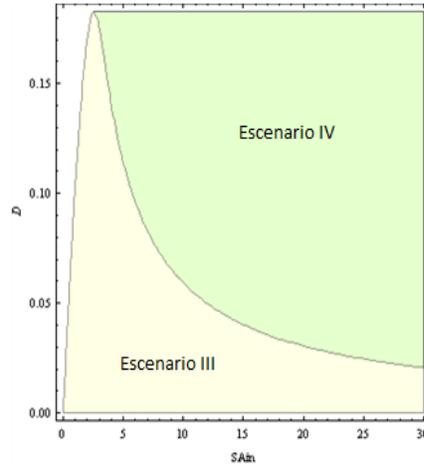


Figura 2.5: Escenarios de operación en coexistencia para el Modelo Simple, representados en el plano (S_{AI_n}, D) . El área en amarillo corresponde al Escenario III, en el cual, coexistencia está garantizada desde cualquier condición inicial distinta de cero. El área verde corresponde al Escenario IV, en el cual, desde condiciones iniciales lo suficientemente bajas, washout del microorganismo metanogénico ocurrirá. Puede verse que mientras más crece el valor de S_{AI_n} , más grande el área correspondiente al Escenario IV es.

Estabilidad del equilibrio E_3 en el Escenario III

Una vez más, el resultado presente en [9], nos garantiza la estabilidad global del equilibrio $E_3 = [X_A^*, X_{MS}^*, S_A^*, S_{MS}^*]$ bajo las condiciones enunciadas anteriormente. A continuación demostraremos este resultado:

Proposición 3. *Bajo las condiciones del Escenario III:*

$$\begin{aligned}\mu_A(S_{AI_n}) &> D \\ \mu_M(k_2 X_A^*) &> D,\end{aligned}$$

se cumple que $E_3 = [X_A^*, X_{MS}^*, S_A^*, S_{MS}^*]$, equilibrio de coexistencia, es globalmente asintóticamente estable desde condiciones iniciales de poblaciones mayores que cero y de sustratos mayores e iguales a cero.

Demostración. Recordando que el modelo es de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\dot{X}_A &= \mu_A(S_A)X_A - DX_A \\ \dot{S}_A &= -k_1\mu_A(S_A)X_A + D(S_{AI_n} - S_A) \\ \dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= k_2\mu_A(S_A)X_A - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M\end{aligned}$$

como ya se ha dicho, como X_A y S_A al estar desacopladas, convergerán de forma global y asintóticamente estable a la sobrevivencia del microorganismo bajo las condiciones que hemos planteado, de esta forma, se puede plantear el sistema semiautónomo para las variables metanogénicas:

$$\begin{aligned}\dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= k_2\mu_A(S_A(t))X_A(t) - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M\end{aligned}$$

Se aprecia que cuando se aplican los límites de $t \rightarrow \infty$ en $S_A(t)$ y $X_A(t)$ se obtendrá el sistema asociado:

$$\begin{aligned}\dot{X}_M &= \mu_M(S_M)X_M - DX_M \\ \dot{S}_M &= k_2DX_A^* - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M\end{aligned}$$

que por su parte, es un Quimiostato Simple con sustrato de entrada $k_2X_A^*$. Es sencillo notar que los equilibrios de coexistencia de este sistema corresponden justamente a $[X_{MS}^*, S_{MS}^*]$ y $[X_{MU}^*, S_{MU}^*]$, donde el primer equilibrio corresponde al localmente estable, y el segundo corresponde a un punto silla. En dicho caso, gracias al Teorema 5, si se cumple la condición $\mu_M(k_2X_A^*) > D$, se garantiza que el equilibrio de coexistencia estable $[X_{MS}^*, S_{MS}^*]$ es global y asintóticamente estable en este sistema asociado, y por lo tanto, para todo el modelo gracias al Teorema 4. ■

Para concluir, se aprecia además que no es posible garantizar estabilidad global cuando ambos X_{MS}^* y X_{MU}^* son mayores que cero, es decir, en el Escenario IV. En dicho caso, como se indica en [9], la estabilidad del equilibrio de coexistencia es sólo local, y para condiciones iniciales lo suficientemente bajas, es posible que se elimine el microorganismo metanogénico del sistema.

Bifurcaciones

Como hemos visto, cada uno de los escenarios presenta condiciones distintas de estabilidad para los equilibrios. Cada escenario, como hemos visto, se caracteriza por la entrada de un nuevo equilibrio en el cuadrante positivo, de esta manera haciéndose factible. Desde el punto de vista de la teoría de bifurcaciones, lo que está ocurriendo es que en la transición de un escenario a otro, está ocurriendo una bifurcación, lo que involucra cambios en la estabilidad del sistema. Las transiciones que ocurren son:

- **Escenario I al Escenario II** En esta transición el equilibrio E_1 correspondiente al washout global, se vuelve inestable en un plano, y le transpa

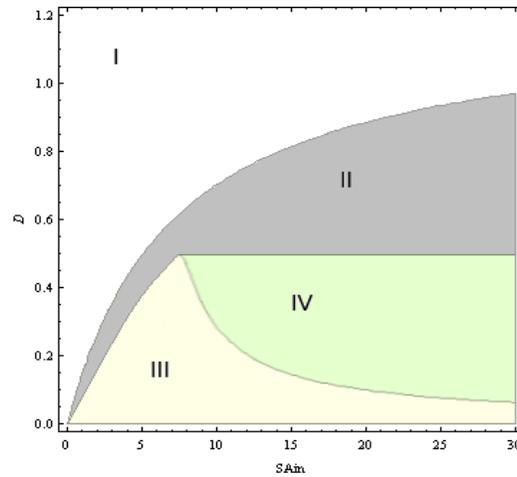


Figura 2.6: Resumen con todos los escenarios. Las zonas en blanco corresponden al Escenario I. Las zonas en gris, corresponden al Escenario II. Las zonas en amarillo, corresponden al Escenario III, y las zonas en verde, al Escenario IV

su estabilidad al equilibrio E_2 , que se vuelve globalmente estable desde condiciones iniciales de poblaciones mayores que cero. Esto constituye una bifurcación que se denomina transcítica.

- **Escenario II al Escenario III** En esta transición el equilibrio E_2 correspondiente al washout metanogénico se vuelve inestable en un plano, y le transpasa su estabilidad al equilibrio E_3 de coexistencia, que se vuelve globalmente estable desde condiciones iniciales de poblaciones mayores que cero. Esto constituye una bifurcación transcítica.
- **Escenario III al Escenario IV** En esta transición el equilibrio E_2 correspondiente al washout metanogénico, vuelve repulsor en un plano al equilibrio E_4 , y el equilibrio E_2 se vuelve localmente estable. Esto constituye una bifurcación transcítica.
- **Escenario IV al Escenario II** En esta transición los equilibrios de coexistencia se juntan en un solo equilibrio, que luego desaparece, quedando sólo el equilibrio E_2 que se vuelve globalmente estable para condiciones iniciales de poblaciones mayores que cero. Esto constituye una bifurcación denominada silla-nodo.

Las transiciones entre los escenarios pueden verse gráficamente en la figura 2.6.

Escenario	Condición para el Escenario	Condición de Estabilidad
Escenario I	$D > \mu_A(S_{AI_n})$	E_1 es globalmente asintóticamente estable.
Escenario II	$D < \mu_A(S_{AI_n})$ $D > \mu_M(S^+)$	E_2 es globalmente asintóticamente estable para condiciones iniciales de población mayores que cero.
Escenario III	$D < \mu_A(S_{AI_n})$ $D < \mu_M(S^+)$ $D < \mu_M(k_2 X_A^*)$	E_3 es globalmente asintóticamente estable para condiciones iniciales de población mayores que cero.
Escenario IV	$D < \mu_A(S_{AI_n})$ $D < \mu_M(S^+)$ $D > \mu_M(k_2 X_A^*)$	E_2 y E_3 son localmente asintóticamente estables para condiciones iniciales de población mayores que cero.

Cuadro 2.1: Tabla Resumen de Estabilidad para los Escenarios de Operación del Modelo Simple

Capítulo 3

Descripción del Modelo Secuencial

La configuración alternativa considerada, que consiste en el objeto principal de estudio de este trabajo, es la separación de los tratamientos de acidogénesis y metanogénesis en dos biorreactores conectados secuencialmente, en el cual ambos microorganismos están en diferentes reactores y aislados uno del otro, significando que no existe invasión de microorganismos entre los reactores. Esto puede lograrse mediante instalación de una membrana o unidad de filtración, de esta forma, cada reactor funcionará como Quimiostato aisladamente uno del otro. A continuación se realizará la deducción del Modelo Secuencial a partir de consideraciones de equilibrio de masa de la misma forma que fue realizada para el Modelo Simple.

Deducción del Modelo Secuencial

Se hará la deducción del modelo, primero para el primer reactor, que se asume tiene volumen de líquido V_1 , con flujo de líquido de entrada Q_{in} , en el cual la concentración de entrada de sustrato acidogénico entrante es: S_{Ain} , y flujo de líquido de salida Q_{out} . La concentración de sustrato acidogénico y sustrato

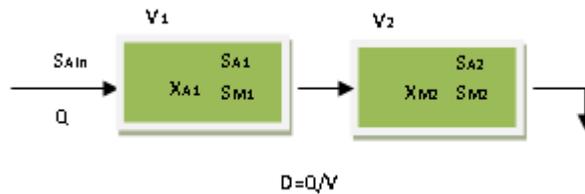


Figura 3.1: Esquema de operación para el Modelo Secuencial

metanogénico se denotan S_{A1} y S_{M1} respectivamente, y X_{A1} para la concentración de población acidogénica. Se recuerda que se toma como hipótesis que el sustrato metanogénico es producido totalmente en el reactor por la reacción acidogénica, sin considerar una concentración de entrada en el flujo entrante. Considerando las hipótesis:

- Al estar el reactor perfectamente mezclado, existe densidad uniforme de las concentraciones de ambos sustratos y de la población acidogénica.
- El consumo de sustrato acidogénico es proporcional a la población de microorganismo acidogénico de la forma: consumo = $k_1\mu_A(S_{A1})X_{A1}V_1$, donde $\mu_A(\cdot)$ es la función de crecimiento del microorganismo acidogénico que es mayor o igual que cero y sólo es cero en el caso $S_{A1} = 0$, y con k_1 siendo un parametro de rendimiento.
- La producción de sustrato metanogénico es proporcional también a la población de microorganismo acidogénico, de la forma: producción = $k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1}V_1$.
- El crecimiento de los microorganismos es proporcional al consumo de sustrato.

De esta forma, el modelo planteado para el primer reactor queda de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} (X_{A1}\dot{V}_1) &= \mu_A(S_{A1})(X_{A1}V_1) - Q_{out}X_{A1} \\ (S_{A1}\dot{V}_1) &= -k_1\mu_A(S_{A1})(X_{A1}V_1) + Q_{in}S_{A1in} - Q_{out}S_{A1} \\ (S_{M1}\dot{V}_1) &= k_2\mu_A(S_{A1})(X_{A1}V_1) - Q_{out}S_{M1} \\ \dot{V}_1 &= Q_{in} - Q_{out} \end{aligned}$$

donde las variables corresponden a:

- V_1 : Volumen de líquido en el reactor 1 (l).
- X_{A1} : Concentración de población de microorganismo acidogénico en el reactor 1 (g/l).
- $X_{A1}V_1$: Masa de población de microorganismo acidogénico en el reactor 1 (g).
- S_{A1} : Concentración de sustrato acidogénico en el reactor 1 (g/l).
- S_{M1} : Concentración de sustrato metanogénico en el reactor 1 ($mmol/l$).

- $S_{A1}V_1$: Masa de sustrato acidogénico en el reactor 1 (g).
- Q_{in} : Flujo de líquido entrante en el reactor 1 (l/d).
- Q_{out} : Flujo de líquido saliente del reactor 1 (l/d).
- k_1 : Tasa de cesión de consumo para sustrato acidogénico.
- k_2 : Tasa de conversión de sustrato acidogénico a metanogénico (mmol/g).
- $\mu_A(\cdot)$: Función de crecimiento para microorganismo acidogénico (d^{-1}).

y la función de crecimiento corresponde a una función de tipo Monod, de la forma:

$$\mu_A(S) = \mu_{Amax} \frac{S}{K_{SA} + S}$$

con sus correspondientes constantes:

- μ_{Amax} : Máxima tasa de crecimiento para microorganismo acidogénico (d^{-1}).
- K_{SA} : Constante de saturación para el microorganismo acidogénico (g/l).

Al estar considerando un modelo de reactor continuo, se cumple que $Q_{in} = Q_{out} = Q$, por lo tanto el volumen del líquido en el reactor 1 es constante, y el modelo queda de la forma:

$$\begin{aligned} \dot{X}_{A1}V_1 &= \mu_A(S_{A1})(X_{A1}V_1) - QX_{A1} \\ \dot{S}_{A1}V_1 &= -k_1\mu_A(S_{A1})(X_{A1}V_1) + Q(S_{A1n} - S_{A1}) \\ \dot{S}_{M1}V_1 &= k_2\mu_A(S_{A1})(X_{A1}V_1) - QS_{M1} \\ \dot{V}_1 &= 0 \end{aligned}$$

Finalmente, dividiendo por V_1 en las ecuaciones, y haciendo $D_1 = \frac{Q}{V_1}$, correspondiente a la tasa de dilución en el reactor 1, con unidad (d^{-1}) resulta:

$$\begin{aligned} \dot{X}_{A1} &= \mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1X_{A1} \\ \dot{S}_{A1} &= -k_1\mu_A(S_{A1})X_{A1} + D_1(S_{A1n} - S_{A1}) \\ \dot{S}_{M1} &= k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1S_{M1} \end{aligned}$$

Análogamente, se deduce el modelo para el segundo reactor. Considerando un volumen de líquido V_2 en el segundo reactor, con flujo de líquido entrante Q_{in} en el cual entran el sustrato acidogénico no consumido en la reacción anterior, cuya concentración es denotada por S_{A2} , y el sustrato metanogénico

producido por la reacción anterior, con concentración S_{M2} , y flujo de líquido de salida Q_{out} . El sustrato metanogénico, entonces, es consumido por el microorganismo metanogénico presente en el segundo reactor, con concentración X_{M2} , produciendo metano en dicha reacción. Considerando las hipótesis:

- Al estar el reactor perfectamente mezclado existe densidad uniforme de las concentraciones de ambos sustratos y de la población metanogénica.
- El consumo de sustrato metanogénico es proporcional a la población de microorganismo metanogénico de la forma: consumo = $k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2}V_2$, donde $\mu_M(\cdot)$ es la función de crecimiento del microorganismo metanogénico que es mayor o igual que cero y sólo es cero en el caso $S_{M2} = 0$, y con k_3 siendo un parametro de rendimiento.
- El crecimiento de los microorganismos es proporcional al consumo de sustrato.

así se puede plantear el siguiente sistema considerando los equilibrios de masas:

$$\begin{aligned}(X_{M2}\dot{V}_2) &= \mu_M(S_{M2})(X_{M2}V_2) - Q_{out}X_{M2} \\ (S_{M2}\dot{V}_2) &= -k_3\mu_M(S_{M2})(X_{M2}V_2) + Q_{in}S_{M1} - Q_{out}S_{M2} \\ (S_{A2}\dot{V}_2) &= Q_{in}S_{A1} - Q_{out}S_{A2} \\ \dot{V}_2 &= Q_{in} - Q_{out}\end{aligned}$$

en donde, resumiendo las variables:

- V_2 : Volumen de líquido en el reactor 2 (l).
- $X_{M2}V_2$: Masa de población de microorganismo metanogénico en el reactor 2 (g).
- X_{M2} : Concentración de población de microorganismo metanogénico en el reactor 2 (g/l).
- $X_{M2}V_2$: Masa de población de microorganismo metanogénico en el reactor 2 (g).
- S_{A2} : Concentración de sustrato acidogénico en el reactor 2 (g/l).
- $S_{M2}V_2$: Masa de sustrato metanogénico en el reactor 2 ($mmol$).
- S_{M2} : Concentración de sustrato metanogénico en el biorreactor 2 ($mmol/l$).
- k_3 : Tasa de cesión de consumo para sustrato metanogénico ($mmol/g$).

- Q_{in} : Flujo de líquido entrante al reactor 2 (l/d).
- Q_{out} : Flujo de líquido entrante al reactor 2 (l/d).

Y donde la función de crecimiento es de tipo Haldane, de la forma:

$$\mu_M(S) = \mu_{Mmax} \frac{S}{K_{SM} + S + \frac{S^2}{K_{IM}}}$$

Nuevamente, considerando que se encuentra en un modelo de reactor continuo, se cumple que $Q_{in} = Q_{out} = Q$, y por lo tanto, el volumen de líquido en el reactor 2 es constante, por lo tanto, el modelo queda de la forma:

$$\begin{aligned} X_{M2} \dot{V}_2 &= \mu_M(S_{M2})(X_{M2}V_2) - QX_{M2} \\ S_{M2} \dot{V}_2 &= -k_3\mu_M(S_{M2})(X_{M2}V_2) + Q(S_{M1} - S_{M2}) \\ S_{A2} \dot{V}_2 &= Q(S_{A1} - S_{A2}) \\ \dot{V}_2 &= 0 \end{aligned}$$

Así, al dividir todo por V_2 y definiendo $D_2 = \frac{Q}{V_2}$ como la dilución en el segundo reactor, con unidad (d^{-1}) resulta:

$$\begin{aligned} X_{M2} \dot{} &= \mu_M(S_{M2})X_{M2} - D_2X_{M2} \\ S_{M2} \dot{} &= -k_3\mu_M(S_{M2})(X_{M2} + D_2(S_{M1} - S_{M2})) \\ S_{A2} \dot{} &= D_2(S_{A1} - S_{A2}) \end{aligned}$$

Así, al juntar los modelos deducidos para ambos reactores, se obtiene el Modelo Secuencial:

$$\begin{aligned} X_{A1} \dot{} &= \mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1X_{A1} \\ S_{A1} \dot{} &= -k_1\mu_A(S_{A1})X_{A1} + D_1(S_{AIn} - S_{A1}) \\ S_{A2} \dot{} &= D_2(S_{A1} - S_{A2}) \\ X_{M2} \dot{} &= \mu_M(S_M)X_M - D_2X_M \\ S_{M1} \dot{} &= k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1S_{M1} \\ S_{M2} \dot{} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + D_2(S_{M1} - S_{M2}) \end{aligned}$$

En este modelo, en contraste con el anterior, existen dos diluciones D_1 y D_2 . A continuación se realizará un cambio de variable, a semejanza del trabajo presentado en [5], para en lugar de trabajar con dos tasas de dilución, se trabaje una variable de dilución y una variable que represente ratio entre volúmenes. Defínase V como el volumen total del sistema, es decir:

$$V = V_1 + V_2.$$

Y a su vez defínase r , correspondiente a la proporción de volumen total que le corresponde al primer reactor, es decir:

$$V_1 = rV.$$

Como $V_1 < V$, evidentemente $r \in]0, 1[$, y a su vez:

$$V_2 = (1 - r)V.$$

De esta forma, definiremos D , que se denominará como "dilución total del sistema", correspondiente a:

$$D = \frac{Q}{V}.$$

Considerando así que Q , el caudal de líquido entre los dos modelos es idéntico para ambos reactores, se tendrán:

$$D_1 = \frac{D}{r}$$

$$D_2 = \frac{D}{1 - r}$$

Reemplazando estos valores en el modelo, se enuncia entonces el Modelo Secuencial:

$$\begin{aligned} \dot{X}_{A1} &= \mu_A(S_{A1})X_{A1} - \frac{D}{r}X_{A1} \\ \dot{S}_{A1} &= -k_1\mu_{A1}(S_{A1})X_{A1} + \frac{D}{r}(S_{A1n} - S_{A1}) \\ \dot{S}_{A2} &= \frac{D}{1-r}(S_{A1} - S_{A2}) \\ \dot{X}_{M2} &= \mu_M(S_M)X_M - \frac{D}{1-r}X_M \\ \dot{S}_{M1} &= k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1} - \frac{D}{r}S_{M1} \\ \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + \frac{D}{1-r}(S_{M1} - S_{M2}) \end{aligned}$$

Estados Estacionarios

En la presente sección, se analizarán los estados estacionarios del modelo, que se obtienen a partir de igualar a cero las ecuaciones del sistema dinámico.

A semejanza de lo ocurrido en el Modelo Simple, las variables acidogénicas, que están desacopladas del resto del sistema, (S_{A1} y X_{A1}), constituyen un modelo de Quimiostato Simple, por lo tanto, sus estados estacionarios corresponden o bien al washout del sistema, o bien a la sobrevivencia del microorganismo.

El equilibrio correspondiente al washout del microorganismo es $X_{A1}^* = 0$, y $S_{A1}^* = S_{AIn}$, $S_{A2}^* = S_{A1}^*$. El equilibrio de sobrevivencia se obtiene a partir de $\frac{D}{r} = \mu_A(S_{A1}^*)$. Por lo tanto, resolviendo para dicha situación se deducen las fórmulas:

$$S_{A1}^* = K_{SA} \frac{D}{r\mu_{Amax} - \alpha D}$$

$$X_{A1}^* = \frac{1}{k_1}(S_{AIn} - S_{A1}^*)$$

$$S_{A2}^* = S_{A1}^*.$$

Es apreciable que en ambos casos, $S_{A2}^* = S_{A1}^*$, de modo que S_{A2}^* rara vez será considerado relevante para los análisis posteriores.

Respecto a las variables metanogénicas, lo mismo que en el Modelo Simple, sus equilibrios dependen de los valores del equilibrio del caso acidogénico. En caso que se cumpla $X_{A1}^* = 0$, es evidente que $S_{M1}^* = 0$, y al ser este valor la entrada para el sustrato del segundo reactor es apreciable que la función de sustrato acidogénico se comportará como un Quimiostato sin tener influente de entrada, y en dicho caso, las fórmulas de equilibrio para X_{M2}^* e S_{M2}^* serán ambas iguales a cero. En caso de existencia de microorganismo acidogénico, pero washout de microorganismo metanogénico, se cumplirá $X_{M1}^* = 0$ y $S_{M1}^* = k_2 X_{A1}^* = S_{M2}^*$. Finalmente, en caso de coexistencia, la ecuación para deducir el equilibrio es $\frac{D}{1-r} = \mu_M(S_{M2}^*)$, que al ser reemplazada en el sistema, se deducen las fórmulas:

$$S_{M1}^* = k_2 X_{A1}^*$$

$$S_{M2}^* = K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D} - 1\right) \pm \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D}\right)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_{M2}^* = \frac{1}{k_3}(k_2 X_{A1}^* - S_{M2}^*)$$

Se puede apreciar que S_{M1}^* es siempre proporcional a X_{A1}^* , de modo que, de la misma forma como se consideró para S_{A2}^* , no es considerado particularmente relevante para el estudio de los puntos de equilibrio. Respecto a S_{M2}^* y X_{M2}^* , se resuelve la naturaleza ambigua de estas fórmulas dada por el signo \pm , para el signo negativo, se obtienen los valores:

$$S_{M2S}^* = K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D} - 1\right) - \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D}\right)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_{M2S}^* = \frac{1}{k_3}(k_2 X_{A1}^* - S_{M2S}^*)$$

y las correspondientes fórmulas para el signo positivo:

$$S_{M2U}^* = K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D} - 1\right) - \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D}\right)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_{M2U}^* = \frac{1}{k_3} (k_2 X_{A1}^* - S_{M2U}^*)$$

que se demostrará posteriormente tienen comportamiento similar a sus análogos en el modelo simple en cuanto a sus condiciones de estabilidad.

Nuevamente, será útil identificar los posibles estados estacionarios mediante un vector E de la forma:

$$E_i = [X_{A1}^*, X_{M2}^*, S_{A1}^*, S_{M2}^*]$$

para cada estado estacionario alcanzable por el sistema. En el caso del Modelo Secuencial, las configuraciones posibles son:

$$E_1 = [0, 0, S_{AIn}, 0]$$

$$E_2 = [X_{A1}^*, 0, S_{A1}^*, k_2 X_{A1}^*]$$

$$E_3 = [X_{A1}^*, X_{M2S}^*, S_A^*, S_{M2S}^*]$$

$$E_4 = [X_{A1}^*, X_{M2U}^*, S_A^*, S_{M2U}^*]$$

En estos vectores, los equilibrios S_{A2}^* y S_{M1}^* no son considerados, por ser superfluos, como ya se indicó. Así como en el caso anterior, E_1 representa el estado de washout global, que es cuando ambos organismos son eliminados del sistema. E_2 representa el estado de washout del microorganismo acidogénico, pero no del metanogénico. E_3 y E_4 son ambos escenarios de coexistencia, pero, como se puede esperar dados los resultados para el Modelo Simple, difieren en su condición de estabilidad.

Dados estos posibles estados estacionarios, existen cuatro posibles escenarios para el sistema, cada uno de los cuales depende de la concentración de entrada S_{AIn} y de los valores del vector (D, r) . Estos escenarios son:

- **Escenario I:** Sólo E_1 es factible. En este escenario se demostrará que sólo E_1 es alcanzado desde cualquier condición inicial de X_{M2} y X_{A1} mayores o iguales a cero.

- **Escenario II:** Sólo E_1 y E_2 son factibles. En este escenario se demostrará que sólo E_2 es alcanzado desde condiciones iniciales de X_{M2} y X_{A1} ambas mayores que cero.
- **Escenario III:** Sólo E_1 , E_2 , E_3 son factibles. En este escenario se demostrará que sólo E_3 es alcanzado desde condiciones iniciales de X_{M2} y X_{A1} ambas mayores que cero.
- **Escenario IV:** Todos los estados estacionarios son factibles. En este escenario se mostrará que sólo E_2 y E_3 , pueden ser alcanzados desde condiciones iniciales de X_{M2} y X_{A1} ambas mayores que cero.

Así como se vio en el capítulo anterior, los Escenarios I y II corresponden al washout de algún microorganismo, o de ambos, así no son considerados escenarios deseables. El Escenario III se considera óptimo, puesto que la coexistencia está garantizada desde cualquier condición inicial no negativa, y el Escenario IV es considerado un estado peligroso, dado el riesgo de posible convergencia al washout del microorganismo metanogénico.

3.1. Escenarios de Operación

Preliminares

A continuación, se presentarán resultados preliminares, de la misma forma que se vio anteriormente para el Modelo Simple.

Teorema 6. *Para condiciones iniciales no negativas, las variables de estado del Modelo Secuencial permanecen no negativas.*

Demostración. En efecto, dado que el Modelo Secuencial es de la forma:

$$\begin{aligned}
 \dot{X}_{A1} &= \mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1X_{A1} \\
 \dot{S}_{A1} &= -k_1\mu_{A1}(S_{A1})X_{A1} + D_1(S_{A1n} - S_{A1}) \\
 \dot{S}_{A2} &= D_2(S_{A1} - S_{A2}) \\
 \dot{X}_{M2} &= \mu_M(S_M)X_M - D_2X_M \\
 \dot{S}_{M1} &= k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1S_{M1} \\
 \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + D_2(S_{M1} - S_{M2})
 \end{aligned}$$

para demostrar que valores menores de cero son inalcanzables, se mostrará qué ocurre en cada variable al reemplazar con cero la variable correspondiente.

Primero, nótese que:

$$\dot{X}_{A1|X_{A1}=0} = 0$$

$$\dot{X}_{M2|X_{M2}=0} = 0$$

de esta manera, en caso que X_{A1} y X_{M2} tengan condiciones iniciales mayores que cero, eso implicará $X_{A1} \geq 0$ y $X_{M2} \geq 0$.

Por otra parte:

$$\dot{S}_{A1|S_{A1}=0} = D_1 S_{AI_n} > 0$$

$$\dot{S}_{M1|S_{M1}=0} = k_2 \mu_A(S_{A1}) X_{A1} \geq 0$$

es decir, nuevamente se tendrá en dicho caso $S_{A1} > 0$, y $S_{M1} \geq 0$.

Finalmente, para:

$$\dot{S}_{A2|S_{A2}=0} = D_2 S_{A1} > 0$$

$$\dot{S}_{M2|S_{M2}=0} = D_2 S_{M1} \geq 0$$

es decir, se tendrá $S_{A2} > 0$, y $S_{M2} \geq 0$, con lo que se demuestra que el modelo nunca adquiere valores negativos, completando la demostración para todo el sistema. ■

Se pudo apreciar en el capítulo anterior que uno de los resultados más útiles para poder garantizar la estabilidad global de los equilibrios consiste en probar que el conjunto ω -límite del sistema dinámico se encuentra dentro de un conjunto compacto, de manera de poder aplicar el Teorema 4. Así, se demostrará este resultado para el Modelo Secuencial a continuación.

Teorema 7. *El Conjunto ω -límite del sistema dinámico asociado al Modelo Secuencial se encuentra dentro de un conjunto compacto.*

Demostración. Se recuerda que el Modelo Secuencial es de la forma:

$$\dot{X}_{A1} = \mu_A(S_{A1}) X_{A1} - D_1 X_{A1}$$

$$\dot{S}_{A1} = -k_1 \mu_{A1}(S_{A1}) X_{A1} + D_1 (S_{AI_n} - S_{A1})$$

$$\dot{S}_{A2} = D_2 (S_{A1} - S_{A2})$$

$$\dot{X}_{M2} = \mu_M(S_{M2}) X_{M2} - D_2 X_{M2}$$

$$\dot{S}_{M1} = k_2 \mu_A(S_{A1}) X_{A1} - D_1 S_{M1}$$

$$\dot{S}_{M2} = -k_3 \mu_M(S_{M2}) X_{M2} + D_2 (S_{M1} - S_{M2})$$

Dado que anteriormente en el Teorema 6 se demostró que todas las variables se encuentran acotadas inferiormente por cero para condiciones iniciales positivas, bastará probar que las variables se encuentran acotadas superiormente. Primero se enfocará la atención en las ecuaciones:

$$\begin{aligned} \dot{X}_{A1} &= \mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1X_{A1} \\ \dot{S}_{A1} &= -k_1\mu_{A1}(S_{A1})X_{A1} + D_1(S_{A1n} - S_{A1}). \end{aligned}$$

Estas funciones están desacopladas con respecto al resto, y corresponde a un modelo de Quimiostato Simple, que como ya se demostró en el capítulo anterior, se encuentra acotado superior e inferiormente en sus dos variables.

Respecto a la variable S_{M1} , al aplicar la transformación:

$$z = -k_2X_{A1} + S_{M1},$$

se obtiene

$$\dot{z} = -D_1z.$$

Dado que X_{A1} está acotada superiormente, es fácil deducir a partir del comportamiento de la variable z que la variable S_{M1} se encuentra acotada también.

Respecto al resto de las variables, se utilizara la siguiente idea: se planteará, de ser necesario, una transformación que simplifique el problema, y luego se acotarán las soluciones de las ecuaciones diferenciales basados en el conocimiento que están asociadas a variables que ya se sabe están acotadas superior e inferiormente. Para S_{A2} la ecuación diferencial asociada a su dinámica es:

$$\dot{S}_{A2} = D_2(S_{A1}(t) - S_{A2}).$$

Observemos que esta ecuación diferencial tiene la forma:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= ax + f(t) \\ x(0) &= x_0 \end{aligned}$$

que tiene como solución:

$$x(t) = \frac{b(t) + x_0}{a(t)}$$

donde:

$$\begin{aligned} a(t) &= e^{-at} \\ b(t) &= \int_0^t a(t)f(t)dt \end{aligned}$$

De esta manera, para el problema planteado quedarán funciones de la forma:

$$S_{A2}(t) = \frac{\int_0^t e^{D_1t} S_{A1}(t) D_1 dt + x_0}{e^{D_1t}}$$

$$= \left(\int_0^t e^{D_1 t} S_{A1}(t) D_1 dt + x_0 \right) e^{-D_1 t}$$

Considerando que la función $S_{A1}(t)$ está acotada superior e inferiormente, de esta forma es posible establecer, tomando la cota superior de S_{A1} , que denominaremos K , se cumplirá:

$$\begin{aligned} S_{A2}(t) &\leq \left(\int_0^t e^{D_1 t} D_1 K dt + x_0 \right) e^{-D_1 t} \\ &= (K(e^{D_1 t} - 1) + x_0) e^{-D_1 t} \\ &= K - (K - x_0)e^{-D_1 t}, \end{aligned}$$

lo que nos indica que la variable S_{A2} se encuentra acotada inferior y superiormente.

Falta demostrar para las funciones S_{M2} y X_{M2} . Haciendo uso de la transformación: $z = k_3 X_{M2} + S_{M2}$, quedará la ecuación:

$$\dot{z} = (S_{M1}(t) - z)D_2.$$

De esta forma, se puede operar siguiendo la misma lógica utilizada anteriormente. La solución para z será de la forma:

$$\begin{aligned} z(t) &= \frac{\int_0^t e^{D_2 t} S_{M1}(t) D_2 dt + x_0}{e^{D_2 t}} \\ &= \left(\int_0^t e^{D_2 t} S_{M1}(t) D_2 dt + x_0 \right) e^{-D_2 t}, \end{aligned}$$

y dado que ya se ha demostrado que S_{M1} se encuentra acotado superior e inferiormente, al reemplazar por la cota superior de S_{M1} , que denominaremos K se puede deducir que:

$$\begin{aligned} z(t) &\leq \left(\int_0^t e^{D_2 t} D_2 K dt + x_0 \right) e^{-D_2 t} \\ &= (K(e^{D_2 t} - 1) + x_0) e^{-D_2 t} \\ &= K - (K - x_0)e^{-D_2 t} \end{aligned}$$

Y así, nuevamente es evidente notar que $z = S_{M2} + k_3 X_{M2}$ está acotada superior e inferiormente. De modo que si demostramos que S_{M2} se encuentra acotada superiormente, se completará la demostración, y en efecto, recordemos que:

$$\dot{S}_{M2} = -k_3 \mu_M(S_{M2}) X_{M2} + D_2(S_{M1} - S_{M2})$$

y haciendo el cambio de variable: $z = S_{M2} - K$, donde K es la cota superior de S_{M1} , se tendrá:

$$\dot{z} \leq -Dz,$$

es decir, z se encontrará acotada superiormente, implicando que S_{M2} también lo está, lo que completa la demostración. ■

Escenario I

El Escenario I, se recuerda corresponde a cuando sólo el equilibrio $E_1 = [0, 0, S_{AI n}, 0]$, correspondiente al washout del microorganismo acidogénico, es factible. De forma similar a lo visto para el Modelo Simple, este escenario se presentará cuando se cumpla la condición:

$$\mu_A(S_{AI n}) > \frac{D}{r}. \quad (3.1)$$

Veamos que la condición enunciada implica que los equilibrios $E_2 = [X_{A1}^*, 0, S_{A1}^*, k_2 X_{A1}^*]$, $E_3 = [X_{A1}^*, X_{M2S}^*, S_A^*, S_{M2S}^*]$ y $E_4 = [X_{A1}^*, X_{M2U}^*, S_A^*, S_{M2U}^*]$ son infactibles. Recordemos la fórmula de los equilibrios acidogénicos:

$$S_{A1}^* = K_{SA} \frac{D}{r\mu_{Amax} - \alpha D}$$

$$X_{A1}^* = \frac{1}{k_1} (S_{AI n} - S_{A1}^*),$$

y notemos que la condición (3.1) es equivalente a que se cumpla:

$$S_{AI n} < S_{A1}^*$$

lo que implica que $X_{A1}^* < 0$, mostrando que los equilibrios E_2 , E_3 y E_4 no son factibles.

Estabilidad para el equilibrio E_1 en el Escenario I

De la misma manera que su análogo del Modelo Simple, se demostrará bajo las condiciones del Escenario I, el equilibrio E_1 correspondiente al washout de ambos microorganismos, es globalmente asintóticamente estable para condiciones iniciales de población positivas.

De esta forma, se enuncia la proposición:

Proposición 4. *Para la condición del Escenario I ($\mu_A(S_{AI n}) > \frac{D}{r}$), el equilibrio E_1 es globalmente asintóticamente estable desde condiciones iniciales de poblaciones y de sustratos mayores o iguales a cero.*

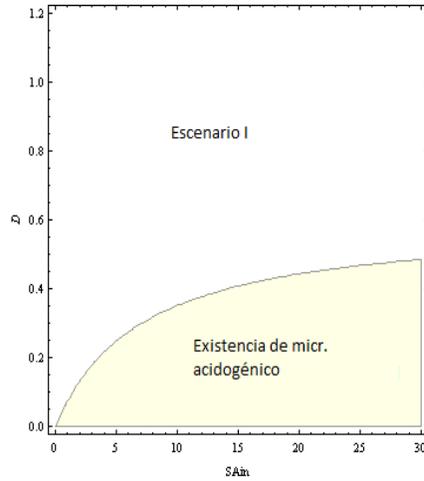


Figura 3.2: Diagrama mostrando las condiciones para el Escenario I, en el Modelo Secuencial, utilizando $r = 0,5$. El área en blanco corresponde al Escenario I. El área en amarillo corresponde a zonas donde la existencia del microorganismo acidogénico está garantizada. El área es claramente menor que el área correspondiente para el Modelo Simple, y puede probarse que esto es el caso para cualquier valor de r .

Demostración. Primero que nada, se recuerda que el Modelo Secuencial es de la forma:

$$\begin{aligned}
 \dot{X}_{A1} &= \mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1X_{A1} \\
 \dot{S}_{A1} &= -k_1\mu_A(S_{A1})X_{A1} + D_1(S_{AIn} - S_{A1}) \\
 \dot{S}_{A2} &= D_2(S_{A1} - S_{A2}) \\
 \dot{X}_{M2} &= \mu_M(S_M)X_M - D_2X_M \\
 \dot{S}_{M1} &= k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1S_{M1} \\
 \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + D_2(S_{M1} - S_{M2})
 \end{aligned}$$

donde recordemos que $D_1 = \frac{D}{r}$ y $D_2 = \frac{D}{1-r}$. De esta forma, la condición enunciada corresponde a $\mu(S_{AIn}) < D_1$. Se nota que las variables S_{A1} y X_{A1} , forman un Quimiostato Simple, y dada la condición del Escenario I, se tiene que estas variables convergen de forma globalmente asintóticamente estable a los valores S_{AIn} y 0 respectivamente, gracias al Teorema 3. Para el resto de las variables podremos aplicar el Teorema 4, dado que demostramos en el Teorema 7 que el conjunto ω -límite del modelo se encuentra dentro de un conjunto compacto.

La variable S_{A2} descrita de forma semiautónoma se plantea:

$$\dot{S}_{A2} = D_2(S_{A1}(t) - S_{A2}),$$

y al hacer $t \rightarrow \infty$ en $S_{A1}(t)$, obtenemos el sistema asociado:

$$\dot{S}_{A2} = D_2(S_{AI_n} - S_{A2}).$$

Resolviendo el sistema asociado, se deduce fácilmente que cuando $t \rightarrow \infty$ se cumple $S_{A2} \rightarrow S_{AI_n}$, de donde deducimos que esto se cumple también para el sistema semiautónomo, al aplicarse el Teorema 4.

La variable S_{M1} , por su parte, de forma semiautónoma se plantea:

$$\dot{S}_{M1} = k_2\mu_A(S_{A1}(t))X_{A1}(t) - D_1S_{M1},$$

y al aplicar $t \rightarrow \infty$ en $S_{A1}(t)$ y $X_{A1}(t)$ obtenemos el sistema asociado:

$$\dot{S}_{M1} = -D_1S_{M1}.$$

Es evidente, por lo tanto, que $S_{M1} \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow \infty$, lo que se cumple para el sistema semiautónomo al aplicarse el Teorema 4.

Finalmente, para las variables S_{M2} y X_{M2} , en forma semiautónoma son:

$$\begin{aligned} \dot{X}_{M2} &= \mu_M(S_{M2})X_{M2} - D_2X_{M2} \\ \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + D_2(S_{M1}(t) - S_{M2}) \end{aligned}$$

y al aplicar $t \rightarrow \infty$ en la variable $S_{M1}(t)$ se obtendrá el sistema asociado:

$$\begin{aligned} \dot{X}_{M2} &= \mu_M(S_{M2})X_{M2} - D_2X_{M2} \\ \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} - D_2S_{M2} \end{aligned}$$

de donde se puede apreciar directamente que $S_{M2} \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow \infty$, puesto que $S_{M2} \leq -D_2S_{M2}$. Además, al hacer el cambio de variable $z = k_3X_{M2} + S_{M2}$, se aprecia que z cumplirá:

$$\dot{z} = -D_2z$$

es decir, cuando $t \rightarrow \infty$, se tiene $z \rightarrow 0$, y por lo tanto, $k_3X_{M2} + S_{M2} \rightarrow 0$, y como $S_{M2} \rightarrow 0$ entonces necesariamente se cumplirá $X_{M2} \rightarrow 0$ para el sistema asociado, y así, esto se cumplirá, para el sistema semiautónomo, gracias al Teorema 4, demostrando de esta forma la estabilidad global del equilibrio E_1 bajo las condiciones del Escenario I. ■

Escenario II

Se recuerda que el Escenario II es definido como cuando los equilibrios E_1 y E_2 son factibles en el sistema. Veremos que el equilibrio $E_2 = [X_{A1}^*, 0, S_{A1}^*, k_2X_{A1}^*]$,

correspondiente a la sobrevivencia del microorganismo acidogénico, y el washout del metanogénico, es alcanzado de forma global y asintóticamente estable desde condiciones iniciales mayores que cero de poblaciones de microorganismos. A semejanza de lo visto para el Modelo Simple, la condición que define este escenario estará dada en primer lugar por:

$$\frac{D}{r} < \mu_A(S_{AIn})$$

que garantiza la sobrevivencia del microorganismo acidogénico, y se asumirá en adelante que se cumple para este escenario. Además, estará la condición:

$$\frac{D}{1-r} > \mu_M(S^+)$$

donde:

$$S^+ = \begin{cases} S_{M1}^* & S_{M1}^* \leq S_{max} \\ S_{max} & S_{M1}^* > S_{max} \end{cases}$$

y S_{max} corresponde al valor de sustrato donde se alcanza el máximo de la función Haldane. De la misma forma que se hizo en el capítulo anterior, se analizarán ambos casos y se obtendrán dos condiciones para este escenario. Se recuerdan las fórmulas:

$$\begin{aligned} X_{A1}^* &= \frac{1}{k_1}(S_{AIn} - S_{A1}^*) \\ S_{M1}^* &= k_2 X_{A1}^* \\ S_{M2S}^* &= K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D} - 1\right) - \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D}\right)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2} \\ X_{M2S}^* &= \frac{1}{k_3}(k_2 X_{A1}^* - S_{M2}^*). \end{aligned}$$

Se tendrá que X_{M2S}^* y S_{M2S}^* corresponden a los estados estacionarios alcanzables por el sistema en el caso de coexistencia, y además S_{M2S}^* cumple la condición $\frac{D}{1-r} = \mu_M(S_{M2S}^*)$.

Así, la primera condición que se analizará es el caso $S_{M1}^* \leq S_{max}$, donde la condición de washout es:

$$\frac{D}{1-r} > \mu_M(S_{M1}^*). \quad (3.2)$$

Veremos que esto implicará la infactibilidad de los equilibrios E_3 y E_4 , puesto que esta condición es equivalente a: $\frac{D}{1-r} > \mu_M\left(\frac{k_2}{k_1}(S_{AIn} - S_{A1}^*)\right)$, y por lo tanto se tendrá:

$$S_{M2S}^* > \frac{k_2}{k_1}(S_{AIn} - S_{A1}^*)$$

$$S_{AI_n} < \frac{k_1}{k_2} S_{M2S}^* + S_{A1}^*$$

condición que resulta ser equivalente a plantear:

$$X_{M2S}^* < 0$$

y como $X_{M2U}^* < X_{M2S}^*$, se deduce la infactibilidad de los equilibrios E_3 y E_4 . Esta condición en particular se puede parametrizar en el plano (D, r) , y más adelante explicitaremos una parametrización para determinar los límites de esta condición.

Finalmente, para el caso en que $S_{max} > S_{M1}^*$, la condición del Escenario II corresponde a:

$$\frac{D}{1-r} > \mu_M(S_{max}), \quad (3.3)$$

restricción que en este caso corresponde al conjunto de puntos por encima de una recta en el plano (D, r) . Nuevamente, al sustituir estos valores de $\frac{D}{1-r}$ en las fórmulas de los equilibrios metanogénicos en E_3 y E_4 , se obtendrán números complejos con parte imaginaria no nula, lo que los convierte en equilibrios infactibles para este caso.

Estabilidad para el equilibrio E_2 en el Escenario II

De la misma manera que su análogo del Modelo Simple, se demostrará que el equilibrio E_2 , para las condiciones enunciadas del Escenario II, es global y asintóticamente estable desde condiciones iniciales de poblaciones mayores que cero.

De esta forma, se enuncia la proposición:

Proposición 5. *Para las condiciones del Escenario II:*

$$\frac{D}{r} < \mu_A(S_{AI_n})$$

$$\frac{D}{1-r} > \mu_M(S^+),$$

el equilibrio E_2 es globalmente asintóticamente estable desde condiciones iniciales de poblaciones mayores que cero y de sustratos mayores o iguales a cero.

Demostración. Primero que nada, se recuerda que el Modelo Secuencial es de

la forma:

$$\begin{aligned}
 \dot{X}_{A1} &= \mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1X_{A1} \\
 \dot{S}_{A1} &= -k_1\mu_{A1}(S_{A1})X_{A1} + D_1(S_{AIn} - S_{A1}) \\
 \dot{S}_{A2} &= D_2(S_{A1} - S_{A2}) \\
 \dot{X}_{M2} &= \mu_M(S_M)X_M - D_2X_M \\
 \dot{S}_{M1} &= k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1S_{M1} \\
 \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + D_2(S_{M1} - S_{M2})
 \end{aligned}$$

donde recordemos que $D_1 = \frac{D}{r}$ y $D_2 = \frac{D}{1-r}$. Las variables S_{A1} y X_{A1} , forman un Quimiostato Simple desacoplado del resto del modelo, y dado que el Escenario II, asume la condición $\mu_A(S_{AIn}) > D_1$, en dicho caso se garantiza que estas variables convergen de forma global y asintóticamente estable a los equilibrios factibles X_{A1}^* y S_{A1}^* gracias al Teorema 5. Para el resto de las variables podremos aplicar el Teorema 4, dado que demostramos en el Teorema 7 que el conjunto ω -límite del modelo se encuentra dentro de un conjunto compacto.

La variable S_{A2} descrita de forma semiautónoma se plantea:

$$\dot{S}_{A2} = D_2(S_{A1}(t) - S_{A2}),$$

que por su parte, al hacer $t \rightarrow \infty$ en $S_{A1}(t)$ se obtiene el sistema asociado:

$$\dot{S}_{A2} = D_2(S_{A1}^* - S_{A2}).$$

Resolviendo el sistema asociado, se deduce fácilmente que cuando $t \rightarrow \infty$ se cumple: $S_{A2} \rightarrow S_{A1}^*$, lo que nos garantiza que se cumple también para el sistema semiautónomo, al aplicarse el Teorema 4.

La variable S_{M1} , por su parte, de forma semiautónoma se plantea:

$$\dot{S}_{M1} = k_2\mu_A(S_{A1}(t))X_{A1}(t) - D_1S_{M1},$$

y al aplicar $t \rightarrow \infty$ en las variables $S_{A1}(t)$ y $X_{A1}(t)$, obtenemos el sistema asociado:

$$\dot{S}_{M1} = k_2D_1X_{A1}^* - D_1S_{M1}.$$

Es evidente, por lo tanto, que $S_{M1} \rightarrow k_2X_{A1}^*$, cuando $t \rightarrow \infty$ en el sistema asociado, y por lo tanto, en el semiautónomo también, al aplicarse el Teorema 4.

Finalmente, para las variables S_{M2} y X_{M2} , en forma semiautónoma son:

$$\begin{aligned}
 \dot{X}_{M2} &= \mu_M(S_{M2})X_{M2} - D_2X_{M2} \\
 \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + D_2(S_{M1}(t) - S_{M2})
 \end{aligned}$$

y, al hacer $t \rightarrow \infty$, en la variable $X_{M1}(t)$, se tendrá como sistema asociado:

$$\begin{aligned} \dot{X}_{M2} &= \mu_M(S_{M2})X_{M2} - D_2X_{M2} \\ \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} - D_2(S_{M1}^* - S_{M2}) \end{aligned}$$

es decir, un Quimiostato Simple con sustrato de entrada S_{M1}^* . Dado que las condiciones del Escenario II están planteadas explícitamente de tal forma de garantizar el washout en este caso, gracias al 3, entonces se garantiza el washout de forma global y asintóticamente estable para este sistema asociado, y por lo tanto, gracias al Teorema 4, del sistema semiautónomo a su vez, completando de esta forma la demostración para todo el modelo. ■

Escenarios III y IV

A semejanza de lo visto para el Modelo Simple, los Escenarios III y IV corresponden a cuando las condiciones de los escenarios anteriores no se cumplen, permitiendo que sea factible la coexistencia. Para esto se deben cumplir las condiciones:

$$\begin{aligned} \frac{D}{r} &< \mu_A(S_{AI_n}) \\ \frac{D}{1-r} &< \mu_M(S^+), \end{aligned}$$

que permiten que sea posible la coexistencia en el Modelo Secuencial. Se recuerda que los Escenarios III y IV se distinguen en que en el Escenario III sólo los equilibrios E_1 , E_2 y E_3 son factibles, y en el Escenario IV todos los equilibrios son factibles, distinción que viene dada por la condición:

$$\frac{D}{1-r} < \mu_M(S_{M1}^*) \quad (3.4)$$

que, de cumplirse, veremos que corresponderá a la infactibilidad del Escenario IV.

Recordemos que $\mu_M(S_{M2U}^*) = \frac{D}{1-r}$, y $\mu_M(S_{M2U}^*)$ se encuentra en la fase decreciente de la función Haldane, así deducimos que la condición (3.4) implica:

$$S_{M2U}^* > S_{M1}^*,$$

lo que a su vez implica:

$$X_{M2U}^* = \frac{1}{k_3}(S_{M1}^* - S_{M2U}^*) < 0,$$

es decir, el equilibrio E_4 es infactible.

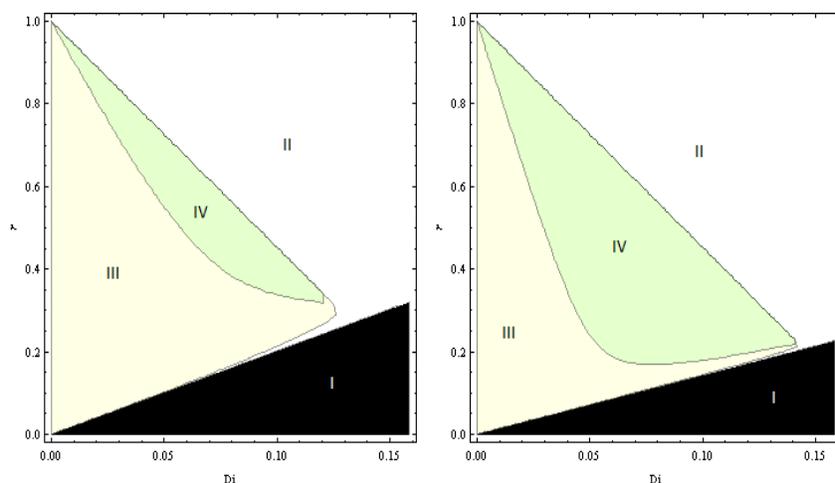


Figura 3.3: Áreas correspondientes en el plano (D, r) a escenarios en el Modelo Secuencial, con S_{AIn} fijo. El área en negro corresponde al Escenario I. El área en blanco corresponde al Escenario II. El área amarilla corresponde al Escenario III, coexistencia en condiciones seguras. El área verde corresponde a Escenario IV, coexistencia con riesgo de washout de microorganismo metanogénico. La condición en el diagrama de la izquierda es $S_{AIn} = 5(g/l)$, en la derecha es $S_{AIn} = 10(g/l)$. Puede verse que mientras mayor el valor de S_{AIn} , más área es cubierta por la correspondiente al Escenario IV.

Si la condición (3.4) se cumple, entonces el Escenario III toma lugar, y esto garantiza que E_3 sea el único equilibrio alcanzable desde condiciones iniciales de poblaciones mayores que cero. Si no se cumple, entonces el Escenario IV toma lugar, y hay riesgo de washout del microorganismo metanogénico cuando las condiciones iniciales de población son lo suficientemente bajas.

Más adelante, se deducirá una curva de nivel respecto de la fórmula 3.4 que permitirá separar las zonas de cada escenario.

Estabilidad para equilibrio E_3 en el Escenario III

Proposición 6. *Para las condiciones del Escenario III:*

$$\frac{D}{r} < \mu_A(S_{AIn})$$

$$\frac{D}{1-r} < \mu_M(S_{M1}^*)$$

el equilibrio de coexistencia E_3 , es globalmente asintóticamente estable desde cualquier condición inicial de poblaciones mayores a cero, y de sustratos mayores e iguales a cero.

Demostración. Primero que nada, se recuerda que el Modelo Secuencial es de la forma:

$$\begin{aligned} \dot{X}_{A1} &= \mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1X_{A1} \\ \dot{S}_{A1} &= -k_1\mu_{A1}(S_{A1})X_{A1} + D_1(S_{A1n} - S_{A1}) \\ \dot{S}_{A2} &= D_2(S_{A1} - S_{A2}) \\ \dot{X}_{M2} &= \mu_M(S_M)X_M - D_2X_M \\ \dot{S}_{M1} &= k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1} - D_1S_{M1} \\ \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + D_2(S_{M1} - S_{M2}) \end{aligned}$$

donde recordemos que $D_1 = \frac{D}{r}$ y $D_2 = \frac{D}{1-r}$. Una vez más, hacemos notar que las variables X_{A1} y S_{A1} corresponden a un Quimiostato Simple, y por lo tanto convergen a sus respectivos equilibrios X_{A1}^* y S_{A1}^* de forma global y asintóticamente estable, dado que se asume que las condiciones del Escenario I no se cumplen. Gracias al Teorema 7 sabemos que el conjunto ω -límite del modelo se encuentra dentro de un conjunto compacto, así podremos aplicar el Teorema 4 para el resto de las variables.

De esta forma, respecto a la variable S_{A2} se puede plantear el sistema semi-autónomo:

$$\dot{S}_{A2} = D_2(S_{A1}(t) - S_{A2}),$$

donde al aplicar $t \rightarrow \infty$ a la variable $S_{A1}(t)$ se obtiene el sistema asociado:

$$\dot{S}_{A2} = D_2(S_{A1}^* - S_{A2}),$$

y es trivial notar que en este sistema se cumple que $S_{A2} \rightarrow S_{A1}^*$ cuando $t \rightarrow \infty$, de modo que gracias al Teorema 4 se garantiza que se cumple lo mismo para el sistema semiautónomo.

Nuestro siguiente sistema semiautónomo a considerar es:

$$\dot{S}_{M1} = -D_1S_{M1} + k_2\mu_A(S_{A1}(t))X_{A1}(t),$$

donde haciendo $t \rightarrow \infty$ en las variables $S_{A1}(t)$ y $X_{A1}(t)$, se obtendrá el sistema asociado:

$$\dot{S}_{M1} = -D_1S_{M1} + k_2D_1X_{A1}^*,$$

que, nuevamente, es trivial verificar que para este sistema $S_{M1} \rightarrow k_2X_{A1}^*$ cuando $t \rightarrow \infty$, y gracias al Teorema 4 esto se cumplirá a su vez para el sistema semiautónomo.

Finalmente, quedan las ultimas dos ecuaciones semiautónomas, de la forma:

$$\begin{aligned} \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + D_2(S_{M1}(t) - S_{M2}) \\ \dot{X}_{M2} &= (\mu_M(S_{M2}) - D_2)X_{M2} \end{aligned}$$

Donde haciendo $t \rightarrow \infty$ en la variable $S_{M1}(t)$, se obtiene el sistema asociado:

$$\begin{aligned} \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + D_2(S_{M1}^* - S_{M2}) \\ \dot{X}_{M2} &= (\mu_M(S_{M2}) - D_2)X_{M2} \end{aligned}$$

Es decir, queda un modelo de Quimiostato Simple, con variable de sustrato de entrada: S_{M1}^* . Dado que en este caso estamos asegurando la condición $D_2 < \mu_M(S_{M1}^*)$, luego es posible, gracias al Teorema 5, establecer que este sistema es globalmente asintóticamente estable para las condiciones iniciales enunciadas, y por lo tanto, también para el sistema semiautónomo gracias al 4. Con esto hemos demostrado que el equilibrio E_3 es globalmente asintóticamente estable desde condiciones iniciales de población mayores que cero. ■

Finalmente, el Escenario IV tendrá condición como vimos $\frac{D}{1-r} > \mu_M(S_{M1}^*)$, en donde todos los equilibrios serán factibles, y los equilibrios E_2 y E_3 serán los únicos alcanzables desde casi todas las condiciones iniciales mayores e iguales a cero, es decir, habrá riesgo de Washout del microorganismo metanogénico, en particular para condiciones iniciales de población bajas.

Como comentario final, es sencillo notar que respecto a las bifurcaciones, las transiciones entre los modelos son iguales a las vistas para el Modelo Simple. Las transiciones entre escenarios I y II, II y III, III y IV, corresponden a bifurcaciones transcricas, y la transición entre el escenario IV y II corresponde a una bifurcación silla-nodo.

Escenario	Condición para el Escenario	Condición de Estabilidad
Escenario I	$\frac{D}{r} > \mu_A(S_{AI n})$	E_1 es globalmente asintóticamente estable.
Escenario II	$\frac{b}{r} < \mu_A(S_{AI n})$ $\frac{D}{1-r} > \mu_M(S^+)$	E_2 es globalmente asintóticamente estable para condiciones iniciales de población mayores que cero.
Escenario III	$\frac{D}{r} < \mu_A(S_{AI n})$ $\frac{D}{1-r} < \mu_M(S^+)$ $D < \mu_M(S_{M1}^*)$	E_3 es globalmente asintóticamente estable para condiciones iniciales de población mayores que cero.
Escenario IV	$\frac{D}{r} < \mu_A(S_{AI n})$ $\frac{D}{1-r} < \mu_M(S^+)$ $D > \mu_M(k_2 S_{M1}^*)$	E_2 y E_3 son localmente asintóticamente estables para condiciones iniciales de población mayores que cero.

Cuadro 3.1: Tabla Resumen de Estabilidad para los Escenarios de Operación del Modelo Secuencial

Capítulo 4

Comparaciones de Condiciones de Coexistencia y Estabilidad

En este capítulo se realizarán comparaciones entre las condiciones de coexistencia y estabilidad para los equilibrios entre ambos modelos, tomando en consideración los valores de D , r y S_{AI_n} . Recordemos que en el Modelo Simple, D corresponde a la tasa de dilución del reactor, es decir, el cociente entre Q , el caudal de líquido entrante, y V , el volumen del reactor. En contraste, en el Modelo Secuencial, D corresponde al cociente entre el caudal Q y la suma del volumen de ambos reactores, V , y por su parte r corresponde a la proporción de dicho volumen en cada reactor, con el primer reactor teniendo un volumen rV y el segundo $(1 - r)V$. Habitualmente, se supondrá que ambos modelos tienen los mismos valores de D y S_{AI_n} , y luego se establecerán comparaciones para valores variables de r .

4.1. Condiciones de Coexistencia

En los capítulos anteriores vimos que para determinar criterios de coexistencia bastaba con determinar las condiciones en que los equilibrios de coexistencia son positivos. En esta sección determinaremos para qué valores de D y S_{AI_n} en el Modelo Simple, y (D, r) y S_{AI_n} en el Modelo Secuencial estas condiciones se cumplen, y estableceremos comparaciones entre ellas. Dado que de aquí en adelante se tratará con los equilibrios como funciones de D y (D, r) , se alterará ligeramente la notación de los equilibrios, presentándolos como funciones de estas variables, para recordar los parámetros que están siendo considerados en cada fórmula de equilibrio.

Para el Modelo Simple, recordemos, la condición del Escenario I, anteriormente vista en el Capítulo 2, correspondiente al washout de ambos microorganismos, es:

$$D > \mu_A(S_{AI n}) \quad (4.1)$$

y, por otra parte, la condición del Escenario II, correspondiente al washout de sólo el microorganismo metanogénico, es:

$$\mu_A(S_{AI n}) > D > \mu_M(S^+) \quad (4.2)$$

donde:

$$S^+ = \begin{cases} k_2 X_A^*(D) & k_2 X_A^*(D) \leq S_{max} \\ S_{max} & k_2 X_A^*(D) > S_{max}. \end{cases}$$

y S_{max} , se recuerda es valor de sustrato donde se alcanza el máximo de la función Haldane. De modo que esta restricción estará definida para dos tramos de valores de $k_2 X_A^*(D)$.

Analicemos el caso $k_2 X_A^*(D) > S_{max}$, para determinar los valores de D que permitan la coexistencia. Recordemos la fórmula del equilibrio $X_A^*(D)$:

$$X_A^*(D) = \frac{1}{k_1} (S_{AI n} - S_A^*(D)).$$

El caso que estamos considerando, $k_2 X_A^*(D) > S_{max}$ implicará entonces:

$$S_{AI n} - \frac{k_1}{k_2} S_{max} > S_A^*(D),$$

y como $\mu_A(S_A^*) = D$, tendremos la restricción:

$$\mu_A \left(S_{AI n} - \frac{k_1}{k_2} S_{max} \right) > D. \quad (4.3)$$

Podemos notar de inmediato que si esta restricción se cumple, entonces también se debe cumplir necesariamente $\mu_A(S_{AI n}) > D$, dado que la función $\mu_A(\cdot)$ es monótona creciente, de modo que se sabe inmediatamente que se debe estar en una situación donde la sobrevivencia del microorganismo acidogénico esté garantizada.

Por otra parte, recordemos que en el Capítulo 2 vimos que, cuando $k_2 X_A^*(D) > S_{max}$, la sobrevivencia del organismo metanogénico está sujeta a la restricción:

$$D < \mu_M(S_{max}). \quad (4.4)$$

En adelante, nos referiremos a esta cantidad, $\mu_M(S_{max})$ como Λ , tal como la habíamos definido en el Capítulo 2, y recordemos que corresponde al valor máximo alcanzado por la función Haldane, que corresponde a:

$$\Lambda = \mu_{Mmax} \frac{\sqrt{K_{SM}}}{\sqrt{K_{SM} + 2\sqrt{K_{IM}}}},$$

donde los valores μ_{Mmax} , K_{SM} , K_{IM} son parámetros de la función de crecimiento Haldane, dada por:

$$\mu_M(S) = \mu_{Mmax} \frac{S}{K_{SM} + S + \frac{S^2}{K_{IM}}}$$

Entonces, considerando las restricciones (4.3) y (4.4), para el Modelo Simple puede caracterizarse que una cota para los valores de D que puedan posibilitar la coexistencia en este caso están dados por:

$$D_{cota1} := \min \left\{ \mu_A \left(S_{AIn} - \frac{k_1}{k_2} S_{max} \right), \Lambda \right\}. \quad (4.5)$$

Ahora realizaremos el mismo análisis para el Modelo Secuencial. Como vimos en el Capítulo 3, la condición del Escenario I, correspondiente al Washout global, es:

$$\frac{D}{r} > \mu_A(S_{AIn}), \quad (4.6)$$

y, por otra parte, la condición del Escenario II, correspondiente al washout de sólo el microorganismo metanogénico, corresponde a que la restricción (4.6) no se cumpla, y además:

$$\frac{D}{1-r} > \mu_M(S^+)$$

donde para este caso S^+ se define:

$$S^+ = \begin{cases} S_{M1}^*(D, r) & S_{M1}^*(D, r) \leq S_{max} \\ S_{max} & S_{M1}^*(D, r) > S_{max}. \end{cases}$$

Además, $S_{M1}^*(D, r) = k_2 X_{A1}^*(D, r)$. Nuevamente, nos centraremos en el caso $k_2 X_{A1}^*(D, r) > S_{max}$, para determinar los valores de D que permitan la coexistencia. Recordemos la fórmula del equilibrio $X_{A1}^*(D, r)$:

$$X_{A1}^*(D, r) = \frac{1}{k_1} (S_{AIn} - S_{A1}^*(D, r)).$$

El caso que estamos considerando implicará:

$$S_{AIn} - \frac{k_1}{k_2} S_{max} > S_{A1}^*(D, r),$$

y como $\mu_A(S_{A1}^*) = \frac{D}{r}$, tendremos la restricción:

$$\mu_A \left(S_{AIn} - \frac{k_1}{k_2} S_{max} \right) > \frac{D}{r}. \quad (4.7)$$

Esta desigualdad nos entregará un conjunto valores máximos para D y r para el caso que estamos considerando. Por otra parte, recordemos que en este caso el washout del microorganismo metanogénico estará sujeto a la condición:

$$\frac{D}{1-r} > \Lambda. \quad (4.8)$$

Las desigualdades (4.7) y (4.8) en conjunto nos entregarán, lo mismo que en el Modelo Simple, los valores de D y r máximos para garantizar la coexistencia. En este caso, podemos obtener una fórmula explícita para el valor máximo para D en el Modelo Secuencial, que se obtiene al intersectar las rectas en el plano (D, r) :

$$\begin{aligned} D &= r\mu_A \left(S_{AI n} - \frac{k_1}{k_2} S_{max} \right) \\ D &= (1-r)\Lambda. \end{aligned}$$

El valor de D en la intersección de estas rectas corresponde a:

$$D_{cota2} := \frac{\mu_A \left(S_{AI n} - \frac{k_1}{k_2} S_{max} \right) \Lambda}{\mu_A \left(S_{AI n} - \frac{k_1}{k_2} S_{max} \right) + \Lambda}. \quad (4.9)$$

Este valor corresponde a la cota máxima de D para el Modelo Secuencial en el caso que estamos considerando. Para valores por sobre este D será imposible la coexistencia en el caso que planteamos, y, como puede verse directamente, este valor siempre es menor que su correspondiente cota (4.5) del Modelo Simple, es decir $D_{cota1} > D_{cota2}$. De esta forma, bajo este criterio de comparación, el Modelo Simple admite más valores de D para permitir la coexistencia en relación al Modelo Secuencial.

4.1.1. Curva de nivel para $X_{M2S}^* \geq 0$ en el Modelo Secuencial

A continuación estudiaremos el caso $X_{M2S}^* \geq 0$, el cual nos permitirá distinguir entre las zonas de coexistencia y las zonas de washout del microorganismo metanogénico en el Modelo Secuencial. Esto requerirá entrar a trabajar algebraicamente de forma explícita con los equilibrios en función de D y r . Sin embargo, veremos que una parametrización de estos valores nos permitirá poder efectivamente despejar D , y de esta forma, poder concluir sobre los valores que permitirán la factibilidad e infactibilidad de estos equilibrios.

Empecemos recordando las fórmulas de los equilibrios del sustrato y microorganismo acidogénico, en el primer reactor, que se obtienen de resolver $\mu_A(S_{A1}) = \frac{D}{r}$, es decir:

$$S_{A1}^*(D, r) = K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax}r - D}$$

$$X_{A1}^*(D, r) = \frac{1}{k_1}(S_{AIn} - S_{A1}^*(D, r)).$$

Además, recordemos las fórmulas de sustrato y microorganismo metanogénico en el segundo reactor y se recuerda que estos equilibrios se obtienen de resolver $\mu_M(S_{M2}) = \frac{D}{1-r}$, es decir:

$$S_{M2S}^*(D, r) = K_{IM} \frac{(\frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D} - 1) - \sqrt{(1 - \frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D})^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_{M2S}^*(D, r) = \frac{1}{k_3}(k_2 X_{A1}^*(D, r) - S_{M2S}^*(D, r)).$$

De esta forma, el caso que será estudiado queda escrito inicialmente de la forma:

$$\frac{1}{k_3}(k_2 X_{A1}^*(D, r) - S_{M2}^*(D, r)) \geq 0. \quad (4.10)$$

Dada la dificultad presentada por estas fórmulas, y la dificultad de plantear relaciones directas entre estos equilibrios, que se obtienen cada uno de distintas funciones de crecimiento, se planteará una parametrización de r en función de D y un parámetro θ , con el objetivo de poder despejar D .

Primero, definamos:

$$\theta := \frac{\Lambda}{D}(1 - r).$$

Notemos que θ representa la proporción entre Λ y la dilución en el segundo reactor $\frac{D}{1-r}$. El caso $\theta = 1$ representa $\frac{D}{1-r} = \Lambda$, es decir, la recta en el plano (D, r) de valores máximos para las diluciones que permitan la sobrevivencia en el segundo reactor. Claramente θ no puede ser menor que 1 puesto que en dicho caso, $\frac{D}{1-r} > \Lambda$, lo que llevaría inmediatamente a washout del microorganismo metanogénico. Así tomaremos sólo casos cuando $\theta > 1$. Un valor alto de θ corresponderá a valores de $\frac{D}{1-r}$ que sean bajos en relación con Λ .

La estrategia para poder despejar D será reemplazar r por su parametrización en función de D y θ , asumiendo, claro, que estos valores no podrán adquirir valores que no tengan sentido para r , es decir, que se debe cumplir:

$$r = 1 - \frac{D\theta}{\Lambda} \in]0, 1[.$$

Podemos ver que si permitimos $\theta \in]1, \infty[$, va a implicar que D estará restringido por:

$$0 < D < \frac{\Lambda}{\theta}.$$

De modo que cuando estas condiciones se cumplan, podemos asumir que nuestra parametrización tiene sentido, ya que implicarán que $r \in]0, 1[$.

Así al reemplazar r parametrizada en los equilibrios relevantes, nos queda:

$$X_{A1}^*(\theta, D) = \frac{1}{k_1} \left(S_{AI_n} - K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} - D \left(\frac{\mu_{Amax}}{\Lambda} \theta + 1 \right)} \right)$$

$$S_{M2S}^*(\theta) = K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda} - 1 \right) - \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda} \right)^2 - 4 \frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}.$$

Observe que el valor de S_{M2S}^* ha quedado independiente de D , y ahora sólo está en función de θ . Esto nos facilitará enormemente poder despejar la restricción para D y dejar ésta en función de θ . Volvamos a nuestro problema entonces, y escribámoslo de la forma:

$$k_1 X_{A1}^*(\theta, D) - \frac{k_1}{k_2} S_{M2S}^*(\theta) \geq 0, \quad (4.11)$$

que es equivalente a:

$$S_{AI_n} - K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} - D \left(\frac{\mu_{Amax}}{\Lambda} \theta + 1 \right)} - \frac{k_1}{k_2} S_{M2S}^*(\theta) \geq 0.$$

En este punto será útil reordenar el problema utilizando las siguientes funciones auxiliares:

$$\tau(\theta) := S_{AI_n} - \frac{k_1}{k_2} S_{M2S}^*(\theta)$$

$$= S_{AI_n} - \frac{k_1}{k_2} K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda} - 1 \right) - \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda} \right)^2 - 4 \frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

y

$$\psi(\theta) := \frac{\mu_{Amax}}{\Lambda} \theta + 1 > 0.$$

Reemplazando estas funciones en (4.11), tendremos:

$$\tau(\theta) - K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} - D\psi(\theta)} \geq 0$$

lo que es equivalente a:

$$K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} - D\psi(\theta)} \leq \tau(\theta).$$

Así, es posible ahora despejar una restricción para D , que nos quedará finalmente:

$$D \leq \mu_{Amax} \frac{\tau(\theta)}{K_{SA} + \tau(\theta)\psi(\theta)} := D(\theta). \quad (4.12)$$

Ahora se plantea el problema que los valores de $D(\theta)$ sean consistentes con los criterios que establecimos y con la factibilidad de todos los equilibrios involucrados. Para esto, volvamos un paso atrás, y recordemos que:

$$\tau(\theta) = S_{AI_n} - \frac{k_1}{k_2} S_{M2S}^*(\theta),$$

y así podemos escribir (4.11) de la forma:

$$\tau(\theta) - S_{A1}^*(D, \theta) \geq 0.$$

Notemos que si $\tau(\theta) \leq 0$, eso deberá implicar necesariamente que $S_{A1}^*(D, \theta) \leq 0$, lo que constituiría un equilibrio infactible. Por lo tanto, podemos asumir que sólo nos interesarán los casos en que $\tau(\theta) > 0$.

Por otra parte, recordemos que D debe estar restringida por las relaciones:

$$0 < D < \frac{\Lambda}{\theta}.$$

Si $\tau(\theta) > 0$, de (4.12) se deduce que $D(\theta) > 0$, y por lo tanto, $D \leq D(\theta)$ con $D > 0$ tiene sentido.

Veremos ahora que $D(\theta) \leq \frac{\Lambda}{\theta}$. Recordemos que $\psi(\theta)$ es de la forma:

$$\psi(\theta) = \frac{\mu_{Amax}\theta + \Lambda}{\Lambda} > 0,$$

por lo tanto, al reemplazar en (4.12), $D(\theta)$ se escribe de la forma:

$$D(\theta) = \frac{\Lambda}{\theta + \frac{\Lambda}{\mu_{Amax}} + \frac{K_{SA}\Lambda}{\mu_{Amax}\tau(\theta)}}.$$

Reescribiendo $D(\theta)$ de esta forma, es evidente que este valor siempre está por debajo de $\frac{\Lambda}{\theta}$ cuando $\tau(\theta) > 0$. Por lo tanto $\tau(\theta) > 0$ es condición suficiente para garantizar que los valores de $D(\theta)$ obtenidos sean consistentes respecto a los criterios establecidos para θ y D , y estarán asociados a su vez a valores de $r \in]0, 1[$.

Hasta ahora, hemos podido despejar una restricción D en función de θ , con la ayuda de dos funciones auxiliares, $\tau(\theta)$ y $\psi(\theta)$, y pudimos ver que cuando $\tau(\theta) > 0$, nuestra parametrización entregará restricciones de D válidas para las condiciones que permitan que los equilibrios sean factibles, y para $r \in]0, 1[$. Por tanto, el problema a continuación será establecer si es que existen valores de $\tau(\theta)$ que sean positivos.

Para empezar, notemos que el signo de $\tau(\theta)$ no está inmediatamente claro para $\theta > 1$. Para aclarar este punto, nos será útil calcular su derivada respecto a θ y así poder inferir conclusiones respecto a su comportamiento. Recordemos que $\tau(\theta)$ la definimos:

$$\tau(\theta) = S_{AI_n} - \frac{k_1}{k_2} K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda} - 1\right) - \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda}\right)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}.$$

Para calcular la derivada de $\tau(\theta)$ respecto a θ , nos será útil considerar la siguiente función auxiliar:

$$\begin{aligned}\phi(\theta) &:= \frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda} - 1 > 0 & \forall \theta > 1 \\ \phi'(\theta) &= \frac{\mu_{Mmax}}{\Lambda} > 0 & \forall \theta > 1.\end{aligned}$$

De esta forma:

$$\tau(\theta) = S_{AI_n} - \frac{k_1}{k_2} K_{IM} \left(\frac{\phi(\theta) - \sqrt{\phi(\theta)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2} \right)$$

y

$$\tau'(\theta) = \frac{k_1}{k_2} K_{IM} \phi'(\theta) \left(\frac{\phi(\theta)}{\sqrt{\phi(\theta)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}} - 1 \right) > 0 \quad \forall \theta > 1,$$

es decir $\tau(\theta)$ es creciente para $\theta > 1$. Por otra parte, puede probarse que si hacemos $\theta \rightarrow \infty$, tenemos $\tau(\theta) \rightarrow S_{AI_n}$. Lo que esto nos quiere decir es que, si bien el valor de $\tau(\theta)$ puede partir siendo negativo para $\theta = 1$, necesariamente debe existir un valor θ^* tal que $\tau(\theta) > 0$ para todo $\theta > \theta^*$. Claramente, si $\tau(1) > 0$, en dicho caso podemos tomar sencillamente $\theta^* = 1$, y la condición requerida $\tau(\theta) > 0$ se cumplirá para todo $\theta > 1$.

Resumiendo, hasta ahora hemos obtenido que $D(\theta)$ es consistente con todas las restricciones que impusimos cuando $\tau(\theta) > 0$, y además, siempre existe un valor θ^* tal que para todo $\theta > \theta^*$ se cumple $\tau(\theta) > 0$. Ahora concentrémonos en el borde de nuestra desigualdad, es decir:

$$D = D(\theta) = \mu_{Amax} \frac{\tau(\theta)}{K_{SA} + \tau(\theta)\psi(\theta)}.$$

Este caso corresponde a los valores de D ubicados justamente en la curva $X_{M2S}^* = 0$, y nuestra parametrización anterior implica que para valores de D menores que estos, dado un valor de θ fijo, estaremos necesariamente en zona de posible coexistencia. A continuación estableceremos una cota máxima para

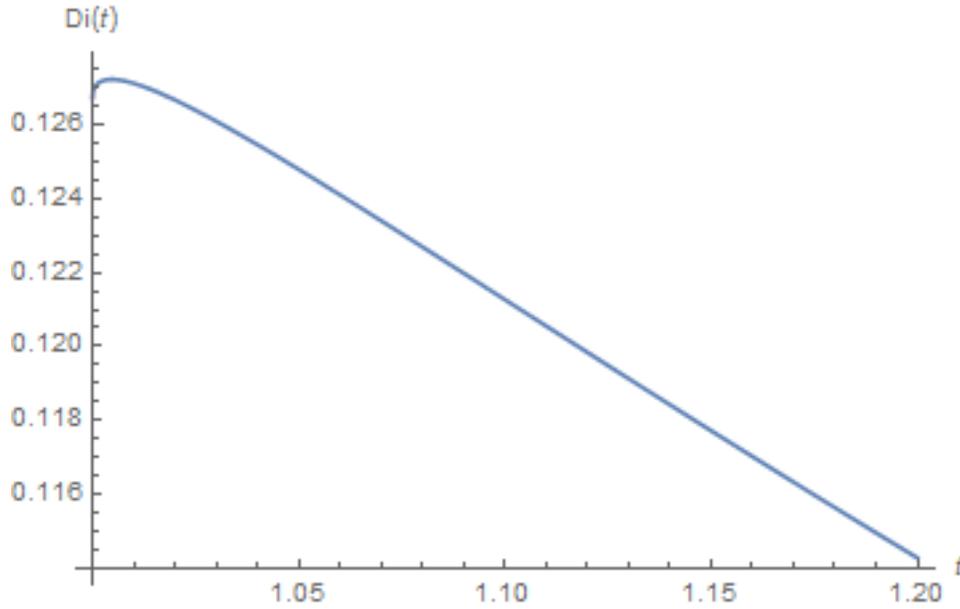


Figura 4.1: Gráfica de la función $D(\theta)$ para $\theta \in [1, 1.2]$, con $S_{AI_n} = 5(g/l)$. Se puede apreciar gráficamente la existencia de un valor máximo.

$D(\theta)$, probando que esta función tiene un único máximo (ver la figura 4.1). Esto lo haremos obteniendo la derivada de la función $D(\theta)$, que nos queda de la forma:

$$D'(\theta) = \frac{\mu_{Amax}}{(K_{SA} + \tau(\theta)\psi(\theta))^2} (K_{SA}\tau'(\theta) - \psi'(\theta)\tau(\theta)^2).$$

Para simplificar, veamos que $\psi'(\theta)$ es constante, pues:

$$\psi'(\theta) = \frac{\mu_{Amax}}{\Lambda} > 0,$$

así que escribámosla de aquí en adelante como K . Vemos así que $D'(\theta)$ la podemos escribir como producto de las siguientes dos funciones:

$$f(\theta) = \frac{\mu_{Amax}}{(K_{SA} + \tau(\theta)\psi(\theta))^2}$$

$$g(\theta) = (K_{SA}\tau'(\theta) - K\tau(\theta)^2).$$

Recordemos que estamos restringiendo θ para valores en que $\tau(\theta) > 0$, es decir, $\theta > \theta^*$, como lo habíamos definido anteriormente. Puede verse fácilmente que $f(\theta) > 0$. Ahora, centrémonos en $g(\theta)$.

Dado que estamos tomando valores de $\theta \in]\theta^*, \infty[$, veamos cuáles son los límites en cada uno de los extremos del intervalo. Primero que nada, se tiene:

$$\lim_{\theta \rightarrow \theta^{*+}} g(\theta) > 0.$$

en efecto, puesto que puede probarse en $\lim_{\theta \rightarrow 1^+} \tau'(\theta) = +\infty$. Y cuando $\theta^* > 1$, se tiene $\tau(\theta^*) = 0$ y $\tau'(\theta^*) > 0$.

Por otra parte, como $\tau'(\theta) \rightarrow 0$ y $\tau(\theta) \rightarrow S_{AI_n}$ cuando $\theta \rightarrow \infty$, es fácil ver que:

$$\lim_{\theta \rightarrow \infty} g(\theta) < 0.$$

Ahora veremos el comportamiento de la derivada de $g(\theta)$. Primero notemos que la segunda derivada de $\tau(\theta)$ respecto a θ es:

$$\tau''(\theta) = \frac{k_1}{k_2} K_{IM} \phi'(\theta)^2 \left(\frac{-\frac{4K_{SM}}{K_{IM}}}{\left(\phi(\theta)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}\right)^{\frac{3}{2}}} \right) < 0 \quad \forall \theta > 1.$$

Así, $\tau''(\theta) < 0$ y $(\tau(\theta)^2)' = 2\tau(\theta)\tau'(\theta) > 0$, para todo $\theta > \theta^*$ de modo que podemos deducir:

$$g'(\theta) < 0 \quad \forall \theta > \theta^*.$$

Con esto, podemos concluir que existe un único valor $\bar{\theta} > \theta^*$ tal que $g(\bar{\theta}) = 0$, y por lo tanto, $D'(\bar{\theta}) = 0$.

Es sencillo ver que este valor corresponde a un máximo, puesto que:

$$D''(\bar{\theta}) = f'(\bar{\theta})g(\bar{\theta}) + f(\bar{\theta})g'(\bar{\theta}) = f(\bar{\theta})g'(\bar{\theta}) < 0.$$

Así, hemos probado la existencia de un máximo valor de $D(\theta)$ que debe corresponder a una cota superior de valores de D que permitan coexistencia, y así es fácil apreciar que para valores de D menores de los encontrados en la curva $D(\theta)$, siempre podremos encontrar valores de r que permitirán cumplir con la condición de posible coexistencia, es decir, $X_{M2S}^* > 0$.

La función $D(\theta)$ que hemos obtenido representa los valores en el caso $X_{M2S}^* = 0$. Nos será útil obtener la parametrización equivalente para r , de modo que podamos construir explícitamente la curva $\theta \rightarrow (D(\theta), r(\theta))$ en el plano (D, r) . Obtener la parametrización de r es sencillo, pues se recuerda que $r = 1 - \frac{D\theta}{\Lambda}$, de manera que al reemplazar con la fórmula obtenida para $D(\theta)$ se obtiene que:

$$r(\theta) = 1 - \frac{\mu_{Amax}}{\Lambda} \frac{\theta\tau(\theta)}{K_{SA} + \tau(\theta)\psi(\theta)}.$$

Respecto a esta función, se demostrará el siguiente resultado:

Proposición 7. *Cuando $\theta \rightarrow \infty$, ocurrirá que $r(\theta) \rightarrow 0$.*

Demostración. Para estudiar el comportamiento de $r(\theta)$ cuando $\theta \rightarrow \infty$, primero se notará que:

$$\frac{\psi(\theta)}{\theta} = \frac{\mu_{Amax}}{\Lambda} + \frac{1}{\theta}$$

y se recuerda:

$$\lim_{\theta \rightarrow \infty} \tau(\theta) = S_{AI n}.$$

De esta forma, podremos escribir $r(\theta)$ de la forma:

$$r(\theta) = 1 - \frac{\mu_{Amax}}{\Lambda} \frac{\tau(\theta)}{\frac{K_{SA}}{\theta} + \tau(\theta) \frac{\mu_{Amax}}{\Lambda} + \frac{\tau(\theta)}{\theta}}.$$

Y, claramente, al hacer tender $\theta \rightarrow \infty$ en esta última expresión, se obtiene fácilmente que $\lim_{\theta \rightarrow \infty} r(\theta) = 0$. ■

Hemos podido plantear, dos parametrizaciones que nos permiten distinguir entre las zonas de factibilidad e infactibilidad para el equilibrio X_{M2S}^* . Ahora, veamos cómo utilizar estas curvas para determinar las zonas de infactibilidad. Para eso, tenemos dos casos:

1. $\tau(1) > 0$. En dicho caso, el punto $(D(1), r(1))$ se encuentra sobre la recta $\frac{D}{1-r} = \Lambda$. Dado un \bar{r} fijo menor que $r(1)$, resolviendo la desigualdad:

$$D \leq D \left(\Lambda \frac{1 - \bar{r}}{D} \right),$$

siempre es factible encontrar un conjunto de valores de D tales que se puede garantizar la coexistencia. Para valores de $\bar{r} \geq r(1)$, los valores de D estarán determinados por la fórmula:

$$D \leq (1 - \bar{r})\Lambda$$

ver la Figura 4.2 para apreciar esto gráficamente.

2. $\tau(1) < 0$. En dicho caso, existe $\theta^* > 1$ tal que $\tau(\theta) > 0$ para todo $\theta > \theta^*$, y además: $D(\theta^*) = 0, r(\theta^*) = 1$. En dicho caso, dado un valor fijo \bar{r} menor que 1, resolviendo la desigualdad:

$$D \leq D \left(\Lambda \frac{1 - \bar{r}}{D} \right),$$

es factible encontrar un conjunto de valores de D tales que se puede garantizar la coexistencia.

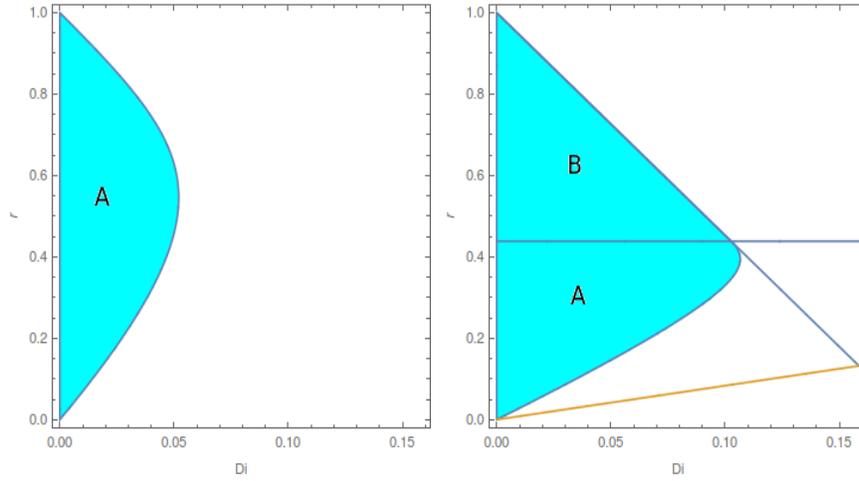


Figura 4.2: En ambas gráficas, el sector color cian representa las zonas donde es factible la coexistencia, es decir, $X_{M2S} > 0$. En el cuadro de la izquierda, tenemos un caso en que $\tau(1) < 0$, con $S_{AIn} = 1(g/l)$. A la derecha, tenemos, con $S_{AIn} = 3(g/l)$, un caso en que $\tau(1) > 0$. En dicho caso, la línea horizontal indica el valor de corte de $r(1)$, que nos indica el punto de partida de la curva $(D(\theta), r(\theta))$. Para valores de r por encima de dicha recta (marcado con la letra B), los valores de D estarán restringidos por la recta $\frac{D}{1-r} = \Lambda$.

4.1.2. Comparación entre la parametrización $(D(\theta), r(\theta))$ y el Modelo Simple

En la sección anterior hemos podido determinar la curva $(D(\theta), r(\theta))$ que vimos nos ayuda a determinar zonas donde es el equilibrio de coexistencia X_{M2S}^* es factible en el Modelo Secuencial, y además pudimos determinar que para cualquier nivel de S_{AIn} , siempre existe un valor máximo de D en dicha curva, que corresponderá a la cota superior máxima de D para garantizar la coexistencia en el Modelo Secuencial. En esta sección, compararemos estos valores con el Modelo Simple, para comparar el comportamiento de ambos modelos respecto a la condición $X_{M2S}^* \geq 0$.

Empecemos recordando las fórmulas de los equilibrios del sustrato y microorganismo acidogénico, en el reactor del Modelo Simple, que se obtienen de resolver $\mu_A(S_A) = D$, es decir:

$$S_A^*(D) = K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} - D}$$

$$X_A^*(D) = \frac{1}{k_1} (S_{AIn} - S_A^*(D)).$$

Además, recordemos las fórmulas de sustrato y microorganismo metanogénico en el reactor del Modelo Simple y se recuerda que estos equilibrios se obtienen de resolver $\mu_M(S_M) = D$, es decir:

$$S_{MS}^*(D) = K_{IM} \frac{(\frac{\mu_{Mmax}}{D} - 1) - \sqrt{(1 - \frac{\mu_{Mmax}}{D})^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_{MS}^*(D) = \frac{1}{k_3}(k_2 X_A^*(D) - S_{MS}^*(D)).$$

Así, pues estudiaremos la condición $X_{MS}^* \leq 0$, que corresponde a:

$$k_2 X_A^*(D) - S_{MS}^*(D) \leq 0. \quad (4.13)$$

En este caso no es posible despejar D en (4.13), en contraste con el Modelo Secuencial, donde pudimos despejar la variable D mediante una parametrización. En general, es difícil comparar directamente esta fórmula con los valores de la curva del Modelo Secuencial, pero haremos una comparación en una situación particular. Notemos que si $k_2 X_A^*(D) > S_{max}$, en dicho caso, la restricción (4.13) se debe cumplir necesariamente para todo D , puesto que $S_{MS}^*(D) < S_{max}$. En dicho caso, la infactibilidad del equilibrio metanogénico estará dada por la condición $D > \Lambda$. Así, podemos apreciar que la restricción (4.13) siempre será satisfecha para un valor de S_{AIn} lo suficientemente alto, y en dicho caso, la selección de valores de D que permitirán la sobrevivencia del microorganismo metanogénico se encuentra en $D \in]0, \Lambda[$.

Esto establece un contraste con el Modelo Secuencial, donde vimos que la curva $(D(\theta), r(\theta))$, correspondiente a $X_{MS2}^* = 0$ está bien definida para todo $S_{AIn} > 0$, y para cada valor de S_{AIn} tiene un único máximo en $D(\theta)$. Este valor, como vimos, debe ser necesariamente menor o igual que $\frac{\Lambda}{\theta}$, con $\theta > 1$. Este máximo, por lo tanto necesariamente debe ser menor o igual que Λ , para cualquier valor de S_{AIn} . Aún más, volvamos a la fórmula explícita de $D(\theta)$ escrita de la forma:

$$D(\theta) = \frac{\Lambda}{\theta + \frac{\Lambda}{\mu_{Amax}} + \frac{K_{SA}\Lambda}{\mu_{Amax}\tau(\theta)}}, \quad (4.14)$$

donde recordemos:

$$\tau(\theta) = S_{AIn} - \frac{k_1}{k_2} S_{M2S}^*(\theta).$$

Se aprecia que para un valor de θ fijo, la función $D(\theta)$ es creciente respecto a S_{AIn} . Vemos que haciendo $S_{AIn} \rightarrow \infty$ en la fórmula (4.14), se obtiene:

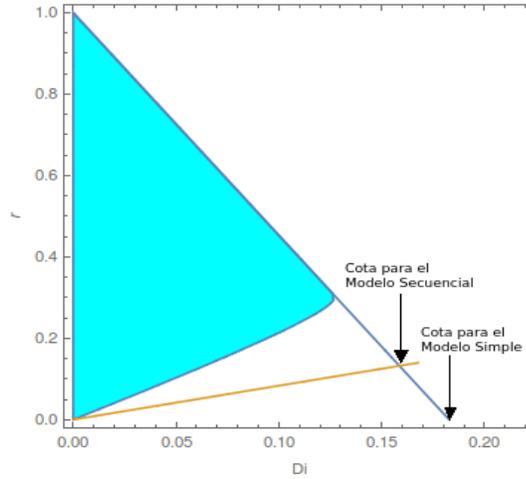


Figura 4.3: La recta con pendiente negativa de color azul corresponde a $\frac{D}{1-r} = \Lambda$, la recta con pendiente positiva de color amarillo, corresponde a $\frac{D}{r} = \mu_{Amax}$. Su intersección corresponde a $D_{cota2} = \frac{\Lambda\mu_{Amax}}{\Lambda + \mu_{Amax}}$. Cuando la recta azul intersecciona el eje horizontal, dicho valor corresponde a $D = \Lambda$. El área pintada en color cian corresponde a la zona donde es posible coexistencia para $S_{AI_n} = 5(g/l)$. El contorno que está por debajo del área de coexistencia corresponde a la curva $(D(\theta), r(\theta))$. A medida que S_{AI_n} crece, el área color cian rellena todo el triángulo formado por las dos rectas.

$$\lim_{S_{AI_n} \rightarrow \infty} D(\theta) = \frac{\Lambda\mu_{Amax}}{\mu_{Amax}\theta + \Lambda}.$$

En dicho caso, el máximo de la curva $D(\theta)$ se encuentra en $\theta = 1$. Este resultado nos muestra que incluso para valores arbitrariamente altos de S_{AI_n} , todos los valores de la curva $D(\theta)$ (y por lo tanto, también su valor máximo), son estrictamente menores que Λ . Por tanto, se aprecia que el Modelo Simple siempre tiene un mayor rango de valores para D que permiten la coexistencia, en relación al Modelo Secuencial, a iguales valores de S_{AI_n} tales que la condición (4.13) se cumpla para todo $D \in [0, \Lambda]$ (Ver la Figura 4.3 donde se aprecia esto gráficamente), y además, el valor $D = \frac{\Lambda\mu_{Amax}}{\mu_{Amax} + \Lambda}$ debe corresponder a una cota máxima de valores de D para el Modelo Secuencial cuando se toman valores de S_{AI_n} arbitrariamente altos.

4.2. Condiciones de Estabilidad

A continuación se planteará realizar una distinción entre distintas condiciones de estabilidad entre los modelos Simple y Secuencial, en particular, poder

distinguir entre los escenarios III y IV, que se recuerda, corresponden respectivamente a uno en que el equilibrio de coexistencia es globalmente asintóticamente estable desde condiciones iniciales de poblaciones mayores que cero y de sustrato mayores o iguales a cero, y el otro en el cual dicho equilibrio es sólo localmente asintóticamente estable, y existe riesgo de washout del microorganismo metanogénico para condiciones iniciales de población metanogénica lo suficientemente bajas. Antes de proceder, volvamos a analizar un Quimiostato Simple, con función de Crecimiento Haldane. Recordemos que el Quimiostato Simple es de la forma:

$$\begin{aligned}\dot{X} &= (\mu(S) - D)X \\ \dot{S} &= -k\mu(S)X + D(S_{In} - S),\end{aligned}$$

Como vimos en el Teorema 5, la condición en que el equilibrio de Coexistencia es global y asintóticamente estable desde cualquier condición inicial de población mayor a cero corresponde a:

$$D < \mu(S_{In}). \quad (4.15)$$

Además, recordemos que la condición para washout del microorganismo en el Quimiostato Simple corresponde a:

$$D > \mu(S^+),$$

donde:

$$S^+ = \begin{cases} S_{In} & S_{In} \leq S_{max} \\ S_{max} & S_{In} > S_{max}. \end{cases}$$

Notemos que cuando $S_{In} \leq S_{max}$, si tenemos $D < \mu(S_{In})$, esto corresponde a la vez a la condición de sobrevivencia del microorganismo y a la estabilidad global de dicho equilibrio. A esta situación nos referiremos como una de "estabilidad garantizada", puesto que para cualquier valor de D que no incurra en washout, se tendrá garantizada la estabilidad global del equilibrio de coexistencia.

Volviendo ahora a los modelos que estamos estudiando, se plantea el problema de establecer una comparación entre los escenarios de estabilidad garantizada en ambos modelos, para valores de S_{AI_n} y D iguales en ambos modelos. Recordemos que para el Modelo Simple, si las condiciones de washout no se cumplen, y además se tiene la condición:

$$\mu_M(k_2 X_A^*) > D, \quad (4.16)$$

entonces nos encontramos en el Escenario III, que corresponde a la estabilidad global del Equilibrio de coexistencia E_3 . Equivalentemente, para el Modelo Secuencial vimos que la condición corresponde a:

$$\mu_M(S_{M1}^*) > \frac{D}{1-r}, \quad (4.17)$$

donde, $S_{M1}^* = k_2 X_{A1}^*$. Queremos ahora ver en qué condiciones se cumplirá la condición de estabilidad garantizada. En el Modelo Simple, corresponderá a:

$$k_2 X_A^*(D) < S_{max}, \quad (4.18)$$

donde recordemos:

$$X_A^*(D) = \frac{1}{k_1}(S_{AI n} - S_A^*(D)).$$

En el Modelo Secuencial, la condición de estabilidad garantizada corresponderá a:

$$k_2 X_{A1}^*(D, r) < S_{max}, \quad (4.19)$$

donde, recordemos:

$$X_{A1}^*(D, r) = \frac{1}{k_1}(S_{AI n} - S_{A1}^*(D, r)).$$

En el próximo capítulo, demostraremos de forma explícita que para todo $r \in]0, 1[$ se debe cumplir que $S_{A1}^*(D, r) > S_A^*(D)$. Observando las fórmulas de los equilibrios $X_A^*(D)$ y $X_{A1}^*(D, r)$ puede apreciarse entonces que si $S_{A1}^*(D, r) > S_A^*(D)$, luego tendremos $X_A^*(D) > X_{A1}^*(D, r)$ para el mismo valor de D en ambos modelos.

Una conclusión importante de $X_A^*(D) > X_{A1}^*(D, r)$ es que si ambos valores cumplen las restricciones (4.18) y (4.19), luego tenemos:

$$\mu_M(X_{A1}^*(D, r)) < \mu_M(X_A^*(D)).$$

ya que ambos equilibrios se encontrarán en la fase creciente de la función Haldane.

Por otra parte, recordemos que las condiciones:

$$\mu_A(S_{AI n}) > D \quad (4.20)$$

$$\mu_A(S_{AI n}) > \frac{D}{r}, \quad (4.21)$$

deben cumplirse para el Modelo Simple y Secuencial respectivamente, puesto que garantizan que el Escenario I no se presente.

Por lo tanto, dejando fijo $S_{AI n}$ en ambos modelos, tenemos que la condición para encontrarnos en la situación de estabilidad garantizada para todo D del

Modelo Simple corresponde a cuando las condiciones que enunciamos (4.16), (4.18) y (4.20) se cumplen, es decir, D debe cumplir a la vez $D < \mu_A(S_{AI n})$ y $D \in]0, \mu_M(k_2 X_A^*(D))]$, donde $k_2 X_A^*(D) < S_{max}$, lo que nos define el conjunto:

$$D \in \{ \{D : \mu_A(S_{AI n}) > D\} \cap \{D : D \in]0, \mu_M(k_2 X_A^*(D))], k_2 X_A^*(D) < S_{max}\} \}.$$

Respectivamente para el Modelo Secuencial, las condiciones (4.17), (4.19) y (4.21) se cumplen, es decir, D debe cumplir a la vez $\frac{D}{r} < \mu_A(S_{AI n})$ y $\frac{D}{1-r} \in]0, \mu_M(k_2 X_{A1}^*(D, r))]$, donde $k_2 X_{A1}^*(D, r) < S_{max}$ y recordemos $r \in]0, 1[$. Estas dos condiciones corresponden al conjunto:

$$D \in \{ \{D : \mu_A(S_{AI n}) > \frac{D}{r}\} \cap \{D : D \in]0, (1-r)\mu_M(k_2 X_{A1}^*(D, r))], k_2 X_{A1}^* < S_{max}\} \}.$$

Claramente tenemos que la selección de valores de D para el Modelo Secuencial se encuentra más restringida que para el Modelo Simple. De modo que podemos concluir que, bajo este criterio, el Modelo Simple permite establecer mayor flexibilidad de valores de D para alcanzar estabilidad garantizada, que lo que permite el Modelo Secuencial, para valores fijos de $S_{AI n}$.

A continuación estableceremos una curva de nivel para distinguir los Escenarios III y IV en el Modelo Secuencial.

4.2.1. Curva de nivel para Zonas de Estabilidad del Equilibrio de Coexistencia en el Modelo Secuencial

En la presente sección construiremos una curva de nivel para determinar las zonas de estabilidad del equilibrio de coexistencia del Modelo Secuencial. La parametrización será semejante, pero no idéntica a la realizada en la sección 4.1.1 para el caso $X_{M2S}^* \leq 0$, puesto que acá no estableceremos una desigualdad, sino construiremos una curva en el caso $X_{M2U}^*(D, r) = 0$, y a partir de la misma, seremos capaces de distinguir zonas entre las zonas de estabilidad para valores de (D, r) .

Empecemos recordando las fórmulas de los equilibrios del sustrato y microorganismo acidogénico, en el primer reactor, que se obtienen de resolver $\mu_A(S_{A1}) = \frac{D}{r}$, quedando de esta forma:

$$S_{A1}^*(D, r) = K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} r - D}$$

$$X_{A1}^*(D, r) = \frac{1}{k_1} (S_{AI n} - S_{A1}^*(D, r)).$$

Además, recordemos las fórmulas de los equilibrios inestables de sustrato y microorganismo metanogénico en el segundo reactor y se recuerda que estos equilibrios se obtienen de resolver $\mu_M(S_{M2}) = \frac{D}{1-r}$, de esta forma obteniendo:

$$S_{M2U}^*(D, r) = K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D} - 1\right) + \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D}\right)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_{M2U}^*(D, r) = \frac{1}{k_3} (k_2 X_{A1}^*(D, r) - S_{M2U}^*(D, r)).$$

De esta forma, enunciamos que estamos interesados en el caso:

$$X_{M2U}^*(D, r) = \frac{1}{k_3} (k_2 X_{A1}^*(D, r) - S_{M2U}^*(D, r)) = 0. \quad (4.22)$$

Cuando $X_{M2U}^* > 0$, nos encontramos en el Escenario IV, y en dicho caso, la estabilidad del equilibrio de coexistencia X_{M2S}^* es localmente asintóticamente estable. Si $X_{M2U}^* < 0$, nos encontramos en el Escenario III, y en dicho caso, la estabilidad del equilibrio de coexistencia X_{M2S}^* es globalmente asintóticamente estable. Más adelante veremos cómo la parametrización de la curva $X_{M2U}^*(D, r) = 0$ nos permitirá determinar para qué valores de D y r nos encontraremos en dichos escenarios.

Procederemos de forma similar a lo hecho en la sección 4.1.1, nuevamente definimos θ de la forma:

$$\theta := \frac{\Lambda}{D}(1-r).$$

Donde, tomaremos valores de θ , en principio, que cumplan $\theta \in]1, +\infty[$
Y despejando r de la parametrización, tenemos:

$$r = 1 - \frac{D\theta}{\Lambda}.$$

Siguiendo los mismos pasos que en la parametrización realizada anteriormente en la sección 4.1.1, se definirán las funciones:

$$\tau(\theta) := S_{AIn} - \frac{k_1}{k_2} K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda} - 1\right) + \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda}\right)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$\psi(\theta) := \frac{\mu_{Amax}}{\Lambda}\theta + 1 > 0,$$

donde, notemos, $\tau(\theta)$ en este caso es distinta de cómo fue definida en la parametrización de la sección 4.1.1. De este modo, será posible despejar D en (4.22), y nos quedará:

$$D(\theta) := \mu_{Amax} \frac{\tau(\theta)}{K_{SA} + \tau(\theta)\psi(\theta)}.$$

Claramente, de forma similar a lo visto en la parametrización de la sección 4.1.1, esta parametrización de $D(\theta)$ sólo tendrá sentido para $\tau(\theta) > 0$, y además, dicha condición implica que $0 < D < \frac{\Lambda}{\theta}$, lo que garantiza por su parte que $r \in]0, 1[$.

Por tanto, se vuelve a plantear el problema de encontrar valores de θ tales que $\tau(\theta)$ sea positivo, de modo que estudiaremos el comportamiento de la derivada de $\tau(\theta)$. Una vez más, nos será útil hacer una función auxiliar:

$$\begin{aligned} \phi(\theta) &:= \left(\frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda} - 1 \right) \\ \phi'(\theta) &= \frac{\mu_{Mmax}}{\Lambda} > 0. \end{aligned}$$

De esta forma:

$$\begin{aligned} \tau(\theta) &= S_{AI_n} - \left(\frac{k_1}{k_2} K_{IM} \frac{\phi(\theta) + \sqrt{\phi(\theta)^2 - 4 \frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2} \right) \\ \tau'(\theta) &= -\frac{k_1}{k_2} K_{IM} \phi'(\theta) \left(\frac{\phi(\theta)}{\sqrt{\phi(\theta)^2 - 4 \frac{K_{SM}}{K_{IM}}}} + 1 \right) < 0 \quad \forall \theta > 1. \end{aligned}$$

En este caso $\tau(\theta)$ es monótonamente decreciente, al ser siempre negativa su derivada. Eventualmente, $\tau(\theta)$, diverge a $-\infty$ cuando $\theta \rightarrow \infty$. Esto nos muestra que existe un θ^* que cumplirá $\tau(\theta^*) = 0$ y luego $\tau(\theta) < 0$ para todo $\theta > \theta^*$. Es decir, a partir de dicho θ^* la parametrización dejará de tener sentido. Evidentemente, si $\tau(1) < 0$, esta parametrización no tiene valores de θ que permitan construir la curva $D(\theta)$. Estos casos corresponden a una situación de **estabilidad garantizada** como la estudiamos en la sección anterior.

Analizando la derivada de $D(\theta)$, tenemos:

$$D'(\theta) = \frac{\mu_{Amax}}{(K_{SA} + \tau(\theta)\psi(\theta))^2} (K_{SA}\tau'(\theta) - \psi'(\theta)\tau(\theta)^2),$$

se aprecia que será siempre negativa, por lo tanto, $D(\theta)$ decrece de forma monótona y se anulará en θ^* . En contraste con nuestra parametrización anterior de la sección 4.1.1, esta parametrización sólo estará bien definida para valores de $\theta \in]1, \theta^*[$, y nunca estará bien definida si $\tau(1) < 0$.

Para obtener la coordenada r en la presente parametrización, se recuerda que $r = 1 - \frac{\theta D}{\Lambda}$. Así, la fórmula de $r(\theta)$ es:

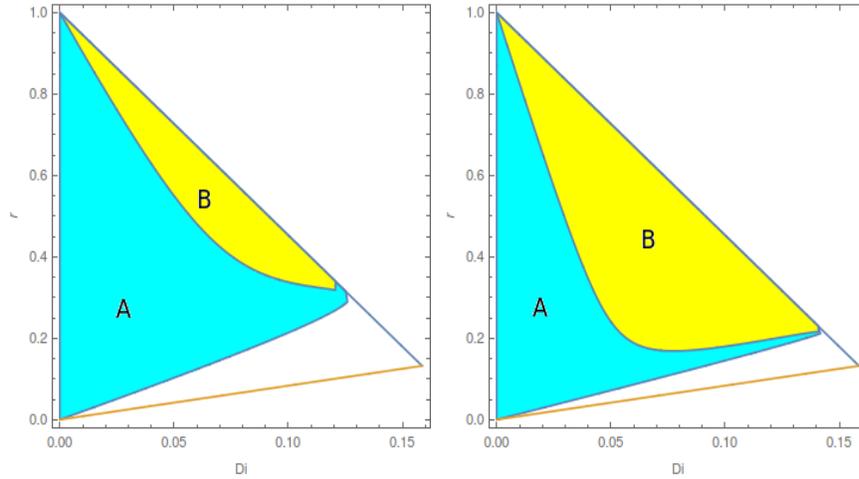


Figura 4.4: Distinción para zonas de estabilidad para $S_{AI_n} = 5(g/l)$ a la izquierda y $S_{AI_n} = 10(g/l)$ a la derecha. El sector color cian (señalado con la letra A), corresponde a la zona de estabilidad global del equilibrio de coexistencia. El sector color amarillo (señalado con la letra B), corresponde a la zona de estabilidad local del equilibrio de coexistencia. La curva que separa estas dos áreas corresponde a la curva $(D(\theta), r(\theta))$ correspondiente a $X_{M2U}^* = 0$. Nótese como a medida que S_{AI_n} crece, el área de estabilidad global se hace menor.

$$r(\theta) = 1 - \frac{\mu_{Amax}}{\Lambda} \frac{\theta\tau(\theta)}{K_{SA} + \tau(\theta)\psi(\theta)},$$

y es evidente que $r(\theta^*) = 1$.

Tenemos una parametrización de una curva $\theta \rightarrow (D(\theta), r(\theta))$ que caracteriza la curva $X_{M2U}^* = 0$. Esta curva nos permitirá determinar para qué valores de (D, r) el equilibrio X_{M2U}^* es factible, implicando que se estará en el Escenario IV. La clave está en que puede probarse que la función $X_{M2U}^*(D, r)$, para un valor de D fijo es monótonamente creciente respecto a r . Por lo tanto, para todo punto en la curva $(D(\theta), r(\theta))$, fijando algún D perteneciente en dicha curva, para todo $r > r(\theta)$ nos encontraremos en la zona determinada por el Escenario IV, es decir, $X_{M2U}^* > 0$. El mismo argumento nos permite decir que para todo $r < r(\theta)$, nos encontraremos en $X_{M2U}^* < 0$, es decir, en el Escenario III. Podemos apreciar gráficamente la distinción de estas zonas en la Figura 4.4.

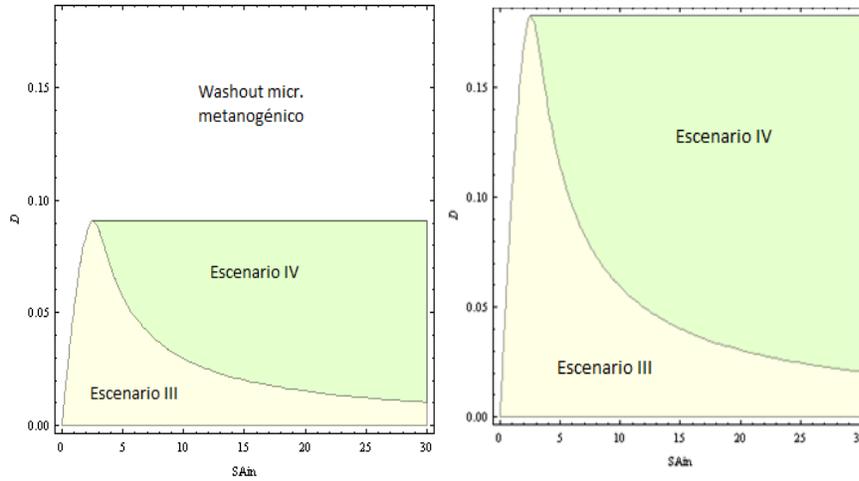


Figura 4.5: El gráfico de la izquierda nos muestra los escenarios de estabilidad para el Modelo Secuencial en el plano (S_{AI_n}, D) , con $r = 0,5$, junto con las del Modelo Simple a la derecha. Es notorio que las zonas de estabilidad global (correspondientes al Escenario III) son de menor tamaño que las indicadas para el Modelo Simple.

4.2.2. Comparaciones Cualitativas entre Zonas de Estabilidad

Hemos podido obtener una parametrización de una curva para determinar el caso $X_{M2U}^*(D, r) = 0$, y a partir de dicha curva, obtener un criterio para determinar las zonas de estabilidad para el Modelo Secuencial. Para el Modelo Simple, no se puede despejar D en $X_{MU}^*(D) = 0$, de modo que no se puede directamente establecer una comparación entre los valores de D que distinguen los Escenarios III y IV en cada modelo.

Sin embargo, recordemos que en el capítulo anterior se estableció que, a medida que S_{AI_n} crece, los valores de D que permiten la coexistencia serán $D \in]0, \Lambda[$ para el Modelo Simple, y para el Modelo Secuencial estarán en $D \in]0, D(\bar{\theta})[$, donde $D(\bar{\theta})$ corresponde al máximo de la función $D(\theta)$ obtenida en la sección 4.1.1. También probamos que $D(\bar{\theta}) \leq \frac{\Lambda \mu_{Amax}}{\Lambda + \mu_{Amax}} < \Lambda$ para todo $S_{AI_n} > 0$. Por lo tanto, dado que los valores de D que permiten coexistencia siempre están más restringidos en el Modelo Secuencial, cualitativamente se ha observado que esto mismo ocurre para los valores de D que garantizan estabilidad, como podemos apreciarlo gráficamente en la figura 4.5.

Capítulo 5

Comparaciones de Desempeño en Descontaminación y Producción de Metano

En el presente capítulo, se compararán los modelos en dos criterios: en términos de capacidad descontaminante, y en términos de producción de metano. Adicionalmente se considerarán comparaciones para los modelos, tomando criterios en forma combinada. Estas comparaciones se harán tomando en consideración los valores de D , r y S_{AI_n} de los equilibrios. Recordemos que en el Modelo Simple, D corresponde a la tasa de dilución del reactor, es decir, el cociente entre Q , el caudal de líquido entrante, y V , el volumen del reactor. En contraste, en el Modelo Secuencial, D corresponde al cociente entre el caudal Q y la suma del volumen de ambos reactores, V , y por su parte r corresponde a la proporción de dicho volumen en cada reactor, con el primer reactor teniendo un volumen rV y el segundo $(1 - r)V$. Habitualmente, se supondrá que ambos modelos tienen los mismos valores de D y S_{AI_n} , y luego se establecerán comparaciones para valores variables de r .

5.1. Descontaminación

Por capacidad descontaminante se entiende como el nivel de sustrato en estado estacionario. Lo más bajo el nivel es, mejor el desempeño. En ambos sistemas, es trivial notar que en $D = 0$, ambos niveles de sustrato de salida en los equilibrios serán cero. Pero, por supuesto, esto no es un estado aceptable de operación. A continuación probaremos que, en ambos modelos, simple y secuencial, las funciones de sustrato son crecientes respecto al valor de D , y por lo tanto, una configuración óptima para descontaminación no es factible en la práctica.

Demostración de pérdida de desempeño sobre la variable D

Proposición 8. *Las funciones de sustrato son crecientes respecto a la variable D para cualquier $D > 0$.*

Demostración. Dado que ambos modelos tienen comportamiento idéntico en sus equilibrios respecto a la variable D , bastará con probar este resultado respecto a los equilibrios del Modelo Simple, de manera que de aquí en adelante, sólo se considerarán las fórmulas de equilibrios de dicho modelo. Tomando la función correspondiente al equilibrio del sustrato acidogénico, es inmediato notar que:

$$S_A^*(D) = K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} - D}$$

$$\frac{dS_A^*(D)}{dD} = K_{SA} \left(\frac{1}{\mu_{Amax} - D} + \frac{D}{(\mu_{Amax} - D)^2} \right).$$

La derivada es siempre positiva, por lo tanto, esta función es creciente para todo $D > 0$, así, siempre habrá pérdida de desempeño a medida que D crezca.

Respecto al equilibrio $S_{MS}^*(D)$, correspondiente al de coexistencia estable del sustrato metanogénico, tenemos que:

$$S_{MS}^*(D) = K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}}{D} - 1 \right) - \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}}{D} \right)^2 - 4 \frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}.$$

Para calcular la derivada de $S_{MS}^*(D)$, será útil una función auxiliar:

$$\phi(D) := \frac{\mu_{Mmax}}{D} - 1$$

$$\phi'(D) = -\frac{\mu_{Mmax}}{D^2} < 0.$$

De esta forma, tenemos:

$$S_{MS}^*(D) = \frac{K_{IM}}{2} \left(\phi(D) - \sqrt{\phi(D)^2 - 4 \frac{K_{SM}}{K_{IM}}} \right)$$

$$\frac{dS_{MS}^*(D)}{dD} = \frac{K_{IM}}{2} \left(\phi'(D) \left(1 - \frac{\phi(D)}{\sqrt{\phi(D)^2 - 4 \frac{K_{SM}}{K_{IM}}}} \right) \right).$$

Se aprecia que el valor de la derivada es siempre positivo, de modo que, nuevamente esta función es creciente para todo $D > 0$. Así concluimos que ambos sustratos perderán desempeño a medida que D crezca, tanto para el Modelo Simple, como en el Modelo Secuencial. ■

Por otra parte, si el nivel de D se fija en ambos modelos, y se comparan los valores de sus sustratos en el equilibrio, entonces puede probarse que el Modelo Secuencial siempre tiene peor desempeño que el Modelo Simple para cualquier valor de r . Esto puede deducirse a partir de las identidades:

$$\begin{aligned} S_{A1}^*(D, 1) &= S_A^*(D) \\ S_{M2S}^*(D, 0) &= S_{MS}^*(D), \end{aligned}$$

además, se demostrará que $S_{A1}^*(D, r)$ es creciente en r , y $S_{M2}^*(D, r)$ es decreciente en r . De esta forma, siempre hay una pérdida de desempeño en nivel de descontaminación en el Modelo Secuencial. En términos de diseño, esto implica que si el Modelo Secuencial debe alcanzar el mismo desempeño que el Modelo Simple, el Modelo Secuencial siempre debe tener mayor volumen de líquido, o menor caudal, disminuyendo así el valor de D . A continuación las demostraciones mencionadas se harán en detalle:

Demostración de pérdida de desempeño para sustrato acidogénico

Proposición 9. *La función $S_{A1}^*(D, r)$ tiene peor desempeño que la función $S_A^*(D)$, para un valor de D fijo.*

Demostración. La fórmula de sustrato acidogénico en el equilibrio para el Modelo Simple es:

$$S_A^*(D) = K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} - D}.$$

La fórmula de sustrato acidogénico en el equilibrio para el Modelo Secuencial es:

$$S_{A1}^*(D, r) = K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax}r - D}.$$

Se recuerda que $S_{A1}^*(D, 1) = S_A^*(D)$, y además:

$$\frac{dS_{A1}^*(D, r)}{dr} = -K_{SA}\mu_{Amax} \frac{D}{(\mu_{Amax}r - D)^2},$$

lo cual es negativo para cualquier valor de $D > 0$ y $r \in]0, 1[$, por lo tanto, es decreciente. Por lo tanto, para cualquier valor de $r \in]0, 1[$, el valor de $S_{A1}^*(D, r)$ será mayor que $S_A^*(D)$. ■

Demostración de pérdida de desempeño para sustrato metanogénico

Proposición 10. *La función $S_{M2S}^*(D, r)$ tiene peor desempeño que la función $S_{MS}^*(D)$, para un valor de D fijo.*

Demostración. La fórmula de sustrato metanogénico en el equilibrio para el Modelo Simple es:

$$S_{MS}^*(D) = K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}}{D} - 1\right) - \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}}{D}\right)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}.$$

La fórmula de sustrato metanogénico en el equilibrio para el Modelo Secuencial es:

$$S_{M2S}^*(D, r) = K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D} - 1\right) - \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D}\right)^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}.$$

Se recuerda que $S_{M2}^*(D, 0) = S_M^*(D)$. Para simplificar la notación se utilizará la función auxiliar:

$$\phi(r) := \frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D} - 1,$$

para $r \in]0, 1[$ y $D > 0$, se tiene que:

$$\phi'(r) < 0.$$

Así:

$$\begin{aligned} S_{M2S}^*(D, r) &= K_{IM} \frac{\phi(r) - \sqrt{\phi^2(r) - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2} \\ \frac{dS_{M2}^*(r)}{dr} &= \frac{K_{IM}}{2} \left(\phi'(r) - \frac{2\phi(r)\phi'(r)}{2\sqrt{\phi^2(r) - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}} \right) \\ &= \frac{K_{IM}}{2} \phi'(r) \left(1 - \frac{\phi(r)}{\sqrt{\phi^2(r) - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}} \right) > 0. \end{aligned}$$

Por lo tanto, la derivada es positiva. Así, la función es creciente respecto a r , y por lo tanto, para cualquier $r \in]0, 1[$ el valor de $S_{M2S}^*(D, r)$ será mayor que $S_{MS}^*(D)$. ■

D (d^{-1})	Sustrato Acidogénico (g/l)
0.1	0.645
0.07	0.440
0.05	0.309
0.02	0.120

Cuadro 5.1: Desempeño de descontaminación de sustrato acidogénico del Modelo Simple

D (d^{-1})	Sustrato Metanogénico (g/l)
0.1	0.886
0.07	0.570
0.05	0.389
0.02	0.147

Cuadro 5.2: Desempeño de descontaminación de sustrato metanogénico del Modelo Simple

5.1.1. Resultados cuantitativos

Modelo Simple

Valores de desempeño en descontaminación han sido calculados para $S_{AIn} = 5(g/l)$ y múltiples valores de D han sido calculados para las salidas de sustratos acidogénico y metanogénico para los modelos Simple y Secuencial, que se encuentran en las tablas 5.1 y 5.2 respectivamente. Como se demostró, a medida que D crece, el desempeño de descontaminación empeora.

Modelo Secuencial

Para el Modelo Secuencial, el desempeño ha sido calculado a su vez para $S_{AIn} = 5(g/l)$ y múltiples valores de D . Para el valor de r en las tablas 5.3 y 5.4, los valores máximos y mínimos posibles para garantizar la factibilidad de los equilibrios de coexistencia han sido utilizados en los cálculos, y en las respectivas tablas son referidos como "Min. Valor" y "Max. Valor". También, en la tabla está incluida la pérdida de desempeño porcentual en comparación al valor obtenido en el Modelo Simple, utilizando las fórmulas:

$$\frac{S_A^* - S_{A1}^*}{S_A} \quad \frac{S_M^* - S_{M2S}^*}{S_M^*}$$

Los resultados se muestran en las tablas 5.3 y 5.4. Como se pudo notar

r	D (d^{-1})	Sustrato Acidogénico (g/l)	% Pérdida Desempeño
Min. Valor	0.1	4.549	604.7%
Max. Valor	0.1	1.600	147.9%
Min. Valor	0.07	4.751	980.3%
Max. Valor	0.07	0.741	68.5%
Min. Valor	0.05	4.841	1468.3%
Max. Valor	0.05	0.432	39.9%
Min. Valor	0.02	4.944	4008.7%
Max. Valor	0.02	0.135	12.5%

Cuadro 5.3: Desempeño de descontaminación de sustrato acidogénico por el Modelo Secuencial

r	D (d^{-1})	Sustrato Metanogénico (g/l)	% Pérdida Desempeño
Min. Valor	0.1	1.248	40.9%
Max. Valor	0.1	3.536	299.2%
Min. Valor	0.07	0.688	20.7%
Max. Valor	0.07	3.536	520.3%
Min. Valor	0.05	0.439	12.8%
Max. Valor	0.05	3.356	808.2%
Min. Valor	0.02	0.154	4.4%
Max. Valor	0.02	3.356	2300.0%

Cuadro 5.4: Desempeño de descontaminación de sustrato metanogénico por el Modelo Secuencial

con los resultados anteriores, ambas pérdidas de desempeño van en direcciones opuestas, esto es, cuando la pérdida de desempeño en descontaminación acidogénica es alta, la pérdida de desempeño en descontaminación metanogénica es baja, y viceversa.

5.2. Producción de Metano

En esta sección nos concentraremos en la producción de metano en estado estacionario en ambos modelos. Las correspondientes fórmulas para la producción en estado estacionario son:

$$Met(D) = k_4DX_{MS}^*(D)$$

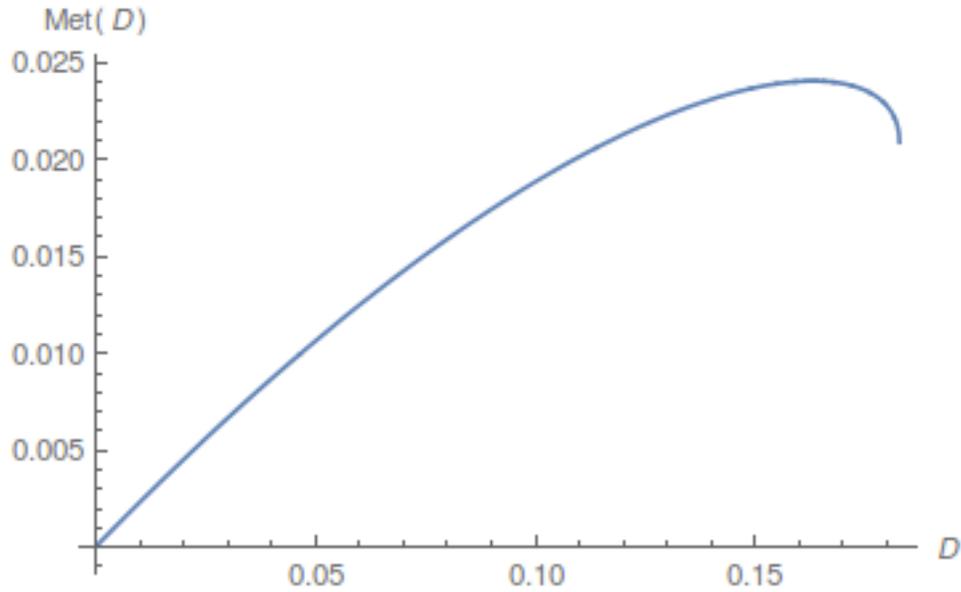


Figura 5.1: Gráfica de la función $Met(D)$ para $S_{AIn} = 5(g/l)$. Se puede observar el aspecto cóncavo que tiene la función.

$$MetSec(D, r) = k_4 \frac{D}{1-r} X_{M2S}^*(D, r),$$

para los modelos Simple y Secuencial respectivamente. A continuación realizaremos comparaciones cualitativas entre estos modelos, para distintos valores de D en el caso del Modelo Simple, y (D, r) , en el caso del Modelo Secuencial, que evidenciarán que el Modelo Secuencial es capaz de mejores valores producción de metano que el Modelo Simple. Finalmente, estableceremos curvas de nivel de producción de metano para el Modelo Secuencial, a semejanza de las obtenidas en el Capítulo 4, las que nos permitirán poder establecer valores de (D, r) que permitan una producción de metano que esté por encima de la producción del Modelo Simple.

5.2.1. Modelo Simple

Respecto a la producción de metano, cualitativamente es posible observar que el comportamiento de la función $Met(D)$ corresponde al de una función cóncava, es decir, a partir de $D = 0$ es creciente, alcanza un valor máximo, y luego decrece hasta el punto en que se indefine la función $X_{MS}^*(D)$. Un ejemplo gráfico podemos verlo en la Figura 5.1. Habitualmente, para valores de S_{AIn} altos, este punto es $D = \Lambda$. Al calcular la derivada de la función de Metano con respecto a D , su comportamiento nos indica que existe a lo menos un

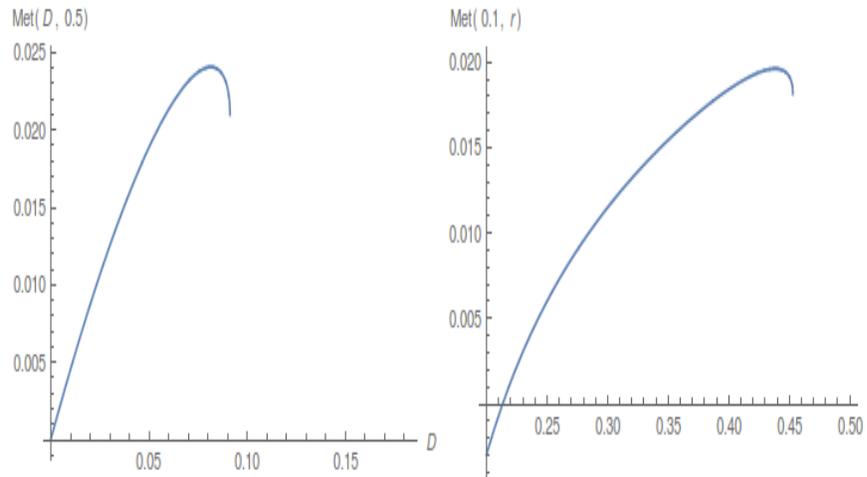


Figura 5.2: Ejemplos de funciones de producción de metano para el Modelo Secuencial con $S_{AIn} = 5(g/l)$. El gráfico de la izquierda nos muestra la producción de metano para la función $MetSec(D, r)$ dejando r fijo en 0,5. El gráfico de la derecha nos muestra a producción de metano para la función $MetSec(D, r)$, esta vez dejando D fijo en 0,1. Nótese en ambos casos la forma de aspecto cóncavo que tienen.

punto crítico entre 0 y Λ . Para los valores máximos de metano obtenidos en los análisis de esta sección, se ha encontrado dicho punto, y luego se ha verificado que corresponde a un máximo en el intervalo de valores de D que permitan la factibilidad de la función.

5.2.2. Modelo Secuencial

Respecto al Modelo Secuencial, el comportamiento de la producción de metano depende de las variables D y r . En primer lugar se nota, para r y S_{AIn} fijos, el comportamiento respecto a la variable D debe ser idéntico que respecto al del Modelo Simple al dejar fijo S_{AIn} , es decir, la función tendrá el comportamiento cóncavo que describimos en la sección anterior y luego se indefinirá en $D = (1 - r)\Lambda$, o en la curva $X_{M2S}^*(D, r) = 0$ que parametrizamos en la sección 4.1.1. Para apreciar un ejemplo ver el gráfico a la izquierda en la Figura 5.2

Respecto a la variable r , el comportamiento es similar, es decir, dejando D y S_{AIn} fijos, la variable la función de Metano tendrá un tramo donde será creciente respecto a r , alcanzará un máximo y luego decaerá hasta que la función de Metano se indefina en $r = 1 - \frac{D}{\Lambda}$, o en la curva $X_{M2S}^*(D, r) = 0$. Para apreciar un ejemplo, notar el gráfico a la derecha en la Figura 5.2

D (d^{-1})	Producción de Metano ($mmol/g$ per d)
0.1	0.019
0.07	0.014
0.05	0.011
0.02	0.005

Cuadro 5.5: Producción de metano para el Modelo Simple

5.2.3. Resultados Cuantitativos

Para analizar comparaciones cuantitativas de producción de metano, se ha calculado el máximo de producción de metano del Modelo Simple, como valor de entrada $S_{AI_n} = 5(g/l)$, para compararlo posteriormente con valores de producción del Modelo Secuencial. El valor del óptimo es:

$$MaxMet = 0,024(mmol/g \text{ per } d).$$

Además de esto, diferentes valores de producción de metano han sido calculados para diferentes valores de D en la tabla 5.5, para ser contrastados a su vez con producciones de metano del Modelo Secuencial al mismo nivel de dilución.

Para el Modelo Secuencial, por su parte, en la tabla 5.6, resultados numéricos de producción de metano son calculados, mostrando diferentes valores de mejora de desempeño en el caso secuencial sobre el Modelo Simple, utilizando como concentración de entrada $S_{AI_n} = 5(g/l)$. En contraste con el método utilizado en el Modelo Simple para obtener el máximo, en este caso los desempeños son calculados fijando D , y tomando el máximo valor de metano a lo largo del correspondiente r . Además, en la tabla 5.6, la comparación de desempeño se hace sobre la producción de metano en el Modelo Simple para ese D en particular, y sobre el mejor valor obtenido por el Modelo Simple, utilizando las siguientes fórmulas:

$$\frac{MetSec(D, r) - Met(D)}{Met(D)} \quad \frac{MetSeq(D, r) - MaxMetSim}{MetSec(D, r)}.$$

En líneas generales, es claro que existe una mejora de desempeño del Modelo Secuencial sobre el Modelo Simple en cuanto a producción de Metano.

Curvas de Nivel para producción de metano

En el capítulo anterior, recordemos, pudimos establecer dos parametrizaciones para el Modelo Secuencial, una de las cuales fue para establecer zonas donde es posible la coexistencia en la sección 4.1.1, y otra para separar escenarios de estabilidad dentro de los escenarios de coexistencia en la sección

D (d^{-1})	Producción de Metano (mmol/g per d)	% Mejora	% Mejora sobre mejor
0.1	0.020	4,0 %	-18,5 %
0.07	0.027	91.3 %	13.3 %
0.05	0.030	181.2 %	24.3 %
0.02	0.032	618.0 %	34.6 %

Cuadro 5.6: Producción de metano para el Modelo Secuencial

4.2.1. En esta sección, utilizando las mismas herramientas que ya definimos para dichas parametrizaciones, las utilizaremos para describir curvas de nivel del tipo $(D(\theta), r(\theta))$, donde dicha curva se encuentra en un determinado nivel de producción de metano fijado con anterioridad.

De esta forma, establecemos que se busca la producción de metano para el nivel:

$$MetSec(D, r) = L.$$

Donde, recordemos:

$$MetSec(D, r) = k_4 \frac{D}{1-r} X_{M2S}^*(D, r).$$

Y recordemos las fórmulas de los equilibrios del sustrato y microorganismo acidogénico, en el primer reactor, que se obtienen de resolver $\mu_A(S_{A1}) = \frac{D}{r}$, así obteniendo:

$$S_{A1}^*(D, r) = K_{SA} \frac{D}{\mu_{Amax} r - D}$$

$$X_{A1}^*(D, r) = \frac{1}{k_1} (S_{A1n} - S_{A1}^*(D, r)).$$

Además, recordemos las fórmulas de los equilibrios estables de sustrato y microorganismo metanogénico en el segundo reactor y se recuerda que estos equilibrios se obtienen de resolver $\mu_M(S_{M2}) = \frac{D}{1-r}$, obteniendo:

$$S_{M2S}^*(D, r) = K_{IM} \frac{\left(\frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D} - 1\right) - \sqrt{\left(1 - \frac{\mu_{Mmax}(1-r)}{D}\right)^2 - 4 \frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$X_{M2S}^*(D, r) = \frac{1}{k_3} (k_2 X_{A1}^*(D, r) - S_{M2S}^*(D, r)).$$

Establecemos, por tanto, que estamos buscando resolver la ecuación:

$$k_4 \frac{D}{1-r} X_{M2S}^*(D, r) = \frac{k_4}{k_3} \frac{D}{1-r} (k_2 X_{A1}^*(D, r) - S_{M2S}^*(D, r)) = L. \quad (5.1)$$

Similarmente a las parametrizaciones anteriores, definimos:

$$\theta := \frac{\Lambda}{D}(1-r).$$

Y recordamos de la sección 4.1.1 que esta parametrización sólo tendrá validez cuando $0 < D < \frac{\Lambda}{\theta}$. De esta forma, despejando r , tenemos:

$$r = 1 - \frac{D\theta}{\Lambda}.$$

y al reemplazar en (5.1), podemos despejar D , utilizando las mismas funciones auxiliares usadas en la parametrización en la sección 4.1.1:

$$\tau(\theta) := S_{AIn} - \frac{k_1}{k_2} K_{IM} \frac{(\frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda} - 1) - \sqrt{(1 - \frac{\mu_{Mmax}\theta}{\Lambda})^2 - 4\frac{K_{SM}}{K_{IM}}}}{2}$$

$$\psi(\theta) := \frac{\mu_{Amax}}{\Lambda}\theta + 1,$$

de esta forma obtenemos:

$$D(\theta) = \mu_{Amax} \frac{\tau(\theta) - K\theta}{K_{SA} + (\tau(\theta) - K\theta)\psi(\theta)},$$

donde en este caso, el valor K estará definido como:

$$K = \frac{k_3 k_1}{k_2 k_6} L.$$

Recordemos que $\tau(\theta) > 0$ debe ser una condición para garantizar la factibilidad este caso, de la misma forma que se vio en la sección 4.1.1. Además, también $\tau(\theta)$ cumplirá que existe un θ^* tal que para todo $\theta > \theta^*$, $\tau(\theta) > 0$.

Aparte de esto, es evidente que nuestra parametrización sólo tendrá sentido cuando $\tau(\theta) - K\theta > 0$, ya que en caso contrario, tendríamos a partir de (5.1) que $S_{A1}^*(D, r) \leq 0$, es decir, correspondería a un equilibrio infactible.

Evidentemente si $K\theta^* > \tau(\theta^*)$, esto quiere decir que el nivel de producción de metano que se ha planteado es infactible. Además notemos que, dado que $\tau(\theta)$ es una función decreciente, y $K\theta$ es creciente, si la parametrización está bien definida en $\theta = \theta^*$, sólo estará bien definida hasta algún valor $\theta_{max} > \theta^*$ en el cual $\tau(\theta_{max}) = K\theta_{max}$.

Finalmente, lo mismo que para las parametrizaciones obtenidas anteriormente, la fórmula correspondiente para $r(\theta)$ se obtiene:

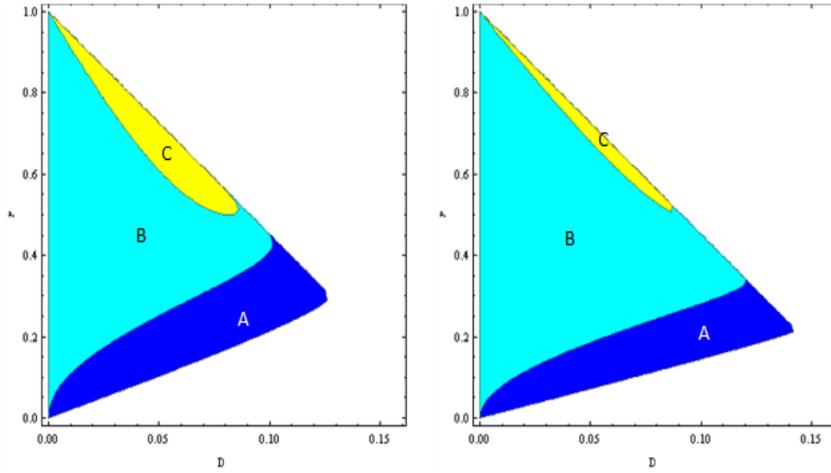


Figura 5.3: Desempeño de producción de metano para $S_{AIn} = 5(g/l)$ a la izquierda, y $S_{AIn} = 10(g/l)$ a la derecha. Los sectores coloreados (en azul, cyan y amarillo) indican los valores de parámetros para los cuales hay coexistencia posible en estado estacionario. El área azul indica menor producción de metano para el Modelo Secuencial que en el Modelo Simple. El área en cyan indica mejor producción para el Modelo Secuencial para el valor de D correspondiente. El área en amarillo indica producción de metano para el Modelo Secuencial que es mejor que la alcanzada por el máximo alcanzado por el Modelo Simple.

$$r(\theta) = 1 - \frac{\mu_{Amax}}{\Lambda} \frac{\theta(\tau(\theta) - K\theta)}{K_{SA} + (\tau(\theta) - K\theta)\psi(\theta)}.$$

Claramente, $r(\theta_{max}) = 1$.

Tras esta caracterización de las curvas de nivel, se muestra el resultado de determinar la curva sobre el máximo de producción de metano alcanzado del Modelo Simple en la Figura 5.3. Es notorio que existen valores de (D, r) que permiten mayor producción de metano en el caso secuencial que la máxima producción alcanzada en el caso simple (ver las zonas amarillas en la figura 5.3). Sin embargo, este resultado depende del valor de S_{AIn} , y se ha observado cualitativamente que la región amarilla en donde el Modelo Secuencial tiene mayor producción de metano tiende a reducirse a medida que S_{AIn} crece.

La estrategia para encontrar valores del Modelo Secuencial que obtengan mejores producción de metano que el Modelo Simple consiste en primero, para un determinado valor de S_{AIn} , encontrar su correspondiente valor de producción máximo de metano para el Modelo Simple. Una vez establecido dicho valor, se plantea la curva de nivel de dicho valor para el Modelo Secuencial a partir de las fórmulas de $D(\theta)$ y $r(\theta)$ establecidos anteriormente. El establecimiento de dicha

curva, y su factibilidad, permitirá explorar la existencia de curvas posibles para niveles de metano mayores a dicho valor, siempre tomando en consideración los criterios de infactibilidad discutidos anteriormente.

5.3. Análisis con criterios asociados

5.3.1. Descontaminación bajo producción de metano óptima

A continuación, analizaremos qué ocurre con los niveles de descontaminación cuando se ha planteado una estrategia óptima de producción de metano, y compararemos qué ocurre en cada modelo en dicho caso. En el Modelo Simple, recordemos la fórmula de producción de metano:

$$Met(D) = k_4 D X_{MS}^*(D),$$

donde, la función $X_{MS}^*(D)$ corresponde a:

$$X_{MS}^*(D) = \frac{1}{k_3} \left(\frac{k_2}{k_1} (S_{AIn} - S_A^*) - S_{MS}^* \right).$$

En la sección anterior vimos que a la función $Met(D)$ tiene un comportamiento similar a una función cóncava, de modo que podemos encontrar un valor máximo de la función para cualquier valor de S_{AIn} que fijemos. En particular, veamos el caso $S_{AIn} = 5(g/l)$, y obtenemos el valor de producción de metano máximo:

$$Met = 0,024(mm\text{ol}/g \text{ per } d),$$

donde el dicho máximo se encuentra en el valor de D :

$$D = 0,163(d^{-1})$$

Para este valor de D , los desempeños descontaminantes serán:

$$S_A^* = 1,118(g/l)$$

$$S_{MS}^* = 2,013(mm\text{ol}/l).$$

Ahora veamos qué ocurre para el Modelo Secuencial, recordemos que la función de producción de metano para este modelo es:

$$MetSec(D, r) = k_4 \frac{D}{1-r} X_{M2S}^*(D, r),$$

D (d^{-1})	r	Prod. de Metano (mmol/g per d)	Sust. Acidogénico (g/l)	Sust. Metanogénico (mmol/l)
0.08	0.54	0.025	0.987	2.568
0.07	0.60	0.027	0.762	2.546
0.06	0.65	0.026	0.584	2.537
0.05	0.71	0.030	0.439	2.537
0.03	0.83	0.032	0.221	2.550

Cuadro 5.7: Producción de metano para el Modelo Secuencial más rendimientos descontaminantes.

donde, la función $X_{M2S}^*(D, r)$ corresponde a:

$$X_{M2S}^*(D, r) = \frac{1}{k_3} \left(\frac{k_2}{k_1} (S_{AI_n} - S_{A1}^*(D, r)) - S_{M2S}^*(D, r) \right).$$

Para el Modelo Secuencial, sabemos que existen valores de (D, r) donde hay mejores zonas de producción de metano, por lo discutido en la sección anterior. De esta forma, se procederá a elegir valores fijos de D , y se maximizará sobre r para encontrar los máximos valores de producción de metano, y además se determinarán los valores de descontaminación para los sustratos en dichos máximos. Los resultados se exponen en la tabla 5.7 e indican que para estos valores elegidos, la descontaminación del sustrato metanogénico es peor, pero comparable, al valor obtenido por el Modelo Simple, pero existe una importante mejora para la descontaminación de sustrato acidogénico.

Este resultado lo podemos interpretar de la siguiente forma: al intentar una producción de metano alta en ambos modelos, el Modelo Secuencial es capaz de obtener resultados de descontaminación y de producción de metano mejores que el Modelo Simple. Sin embargo, notemos que el coste de este resultado será que estos valores se obtienen para valores de D en el Modelo Secuencial mucho menores que los del Modelo Simple, lo que implicará un menor caudal, o mayor volumen de líquido para la operación.

5.3.2. Producción de Metano sobre áreas de estabilidad

En las secciones anteriores, se ha estudiado la producción de metano sin tomar en cuenta las zonas correspondientes a los escenarios III y IV. En general se puede decir que, excepto para las situaciones para S_{AI_n} en donde el Escenario IV no se presenta, las zonas de máxima producción de metano tanto para el Modelo Secuencial como para el Modelo Simple tienden a aparecer en sectores correspondientes al Escenario IV, es decir, en zonas donde el washout del microorganismo metanogénico es posible desde condiciones iniciales bajas.

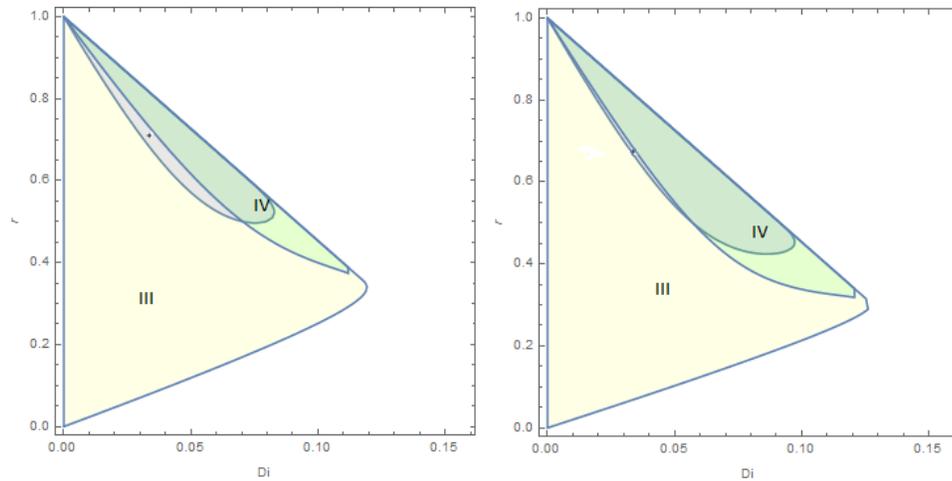


Figura 5.4: Desempeño de producción de metano para $S_{AIn} = 4(g/l)$ a la izquierda, y $S_{AIn} = 5(g/l)$ a la derecha. Los sectores en amarillo, son sectores correspondientes al Escenario III, los sectores en verde, claro u oscuro, corresponden al Escenario IV. Los sectores que se ven en azul (marcados con un punto negro) corresponden a mejora por sobre el nivel establecido para la producción de metano dentro del Escenario III. Como se puede apreciar, para $S_{AIn} = 5(g/l)$ dicha área disminuye notablemente.

Considerando que éste es un escenario peligroso, se ha presentado el problema de ver qué ocurre si se restringe la producción de metano en sectores del Escenario III.

Para esto, se ha calculado el valor del borde de dichos escenarios para el Modelo Simple, al resolver $X_{MU}^* = 0$, se ha calculado el nivel de metano en dicho valor, y se ha explorado para distintos valores de S_{AIn} qué ocurre con la producción de metano para el Modelo Secuencial para dicho nivel.

Como se puede apreciar en las gráficas de la Figura 5.4, el criterio que se distingue es que, restringiendo la producción de metano dentro de zonas del Escenario III, el mismo patrón encontrado visto en las secciones anteriores ocurre, pero a menor escala: existen zonas de mejor producción de metano para el Modelo Secuencial dentro de las zonas de estabilidad global, pero se empieza a restringir a medida que S_{AIn} crece. Para valores altos de S_{AIn} , se vuelve insignificante el área de mejor desempeño para el Modelo Secuencial, de modo que se pierde la mejora bajo dicho criterio.

La estrategia a seguir, por lo tanto en este caso es establecer el nivel máximo de producción de metano para el Modelo Simple dentro de la zona de estabilidad global. Utilizando dicho nivel de producción se puede utilizar la curva de nivel de producción de metano, planteada en la sección 5.2.3, para explorar po-

sibles producciones de metano iguales o superiores al nivel del Modelo Simple, en conjunto con la curva de nivel para el caso $X_{M2U}^* = 0$ determinada en el Capítulo 4 en la sección 4.2.1, se puede determinar la estabilidad de la curva de producción de metano en los casos que se planteen.

Capítulo 6

Conclusiones Generales

Las conclusiones obtenidas en el trabajo se enumeran a continuación:

1. El Modelo Simple es mejor desde un punto de vista de descontaminación que el Modelo Secuencial, para un valor fijo de D . Esto implica que para el Modelo Secuencial cualquier intento de mantener o mejorar los desempeños del Modelo Simple implicará una disminución del caudal o un aumento del volumen del líquido en los reactores.
2. El Modelo Simple permite mayores tasas de dilución que garantizan coexistencia y por lo tanto, además de un mayor rango de valores de D para la
3. El Modelo Secuencial permite mayor capacidad de producción de metano que el Modelo Simple.
4. La producción óptima de metano en ambos sistema tiende a aparecer en situaciones donde hay riesgo de washout metanogénico.
5. Al considerar el Modelo Secuencial, si una estrategia de mejor producción de metano es planteada, entonces la descontaminación de sustrato metanogénico sufrirá la peor pérdida de desempeño en términos de descontaminación.
6. Si en ambos sistemas se plantea una estrategia de producción óptima de metano, el Modelo Secuencial puede mejorar la descontaminación del Modelo Simple, mediante una estrategia de elegir valores de dilución y ratios de volumen apropiados para ambos reactores.
7. Si la producción de metano es restringida a zonas donde la estabilidad del equilibrio de coexistencia esté garantizada, el patrón se repite: existe un área del plano (D, r) donde hay una mejora de producción de metano del

Modelo Secuencial sobre el mejor valor obtenido por el Modelo Simple. Esta área se reduce a medida que S_{AIn} crece.

6.1. Perspectivas de trabajo futuro

Entre los tópicos que se plantean para posibles perspectivas de trabajo futuro se identifican:

1. Optimización transiente: Estudiar estrategias de operación de los biorreactores en vistas de agilizar la operación, mediante control de la variable D .
2. Complementar el modelo con respecto a los distintos gases generados en la reacción, en particular la reacción que produce CO_2
3. Modelos alternativos: Considerar la configuración alternativa en la cual el microorganismo acidogénico es permitido pasar al segundo . En dicho caso, el modelo quedaría reemplazado por:

$$\begin{aligned}
 \dot{X}_{A1} &= \mu_A(S_{A1})X_{A1} - \frac{D}{r}X_{A1} \\
 \dot{X}_{A2} &= \mu_A(S_{A2})X_{A2} + \frac{D}{1-r}(X_{A1} - X_{A2}) \\
 \dot{S}_{A1} &= -k_1\mu_A(S_{A1})X_{A1} + \frac{D}{r}(S_{AIn} - S_{A1}) \\
 \dot{S}_{A2} &= -k_1\mu_A(S_{A2})X_{A2} + \frac{D}{1-r}(S_{A1} - S_{A2}) \\
 \dot{X}_{M2} &= \mu_M(S_{M2})X_{M2} - \frac{D}{1-r}X_{M2} \\
 \dot{S}_{M1} &= k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1} - \frac{D}{r}S_{M1} \\
 \dot{S}_{M2} &= -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + k_2\mu_A(S_{A2})X_{A2} + \frac{D}{1-r}(S_{M1} - S_{M2})
 \end{aligned}$$

En este modelo, la descontaminación del sustrato acidogénico mejoraría a causa del consumo en el segundo reactor por parte del microorganismo acidogénico presente en el mismo. Muchos de los resultados obtenidos en el trabajo realizado pueden transpasarse para este modelo, aparte de los resultados expuestos en [5], en donde se presentan condiciones para las cuales el sistema secuencial puede obtener mejores rendimientos para la descontaminación. Esta perspectiva se presenta como una interesante alternativa para potenciar los resultados obtenidos en este trabajo, para el estudio de sus zonas de estabilidad y condiciones que permitan presentar mejores criterios de descontaminación y producción de metano.

Bibliografía

- [1] Batstone D., Keller J. Newell B. Newland M. 1997 *Model development and full scale validation for anaerobic treatment of protein and fat based wastewater*. Water Sci Technol. 36, 423-431
- [2] Baere L., Mattheeuws B. 2012 *Anaerobic Digestion of the Organic Fraction of Municipal Solid Waste in Europe*. Waste Management: Recycling and Recovery 3,517–526
- [3] Bernard O., Hadj-Zadok Z., Dochain D. 2001 *Dynamical Model Development and Parameter Identification for an Anaerobic Wastewater Treatment Process*. Biotechnology and Bioengineering 75 (4) , 425-438
- [4] Cooney, M., Maynard, N., Cannizzaro C., Benemann, J. (2007). *Two-phase anaerobic digestion for production of hydrogen-methane mixtures* Bioresource Technology 98 (14), 2641-2651
- [5] Haidar I., Rapaport A., Gérard F. 2011 *Effects of spatial structure and diffusion on the performances of the chemostat. (English summary)* Math. Biosci. Eng. 8 (4), 953–971
- [6] Li R., Chen S., Li X. 2010 *Biogas production from anaerobic co-digestion of food waste with dairy manure in a two-phase digestion system*. Applied Biochemistry and Biotechnology 160 (2), 643-654
- [7] Méndez-Acosta H.O. , Campos-Delgado D.U. ,Femat R. ,González-Alvarez V. 2005 *A robust feedforward/feedback control for an anaerobic digester*. Computers & Chemical Engineering. 29 (7), 1613–1623
- [8] Mischaikow M., Smith H.,Thieme H. 1995 *Asymptotically autonomous semiflows: chain recurrence and Lyapunov functions*, Transactions of the American Mathematical Society 347 (5), pp. 1669–1685
- [9] Sbarciog, M., Loccufier, M., Noldus, E. 2010 *Determination of appropriate operating strategies for anaerobic digestion systems*. Biochemical Engineering Journal 51(2010), 180-188

- [10] Sbarciog, M., Moreno, J.A., Vande Wouwer, A. 2014 *Application of super-twisting observers to the estimation of state and unknown inputs in an anaerobic digestion system*. Water Science and Technology. 69 (2), 414-421
- [11] Smith H. and Waltman P. 1995 *The theory of chemostat, dynamics of microbial competition*, Cambridge Studies in Mathematical Biology, Cambridge University Press
- [12] Weinrich S., Nelles M. 2015 *Critical comparison of different model structures for the applied simulation of the anaerobic digestion of agricultural energy crops* Bioresource Technology. 178, 306-312

Capítulo 7

Anexos

7.1. Enunciado de Teorema para Estabilidad Global

Un sistema denominado asintóticamente autónomo es un sistema que tiene la forma:

$$\dot{x} = f(t, x)$$

y está asociado a una ecuación límite, que es de la forma:

$$\dot{y} = g(y)$$

de tal forma que se cumple la relación:

$$f(t, x) \rightarrow g(x), \quad t \rightarrow \infty$$

Se definirá un semiflujo Φ de la siguiente forma:

Sea (X, d) un espacio métrico. Considerando el mapeo $\Phi \times X \rightarrow X \in \Delta = \{(t, s) : t_0 \leq s \leq t < \infty\}$ Φ es denominado un semiflujo no autónomo si es que es continuo y cumple con:

1. $\Phi(s, s, x) = x, \quad s \geq t_0$
2. $\Phi(t, s, \Phi(s, r, x)) = \Phi(t, r, x), \quad t \geq s \geq r \geq t_0$

El semiflujo es llamado autónomo, si además:

3. $\Phi(t + r, s + r, x) = \Phi(t, s, x)$

Haciendo $\Theta(t, x) = \Phi(t + t_0, t_0, x)$ entonces el mapeo $\Theta : [0, \infty) \times X \rightarrow X$ será referido como un semiflujo autónomo. Dado que $\Phi(t, s, x) = \Theta(t - s, x)$, es suficiente estudiar Θ , que es continuo y satisface:

4. $\Theta(0, x) = x$
5. $\Theta(t, \Theta(s, x)) = \Theta(t + s, x)$, $t, s \geq 0$

Un semiflujo no autónomo Φ es denominado asintóticamente autónomo, con semiflujo límite Θ , cuando Θ es un semiflujo autónomo en X y además:

$$\Phi(t_j + s_j, s_j, x_j) \rightarrow \Theta(t, x), \quad j \rightarrow \infty$$

para tres sucesiones cualquiera, $t_j \rightarrow t$, $s_j \rightarrow \infty$, $x_j \rightarrow \infty$, $j \rightarrow \infty$, con $x, x_j \in X$, $0 \leq t$, $t_j < \infty$ y $s_j \geq t_0$.

Consideremos el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias: $\dot{x} = f(t, x)$ y $\dot{y} = g(y)$ en \mathbb{R}^n . Asumimos que f y g son continuas y con soluciones únicas. Si se denota $\Phi(t, s, x_0)$ la solución $x(t)$ del primer sistema para $x(s) = x_0$ y a su vez se denota $\Theta(t, x_0)$ la solución $y(t)$ para el segundo sistema que satisfaga $y(0) = x_0$, entonces Φ es asintóticamente autónoma con semiflujo límite Θ cuando $f(t, x) \rightarrow g(x)$, $t \rightarrow \infty$, uniformemente en subconjuntos compactos de \mathbb{R}^n .

Si Φ es un semiflujo no autónomo en X y $(s, x) \in [t_0, \infty) \times X$, entonces la órbita hacia adelante de Φ a través de (s, x) se define como:

$$\mathcal{O}_\Phi(s, x) = \{\Phi(t, s, x) : t \geq s\} \subset X$$

Finalmente se definirá la recurrencia en cadena. Sea A un conjunto no vacío positivamente invariante de X , y $x, y \in A$. Para $\epsilon > 0$, $t > 0$, una (ϵ, t) -cadena desde x a y (en A) es una sucesión $\{x = x_1, x_2, \dots, x_{n+1} = y; t_1, t_2, \dots, t_n\}$ de puntos $x_i \in A$ y tiempos $t_i \geq t$ tales que $d(\Theta(t_i, x_i), x_{i+1}) < \epsilon$, $i = 1, 2, \dots, n$. Un punto $x \in A$ es denominado recurrente en cadena (en A) si para cada $\epsilon > 0$, $t > 0$ hay una (ϵ, t) -cadena de x a x en A . El conjunto A se dice recurrente en cadena si cada punto en A es recurrente en cadena en A .

Con todas estas definiciones, es posible enunciar el teorema, tal como estaba presente en [8], que fue utilizado para la demostración de estabilidad global:

Teorema 8. *Sea Φ un semiflujo asintóticamente autónomo, con límite el semiflujo Θ , y que la órbita $\mathcal{O}_\Phi(\tau, \xi)$ tenga cerradura compacta. Entonces, el conjunto ω -límite $\omega_\Phi(\tau, \xi)$ es no vacío, compacto, conexo, invariante y recurrente en cadena por el semiflujo Θ y atrae a $\Phi(t, \tau, \xi)$ cuando $t \rightarrow \infty$.*

7.2. Enunciado del Teorema de Estabilidad para el Quimiostato Simple

Antes de proceder con el enunciado del teorema, se plantearán algunas definiciones previas:

Un sistema dinámico es una función de dos variables de la forma:

$$\pi : M \times \mathbb{R} \rightarrow M$$

donde M es \mathbb{R}^n . La función se le denomina un sistema dinámico continuo si π es continua y tiene las siguientes propiedades:

1. $\pi(x, 0) = x$
2. $\pi(x, t + s) = \pi(\pi(x, t), s)$

Dado un punto x , el conjunto $\{\pi(x, t), t \geq 0\}$, se denomina una órbita positiva o trayectoria positiva a través del punto, y se denota por $\gamma^+(x)$. Si un conjunto S es tal que todas las trayectorias que comienzan (es decir, tienen sus condiciones iniciales en S), se mantienen en S para cualquier tiempo positivo, en dicho caso se dice que S es positivamente invariante.

Si un conjunto ω -límite contiene un punto estacionario P , entonces este punto es todo el conjunto ω -límite. Si todos los valores propios de la matriz variacional tienen parte real positiva, dicho punto es un repulsor. Dicho punto no puede estar en el conjunto ω -límite de ninguna trayectoria salvo sí mismo. Si k valores propios tienen parte real positiva y $n - k$, valores propios tienen parte real negativa, entonces existen dos conjuntos: $M^+(P)$, denominado la variedad estable definido por:

$$M^+(P) = \{x \mid \lim_{t \rightarrow \infty} \pi(x, t) = P\}$$

y $M^-(P)$, denominado la variedad inestable, definida por:

$$M^-(P) = \{x \mid \lim_{t \rightarrow -\infty} \pi(x, t) = P\}$$

A continuación se enuncia el Teorema que se encuentra en el Apéndice F en [11]. Considérese dos sistemas de ecuaciones diferenciales de la forma:

$$\dot{z} = Az \quad \dot{y} = f(y, z) \quad (7.1)$$

$$\dot{x} = f(x, 0) \quad (7.2)$$

donde:

$$z \in \mathbb{R}^m, \quad (y, z) \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$$

$$x \in \Omega = \{x | (x, 0) \in \mathcal{D}\} \subset \mathbb{R}^n$$

con f continuamente diferenciable, \mathcal{D} , positivamente invariante para ambos sistemas, y el primer sistema es disipativo en el sentido que existe un subconjunto compacto de \mathcal{D} en el cual cada solución eventualmente entra y se mantiene allí. Ahora, consideréanse las siguientes hipótesis:

1. Todos los valores propios de A tienen parte real negativa.
2. La ecuación (7.2) tiene un número finito de puntos de equilibrio en Ω , cada uno de los cuales es hiperbólico para (7.2)- Se denotan estos puntos de equilibrio x_1, \dots, x_p .
3. La dimensión de la variedad estable de x_j es n para $1 \leq j \leq r$, y la dimensión de las variedades estables de x_j es menor que n para $j = r + 1, \dots, p$. Expresado en símbolos, $\dim(M^+(x_j) = n)$, $i = 1, \dots, r$, $\dim(M^+(x_j) < n)$, $i = r + 1, \dots, p$
4. $\Omega = \cup_{i=1}^p M^+(x_j)$.
5. La ecuación (7.2) no posee un ciclo de puntos de equilibrio.

De esta forma, se enuncia el teorema:

Teorema 9. *Si las hipótesis indicadas se cumplen, y sea $(y(t), z(t))$ una solución de (7.1). Entonces, para algún i :*

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (y(t), z(t)) = (x_i, 0)$$

En otras palabras, $\mathcal{D} \subset \Lambda^+(x_i, 0)$, donde Λ^+ representa la variedad estable de (7.1).

Veamos ahora cómo este resultado se aplica al Quimiostato Simple. Recordemos que podemos escribir dicho modelo de la forma:

$$\begin{aligned} \dot{X} &= (\mu(S_{In} - z(t) - kX) - D)X \\ \dot{z} &= -Dz, \end{aligned}$$

donde en este caso $\mathcal{D} = \{(X, z) : X > 0, kX + z \leq S_{In}\}$. De esta forma, este sistema estará asociado a:

$$\dot{X} = (\mu(S_{In} - kX) - D)X$$

donde $\Omega = \{X : X > 0, kX \leq S_{In}\}$. Y es sencillo verificar en el caso de $\mu(\cdot)$ siendo una función Monod, que esta ecuación satisface todas las condiciones

enunciadas para el equilibrio X^* , bajo las condiciones que permiten la coexistencia, puesto que en dicho caso sólo existe un equilibrio dentro del conjunto ω -límite, cuya variedad estable, como vimos en el Teorema 5, es de dimensión 1, y cubre todo Ω .

Debe notarse, que en el caso Haldane, el equilibrio inestable X_U^* , para las condiciones que se enuncian, es negativo, y por lo tanto, se encuentra fuera de Ω , de esta forma, las condiciones planteadas se cumplen y garantizan la estabilidad global del equilibrio X_S^* en dicho caso.

7.3. Tabla de valores numéricos utilizados

Los valores numéricos utilizados para el estudio realizado en el trabajo fueron gentilmente sugeridos por el Doctor Andrés Donoso de la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso. Muchos de estos valores coinciden con los valores encontrados en [3] y [9]. Los valores de las constantes de la función Haldane, sin embargo, son distintos puesto que, por sugerencia del Doctor Donoso, de esta forma se pone más en manifiesto los fenómenos de inhibición del crecimiento para valores altos de sustrato.

Constante	Valor	Unidad
k_1	42	
k_2	115	<i>mmol/g</i>
k_3	268	<i>mmol/g</i>
μ_{AMax}	1.2	d^{-1}
K_{SA}	7.1	<i>g/l</i>
μ_{MMax}	0.7	d^{-1}
K_{SM}	5	<i>mmol/l</i>
K_{IM}	2.5	<i>mmol/l</i>

Cuadro 7.1: Constantes utilizadas para los modelos.