

MODELADO MATEMÁTICO DE LA BIODEGRADACIÓN DE FENANTRENO EN SUELO Y TOLUENO EN FASE GASEOSA

Irmene Ortiz, Bruno Cousin, Jean-Claude Benet, Richard Auria, Sergio Revah
 Apdo. Postal 55-534, 09340 México, D.F., México. Fax 58044900 srevah@xanum.uam.mx

Palabras claves: fenantreno, biodisponibilidad, modelado matemático

Introducción. El fenantreno es un compuesto recalcitrante del grupo de los hidrocarburos poliaromáticos (PAHs) encontrado comúnmente en suelos contaminados por petróleo o sus derivados. El tolueno es un compuesto orgánico volátil (VOC) que ha sido utilizado como molécula modelo en estudios de biofiltración [1] debido a su relativa facilidad para ser degradado por microorganismos. En este trabajo se estudió, utilizando un sistema de microcosmos, la degradación de fenantreno de suelo contaminado artificialmente. Específicamente se estudia el efecto de sustrato adicional en fase gaseosa que pueda actuar como un co-solvente, favorecer el crecimiento de la población microbiana e inducir su actividad enzimática. Un modelo matemático local fue desarrollado para describir los fenómenos que se llevan a cabo durante el proceso.

Metodología. Los parámetros cinéticos de degradación de fenantreno y tolueno fueron determinados mediante estudios de microcosmos frascos de 125 ml. El tolueno fue medido mediante CG-FID. Se utilizó como inóculo un consorcio bacteriano proveniente de suelos contaminados con hidrocarburos. El suelo modelo fue contaminado artificialmente con una concentración de 100 mg/kg. El sistema de ecuaciones diferenciales parciales resultantes del modelo matemático fueron discretizadas en el espacio por el método de diferencias finitas [2] y resueltas utilizando un *solver* Berkeley- Madonna con un método Runge-Kutta semi-implícito de 4° orden para integrar en el tiempo.

Resultados y Discusión.

El modelo matemático local propuesto describe las concentraciones de fenantreno y tolueno al interior de una biopelícula. Los balances de materia para el tolueno y el fenantreno dan el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales parciales (1) y (2):

$$\frac{\partial C_{1\text{TOL}}}{\partial t} = D_{\text{effTOL}} \frac{\partial^2 C_{1\text{TOL}}}{\partial x^2} - \frac{k'_{\text{TOL}} C_{1\text{TOL}}}{C_{1\text{TOL}} + K_{\text{TOL}} \left(1 + \frac{C_{1\text{PHE}}}{K_{\text{PHE}}} \right)} \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_{1\text{PHE}}}{\partial t} = D_{\text{effPHE}} \frac{\partial^2 C_{1\text{PHE}}}{\partial x^2} - k'_{\text{PHE}} C_{1\text{PHE}} \left(1 + \frac{C_{1\text{TOL}}}{K_{\text{TOL}}} \right) \quad (2)$$

Donde D_{effTOL} , D_{effPHE} , K_{TOL} , K_{PHE} , k'_{TOL} y k'_{PHE} son los coeficientes de difusión, las constantes de Monod y las tasas de reacción del tolueno y el fenantreno respectivamente.

En la frontera entre la fase líquido-sólido ($x=0$), la concentración tolueno en la biopelícula es cero ($\partial C_{1\text{TOL}} / \partial x = 0$), para el fenantreno se asume concentración

de equilibrio constante igual a la concentración de disolución máxima en agua. En la frontera líquido-gas ($x=d$) donde d es el espesor de la biopelícula, la concentración de tolueno esta dada por la Ley de Henry, $C_{1\text{TOL}} = C_{\text{gTOL}} / m$, para el fenantreno puesto que no es volátil la concentración en la fase gas es cero, $\partial C_{1\text{PHE}} / \partial x = 0$.

Los resultados experimentales iniciales permitieron estimar el valor de los parámetros del modelo. El modelo predice un favorecimiento en la degradación de fenantreno debido a la presencia del tolueno en la fase gaseosa tal como se muestra en Fig 1.

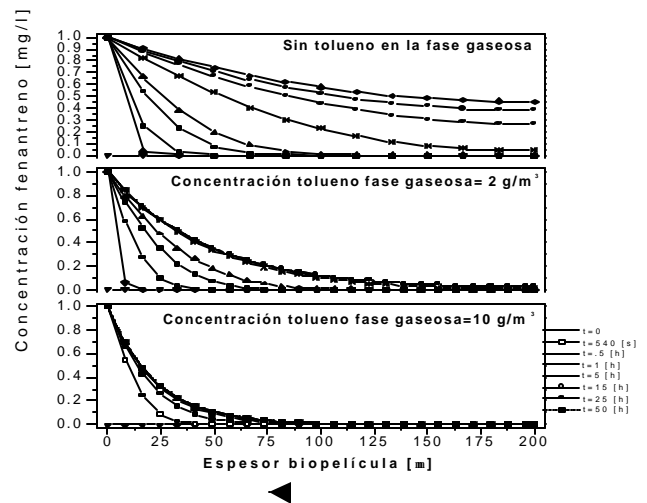


Fig 1. Perfiles de concentración de fenantreno para diferentes valores de concentración de tolueno en la fase gas.

Conclusiones.

Los resultados del modelado matemático del sistema predicen una mejor degradación del fenantreno en el suelo con una presencia de tolueno. Los datos experimentales no fueron concluyentes para muestras no intemperizadas.

Agradecimiento.

La autora principal agradece el financiamiento del IRD (Francia) y del CONACYT para esta investigación.

Bibliografía.

- [1] Devinny, J. S., M. A. Deshusses. (1999). Biofiltration for air pollution control. Washington D.C., Lewis Publishers. 57-72.
- [2] Finlayson B.A. (1980) Parabolic partial differential equations-Time and one spatial dimension. En: Nonlinear analysis in chem. Eng. Mc-Graw Hill. New York. 172-271.