

Informació Suplementaria

Model matemàtic multifàsic de la biometanització en biofiltres percoladors

Marçal Tarrida Levy

MÀSTER EN ENGINYERIA BIOLÒGICA I AMBIENTAL

Tutors: David Gabriel Buguñá, Juan Antonio Baeza Labat i Albert Guisasola Canudas

Febrer 2026

Model matemàtic multifàsic de la biometanització en biofiltres percoladors

Informació Suplementària

Aquesta informació suplementària recull resultats addicionals de simulacions que complementen els presentats a l'article principal. En concret, s'hi inclouen diferents anàlisis del calibratge del model, perfils de la concentració d'hidrogen dins la biopel·lícula i perfils addicionals per a variacions en la temperatura.

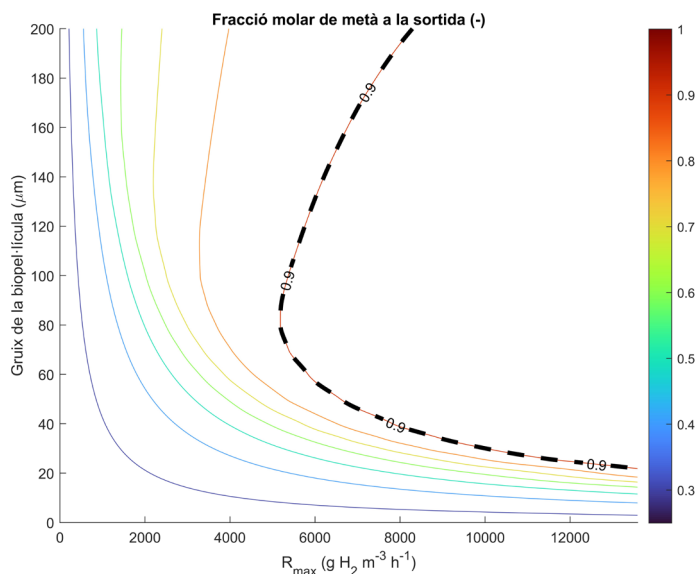


Fig. S1 Resultats de les simulacions per múltiples combinacions de valors de $R_{\max}$ i FT per a $K_{S,H_2}=0.02 \text{ g H}_2/\text{m}^3$. On (---) és la corba sobre els valors de la concentració de metà experimentals a la sortida, sense modificar la discretització de nb amb els valors de FT (δ_2).

La **Fig. S1** exemplifica els resultats del calibratge del model per a diferents combinacions de $R_{\max}$ i FT quan no es considera l'influència de la discretització espacial en la biopel·lícula. En aquestes condicions, les simulacions presenten comportament no coherent de d'un punt de vista físic, com ara la necessitat d'una major $R_{\max}$ a mesura que augmenta el gruix de biopel·lícula. Aquest resultat posa de manifest la importància de considerar adequadament la discretització de la biopel·lícula en el calibratge i l'anàlisi de sensibilitat.

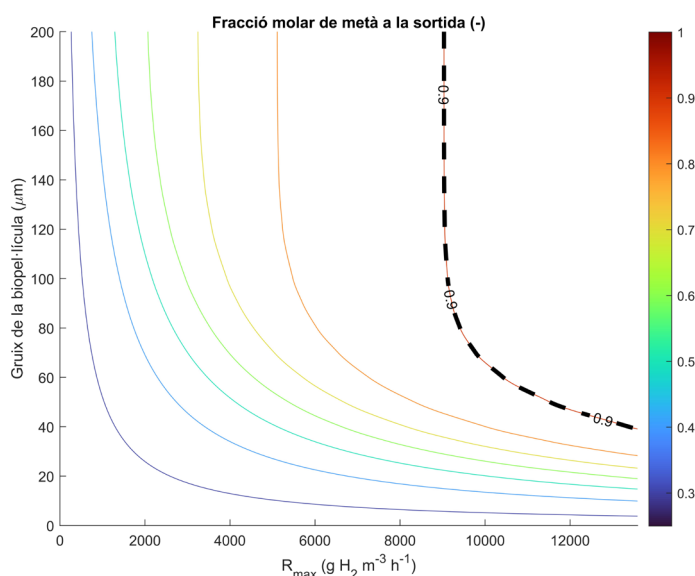


Fig. S2 Resultats de les simulacions per múltiples combinacions de valors de $R_{\max}$ i FT per a $K_{S,H_2}=0.2 \text{ g H}_2/\text{m}^3$. On (---) és la corba sobre els valors de la concentració de metà experimentals a la sortida.

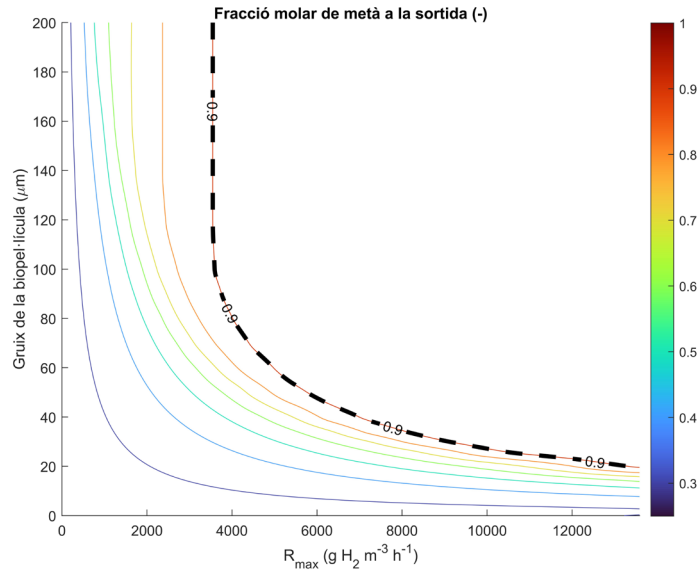


Fig. S3 Resultats de les simulacions per múltiples combinacions de valors de R_{max} i FT per a $K_{\text{S,H}_2}=0.002 \text{ g H}_2/\text{m}^3$. On (--) és la corba sobre els valors de la concentració de metà experimentals a la sortida.

Les **Fig. S2** i **S3** mostren els resultats del calibratge del model per diferents combinacions de R_{max} i FT, considerant diversos valors de $K_{\text{S,H}_2}$. L'objectiu d'aquest anàlisi és avaluar si variacions en un ordre de magnitud respecte als valors habitualment reportats a la bibliografia permeten obtenir un millor ajust del model a les dades experimentals.

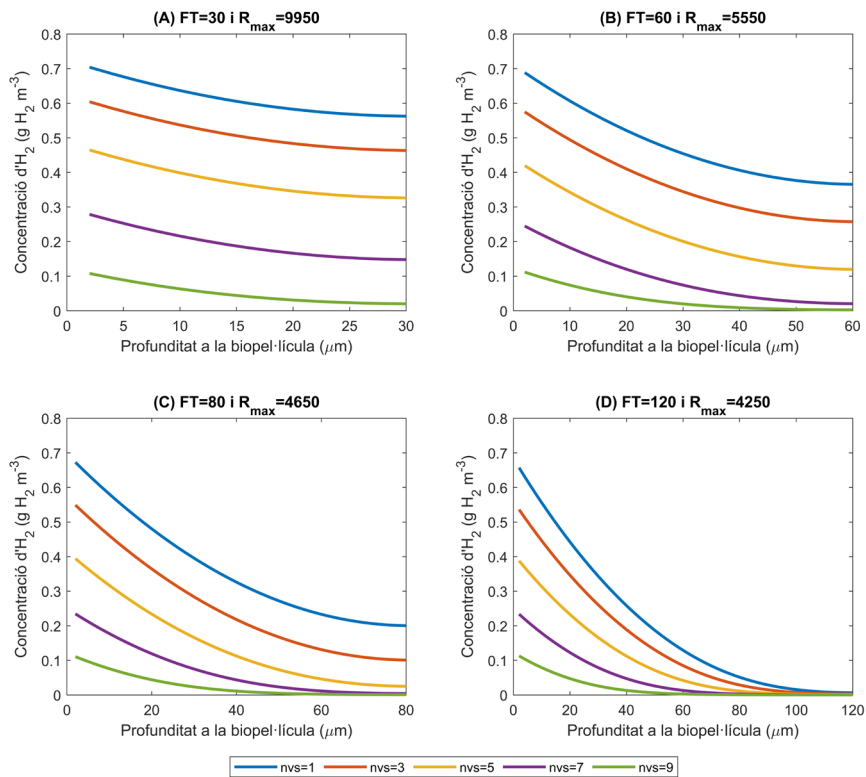


Fig. S4 Perfils de la concentració d'hidrogen ($\text{g H}_2 \text{m}^{-3}$) simulats amb el model en la profunditat del biofilm (μm), per diferents altures en el BTF. (A) Per a FT=30 μm i $R_{\text{max}}=9950 \text{ g H}_2 \text{m}^{-3} \text{h}^{-1}$. (B) Per a FT=60 μm i $R_{\text{max}}=5550 \text{ g H}_2 \text{m}^{-3} \text{h}^{-1}$. (C) Per a FT=80 μm i $R_{\text{max}}=4650 \text{ g H}_2 \text{m}^{-3} \text{h}^{-1}$. (D) Per a FT=120 μm i $R_{\text{max}}=4250 \text{ g H}_2 \text{m}^{-3} \text{h}^{-1}$.

La **Fig. S4** mostra els perfils de concentració d'hidrogen al llarg de la profunditat de la biopel·lícula, complementaris als perfils de velocitat de consum presentats a la **Fig. 5**. En els casos corresponents al calibratge amb biopel·lícules primes (**Fig. S4A i S4B**), s'observa que l'hidrogen no s'esgota al llarg dels primers 70 cm del BTF, de manera que una gran part del reactor opera a velocitats de consum properes a les màximes. En canvi, per a biopel·lícules més gruixudes (**Fig. S4D**), a partir de gruixos superiors a 100 μm la concentració d'hidrogen tendeix a valors pròxims a zero, fet que comporta una inactivació efectiva de la biomassa en les capes més profundes de la biopel·lícula.

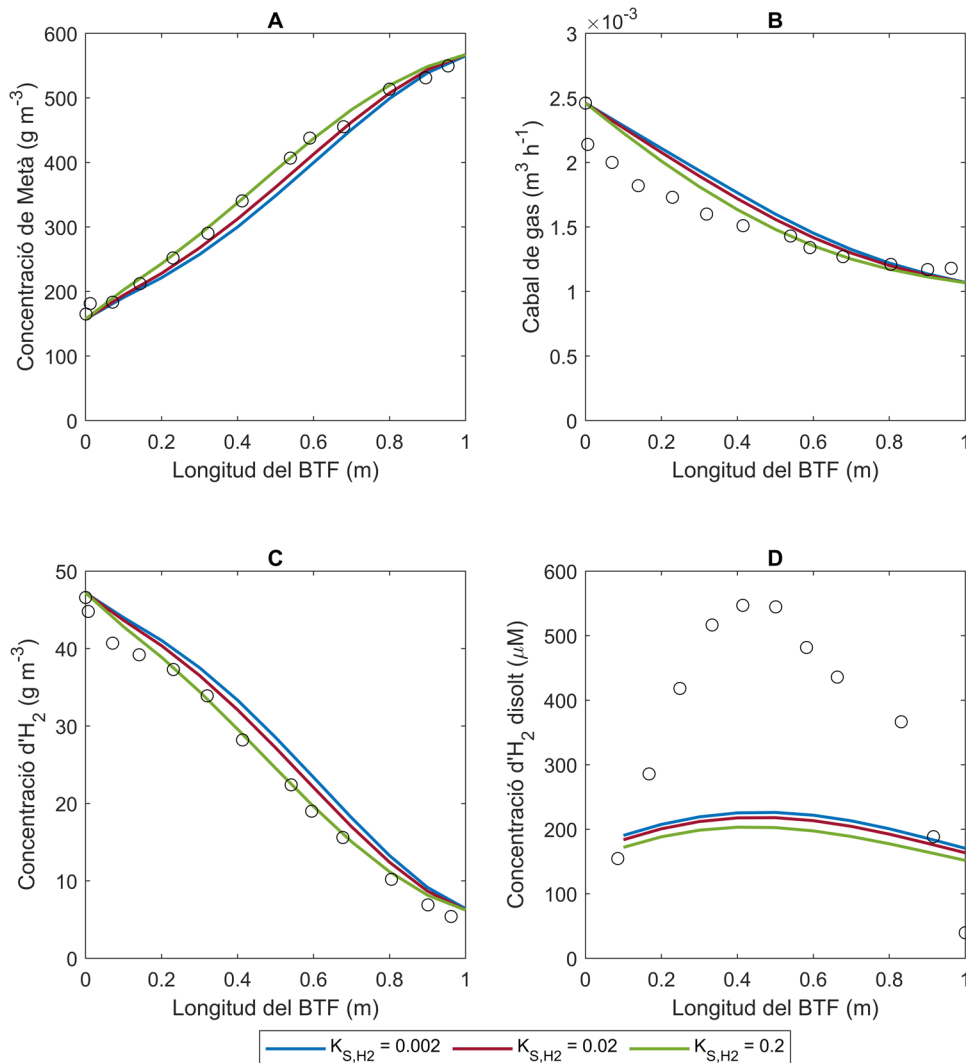


Fig. S5 Comparació entre les simulacions del model propi (línies de colors), els valors experimentals (símbols), per a diferents valors de K_{S,H_2} . (A) Per a la concentració de metà al gas (g m^{-3}). (B) Per al cabal volumètric de gas ($\text{m}^3 \text{h}^{-1}$). (C) Per a la concentració d' H_2 al gas (g m^{-3}). (D) Per a la concentració d' H_2 al líquid (μM).

La **Fig. S5** presenta la comparació entre els resultats del model i els perfils experimentals per a diferents valors de la constant de semisaturació de l'hidrogen, variant-la en un ordre de magnitud, i reajustant el valor de R_{max} mentre es manté constant el gruix de la biopel·lícula ($FT=80 \mu\text{m}$). En el cas de $K_{S,H_2}=0.2 \text{ g m}^{-3}$, el model mostra una millor capacitat per reproduir les concentracions de gas, amb perfils de metà més convexos i una descripció més acurada de l'evolució del cabal volumètric al llarg del reactor. Aquest comportament descriu la reducció en la velocitat de consum d'hidrogen al llarg del reactor degut a la pèrdua de concentració d'hidrogen. Al K_{S,H_2} trobar-se fora del rang bibliogràfic es

descarta l'ajust, però aquest fet suggereix una possible estratificació de la biomassa en el BTF (on amb la implementació de perfils de X i així perfils de $R_{\max}$ per als diferents segments de biopel·lícula) es podria descriure el mateix fenomen de velocitats que disminueixen en la llargada sense comprometre el valor de K_{S,H_2} . En canvi, per a $K_{S,H_2}=0.002 \text{ g m}^{-3}$, el nou ajust no condueix a una millora en els valors de sortida del model, que tendeixen a allunyar-se encara més dels valors experimentals, indicant que aquest rang de K_{S,H_2} no és adequat per descriure el sistema estudiat.

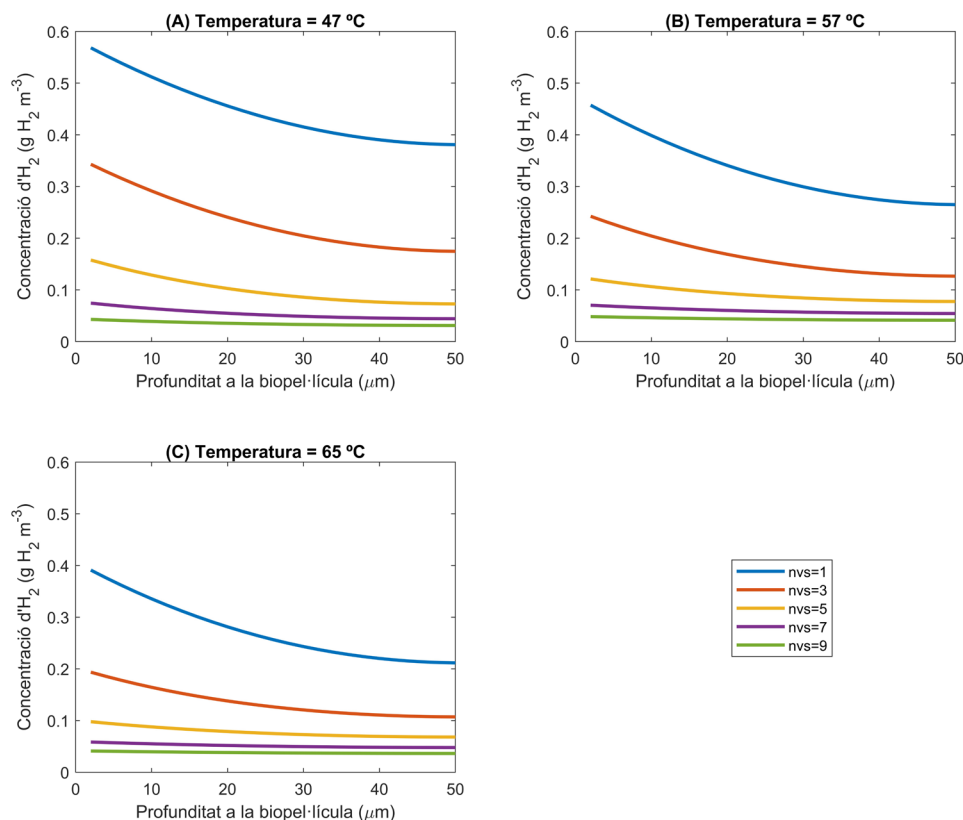


Fig.S6 Concentracions d' H_2 en la profunditat de la biopel·lícula per un cabal de gas de 20 mL min^{-1} a 37°C i 1 atm, per a diferents temperatures. (A) Per una temperatura d'operació de 47°C . (B) Per una temperatura d'operació de 57°C . (C) Per una temperatura d'operació de 65°C .

La **Fig. S6** mostra els perfils de concentració d'hidrogen en la profunditat de la biopel·lícula per a les diferents temperatures, com a complement dels resultats presentats a la **Fig. 8**. En els primers segments del reactor, el cas corresponent a 47°C presenta concentracions d'hidrogen més elevades en la biopel·lícula, associades a una major concentració d'hidrogen en el gas degut a un menor consum inicial sota condicions sense limitació per substrat, $\mu_{\max}$ menor que per 57 i 65°C . En canvi, en els darrers segments del reactor, les concentracions d'hidrogen tendeixen a equiparar-se entre temperatures, fet que permet una velocitat de consum superior en el cas de 47°C com a conseqüència del seu menor valor de K_{S,H_2} . Aquest efecte es tradueix en una major eficiència de conversió i en una puresa

de metà més elevada a la sortida del reactor, especialment per a cabals baixos sota condicions termòfiles moderades.

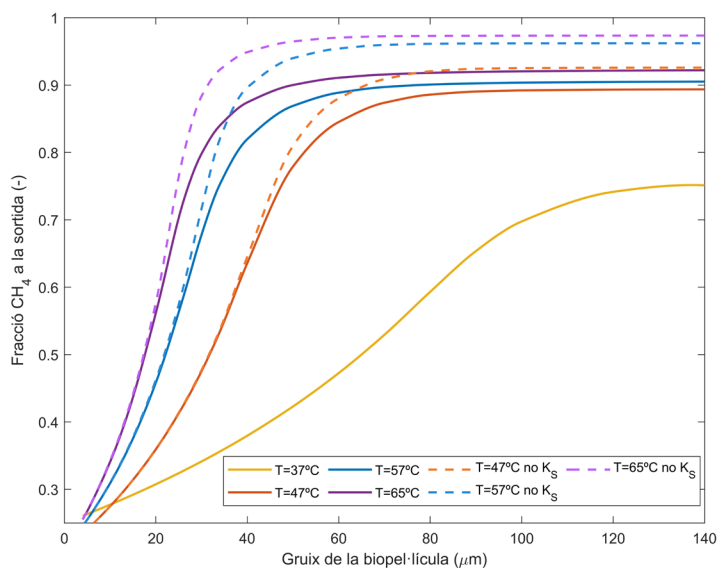


Fig.S7 Perfils de la concentració de metà a la sortida per a diferents temperatures d'operació amb diferents gruixos de biopel·lícula, i tenint o no en compte l'efecte de la temperatura sobre la K_{S,H_2} per un cabal de 41 m min^{-1} , concentracions de sortida sense la puresa necessària.

La **Fig. S7** mostra els perfils de concentració de metà a la sortida del reactor en funció del gruix de la biopel·lícula per a diferents temperatures d'operació, considerant un cabal de gas d'entrada de 41 mL min^{-1} a 1 atm i 37 °C. Per a aquest cabal, les concentracions de metà assolides a la sortida no arriben als valors requerits per a la injecció a xarxa, i augmenten de amb la temperatura d'operació. Aquest comportament s'explica pel fet que, sota aquestes condicions, la concentració d'hidrogen en la fase gasosa no es redueix prou com perquè el funcionament del BTF quedi dominat per una disminució de l'afinitat pel substrat associada a la temperatura. Al comparar els perfils amb i sense l'efecte de la temperatura en la K_{S,H_2} , els resultats posen de manifest la importància de considerar una possible dependència de K_{S,H_2} amb la temperatura si es vol estendre el model a un rang més ampli de condicions tèrmiques.

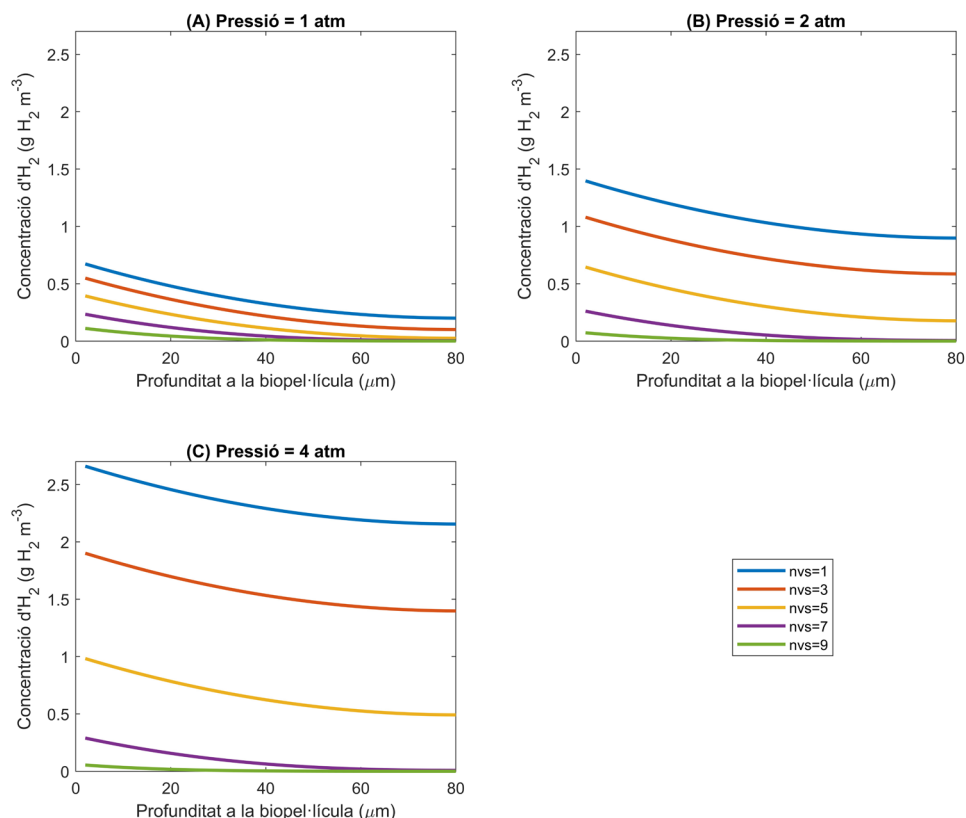


Fig.S8 Concentracions d' H_2 en la profunditat de la biopel·lícula per un cabal de gas de 41 mL min $^{-1}$ a 37°C i 1 atm, per a diferents pressions. (A) Per una pressió d'operació de 1 atm. (B) Per una pressió d'operació de 2 atm. (C) Per una pressió d'operació de 4 atm.

La **Fig. S8** mostra els perfils de concentració d'hidrogen en la profunditat de la biopel·lícula per a les diferents pressions, com a complement dels resultats presentats a la **Fig. 10**. En els casos corresponents a les Fig. S8B i S8C, l'augment de la pressió comporta una major concentració molar d'hidrogen en la biopel·lícula, fet que permet que una fracció més gran del reactor operi a velocitats de consum properes a R_{max} , notar que tot i que la concentració augmenti no ho fa la velocitat (**Fig.10**), aproximació a un ordre zero, (motiu pel qual la millora amb la pressió tendeix a un límit). En canvi, en els darrers segments del reactor, les concentracions d'hidrogen tendeixen a equiparar-se i acaben sent lleugerament superiors per al cas a 1 atm. Aquest comportament explica el creuament observat en la velocitat mitjana de consum a la **Fig. 10D** i posa de manifest la interacció entre pressió, disponibilitat de substrat i règim cinètic al llarg del reactor.