

ESTUDIO DE LA SENSIBILIDAD GLOBAL Y ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS EN UN REACTOR SBR, CON NITRIFICACIÓN DESNITRIFICACIÓN, UTILIZANDO EL MODELO ASM1

Luis Gómez Palacín, Alejandro Merino Gómez, César de Prada Moraga
Dpto. de Ingeniería de Sistemas y Automática, Universidad de Valladolid, 47011, Valladolid
palacin@cta.uva.es

Resumen

El presente documento muestra el modelado y la simulación dinámica de un reactor biológico secuencial (SBR), utilizado de manera común en el tratamiento biológico de aguas. Las etapas que tienen lugar en este reactor son la carga de un cierto volumen de efluente a tratar (con alta concentración en materia orgánica), una primera etapa de reacción anóxica (donde se produce la desnitrificación, o transformación del nitrato soluble en nitrógeno gaseoso), una segunda etapa aerobia (donde se produce la nitrificación, o transformación del amonio en nitrato), un periodo de reposo (realizado para fomentar la sedimentación de la materia particulada), y finalmente, la descarga del agua tratada (cuya concentración en materia orgánica es muy inferior a la de alimentación). Para simular las reacciones biológicas y químicas que suceden en las etapas anóxica y aerobia, se utiliza el modelo ASM1, que tiene en cuenta el crecimiento y muerte de los diferentes tipos de microorganismos (heterótrofos aerobios, heterótrofos anóxicos, nitrosomonas, nitrobacter, etc.), así como la hidrólisis del nitrógeno y el sustrato biodegradable y la amonificación del nitrógeno soluble. A partir de una serie de datos experimentales de las etapas anóxica y aerobia, se estiman los parámetros del modelo ASM1, de los que no se tienen valores bibliográficos. Típicamente, para poder estudiar la estimación de parámetros y poder decidir si los valores obtenidos son adecuados y fiables, se recurre al cálculo de sensibilidades. Sin embargo, en la mayoría de los casos, la sensibilidad calculada se realiza solo de manera local, lo que, en cierto modo, deja el problema sin completar. Por ello, en este documento, se realiza el cálculo de la sensibilidad global, que si bien es computacionalmente mucho más complejo, sus resultados son más robustos y aplicables.

Palabras Clave: Tratamiento de aguas, Nitrificación-Desnitrificación, Reactor SBR, Sensibilidad global, Estimación de Parámetros, EcosimPro©.

1 INTRODUCCIÓN

Los microorganismos necesitan energía tanto para mantenerse vivos como para reproducirse. Esta energía la obtienen a partir de la oxidación de un determinado alimento (o dador de electrones). Para que esta oxidación tenga lugar, se requiere además la presencia de un agente oxidante (o aceptor de electrones). El dador de electrones puede ser, por ejemplo, materia orgánica (y se hablaría de microorganismos heterótrofos) o puede tratarse de materia inorgánica (y se hablaría de microorganismos autótrofos). A su vez, la materia orgánica puede tratarse de un sustrato, proveniente del exterior, como en el caso de la carga de un reactor biológico (y se hablaría de consumo exógeno), o puede tratarse de materia orgánica, proveniente de la muerte de los propios microorganismos (y se hablaría de consumo endógeno). Finalmente, ejemplos típicos de dadores de electrones inorgánicos son el amonio (NH_4^+) o el nitrito (NO_2^-).

El aceptor de electrones más común es el oxígeno (O_2), utilizado por los microorganismos aerobios. Pero existen otros posibles aceptores de electrones, como el nitrito o el nitrato (NO_3^-), utilizados por los microorganismos anóxicos. De la misma forma, un proceso puede ocurrir en condiciones aerobias (con presencia de oxígeno) o en condiciones anóxicas (con presencia de nitrito o nitrato). En el caso de que no haya ninguno de estos tres aceptores de electrones, se hablaría de condiciones anaerobias.

Desde el punto de vista de la obtención de la energía, los microorganismos pueden clasificarse en heterótrofos aerobios, heterótrofos anóxicos, autótrofos aerobios o autótrofos anóxicos, como se resume en la tabla 1.

El modelo ASM1, presentado en [4] y mejorado en [8], es un modelo matemático para la simulación de los procesos químicos y biológicos que tienen lugar en el tratamiento de agua residual con fangos activos. Este tratamiento combina procesos en condiciones tanto aerobias como anóxicas, y se basa en la acción de distintos tipos de microorganismos (heterótrofos

aerobios, heterótrofos anóxicos, autótrofos aerobios) para la eliminación de los diferentes compuestos del agua a tratar.

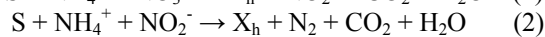
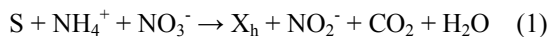
Tabla 1: Clasificación de microorganismos según la fuente de obtención de energía.

		dador de electrones	
		materia orgánica (S...)	materia inorgánica (NH ₄ ⁺ , NO ₂ ⁻ ...)
aceptor de electrones	O ₂	heterótrofos aerobios	autótrofos aerobios
	NO ₃ ⁻ , NO ₂ ⁻	heterótrofos anóxicos	autótrofos anóxicos

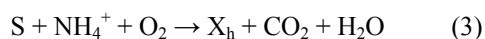
Para poder realizar tanto los procesos aerobios como los anóxicos, el tratamiento de aguas residuales puede llevarse a cabo, principalmente de dos maneras distintas. En continuo, con varios reactores en serie, de los cuales, algunos trabajarán, de manera permanente, en condiciones aerobias, y otros en condiciones anóxicas. O bien, en discontinuo, con un solo reactor que, de manera secuencial, trabajará de manera anóxica y aerobia. Este tipo de reactor, llamado SBR, es el utilizado en el presente documento.

El modelo ASM1 incorpora los siguientes procesos:

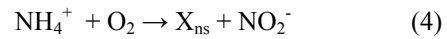
- Crecimiento de microorganismos heterótrofos (X_h) anóxicos (desnitrificación). Estos microorganismos utilizan como fuente de electrones materia orgánica (S), exógena o endógena, que se oxida a CO₂ y H₂O; y como aceptor de electrones nitrato y nitrito. El consumo de estos dos compuestos se produce en serie y su producto final es nitrógeno gaseoso. Además, se consume amonio, utilizado en la síntesis celular. El proceso completo se muestra en las reacciones 1 y 2 (donde se han omitido los coeficientes estequiométricos correspondientes).



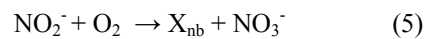
- Crecimiento de microorganismos heterótrofos (X_h) aerobios. De la misma manera que los heterótrofos anóxicos, utilizan materia orgánica (S), como fuente de electrones, y que oxidan a CO₂ y H₂O. Pero, como agente oxidante, utilizan oxígeno. Igualmente, consumen amonio en la síntesis celular. El proceso completo se muestra en la reacción 3 (donde se han omitido los coeficientes estequiométricos correspondientes).



- Crecimiento de microorganismos autótrofos aerobios, con consumo de amonio. Estos microorganismos, llamados nitrosomonas (X_{ns}), utilizan amonio como fuente de electrones (además de para la síntesis celular), que oxidan a nitrito; y oxígeno como agente oxidante. El proceso completo se muestra en la reacción 4 (donde se han omitido los coeficientes estequiométricos correspondientes).



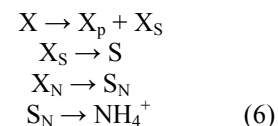
- Crecimiento de microorganismos autótrofos aerobios, con consumo de nitrito. Estos microorganismos, llamados nitrobacter (X_{nb}), utilizan nitrito como fuente de electrones (además de para la síntesis celular), que oxidan a nitrato; y oxígeno como agente oxidante. Además, consumen amonio para la síntesis celular. El proceso completo se muestra en la reacción 5 (donde se han omitido los coeficientes estequiométricos correspondientes).



La combinación del crecimiento de nitrosomonas y nitrobacter, produce la transformación de amonio en nitrato, es decir, la nitrificación.

- Muerte de los distintos tipos de microorganismos. Los compuestos obtenidos en la muerte de microorganismos, se pueden dividir en sustancias lentamente biodegradables (X_p), inertes para en el presente documento, y sustancias biodegradables (X_s), eliminadas por los microorganismos heterótrofos mediante el consumo endógeno. Tras la muerte de los microorganismos, la materia biodegradable es particulada, sin embargo, los microorganismos solo pueden alimentarse de materia soluble. Para que la materia orgánica particulada pueda ser consumida, debe ser hidrolizada primero, transformándose en materia orgánica soluble (S).

Parte de la materia orgánica biodegradable, será materia nitrogenada (X_N). Y que, de la misma manera que el sustrato biodegradable, se hidroliza a materia nitrogenada soluble (S_N). Finalmente, se produce la amonificación, o transformación de esta materia nitrogenada soluble, en amonio. Las reacciones que tienen lugar se resumen a continuación:



La tabla 2 resume, de manera matricial, cada uno de los procesos y reacciones incorporados en el modelo ASM1. Esta representación matricial corresponde con la propuesta por IAWPRC (International

	S	X _S	X _h	X _{ns}	X _{nb}	X _p	O ₂
crecimiento X _h aerobio	-1/Y _h		1				-(1-Y _h)/Y _h
crecimiento X _h anoxico consumo de nitrato	-1/Y _h		1				
crecimiento X _h anoxico consumo de nitrato	-1/Y _h		1				
crecimiento X _{ns} aerobio				1			-(3.43-Y _{ns})/Y _{ns}
crecimiento X _{nb} aerobio					1		-(1.14-Y _{nb})/Y _{nb}
muerte X _h		1-f _p	-1			f _p	
muerte X _{ns}		1-f _p		-1		f _p	
muerte X _{nb}		1-f _p			-1	f _p	
amonificación							
hidrólisis X _S	1	-1					
hidrólisis X _N							

Association on Water Pollution Research and Control), [4][8]. Las distintas reacciones corresponden con las diferentes filas, y cada uno de los compuestos que intervienen en ellas, está definido en una columna. Cada celda, corresponde con el coeficiente estequiométrico de cada compuesto en cada reacción. Nótese que coeficientes negativos significan reactivos y coeficientes positivos, significan productos. Se recomienda consultar la bibliografía especializada para una descripción en profundidad del modelo ASM1 y los diferentes procesos biológicos que tienen lugar, [1-6], [8-9].

2 SIMPLIFICACIÓN DEL MODELO ASM1

La materia orgánica y la materia nitrogenada, presentes en una corriente típica de agua residual, pueden ser eliminados fácilmente mediante un tratamiento de fangos activos, donde tienen lugar las diferentes reacciones y procesos presentados en la primera sección. En una planta piloto de laboratorio, [3], se ha tratado una corriente de agua residual (cuyas cargas de materia orgánica y materia nitrogenada, una vez diluida en el reactor, son 180 mgCOD/L y 12 mgN/L) mediante el proceso de nitrificación desnitrificación, y medido la evolución temporal de los distintos compuestos. La planta piloto consiste en un reactor secuencial biológico (SBR), donde tienen lugar las siguientes etapas:

- 1° Carga de alimentación.
- 2° Reacción anóxica (durante 150 minutos).
- 3° Reacción aerobia (durante 150 minutos).
- 4° Sedimentación.
- 5° Descarga del agua tratada.

A partir de los datos experimentales, medidos durante las etapas anóxica y aerobia, se pretende estimar los valores de las constantes de las reacciones del modelo ASM1 (tabla 2). En realidad, debido a los tiempos cortos (300 minutos) empleados durante las fases de reacción, el modelo ASM1 puede ser simplificado para el caso en estudio. En primer lugar, para un mismo ciclo, se puede considerar constante el número de microorganismos. Lo que equivale a despreciar las columnas correspondientes a los microorganismos. En la tabla 2, los coeficientes estequiométricos, habían sido elegidos de manera que hubiera un 1 en las columnas de microorganismos. Sin embargo, debido a que se ha decidido suprimir estas columnas, resulta más acertado reestructurar los coeficientes estequiométricos como se muestra en las tablas 3 y 4. Que corresponden con las reacciones que tienen lugar durante la fase anóxica

y aerobia respectivamente. Además, en la tabla 4 se ha añadido el efecto de la adición de oxígeno.

Tabla 3: Modelo ASM1 simplificado, para la fase anóxica.

	S	NO ₃ ⁻	NO ₂ ⁻	NH ₄ ⁺	S _N	
1	-1.14/(1-Y _h)	-1	1			$r_1 \cdot (S-S_i) / (K_{1S} + S) \cdot r^*$ $\cdot NO_3 / (K_{1N} + NO_3) \cdot X_{h1}$
2	-1.71/(1-Y _h)		-1			$r_2 \cdot (S-S_i) / (K_{2S} + S) \cdot r^*$ $\cdot NO_2 / (K_{2N} + NO_2) \cdot X_{h2}$
3				1	-1	$r_3 \cdot (S_N - S_{Ni}) / (K_{3N} + S_N - S_{Ni}) \cdot X_{h3}$

planta piloto. En concreto los valores que han de ser estimados son los siguientes:

$$r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, r_6, r_7, Y_h, Y_{nb}, Y_{ns}, K_{7N} \text{ y } \beta \quad (11)$$

En realidad, sí que se dispone de abundantes datos para los ratio de crecimiento ($Y_h = 0.67$, $Y_{ns} = 0.21$ y $Y_{nb} = 0.04$). Pero los datos bibliográficos suelen estar calculados para largos tiempos de operación. En el caso de la planta piloto, con una escala de tiempo de solo 300 minutos, los valores de crecimiento, deberán ser mayores que los bibliográficos.

La herramienta elegida para simular el comportamiento del reactor SBR es EcosimPro© (<http://www.ecosimpro.com>). Se trata de un software avanzado de simulación, con un potente algoritmo de tratamiento simbólico de las ecuaciones y de carácter no causal, así como una interfaz amigable e intuitiva, y que dispone de eficaces herramientas de optimización y estimación de parámetros. Además, EcosimPro© posee versiones gratuitas enfocadas al ambiente universitario y para objetivos no comerciales. Por todo ello, trabajar con este software concreto, resulta ser una cómoda opción.

Las siguientes figuras, comparan los valores de las distintas especies químicas experimentales, y calculadas. En particular, las figuras 1, 2 y 3 muestran la evolución de las especies amonio, nitrito, nitrato, sustrato soluble y nitrógeno soluble durante la fase anóxica. Y a continuación, las

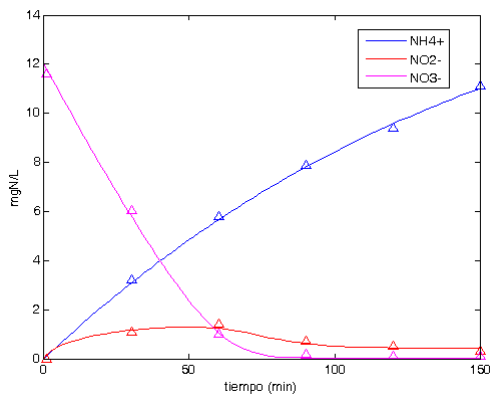


Figura 1: Evolución del amonio, nitrito y nitrato durante la fase anóxica. Valores experimentales (triángulos) y calculados (línea continua).

figuras 4 y 5, muestran la evolución del amonio, nitrito, nitrato y oxígeno durante la fase aerobia. En cada una de las gráficas, se puede ver cómo se consigue simular correctamente cada uno de los diferentes compuestos. En particular, es importante comentar la evolución del oxígeno (figura 5). La concentración de oxígeno alcanza dos valores

estacionarios, cambiando de uno a otro aproximadamente a la mitad del proceso aerobio. Este cambio puede explicarse fácilmente por el final del crecimiento de las nitrosomonas, que tiene lugar cuando estos microorganismos han consumido prácticamente todo el amonio disponible.

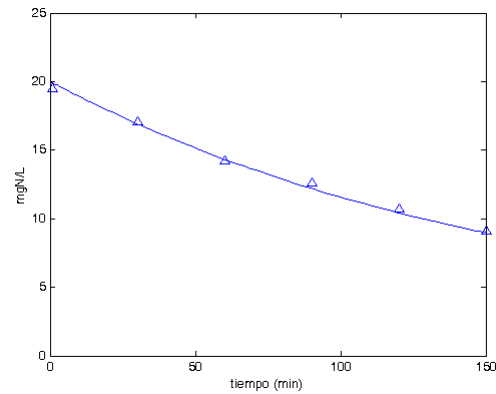


Figura 2: Evolución del sustrato (S) durante la fase anóxica. Valores experimentales (triángulos) y calculados (línea continua).

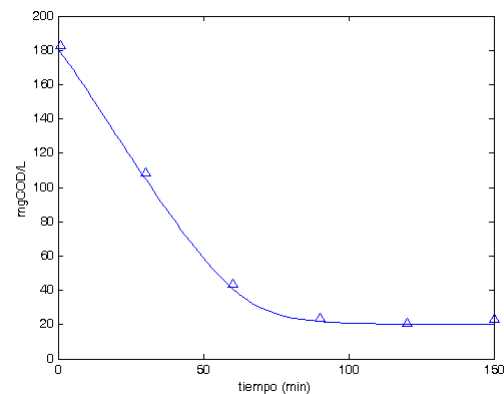


Figura 3: Evolución del nitrógeno soluble (S_N) durante la fase anóxica. Valores experimentales (triángulos) y calculados (línea continua).

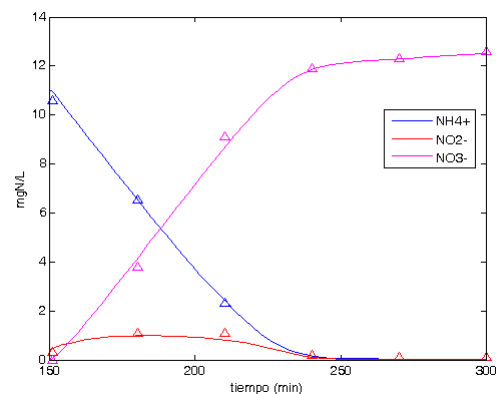


Figura 4: Evolución del amonio, nitrito y nitrato durante la fase aerobia. Valores experimentales (triángulos) y calculados (línea continua).

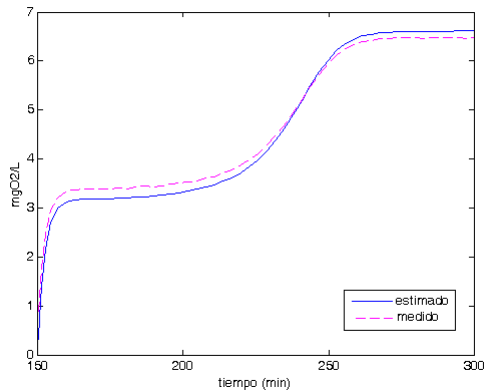


Figura 5: Evolución del oxígeno durante la fase aerobia. Valores experimentales (línea rayada) y calculados (línea continua).

Utilizando las herramientas de estimación de parámetros, suministradas por el propio EcosimPro®, ha sido posible calcular los parámetros desconocidos (11). Para ello, se ha utilizado el algoritmo de optimización SQP, apto para resolución de problemas no lineales con restricciones, minimizando una función objetivo que depende del cuadrado de los errores entre los valores experimentales y los simulados. A continuación, se muestran los valores obtenidos con este método:

$$\begin{aligned}
 r_1 &= 1.3 \cdot 10^{-4} \text{ mg N/mg COD min} \\
 r_2 &= 1.4 \cdot 10^{-4} \text{ mg N/mg COD min} \\
 r_3 &= 4.0 \cdot 10^{-4} \text{ mg N/mg COD min} \\
 r_4 &= 4.5 \cdot 10^{-3} \text{ mg COD/mg COD min} \\
 r_5 &= 1.7 \cdot 10^{-2} \text{ mg COD/mg COD min} \\
 r_6 &= 3.9 \cdot 10^{-6} \text{ mg COD/mg COD min} \\
 r_7 &= 4.9 \cdot 10^{-4} \text{ mg COD/mg COD min} \\
 Y_h &= 0.79 \text{ mg COD/mg COD} \\
 Y_{ns} &= 0.22 \text{ mg COD/mg N} \\
 Y_{nb} &= 0.081 \text{ mg COD/mg N} \\
 K_{7N} &= 0.049 \text{ mgN/L} \\
 \beta &= 0.94
 \end{aligned}
 \tag{12}$$

Por último, se realiza el cálculo de la sensibilidad de cada una de estos parámetros. La sensibilidad es una herramienta fundamental para poder discernir si un parámetro está bien calculado, si es influyente dentro del modelo matemático y si su rango de variación razonable. Típicamente, la sensibilidad se calcula de manera local. Es decir, en el entorno de los valores ya estimados. Para poder realizar un estudio de sensibilidad más riguroso, es necesario hacerlo de manera global. La sensibilidad global funciona de la misma manera que la sensibilidad local, pero da una idea de la estimación de los parámetros en todo el rango de variación. Básicamente, para poder calcular la sensibilidad global, es necesario repetir un número elevado de

veces el cálculo de sensibilidades locales en distintos puntos. Un problema muy sencillo de programar, pero costoso computacionalmente (del orden de varios días). En [7] se muestra un método eficaz para el cálculo de la sensibilidad global, que requiere ejecutar el modelo matemático $N \cdot (p+2)$ veces, donde N es el número de puntos distintos en los que se calculan sensibilidades individuales (valores típicos de N pueden ser 10^5 - 10^6) y p el número de parámetros. Si se utilizase el método clásico mediante la fuerza bruta, para un cálculo similar de la sensibilidad global, se requeriría ejecutar el modelo N^2 veces, un número muchas veces superior.

Mientras que los cálculos de sensibilidad han sido realizados en EcosimPro®, utilizando para ello, los conceptos nuevos de clases y métodos; los gráficos tridimensionales han sido realizados en Matlab®, debido a que este segundo software, dispone de una mayor potencia de representación gráfica. La figura 6 muestra la matriz de sensibilidades, donde se puede apreciar la sensibilidad para cada variable calculada (la evolución de las distintas especies químicas: oxígeno, sustrato, nitrógeno soluble, nitrato, nitrito y amonio), respecto de cada parámetro estimado ($r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, r_6, r_7, Y_h, Y_{nb}, Y_{ns}, K_{7N}$ y β). La figura 7, equivale a la figura 6, pero donde se puede apreciar cada una de las sensibilidades (de cada variable y respecto de cada parámetro) en tres dimensiones. En ambos gráficos, la sensibilidad de una variable respecto a un parámetro está definida por el color. Colores más suaves, indican mayores sensibilidades. Valores de sensibilidad por encima de 0.1 deben ser ya tenidos en cuenta [7]. A partir de estas figuras, se puede observar que todos los parámetros son importantes, y que influyen de manera significativa, como mínimo para alguna variable. El parámetro menos sensible, y por tanto, su valor menos preciso, es β . Además, se puede ver que el amonio es la variable más dependiente, y por tanto, más útil para la estimación de parámetros. En el caso contrario, se encuentra la materia nitrogenada soluble, cuya sensibilidad es muy baja para casi todas las variables, excepto para r_3 e Y_h .

4 CONCLUSIONES

En el presente trabajo se ha simulado un reactor biológico secuencial (SBR) para el tratamiento de aguas residuales. Utilizando para ello una simplificación del modelo ASM1. Se han estimado los parámetros de las ecuaciones del modelo, de los que no se disponían valores bibliográficos, y se ha comprobado su correcto ajuste, mediante la comparación entre los valores calculados, mediante simulación, de las distintas especies químicas, con

los valores medidos experimentalmente. Finalmente, se ha realizado un cálculo de la sensibilidad global del modelo matemático.

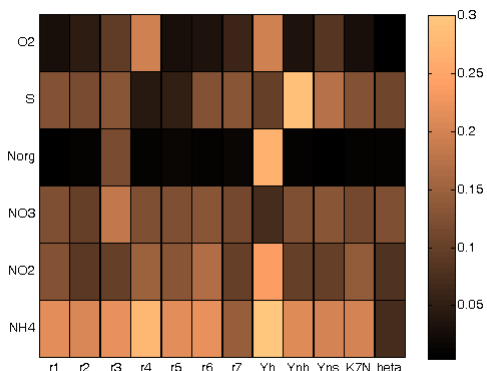


Figura 6: Sensibilidad global de las diferentes variables, respecto a cada uno de los parámetros calculados. Vista matricial.

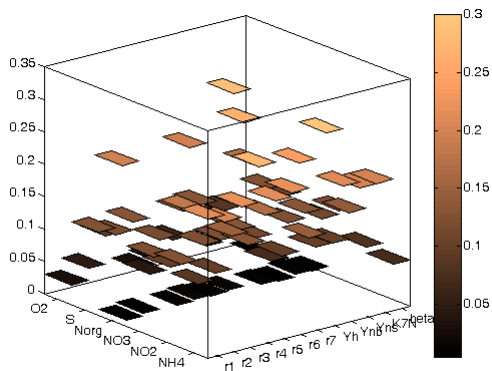


Figura 7: Sensibilidad global de las diferentes variables, respecto a cada uno de los parámetros calculados. Vista tridimensional.

[4] Henze M. et al., (1987) Activated sludge model n°1, IAWPRC Scientific and Technical Report, London, UK.

[5] Musvoto E. V. et al., (1999) Development of a kinetic-based model for mixed weak acid/base systems, Water Research Group, University of Cape Town, Department of Civil Engineering, Rondebosh, South Africa.

[6] Nowak O. et al., (1995) The dynamic behaviour of nitrifying activated sludge systems influenced by inhibiting wastewater compounds, Institute for Water Quality, Technical University of Vienna, Wien, Austria.

[7] Saltelli A. et al., (2008) Global sensitivity analysis, Wiley, Italy.

[8] Schulthess R. et al., (1995) Release of nitrous oxide from denitrifying activated sludge: verification and application of a mathematical model, Swiss Federal Institute for Environmental Science and Technology (EAWAG) and Swiss Federal Institute of Technology (ETH), Dubendorf, Switzerland.

[9] Wild D. et al., (1995) Structured modelling of denitrification intermediates, Swiss Federal Institute for Environmental Science and Technology (EAWAG) and Swiss Federal Institute of Technology (ETH), Dubendorf, Switzerland.

Referencias

[1] Bernardes R.S et al., (1998) Modelling respiration rate and nitrate removal in a nitrifying denitrifying SBR treating domestic wastewater, Universidade de Brasilia, Brasilia, Brazil.

[2] Fibrianto H. et al., (2004) Model selection and parameter identification, Centre for Systems Engineering and Applied Mechanics, Université Catholique de Louvain, Belgium.

[3] Ficara E. et al., (1999) Comparison and combination of titrimetric and respirometric techniques to estimate nitrification kinetics parameters, Department of Hydraulic Environmental Engineering and Survey, Milan, Italy.