

Figura 7. Dependencia del coeficiente de fricción con el número de Reynolds.

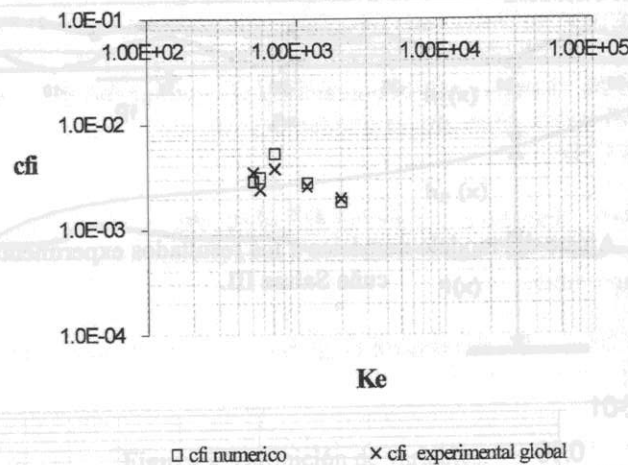


Figura 8. Dependencia del coeficiente de fricción interfacial con número de Keulegan.

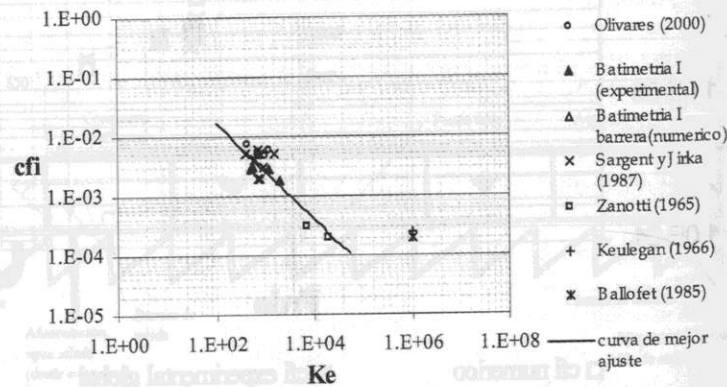


Figura 9. Dependencia del coeficiente de fricción interfacial con el número de Keulegan. Comparación con otros investigadores.

MODELO DE AUTÓMATAS CELULARES BIDIMENSIONAL PARA BIOFILMS

GONZALO PIZARRO PUCCIO¹
DANIEL NOGUERA CAMACHO²

RESUMEN

Se desarrolló un modelo para biofilms basado en Autómatas Celulares (AC). El modelo aprovecha la naturaleza paralela de los AC y la arquitectura de los procesadores de computadores personales. Las simulaciones en dos dimensiones (2D) del modelo de AC se usaron para comparar las predicciones del flujo de sustrato en estado estacionario de modelos de biofilms heterogéneos y homogéneos. Los resultados indicaron que para obtener predicciones de flujos similares entre los modelos homogéneos y heterogéneos, la masa total de células y el espesor total de la región de transferencia de masa tenían que mantenerse iguales en los dos modelos.

características de los biofilms heterogéneos que no son representadas por los modelos homogéneos de 1D son el espesor variable del biofilm, la variación de la biomasa y el espesor de la capa de difusión. Si bien el espesor del biofilm normalmente no es un factor crítico, sino más bien un resultado de él al suponer estado estacionario (Rittmann 1990), el espesor de la capa de difusión y la densidad de la biomasa sí lo son, ya que son factores críticos e influyen en la predicción del flujo de sustrato. Para un modelo homogéneo, el valor medio de masa de células por unidad de área (M_c), un parámetro que puede medirse experimentalmente con una buena precisión y no requiere suponer una biomasa constante, puede ser un buen parámetro para las simulaciones del modelo. Para considerar la variabilidad del espesor de la capa de difusión y del biofilm, se propone utilizar la suma de ambos M_c y el espesor de la zona de transporte de masa) como parámetro de biofilm.

¹ Profesor, Depto. de Ingeniería Hidráulica y Ambiental, P. Universidad Católica de Chile.
² Profesor, Depto. de Ingeniería Civil y Ambiental, University of Wisconsin-Madison

1. INTRODUCCIÓN

Es un hecho reconocido que se encuentra heterogeneidad de los biofilms en casi cualquier sistema de biofilms. Para poder evaluar el efecto de la heterogeneidad sobre parámetros de diseño tal como el flujo de sustrato hacia el biofilm, hemos desarrollado un modelo de dos dimensiones (2D) para biofilms, y posteriormente lo hemos usado para comparar las predicciones de modelos de biofilm homogéneos y heterogéneos. El modelo está basado en Autómatas Celulares (AC) para simular dominios multidimensionales de una forma discreta y autoorganizante (Pizarro, 2001; Pizarro *et al.*, 2001). La implementación del modelo aprovecha el paralelismo natural entre los modelos de AC y la arquitectura de computadores seriales de un procesador.

Desde el punto de vista ingenieril, los modelos de biofilm multidimensionales deberían entregar los medios para describir en forma precisa los procesos en biofilms y generar información útil para el diseño de obras que los utilicen. Sin embargo, modelos complejos que requieren de mucho tiempo de simulación no son prácticos para un uso rutinario. Motivados por las mismas limitaciones prácticas, investigadores han desarrollado soluciones analíticas simplificadas (Kim y Suidan, 1989; Suidan *et al.*, 1987), pseudoanalíticas (Sáez y Rittmann, 1988; Sáez y Rittmann, 1992) y gráficas (Heath *et al.*, 1990) para evitar la integración numérica de los modelos de biofilms homogéneos de una dimensión (1D). Adicionalmente, metodologías de diseño simplificadas han sido propuestas donde la actividad del biofilm puede evaluarse mediante el uso de un conjunto de curvas de carga normalizada que son función sólo de dos parámetros adimensionales S_{min}^* y K^* (Rittmann y McCarty, 2001; Wirtel *et al.*, 1992). Las variables adimensionales utilizadas en este método simplifican el análisis del biofilm y entregan información de sus propiedades cinéticas. Es así como S_{min}^* representa el potencial de crecimiento, es decir, indica la relación entre la tasa de crecimiento y la tasa de desprendimiento y de decaimiento, mientras que K^* compara el transporte de masa externo con la tasa máxima de utilización de sustrato. Valores pequeños de K^* (< 1) indican que el transporte de masa externo ejerce una influencia importante sobre el flujo de sustrato, mientras que valores grandes de K^* (> 1) indican un efecto pequeño del transporte de masa externo. Las variables de las Ecuaciones (1) y (2) representan parámetros cinéticos y físicos del biofilm. Entre los parámetros cinéticos están b' , el coeficiente de decaimiento de células por muerte y desprendimiento, Y , el rendimiento bacteriano, \hat{q} , la tasa máxima de consumo de sustrato y K_s , la tasa de saturación media. Entre los parámetros físicos están D_l y D_p , coeficientes de difusión en el líquido y biofilm respectivamente, X_f , la densidad de células en el biofilm y L_p , el espesor de la capa de difusión externa al biofilm.

$$S_{min}^* = \frac{b'}{Y\hat{q} - b'} \quad (1)$$
$$K^* = \frac{D_l}{L_p} \sqrt{\frac{K_s}{\hat{q}X_f D_f}} \quad (2)$$

A pesar de que la velocidad de los computadores personales ha aumentado dramáticamente en el último tiempo y no es difícil resolver numéricamente modelos de biofilm de 1D usando aproximaciones de diferencias finitas, el reconocimiento de que las suposiciones usadas en los

modelos de 1D para simplificar el problema normalmente no coinciden con las observaciones experimentales (Noguera *et al.*, 1999a) ha motivado el desarrollo de modelos en dos y tres dimensiones (Noguera *et al.*, 1999b; Picioreanu *et al.*, 1998). Sin embargo, estos modelos son complejos y requieren de enormes recursos computacionales y probablemente no serán usados en forma rutinaria para el análisis de sistemas de biofilms. Por lo tanto, hay una nueva necesidad para desarrollar nuevas simplificaciones que podrían permitir incluir la heterogeneidad en la predicción de los modelos, y al mismo tiempo entregar métodos computacionalmente eficientes para la simulación de la actividad del biofilm. Usando un modelo de AC de 2D, comparamos los resultados de biofilms homogéneos y heterogéneos y evaluamos la manera de usar modelos de 1D para incorporar la heterogeneidad del biofilm en las predicciones de flujo de sustrato en estado estacionario. Demostramos que la manera de encontrar predicciones similares entre modelos homogéneos y heterogéneos es mantener la masa total de células y el espesor total de la zona de transferencia de masa igual en ambos modelos.

2. MODELO MATEMÁTICO

El modelo de AC para biofilms (Pizarro *et al.*, 2001) representa al sustrato y a la biomasa como partículas discretas que existen e interactúan en un dominio físico bidimensional definido. Las partículas de sustrato se mueven en forma aleatoria, simulando difusión molecular. Los microorganismos en el biofilm pueden crecer adheridos a una superficie o a otras partículas microbianas, consumir partículas de sustrato y duplicarse si han consumido una cantidad suficiente de sustrato. La dinámica del sistema se simula usando procesos estocásticos que representan la ocurrencia de la difusión de sustrato, utilización de sustrato, crecimiento del biofilm y decaimiento del biofilm. El desprendimiento es una consecuencia natural de la dinámica de la simulación y se determina evaluando la conectividad de las células al sustrato (Pizarro, 2001). El modelo supone que hay sólo un sustrato limitante y que el biofilm está compuesto por sólo un tipo de bacteria. Biomasa inerte no se considera por el momento. Cuando una partícula de biomasa muere, desaparece del dominio físico. Se considera una capa de difusión paralela a la superficie de adhesión, con un espesor mínimo definido, que se mide desde el líquido hasta la altura máxima del biofilm simulado.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las principales características de los biofilms heterogéneos que no son representadas por los modelos homogéneos de 1D son el espesor variable del biofilm, la variación de la biomasa y el espesor variable de la capa de difusión. Si bien el espesor del biofilm normalmente no es un dato para el modelo, sino más bien un resultado de él al suponer estado estacionario (Rittmann y McCarty, 1980), el espesor de la capa de difusión y la densidad de la biomasa sí lo son, pudiendo llegar a ser factores críticos e influir en la predicción del flujo de sustrato. Para un biofilm heterogéneo, el valor medio de masa de células por unidad de área (M_0), un parámetro que se puede medir experimentalmente con una buena precisión y no requiere suponer una densidad de la biomasa constante, puede ser un buen parámetro para las simulaciones del modelo. Similarmente, para considerar la variabilidad del espesor de la capa de difusión y del biofilm, proponemos usar la suma de ambos (L_m = espesor de la zona de transporte de masa) como parámetro del modelo de biofilm.

Se realizaron simulaciones para varias concentraciones de sustrato afluente (S_b) usando parámetros comunes para biofilms heterotróficos (Sáez y Rittmann, 1992). La validez cuantitativa del modelo de AC se comprobó comparando los resultados del modelo con los de un modelo de diferencias finitas en un biofilm homogéneo (Pizarro *et al.*, 2001). Simulaciones

de larga duración revelaron que a pesar de que el biofilm era altamente heterogéneo y la microestructura cambiaba continuamente, el biofilm alcanzó un estado «estacionario dinámico», donde el espesor del biofilm y el flujo de sustrato permanecían relativamente constantes (Pizarro, 2001).

Las estimaciones de flujo de sustrato usando los modelos de 1D y 2D resultaron notablemente diferentes (Figura 1). Para el rango de concentraciones usadas, las predicciones del flujo de sustrato del modelo de 1D fueron mayores que las del modelo de 2D. Esta diferencia en la predicción del flujo de sustrato es el resultado de las estructuras heterogéneas predichas por el modelo de 2D (Figura 2), que resultaron en una disminución de la densidad de células y en un aumento del promedio del espesor de la capa de difusión (Pizarro, 2001). Una comparación entre las estimaciones del estado estacionario también reveló que el promedio de masa de células por unidad de área fue diferente para las predicciones de los dos modelos. Por lo tanto, para obtener predicciones de flujo del modelo homogéneo de 1D comparables con las del modelo heterogéneo de 2D, fijamos el valor del espesor de la zona de transporte de masa (Ecuación 3) y corrimos el modelo de 1D con diferentes valores del espesor de la capa de difusión (L_f). Una característica importante de estas simulaciones es que la densidad del biofilm (X_f) es función de L_f , tal como lo define la Ecuación 4. Este análisis reveló que hay un único valor de L_f para el cual la masa por unidad de área calculada por el modelo de 1D coincidió con la masa por unidad de área calculada por el modelo de 2D. Sólo en esta condición la predicción del flujo de sustrato del modelo de 1D fue comparable con la del modelo de 2D (Figura 4).

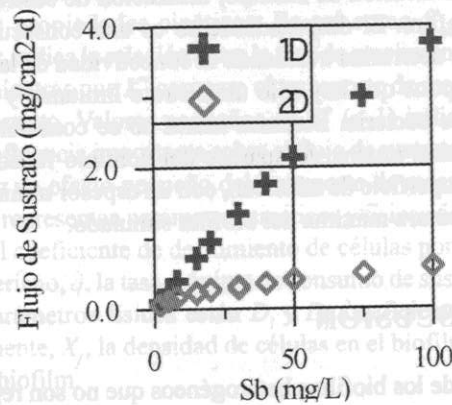


Figura 1. Flujo de sustrato en función de la la concentración afluente (S_b).

$$L_m = L_f + L_l \quad (3)$$

$$X_f = \frac{M_0}{(L_m - L_l)} \quad (4)$$

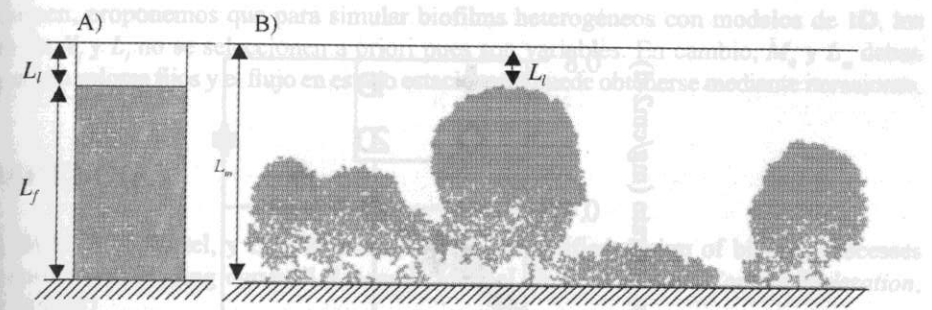


Figura 2. Comparación gráfica de los resultados del modelo A) de 1 dimensión y B) de 2 dimensiones. La concentración de sustrato afluente es de 5 mg/L.

4. ANÁLISIS UNIDIMENSIONAL PROPUESTO PARA BIOFILMS HETEROGÉNEOS

Basados en el análisis presentado antes, desarrollamos un método iterativo para encontrar predicciones del flujo de sustrato en estado estacionario usando el modelo de 1D cuando se conocen la densidad de células por unidad de área y el espesor total de la zona de transporte de masa (L_m). La diferencia con respecto al análisis tradicional que usa el modelo de 1D es que los valores de L_f y X_f no se eligen a priori, pero representan valores medios de biofilms heterogéneos. En cambio, M_0 y L_m se eligen como datos para el modelo. Para la solución iterativa (Figura 3), se supone un valor inicial de L_f y se usa para calcular el valor correspondiente de X_f (Ecuación 4). Estos parámetros se usan entonces para resolver el modelo de 1D (para este paso usamos el modelo pseudoanalítico de Sáez y Rittmann (1992)). Luego, el valor de la predicción del flujo de sustrato en estado estacionario se usó para calcular L_f y la masa de células por unidad de área. Si la masa por unidad de área es mayor que M_0 , entonces se necesita un valor mayor de L_f y una nueva iteración comienza. Si la masa por unidad de área es menor que M_0 , entonces se necesita un valor menor de L_f y una nueva iteración comienza. El proceso iterativo termina cuando la masa por unidad de área calculada con el modelo de 1D es igual a M_0 .

Como se muestra en la Figura 4, hay una correspondencia muy buena entre las predicciones de flujo hechas por ambos modelos, demostrando que al no establecer L_f y X_f a priori, es posible simular el flujo de sustrato a un biofilm heterogéneo usando sólo un modelo de 1D simple. La diferencia promedio de las estimaciones de flujo fue de 3,1 %.

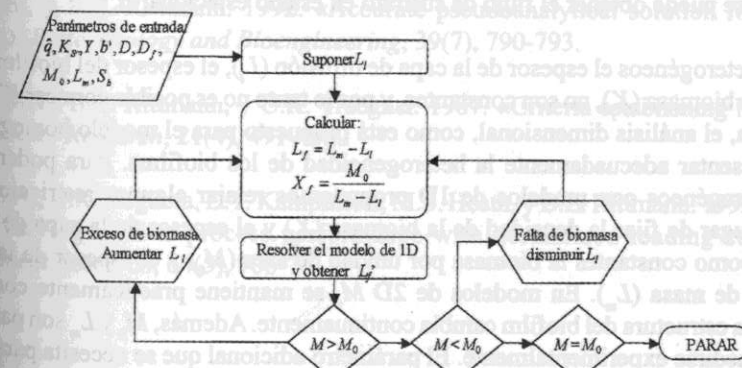


Figura 3. Algoritmo iterativo para determinar la equivalencia entre el modelo de 2D y el de 1D.

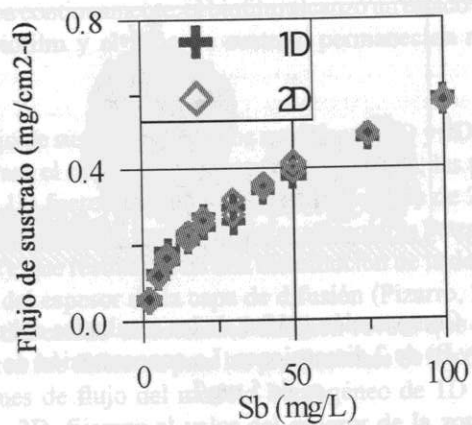


Figura 4. Predicción del flujo de sustrato para los modelos de 1D y 2D cuando M_0 y L_m son los mismos para ambas simulaciones.

5. DISCUSIÓN

Para usar los modelos de 1D homogéneos para biofilms se requiere conocer varios parámetros que definen el sistema de biofilm (Rittmann y McCarty, 1980; Sáez y Rittmann, 1992; Wirtel *et al.*, 1992). Por ejemplo, los parámetros cinéticos (\hat{q} , K_s , Y , y b') describen el crecimiento y decaimiento bacteriano. El desprendimiento es un proceso que normalmente está asociado al decaimiento con sólo un parámetro, b' , ya que ambos se modelan como una cinética de primer orden. El proceso físico de transporte de masa está definido por los coeficientes de difusión en agua y biofilm (D , D_p). La densidad del biofilm (X_p) y el espesor de la capa de difusión (L_p) normalmente se suponen constantes (Rittmann y McCarty, 1980; Sáez y Rittmann, 1992; Wirtel *et al.*, 1992). Así, con ocho parámetros y la concentración afluente de sustrato (S_b) los modelos de 1D homogéneos predicen el flujo de sustrato y, para estado estacionario, un espesor del biofilm. Este modelo fue simplificado mediante análisis dimensional (Sáez y Rittmann, 1988; Sáez y Rittmann, 1992) y condensado a dos parámetros característicos, S_{min}^* y K^* (Rittmann y McCarty, 2001; Wirtel *et al.*, 1992). Estos dos parámetros representan el equilibrio entre el transporte de masa externo e interno (K^*) y la actividad bacteriana (S_{min}^*). Conociendo K^* , S_{min}^* , y S_b se puede obtener el flujo de sustrato en estado estacionario.

En biofilms heterogéneos el espesor de la capa de difusión (L_p), el espesor del biofilm (L_p) y la densidad de la biomasa (X_p), no son constantes, y por lo tanto no es posible conocer K^* a priori. Por esta razón, el análisis dimensional, como está propuesto para el modelo homogéneo, no permite representar adecuadamente la heterogeneidad de los biofilms. Para poder simular biofilms heterogéneos con modelos de 1D proponemos relajar algunas restricciones. Por ejemplo, en lugar de fijar la densidad de la biomasa (X_p) y el espesor de la capa de difusión (L_p), utilizar como constantes la biomasa por unidad de área (M_0) y el espesor de la capa de transferencia de masa (L_m). En modelos de 2D M_0 se mantiene prácticamente constante a pesar de que la estructura del biofilm cambia continuamente. Además, M_0 y L_m son parámetros que pueden medirse experimentalmente. El parámetro adicional que se necesita para simular biofilms heterogéneos es el coeficiente de desprendimiento (b'). Éste también puede estimarse experimentalmente.

En resumen, proponemos que para simular biofilms heterogéneos con modelos de 1D, los valores de X_p y L_p no se seleccionen a priori pues son variables. En cambio, M_0 y L_m deben usarse como valores fijos y el flujo en estado estacionario puede obtenerse mediante iteraciones.

REFERENCIAS

- Heath, M.S., S.A. Wirtel, y B.E. Rittmann. 1990. "Simplified design of biofilm processes using normalized loading curves." *Research Journal Water Pollution Control Federation*, 62(2), 185-192.
- Kim, B.R., y M.T.Suidan. 1989. "Approximate algebraic solution for a biofilm model with the Monod kinetic expression." *Water Research*, 23(12), 1491-1498.
- Noguera, D.R., S. Okabe, y C. Picioreanu. 1999a. «Biofilm modeling: Present status and future directions.» *Water Science and Technology*, 39(7), 273-278.
- Noguera, D.R., G.E. Pizarro, D.A. Stahl, y B.E. Rittmann. 1999b. «Simulation of multispecies biofilm development in three dimensions.» *Water Science and Technology*, 39(7), 123-130.
- Picioreanu, C., M.C.M. van Loosdrecht, y J.J. Heijnen. 1998. «Mathematical modeling of biofilm structure with a hybrid differential-discrete cellular automaton approach.» *Biotechnology and Bioengineering*, 58(1), 101-116.
- Pizarro, G.E. 2001. «Quantitative Modeling of Heterogeneous Biofilms using Cellular Automata.» Ph.D. Thesis. University of Wisconsin, Madison.
- Pizarro, G.E., D. Griffeth, y D.R. Noguera. 2001. «Quantitative cellular automaton model for biofilms.» *Journal of Environmental Engineering, ASCE*.
- Rittmann, B.E., y P.L. McCarty. 1980. «Model of steady-state biofilm kinetics.» *Biotechnology and Bioengineering*, 22, 2343-2357.
- Rittmann, B.E., y P.L. McCarty. 2001. *Environmental Biotechnology: Principles and Applications*, McGraw-Hill, New York.
- Sáez, P.B., y B.E. Rittmann. 1988. «Improved pseudoanalytical solution for steady-state biofilm kinetics.» *Biotechnology and Bioengineering*, 32(3), 379-385.
- Sáez, P.B., y B.E. Rittmann. 1992. «Accurate pseudoanalytical solution for steady-state biofilms.» *Biotechnology and Bioengineering*, 39(7), 790-793.
- Suidan, M.T., B.E. Rittmann, y U.K. Traegner. 1987. «Criteria establishing biofilm-kinetic types.» *Water Research*, 21(4), 491-498.
- Wirtel, S.A., D.R. Noguera, D.T. Kampmeier, M.S. Heath, y B.E. Rittmann. 1992. «Explaining widely varying biofilm-process performance with normalized loading curves.» *Water Environment Research*, 64(5), 706-711.