MASTER EN INGENIERÍA DE SISTEMAS Y CONTROL

CURSO ACADÉMICO: 2018-2019

CONVOCATORIA DE DEFENSA: Junio de 2019

CALIBRACIÓN DEL PROCESO DE NITRIFICACIÓN DE UNA PLANTA DEPURADORA

MARIA CHAUDARCAS BILBAO

DIRECTORES

FELIX HERNANDEZ DEL OLMO

NATIVIDAD DURO CARRALERO

ELENA GAUDIOSO VÁZQUEZ

RAQUEL DORMIDO CANTO



MASTER EN INGENIERÍA DE SISTEMAS Y CONTROL

CALIBRACIÓN DEL PROCESO DE NITRIFICACIÓN DE UNA PLANTA DEPURADORA

MARIA CHAUDARCAS BILBAO

DIRECTORES

FELIX HERNANDEZ DEL OLMO

NATIVIDAD DURO CARRALERO

ELENA GAUDIOSO VÁZQUEZ

RAQUEL DORMIDO CANTO

PROYECTO ESPECÍFICO PROPUESTO POR EL ALUMNO.

Autorización

Autorizamos a la Universidad Complutense y a la UNED a difundir y utilizar con fines académicos, no comerciales y mencionando expresamente a sus autores, tanto la memoria de este Trabajo Fin de Máster, como el código, la documentación y/o el prototipo desarrollado.

Firmado:

Maria Chaudarcas Bilbao

A mi hija June, nacida en Noviembre del 2018.

El camino ha sido duro, pero recuerda, el camino se hace caminando.

RESUMEN

Para simular un proceso se necesita un modelo dinámico que lo describa. En este trabajo se ha simulado un proceso de lodos activados de una estación depuradora de aguas residuales. Para ello, se ha usado el modelo de lodos activados número 1 (ASM1) propuesto por IWA (International Water Association) en 1987.

El objetivo principal de este trabajo es la calibración del modelo que describe el proceso de lodos activados y decantación secundaria de la estación depuradora de aguas residuales situada en Estella (Navarra). Para la descripción de los lodos activados del tanque biológico se ha usado el modelo ASM1 y para el decantador un balance de masa. El modelo completo se ha se ha construido en MATLAB/SIMULINK. Los parámetros usados en ambos modelos deben calibrarse para adaptarse a la EDAR y para ello se ha realizado una campaña de medición para recopilar datos sobre la composición del agua residual.

Lista de palabras clave: proceso de lodos activados, SIMULINK, ASM1, calibración, decantador secundario, tratamiento de aguas residuales.

ÍNDICE

1. INTRODUCCION 12
   1.1 ESTACIÓN DEPURADORA DE AGUAS RESIDUALES DE ESTELLA 13
   1.2. PROCESO DE NITRIFICACIÓN Y DESNITRIFICACIÓN CON DECANTACIÓN 15
   1.3. MODELO ASM1 20
   1.4. CALIBRACIÓN DINÁMICA 23
2. OBJETIVOS 26
3. MARCO TEORICO 27
   3.1. ESTRUCTURA DEL ASM1 27
      3.1.1. VARIABLES DE ESTADO 27
      3.1.2. PARAMETROS DEL MODELO 28
      3.1.3. PROCESOS DINÁMICOS DEL ASM1 30
      3.1.4. FORMULACIÓN DEL MODELO 32
   3.2. BALANCE DE MATERIA EN EL TANQUE BIOLÓGICO Y DECANTADOR 34
   3.3. MATLAB 35
      3.3.1. SIMULINK 35
      3.3.2. GUIDE 35
   3.4. MODELO DE CALIBRACIÓN 36
      3.4.1. VARIABLES DE ESTADO DEL ASM1 37
      3.4.2. BALANCES DE MATERIA EN EL REACTOR BIOLOGICO 39
      3.4.3. BALANCES EN EL DECANTADOR 40
      3.4.4. LA PURGA 41
   3.5. INCERTIDUMBRE DEL ENSAYO 42
4. MÉTODO 31
   4.1. LA TOMA DE DATOS 32
   4.2. EL PROGRAMA 33
      4.2.1. INTRODUCCIÓN DE DATOS 33
      4.2.2. TRANSFORMACIÓN DE DATOS 34
      4.2.3. REACTOR BIOLÓGICO DE LODOS ACTIVADOS 35
      4.2.4. DECANTADOR, RECIRCULACIÓN Y PURGA 36

4.2.5. TRANSFORMACIÓN DE DATOS 40
4.2.6. SALIDA DE DATOS 40
4.3. AJUSTE DEL MODELO 43
4.4. ESTIMACIÓN DEL ERROR 47
5. RESULTADO OBTENIDO 49
6. CONCLUSIÓN Y DISCUSIÓN 57
7. BIBLIOGRAFÍA 63
8. ANEXOS 1
8.1. GRÁFICAS CON LOS DISTINTOS PARÁMETROS 1

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Depuradora de Estella (Fuente: web de Mancomunidad de Montejurra) 13
Figura 2.Balsas de aireación del proceso de pretratamiento 14
Figura 3. Filtro biológico (Fuente: web de Mancomunidad de Montejurra) 14
Figura 4. Proceso de nitrificación y desnitrificación (Fuente: web de Mancomunidad de Montejurra) 15
Figura 5. Velocidad de sedimentación en función de la concentración (Fuente propia). 19
Figura 6. Variación de la altura de la interfase en función del tiempo de sedimentación, para obtener la velocidad de sedimentación zonal (Vs) (Fuente internet). 19
Figura 7. Proceso de calibración dinámica. 25
Figura 8. Variables de estado de la materia orgánica (figura modificada Petersen 2000) 27
Figura 9. Variables de estado del nitrógeno (figura modificada Petersen 2000) 28
Figura 10. Diagrama de flujo de la planta de lodos activados. (Fuente: propia) 34
Figura 11: Sedimentador. (Fuente propia) 40
Figura 12. Esquema de trabajo 31
Figura 13. Tomamuestras automático. 32
Figura 14. Datos importados de la Excel a Simulink. 34
Figura 15. Entrada de datos y conversión a variables de estado 35
Figura 16. Bloques principales de Simulink hasta el reactor biológico. 36
Figura 17. Bloque de balance del decantador 37
Figura 18. Velocidad de sedimentación para una concentración de sólidos (Fuente propia), ... 37
Figura 19. Relación de sólidos en suspensión vs velocidad de sedimentación. (Fuente propia) . 38
Figura 20. Linealización. (Fuente propia) 38
Figura 21. Recirculación y purga 39
Figura 22. Bloque de recirculación con sus entradas y salidas al bloque del balance del reactor. (Pantallazo del programa generado en SIMULINK). 40
Figura 23. Envío de datos a Workspace definido en el bloque “SCOPE”. 41
Figura 24. Pantallazo de Matlab al programa DatosSalida.m. 41
Figura 25. Pantalla de trabajo GUIDE. 42
Figura 26. Ejemplo de visualización de datos simulados y reales de la variable SS en tiempo real. 42
Figura 27. Datos de simulación y datos reales para los sólidos en suspensión total 43
Figura 28. Datos de simulación y datos reales para la DQO total 43
Figura 29. Datos de simulación y datos reales para la DBO5 total 44
Figura 30. Datos de simulación y datos reales para el nitrato 44
Figura 31. Datos de simulación y datos reales para el amonio 44
Figura 32. Datos de simulación y datos reales para el Kjeldahl 45
Figura 33. Datos de simulación logrados para μH =30 (valor más cercano logrado a los datos reales). 45
Figura 34. Datos de simulación logrados para μH =30 46
Figura 35. Relación de las variables con los parámetros. 47
Figura 36. Parte de programa (estimación del error). 48
Figura 37. Sólidos en suspensión antes y después del ajuste. 50

Figura 38. DQO antes y después del ajuste. 50
Figura 39. DBO antes y después del ajuste. 51
Figura 40. Amonio total antes y después del ajuste. 51
Figura 41. Nitrato total antes y después del ajuste. 51
Figura 42. Nitrógeno Kjeldahl total antes y después del ajuste. 52
Figura 43. Comparativa de los diferentes ajuste SST. 53
Figura 44. Comparativa de los diferentes ajustes DQO. 54
Figura 45. Comparativa de los diferentes ajustes DBO_5. 54
Figura 46. Comparativa de los diferentes ajustes Amonio. 55
Figura 47. Comparativa de los diferentes ajustes Nitrato. 55
Figura 48. Comparativa de los diferentes ajustes Nitrógeno Kjeldahl. 56

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Modelo ASM1 en notación matricial. (Henze et al 1987) 22
Tabla 2. Parámetros del modelo ASM1 con valores bibliográficos (Henze et al 1987) 29
Tabla 3. Resultado de los parámetros del modelo ASM1. 49
Tabla 4. Resultado de los parámetros del modelo ASM1 mediante ajuste visual y cálculo de EA acum. 52

1. INTRODUCCION

Los modelos de lodos activados (ASM) y los modelos que son una combinación de ASM, pertenecen al enfoque más comúnmente utilizado en el modelado de procesos biológicos de tratamiento de aguas residuales. Desde la publicación del primer modelo de lodos activados ASM1 en 1987, la complejidad de estos modelos ha ido aumentado significativamente [1]. Esto ha sido debido al reconocimiento de nuevos fenómenos y a la introducción de nuevas variables y parámetros que expresarían con más detalle el modelo de lodos activados. Aun así, para poder describir adecuadamente el comportamiento general de los procesos biológicos de una EDAR, es necesaria la calibración de los modelos.

La calibración del modelo se entiende como la estimación de los parámetros del modelo para ajustarse a un determinado conjunto de datos obtenidos de la EDAR a gran escala [2]. Los datos operacionales de la planta de tratamiento de aguas residuales deben verificarse e introducirse cuidadosamente en el modelo como datos de entrada dentro del proceso de calibración [3]. Se pueden distinguir diferentes niveles de calibración al igual que existen diferentes protocolos de calibración para los ASM [4-7]. En [8] se resume y se compara en detalle cuatro metodologías de calibración: protocolo de calibración Biomath, protocolo de calibración de la Fundación Holandesa de Investigación Aplicada del Agua (STOWA), las directrices de Hochschulgruppe (HSG) y el protocolo de la Fundación de Investigación del Medioambiente Acuático (WERF). A pesar de las diferencias entre estos protocolos, cada uno de ellos incluye dos etapas sustanciales: una calibración de estado estacionario y otra sería la dinámica del modelo. Es decir, el ajuste de los parámetros del modelo en estado estacionario y otro ajuste en tiempo real o dinámico. En estudios biológicos, el estudio en estadio estacionario sirve para conocer los valores máximos y/o mínimos de varios parámetros expresados en las reacciones. Así se logra una acotación en la siguiente etapa de ajuste dinámico.

Los autores de los procedimientos de calibración antes mencionados también enfatizaron en el papel del análisis de sensibilidad en el proceso de calibración del modelo. El análisis de sensibilización corresponde al estudio de los parámetros más influyentes en el modelo. Este análisis debe realizarse tanto en las etapas de calibración dinámica como estacionario. De acuerdo con Vanrolleghem et al. [6], el análisis de sensibilidad debe incorporarse en el protocolo de calibración para minimizar los esfuerzos y optimizar el procedimiento de calibración general.

En este proyecto, se considera una planta de tratamiento de aguas residuales a gran escala situada en Navarra. Por lo tanto, se suministran datos de la calibración para el modelo ASM, un análisis de sensibilidad del modelo cinético y estequiométrico, así como la comparación entre los datos reales y de simulación obtenidos para las fracciones carbonosas y nitrogenadas.

1.1ESTACIÓN DEPURADORA DE AGUAS RESIDUALES DE ESTELLA

La EDAR de Estella, permite el tratamiento de las aguas residuales generadas en los municipios de Estella, Villatuerta, Ayegui, Iratxe, Bearin y Arandigoyen, además de la zona industrial de Villatuerta (Navarra).

El volumen de agua a tratar es de unos 5000 m^3/día de agua residual urbana y unos 2500 m^3/día de agua residual industrial. Para ello consta de varias etapas que se muestran en la siguiente figura (Figura 1).



Figura 1. Depuradora de Estella (Fuente: web de Mancomunidad de Montejurra)

La estación de bombeo permite bombear toda el agua residual a la zona más alta de la instalación, el pretratamiento (Figura 2), y posteriormente el agua caerá en los diversos procesos de depuración por gravedad. En este punto tenemos 5 bombas con sus variadores que se regulan mediante la medición del nivel del agua en la arqueta donde se encuentran. Este control se lleva a cabo mediante un autómata y se visualiza en el SCADA. Antes de que el agua sea bombeada, el fluido pasa por unas rejillas para eliminar parte de sólidos de gran tamaño que provocarían la obstrucción de las bombas.

Posteriormente, el agua pasa a la primera etapa de depuración conocido como pretratamiento. En este punto el agua residual pasa por unos filtros autolimpiantes y después llegarán a unas balsas aireadas que tendrán una doble función. La primera, la eliminación de aceites y grasas que quedarán en la superficie, y la segunda la retirada de arenas que se acumulan en el fondo.



Figura 2.Balsas de aireación del proceso de pretratamiento
(Fuente: web de Mancomunidad de Montejurra)

A continuación, el agua pasa por los decantadores primarios donde la velocidad del fluido desciende drásticamente y así las partículas de gran tamaño se decantarán. Luego el agua clarificado de los decantadores es enviado a unos filtros percolados biológicos para la eliminación de la DBO_5 (Figura 3).



Figura 3. Filtro biológico (Fuente: web de Mancomunidad de Montejurra)

Debido al arrastre de partículas el agua se envía a la siguiente etapa de decantación (decantación intermedia). Finalmente, el efluente de decantación intermedia pasa por la etapa de nitrificación-desnitrificación con decantación (Figura 4). Este reactor biológico funciona en continuo con lodos activados y con una zona anóxica (para la desnitrificación) y otra aeróbica (para la nitrificación).



Figura 4. Proceso de nitrificación y desnitrificación (Fuente: web de Mancomunidad de Montejurra)

La planta depuradora vierte su agua tratada al Río Ega y para ello consta de una Autorización de vertido otorgada por la CHE (Confederación Hidrográfica del Ebro). En dicha autorización aparecen los valores límites de los parámetros característicos de un agua residual, tales como, el pH, la DQO, la DBO_5, el nitrógeno amoniacal, los sólidos en suspensión…en ningún caso se deben sobrepasar dichos límites y para ello, se visualizan en continuo ciertos parámetros que si se vieran desviados habría que modificar por ejemplo tiempos de recirculación, apertura o cierre de válvulas, por ejemplo, mediante SCADA.

Los fangos generados se tratan en otra línea en el edificio de fangos y todo el control de los parámetros se lleva en el edificio de control, donde también está situado el laboratorio.

1.2. PROCESO DE NITRIFICACIÓN Y DESNITRIFICACIÓN CON DECANTACIÓN

Los sistemas de lodos activados, son un tipo de tratamiento biológico de aguas residuales domésticas o industriales, en el cual los microorganismos oxidan y mineralizan la materia orgánica como muchos científicos tales como Lindberg, Seyssiercq, Ferrasse y Mulas indican en sus estudios.

Una planta de lodos activados se caracteriza por cuatro elementos [15].

- Un tanque con aireación donde la biomasa se mezcla con las aguas residuales y el oxígeno.
- Un clarificador o decantador final, donde la biomasa es retirada por sedimentación.
- Recirculación de lodos al tanque de aireación.
- Retirada del exceso de lodos.

El residuo orgánico se introduce en un reactor donde se mantiene un cultivo bacteriano aerobio en suspensión. Este contenido es conocido como "líquido de mezcal".El cultivo bacteriano lleva a cabo la conversión de la materia orgánica de gran tamaño en moléculas de menor tamaño.

- **Reacciones: nitrificación y desnitrificación**

La nitrificación consiste en la transformación del nitrógeno amoniacal en nitrato por acción de un conjunto de bacterias autótrofas nitrificantes. Las bacterias encargadas de realizar este proceso utilizan el carbono inorgánico (CO_2 o HCO_3^-) como fuente de carbono, y obtienen la energía necesaria para su crecimiento a partir de la oxidación del nitrógeno amoniacal. La nitrificación del nitrógeno amoniacal se realiza en dos etapas llevadas a cabo por dos grupos diferentes de microorganismos (bacterias amonioxidantes y nitrooxidantes). [16]

Primera etapa

$$NH_4^+ + \frac{3}{2}O_2 \xrightarrow{Amin\ oxidantes} NO_2^- + 2H^+ + H_2O$$

Segunda etapa

$$NO_2^- + \frac{1}{2}O_2 \xrightarrow{Nitrioxidantes} NO_3^-$$

En las reacciones bioquímicas de ambas etapas se produce energía que es utilizada por los microorganismos para el crecimiento y mantenimiento celular. Para condiciones habituales de operación en una EDAR, la primera etapa corresponde con la etapa limitante del proceso de nitrificación, por lo que la reacción energética global queda representada por:

$$NH_4^+ + 2O_2 \rightarrow NO_3^- + 2H^+ + H_2O$$

También se ha de considerar la reacción de síntesis de los microorganismos implicados, que como se ha comentado anteriormente, asimilan una fracción del amonio del agua residual para el tejido celular. Esta reacción de síntesis, asumiendo como fórmula química de la biomasa $C_5H_7NO_2$, corresponde con:

$$4CO_2 + HCO_3^- + NH_4^+ + H_2O \rightarrow C_5H_7NO_2 + 5O_2$$

Por tanto, en la reacción global se puede observar como en el proceso de nitrificación se produce un consumo considerable de alcalinidad, cada mg/l de N-NH_4 oxidado provoca una disminución de 7.14 mg/l de alcalinidad expresada como $CaCO_3$, lo que provoca un importante descenso del pH del medio.

En la etapa de nitrificación se consigue oxidar el nitrógeno amoniacal a nitrato, pero para transformar ese nitrato a nitrógeno gas, y por tanto poder reducir el contenido de nitrógeno del agua residual, se requiere de una segunda etapa, denominada desnitrificación.

Esta segunda etapa del proceso biológico de eliminación de nitrógeno, las bacterias heterótrofas facultativas, en ausencia de oxígeno, utilizan el nitrato como aceptor de electrones para degradar la materia orgánica. De este modo, las bacterias, en presencia de una fuente de carbono, reducen el nitrato a nitrógeno gas dando fin al proceso de eliminación biológica de nitrógeno.

Para que este proceso tenga lugar de forma eficiente es fundamental mantener condiciones anóxicas (término que se emplea para indicar la ausencia de oxígeno disuelto en el medio y la presencia de nitrato como aceptor de electrones) en el reactor, ya que las bacterias heterótrofas facultativas prefieren utilizar el oxígeno como aceptor de electrones antes que el nitrato. El crecimiento bacteriano en presencia de nitrato resulta menos eficiente que el crecimiento en presencia de oxígeno, ya que no se genera la misma cantidad de energía en forma de ATP por unidad de DQO degradada [11].

La reacción general de desnitrificación utilizando metanol como fuente de carbono, se representa a partir de la siguiente ecuación:

$$6NO_3^- + 5CH_3OH \rightarrow 3N_2 + 5CO_2 + 7H_2O + 6OH^-$$

Si en la anterior reacción se considera la síntesis de biomasa ($C_5H_7NO_2$), la degradación de la materia orgánica del agua residual como fuente de carbono (considerada como $C_{10}H_{19}O_3N$) y el consumo de nitrógeno amoniacal como nutriente, la reacción global de eliminación de nitrato se puede escribir como [12].

$$NO_3^- + 0.345C_{10}H_{19}O_3N + H^+ + 0.26HCO_3^- + 0.26NH_4^+ \rightarrow$$
$$0.612C_5H_7O_2N + 0.5N_2 + 0.655CO_2 + 2.3H_2O$$

Como se puede observar, el proceso de desnitrificación compensa la disminución de alcalinidad del proceso de nitrificación ya que en el proceso de desnitrificación aumenta el pH. Este aumento del pH se produce como consecuencia del consumo de protones [13].

Una vez descritas las reacciones que suceden en el reactor biológico de lodos activados, quedaría indicar las condiciones típicas en este tipo de reactores. Debido a la robustez del sistema biológico, los reactores son balsas de hormigón abiertas en superficie y en contacto entre ellas. Unas balsas serán para el proceso aeróbico y otras para el anóxico.

El ambiente aerobio en el reactor se consigue mediante el uso de difusores o aireadores mecánicos que también sirven para mantener el líquido completamente mezclado. Adicionalmente los microorganismos son mantenidos en suspensión por las burbujas de aire o mediante el uso de agitadores. Por lo tanto, se puede concluir que el oxígeno cumple varias funciones, una para el uso en las reacciones biológicas y la otra para mantener la población microbiológica viva en el tanque (en suspensión). Para conseguir un ambiente aerobio, no se debe aplicar aire y debido a la alta concentración de lodos, el poco oxígeno que se puede transferir en la superficie del líquido, queda rápidamente consumido. Además, para mantener esos lodos en suspensión y que no se queden atrapados en el fondo de las balsas, se deben agitar mediante agitadores mecánicos.

En el tanque biológico de lodos activados, para la parte aeróbica, la transferencia de gas al líquido es el éxito de este proceso, y para describirlo existen diferentes teorías que explican el mecanismo de transferencia de gases, como la teoría de la doble capa por Lewis y Withman de 1920, el modelo de penetración de Higbie de 1935 y la teoría de renovación superficial por Dankwets de 1951. De ellas, la teoría más usada para entender el mecanismo de la transferencia de gases es la de doble capa [17].

La teoría de la doble capa es un modelo físico donde se establece que la tasa de transferencia se puede expresar en términos de un coeficiente global de transferencia y las resistencias en ambos lados de la interfaz (gas-líquido).

Una de las aplicaciones de modelar un sistema de lodos activados, aparte de establecer los valores óptimos de trabajo o anticipar la respuesta del sistema ante cambios, es conocer el consumo energético. En los lodos activados, el mayor consumo energético se debe a la aireación des sistema. Por ello, otra línea de estudio sería la optimización del consumo de aire en la estación depuradora que se está estudiando. Pero en nuestro caso para que el aire no sea una de las variables de estudio, se ha proporcionado en exceso (valor superior a 2 ppm) y así, se supondrá una transferencia constante y una concentración adecuada para que siempre pueda oxidarse la materia, así no interferirá en el modelo propuesto.

Aparte de las reacciones biológicas que se producen en los tanques, es necesaria una etapa posterior de sedimentación para la separación y recuperación de los lodos activados. La sedimentación es un proceso utilizado para la clarificación de aguas residuales en el cual se separan los sólidos en suspensión mediante fuerzas gravitacionales. En una planta convencional para tratar aguas residuales mediante lodos activados, la sedimentación se aplica para separar la biomasa (sólidos en suspensión) que se generan en el reactor durante la degradación de los contaminantes del agua residual, para dejarla libre de sólidos suspendidos. Una sedimentación discreta pude ser descrita por la ley de Stokes, debido a que las partículas conservan su tamaño de partícula y no tienen interacciones. En este caso, por el contrario, la biomasa, presenta una concentración de partículas tan alta (> 500 mg/l) que sí existen interacciones importantes entre los flóculos suspendidos y la velocidad de sedimentación se considera esta en función de la concentración local. [9]

El modelo de Vesilind describe la velocidad de sedimentación en función de la concentración:

$$V_{Si} = V_0 * e^{(-K_V * X_i)}$$

Donde

X_i = concentración de sólidos suspendidos (mg/l)

V_{Si} = Velocidad de sedimentación (m/h)

V_0 y K_V = constantes.

En la figura 5 se puede observar la curva que describe la sedimentación, es decir, la velocidad de sedimentación en función de la concentración de los sólidos en suspensión.

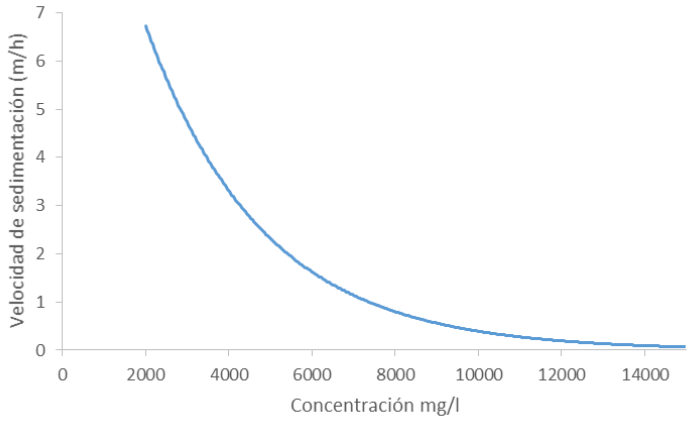


Figura 5. Velocidad de sedimentación en función de la concentración (Fuente propia).

Al inicio de la sedimentación (clarificación), las partículas se comportan como partículas independientes y sedimentan con velocidad constante V_S (Figura 6). Cuando la concentración de los lodos incrementa, la interacción entre los flóculos aumenta y se alcanza la etapa de compactación; por tal razón la interfaz de sólidos desciende con menor velocidad. La compactación se lleva a cabo en el fondo del sedimentador. Al mismo tiempo, el agua es desplazada hacia arriba para dejar espacio al lodo biológico que sedimenta, es decir es un fenómeno complejo de movimiento de los lodos hacia el fondo y de agua hacia arriba. La presencia de microorganismos filamentosos en pequeñas concentraciones puede servir como puente para unir diferentes flóculos dispersos, con lo que se mejora la sedimentación. Sin embargo, cuando la concentración de filamentosos es muy alta, se presentan problemas de sedimentación. A esto se le llama abultamiento de lodos (Bulking), por lo que el índice volumétrico de lodos (IVL) se incrementa. Es importante señalar que la densidad de los agregados, microorganismos o flóculos es 0.5% mayor a la del agua donde están suspendidos; por tal razón, el efecto de temperatura, viento o variaciones súbitas en el caudal de alimentación puede afectar fácilmente el desempeño del sedimentador.[9]

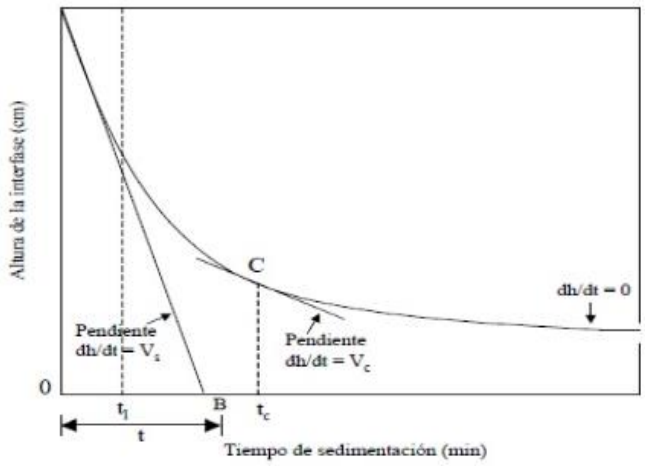


Figura 6. Variación de la altura de la interfase en función del tiempo de sedimentación, para obtener la velocidad de sedimentación zonal (Vs) (Fuente internet).

1.3. MODELO ASM1

Cuando se comenzó con el modelado para el diseño de las plantas de tratamiento de lodos activados, únicamente se consideraba un régimen estacionario y la DBO o DQO eran los parámetros de caracterización. Además, no permitía predecir el comportamiento dinámico de las plantas, ni determinar con exactitud la demanda de oxígeno ni la producción de lodos (Fall)

En los últimos años, aparecieron cambios importantes en las teorías y prácticas de diseño de los procesos biológicos de tratamiento de aguas residuales, constituyendo claramente un nuevo paradigma entre el enfoque clásico y las tendencias actuales asentadas en la formulación de modelos más precisos. Estos modelos presentan todas las ventajas de la simulación dinámica, por ejemplo una mayor exactitud de las predicciones y diseño, que vuelven obsoleta una buena parte de las simplificaciones e imprecisiones de los métodos antiguos. Cambian radicalmente hasta los métodos de caracterizar las aguas residuales, con la aparición, por ejemplo, de una nueva forma de fragmentar la demanda química de oxígeno. Los modelos para los lodos activados (el más famoso de todos los procesos de tratamiento biológico) fueron desarrollados por un comité científico internacional bajo la responsabilidad de IAWQ (International Association of Water Quality), actual IWA.

En el inicio, el esfuerzo radicó en llegar a un consenso sobre la forma de presentar los modelos y hacerlos evolucionar o ampliar progresivamente. Existen hoy cuatro generaciones de modelos de la IWA: el ASM1 original; el ASM3 ambos capaces de predecir la degradación de la materia orgánica, nitrificación y desnitrificación de los lodos; y el ASM2 y su versión modificada ASM2d que incluyen además la mitigación biológica del fósforo [1].

En la actualidad, existe una gran variedad de difusión del tema y actualizaciones de los especialistas en modelado de los procesos de tratamiento de agua. También existen retos bien identificados para la investigación en los aspectos de caracterización y mecanismos bioquímicos así como en lo relacionado con la simplificación de los modelos y protocolos de simulación. El enfoque de la modelación dinámica en tratamiento de aguas está en vía de generalizarse a muchos otros tipos de sistemas, y constituye, sin duda alguna, uno de los puntos con mayor potencial de desarrollo en el futuro para la investigación en tratamiento de aguas residuales.

- **Antecedentes históricos del modelado dinámico del proceso de lodos activados.**

En 1982, la IAWQ incentivó la formación de un grupo de estudio internacional encargado de acelerar el desarrollo de la modelación dinámica de las plantas de tratamiento, crear una plataforma consensuada y proponer un modelo simple de inicio. El grupo concentró sus primeros esfuerzos en inventariar los modelos existentes así como los obstáculos a su desarrollo. Se llegó a concluir que los únicos modelos que conocieron una amplia difusión y nivel de utilización, fueron los más simples que consideran una hipótesis de régimen estacionario y mezcla completa para los reactores. Por otra parte, existía un gran número de modelos dinámicos, cuya difusión fue obstaculizada por la complejidad, la falta de orden para presentarlos y las limitaciones en el poder de las computadoras.

En los años 70, la Universidad de Cape Town (Suráfrica) fue una de las pioneras de la modelación dinámica con los trabajos del profesor G.V.R. Marais. Otros trabajos tuvieron lugar después o simultáneamente en un número muy restringido de universidades de Europa y Estados Unidos. Parte de los pioneros fueron juntados en 1980 en el primer grupo de estudio de la IAWQ formado por Henze (Dinamarca), Grady (USA), Gujer (Suiza) y Marais (Suráfrica).

Las conclusiones del grupo fueron publicadas en 1987 en un informe que presentaba lo conocido hoy como el Modelo ASM1, modelo dedicado a describir la degradación de la materia orgánica, nitrificación y desnitrificación en un proceso de lodos activados. Los logros más destacados del grupo fueron un consenso en los procesos biológicos que integran el modelo, la estandarización de los símbolos, la presentación del modelo utilizando una notación matricial, la propuesta de valores por defecto de los parámetros del modelo, la adopción de la DQO y su fraccionamiento para caracterizar las aguas y lodos, un código de programación para el desarrollo futuro de software de modelización. La última acción propulsó la existencia actual de varios software y programas que tienen implementados, los conceptos del ASM1 original o algunas de sus modificaciones para fines de diseño, operación de plantas o investigación (GPS-X, Biowin…).

En 1995, los trabajos del grupo de estudio renovado se prolongaron para publicar la versión ASM2, la cual está dirigida a predecir el comportamiento del fósforo. En 1999, hubo otras dos modificaciones con la aparición de la versión ASM2d y ASM3 (alternativa del ASM1).

- **Ventajas y límites del modelo dinámico.**

- La modelación dinámica permite predecir la calidad del efluente, la demanda de oxígeno y la producción de lodos en respuesta a las fluctuaciones en tiempo real de la carga y del caudal del influente.

- Una vez que se tiene modelado y calibrada una planta, el modelo se puede utilizar para finas de diagnóstico, proyección, comparación de variantes, probar cambios en la operación, evaluación de las prácticas actuales, optimización de operación y gastos, así como para la capacitación del personal.

- Aun cuando la planta proyectada no existe todavía físicamente, se pueden probar configuraciones innovadoras y comparar variantes.

- Se pueden reducir las necesidades de estudio piloto, el tiempo y la inversión que se requiere para esto, realizando primero los estudios por modelación y solo probar a escala piloto algunas de las soluciones identificadas.

- Se puede optimizar la configuración y el funcionamiento de una planta de tratamiento, así como responder a numerosas preguntas respecto a su capacidad e impactos de modificaciones proyectadas.

- La modelación constituye un instrumento de ayuda a la decisión para los administradores de plantas y un medio de gráficos visual para convencer estos a estos últimos.

- Con la modelación se pueden realizar estudios sin perturbar el funcionamiento de la planta, ni poner en riesgo sus equipos.

- Es también un medio de formación y concienciación de los operadores sobre algunos aspectos críticos.

- Como principales límites, se debe notar la necesidad de realizar estudios anteriores para calibrar los modelos. Los datos que se necesitan para esto son generalmente diferentes de los datos rutinarios de caracterización que se tienen en las plantas de tratamiento. Todavía falta realizar investigaciones para evaluar la aplicabilidad de los modelos para diferentes efluentes industriales.

El modelo ASM1 puede ser presentado en forma matricial de acuerdo con Henze et al (1987) según se puede observar en la siguiente tabla. En esta matriz aparecen los conceptos principales (componentes y procesos).

Tabla 1. Modelo ASM1 en notación matricial. (Henze et al 1987)

Componentes i Procesos j	**1** S_I	**2** S_S	**3** X_I	**4** X_S	**5** X_{BH}	**6** X_{BA}	**7** X_P	**8** S_O	**9** S_{NO}	**10** S_{NH}	**11** S_{ND}	**12** X_{ND}	**13** S_{ALK}	Tasa de reacción ρ_j ($M\ L^{-3}\ T^{-1}$)
Crecimiento aerobio de heterótrofos		$-1/Y_H$			1			$-(1-Y_H)/(Y_H)$		$-i_{XB}$			$-i_{XB}/14$	$\mu_{H\max}\left[\frac{S_O}{K_{OH}+S_O}\right]\left[\frac{S_S}{K_S+S_S}\right]X_{BH}$
Crecimiento anóxico de heterótrofos		$-1/Y_H$			1				$-(1-Y_H)/(2{,}86Y_H)$	$-i_{XB}$			$[(1-Y_H)/(14x2{,}86Y_H)]-i_{XB}/14$	$\mu_{H\max}\left[\frac{S_{NO}}{K_{NO}+S_{NO}}\right]\left[\frac{S_O}{K_{OH}+S_O}\right]\left[\frac{S_S}{K_S+S_S}\right]\eta_g X_{BH}$
Crecimiento aerobio de heterótrofos						1		$-(4{,}57-Y_A)/(Y_A)$	$1/Y_A$	$-i_{XB}-(1/Y_A)$			$(-i_{XB}/14)-(1/7Y_A)$	$\mu_{H\max}\left[\frac{S_O}{K_{OH}+S_O}\right]\left[\frac{S_{NH}}{K_{NH}+S_{NH}}\right]X_{BA}$
Decaimiento de heterótrofos				$1-f_P$	-1		f_P					$i_{XB}-f_P i_{XP}$		$b_H X_{BH}$
Decaimiento de autótrofos				$1-f_P$		-1	f_P					$i_{XB}-f_P i_{XP}$		$b_A X_{BA}$
Amonificación de N org soluble		1		-1						1	-1		1/14	$k_a S_{ND} X_{BH}$

Hidrólisis orgánicos enredados														$k_h \frac{X_S/X_{BH}}{K_X + (X_S/X_{BH})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{OH}+S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{OH}}{K_{OH}+S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO}+S_{NO}} \right) \right] X_{BH}$
Hidrólisis del N org enredado											1	-1	-1	$\rho_{7\left(X_{ND}/X_S\right)}$
Tasa de conversión total	$\eta = \sum v_{ij}\rho_j$													

Parámetros estequiométricos	Componentes		**Parámetros cinéticos**
Rendimiento de los heterótrofos Y_H Rendimiento de los autótrofos Y_A Fracción de biomasa que se convierte en productos inertes f_P Masa de N por unidad de mas de biomasa en DQO ix_B Masa de N por unidad de masa de productos residuales en DQO ix_P	S_I: mat orgánica inerte soluble, $M(DQO)L^{-3}$ S_S: mat irg. Rápidamente biodegradable, $M(DQO)L^{-3}$ X_I: mat. org. inerte en forma particulada, $M(DQO)L^{-3}$ X_S: mat. org. Lentamente biodegradable, $M(DQO)L^{-3}$ X_{BH}: biomasa heterótrofa activa, $M(DQO)L^{-3}$ X_{BA}: biomasa autótrofa activa, $M(DQO)L^{-3}$ X_P: productos partidulados inertes procedentes del decaimiento, $M(DQO)L^{-3}$	S_O: oxígeno disuelto S_{NO}: N en nitratos y nitritos, $M(N)L^{-3}$ S_{NH}: $N\text{-}NH_4^+ + N\text{-}NH_3$, $M(N)L^{-3}$ S_{ND}: N orgánico soluble biodegradable, $M(N)L^{-3}$ X_{ND}: N orgánico partidulado biodegradable, $M(N)L^{-3}$ S_{ALK}: Alcalinidad, unidades molares	Crecimiento y decaimiento de heterótrofos: μ_{Hmax}, K_S, K_{OH}, K_{NO}, b_H Crecimiento y decaimiento de autótrofos: μ_{Amax}, K_{NH}, K_{OA}, b_A Factor de corrección para el crecimiento de autótrofos en medio anóxico: η_g Hidrólisis: k_h, K_X Amonificación: k_a Factor de corrección para la hidrólisis en medio anóxico: η_h

1.4. CALIBRACIÓN DINÁMICA

El proceso de calibración proporciona los valores de los parámetros que intervienen en el proceso biológico y que servirán para que los resultados del modelo matemático se ajusten a la realidad. La determinación de dichos parámetros se obtiene mediante la optimización de una función objetivo empleando algoritmos matemáticos específicos. En general, la función objetivo propuesta es la minimización de la suma del cuadrado del error, el cual viene dado por la diferencia entre los valores experimentales y los predichos por el modelo.

La calibración de cualquier modelo garantiza su aplicabilidad, lo cual lleva implícito tres cualidades del modelo:

- ✓ Confianza. Hay que demostrar que el modelo tiene capacidad de reproducir condiciones existentes y fiabilidad para resolver situaciones futuras.

- ✓ Conocimiento y comprensión. La determinación de los valores de los parámetros del modelo mediante la calibración convierte el modelo en una herramienta para conocer el comportamiento del proceso biológico en su totalidad, explicando cambios que ocurren en su comportamiento en base a variaciones de las condiciones de operación.

- ✓ Resolución de problemas. El disponer de un modelo adecuadamente calibrado puede permitir la reconstrucción de información perdida o el establecimiento de alarmas ante comportamientos anómalos o información errónea del sistema. [13]

Como el propósito del procedimiento de calibración es describir y predecir situaciones dinámicas a un corto plazo, es conveniente un procedimiento de calibración basado en datos dinámicos. Para ello, se requiere de la recogida de datos con una determinada frecuencia en función del tiempo y de las variables de influente (entrada del sistema). El tiempo de retención hidráulico (TRH) es una de las constantes de tiempo del sistema más importantes, que nos indica el tiempo que está una unidad de fluido en un recipiente, lo que para nosotros sería el tiempo de contacto para que ocurran las reacciones biológicas. Idealmente, el periodo de tiempo entre muestras no debe ser mayor a la quinta parte del TRH, como así, también el periodo de toma de muestras debe ser 3 a 4 veces esta constante de tiempo. Sin embargo, puesto que las medidas son relativamente costosas estas recomendaciones no siempre se logran cumplir.

Esta metodología de calibración se emplea generalmente para lograr una profundización en el conocimiento del comportamiento dinámico del sistema. Sin embargo, la implementación de esta metodología de calibración requiere un costoso trabajo experimental. El empleo de sondas permite aliviar el esfuerzo experimental que requiere esta metodología, aunque la determinación de los parámetros en laboratorio es igual de efectivo.

La información obtenida de la modalidad dinámica puede ser complementada con experiencias en laboratorio. Este tipo de metodología consiste en la calibración selectiva de los parámetros de elevada influencia del modelo matemático mediante experimentos en discontinuo [14].

- **Calibración del proceso nitrificación**

Dentro de una planta depuradora de aguas residuales existen diversos procesos cada uno de ellos diseñado para la mitigación de ciertos elementos contaminantes. Actualmente existen paquetes definidos que simulan el funcionamiento de esos procesos dentro de programas como el Modelica, porque ahorran tiempo y dinero a la hora de determinar cambios en cualquiera de esos procesos.

Se va a crear un paquete personalizado para describir el proceso de nitrificación-desnitrificación de la planta depuradora de Estella. Para ello se va a realizar una calibración de dicho proceso mediante el programa Matlab. Que posteriormente se podrá usar para observar la respuesta del sistema descrito (nitrificación-desnitrificación) ante cambios.

El proceso a seguir para la calibración sería el siguiente (Figura 7):

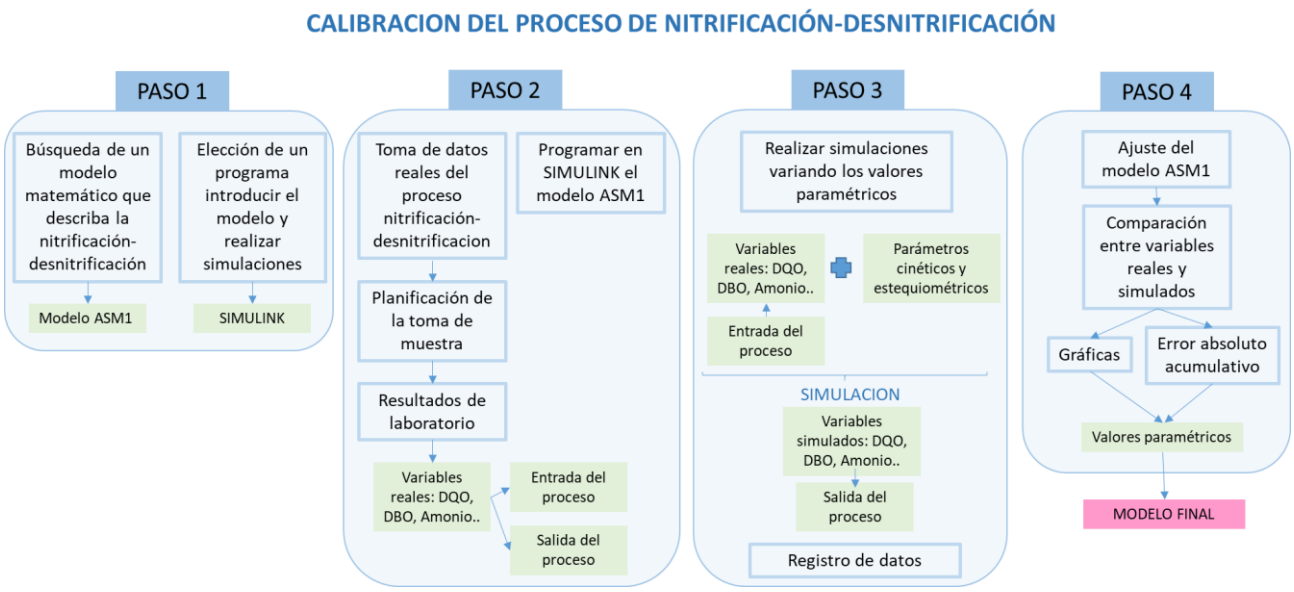


Figura 7. Proceso de calibración dinámica.

Primero se debe elegir el modelo matemático que describa el proceso que se desea calibrar. El más conocido es el ASM y de ellos, se ha optado por el ASM1. Al mismo tiempo se decide usar SIMULINK para realizar las simulaciones.

El modelo ASM1 describe la evolución de la materia orgánica y la materia orgánica nitrogenada mediante procesos microbiológicos. Para la descripción de la materia usa variables de estados (S_S, X_S, S_{ND}…) y estos representan las variables DBO, DQO, amonio…

Posteriormente se necesitan datos reales para poder compararlos con los obtenidos en la simulación, por lo que se debe planificar la toma de muestras. Para ello, en la depuradora de Estella se programan y registran muestras tanto de entrada al sistema de nitrificación-desnitrificación como de salida. Esas muestras son analizadas en el laboratorio y de determina su contenido de materia orgánica y materia orgánica nitrogenada (DBO, DQO, Amonio…). Estos valores serán nuestras variables reales de entrada y salida.

Al mismo tiempo se irá programando en el entorno SIMULINK el modelo ASM1 y los balances de materia que definen el proceso de nitrificación-desnitrificación.

El siguiente paso es la realización de la simulación para probar el modelo. Para ello el programa necesita unos datos iniciales, que en nuestro caso serán las variables reales de entrada.

El modelo consta de unos parámetros cinéticos y estequiométricos que varían según el sistema (por eso la importancia de realizar una calibración). En cada simulación se irán modificando los valores paramétricos obteniendo variables simulados.

Finalmente se comparan los datos de las variables reales de salida con los simulados y se procede a realizar el ajuste gráficamente y mediante el cálculo del error absoluto acumulativo.

2. OBJETIVOS

Son varios los objetivos que se plantean en este proyecto aunque el principal es la calibración del proceso de nitrificación en una planta real situada en Estella, Navarra.

Para la calibración del proceso se necesitan lograr varios propósitos tales como:

- La búsqueda de los modelos matemáticos que describan el proceso de nitrificación.
- Estudio del comportamiento del sistema real mediante la planificación y obtención de datos.
- Elección de un programa computacional para escribir el modelo y realizar simulaciones para obtener un ajuste del modelo, en el cual los parámetros sean los que mejor describan el sistema real que se está estudiando. Para ello se irá comparando y ajustando el modelo matemático frente a los datos reales de la planta.
  Una vez logrado todos los parámetros (coeficientes y factores), se puede plantear un modelo exacto que describa el proceso real, con lo que se puede concluir que se habría calibrado.
- De cada simulación, generar un sistema de base de datos que posteriormente servirá para comparar los datos reales con los simulados.

Posteriormente, sería interesante volver a tomar datos y comprobar que realmente el modelo y los parámetros obtenidos se ajustan. Este siguiente paso se conoce como la validación.

Por otro lado, se realiza una comparativa mediante un ajuste del modelo de forma visual mediante el análisis de las gráficas frente al ajuste logrado por mediación de la estimación del error absoluto acumulativo.

3. MARCO TEORICO

3.1. ESTRUCTURA DEL ASM1

El modelo ASM1 se basa en modelos diferenciales. Estas ecuaciones describen el cambio dinámico tanto de la DQO (Demanda Química de Oxígeno) como la del nitrógeno. Para definir los diferentes componentes del modelo, la DQO y el nitrógeno se dividen en fracciones representadas como variables de estado. Dentro del modelo también nos encontraremos con parámetros estequiométricos y cinéticos que describen la dinámica del proceso.[5]

3.1.1. VARIABLES DE ESTADO

La DQO se considera el mejor parámetro para definir el sustrato en forma de carbón porque relaciona el electrón equivalente entre el sustrato orgánico, la biomasa y el oxígeno consumido. El fraccionamiento de la DQO en el ASM1 (Figura 8) se realiza en 7 variables basados en la solubilidad, biodegradabilidad, el ratio de biodegradación y la viabilidad. [6]

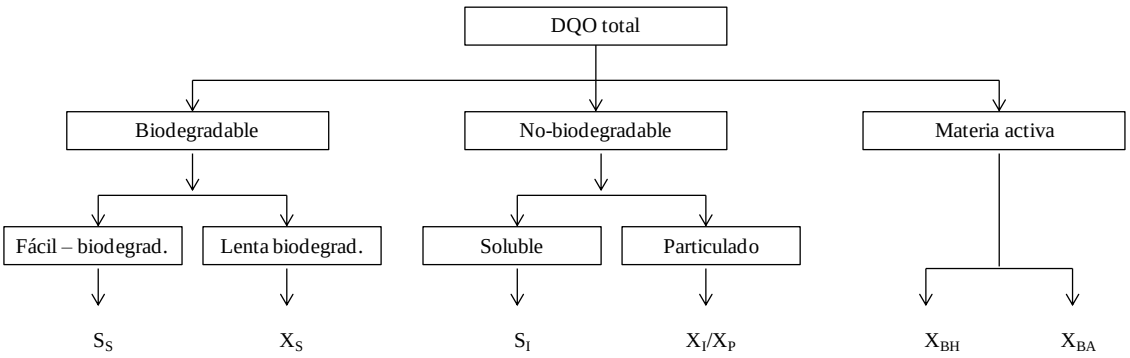


Figura 8. Variables de estado de la materia orgánica (figura modificada Petersen 2000)

Las variables se definen de la siguiente manera:

- S_s : sustrato fácilmente biodegradable.
- S_I: materia orgánica inerte soluble.
- X_s: sustrato lentamente biodegradable.
- X_{BA}: biomasa autótrofa activa
- X_{BH}: biomasa heterótrofa activa.
- X_I: materia orgánica inerte en forma de partícula.

- X_P: partículas procedente de la muerte biológica

A continuación fraccionaremos el nitrógeno del agua residual (Figura 9): [6]

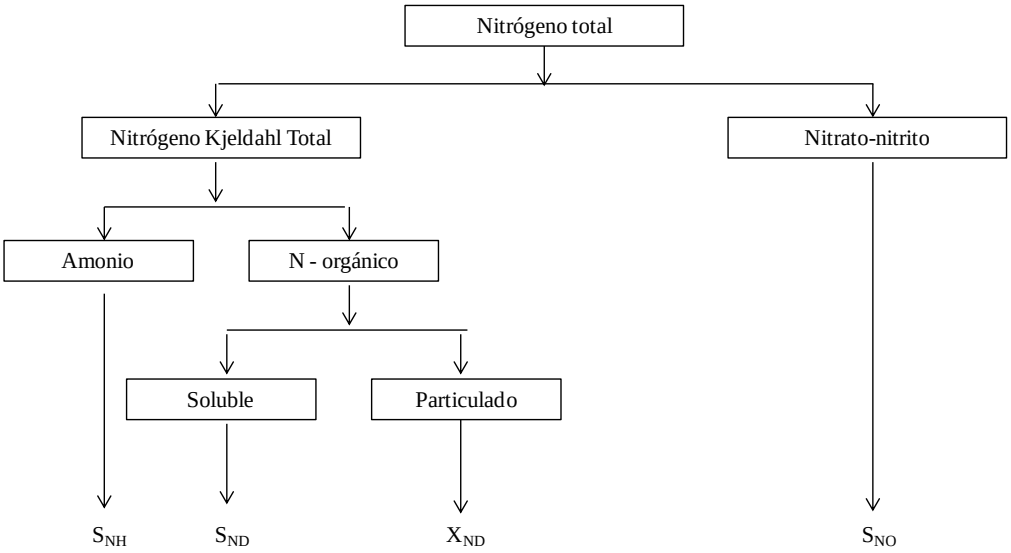


Figura 9. Variables de estado del nitrógeno (figura modificada Petersen 2000)

Las variables se definen de la siguiente manera:

- X_{ND}: nitrógeno orgánico particulado
- S_{ND}: nitrógeno orgánico soluble
- S_{NH}: nitrógeno amoniacal
- S_{NO}: nitrato más nitrito.

Hay dos componentes más que se describen en el modelo de ASM1 como variable de estado que son la concentración de oxígeno S_O y la alcalinidad S_{ALK}. [1]

3.1.2. PARAMETROS DEL MODELO

A continuación se recogen en una tabla los parámetros del modelo matemáticos que describen el sistema y los cuales se deberán ajustar. Para partir de un valor lógico, se indican los valores típicos bibliográficos.

Se dividen en dos grupos, los parámetros estequiométricos y los parámetros cinéticos. Los parámetros estequiométricos indican el desplazamiento de las reacciones. Es decir, si tenemos una reacción tipo A + B $\longrightarrow$ C, cuanto mayor sea el coeficiente, mayor producción de C tendremos, por el contrario, si el coeficiente es inferior a la unidad, quedará desplazado para la no formación de C.

En el caso de los parámetros cinéticos, su importancia reside en la velocidad de las reacciones. Por ello, cuanto mayor sea el coeficiente indicará que dicho proceso o reacción se producirá más rápido. [11]

Por otro lado, hay que tener en cuenta que toda reacción suele estar condicionado por otros parámetros (perturbaciones) externos como por ejemplo, la temperatura, el pH, la salinidad… en este caso supondremos una constancia de dichas perturbaciones para no aumentar el número de variables a estudiar, aunque sería interesante una vez obtenida la calibración, ampliar el estudio en cuanto a estas variables externas ambientales.

Dentro de los parámetros nos encontramos coeficientes, factores, rendimientos y velocidades. [1].

Tabla 2. Parámetros del modelo ASM1 con valores bibliográficos (Henze et al 1987)

Parámetros ASM 1	**Símbolo**	**20 ºC**	**Unidades**
PARAMETROS ESTEQUIOMETRICOS			
Rendimiento heterótrofo	Y_H	0,67	g DQO formado / g DQO oxidado
Rendimiento autótrofo	Y_A	0,24	g DQO formado / g N oxidado
Fracción de biomasa para la producción	f_P	0,08	
Masa N/Masa DQO en biomasa	i_{xB}	0,086	gN/gDQO
Masa N/Masa DQO producción desde biomasa	i_{xP}	0,06	gN/gDQO
PARAMETROS CINÉTICOS			
Velocidad de crecimiento heterótrofo	μ_H	6,0	d^{-1}
Coeficiente medio de saturación para heterótrofos	K_S	20,0	$gDQO/m^3$
Coeficiente de oxígeno para heterótrofos	K_{OH}	0,20	g_{O2}/m^3
Coeficiente de nitrato para heterótrofos	K_{NO}	0,50	$g_{N\text{-}NO\text{-}}/m^3$
Velocidad muerte heterótrofa	b_H	0,62	l/d
Factor de corrección para el crecimiento heterótrofo	η_g	0,80	
Velocidad de crecimiento autótrofo	μ_A	0,80	d^{-1}
Coeficiente amonio para autótrofos	K_{NH}	1,0	$g_{N\text{-}NH3}/m^3$
Coeficiente de oxígeno para autótrofo	K_{OA}	0,40	g_{O2}/m^3
Velocidad muerte autótrofa	b_A	0,20	d^{-1}
Velocidad de amonificación	k_a	0,08	m3/gDQO/d

Velocidad max de hidrólisis	k_h	3,0	gDQObio/gDQO/d
Coeficiente de hidrólisis para mat biodegradable	K_X	0,03	gDQObio/gDQO/d
Factor de corrección para hidrólisis anóxico	η_h	0,40	

3.1.3. PROCESOS DINÁMICOS DEL ASM1

En el modelo ASM1 [1] hay cuatro tipos de procesos dinámicos. Los ratios de crecimiento se describen generalmente por la cinética de Monod de primer orden:

$$\mu = \mu_{MAX} \frac{S}{S + K_S}$$

Donde

μ: ratio del crecimiento específico

μ_{max}: ratio del crecimiento específico máximo

S: concentración de sustrato

Ks: Constante medio de saturación

3.1.3.1. CRECIMIENTO DE LA BIOMASA

- *Crecimiento aeróbico de la biomasa heterótrofa*

La degradación del sustrato soluble rápidamente biodegradable bajo el consumo del oxígeno conduce al crecimiento de la biomasa heterótrofa. El amonio es usado como fuente de nitrógeno. Generalmente este proceso es el principal de la producción de biomasa y de la eliminación de la DQO. El proceso se basa en la función de Monod (COST, 1998)

$$\rho_1 = \mu_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) X_{BH}$$

- *Crecimiento anóxica de la biomasa heterótrofa*

En ausencia de oxigeno los organismos heterótrofos usan el S_S como sustrato y el nitrato como electrón aceptor. Como resultado se tendrá el crecimiento de la biomasa y la producción del nitrógeno gas debido a la desnitrificación. Este proceso también se describe mediante la función de Monod. La cinética resultante aparece a continuación (saber que $\eta_g < 1$)

$$\rho_2 = \eta_g \mu_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) X_{BH}$$

- *Crecimiento aeróbica de la biomasa autótrofa*

Mediante la nitrificación el nitrógeno del amonio se oxida para dar nitrato. Este resulta en el crecimiento de la biomasa autótrofa y el alto consumo del oxígeno. Este proceso también se describe mediante la función de Monod

$$\rho_3 = \mu_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{OA} + S_O} \right) X_{BA}$$

3.1.3.2. MUERTE DE LA BIOMASA

- *Muerte de la biomasa heterótrofa*

Se supone que los organismos mueren a cierta velocidad y parte de la descomposición da como resultado la liberación de sustrato lentamente biodegradable. El resto es considerado no-biodegradable y pasa a formar parte de la fracción Xp. La velocidad será la misma para la zona aeróbica, anóxica o anaerobia.

$$\rho_4 = b_H X_{BH}$$

- *Muerte de la biomasa autótrofa*

Es muy parecida a la muerte de la biomasa heterótrofa

$$\rho_5 = b_A X_{BA}$$

3.1.3.3. AMONIFICACION

El nitrógeno orgánico soluble biodegradable se libera.

$$\rho_6 = k_A S_{ND} X_{BH}$$

3.1.3.4. HIDRÓLISIS

- *Hidrólisis de la materia orgánica atrapada*

El sustrato lentamente biodegradable atrapado en el lodo se descompone extracelularmente. Este proceso produce sustrato fácilmente biodegradable que se usará para el crecimiento microbiológico. Esto ocurre en condiciones tanto aeróbico como anóxico. La parte anóxica es controlada mediante el factor $\eta_H < 1$.

$$\rho_7 = k_h \frac{X_S / X_{BH}}{K_X + (X_S / X_{BH})} \left\{ \left(\frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right\} X_{BH}$$

- *Hidrólisis del nitrógeno orgánico atrapado*

Este proceso de rotura del nitrógeno orgánico particulado en nitrógeno orgánico soluble es descrito como la velocidad de los compuestos orgánicos atrapados.

$$\rho_8 = k_h \frac{X_S / X_{BH}}{K_X + (X_S / X_{BH})} \left\{ \left(\frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right\} X_{BH} \frac{X_{ND}}{X_S}$$

3.1.4. FORMULACIÓN DEL MODELO

La descripción final del modelo se basa en los procesos dinámicos y se construye mediante ecuaciones diferenciales. [21]

La primera variable de estado representa el comportamiento de la concentración de la biomasa heterótrofa y nos muestra como es afectado por tres procesos, el crecimiento aeróbico el anóxico y la muerte.

$$r_{X_{BH}} = \frac{dX_{BH}}{dt} = \rho_1 + \rho_2 - \rho_4$$

La segunda describe la concentración de la biomasa autótrofa.

$$r_{X_{BA}} = \frac{dX_{BA}}{dt} = \rho_3 - \rho_5$$

La tercera variable describe el comportamiento del sustrato fácilmente biodegradable. La concentración irá reduciéndose en cuanto las bacterias heterótrofas vayan formándose, además, también irá en aumento cuando mediante la hidrólisis se genere más sustrato.

$$r_{S_S} = \frac{dS_S}{dt} = \rho_7 - (\rho_1 + \rho_2)$$

La siguiente ecuación diferencial describe cómo el sustrato lentamente biodegradable se incrementa por la muerte bacteriana y decrece por la hidrólisis.

$$r_{X_S} = \frac{dX_S}{dt} = (1 - f_P)(\rho_4 + \rho_5) - \rho_7$$

La quinta ecuación del modelo describe como la concentración de las partículas inertes se producen de la muerte de la biomasa.

$$r_{X_P} = \frac{dX_P}{dt} = (f_P)(\rho_4 + \rho_5)$$

La sexta ecuación describe el comportamiento del nitrógeno orgánico en partícula que es similar al sustrato lentamente biodegradable.

$$r_{X_{ND}} = \frac{dX_{ND}}{dt} = (i_{XB} - i_{xP} f_P)(\rho_4 + \rho_5) - \rho_7$$

El nitrógeno orgánico soluble es afectado por la amonificación y la hidrólisis

$$r_{S_{ND}} = \frac{dS_{ND}}{dt} = \rho_7 - \rho_6$$

El amonio se usa como fuente para el crecimiento de los microorganismos.

$$r_{S_{NH}} = \frac{dS_{NH}}{dt} = -i_{XB}(\rho_1 + \rho_2) + \rho_6 - \left(i_{XB} + \frac{1}{Y_A}\right)\rho_3$$

La concentración del nitrato crece con la nitrificación y desciende con la desnitrificación, novena ecuación.

$$r_{S_{NO}} = \frac{dS_{NO}}{dt} = \frac{1}{Y_A}\rho_3 - \left(\frac{1 - Y_H}{2.86 Y_H}\right)\rho_2$$

El número 2.86 representa el oxígeno equivalente para la conversión del nitrato en nitrógeno gas.

Finalmente, la siguiente ecuación del modelo describe la concentración del oxígeno en el agua residual. La concentración del oxígeno decrece con el crecimiento aeróbico.

$$r_{S_O} = \frac{dS_O}{dt} = \left(\frac{1 - Y_H}{Y_H}\right)\rho_1 - \left(\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}\right)\rho_3$$

El valor 4.57 representa el oxígeno teórico consumido para la oxidación del amonio en nitrato.

Todavía quedaría las variables de X_I, S_I y S_{ALK}. Los dos primeros son constantes según la tabla ASM1 y la alcalinidad la supondremos también constante.

3.1.4.1. RESTRICCIONES DEL MODELO

Se han tomado una serie de simplificaciones y restricciones para detallar mejor el modelo de lodos activados, relacionados tanto con el sistema físico como el propio modelo matemático. Por ejemplo, se ha supuesto que tanto la temperatura como el pH no van a variar o no le afecta al modelo.

3.2. BALANCE DE MATERIA EN EL TANQUE BIOLÓGICO Y DECANTADOR

A continuación se observa el esquema del proceso junto con las variables (Figura 10).

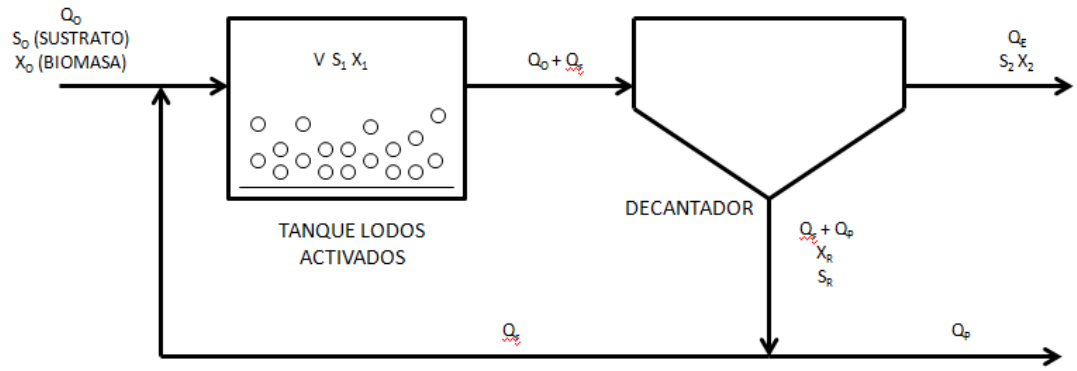


Figura 10. Diagrama de flujo de la planta de lodos activados. (Fuente: propia)

En este esquema se representan las variables de las que depende el sistema así como los diversos flujos y la relación que tienen entre ellos, es decir, las entradas y las salidas. Los distintos elementos de los que se compone este proceso son:

- Corriente de entrada. Punto de muestreo número uno. Esta corriente corresponde a la salida de los decantadores intermedios de la planta depuradora. El caudal Qo es conocido mediante caudalímetro. En esta corriente no encontraremos biomasa ni partículas de gran tamaño (Xp) puesto que venimos de un grupo de 3 sedimentadores.

- Reactor biológico de lodos activados. Es un tanque abierto aireado mediante un grupo de aireadores y difusores colocados en la parte inferior de las balsas. Actualmente, la parte anóxica ha quedado eliminada puesto que el rendimiento que se lograba era bastante bajo. En este punto, el sustrato se consume para el crecimiento de la biomasa. La

materia inerte se mantiene constante. Al reactor llega el caudal procedente de los decantadores anteriores y el caudal recirculado del decantador posterior.

- Decantador. En este elemento la velocidad del flujo se reduce produciendo que las partículas de gran tamaño se sedimentes formando un película gruesa de lodos en su fondo que serán recirculados o purgados. Al realizar la separación de las partículas, el agua residual queda más clarificado consiguiendo una eliminación de los parámetros límites.

- Corriente de salida (efluente). Punto de muestreo número dos. Esta corriente de agua corresponde a la salida de la estación depura de aguas, por lo que los parámetros deben cumplir con los valores máximos permitidos en la autorización de vertido.

Balance de materia en el reactor se define como:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{Q}{V} S_{entrada} - \frac{Q}{V} S_{salida} + generación/consumo$$

3.3. MATLAB

MATLAB es un software matemático (Laboratorio de Matrices) y su código en principio fue escrito para proporcionar un fácil acceso al software de matrices. Es un entorno computacional y de desarrollo de aplicaciones totalmente integrado, orientado para llevar a cabo proyectos en donde se encuentren implicados un gran número de cálculos matemáticos y se requiera de la visualización gráfica de los mismos. MATLAB integra un análisis numérico, cálculo matricial, proceso de señales y visualización gráfica (Mathworks).

3.3.1. SIMULINK

Simulink es una extensión de Matlab que permite realizar simulaciones y análisis de sistemas dinámicos. Permite construir diagramas de bloques de manera gráfica, evaluar el desempeño del sistema y hacer modificaciones en su diseño. Es necesario que se entienda que Simulink no es completamente un programa separado de Matlab, sino una herramienta.

Existen dos fases importantes en la simulación, la construcción del sistema y su análisis. Simulink posee una amplia gama de bloques, fuentes, componentes lineales y no lineales y conectores. Da la opción de poder personalizar y crear bloques propios. Se pueden crear bloques de una manera jerárquica en donde un solo bloque (subsistema) pueda contener, dentro de sí, más de un bloque, de esta forma se puede ver un sistema desde un nivel superior y entrado en los bloques de puede ir descendiendo a través de los niveles para verlo con más detalle.

3.3.2. GUIDE

La GUI (también conocidas como interfaces gráficas de usuario o interfaces de usuario) permiten un control sencillo (con uso de ratón) de las aplicaciones de software (MATLAB), lo cual elimina la necesidad de aprender un lenguaje y escribir comandos a fin de ejecutar una aplicación.

La GUIDE (Graphical User Interface Development Enviroment) es un entorno de programación visual disponible en MATLAB que permite diseñar interfaces gráficas y ejecutar programas. Esta herramienta es muy útil cuando se tiene un programa MATLAB que necesita un ingreso continuo de datos o la interacción activa con el usuario. Con GUIDE es posible crear de forma sencilla ventanas y diálogos que contengan los componentes básicos, como son etiquetas, campos de textos, botones, contenedores, entre otros.

A la hora de diseñar o crear el GUIDE, debe ser abierto mediante la pantalla de trabajo MATLAB y posteriormente, según se inserten elementos en la hoja de trabajo del GUIDE, aparecerán en una hoja de trabajo de MATLAB para poder ser definido. Es decir, ambos interactúan entre ellos. Como se ha indicado, una vez que los controles están definidos (elementos que se van incluyendo en la pantalla de trabajo del GUIDE) se editan las funciones de llamada (Callback) de cada uno de ellos, escribiendo el código de MATLAB que se ejecutará cuando el control sea clicado.

GUIDE está diseñado para hacer menos tedioso el proceso de aplicación de la interfaz gráfica y obviamente para trabajar como herramienta de traza. Éste se encuentra disponible en cualquier momento que se está lidiando con los controles de MATLAB. El editor de propiedades por separado se puede concebir como una herramienta de trazado, y asistente de codificación. Cuando se fusiona con el panel de control, el editor de menú, y herramienta de alineación, resulta una combinación que brinda un inigualable control de los gráficos en MATLAB.

El beneficio que proporciona el uso de GUIs es evidente, ya que permiten al usuario ejecutar cómodamente el código desarrollado en MATLAB sin necesidad de cumplir la sintaxis funcional necesaria cuando se trabaja desde la línea de órdenes. A diferencia de la ejecución de funciones o scripts de MATLAB, la ejecución de GUIs no predetermina el flujo de ejecución del código. Es el usuario, a través de su interacción con el GUI, el que determina el orden en que se ejecutan las diferentes órdenes y funciones desarrolladas. Otra diferencia importante es que la ejecución no termina cuando finaliza la ejecución del script o función, sino que el GUI permanece abierto, permitiendo al usuario invocar la ejecución de ese u otro control.[20]

3.4. MODELO DE CALIBRACIÓN

La calibración de un modelo es la adaptación del modelo para ajustarlo a cierta información, en este caso a los datos que recojamos de la estación depuradora de aguas residuales.

Los modelos son una descripción matemática de una serie de procesos que ocurren en un espacio delimitado. Sin embargo, uno debe darse cuenta que el hecho de que un modelo se ajuste bien a los datos experimentales y que prediga bien el comportamiento del sistema estudiado, no significa que los mecanismos del modelo sean exactos al cien por cien (por ejemplo, si entre esos mecanismos tenemos los que influyen en los microorganismos, por ser seres vivos).

En tratamiento de aguas, los modelos se expresan a través de balances de masas que toman en cuenta la cinética de reacción de los procesos (procesos de transformación), la hidrodinámica (tipo de flujo y mezcla en el reactor) y el transporte de materia a través de los límites del sistema

(flujos de entrada y salida). Los procesos de transporte son unas características específicas a cada sistema: configuración del reactor, distribución del influente, mezcla, dispersión, recirculación, extracción de lodo… Los procesos de transformación, por el contrario, ocasionan cambios en la estructura y nivel de los componentes químicos con una velocidad que depende del ambiente local del proceso. Los procesos individuales que forman el modelo sin relacionados a través de ecuaciones de leyes de conservación de masas (balances), las cuales se deben resolver, para poder describir los cambios en el estado del sistema a través de las variables de estado (concentraciones de biomasa, oxígeno, DQO, nitrógeno…). La escritura de balances de masas de un modelo resulta en un sistema de ecuaciones diferenciales totales y/o parciales y de ecuaciones algebraicas. Su resolución necesita en general algún programa o software.

3.4.1. VARIABLES DE ESTADO DEL ASM1

Una de las partes más difíciles para la calibración del ASM1 es la caracterización de las fracciones del agua residual. El agua residual puede ser caracterizada mediante métodos físico-químicos o métodos biológicos, pero la mejor opción es una combinación de ambos. El método físico-químico se basa en el hecho de que la división de los diferentes componentes se puede realizar mediante una separación y los métodos biológicos se basan en los ratios o velocidades de degradación o crecimiento.

3.4.1.1. COMPONENTES DE LA DQO

Como se ha indicado anteriormente, la DQO es la suma de varios componentes:

$$DQO_{total}: S_I + S_S + X_I + X_S + (X_{BH} + X_{BA} + X_P)$$

En el afluente, tanto la X_{BH} como la X_{BA} son despreciables y se asume que X_P es cero.

- *Sustrato rápidamente biodegradable (S_S)*

Existen dos formas de conseguirlo, la primera mediante la determinación de la DBO_5 de una muestra filtrada en un filtro de 0,45 μm y la segunda, con la relación entre la DQO soluble y el sustrato inerte.

$$S_S = DQO_{sol} - S_I \quad o \quad S_S = DBO_{5sol}$$

En este proyecto, se usa la primera de las expresiones, por lo que se debe conocer la concentración de inertes soluble.

- *Materia orgánica soluble inerte (S_I)*

Teóricamente, la concentración de inertes en forma soluble se establece como la materia inerte que queda cuando se degrada la DQO soluble del efluente, por lo que lo estimaremos aproximadamente en 40 ppm.

- *Materia orgánica inerte en partícula (X_I)*

Esta fracción de DQO corresponde a la parte filtrada (en forma de partícula) cuando la DQO del efluente es degrada a tiempo infinito. Según bibliografía lo estimaremos en unos 5 ppm.

- *Sustrato lentamente biodegradable (X_S)*

Según la primera expresión determinada al principio del apartado, esta variable de estado se determina como:

$$X_S = DQO_t - S_S - X_I$$

3.4.1.2. COMPUESTOS DE NITRÓGENO

- *Nitrato y nitrito (S_{NO})*

Se miden directamente mediante la determinación del nitrato y el nitrito del agua residual.

- *Amonio (S_{NH})*

Se miden directamente mediante la determinación del nitrógeno amoniacal del agua residual.

- *Nitrógeno orgánico biodegradable soluble (S_{ND})*

Se determina mediante la relación del nitrógeno Kjeldahl soluble y el nitrógeno amoniacal. Según las características del agua residual de la EDAR de Estella, el nitrógeno Kjeldahl soluble a la entrada del reactor de lodos activado, ronda el 90-95 % del total.

$$S_{ND} = \text{Kjeldahl}_{\text{soluble}} - \text{Nitrógeno amoniacal } (S_{NH})$$

- *Nitrógeno orgánico biodegradable en partícula (X_{ND})*

Se determina mediante la siguiente relación.

$$X_{ND} = \text{Kjeldahl}_{\text{total}} - S_{ND}$$

3.4.2. BALANCES DE MATERIA EN EL REACTOR BIOLOGICO

Siendo esta la expresión general (S puede ser cualquier variable de estado) los balances de materia quedarías:

$$\frac{dX_{BH}}{dt} = \frac{Q}{V}X_{BH0} - \frac{Q}{V}X_{BH} + \rho_1 + \rho_2 - \rho_4$$

$$\frac{dX_{BA}}{dt} = \frac{Q}{V}X_{BA0} - \frac{Q}{V}X_{BA} + \rho_3 - \rho_5$$

$$\frac{dS_S}{dt} = \frac{Q}{V}S_{S0} - \frac{Q}{V}S_S + \rho_7 - (\rho_1 + \rho_2)$$

$$\frac{dX_S}{dt} = \frac{Q}{V}X_{S0} - \frac{Q}{V}X_S + (1 - f_P)(\rho_4 + \rho_5) - \rho_7$$

$$\frac{dX_P}{dt} = \frac{Q}{V}X_{P0} - \frac{Q}{V}X_P + (f_P)(\rho_4 + \rho_5)$$

$$\frac{dX_{ND}}{dt} = \frac{Q}{V}X_{ND0} - \frac{Q}{V}X_{ND} + (i_{XB} - i_{xP} f_P)(\rho_4 + \rho_5) - \rho_7$$

$$\frac{dS_{NH}}{dt} = \frac{Q}{V}S_{NH0} - \frac{Q}{V}S_{NH} - i_{XB}(\rho_1 + \rho_2) + \rho_6 - \left(i_{XB} + \frac{1}{Y_A}\right)\rho_3$$

$$\frac{dS_{NO}}{dt} = \frac{Q}{V}S_{NO0} - \frac{Q}{V}S_{NO} + \frac{1}{Y_A}\rho_3 - \left(\frac{1 - Y_H}{2.86 Y_H}\right)\rho_2$$

$$\frac{dS_O}{dt} = \frac{Q}{V}S_{O0} - \frac{Q}{V}S_O + \left(\frac{1 - Y_H}{Y_H}\right)\rho_1 - \left(\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}\right)\rho_3$$

Todas estas expresiones han sido definidas en SIMULINK en el bloque llamado “Balances reactor” y después de cada integración se ha colocado un saturador para que la concentración resultante no sobrepase el 0 y se convierta en negativo. El caudal de entrada y salida del reactor es la misma, puesto que lo que entra debe salir. El volumen del reactor es de 300 m^3.

3.4.3. BALANCES EN EL DECANTADOR

El objetivo principal de este proceso es la separación de las partículas, puesto que son compuestos de mayor tamaño y peso. En conclusión, las variables en forma de soluto se mantendrán constantes hasta el efluente y solo variará las concentraciones correspondientes a las variables en forma de partícula (X). Se parte del modelo de Vesilind [9] para describir el proceso de decantación que se produce después del reactor biológico.

Para su cálculo, se realizarán varios experimentos en el laboratorio con muestras extraídas de la planta real, que servirán para describir el proceso de sedimentación.

Mediante los balances en el reactor se puede obtener la concentración de los sólidos en suspensión (la suma de todos los elementos partículados). Y para la obtención de la velocidad de sedimentación V_S, experimentalmente se obtiene mediante:

1. Se colocan los lodos con cierta concentración conocida de sólidos suspendidos en una probeta de 1000 ml.

2. Se mezcla a fin de homogeneizar la muestra.

3. Detener el mezclado y comenzar a medir la sedimentación (clarificado y lodo) desde el tiempo t=0, hasta que ya no se observe ninguna variación.

4. Repetir todo lo anterior para diferentes concentraciones de sólidos en suspensión.

5. Para la obtener la velocidad de sedimentación zonal (Vs) de cada concentración de sólidos suspendidos, se elabora una gráfica para cada concentración, se evalúan sus pendientes para obtener finalmente la Vs.

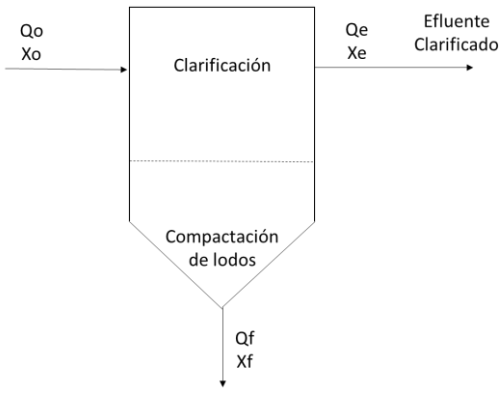


Figura 11: Sedimentador. (Fuente propia)

Como se observa en la figura 11, además de la separación que sucede dentro del decantador que se describirá mediante el modelo de Vesilind, también se tiene que tener en cuenta el balance de masa. Es por ello, que se tendrán en cuenta tanto el caudal de entrada como los dos de salida y la concentración de partículas (que se obtendrá con la suma de las variables en forma de partícula).

A continuación se presentan las ecuaciones que sirven para determinar la separación de las partículas en función de la velocidad de sedimentación. Comenzando por la siguiente relación de diseño que nos indica que el área de un clarificador (decantador) debe ser igual a la división entre el caudal del efluente y la velocidad de sedimentación.

$$A_c = Q_e / V_s$$

Tal y como se observa en el dibujo, el caudal de entrada Qo es la suma de los caudales de salida Q_e y Q_f.

$$Q_o = Q_e + Q_f$$

Finalmente, del balance completo del sistema tenemos que la concentración de las partículas que se decanta se obtiene de la siguiente manera. Además, hay que tener en cuenta que en el efluente la concentración de partículas no debe superar los 25 mg/l (condición que se pondrá en el programa).

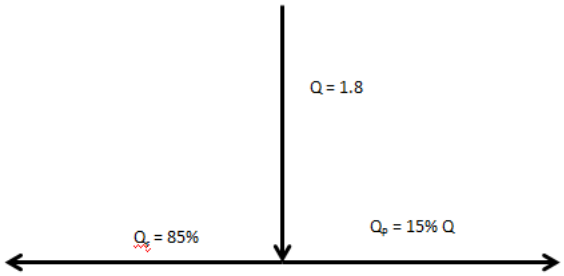
$$X_f = (Q_o X_o - Q_e X_e) / Q_f$$

3.4.4. LA PURGA

Para evitar el envejecimiento de los lodos activos o el incremento de las partículas inertes, el sistema dispone de purga. Para ello se define el caudal, que en las plantas depuradoras suele ser constante puesto que no se suele diseñar una bomba con variador. Y en cuanto a la concentración, es la misma que la de recirculación.

El caudal de purga va a ser un valor constante, es decir, que esta bomba trabajaría solo en encendido o apagado. En la simulación se va a suponer que todo el rato está encendida, por lo que su valor se mantendrá constante a lo largo de toda la simulación. En cuanto a las variables (DQO, DBO, sólidos…que están definidas por los parámetros de X y S y los diversos subíndices) es igual en las tres ramas, porque estamos hablando de concentraciones, y lo único que se hace es la división de una rama en dos.

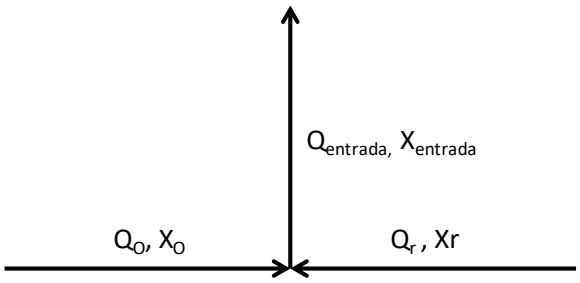
Mediante esta purga, lo que se consigue es que si en el decantador se logra la separación de los sólidos en suspensión (variables X) para que el efluente sea agua más limpia, este incremento de concentración no vaya incrementándose en cada ciclo, si no que una parte será eliminada, controlando así los sólidos en el sistema.



También se supone que toda la biomasa se queda en el reactor biológico por lo que tanto X_{BH} como X_{BA} no llegan al decantador ni deben ser purgado.

La concentración en todas las líneas es la misma. De la línea de recirculación, se suma al de la entrada y entra en el sistema.

Una vez estimada la recirculación, para la "nueva" entrada al reactor biológico, hay que realizar un balance que quedaría de la siguiente forma:



$$Q_{entrada}.X_{entrada} = Q_{o}.X_{o} + Q_{r}.X_{r}$$

Por lo que:

$$X_{entrada} = \frac{Q_O X_O + Q_r X_r}{(Q_0 + Q_r)}$$

Esto se realiza para todas las variables en forma de partícula (X).

3.5. INCERTIDUMBRE DEL ENSAYO

La incertidumbre del resultado de una medida refleja la falta de conocimiento sobre el verdadero valor del mesurando. El resultado de medir tal mensurando tras aplicar las correcciones debidas a efectos sistemáticos es todavía una estimación debido a la incertidumbre proveniente de los efectos aleatorios y a la falta de conocimiento completo de las correcciones aplicadas por los efectos sistemáticos.[18]

Existen varias formas de expresar la incertidumbre asociada a una medida, como por ejemplo el error absoluto y el error relativo. [19].

- Error absoluto: el error absoluto de una medida es la diferencia entre el valor real de la medida y el valor que se ha obtenido en la medición.

- Error relativo: es el cociente entre el error absoluto y el valor que se considera como exacto (la media).

4. MÉTODO

Como marco general, la estructura de trabajo a seguir sería, primero la toma de datos en laboratorio del sistema real, tanto a la entrada del sistema como a la salida. Estos datos se deben guardar en una base de datos que posteriormente serán cargados en el programa de simulación (como datos de entrada). [6]

Se ha hecho un estudio en cuanto a los términos matemáticos que describen los diferentes procesos químicos y físicos que ocurren en una planta depura de aguas residuales. Con ello se ha generado un modelo matemático. Mediante el software MATLAB se programa un modelo que primero, carga los datos iniciales, realiza las ecuaciones matemáticas y posteriormente genera unos datos de salida que también se gestionará en una base de datos.

Finalmente, se hace una comparativa entre los datos de salida tanto de laboratorio como los obtenidos en simulación. Si se observa que existe una diferencia entre ambos resultados, se procede a ajustar los parámetros del modelo matemático. En cada cambio (ajuste de parámetros) de los datos de salida obtenidos, se graficarán para observar visualmente qué valor sería el que mejor se ajuste a los valores reales.

Otra forma de observar la diferencia entre los datos reales y los obtenidos en simulación sería el cálculo del error. Existen varios métodos para el cálculo del error, pero en este proyecto se propone la observación del error absoluto acumulativo.

A continuación se observa en la figura 12, un esquema que resume el método a seguir:

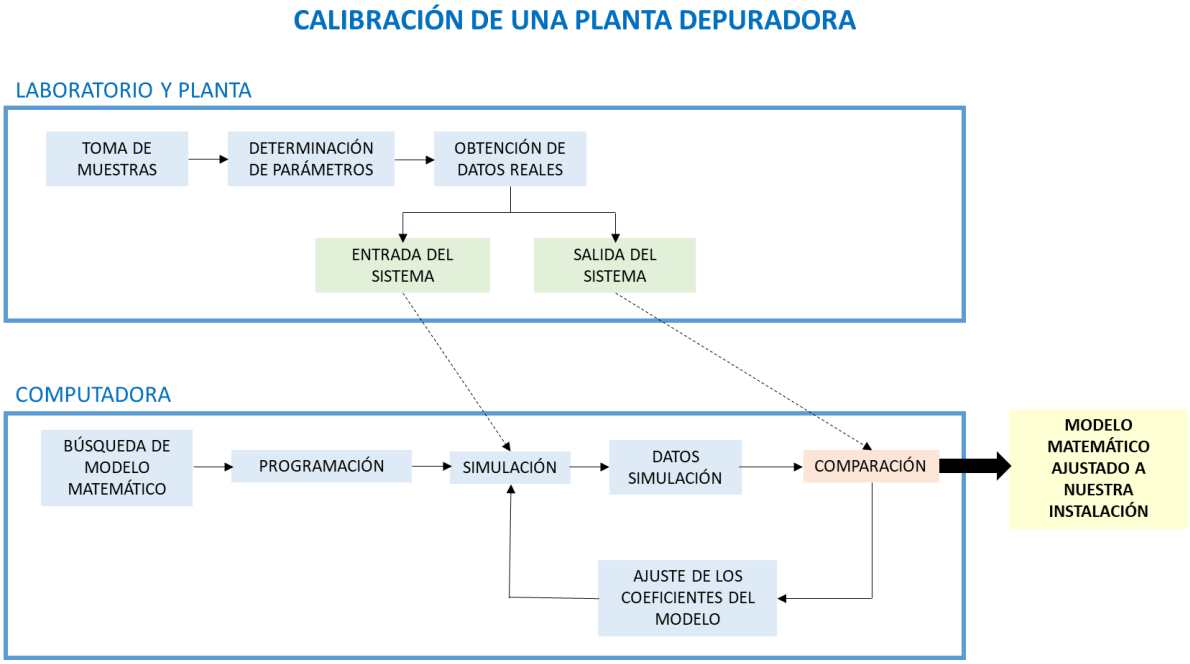


Figura 12. Esquema de trabajo

4.1. LA TOMA DE DATOS

Se ha programado un periodo de toma y registro de muestras de la planta depuradora de aguas residuales. Para ello durante una semana, se han tomado muestras tanto a la entrada del proceso como a la salida (en el efluente) cada 15 minutos a lo largo de 8 horas (horario de trabajo "in situ") y cada se han colocado dos tomamuestras (figura 13) para recoger muestra cada hora el resto del tiempo.



Figura 13. Tomamuestras automático.

Una vez recogidas las muestras se han llevado al laboratorio situado en el edificio de control y se ha procedido a determinar los sólidos en suspensión, la DQO total y soluble (filtrada) , la DBO_5 total y soluble, el nitrato, el nitrógeno amoniacal y el nitrógeno Kjeldahl. Las técnicas utilizadas en el laboratorio para la determinación de estos componentes han sido:

- DQO (total y soluble) mediante la digestión en sistema cerrado y posterior valoración que se describe en el Standard Method for the examination of Water and Waste Water 22nd Edition. (5220 C. Closed Reflux, Titrimetric Method)

- DBO_5 (total y soluble) mediante un método respírometrico basado en el Standard Method for the examination of Water and Waste Water 22nd Edition. (5210 D. Respirometric Method)

- Nitrógeno amoniacal mediante la valoración con ácido que se describe en el Standard Method for the examination of Water and Waste Water 22nd Edition. (4500 NH_3C Tritimetric Method)

- Nitrógeno Kjeldahl mediante el procedimiento de análisis para aguas residuales basado en el método de mineralización con Selenio descrito en el Standard Method for the examination of Water and Waste Water 22nd Edition. (4500 N_{org} B)

- Nitrato mediante cromatografía iónica.

Las muestras una vez recogidas y codificadas, se llevan al laboratorio para ser analizadas. El análisis de todas las muestras tomadas, ha llevado a un trabajo completo de 3 semanas en el laboratorio debido a la cantidad de muestras que se han tratado.

Por otro lado, otra variable de entrada es el caudal que va variando a lo largo del tiempo. Este dato de entrada se consigue mediante el caudalímetro situado en la planta depuradora. Los datos que se obtienen del caudalímetro se pueden visualizar en el SCADA pero para recopilarlos, la empresa usa el programa "query".

Tanto el SCADA como la gestión de datos mediante el query se realiza en máquina virtual.

4.2. EL PROGRAMA

El programa utilizado para la simulación ha sido SIMULINK. Para comenzar con su desarrollo, primero se ha pensado en la estructura general del programa y posteriormente se ha ido trabajando etapa tras etapa.

La estructura general sería: la introducción de los datos con los que comenzará la simulación y al ser un sistema dinámico con los que trabajará continuamente; la transformación de esos datos a la variables de estado porque serán las variables con las que se trabajará en los modelos; el reactor biológico de lodos activados; el decantador donde se definirán el efluente, la recirculación y la purga; la transformación de datos nuevamente a los parámetros medibles y finalmente; la salida de datos para poder ser visualizados y comparados con los recogidos en la toma de datos de la planta real.

4.2.1. INTRODUCCIÓN DE DATOS

Todos los datos de laboratorio y de caudal se registran en una hoja Excel y se guarda en el mismo entorno donde guardaremos nuestro programa de SIMULINK.

En una hoja de introducimos el bloque "Signal builder". Al abrir el bloque debemos cargar la Excel con los datos. Al cargar los datos quedan de la siguiente manera (figura 14):

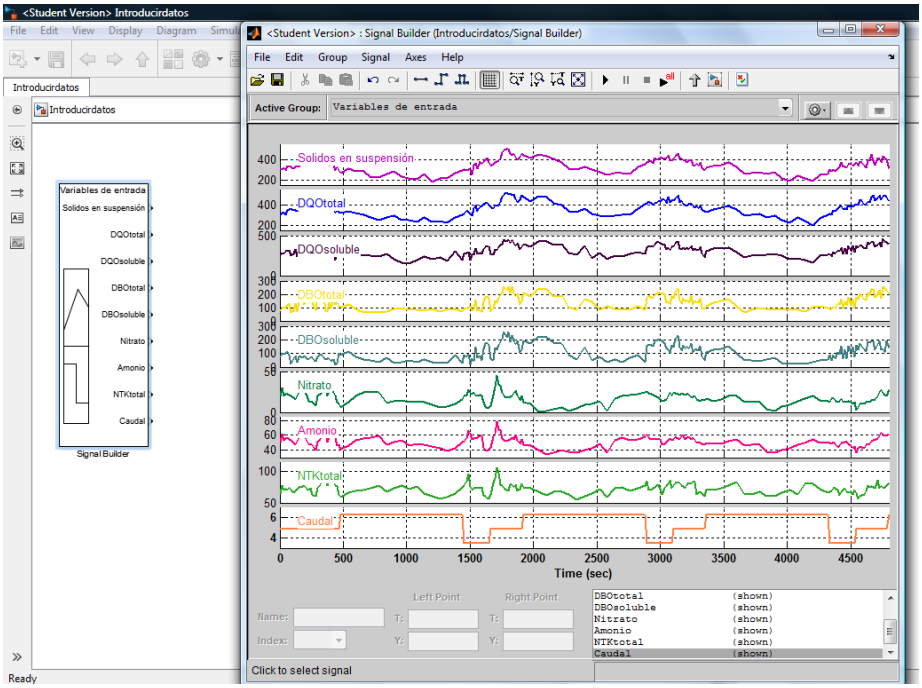


Figura 14. Datos importados de la Excel a Simulink.

En el caso de querer modificar los datos, se cambiaría la Excel y se tendrían que volver a importar.

Estos datos de entrada serán iguales para todas las simulaciones puesto que son los datos que hacen que el programa generado arranque, es decir, el valor inicial de todos los parámetros.

4.2.2. TRANSFORMACIÓN DE DATOS

A continuación se deben adecuar estos datos a los de variables de estado tal como se ha descrito en el apartado (3.4.1.). Se crea un subgrupo y dentro de él se describen las relaciones anteriormente mencionadas.

Mediante este transformado de datos iniciales (Figura 15), ya se puede trabajar con las ecuaciones físicas, químicas y biológicas que suceden en el sistema.

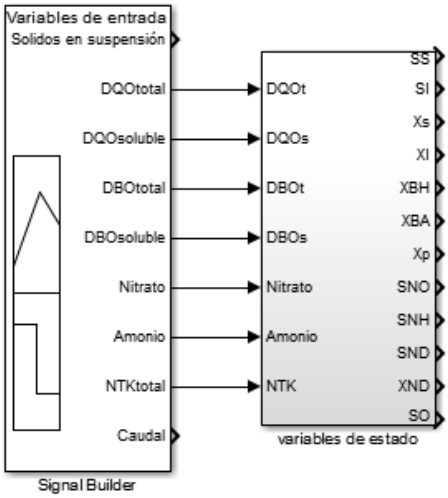


Figura 15. Entrada de datos y conversión a variables de estado

4.2.3. REACTOR BIOLÓGICO DE LODOS ACTIVADOS

El siguiente paso es crear un subgrupo para definir todas las ecuaciones que definen el modelo del reactor biológico de lodos activados. Por una parte serán los modelos biológicos pertenecientes la estructura del ASM1 y por otro el balance de masa.

Primero creamos un sub-bloque donde desarrollaremos los balances correspondientes al ASM1. Para este bloque necesitamos alimentarlo tanto de las variables de estado de entrada, el caudal de entrada, el volumen del reactor, los parámetros estequiométricos y de los parámetros cinéticos.

En la parte inferior izquierda de la figura 16 se observan todos los parámetros cinéticos y estequiométricos que entrarán en el sistema y que serán objeto de ajuste. Es decir, para arrancar la simulación necesitamos por un lado los datos de entrada a la simulación (los datos de entrada obtenidos en el laboratorio) y los valores iniciales de los parámetros de los modelos matemáticos (ASM1) que se usarán los valores bibliográficos (tabla 2). Son 19 parámetros que se deben ir ajustando.

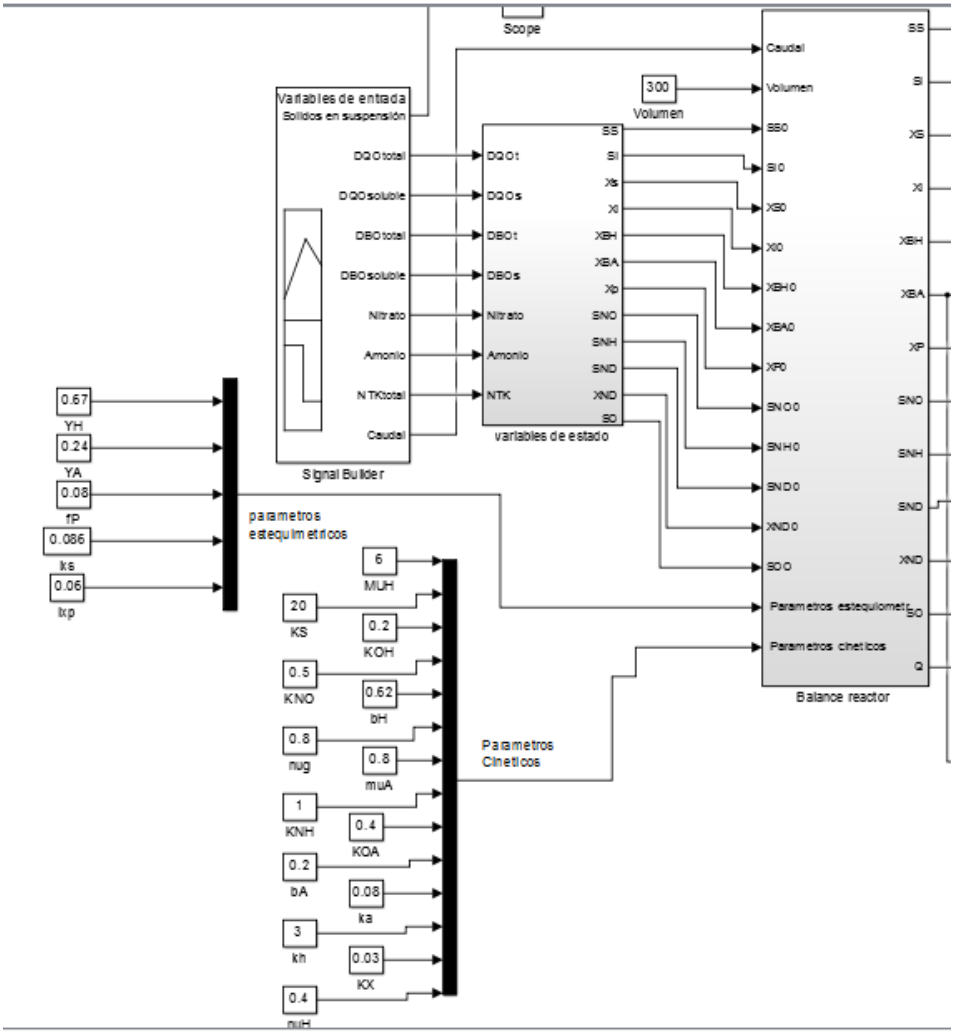


Figura 16. Bloques principales de Simulink hasta el reactor biológico.

Dentro de este bloque llamado “balance reactor” están definidos todas las ecuaciones diferenciales de la matriz de Petersen correspondientes al modelo ASM1. A modo de seguridad, en cada integración, se ha puesto un bloque de saturación para no pasar el 0 puesto que las concentraciones no pueden ser negativas.

4.2.4. DECANTADOR, RECIRCULACIÓN Y PURGA

En este paso, se define el balance del decantador (figura 18), donde las partículas se sedimentan haciendo que el efluente tenga menor concentración de partículas. A continuación se muestra el bloque correspondiente con sus entradas y salidas.

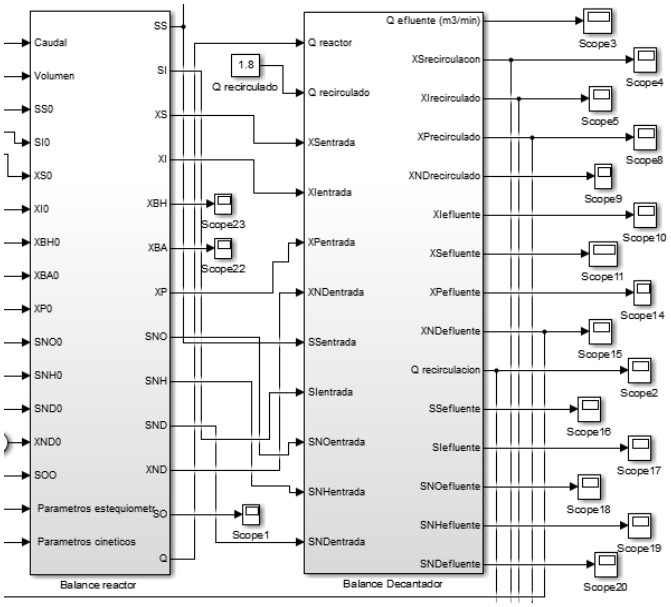


Figura 17. Bloque de balance del decantador

Para el decantador se ha optado por usar un modelo matemático y ajustarlo a nuestro sistema. Para ello se realizaron varios ensayos en laboratorio de sedimentación a distintas concentraciones de sólidos en suspensión. Con ello se logró una relación entre los sólidos en suspensión totales y la velocidad de decantación (modelo de Vesilind, véase apartado 1.2.).

Esta etapa se puede realizar en el laboratorio, para ello se toman muestras de agua residual procedentes del decantador y posteriormente se han continuado las etapas descritas en el apartado 3.4.3.

Una vez realizado los experimentos en el laboratorio, se obtuvieron los valores de velocidad mediante la pendiente de sedimentación como se observa en la figura 18. Es decir, se dibujó la evolución de la altura del fango frente al tiempo y la pendiente obtenida será la Vs correspondiente a la concentración de sólidos tomado.

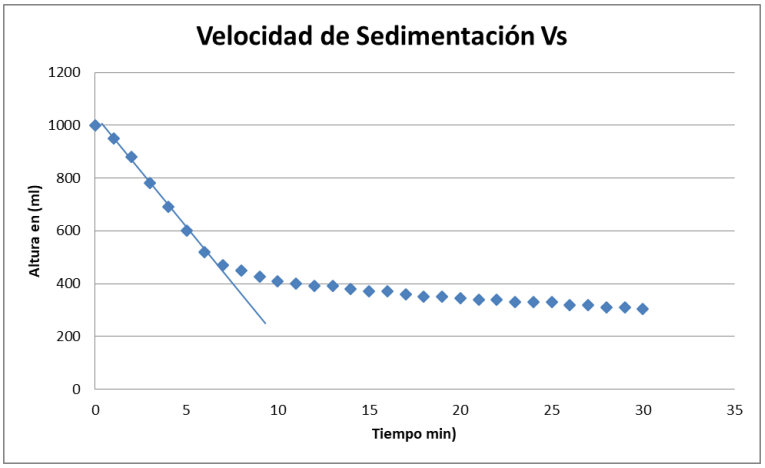


Figura 18. Velocidad de sedimentación para una concentración de sólidos (Fuente propia),

Se repite el mismo procedimiento para distintas concentraciones de sólidos en suspensión para poder lograr una relación de concentración de sólidos y velocidad de sedimentación (Figura 19).

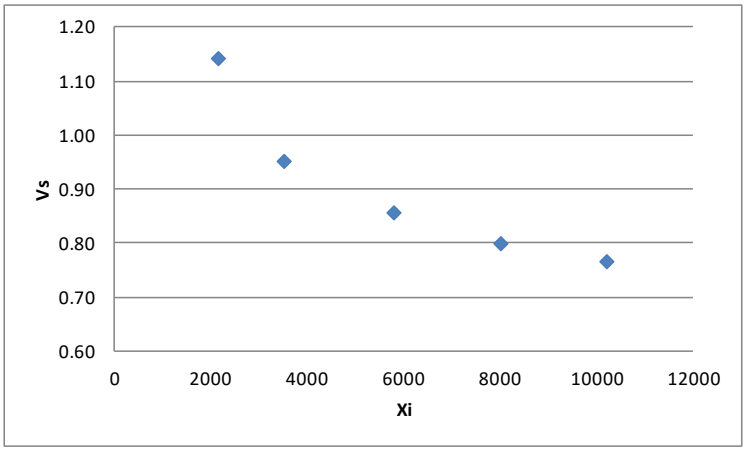


Figura 19. Relación de sólidos en suspensión vs velocidad de sedimentación. (Fuente propia)

Linealizando esta relación (Figura 20) se obtendrán los coeficientes de V_o y K_v.

V_o = 1,31 m/s y K_v = 0.6

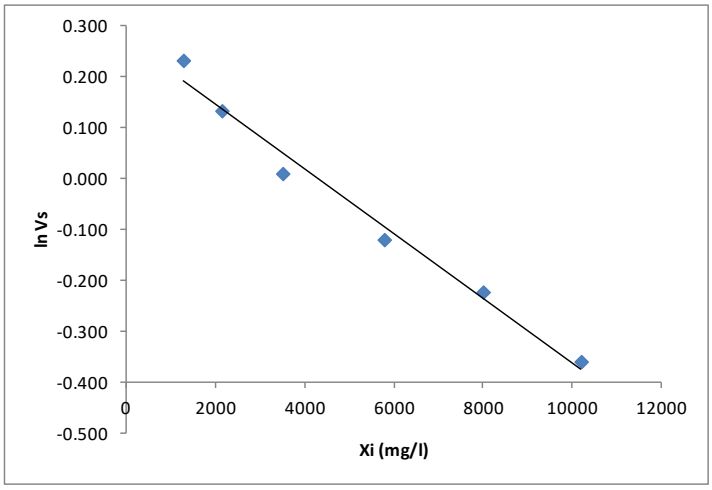


Figura 20. Linealización. (Fuente propia)

Una vez obtenido los valores de los coeficientes en el laboratorio, se definirán en el programa para usar el modelo de Vesilind.

En la purga, lo único que se hace es la separación de los caudales que van hacia purga y hacia la recirculación, que debido a las capacidades de las bombas instaladas en la depuradora, corresponderían aproximadamente a un 15% de la capacidad total de recirculación a purga, y el 85% a recirculación. En cuanto a las concentraciones, son iguales en las 2 ramas.

Como se ha expuesto en el apartado 3.4.4., la bomba de purga tiene un caudal constante, por lo que se ha determinado un valor aproximado del 15% del caudal de entrada. En el caso de la concentración, como es una separación de tuberías, se mantiene constante.

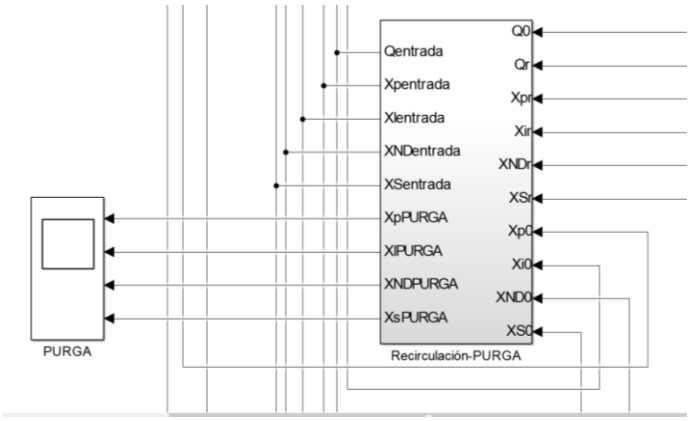


Figura 21. Recirculación y purga

Después de la recirculación hace falta sumarle al caudal de entrada (donde se toman los datos y es salida de decantación intermedia) la recirculación. Además de realizar todos los balances correspondientes a las variables en forma de partícula.

En el bloque de la figura 21 se representa lo descrito anteriormente, la recirculación y purga. Para ello, en el bloque se definen dos tipos de balances, uno el de la purga y el otro la entrada al reactor. Para definir la purga, se necesitan los datos de recirculación provenientes del decantador (Xir). Posteriormente, se realiza una separación donde una parte de las partículas irán fuera del sistema conocido como purga (XiPURGA) y otra irán a la entrada del sistema. Esta parte junto con los datos de entrada (XiO), serán los que darán comienzo al balance en el reactor (Xientrada).

En la figura 22 se puede observar toda la programación del proceso.

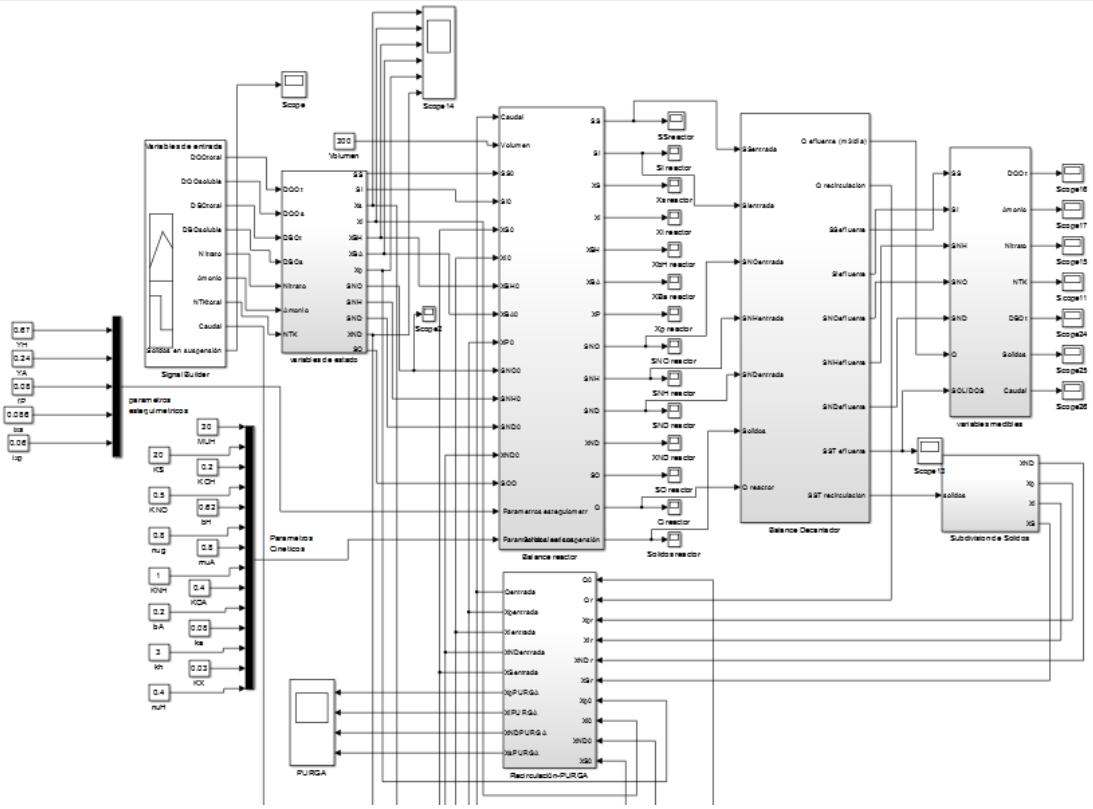


Figura 22. Bloque de recirculación con sus entradas y salidas al bloque del balance del reactor. (Pantallazo del programa generado en SIMULINK).

4.2.5. TRANSFORMACIÓN DE DATOS

Los datos tomados en el laboratorio se deben comparar con los obtenidos en la simulación. Para ello, como primer paso, los datos de variables de estado se deben transformar en las variables medibles.

Se realizará la misma pauta seguida que con los datos de entrada, la DQO total es la suma de varias variables, la S_S representa la materia orgánica biodegradable DBO_5, el nitrógeno amoniacal es el S_{NH}, el nitrato es el S_{NO}, el Kjeldahl es la suma de todos los compuestos nitrogenados a excepción del nitrato, y los sólidos en suspensión representa la suma de todos los compuestos en forma de partícula (X).

4.2.6. SALIDA DE DATOS

Para poder registrar los datos obtenidos en la simulación, lo que se ha hecho es definir en es SCOPE final donde se observa el resultado, es indicarle que guarde los datos en el WORKSPACE de Matlab (Figura 23).

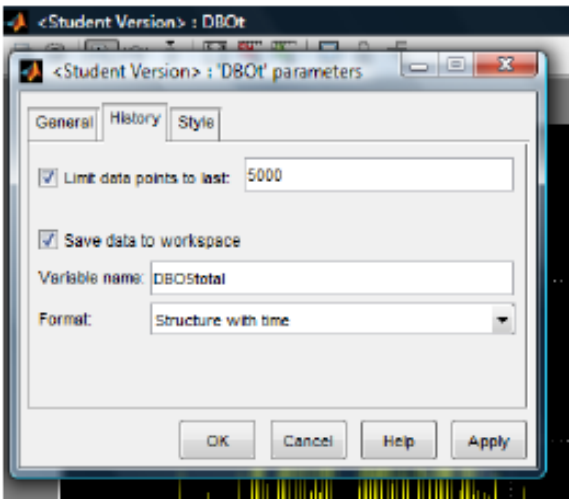


Figura 23. Envío de datos a Workspace definido en el bloque "SCOPE".

Todos los datos se van a guardar en el Workspace en forma de estructura con tiempo. Así cada valor de tiempo tiene asignado el valor de la variable, guardado en forma de columna (es decir, 2 columnas).

A continuación, para poder tratar los datos y visualizarlos, se trabajará en Excel. Para ello se ha generado en Matlab un programa que recoge los datos anteriormente enviados al Workspace y los ordena en una Excel en el orden que se le defina (Figura 24).

DatosSalida.m

```
data(:,1)=SSTefluente.time;
data(:,2)=SSTefluente.signals.values;
data(:,3)=DQOtefluente.signals.values;
data(:,4)=DBOtefluente.signals.values;
data(:,5)=Qefluente.signals.values;
data(:,6)=Amonioefluente.signals.values;
data(:,7)=Nitratoefluente.signals.values;
data(:,8)=NTKefluente.signals.values;
xlswrite('datosSimulacion.xlsx',data,1);
```

Figura 24. Pantallazo de Matlab al programa DatosSalida.m

Con objeto de mejorar la accesibilidad a la introducción de cambios en el programa y la visualización de los datos mediante gráfica, se ha creado una interfaz con el programa GUIDE de MATLAB como se puede observar en la figura 25.

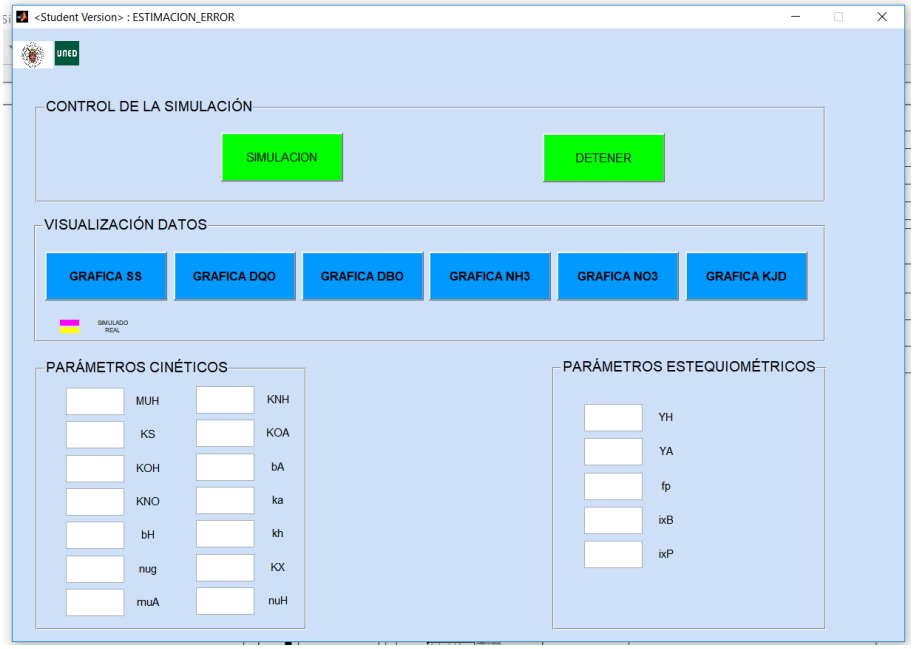


Figura 25. Pantalla de trabajo GUIDE.

Mediante esta pantalla, en la parte inferior, se pueden introducir los distintos valores de los parámetros cinéticos y estequiométricos para poder ir ajustando el modelo matemático. Una vez introducido los valores, se comienza con la simulación mediante el botón SIMULACIÓN, y mientras está arrancado se pueden ver los datos de las distintas variables en tiempo real pulsando los botones de GRAFICA. Como se acaba de indicar, se visualizan en tiempo real los datos de SS, DQO, DBO, Amonio, Nitrato y Kjeldahl tanto de simulación como los datos reales. Existe un botón denominado DETENER para parar la simulación.

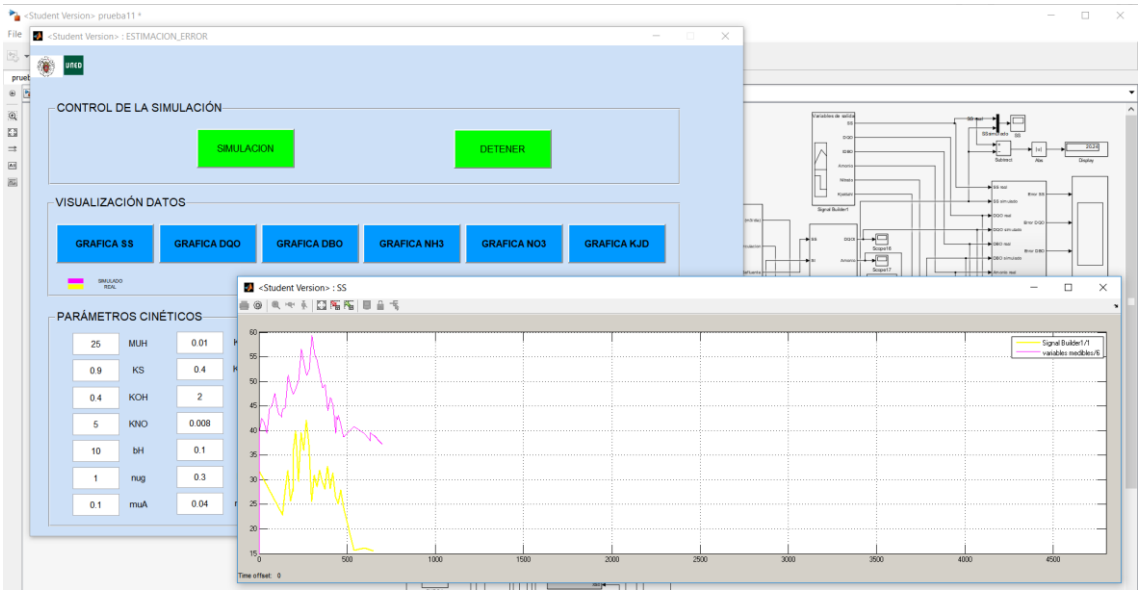


Figura 26. Ejemplo de visualización de datos simulados y reales de la variable SS en tiempo real.

4.3. AJUSTE DEL MODELO

Antes de comenzar con el ajuste del modelo, se ha realizado una simulación usando los valores bibliográficos de la tabla 2 para los parámetros cinéticos y estequiométricos del modelo matemático. A continuación se presentan los valores obtenidos en la simulación en color azul y los datos reales medidos en laboratorio en color granate (Figuras 27-32). Así, se podrá comprobar la diferencia que existe entre los valores reales y los simulados.

Los parámetros que se van a comparar y con los que se ha trabajado son los sólidos en suspensión, la DQO total, la DBO_5 total, el nitrógeno total, el nitrógeno amoniacal (o amonio) y el nitrógeno Kjeldahl.

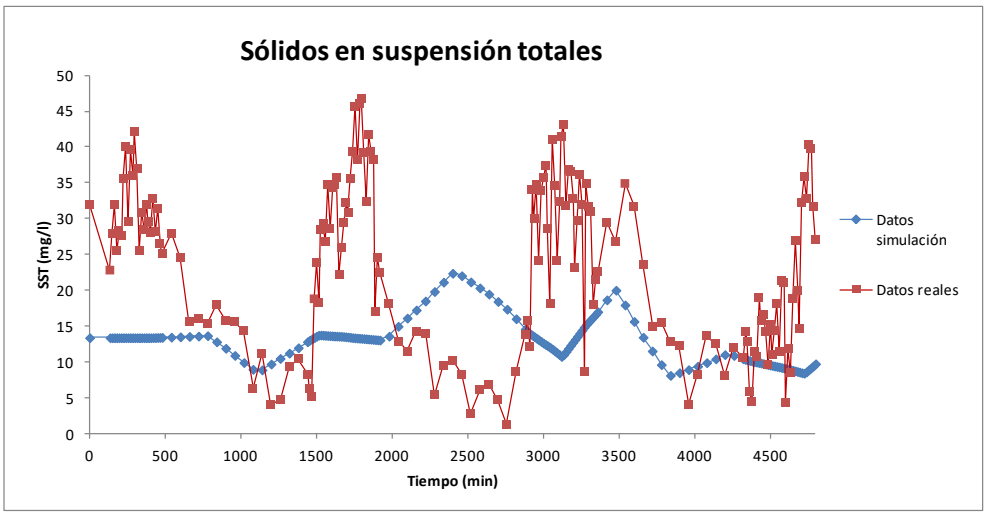


Figura 27. Datos de simulación y datos reales para los sólidos en suspensión total

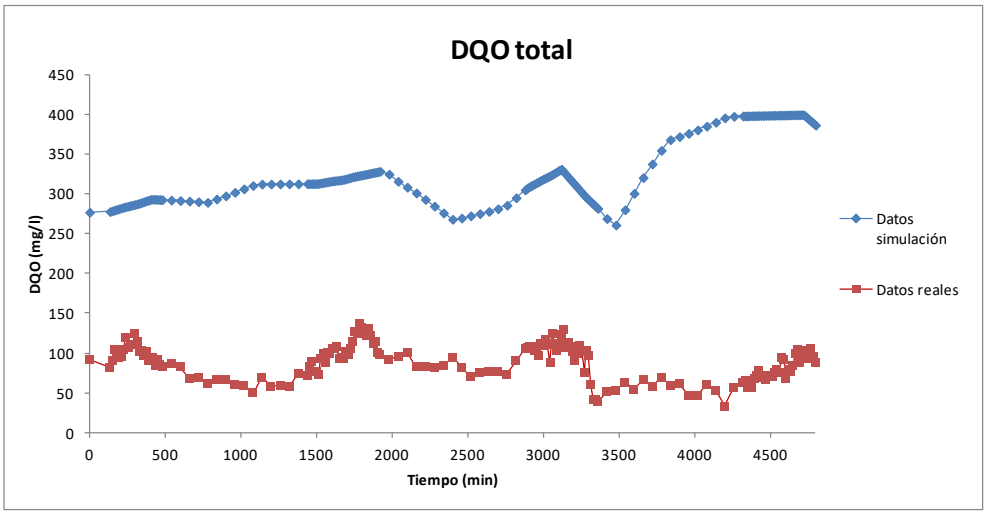


Figura 28. Datos de simulación y datos reales para la DQO total

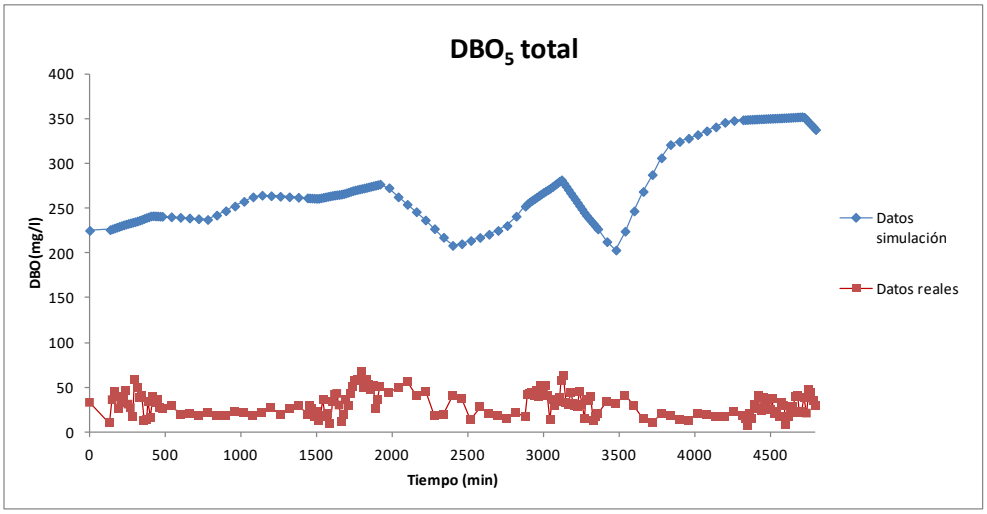


Figura 29. Datos de simulación y datos reales para la DBO5 total

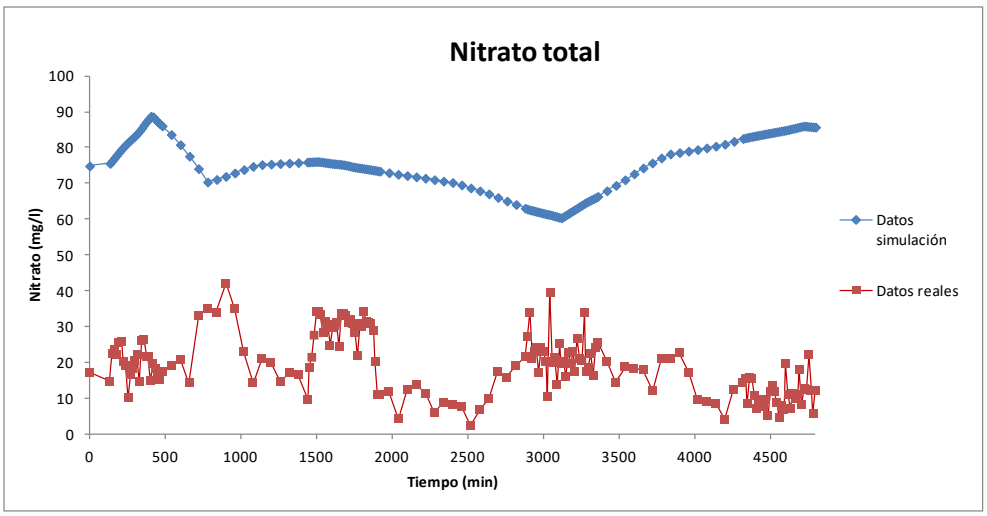


Figura 30. Datos de simulación y datos reales para el nitrato

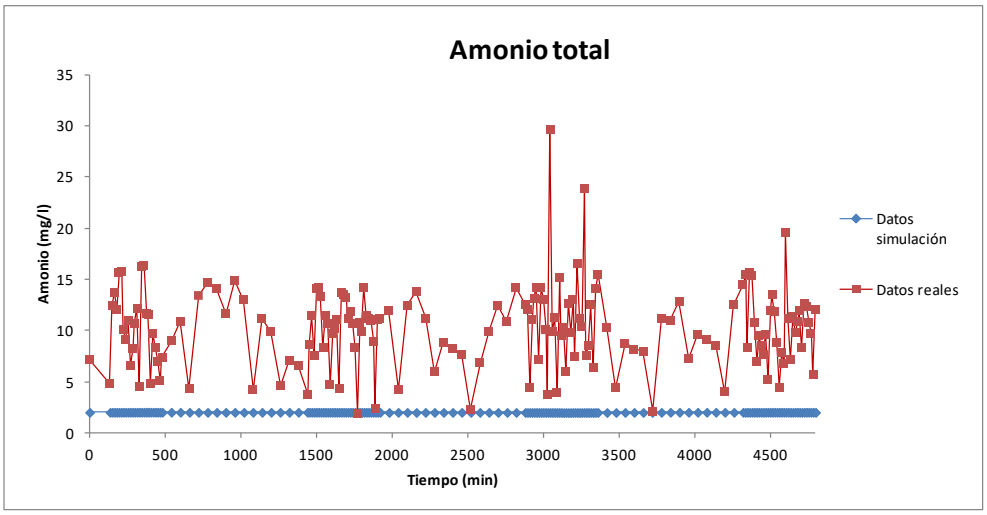


Figura 31. Datos de simulación y datos reales para el amonio

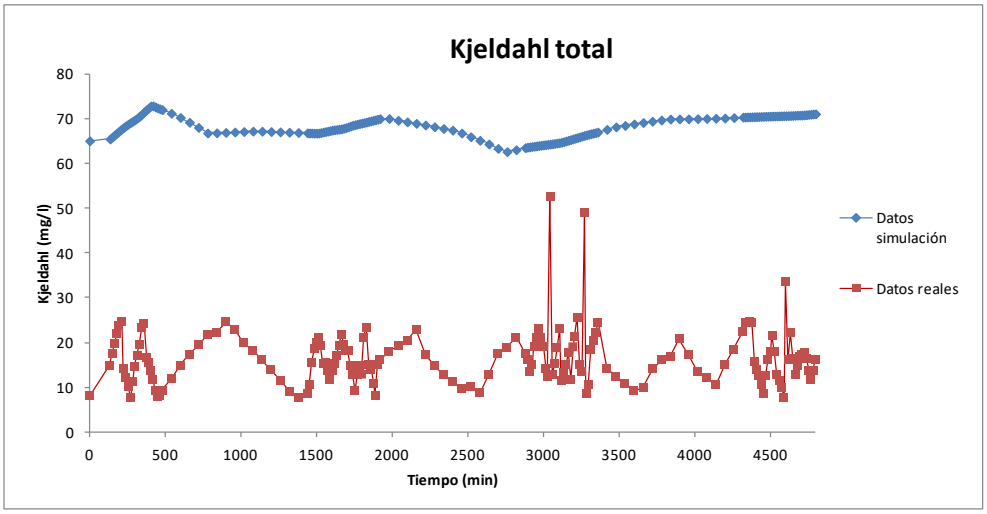


Figura 32. Datos de simulación y datos reales para el Kjeldahl

Como se puede observar, los datos de la simulación no encajan con los datos reales de la planta, por lo que el siguiente paso es ir cambiando los valores de los parámetros cinéticos y estequiométricos hasta que los datos de simulación encajen con los reales. De esta forma tendríamos el modelo para nuestra planta.

Este paso se va a realizar a base de prueba y error, pero siempre sabiendo cómo afecta cada parámetro que se cambia y qué significa dicho cambio, esto sería como un estudio de sensibilización, es decir, teniendo en cuenta la influencia de cada parámetro y variable se determina cuál de los cambios sería el más adecuado.

Lo primero de todo, se comienza por tratar los parámetros cinéticos y para ello, nos fijamos en uno de las variables (ejemplo la DBO_5) y observando cuál sería el o los parámetros cinéticos que le afectan se irán variando hasta lograr un valor óptimo. En la figura 33 se observa cómo ha quedado la variable DBO_5 una vez elegido el valor que mejor se ajusta para el µH, que este caso ha salido el valor 30.

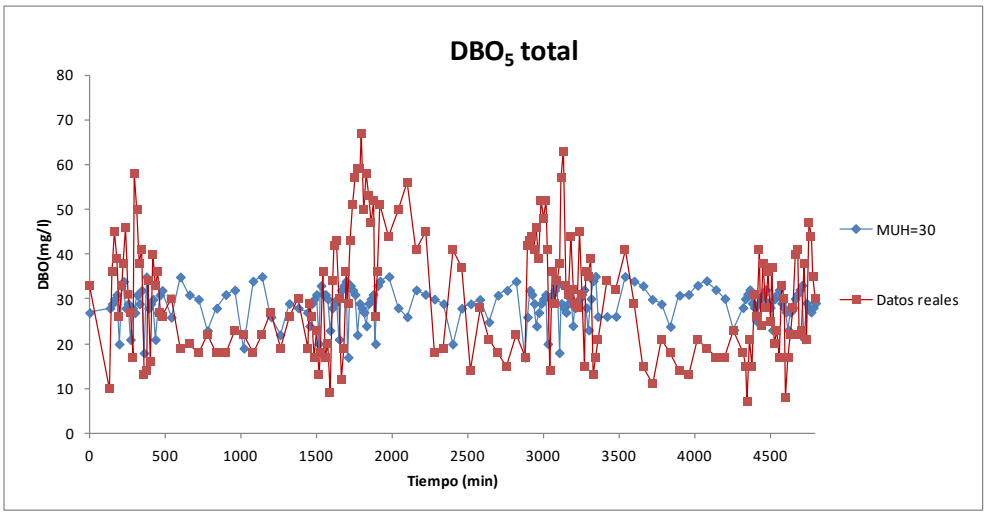


Figura 33. Datos de simulación logrados para µH =30 (valor más cercano logrado a los datos reales).

Al ser un sistema interconectado en su totalidad, la modificación de este parámetro cinético ha conllevado a cambiar los valores de salida del resto de parámetros, quedando de la siguiente manera (Figura 34):

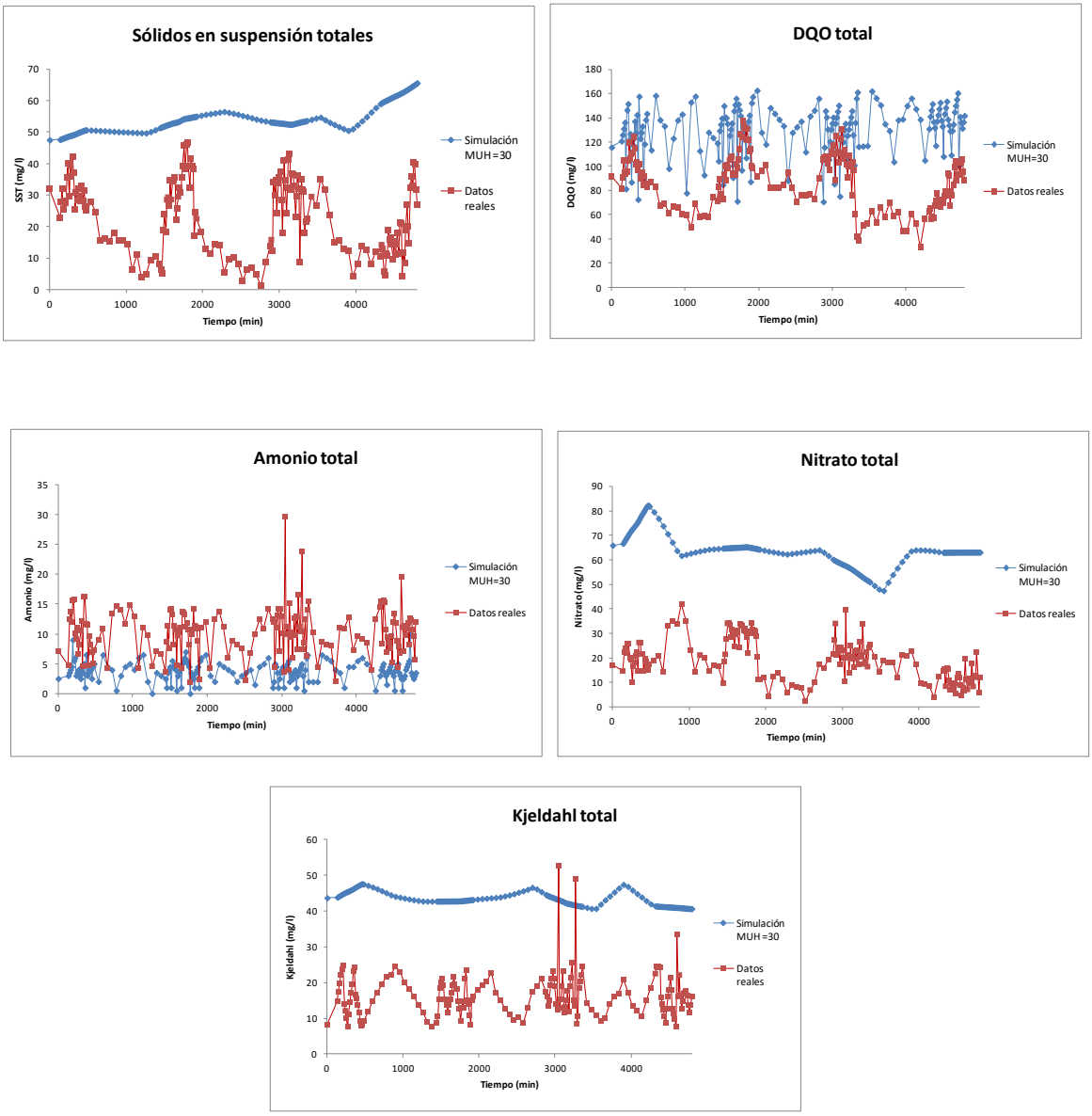


Figura 34. Datos de simulación logrados para μH =30

Este cambio de parámetro ha mejorado considerablemente el resto de parámetros aunque todavía hay que afinar muchísimo más.

Para ello se va analizando uno a uno la influencia de cada parámetro (tabla 2) sobre los resultados de la simulación. Se comienza por el valor bibliográfico y se prueban valores superiores e inferiores a dicho valor. Posteriormente se grafican los resultados y se observa el acercamiento o el alejamiento respecto a los datos reales y se determina cuál de los valores podría ser el más adecuado.

Este proceso requiere no solo de la observación de los datos sino también su interpretación, es decir, cada parámetro tiene un significado y por lo tanto los valores que puede abarcar no son infinitos, puesto que deben tener un significado físico lógico.

Además, otro aspecto a tener en cuenta es la relación de los parámetros y las variables de estado. Por ello se debe tener en cuenta las variables que representan la materia orgánica como la DO y la DBO_5 tiene una relación muy fuerte al igual que las variables nitrogenadas entre ellos. Finalmente, la relación entre los sólidos y el resto de variables es directa.

Pero si aparte de la relación o correlación que existe entre las variables de estudio (tabla 2) resumimos la relación que existe entre las variables y los parámetros, el resultado se observa en la figura 35:

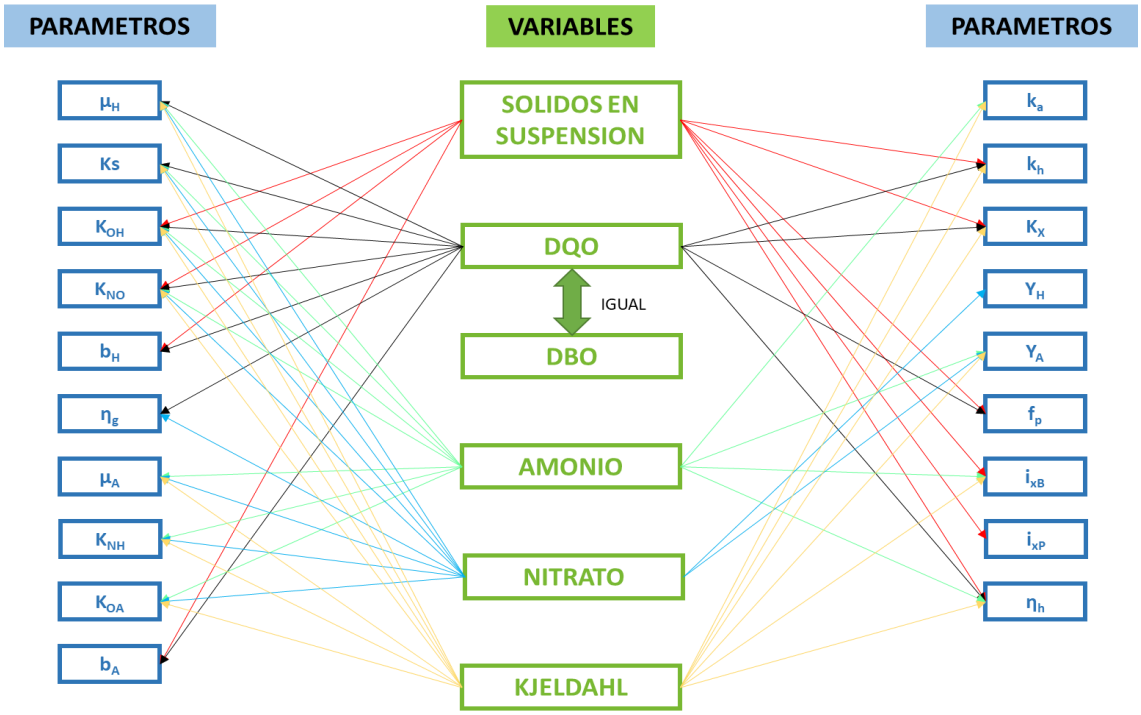


Figura 35. Relación de las variables con los parámetros.

Otra forma para ajustar el modelo, se ha realizado mediante la estimación del error mínimo que se describe en el siguiente apartado.

4.4. ESTIMACIÓN DEL ERROR

Para la estimación del error tanto absoluto como relativo, al programa se le ha añadido un subgrupo denominado error como se muestra en la Figura 36.

Para poder realizar la estimación se deben incluir en el programa los datos de salida medidos en el laboratorio, siguiendo el mismo procedimiento que con los datos de laboratorio de inicio.

Se han obtenido tanto el valor del error absoluto acumulativo y el valor de error relativo.

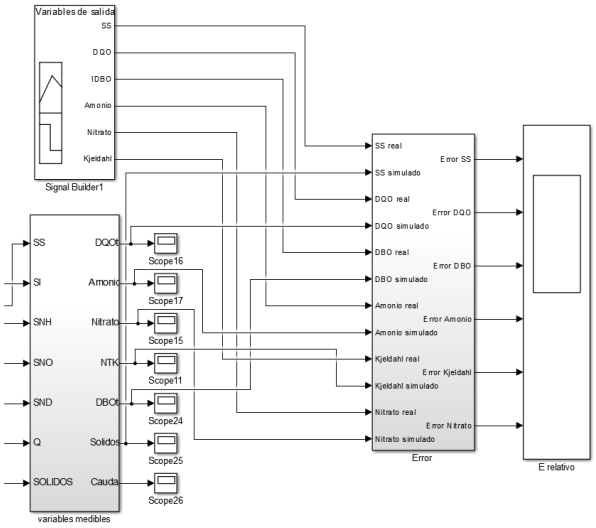


Figura 36. Parte de programa (estimación del error).

El error absoluto acumulativo se ha estimado como la diferencia entre el valor simulado (valor estimado) y el valor de laboratorio (valor real) y posteriormente realizando el sumatorio acumulativo de ello. Simulink no permite realizar esta acción por lo que se ha debido tratar fuera de su entorno. Para ello se han trasladado los datos del error absoluto al entorno Matlab para poder ser tratados.

Al igual que en el apartado del ajuste del modelo (4.3.) se han tratado los mismo valores para cada parámetro, y de cada uno de ellos se ha calculado el valor del error absoluto acumulativo. Para cada parámetro se ha establecido el valor mínimo de error absoluto acumulativo (EA).

5. RESULTADO OBTENIDO

Una vez observado todos los resultados obtenidos en simulación y compararlos con los datos reales, en la siguiente tabla se observan tantos los parámetros iniciales de bibliografía y los logrados mediante el ajuste; y que corresponden a la planta.

Tabla 3. Resultado de los parámetros del modelo ASM1.

Parámetros ASM 1	Símbolo	Valor bibliográfico	Valor obtenido
PARAMETROS ESTEQUIOMETRICOS			
Rendimiento heterótrofo	Y_H	0,67	0,50
Rendimiento autótrofo	Y_A	0,24	0,24
Fracción de biomasa para la producción	f_P	0,08	0,08
Masa N/Masa DQO en biomasa	i_{xB}	0,086	0,04
Masa N/Masa DQO producción desde biomasa	i_{xP}	0,06	0,06
PARAMETROS CINÉTICOS			
Velocidad de crecimiento heterótrofo	μ_H	6,0	30,0
Coeficiente medio de saturación para heterótrofos	K_S	20,0	20,0
Coeficiente de oxígeno para heterótrofos	K_{OH}	0,20	0,02
Coeficiente de nitrato para heterótrofos	K_{NO}	0,50	0,50
Velocidad muerte heterótrofa	b_H	0,62	10,0
Factor de corrección para el crecimiento heterótrofo	η_g	0,80	0,80
Velocidad de crecimiento autótrofo	μ_A	0,80	0,40
Coeficiente amonio para autótrofos	K_{NH}	1,0	1,0
Coeficiente de oxígeno para autótrofo	K_{OA}	0,40	0,04
Velocidad muerte autótrofa	b_A	0,20	0,20
Velocidad de amonificación	k_a	0,08	0,20
Velocidad max de hidrólisis	k_h	3,0	3,0
Coeficiente de hidrólisis para mat biodegradable	K_X	0,03	0,03
Factor de corrección para hidrólisis anóxico	η_h	0,40	0,40

En muchas simulaciones se ha observado que cuando se han dado distintos valores a un parámetro, los datos de salida han sido muy parecidos, con una diferencia menor a la décima, por lo que se ha decidido mantener el mismo valor inicial (o bibliográfico).

Por otro lado, algunos de los parámetros tienen influencia positiva en algunas variables pero negativa en otras, por lo que ha sido importante la comprensión del significado del parámetro para determinar qué valor sería el que mejor ajustara nuestro modelo matemático.

De estos valores, los resultados obtenidos son los siguientes y se van a comparar con los datos iniciales de simulación con los valores bibliográficos (tabla 3).

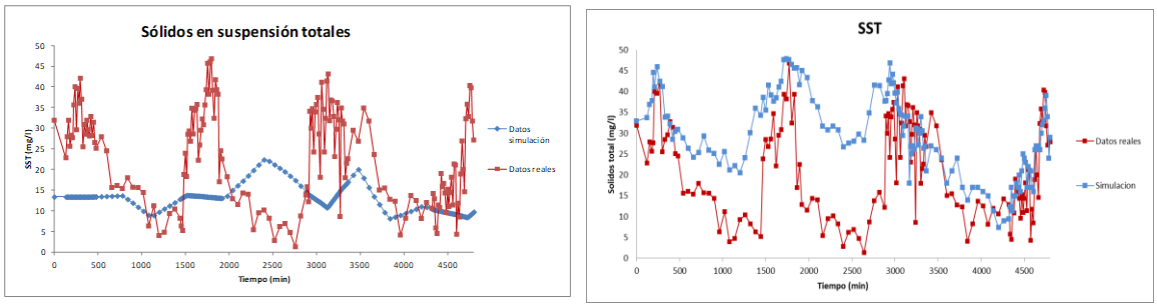


Figura 37. Sólidos en suspensión antes y después del ajuste.

El valor inicial de los datos simulados después del ajuste se ha mejorado, es decir, en tiempo cero el valor obtenido de los sólidos en suspensión se ha acercado mucho al dato real (Figura 37). Otro término a destacar es la tendencia de los datos, que con el ajuste se ha logrado una tendencia similar a los datos reales aunque siga habiendo una diferencia entre ellos.

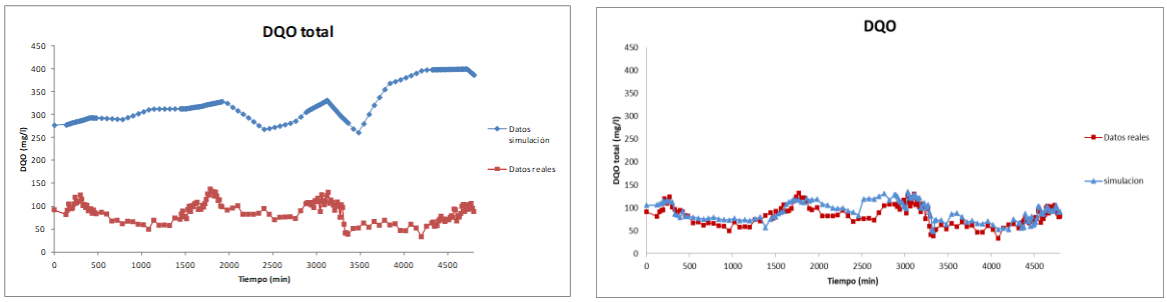


Figura 38. DQO antes y después del ajuste.

El ajuste de los parámetros ha sido bueno para esta variable de estado (DQO) y lo mismo ha ocurrido con la DBO_5, puesto que ambas variables están relacionadas directamente. (La DBO es la parte biodegradable de la DQO que en un mismo vertido focalizado, la relación suele mantenerse constante) (Figura 38 y 39).

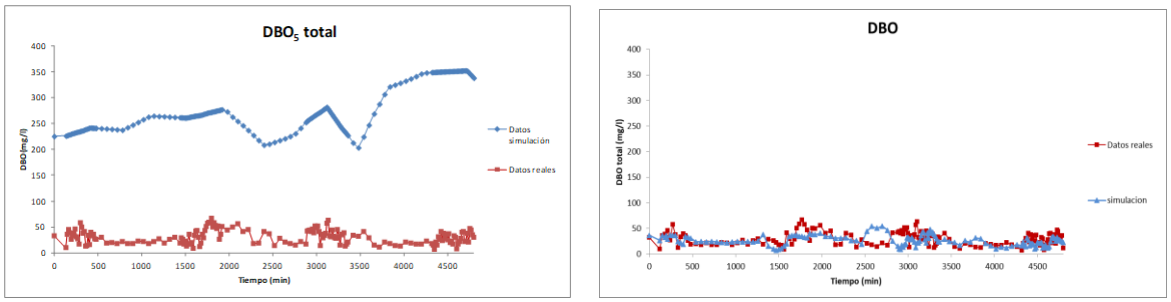


Figura 39. DBO antes y después del ajuste.

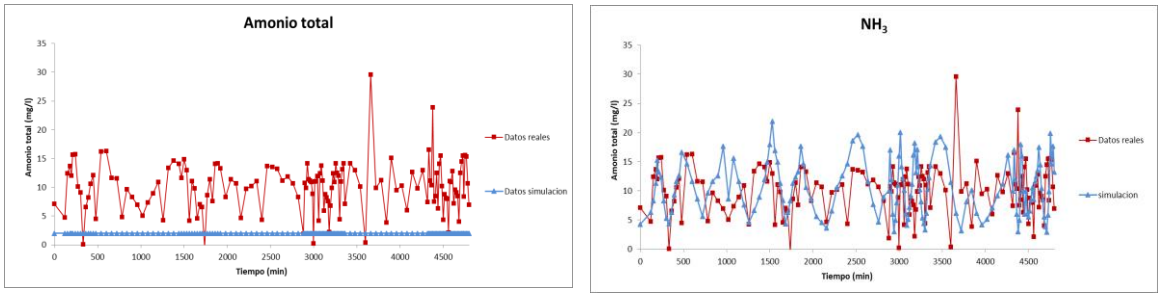


Figura 40. Amonio total antes y después del ajuste.

En este caso, se ha conseguido que el amonio obtenga valores medios de 10 mg/l que es mejor que los 2 mg/l de media que existía en un inicio (Figura 40). Pero la tendencia que se ha obtenido no corresponde con los datos reales. Seguramente sea debido a que en el modelo matemático falte alguna otra ecuación para modelar la evolución de esta variable de estado.

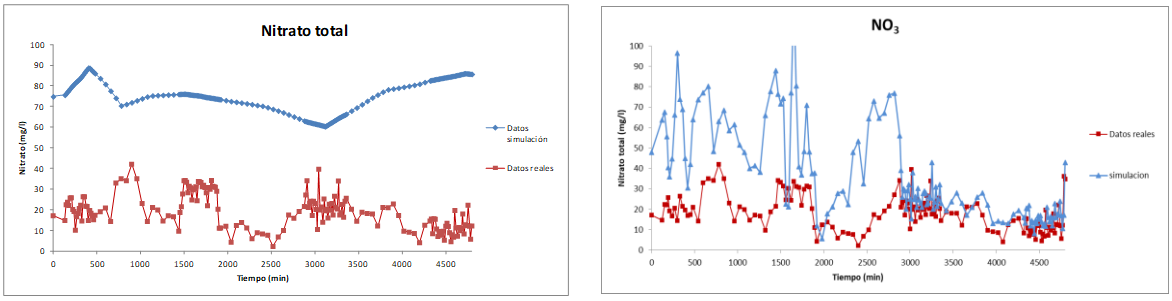


Figura 41. Nitrato total antes y después del ajuste.

Observando las gráficas de la figura 40, se advierte que la tendencia de los datos ha mejorado a pesar que al inicio de la simulación, la desviación de los datos para después del ajuste sea mucho más amplia. Es decir, con el tiempo la amplitud de la desviación va disminuyendo.

En la gráfica después del ajuste (Figura 41) hay un punto que queda fuera del rango (con un valor de 160 mg/l aproximadamente). No siguen ninguna tendencia, por lo que ambos valores

pueden ser anómalos y a la hora del ajuste podrían quitarse. Como no se ha realizado una investigación, ambos valores se tendrán en cuenta.

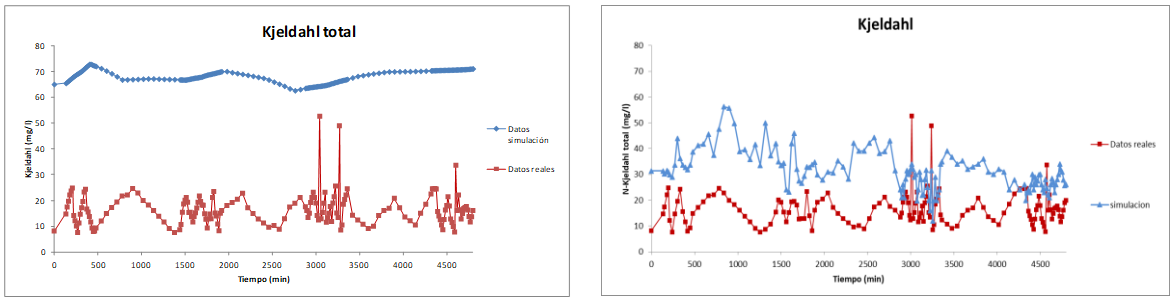


Figura 42. Nitrógeno Kjeldahl total antes y después del ajuste.

Después del ajuste de los parámetros se ha conseguido una mejor tendencia de datos del nitrógeno Kjeldahl (Figura 42), además de la mejora en el valor medio y del valor inicial y final de los datos de simulación.

De igual manera, partiendo de los valores paramétricos bibliográficos se ha ido calculando el error absoluto acumulativo para distintos valores. Una vez calculado el error absoluto acumulativo de cada valor, se ha elegido el mínimo.

En la tabla 4 se observan los valores paramétricos bibliográficos, los estudiados, los obtenidos mediante gráfica (con el ajuste visual) y finalmente los del error absoluto acumulativo mínimo.

Tabla 4. Resultado de los parámetros del modelo ASM1 mediante ajuste visual y cálculo de EA acum.

Parámetros ASM 1	Valor bibliográfico	Valores probados	Valor obtenido simulación	Valor obtenido EA min
PARAMETROS ESTEQUIOMETRICOS				
Y_H	0,67	0.3 – 0.5 – 0.67 – 0.9	0,50	0.3
Y_A	0,24	0.1 – 0.24 – 0.6 – 0.9	0,24	0.9
f_P	0,08	0.04 – 0.08 – 0.16 – 0.5	0,08	0.5
i_{xB}	0,086	0.04 -0,086 – 0.16 – 0.2	0,04	0.2
i_{xP}	0,06	0.03 - 0,06 – 0.12 – 0.6	0,06	0.6
PARAMETROS CINÉTICOS				
μ_H	6,0	0.6 - 6,0 – 12 - 30	30,0	12
K_S	20,0	0.1 – 10 – 20 – 30 - 100	20,0	0.1

K_{OH}	0,20	0.02- 0.1 – 0.2 – 0.4 - 20	0,02	0.02
K_{NO}	0,50	0.1 – 0.5 – 5 - 50	0,50	0.50
b_H	0,62	0.01 – 0.1 - 0,62 – 1 - 10	10,0	10.0
η_g	0,80	0.1 – 0.4 – 0.6 - 0,80 - 1	0,80	1
μ_A	0,80	0.1 – 0.4 – 0.8 – 1 – 1.6	0,40	0.10
K_{NH}	1,0	0.01 – 0.5 – 1 – 2 - 10	1,0	0.01
K_{OA}	0,40	0.04 - 0,4 - 4	0,04	0.4
b_A	0,20	0.02 – 0.1 - 0,2 – 0.4 - 2	0,20	2
k_a	0,08	0.008 - 0,08 – 0.2 – 0.8	0,20	0.008
k_h	3,0	0.1 – 0.3 - 3,0 - 30	3,0	0.1
K_X	0,03	0.003 - 0,03 – 0.3	0,03	0.3
η_h	0,40	0.04 - 0,40 - 1	0,40	0.04

Una vez establecidos todos los valores de los parámetros mediante el EA acumulativo mínimo, el error obtenido es de **$2{,}33 \cdot 10^8$** .

Por otro lado, se ha calculado el error absoluto acumulativo con los valores obtenidos mediante ajuste de gráfico y el error obtenido es de **$1{,}89 \cdot 10^8$** .

Para determinar que realmente los valores bibliográficos no describen la planta (nuestro sistema a estudiar) también se ha estimado el error y se ha obtenido un valor de **$8{,}36 \cdot 10^8$** .

Finalmente, se han graficado las variables SS, DBO, DBO, Amonio, Nitrato y nitrógeno Kjeldahl con los valores reales, con los parámetros obtenidos en el ajuste mediante gráfica y con los parámetros obtenidos en el ajuste mediante el error absoluto acumulativo mínimo.

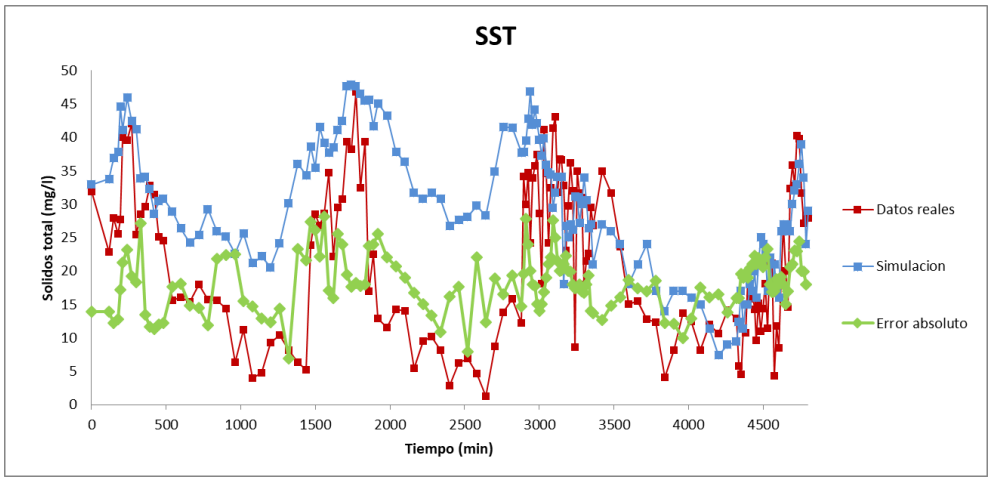


Figura 43. Comparativa de los diferentes ajuste SST.

En la figura 43 se observa que el ajuste mediante la estimación del error absoluto acumulativo ha sido mejor para valores cercanos a los 15 mg/l.

Por el contrario, las variables de materia orgánica (DQO y DBO) no muestran un buen ajuste con el método del error. (Figuras 44 y 45).

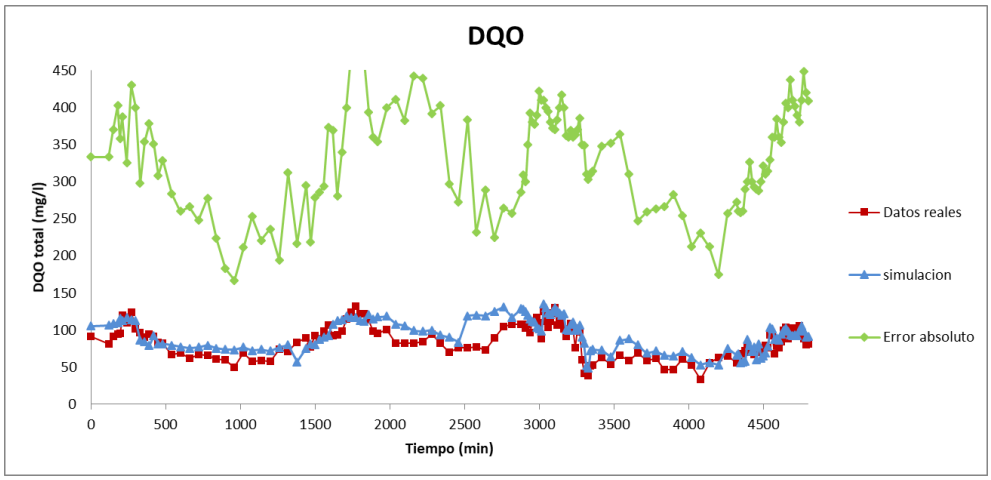


Figura 44. Comparativa de los diferentes ajustes DQO.

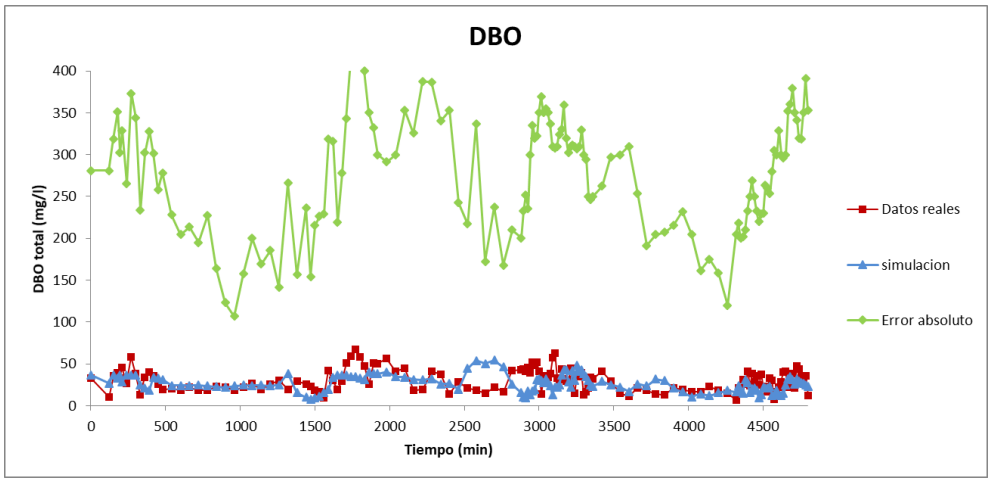


Figura 45. Comparativa de los diferentes ajustes DBO_5.

Para la variable amonio, se ha obtenido un valor medio muy bueno, aunque la tendencia de los datos no sea la misma. (Figura 46).

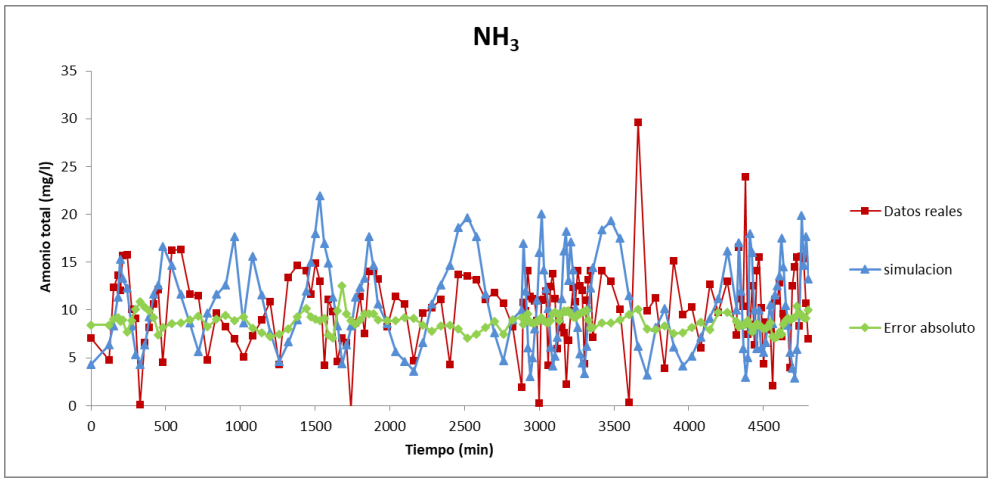


Figura 46. Comparativa de los diferentes ajustes Amonio.

Para la variable nitrato (NO_3), hasta el tiempo 2000 el ajuste mediante el error absoluto acumulativo ha sido mejor, pero posteriormente muestra una desviación mayor. (Figura 47).

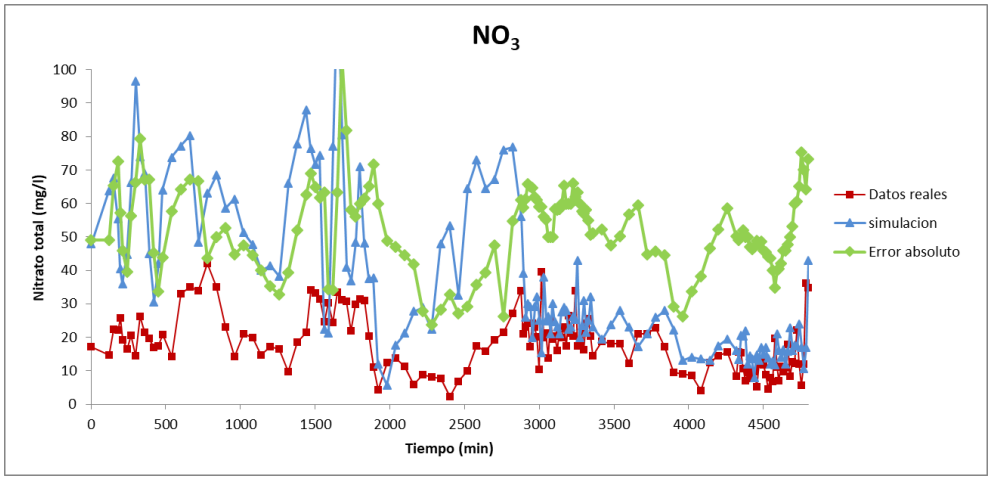


Figura 47. Comparativa de los diferentes ajustes Nitrato.

La última variable representada es el nitrógeno Kjeldahl y en la figura 48 se observa que el ajuste mediante simulación y visualización de gráfica ha sido mejor.

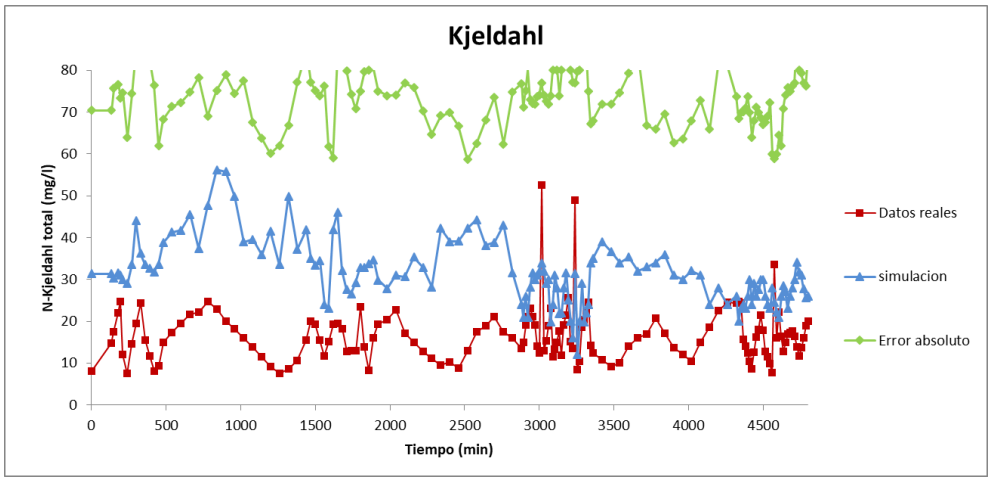


Figura 48. Comparativa de los diferentes ajustes Nitrógeno Kjeldahl.

6. CONCLUSIÓN Y DISCUSIÓN

El modelo matemático usado para la descripción del proceso de nitrificación ha sido el modelo ASM1 de Henze (1987) junto con balances de materia. Este modelo tiene en cuenta las reacciones químicas y biológicas tanto para la materia orgánica como para la materia orgánica nitrogenada. Para nuestro sistema este modelo matemático ha resultado bastante adecuado, puesto que la evolución de las variables ha sido bastante parecida (una vez realizado el ajuste).

En este trabajo se ha avanzado en un ajuste del modelo matemático mediante la estimación de los parámetros del modelo. De los resultados obtenidos se concluye que el modelo puede llegar a representar en gran medida lo que sucede en la planta depuradora de Estella (Navarra). De este modo, si conociésemos en cada momento los valores de entrada a la depuradora (datos iniciales de la simulación), podríamos estimar los valores de salida de la misma, consiguiendo así un ahorro importante en costes de personal y equipos.

En cuanto al apartado del ajuste, se ha realizado de dos formas: mediante la construcción de gráficas y por medio de la estimación del error absoluto acumulativo. En el caso de la construcción de gráficas se han representados los datos reales (obtenidos mediante muestreo y análisis en laboratorio) frente a los de simulación y conociendo la importancia de cada parámetro y variable se ha determinado el valor idóneo. En la tabla 4 se pueden observar los valores obtenidos en ambos ajustes y existe una clara diferencia.

La estimación del error para un ensayo nos proporciona información en cuanto a la desviación sobre el valor real, pero esta herramienta, por si sola, no es capaz de determinar la tendencia de los datos, por lo que su capacidad es bastante reducida.

Por otro lado, cuando se ha calculado el error absoluto para ambos ajustes, se ha logrado un valor menor cuando el ajuste ha sido mediante análisis de gráficos. Esto puede ser debido a que existe una relación entre ciertos parámetros y variables que el cálculo matemático del error no considera. Es importante conocer el sistema que se está estudiando para poder determinar el modelo que mejor ajuste pero también para priorizar la influencia de ciertos parámetros.

El siguiente paso de la calibración de la instalación sería la validación del modelo, y para ello se debería volver a planificar una tanda de recogida de muestras, análisis de las muestras y posteriormente la comprobación mediante el programa de simulación. Pero habría que tener en cuenta que estos parámetros varían según las condiciones ambientales, por lo que seguramente para cada periodo estacional habría que determinarlos.

SÍMBOLOS

Ac : área del decantador

ASM: Activated Sludge Model

bA Velocidad muerte autótrofa

bH Velocidad muerte heterótrofa

$C_5H_7NO_2$: material celular (etil cianoacetato)

$CaCO_3$: calcio carbonato

CH_3OH: metanol

CHE: Confederación Hidrográfica del Ebro

CO_2: carbono

DBO5: Demanda Biológica de Oxígeno al quinto día.

DQO: Demanda Química de Oxígeno

EA: Error Absoluto.

EDAR: Estación Depuradora de Aguas Residuales.

f_P Fracción de biomasa para la producción

h: horas

H^+: protón

H_2O: agua

HCO_3^-: ion bicarbonato

IVL: índice volumétrico de lodos

IWA: International Water Association

i_{xB} Masa N/Masa DQO en biomasa

i_{xP} Masa N/Masa DQO producción desde biomasa

ka Velocidad de amonificación

kh Velocidad máxima de hidrólisis

KNH Coeficiente amonio para autótrofos

KNO Coeficiente de nitrato para heterótrofos

KOA Coeficiente de oxígeno para autótrofo

KOH Coeficiente de oxígeno para heterótrofos

KS Coeficiente medio de saturación para heterótrofos

KX Coeficiente de hidrólisis para materia biodegradable

l: litro

m: metro

m^3: metros cúbicos

mg: miligramo

$N\text{-}NH_4$: nitrógeno amoniacal

N_2: nitrógeno

NH_4^+: ion de amonio

NO_2^-: ion nitrito

NO_3^-: ion nitrato

O_2: oxígeno

OH^-: grupo hidróxilo

pH: coeficiente que indica el grado de acidez o basicidad de una solución acuosa.

ppm: partes por millón (mg/l)

Q: caudal

Qo: caudal de entrada al sistema

Qe: caudal de entrada al decantador

Qr: caudal recirculado

Qp: caudal de purga

r_{SND}: evolución de nitrógeno orgánico soluble

r_{SNH}: evolución de nitrógeno amoniacal

r_{SNO}: evolución de nitrato más nitrito.

r_{SO}: evolución de concentración de oxígeno

r_{SS}: evolución de sustrato fácilmente biodegradable.

r_{XBA}: evolución de biomasa autótrofa activa

r_{XBH}: evolución de biomasa heterótrofa activa

r_{XND}: evolución de nitrógeno orgánico particulado

r_{Xp}: evolución de partículas procedente de la muerte biológica

r_{Xs}: evolución de sustrato lentamente biodegradable.

S_{ALK}: alcalinidad

S_I: materia orgánica inerte soluble.

S_{ND}: nitrógeno orgánico soluble

S_{NH}: nitrógeno amoniacal

S_{NO}: nitrato más nitrito.

S_O: concentración de oxígeno

S_s : sustrato fácilmente biodegradable.

t y dt: tiempo y diferencial de tiempo

TRH: tiempo de retención hidráulico

V: volumen

Vs: velocidad de sedimentación

X: concentración de sólidos en suspensión

X_{BA}: biomasa autótrofa activa

X_{BH}: biomasa heterótrofa activa.

X_I: materia orgánica inerte en forma de partícula.

X_{ND}: nitrógeno orgánico particulado

X_P: partículas procedente de la muerte biológica

X_s: sustrato lentamente biodegradable.

Y_A: rendimiento autótrofo

Y_H: rendimiento heterótrofo

μ_A Velocidad de crecimiento autótrofo

μ_H Velocidad de crecimiento heterótrofo

η_g Factor de corrección para el crecimiento heterótrofo

η_h Factor de corrección para hidrólisis anóxico

ρ_1: crecimiento aeróbico de la biomasa

ρ_2: crecimiento anóxico de la biomasa heterótrofa

ρ_3: crecimiento aeróbico de la biomasa autótrofa

ρ_4: muerte de la biomasa heterótrofa

ρ_5: muerte de la biomasa autótrofa

ρ_6: amonificación

ρ_7: hidrólisis de la materia orgánica atrapada

ρ_8: hidrólisis del nitrógeno orgánico atrapado

μ: ratio del crecimiento específico

μ_{max}: ratio del crecimiento específico máximo

S: concentración de sustrato

Ks: Constante medio de saturación

7. BIBLIOGRAFÍA

1. Henze M, Gujer W, Mino T, van Loosdrecht MCM (2000) Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3. IWA Science and Technical Report No. 9. IWA Publishing, London

2. Gernaey KV, Loosdrecht MCM, Henze M, Lind M, Jorgensen SB. Activated sludge wastewater treatment plant modelling and simulation: state of the art. Environ Modell Softw. 2004;19(9):763–783. doi: 10.1016/j.envsoft.2003.03.005.

3. Meijer SCP, Spoel H, Susanti S, Heijnen JJ, Loosdrecht MCM. Error diagnostics and data reconciliation for activated sludge modelling using mass balances. Wat Sci Technol. 2002;45(6):145–156.

4. Hulsbeek JJW, Kruit J, Roeleveld PJ, Loosdrecht MCM. A practical protocol for dynamic modeling of activated sludge systems. Water Sci Technol. 2002;45(6):127–136. [PubMed]

5. Melcer H, Dold PL, Jones RM, Bye CM, Takacs I, Stensel HD, Wilson AW, Sun P, Bury S. Methods for wastewater characterization in activated sludge modelling. Alexandria: Water Environment Research Foundation (WERF); 2003.

6. Vanrolleghem PA, Insel G, Petersen B, Sin G, De Pauw D, Nopens I, Weijres S, Gernaey K (2003) A comprehensive model calibration procedure for activated sludge models. In: Proceedings of WEFTEC 2003, 76th annual technical exhibition and conference, 11–15 October 2003, Los Angeles, CA, USA

7. Langergraber G, Rieger L, Winkler S, Alex J, Wiese J, Owerdieck C, Ahnert M, Simon J, Maurer M. A guideline for simulation studies of wastewater treatment plants. Water Sci Technol. 2004;50(7):131–138. [PubMed]

8. Sin G, Hulle SWH, Pauw DJW, Griensven A, Vanrolleghem PA. A critical comparison of systematic calibration protocols for activated sludge models: a SWOT analysis. Water Res. 2005;39(12):2459–2474. doi: 10.1016/j.watres.2005.05.006.

9. Sergio A. Martínez y Miriam G. Rodríguez,. Tratamiento de aguas residuales con Matlab, editorial Reverté

10. FALL, C. Chavez, R. & Diaz, R. (2006) Modelación matemática de plantas de tratamiento de lodos activados, revista técnica de medio ambiente.

11. Brock,T. (1994).Biology Of microorganisms. 7th Edition. Editorial Prentice - Hall International.

12. WEF y ASCE (1998). Design of municipal wastewater treatment plans. Volume 2. Liquid treatment processes. ASCE manuals and reports on engineering practive nº 76, WEF manual of practive nº8, American Society of Civil Engineers and Water Environment Federation, Alexadria.

13. Jiménez Douglas, Emérita (2010). Tesis doctoral: modelación matemática del proceso de nitrificaci´n en dos etapas. Desarrollo de metodologías de calibración del modelo para un reactor SHAROM y un proceso de fangos activados. UPV

14. Penya-Roja J.M., Seco A., Ferrer J., Serralta J. (2002). Calibration and validation of Activated Sludge Model No.2d for Spanish municipal wastewater. Environmental and Technology. 23, 849-862.

15. Dockhorn, T.; Cichtl, N.J. y Kayser, R. (2001) Comparative investigations on COD-removal in sequencing batch reactors and continuous flow plants. Water Sci. Technol. 43, 45.

16. Sánchez J., Sanabria J. (2009). Metabolismos microbianos involucrados en procesos avanzados para la remoción de Nitrógeno, una revisión prospectiva. Rev. Colomb. Biotecnol. Vol. XI No.1, 114-124.

17. Metcalf and Eddy (1991). Wastewater Engineering: treatment, disposal and Reuse. McGraw-Hill Education

18. Pérez Hernández M. M. (2012). Estimación de incertidumbres. GUÍA GUM. Revista Española de Metrología.

19. Himmelblau D. M. (1996). Principios Básicos y cálculos en ingeniería química. Pearson Educación.

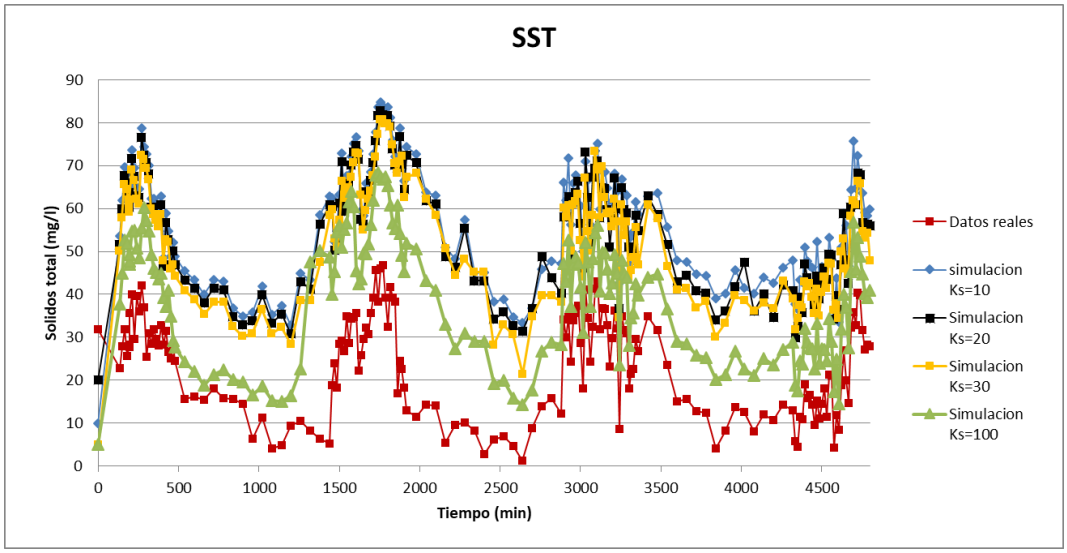
20. http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/11986/fichero/CAP%C3%8DTULO+3%252FCAP%C3%8DTULO+3.pdf

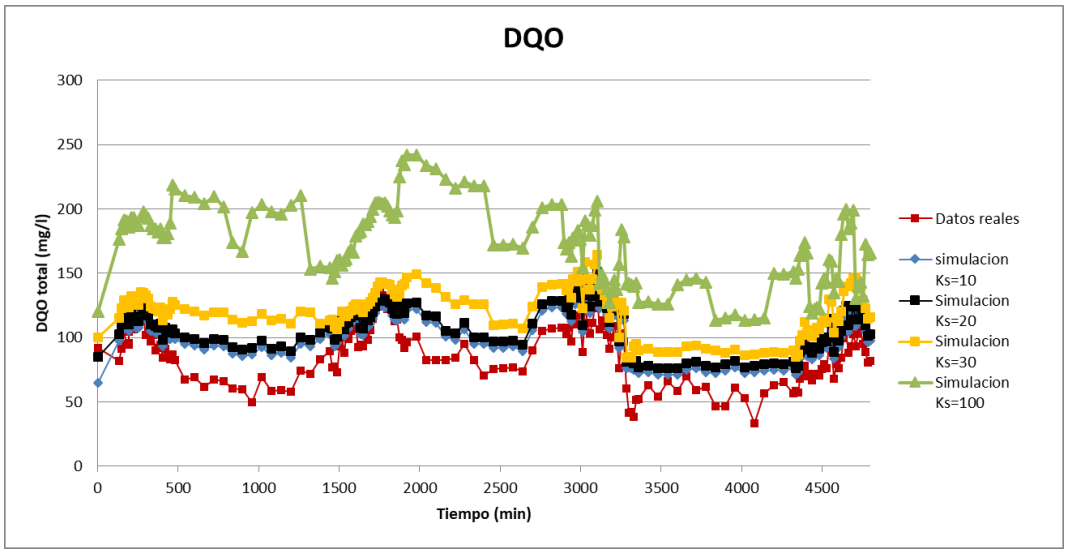
21. Makinia J. (2010). Mathematical Modelling and Computer Simulation of Activated Sludge Systems. IWA Publishing.

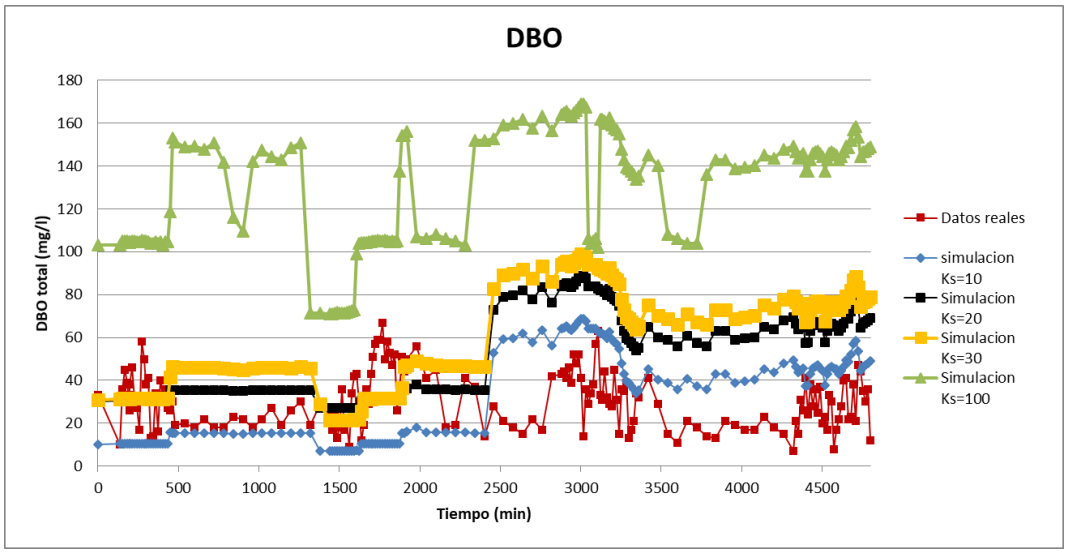
8. ANEXOS

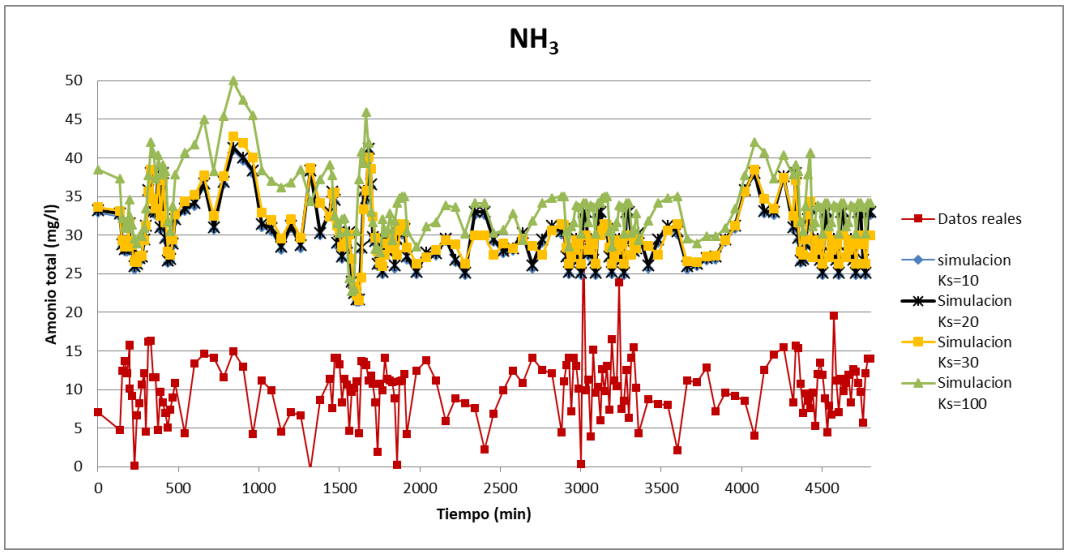
8.1. GRÁFICAS CON LOS DISTINTOS PARÁMETROS

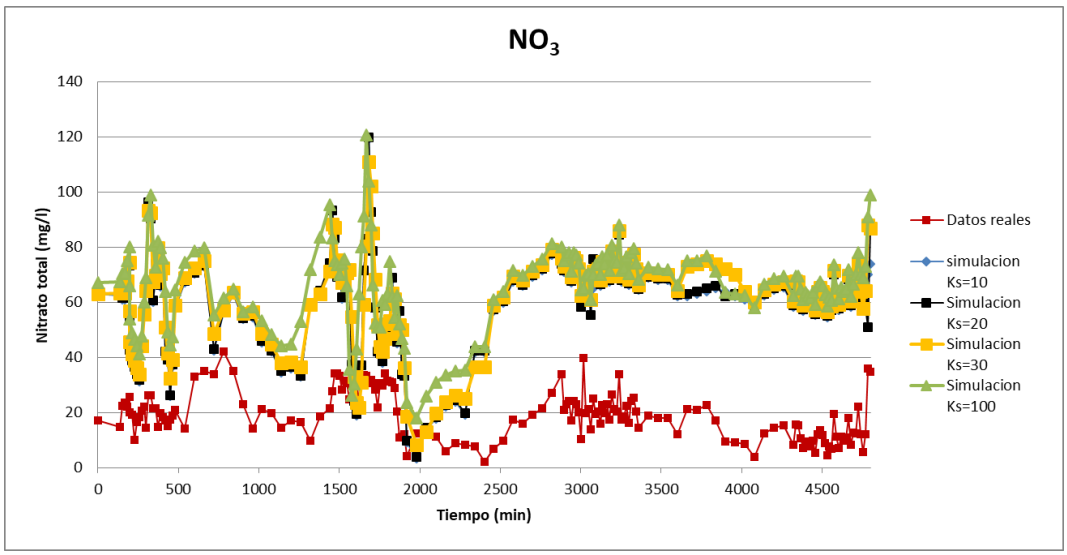
ESTUDIO DEL COEFICIENTE Ks

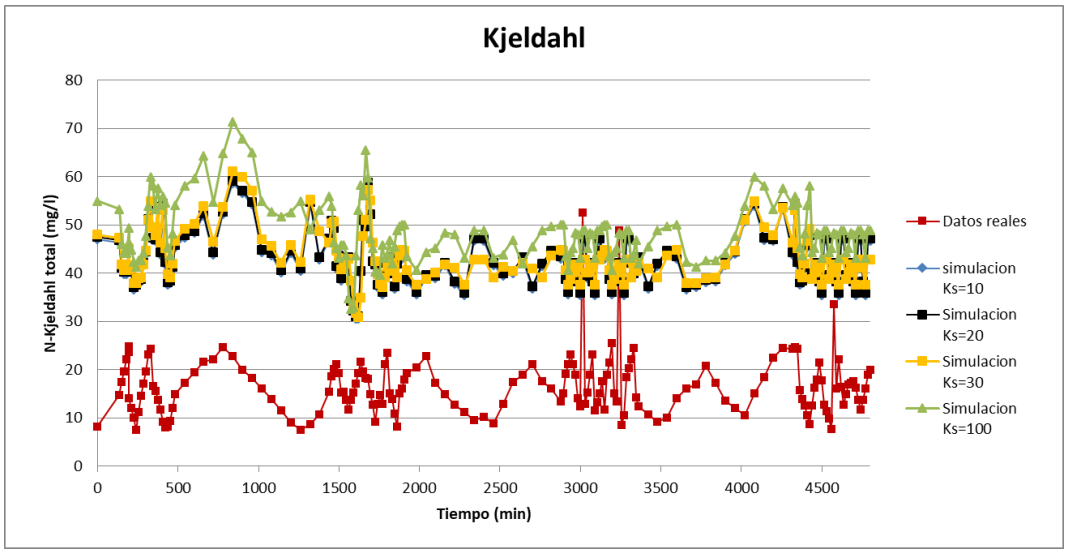




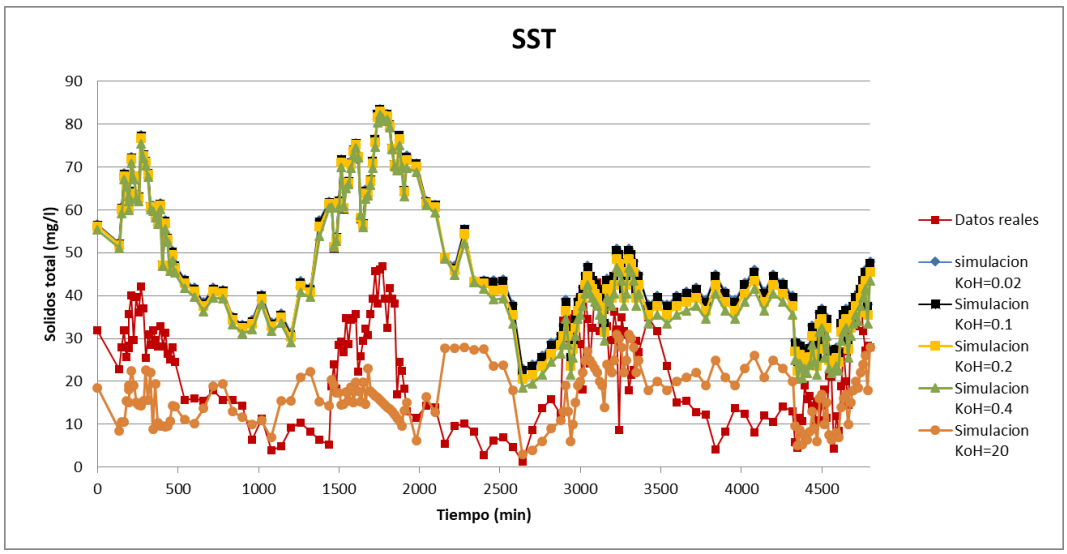

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion Ks=10
Simulacion Ks=20
Simulacion Ks=30
Simulacion Ks=100

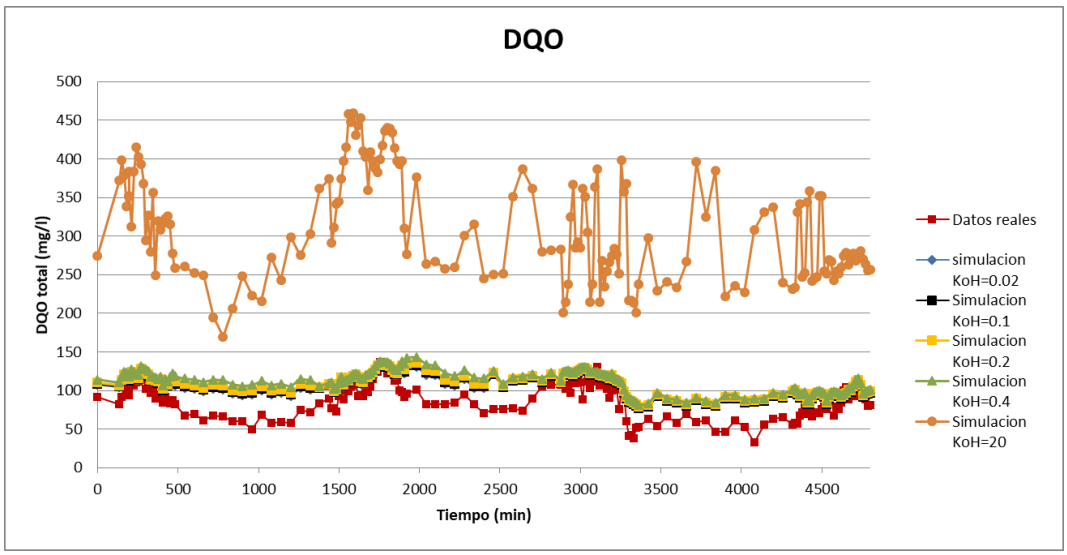

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion Ks=10
Simulacion Ks=20
Simulacion Ks=30
Simulacion Ks=100

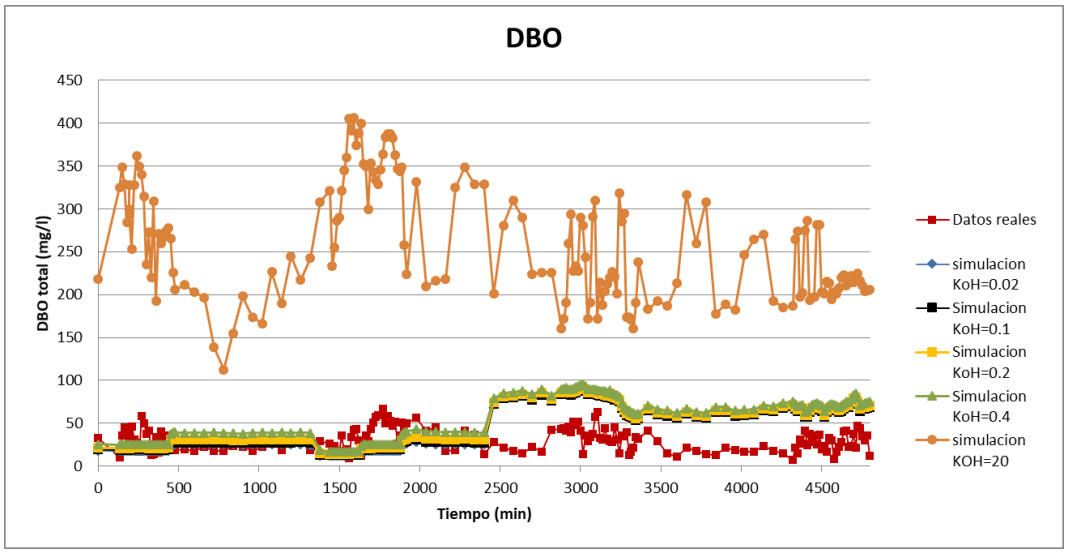

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion Ks=10
Simulacion Ks=20
Simulacion Ks=30
Simulacion Ks=100

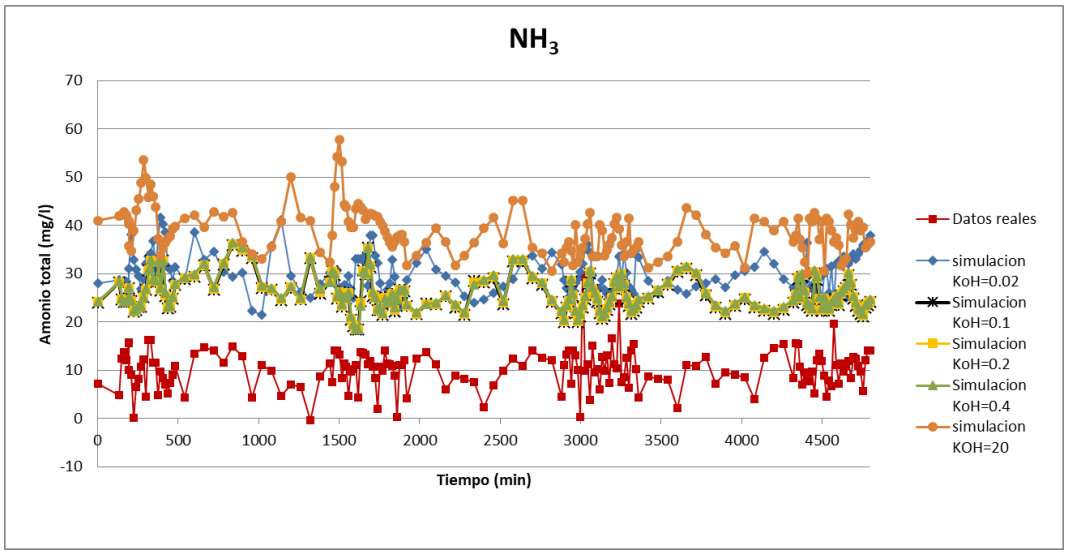


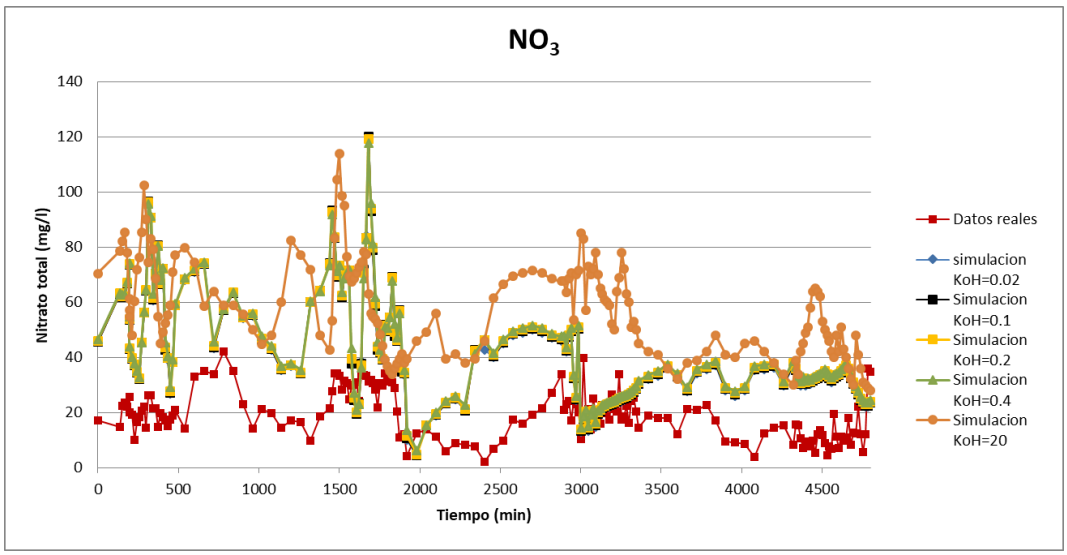
ESTUDIO DEL COEFICIENTE KOH

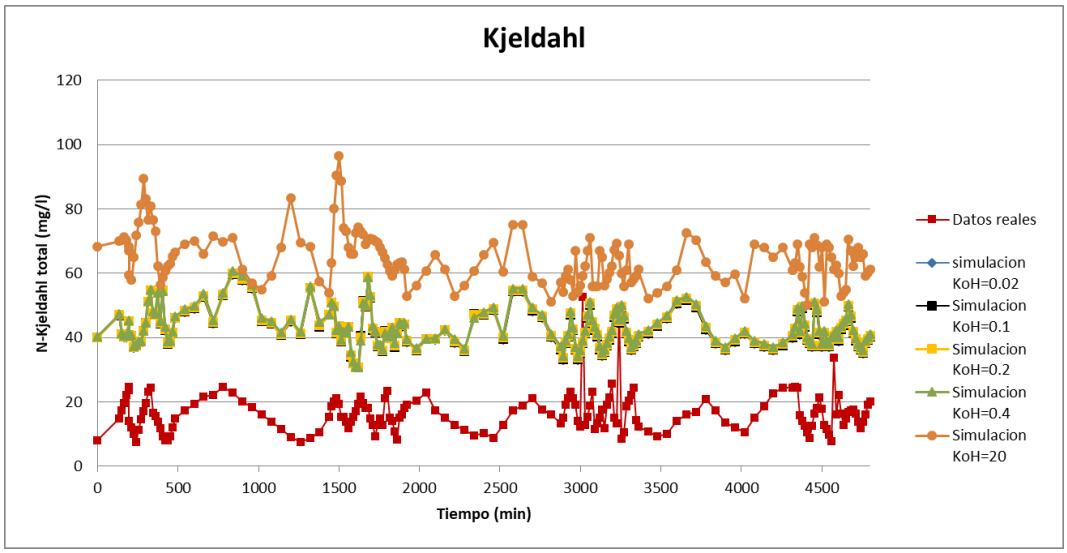




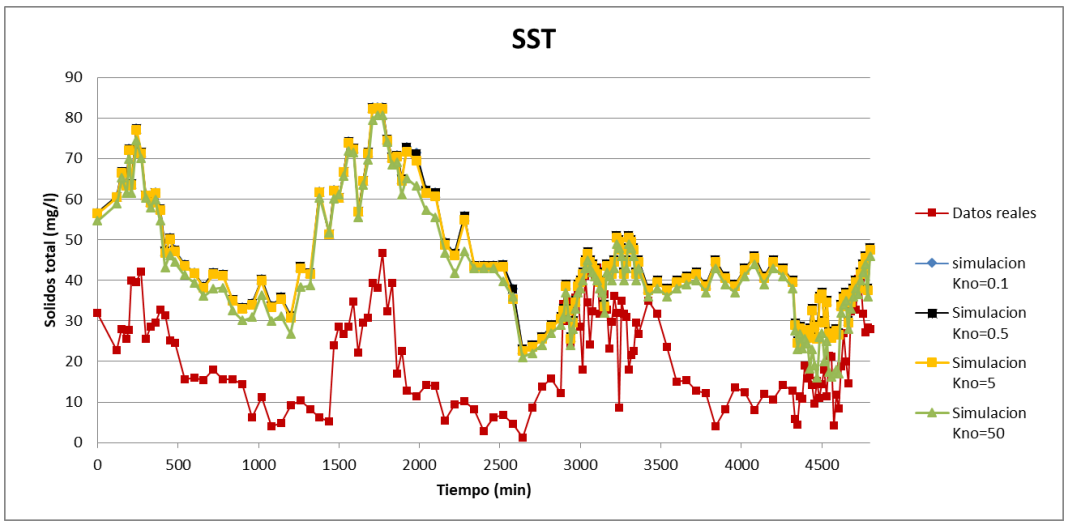

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion KoH=0.02
Simulacion KoH=0.1
Simulacion KoH=0.2
Simulacion KoH=0.4
simulacion KOH=20

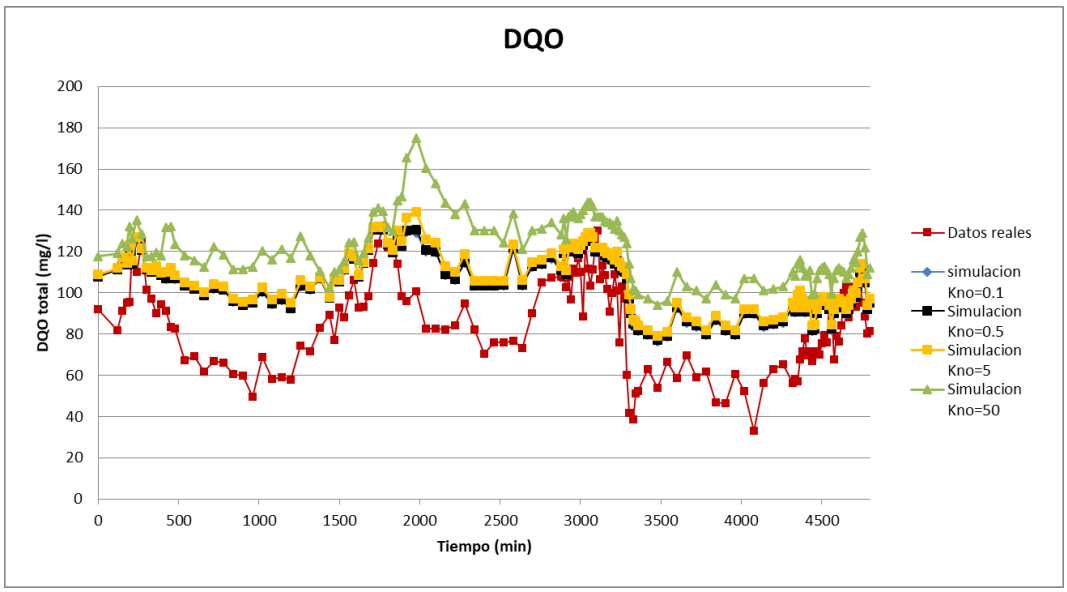

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion KoH=0.02
Simulacion KoH=0.1
Simulacion KoH=0.2
Simulacion KoH=0.4
simulacion KOH=20

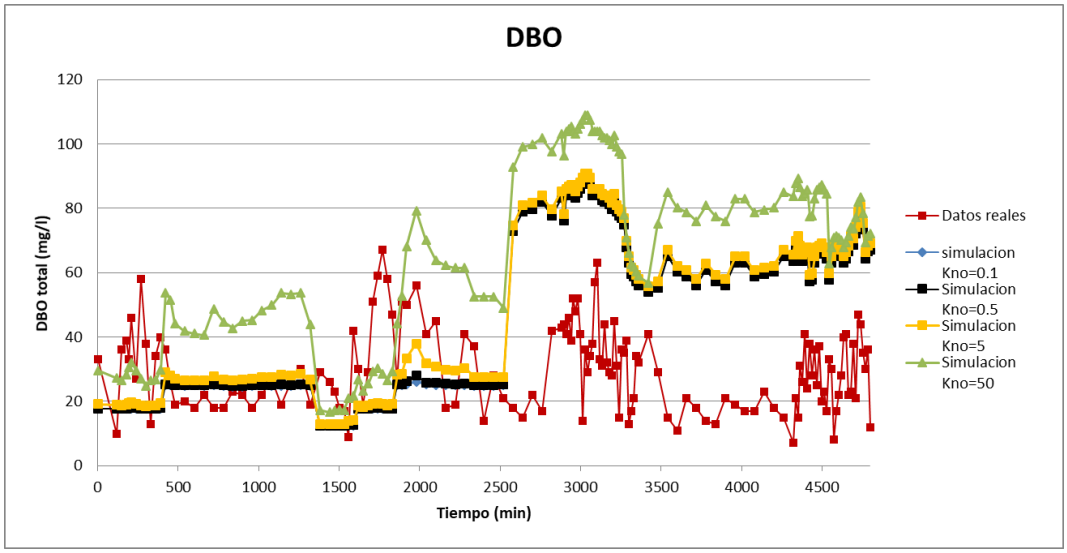

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion KoH=0.02
Simulacion KoH=0.1
Simulacion KoH=0.2
Simulacion KoH=0.4
Simulacion KoH=20

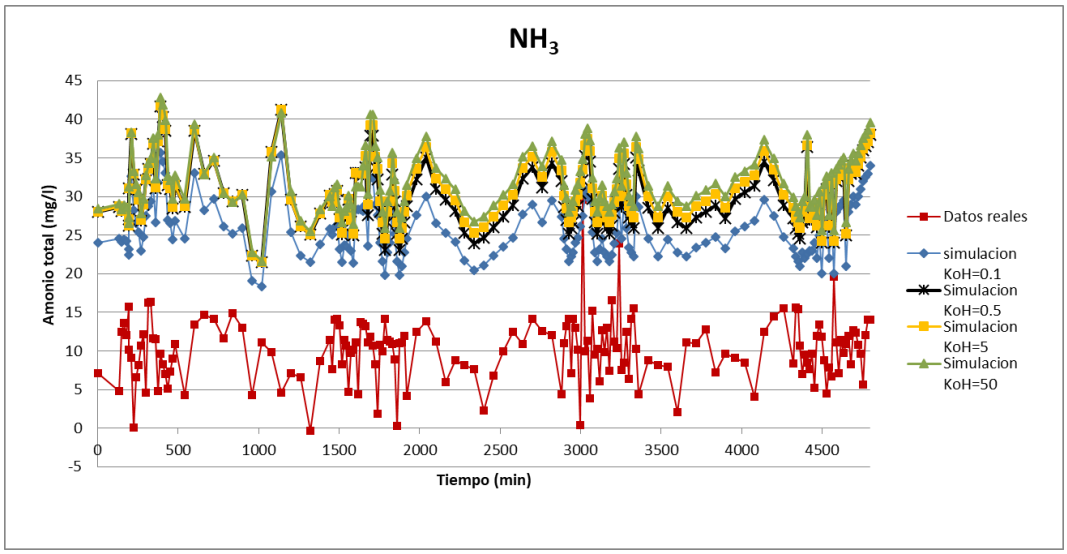


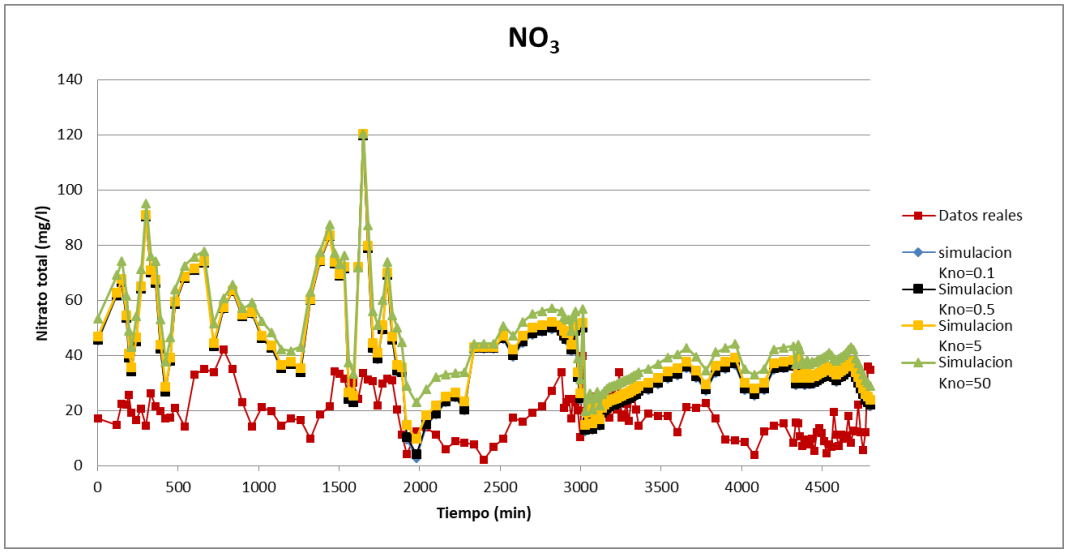
ESTUDIO DEL COEFICIENTE KNO

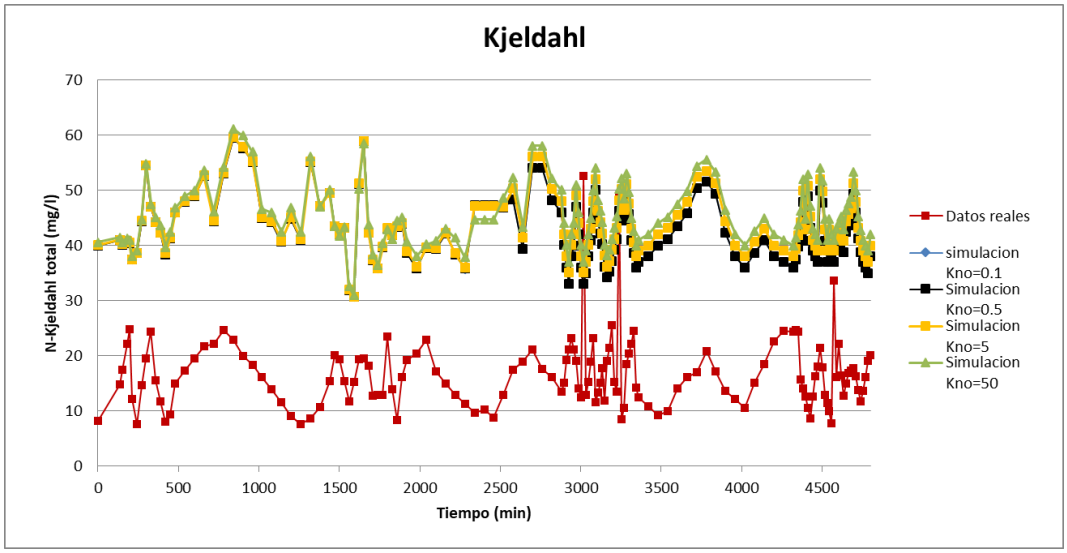




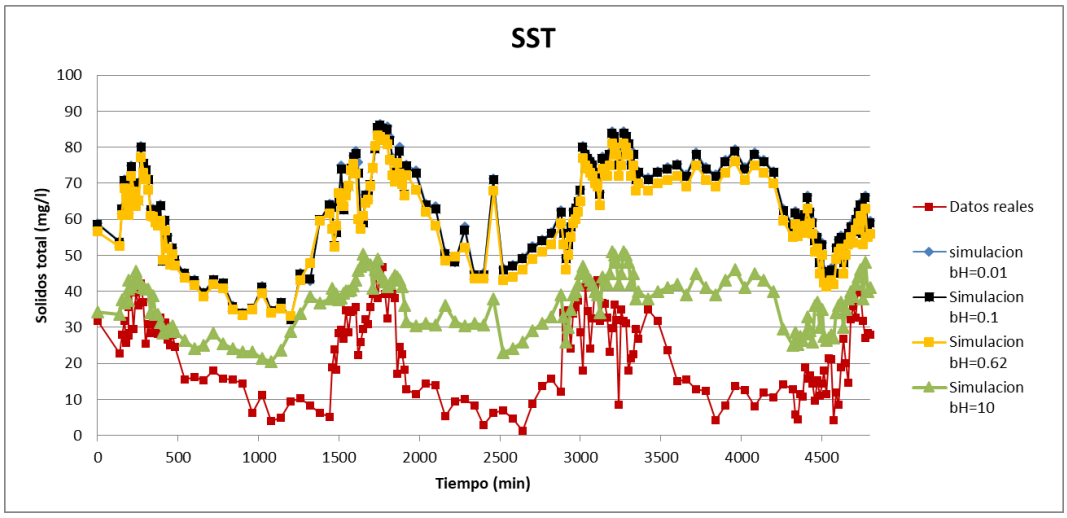

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion Kno=0.1
Simulacion Kno=0.5
Simulacion Kno=5
Simulacion Kno=50

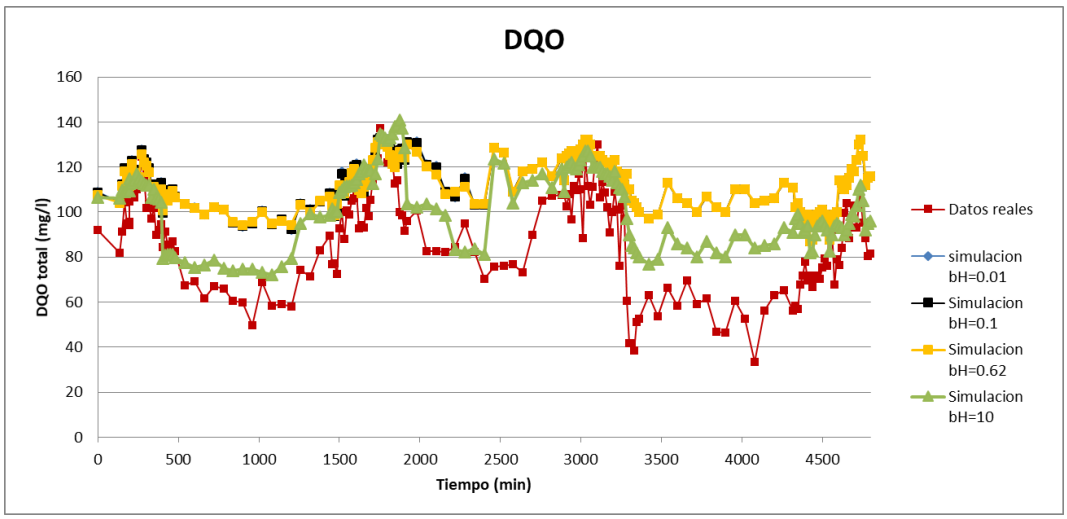

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion KoH=0.1
Simulacion KoH=0.5
Simulacion KoH=5
Simulacion KoH=50

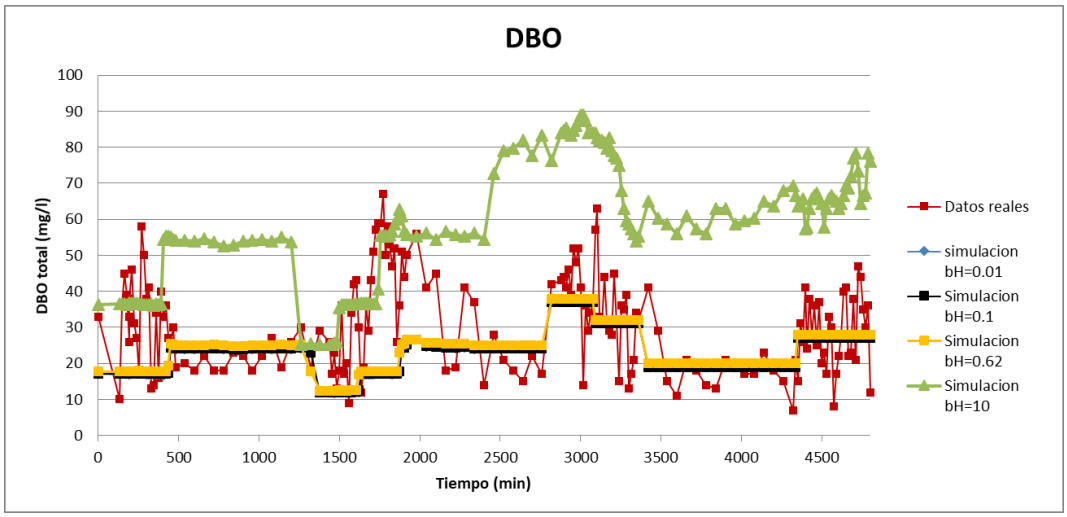

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion Kno=0.1
Simulacion Kno=0.5
Simulacion Kno=5
Simulacion Kno=50

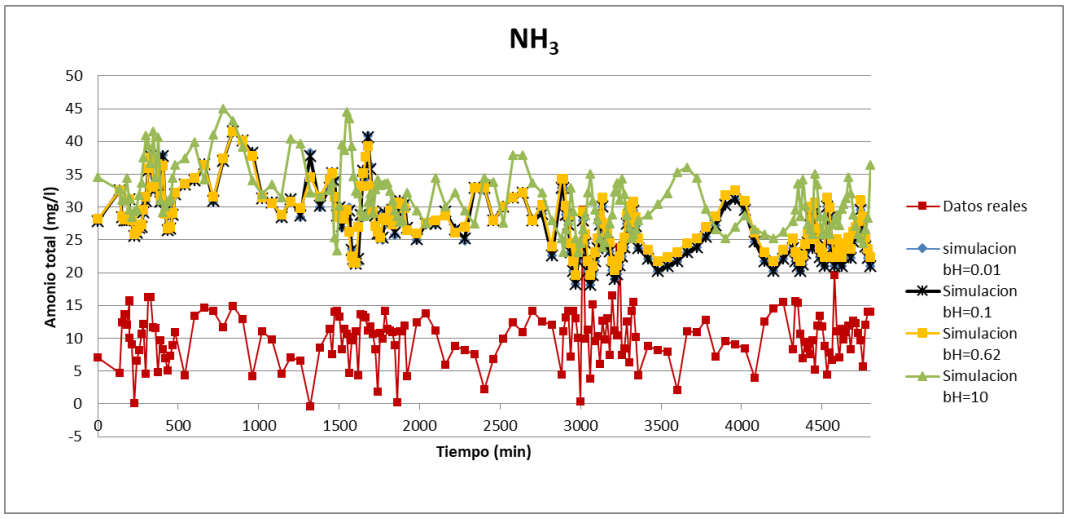


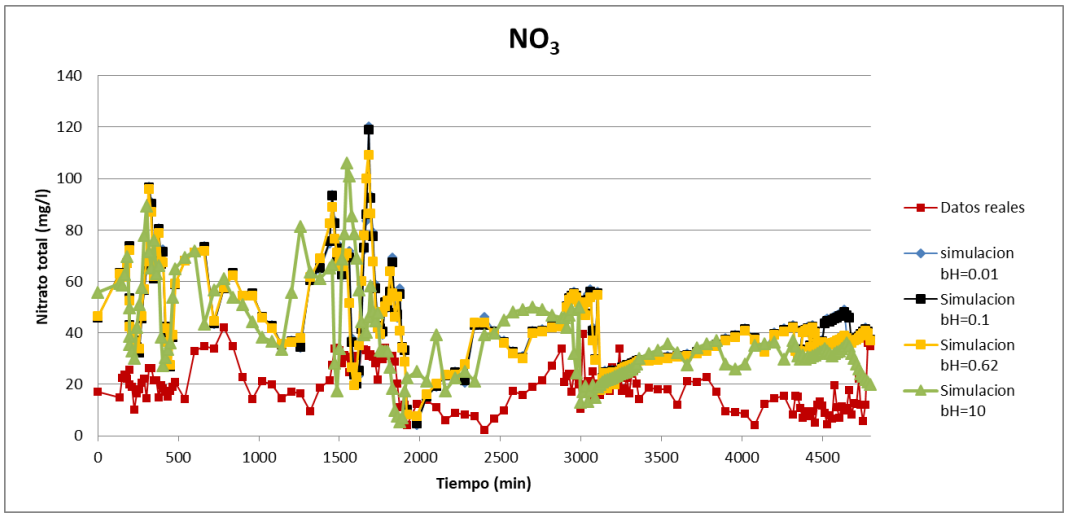
ESTUDIO DEL COEFICIENTE bH

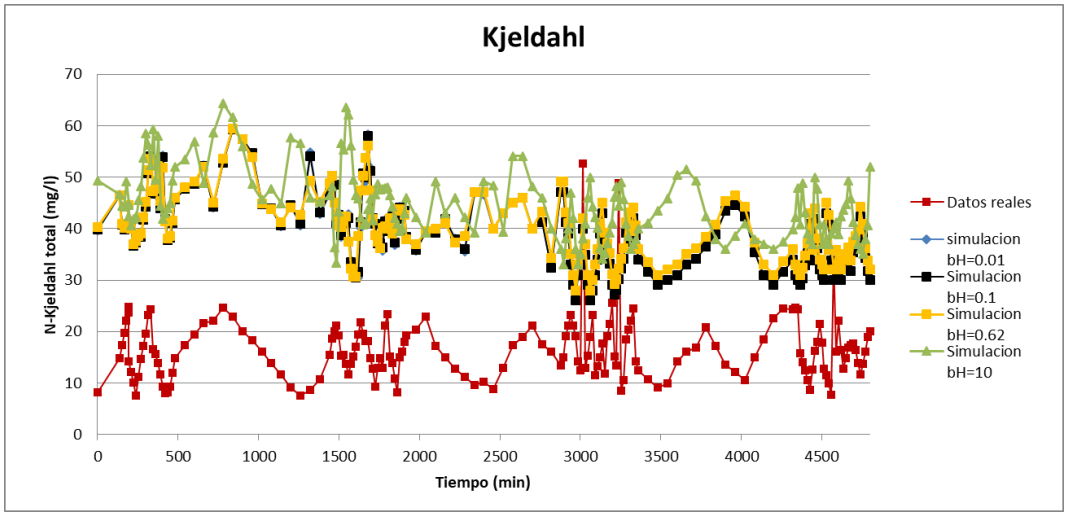




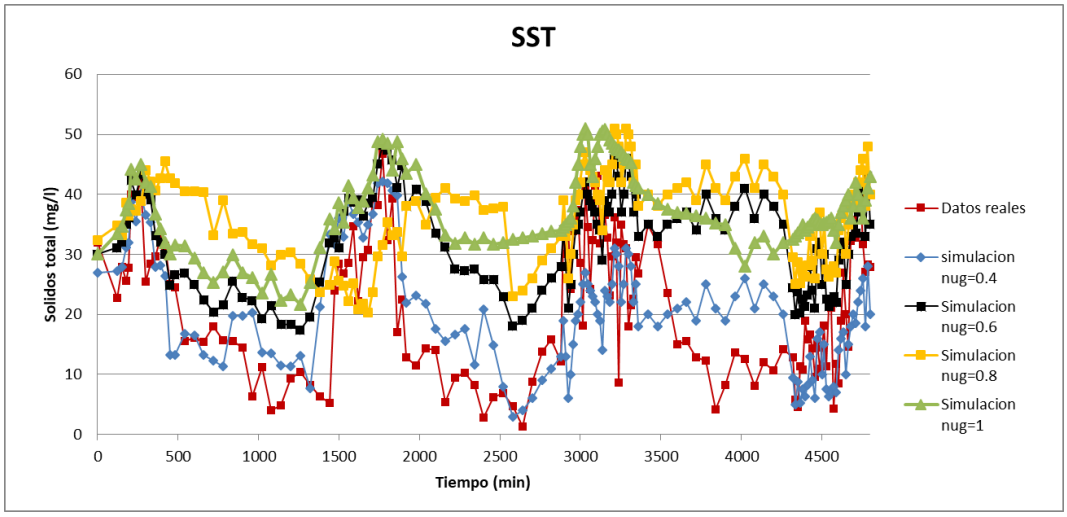

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion bH=0.01
Simulacion bH=0.1
Simulacion bH=0.62
Simulacion bH=10

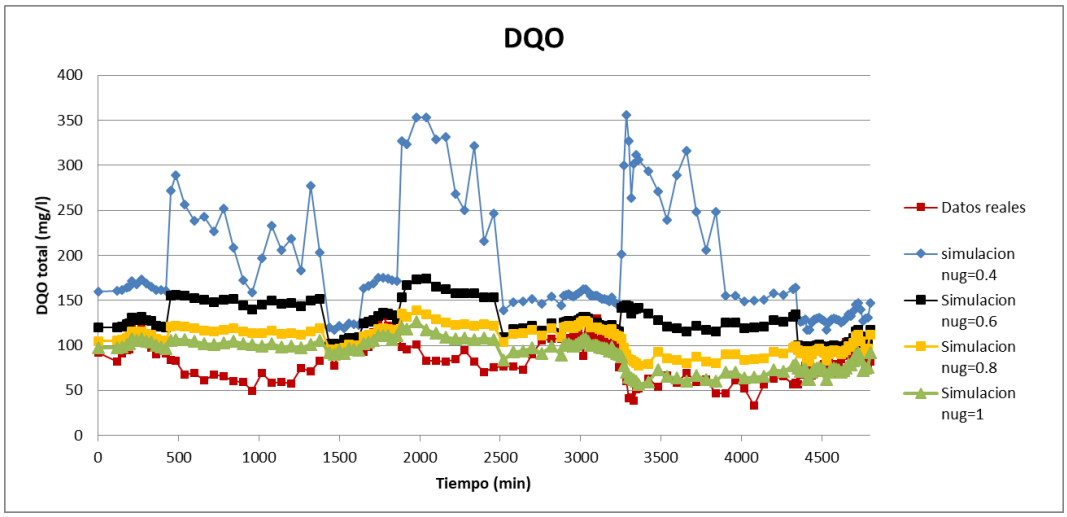

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion bH=0.01
Simulacion bH=0.1
Simulacion bH=0.62
Simulacion bH=10

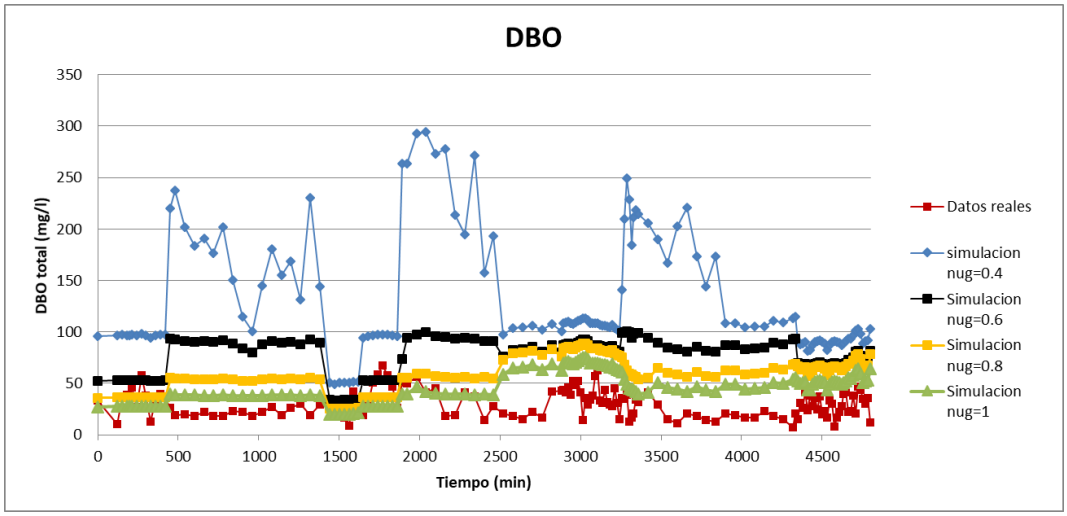

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion bH=0.01
Simulacion bH=0.1
Simulacion bH=0.62
Simulacion bH=10

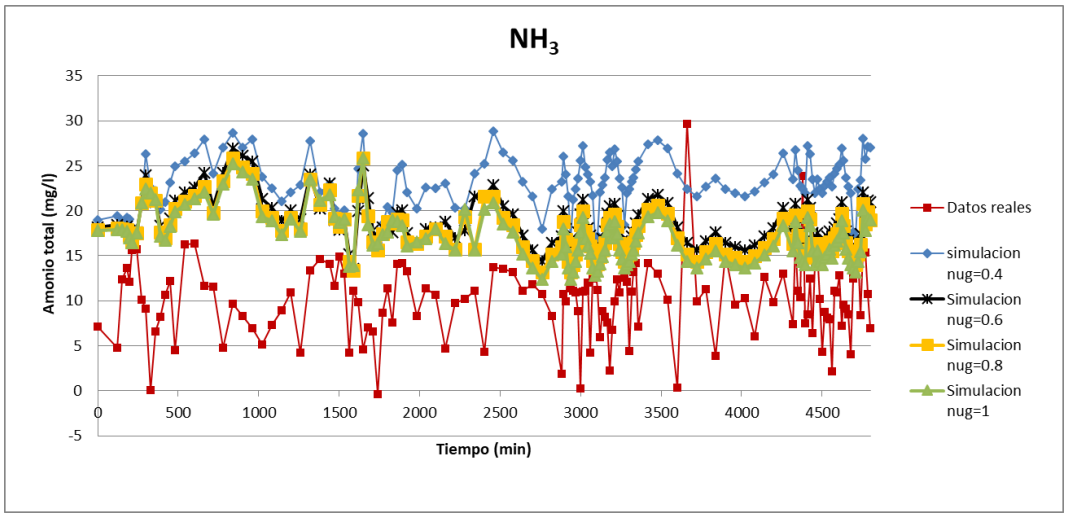


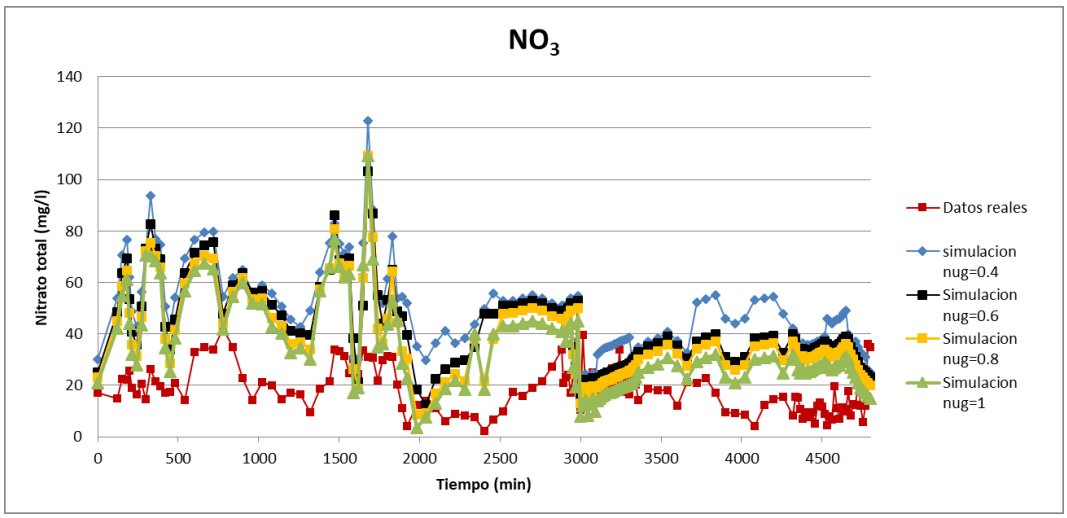
ESTUDIO DEL COEFICIENTE ηg

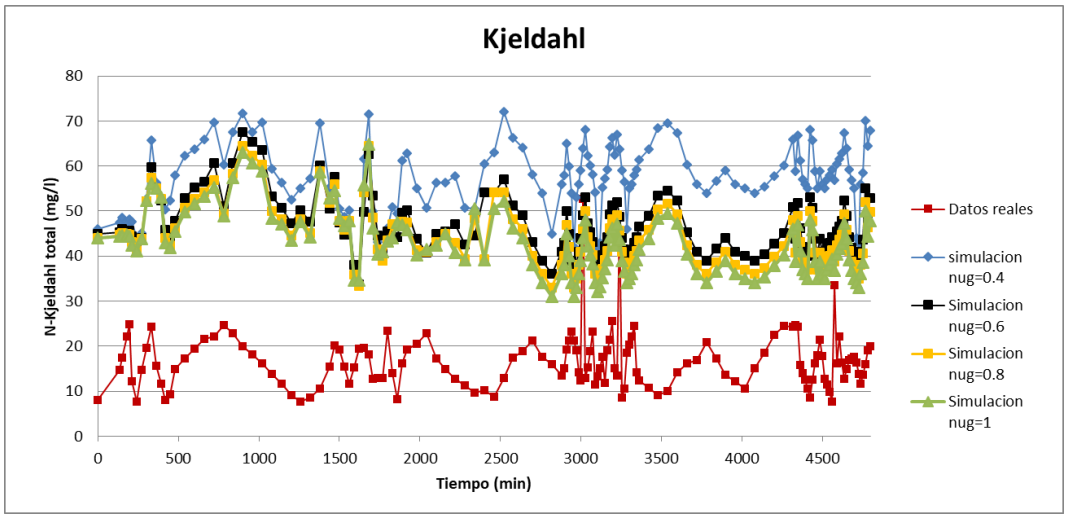




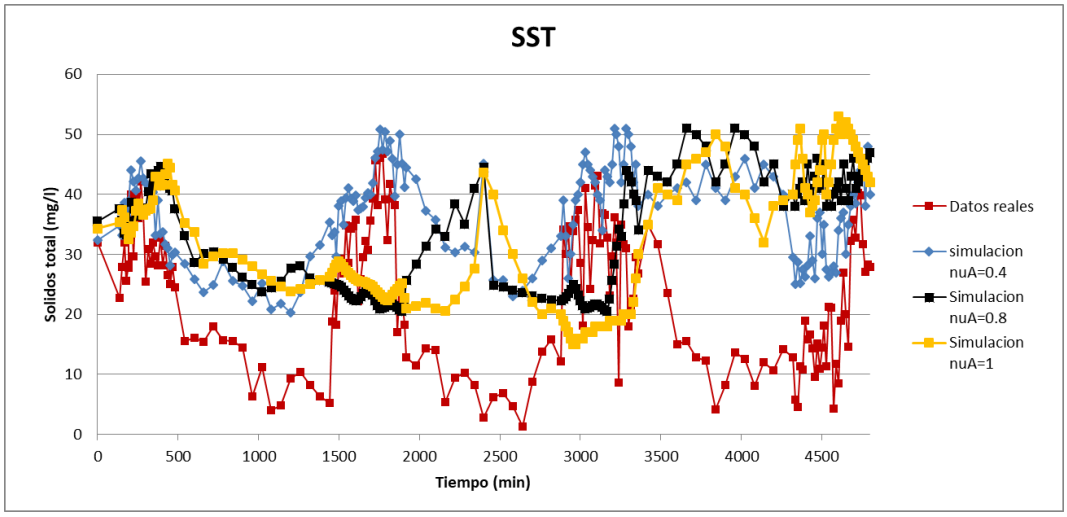

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion nug=0.4
Simulacion nug=0.6
Simulacion nug=0.8
Simulacion nug=1

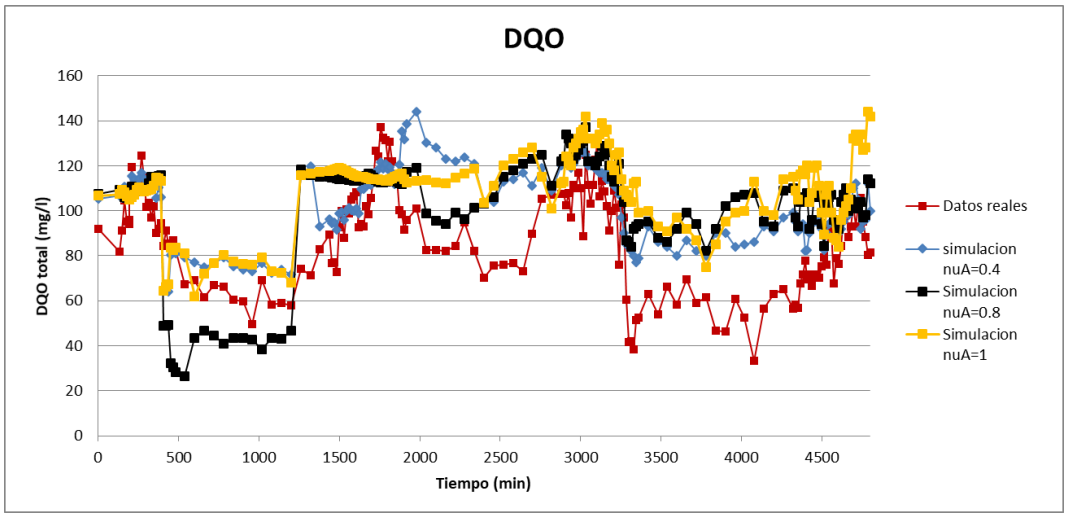

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion nug=0.4
Simulacion nug=0.6
Simulacion nug=0.8
Simulacion nug=1

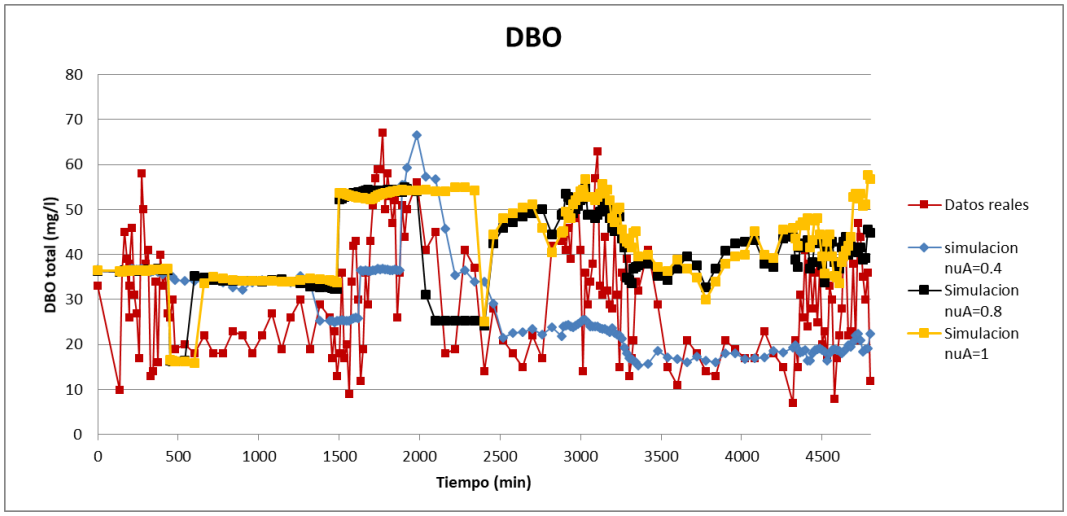

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion nug=0.4
Simulacion nug=0.6
Simulacion nug=0.8
Simulacion nug=1

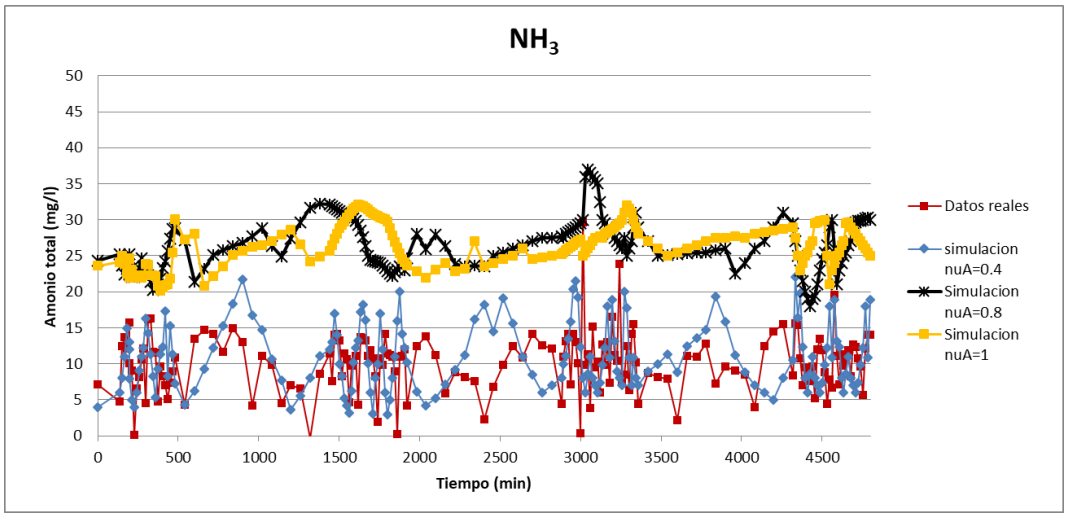


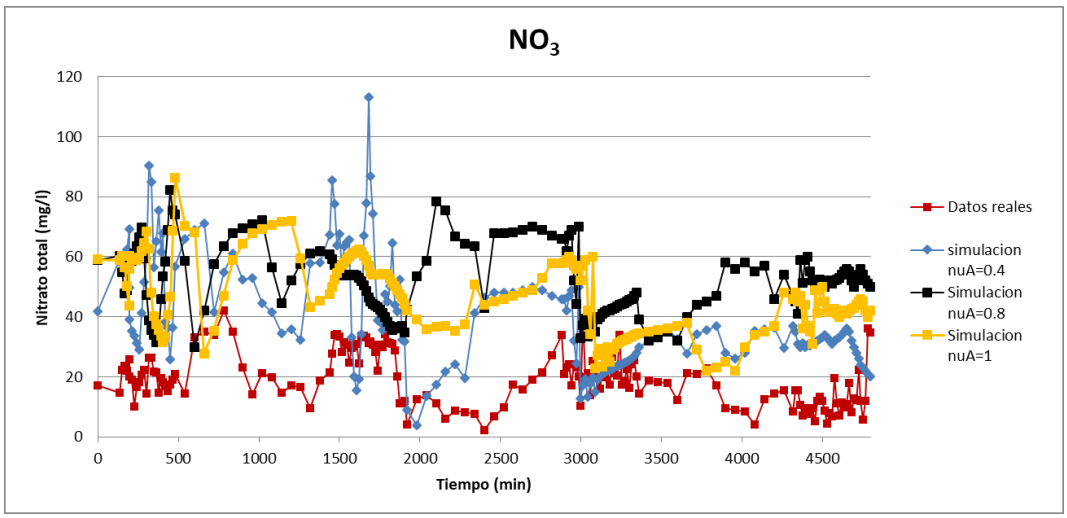
ESTUDIO DEL COEFICIENTE μA

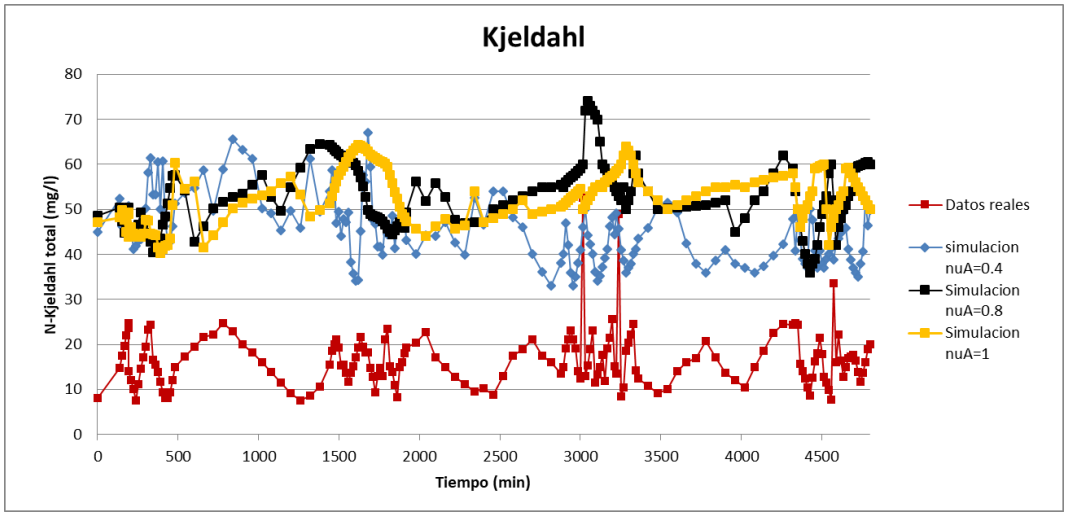




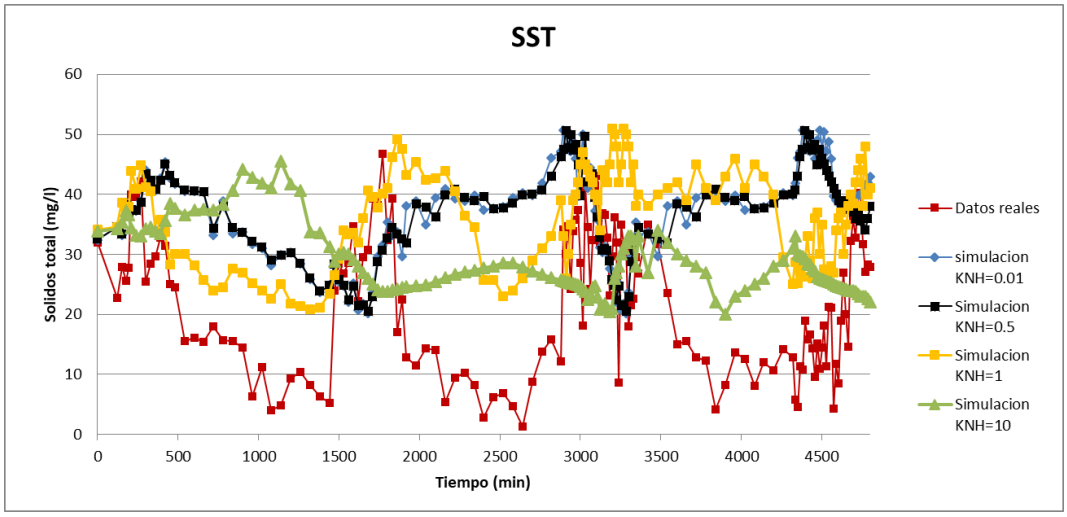

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion nuA=0.4
Simulacion nuA=0.8
Simulacion nuA=1

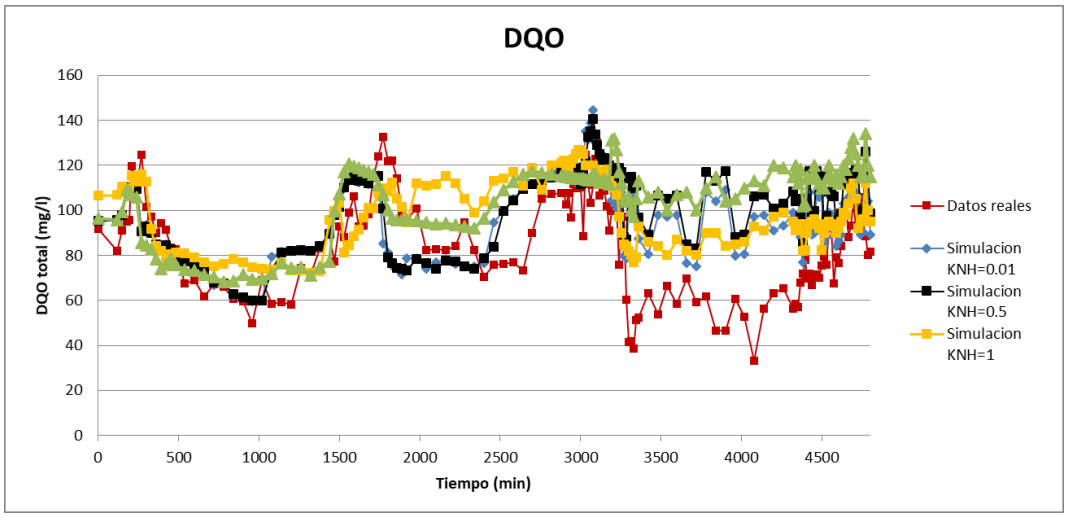

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion nuA=0.4
Simulacion nuA=0.8
Simulacion nuA=1

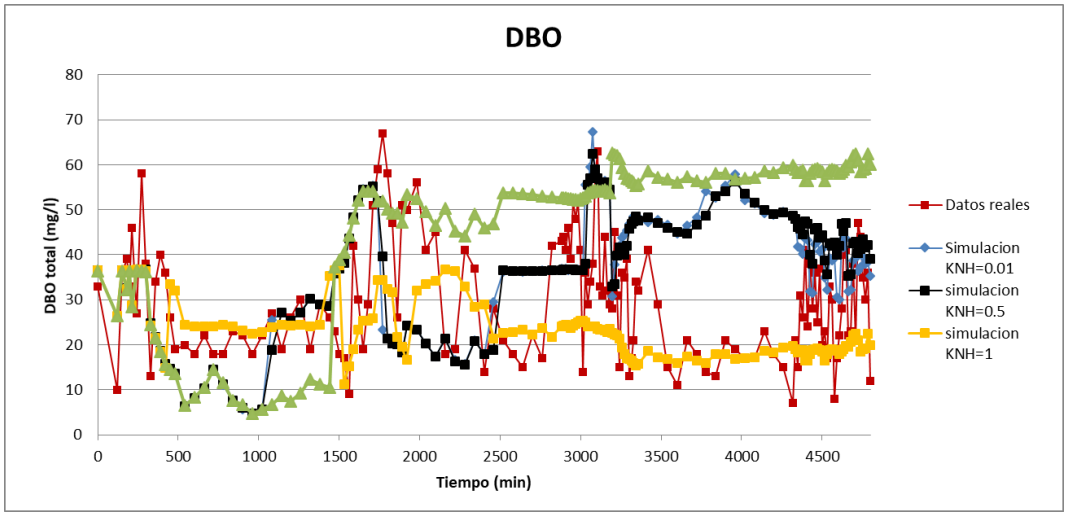

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion nuA=0.4
Simulacion nuA=0.8
Simulacion nuA=1

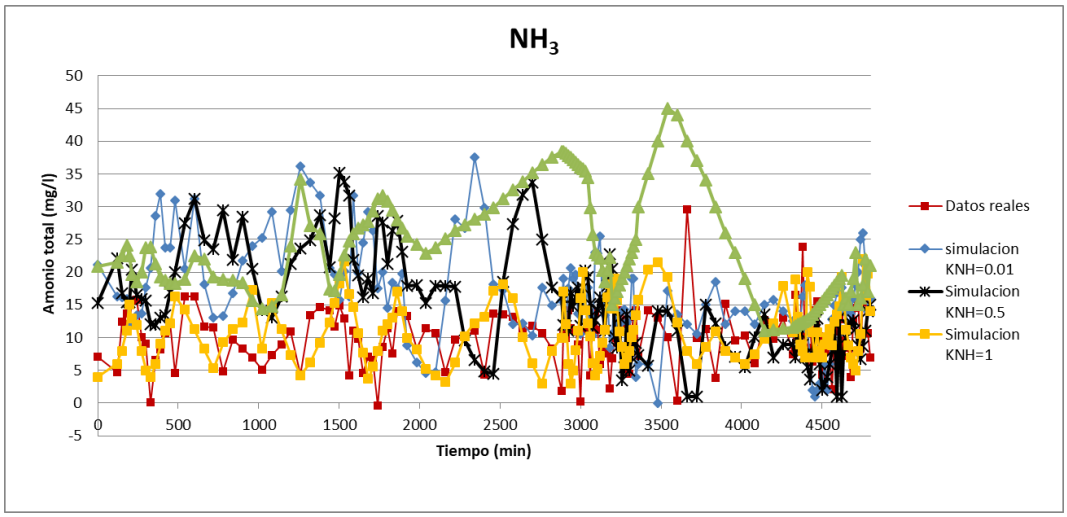


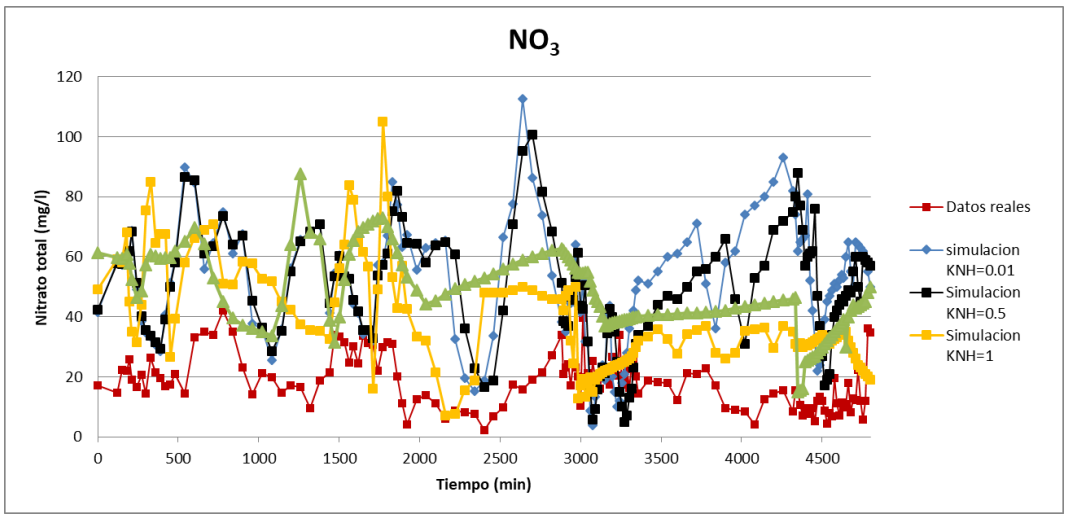
ESTUDIO DEL COEFICIENTE KNH

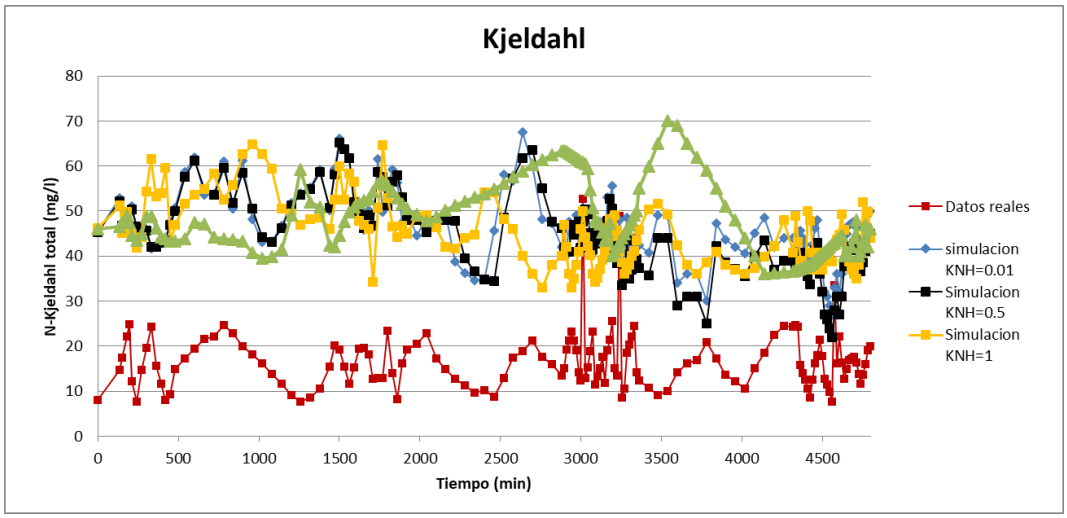




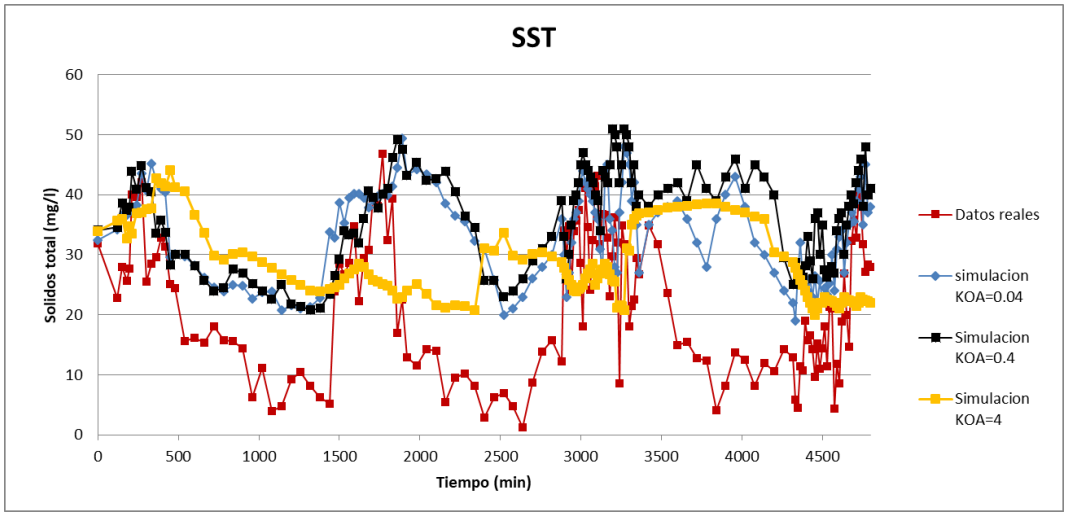

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
Simulacion KNH=0.01
simulacion KNH=0.5
simulacion KNH=1

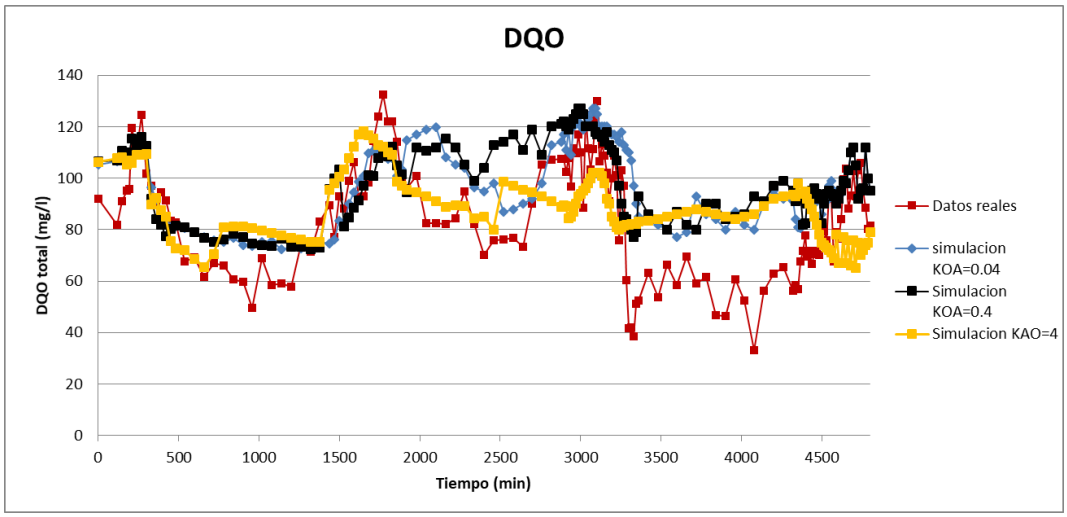

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion KNH=0.01
Simulacion KNH=0.5
Simulacion KNH=1

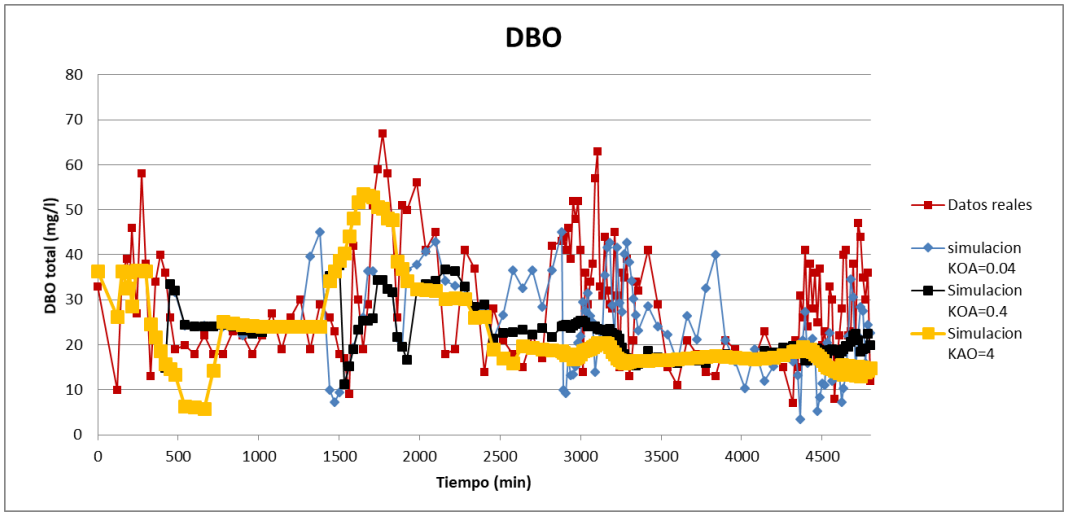

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion KNH=0.01
Simulacion KNH=0.5
Simulacion KNH=1

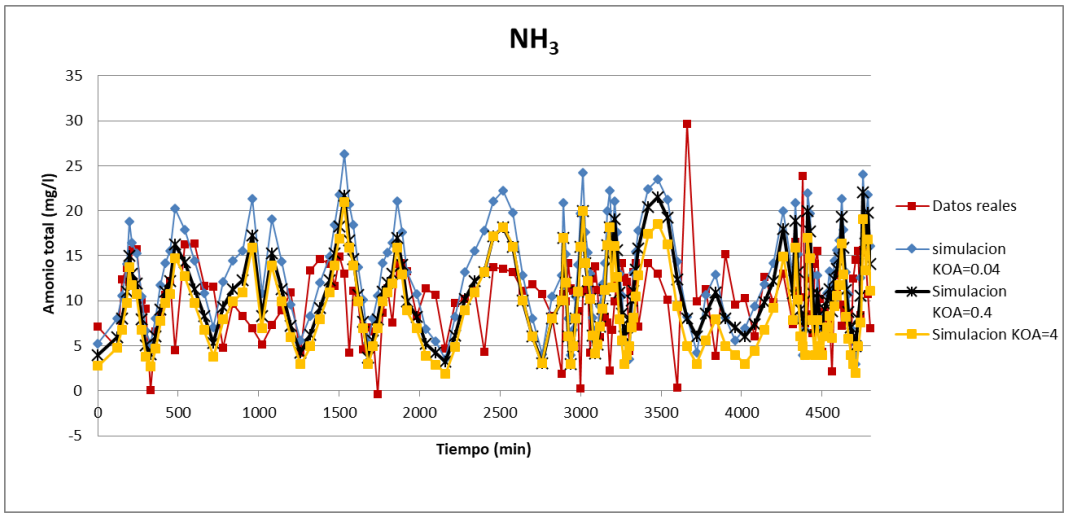


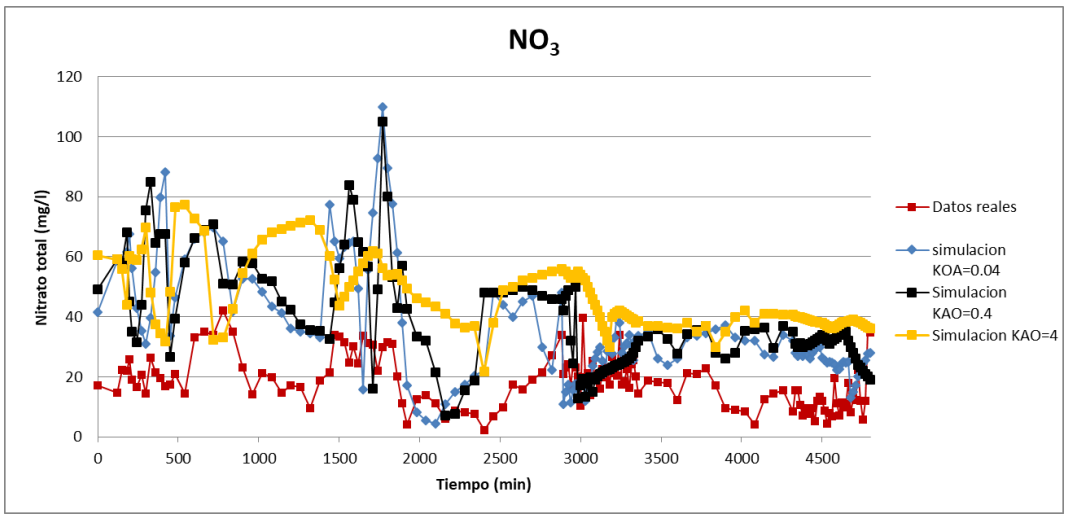
ESTUDIO DEL COEFICIENTE KOA

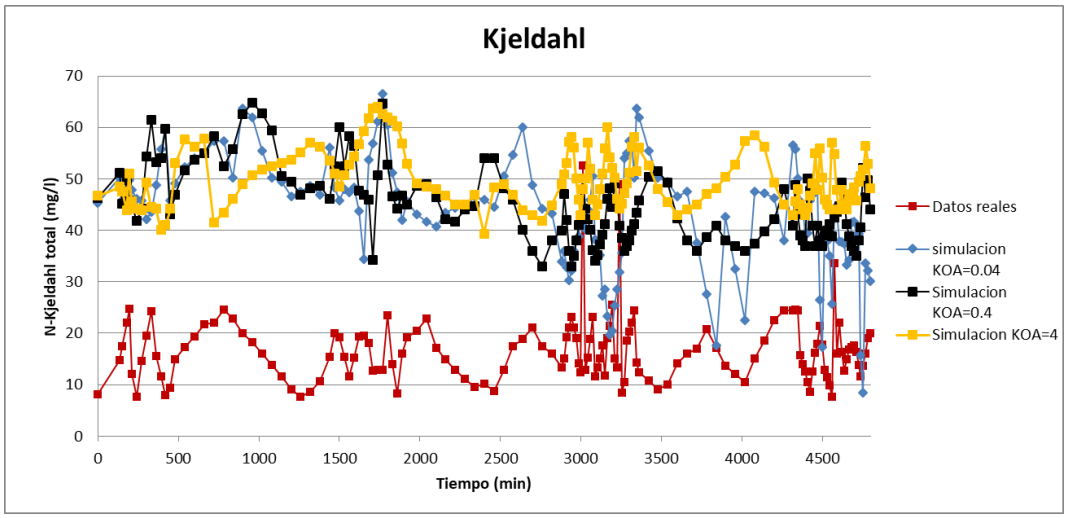




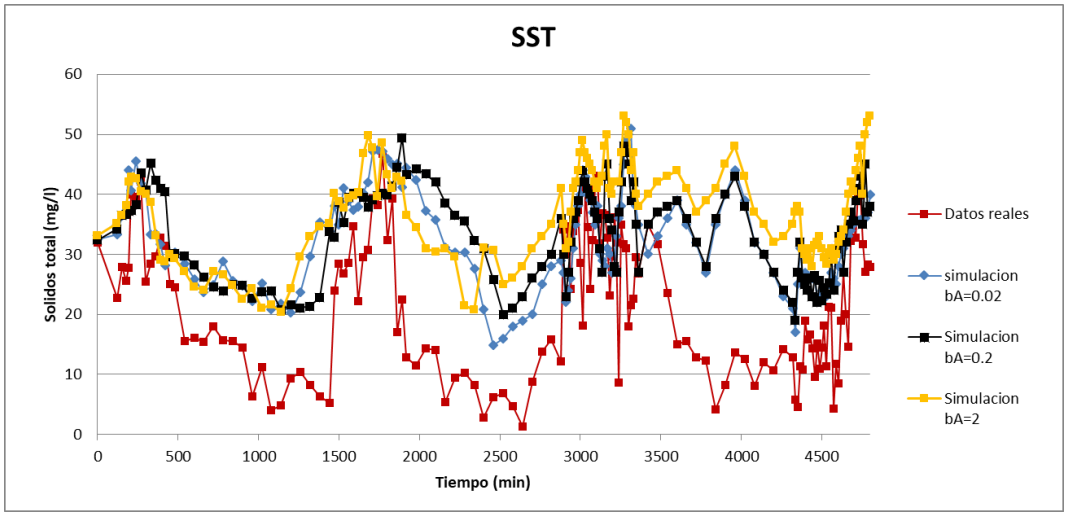

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion KOA=0.04
Simulacion KOA=0.4
Simulacion KAO=4

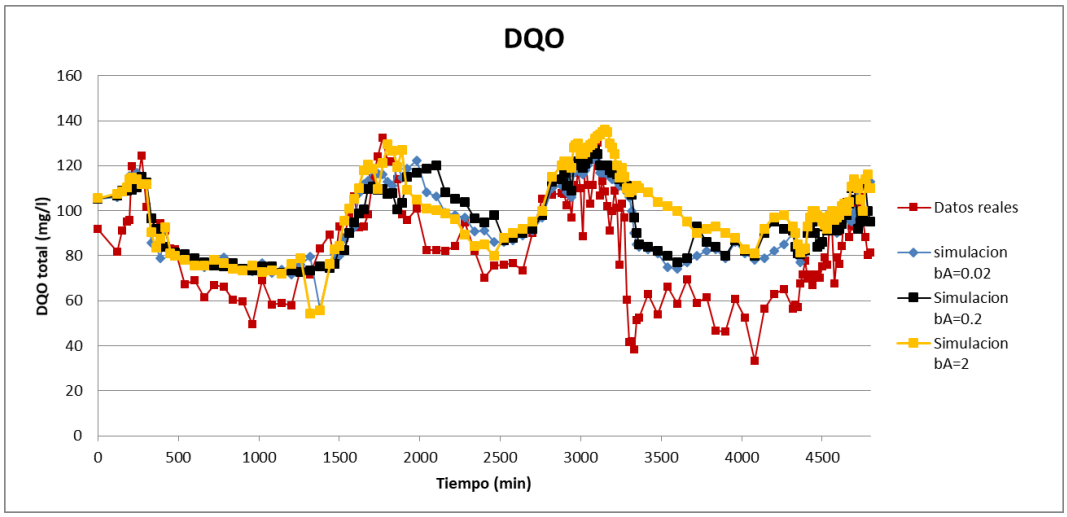

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion KOA=0.04
Simulacion KOA=0.4
Simulacion KOA=4

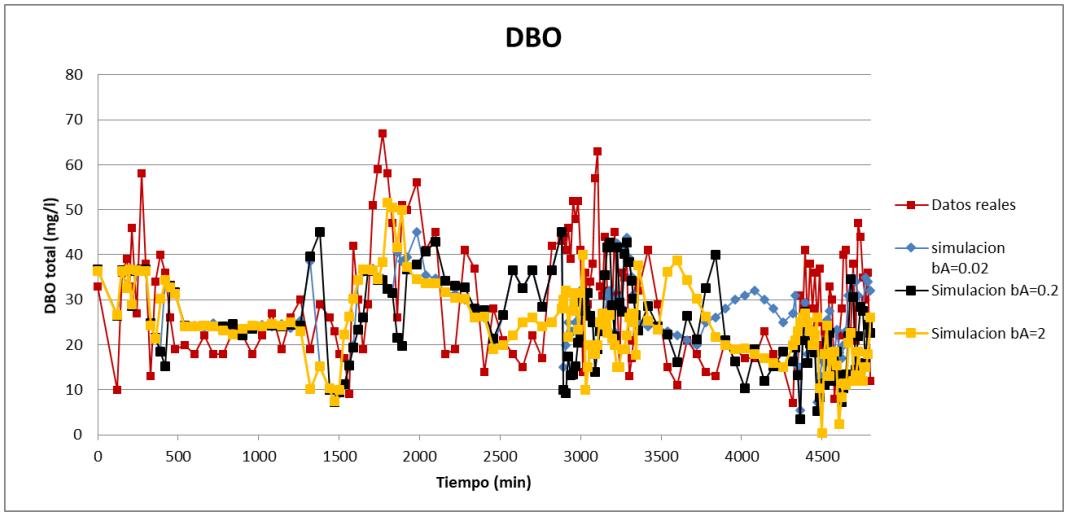

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion KOA=0.04
Simulacion KAO=0.4
Simulacion KAO=4

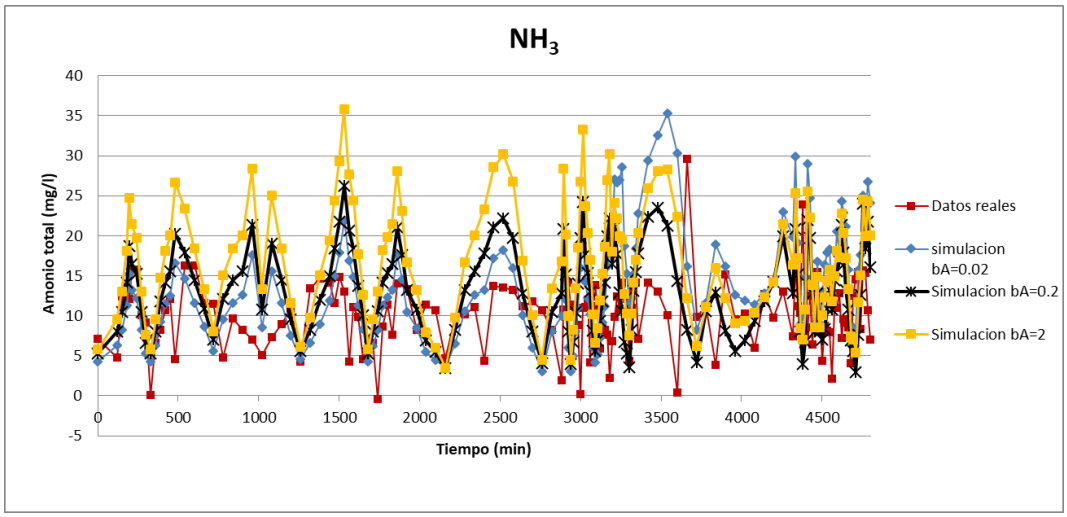


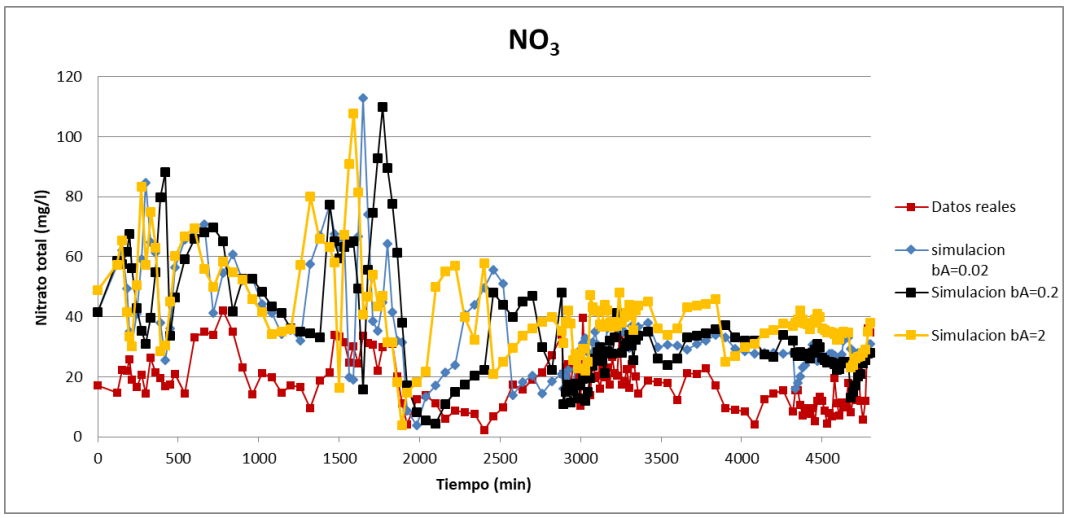
ESTUDIO DEL COEFICIENTE bA

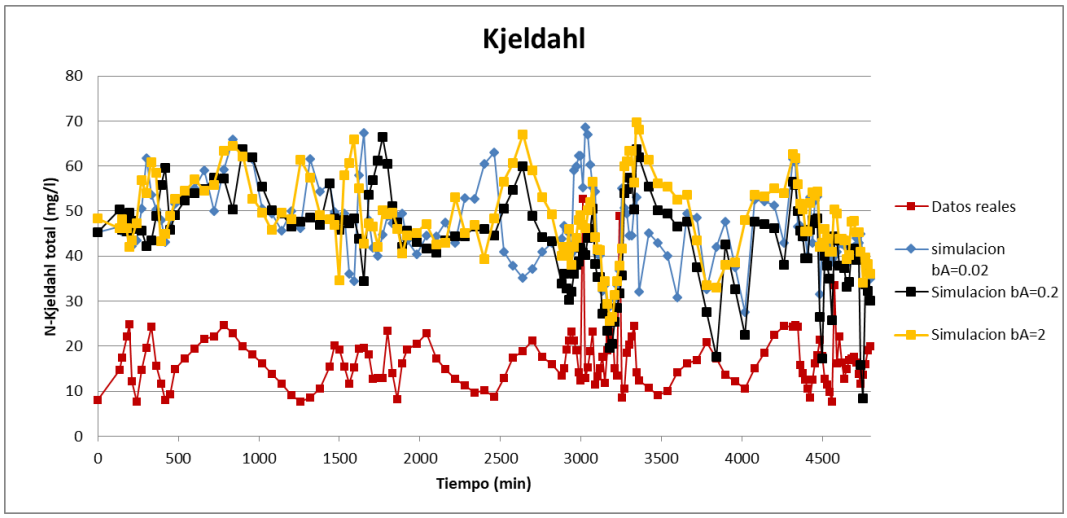




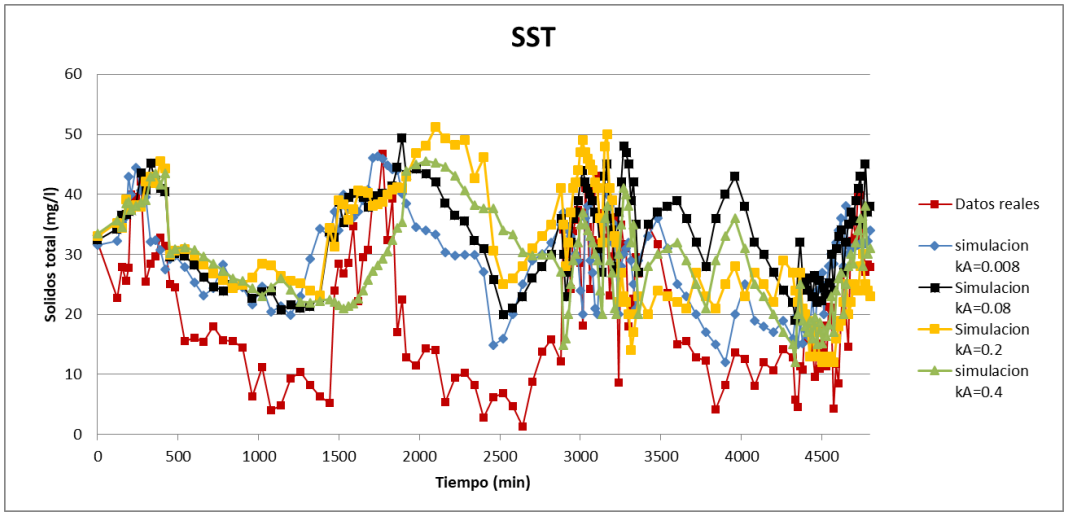

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion bA=0.02
Simulacion bA=0.2
Simulacion bA=2

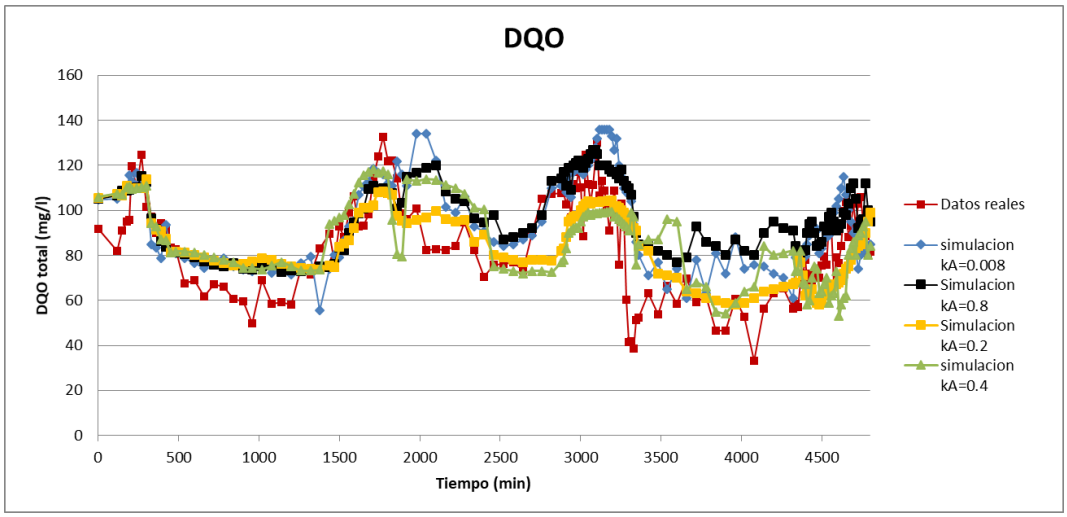

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion bA=0.02
Simulacion bA=0.2
Simulacion bA=2

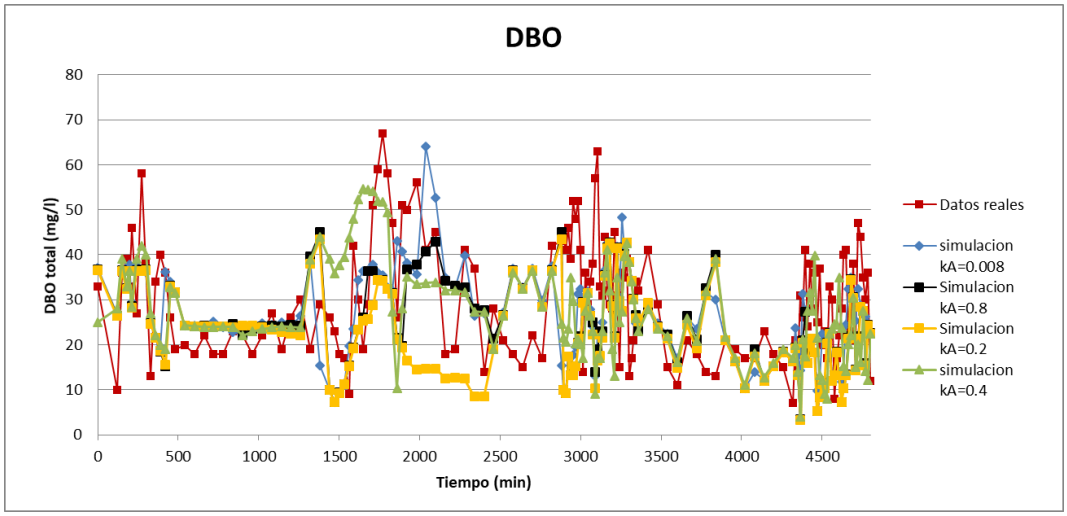

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion bA=0.02
Simulacion bA=0.2
Simulacion bA=2

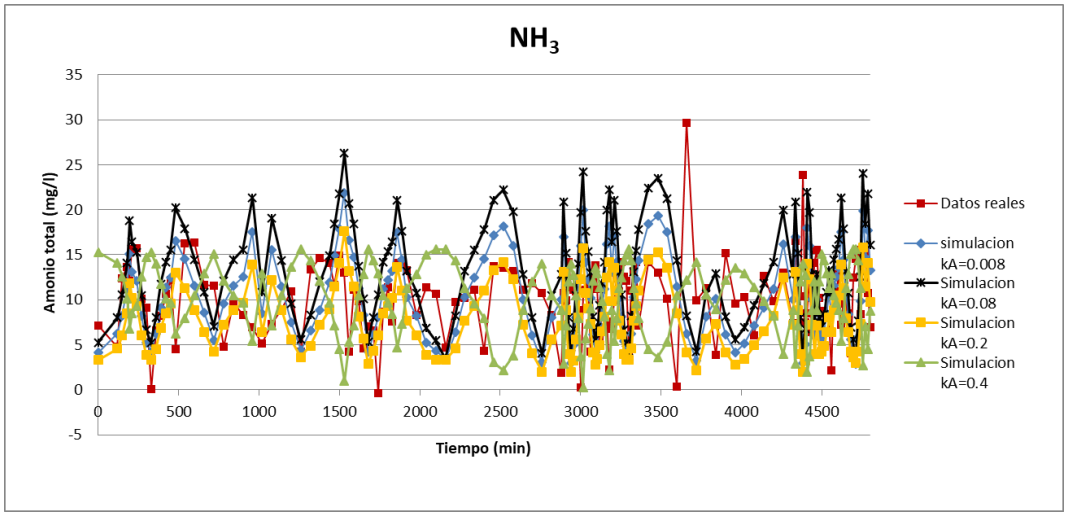


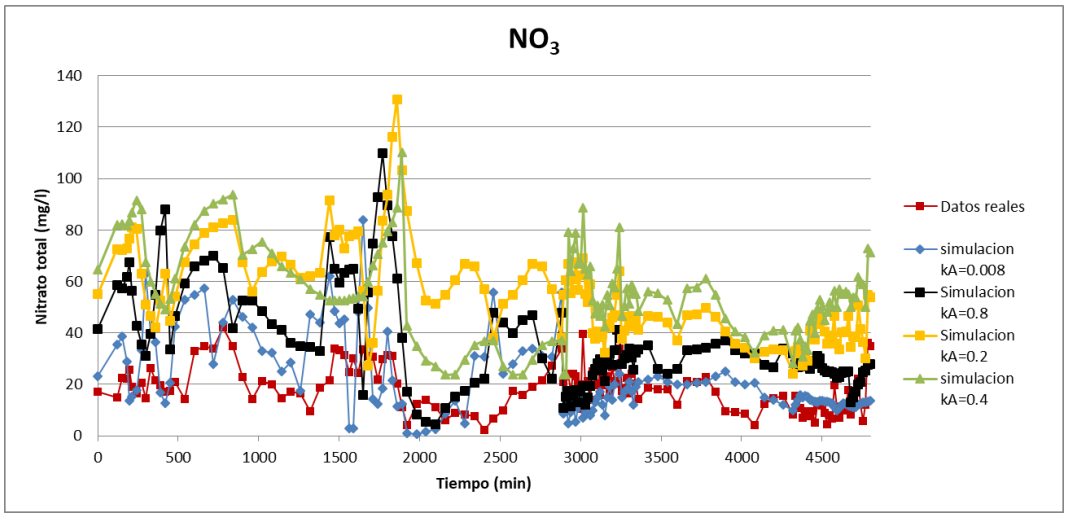
ESTUDIO DEL COEFICIENTE kA

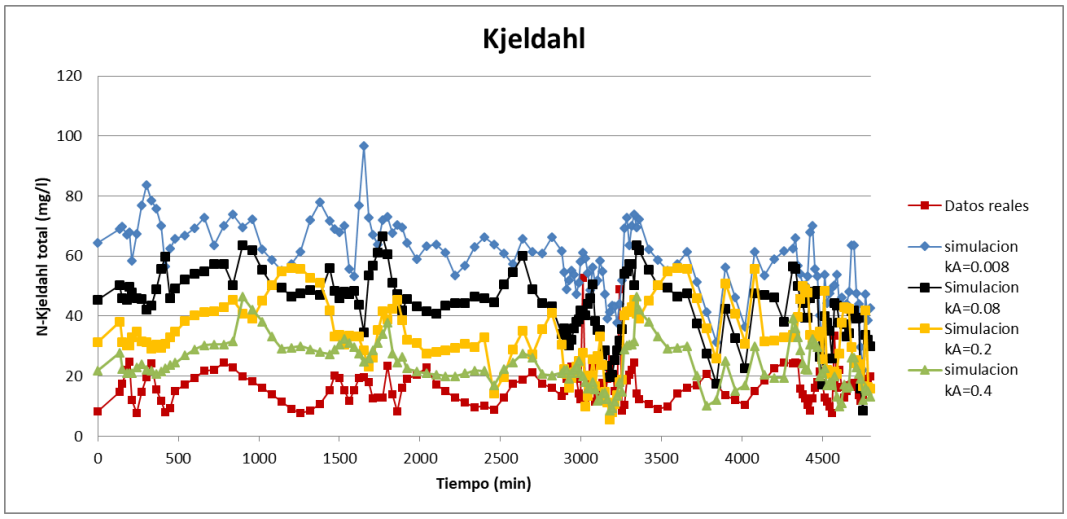




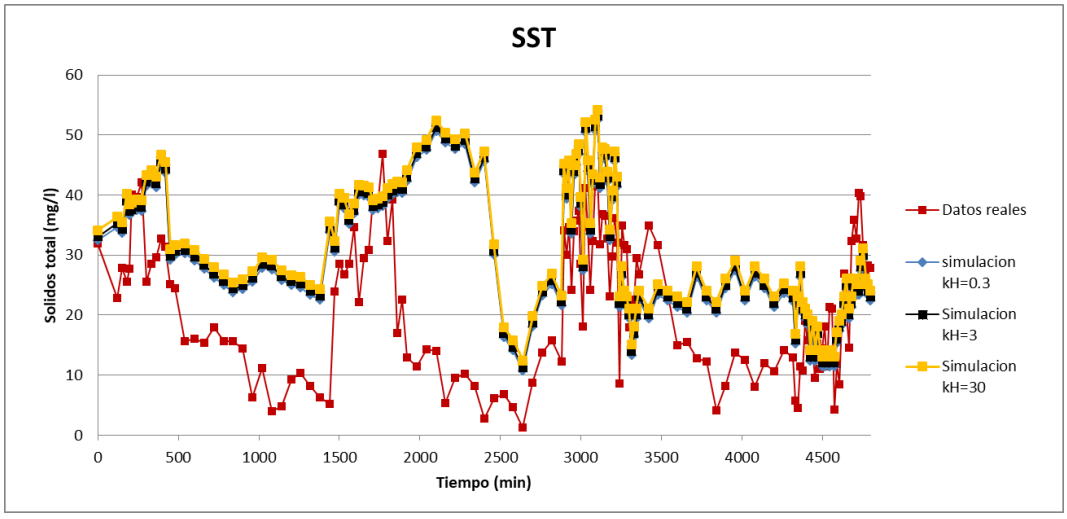

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion kA=0.008
Simulacion kA=0.8
Simulacion kA=0.2
simulacion kA=0.4

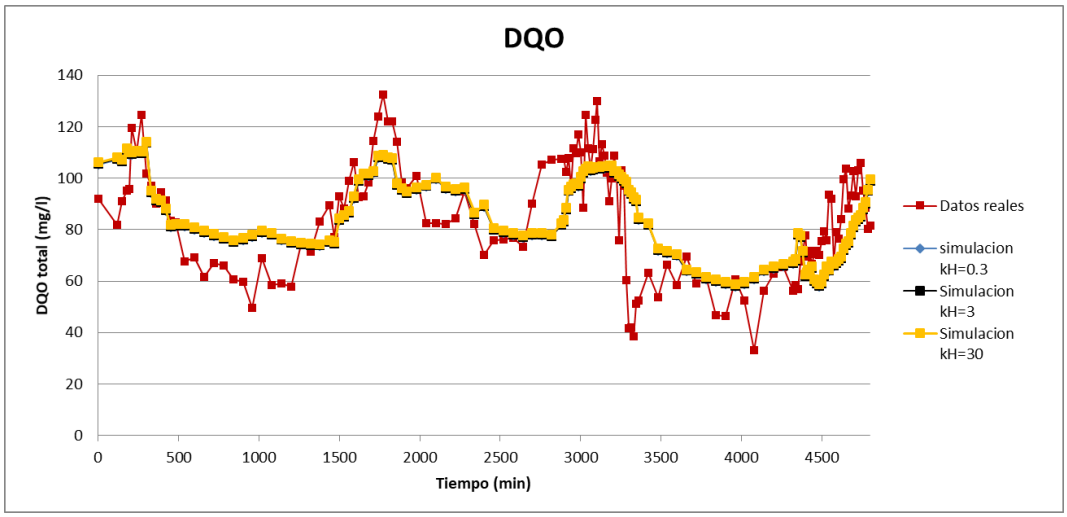

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion kA=0.008
Simulacion kA=0.08
Simulacion kA=0.2
Simulacion kA=0.4

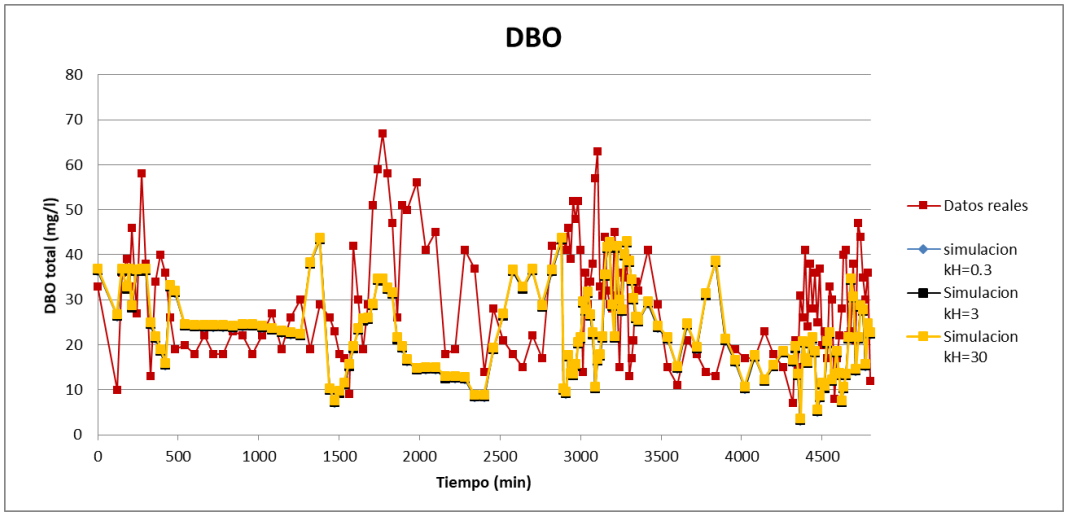

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion kA=0.008
Simulacion kA=0.8
Simulacion kA=0.2
simulacion kA=0.4

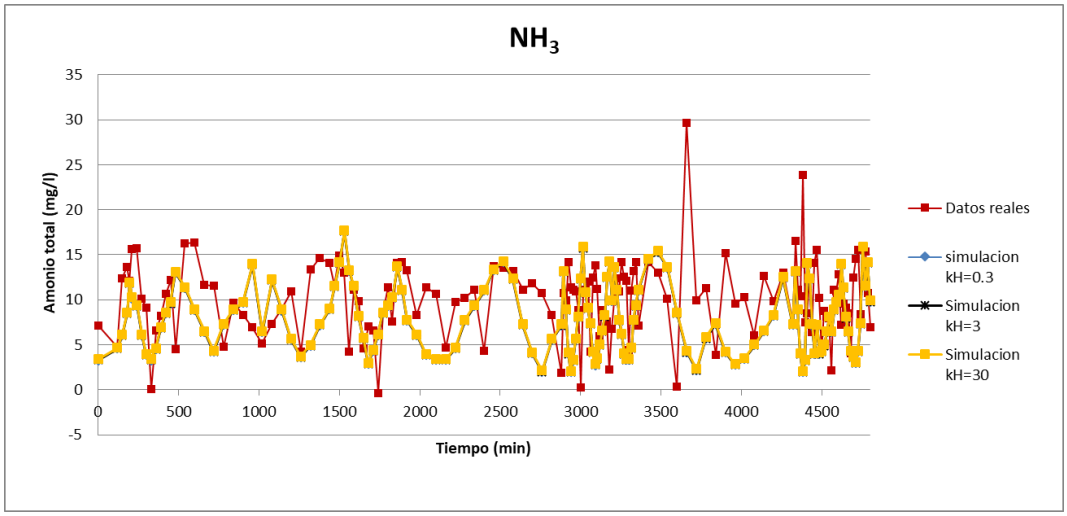


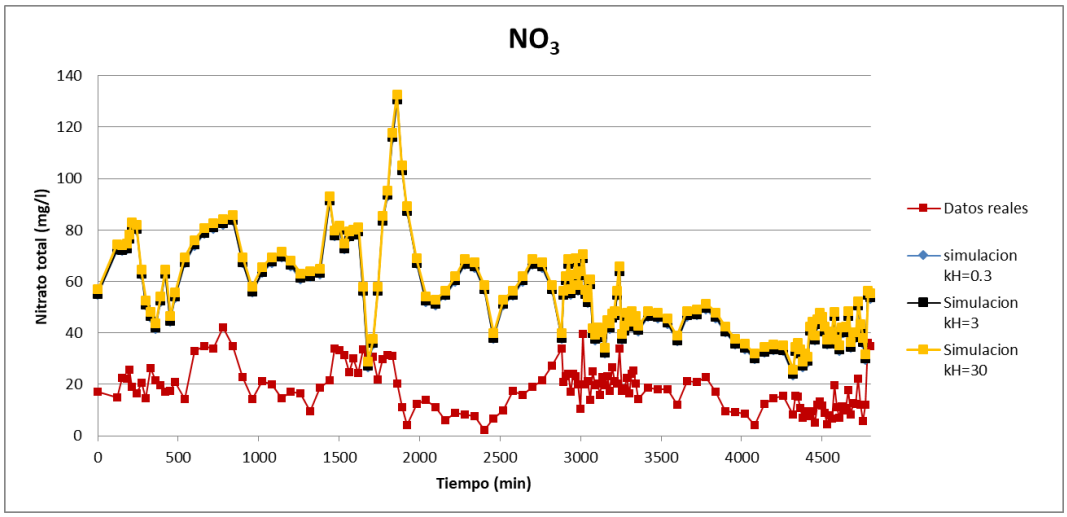
ESTUDIO DEL COEFICIENTE kH

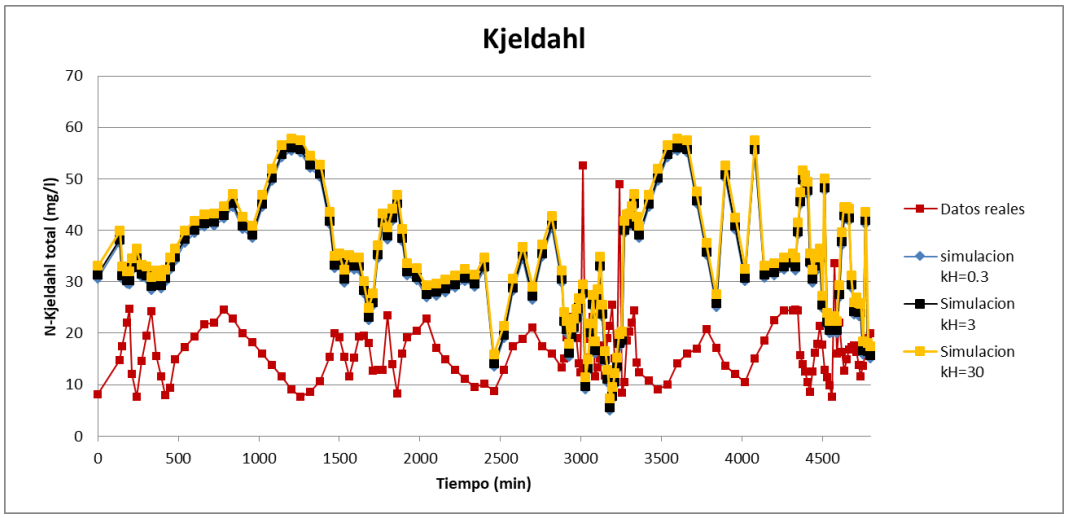




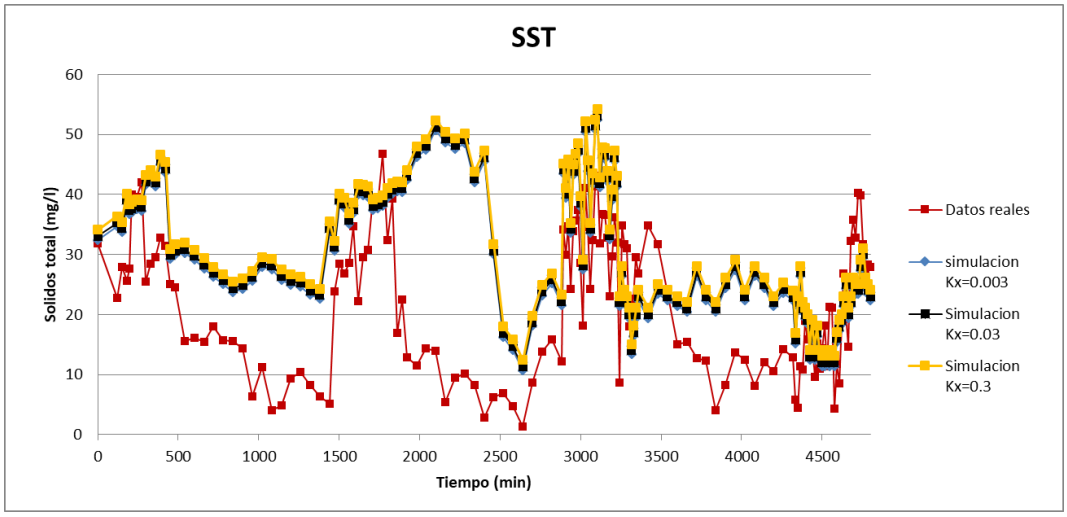

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion kH=0.3
Simulacion kH=3
Simulacion kH=30

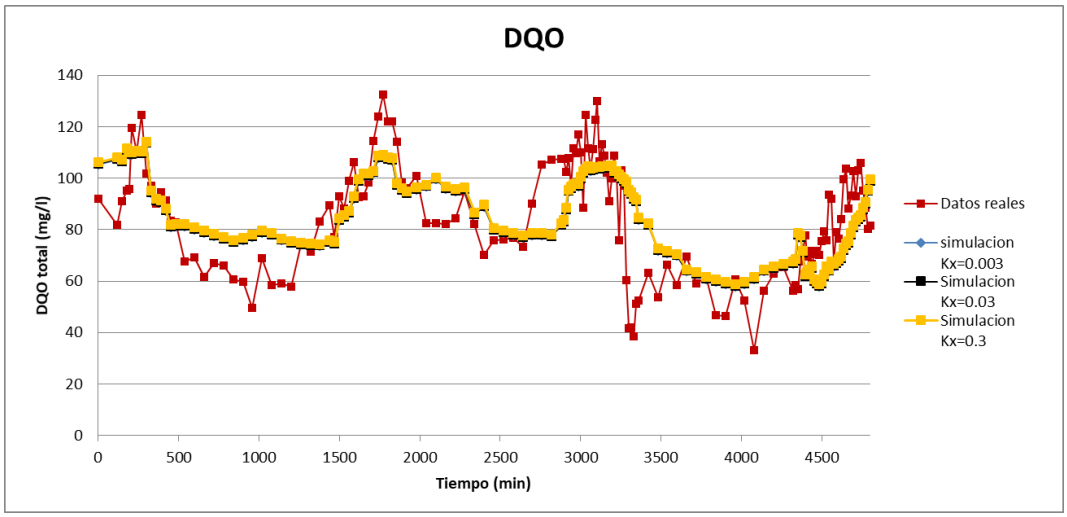

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion kH=0.3
Simulacion kH=3
Simulacion kH=30

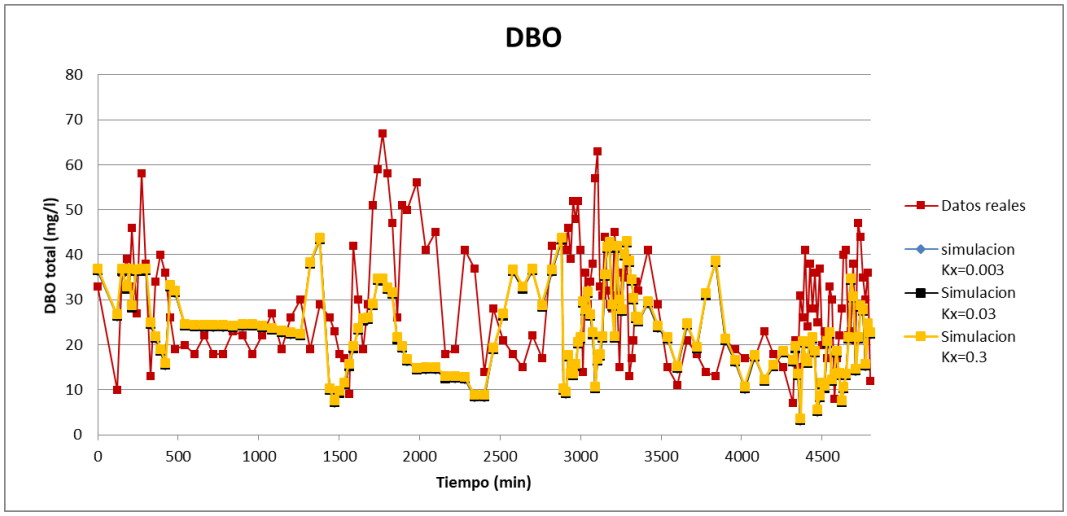

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion kH=0.3
Simulacion kH=3
Simulacion kH=30

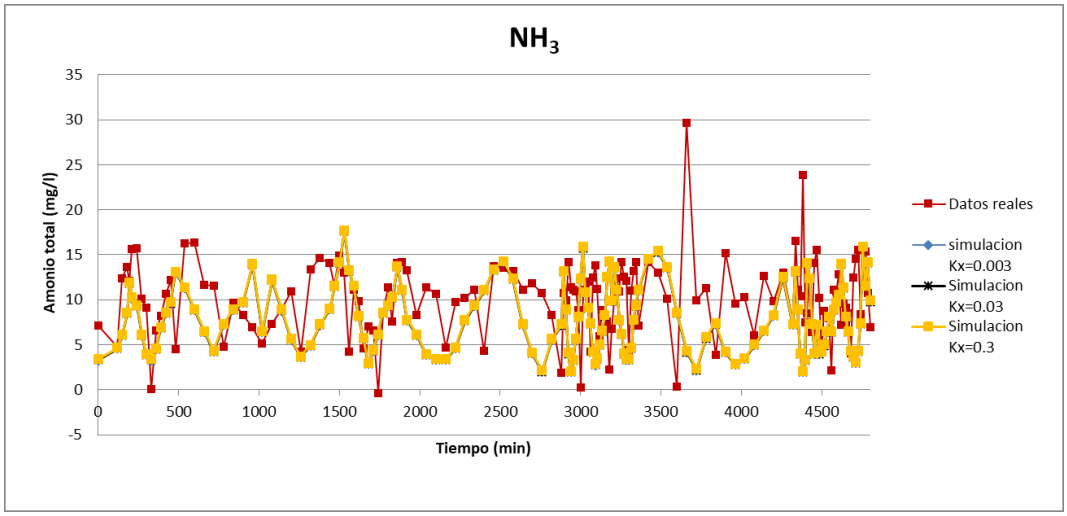


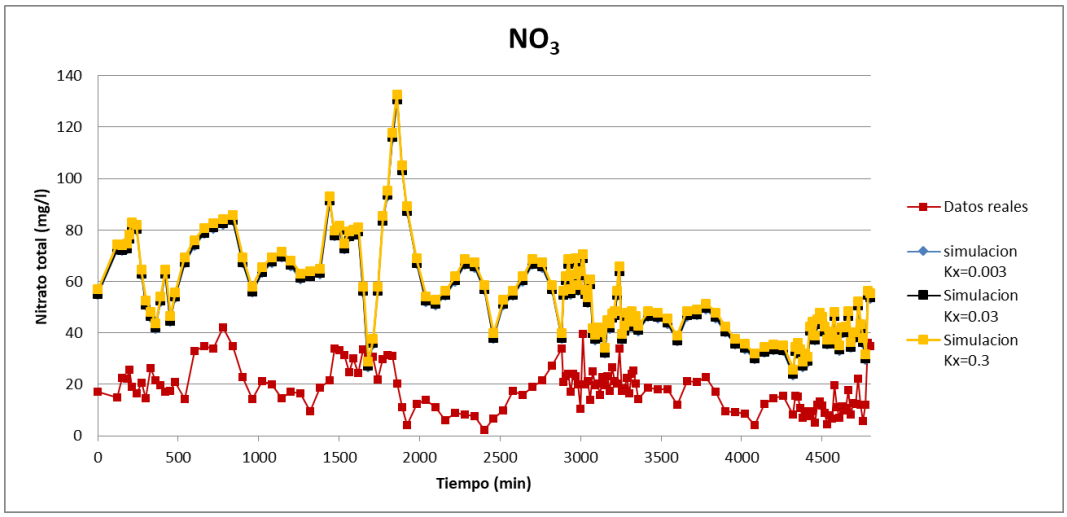
ESTUDIO DEL COEFICIENTE Kx

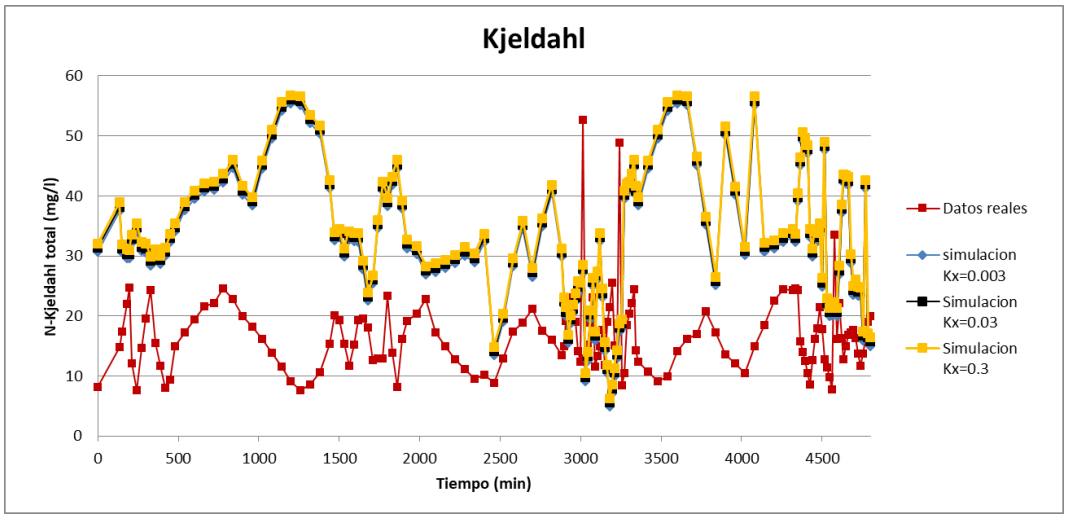




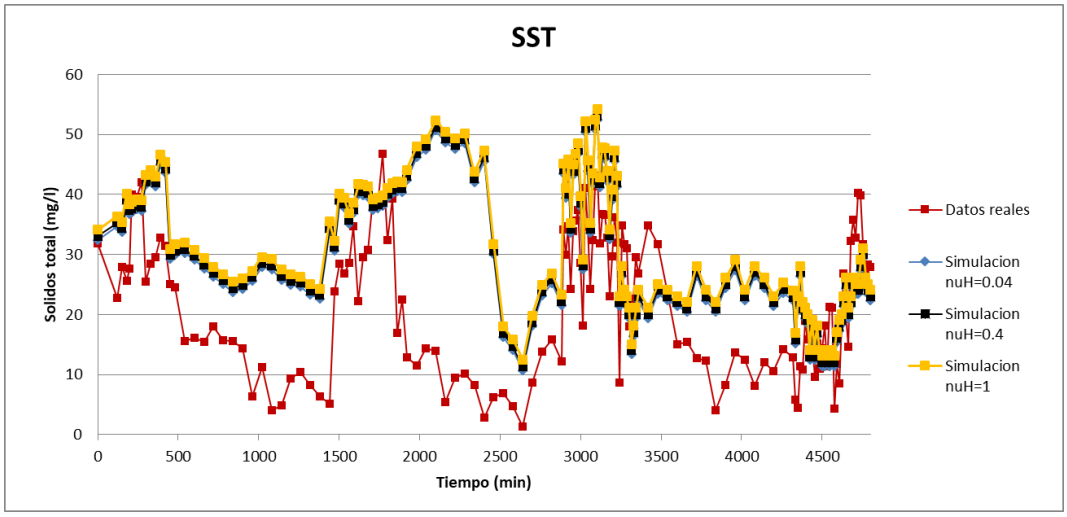

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion Kx=0.003
Simulacion Kx=0.03
Simulacion Kx=0.3

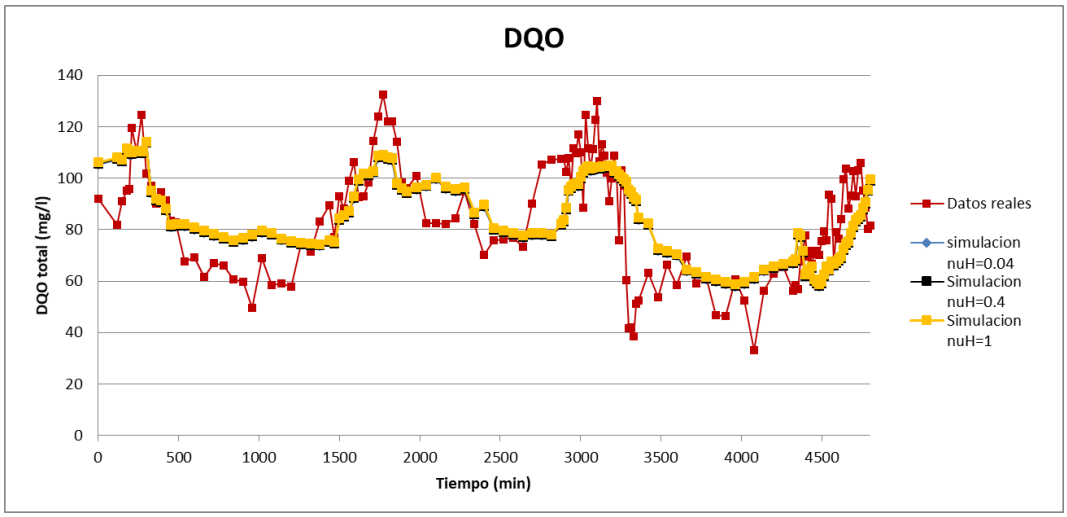

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion Kx=0.003
Simulacion Kx=0.03
Simulacion Kx=0.3

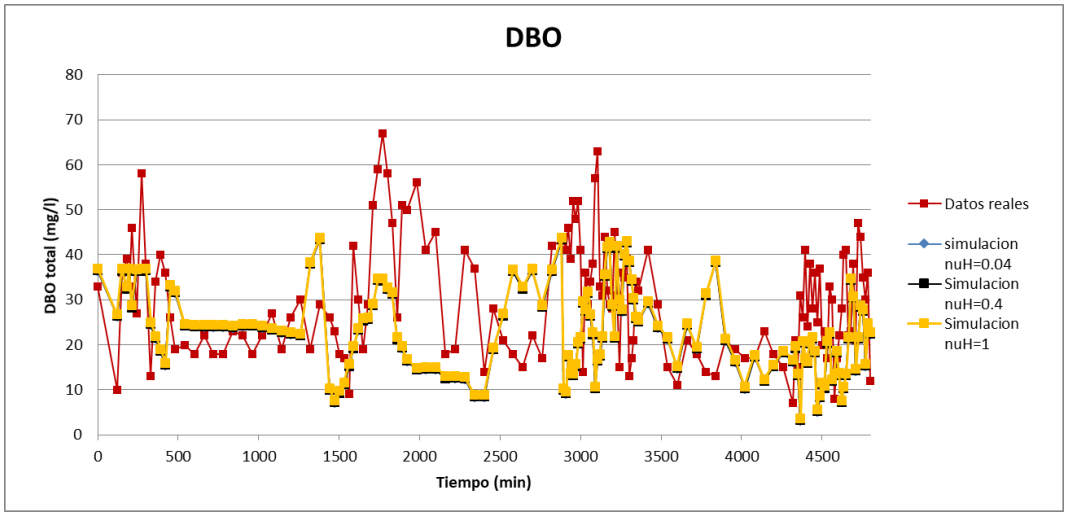

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion Kx=0.003
Simulacion Kx=0.03
Simulacion Kx=0.3

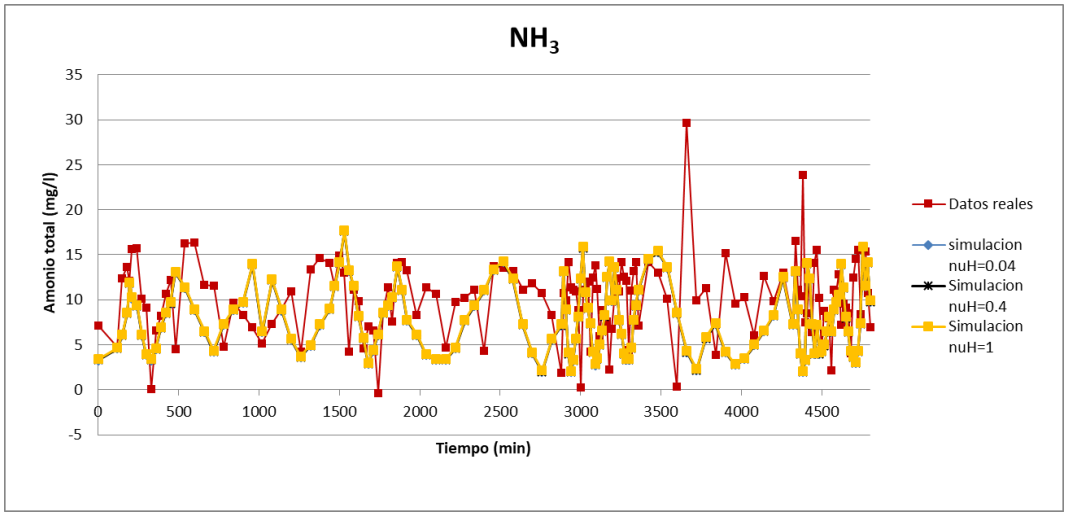


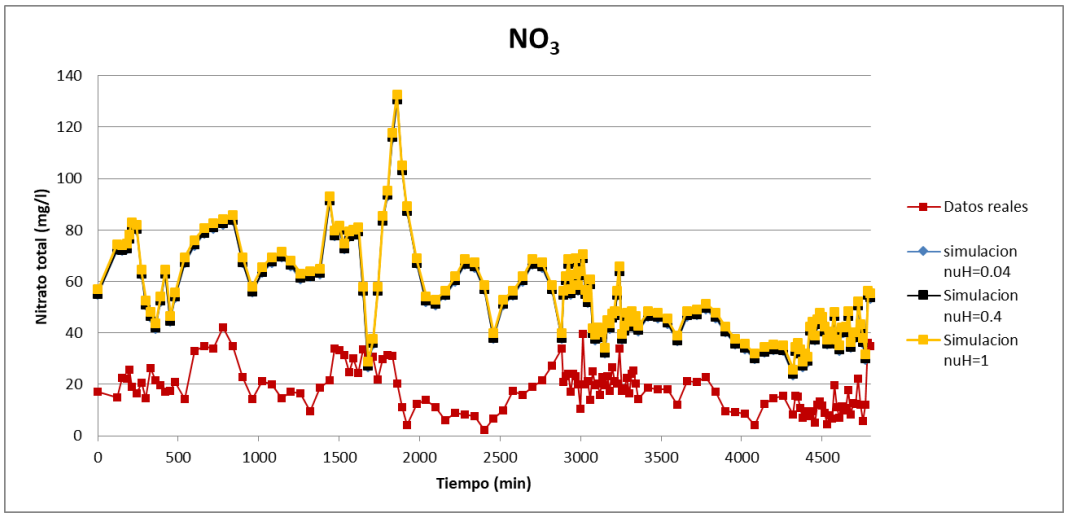
ESTUDIO DEL COEFICIENTE ηH

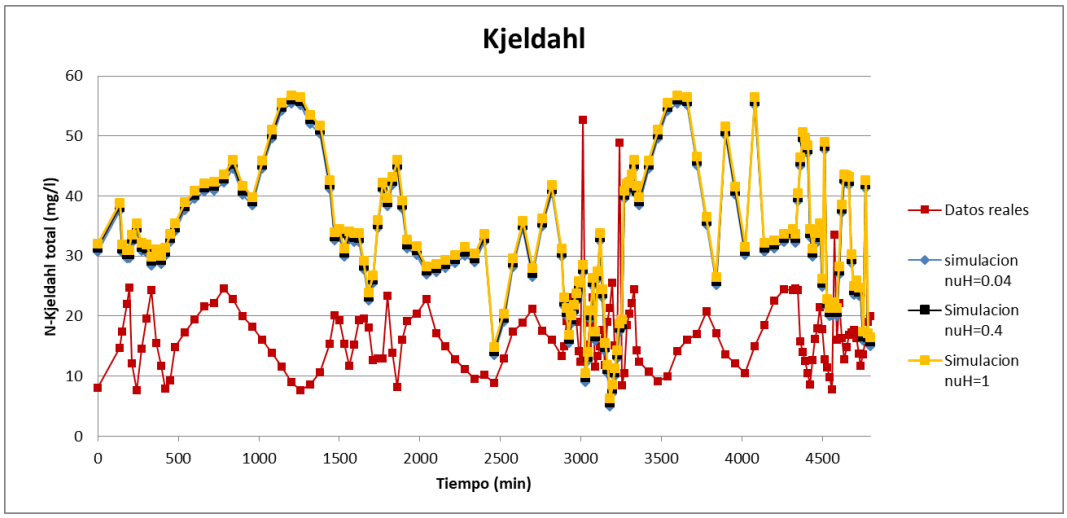




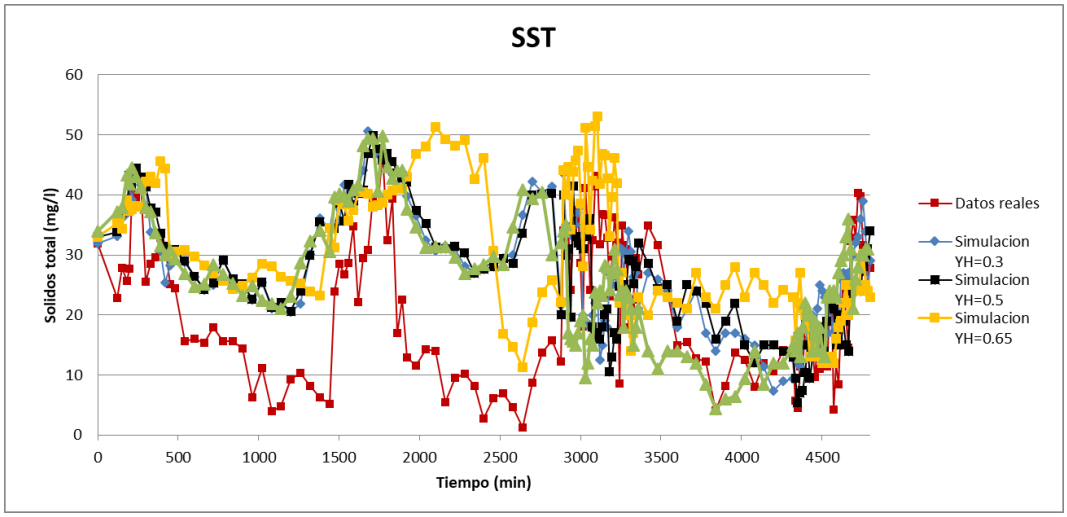

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion nuH=0.04
Simulacion nuH=0.4
Simulacion nuH=1

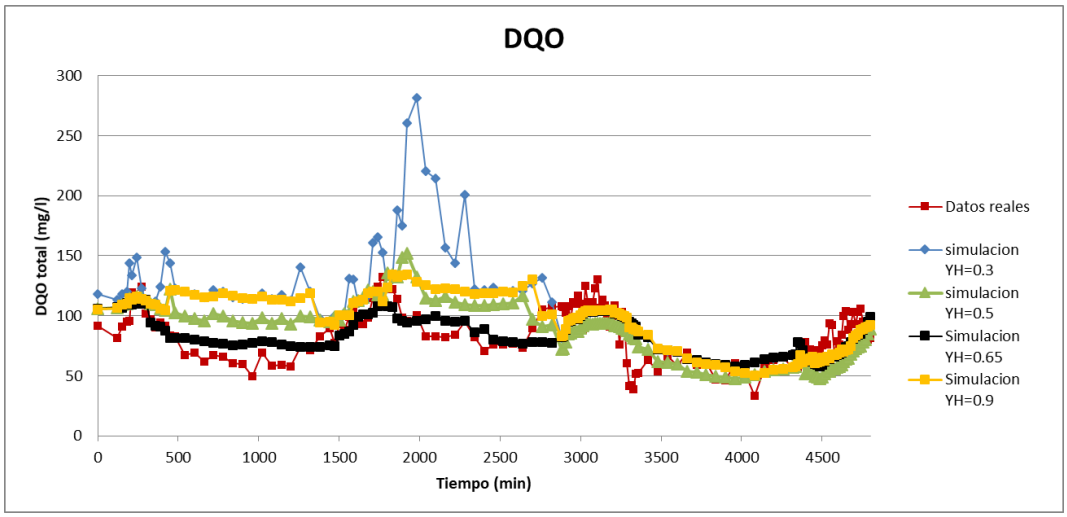

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion nuH=0.04
Simulacion nuH=0.4
Simulacion nuH=1

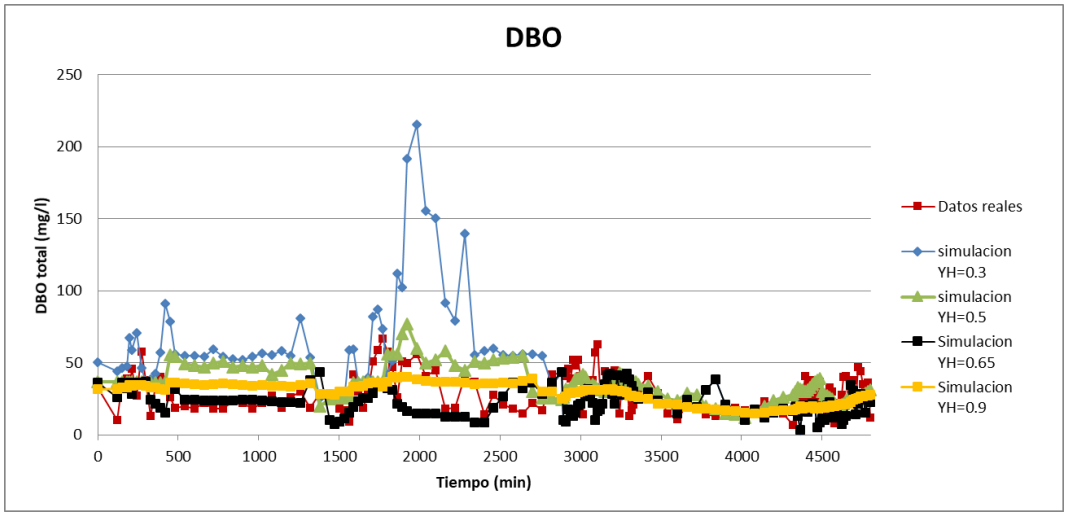

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion nuH=0.04
Simulacion nuH=0.4
Simulacion nuH=1

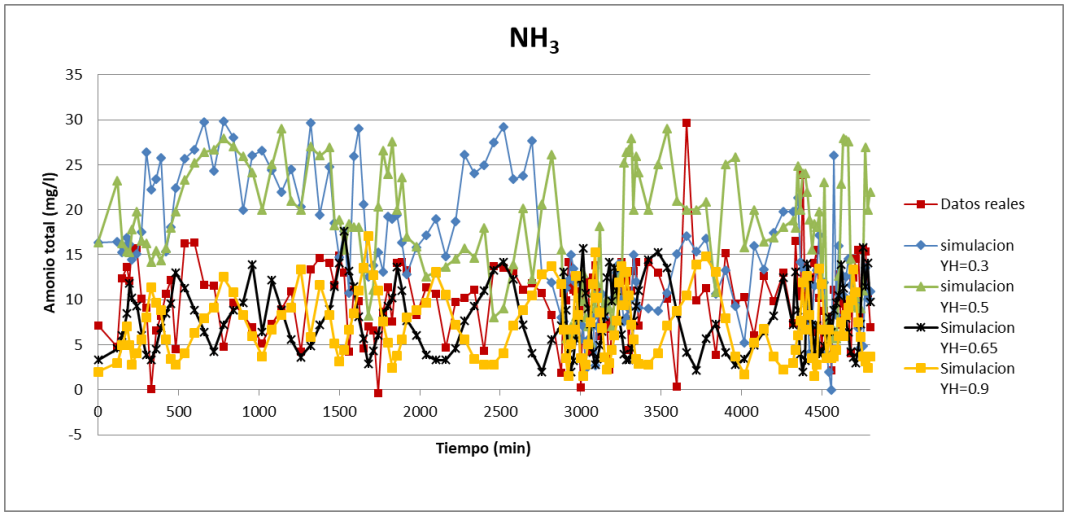


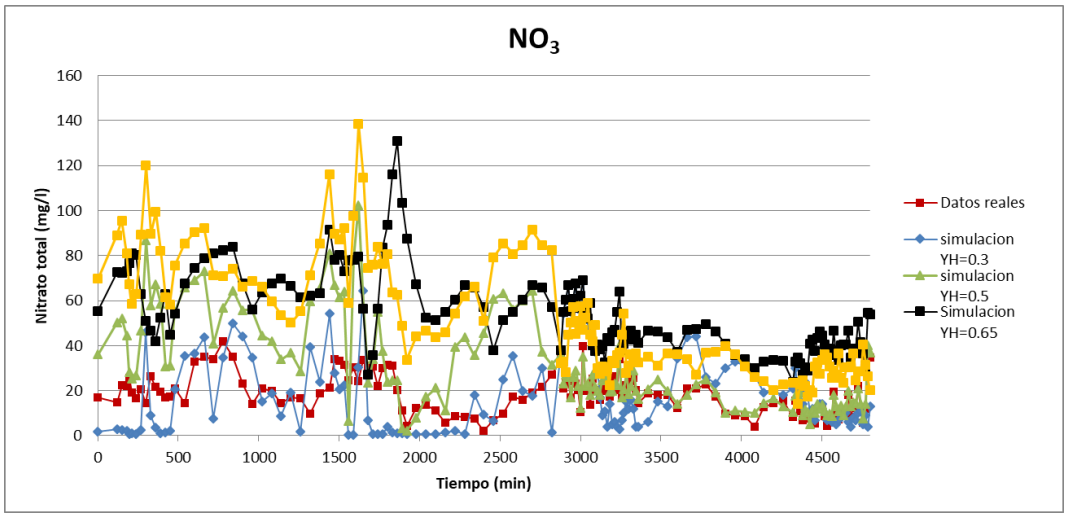
ESTUDIO DEL COEFICIENTE YH

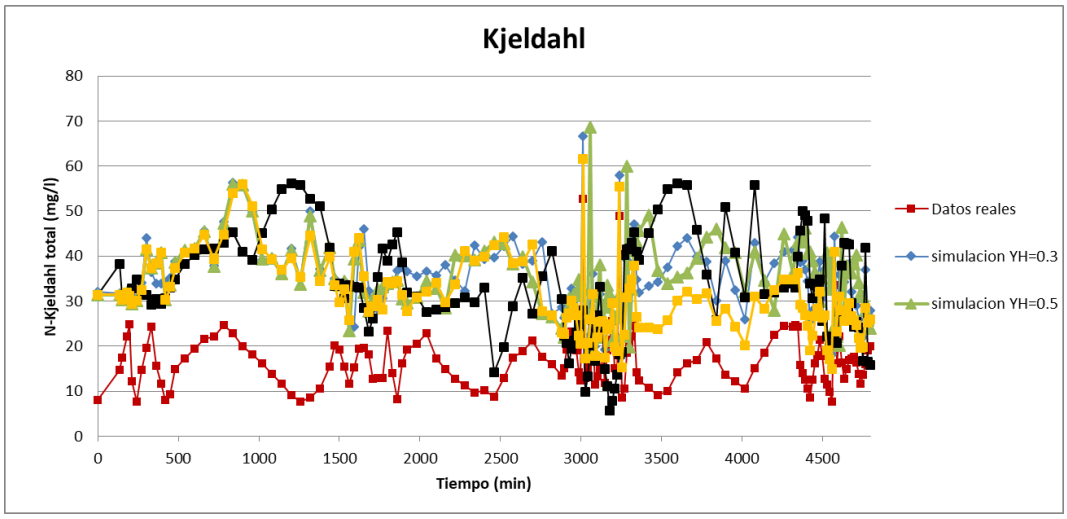




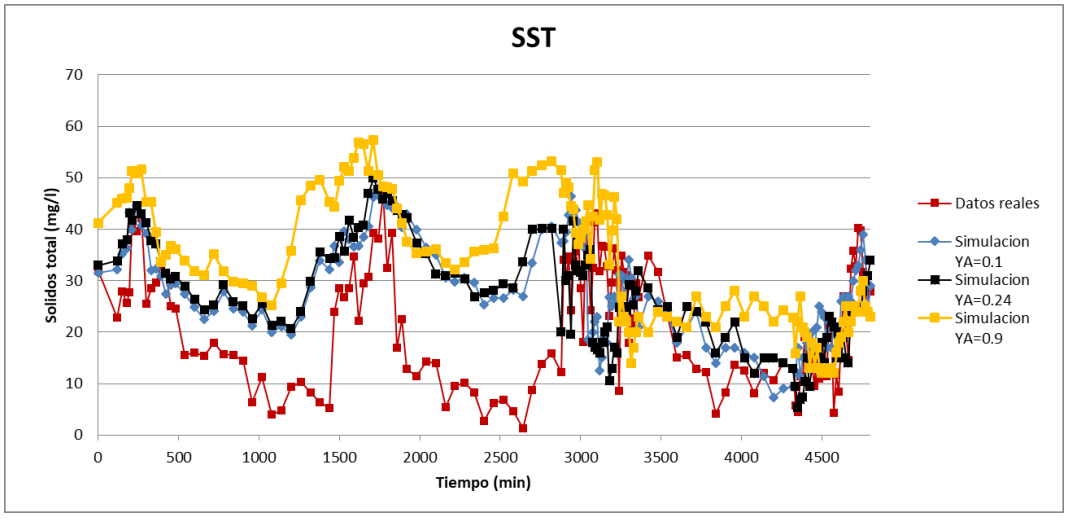

DBO
DBO total (mg/l)
250
200
150
100
50
0
0
500
1000
1500
2000
2500
3000
3500
4000
4500
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion YH=0.3
simulacion YH=0.5
Simulacion YH=0.65
Simulacion YH=0.9

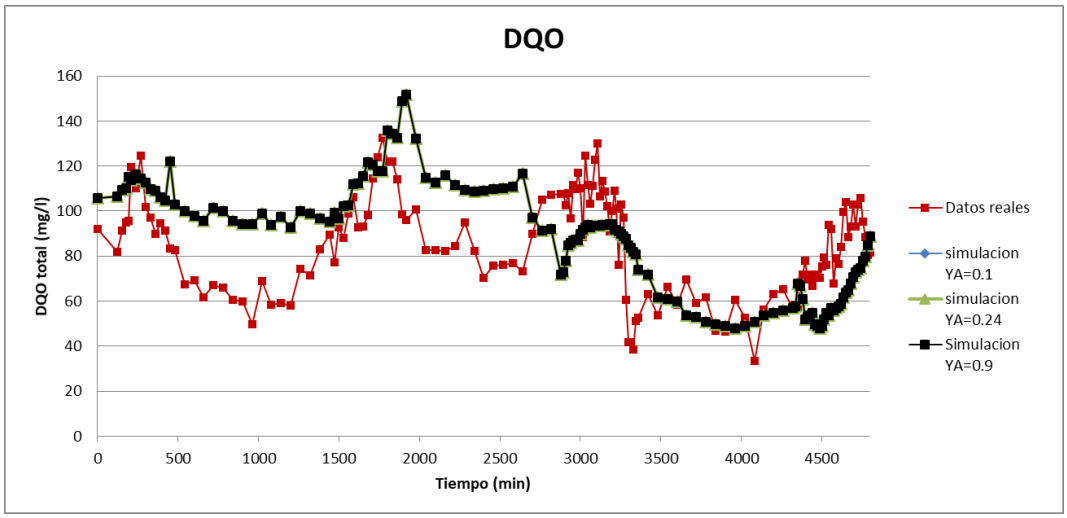

NH3
Amonio total (mg/l)
35
30
25
20
15
10
5
0
-5
0
500
1000
1500
2000
2500
3000
3500
4000
4500
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion YH=0.3
simulacion YH=0.5
Simulacion YH=0.65
Simulacion YH=0.9

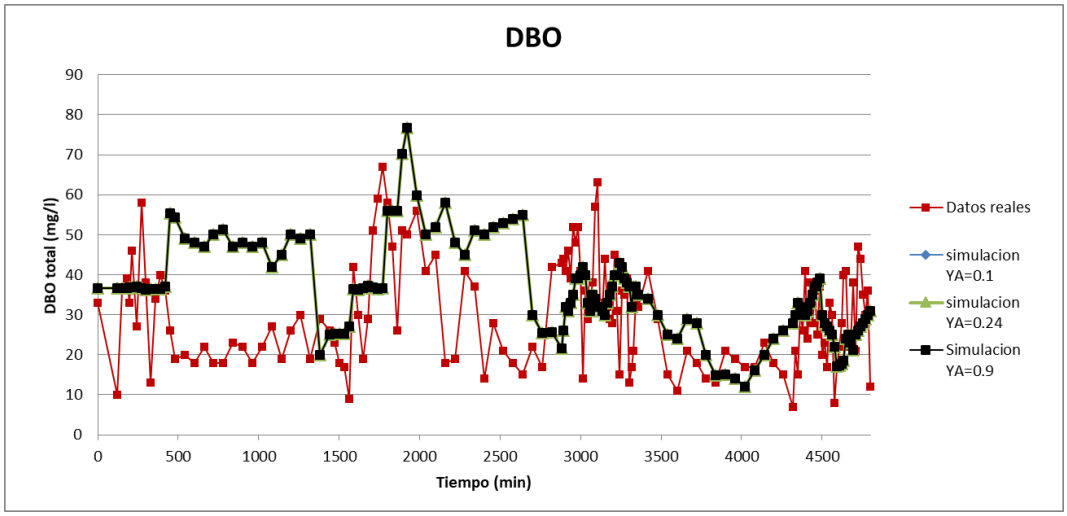

NO3
Nitrato total (mg/l)
160
140
120
100
80
60
40
20
0
0
500
1000
1500
2000
2500
3000
3500
4000
4500
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion YH=0.3
simulacion YH=0.5
Simulacion YH=0.65

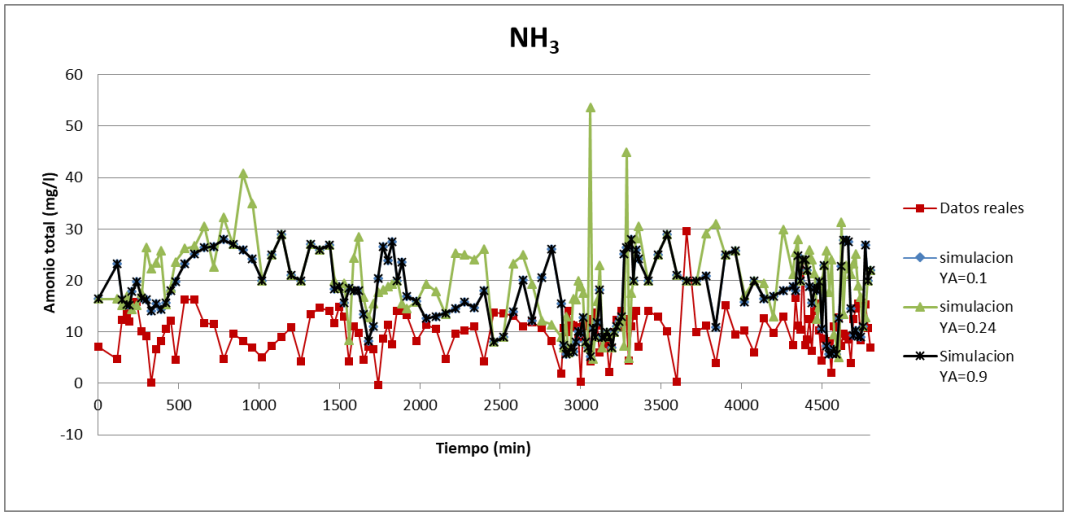


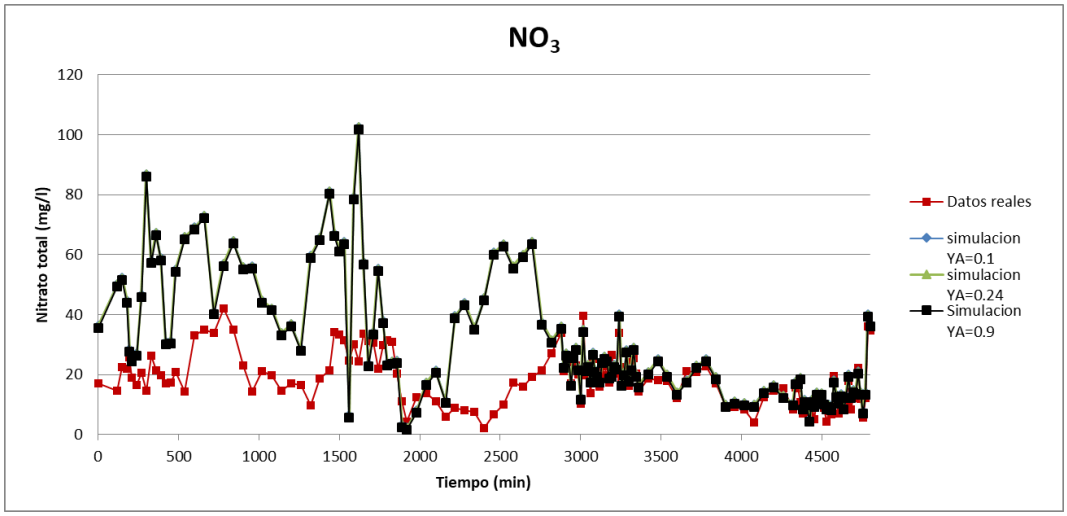
ESTUDIO DEL COEFICIENTE YA

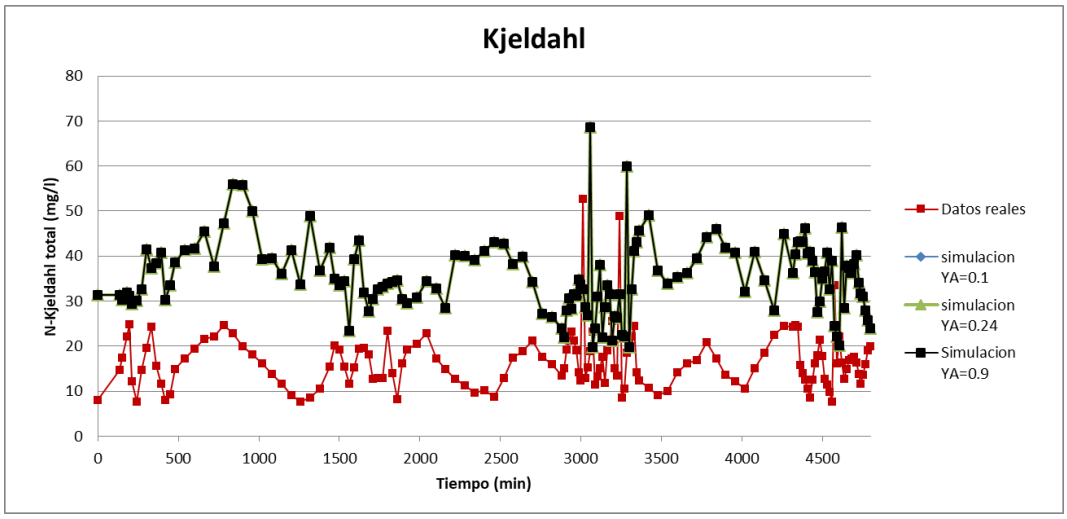




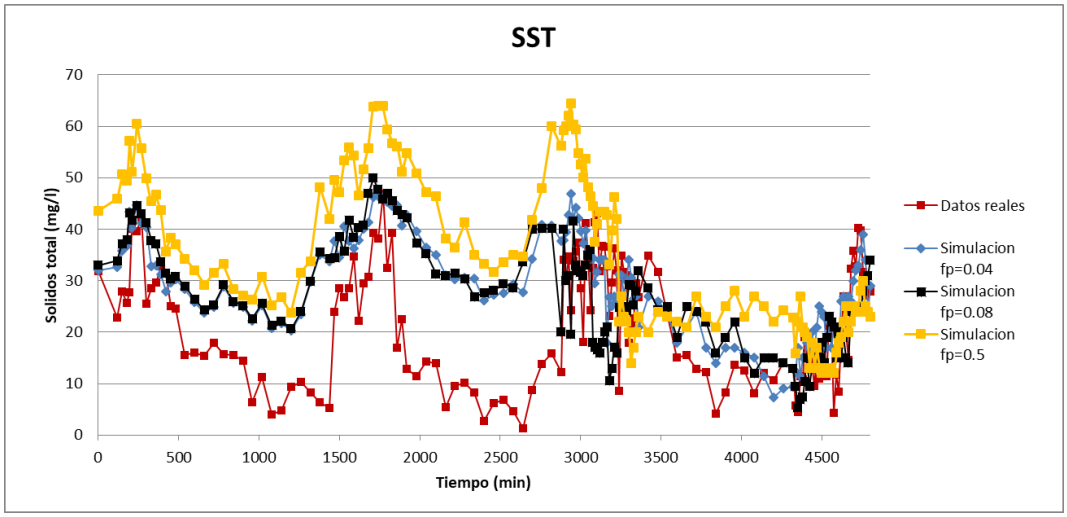

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion YA=0.1
simulacion YA=0.24
Simulacion YA=0.9

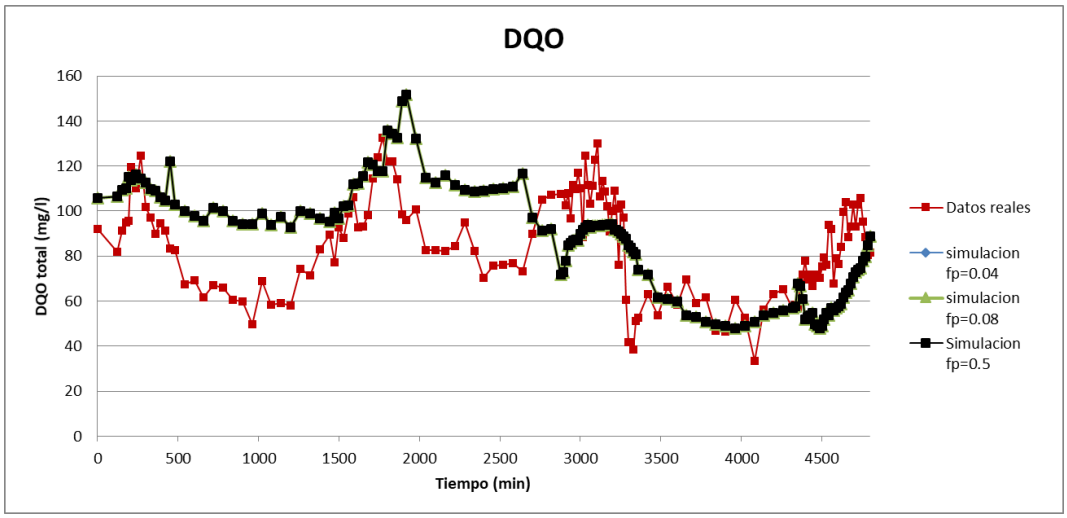

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion YA=0.1
simulacion YA=0.24
Simulacion YA=0.9

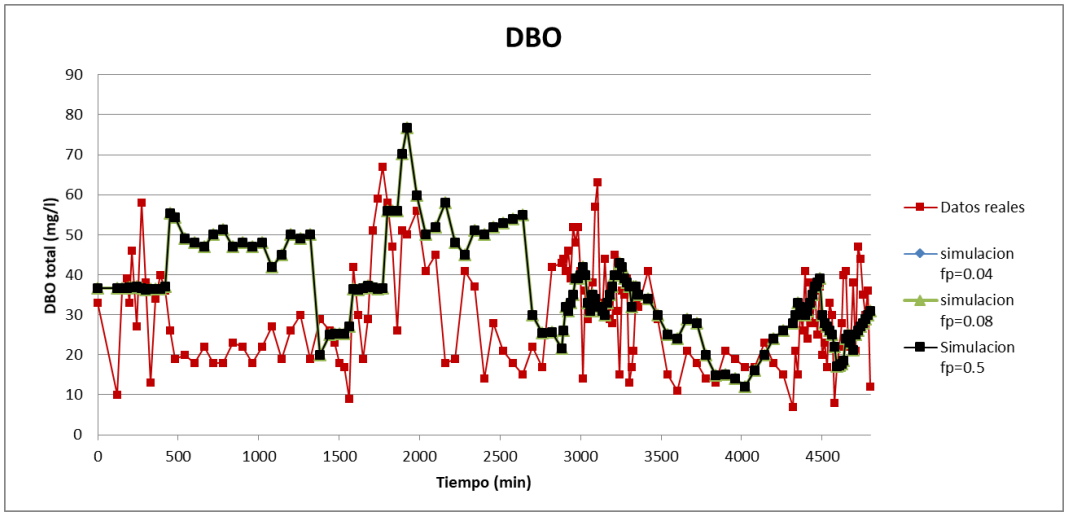

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion YA=0.1
simulacion YA=0.24
Simulacion YA=0.9

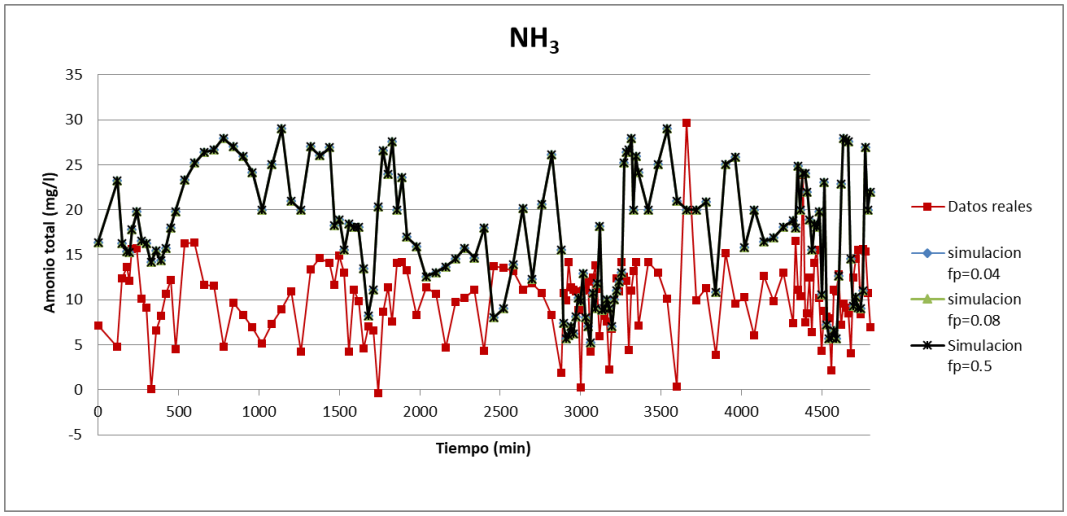


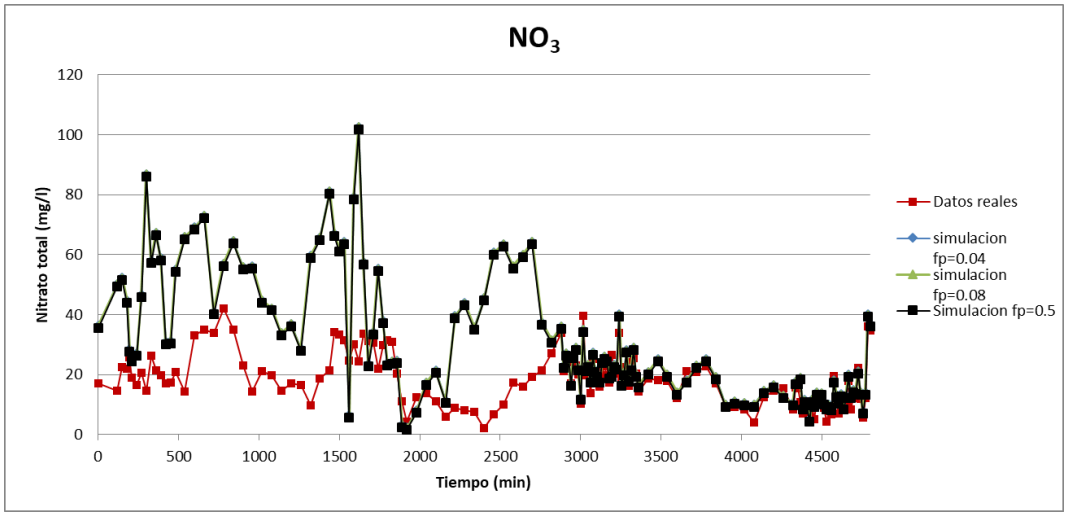
ESTUDIO DEL COEFICIENTE fp

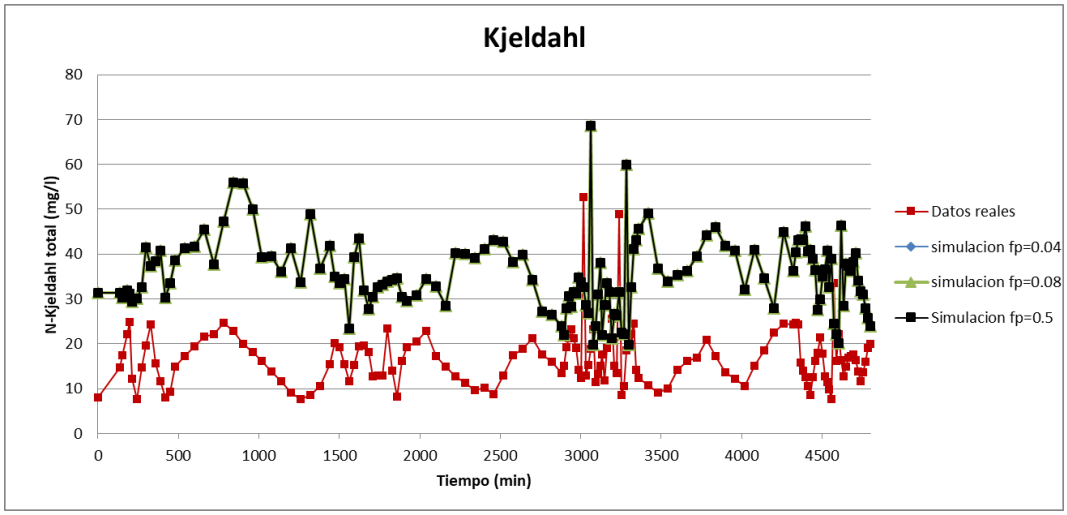




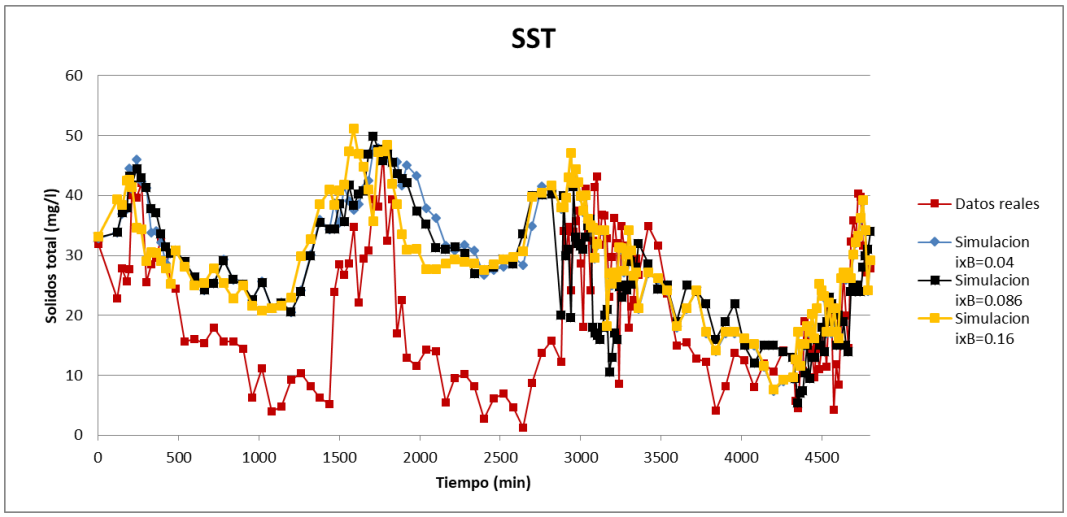

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion fp=0.04
simulacion fp=0.08
Simulacion fp=0.5

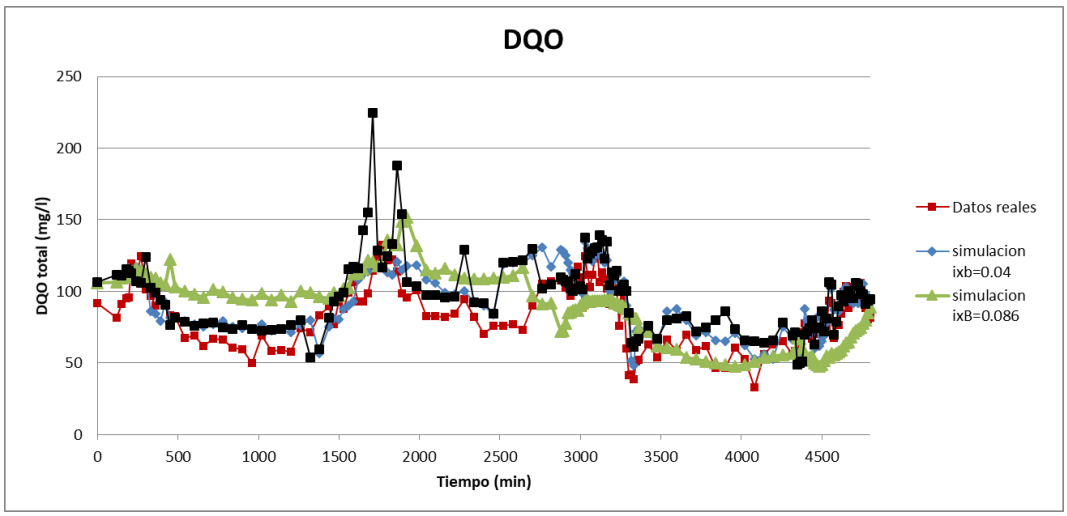

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion fp=0.04
simulacion fp=0.08
Simulacion fp=0.5

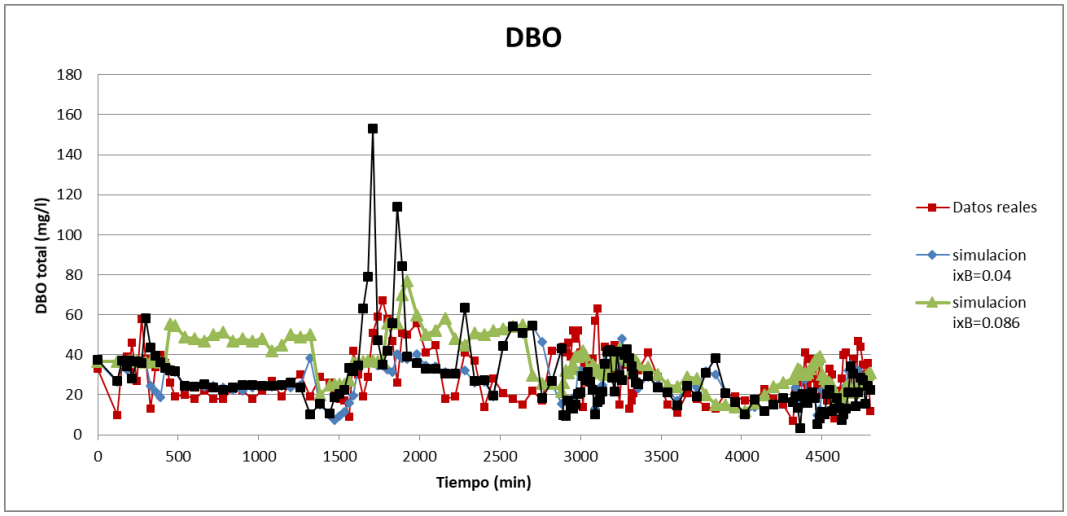

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion fp=0.04
simulacion fp=0.08
Simulacion fp=0.5

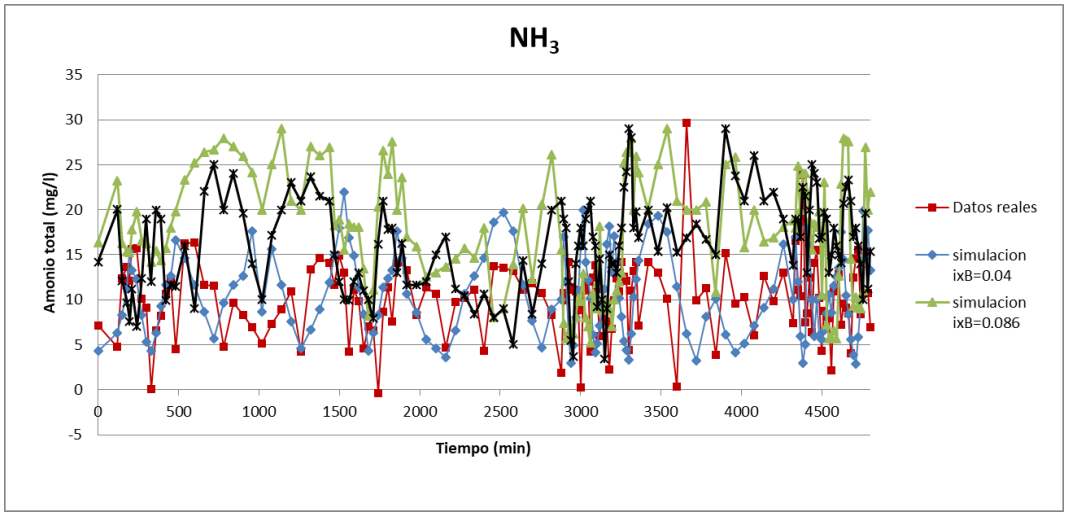


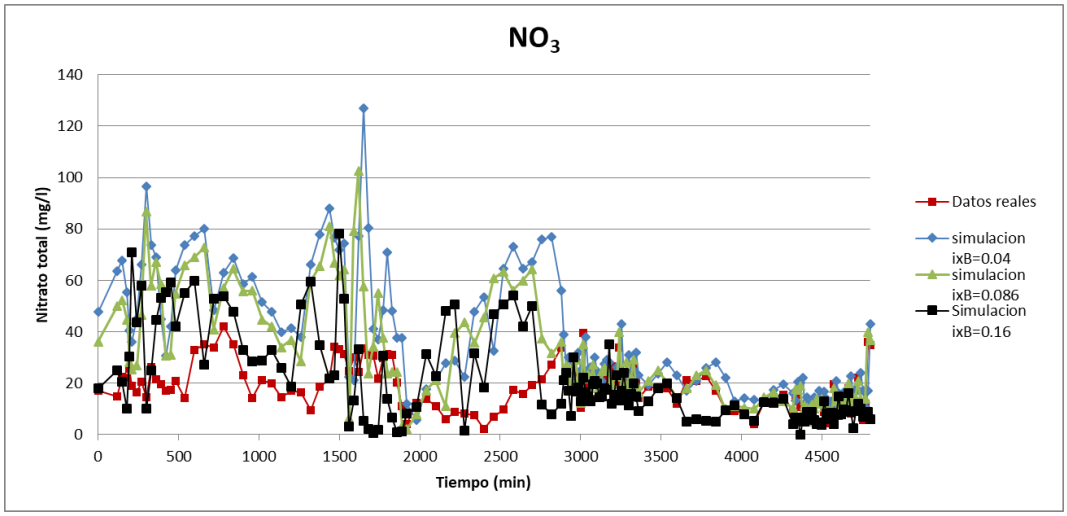
ESTUDIO DEL COEFICIENTE ixb

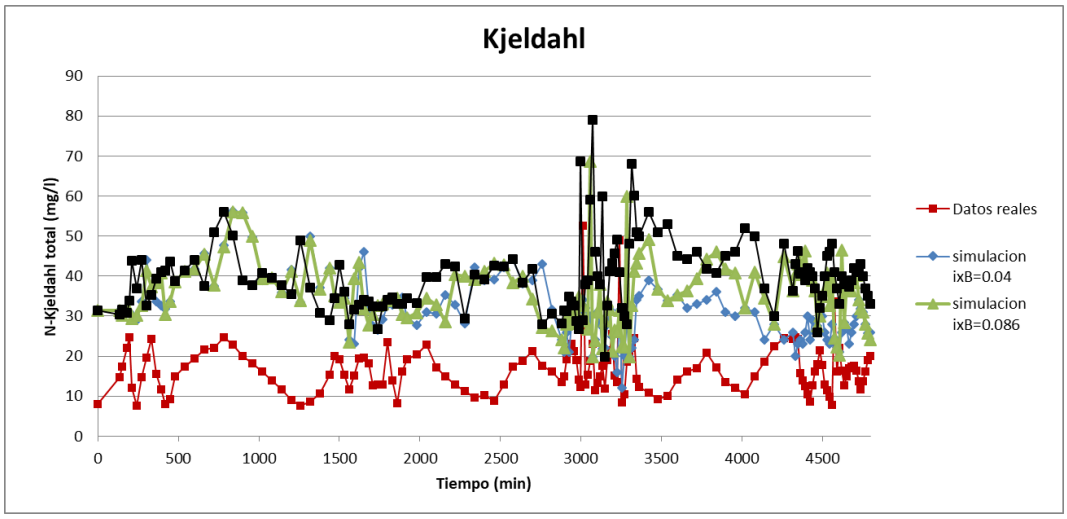




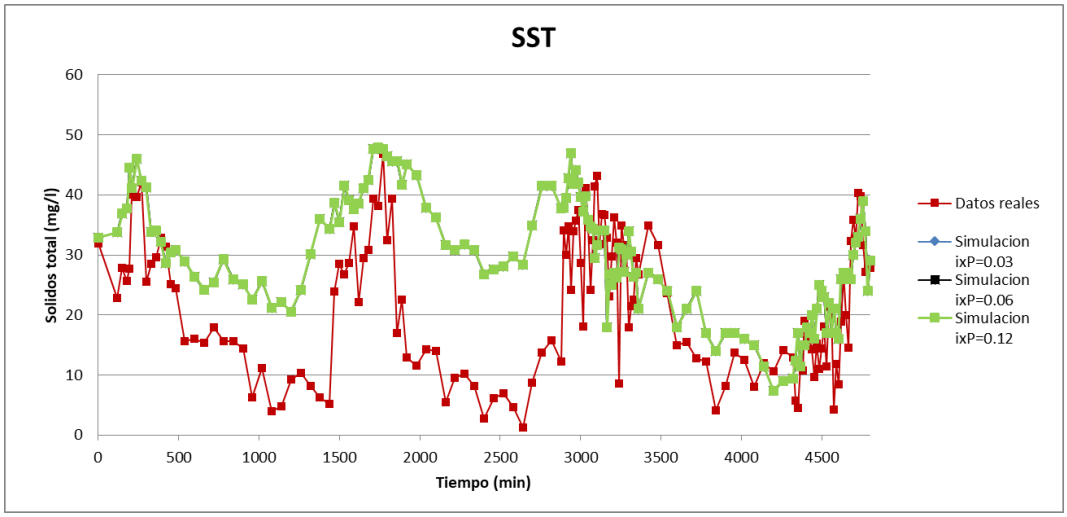

DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion ixB=0.04
simulacion ixB=0.086

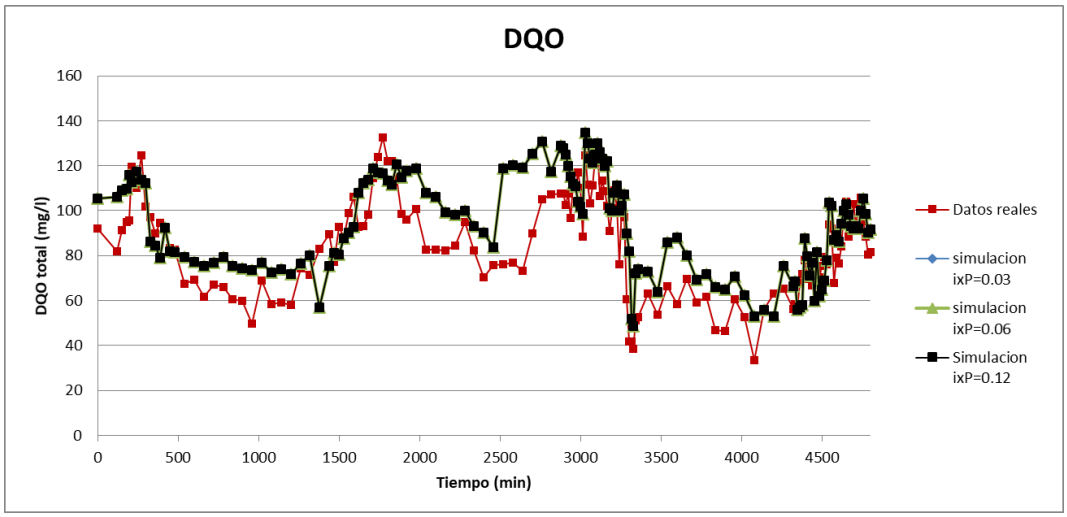

NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion ixB=0.04
simulacion ixB=0.086

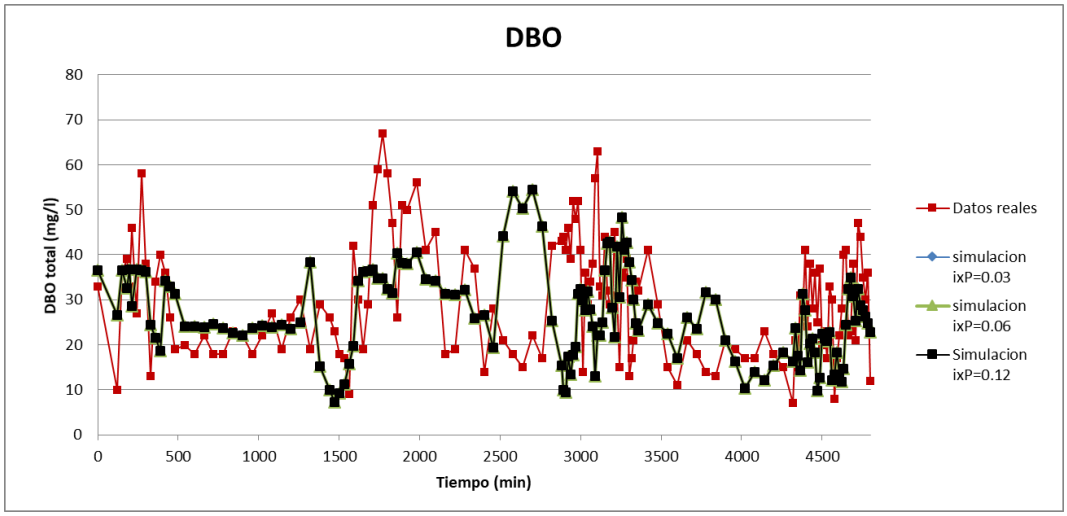

NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion ixB=0.04
simulacion ixB=0.086
Simulacion ixB=0.16

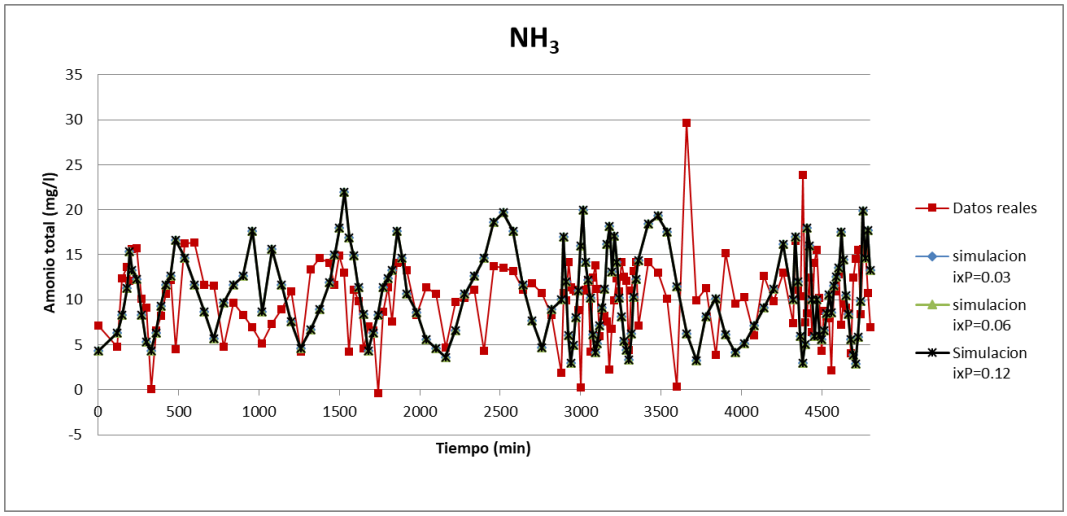


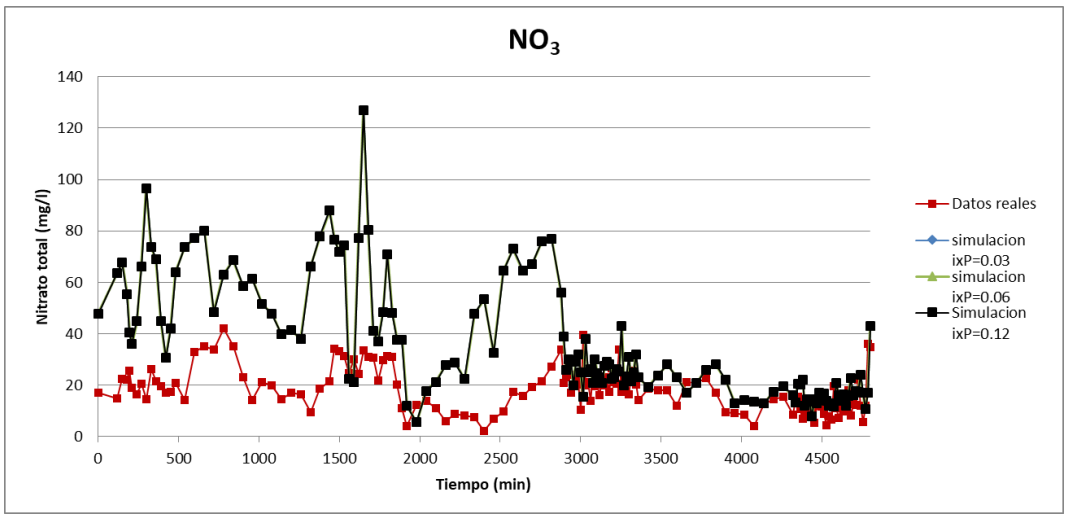
ESTUDIO DEL COEFICIENTE ixp

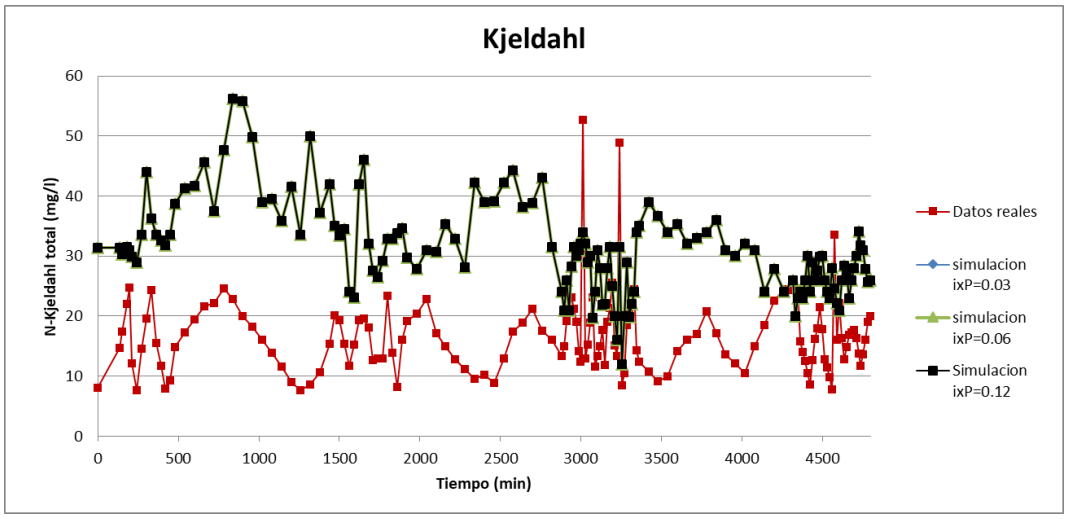





DBO
DBO total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion ixP=0.03
simulacion ixP=0.06
Simulacion ixP=0.12


NH3
Amonio total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion ixP=0.03
simulacion ixP=0.06
Simulacion ixP=0.12


NO3
Nitrato total (mg/l)
Tiempo (min)
Datos reales
simulacion ixP=0.03
simulacion ixP=0.06
Simulacion ixP=0.12


Kjeldahl
N-Kjeldahl total (mg/l)
Tiempo (min)
0
10
20
30
40
50
60
0
500
1000
1500
2000
2500
3000
3500
4000
4500
Datos reales
simulacion ixP=0.03
simulacion ixP=0.06
Simulacion ixP=0.12