



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

Tesis presentada como parte de los requisitos de la Universidad Nacional
del Litoral para la obtención del Grado Académico de
Doctor en Ingeniería Química

SÍNTESIS Y DISEÑO DE PLANTAS DE TRATAMIENTO DE
AGUAS RESIDUALES



Autora:

Ing. NOELIA ALASINO

Director:

Dr. NICOLÁS J. SCENNA

Co-Director:

Dr. MIGUEL C. MUSSATI

Miembros del jurado:

Dr. JAIME CERDÁ

Dra. MARÍA SOLEDAD DÍAZ

Dra. ANA MARÍA ELICECHE

Santa Fe, Argentina

2009

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue realizado en INGAR Instituto de Desarrollo y Diseño CONICET-UTN de Santa Fe, entre 2004 y 2009.

Deseo agradecer a mis directores los Dres. Nicolás Scenna y Miguel Mussati por la oportunidad que me dieron de trabajar en el INGAR, por el estímulo, la confianza y por su dedicación.

Deseo también agradecer a todos los miembros el grupo Ingeniería de Procesos y Biotecnología por su ayuda, contribuciones y por su amistad.

Gracias a toda la gente de INGAR por hacer del ambiente de trabajo un lugar agradable.

Agradezco al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, por financiar este Doctorado.

Finalmente quiero agradecer a mi familia por su estímulo y por valorar mi trabajo; y a Carlos por su apoyo, su paciencia y espera durante todos estos años.

RESUMEN

El proceso biológico más usado para la remoción de nitrógeno y fósforo de aguas residuales municipales e industriales es el proceso de barros activados. Debido a la importancia de este proceso, y al gran número de instalaciones existentes, el esfuerzo de investigación se ha concentrado mayoritariamente en la optimización de las estrategias de operación (control) o en el mejoramiento del diseño individual de partes constitutivas de las instalaciones. Sin embargo, la optimización sistemática de la estructura de proceso (la síntesis de proceso), de su diseño y las condiciones de operación en base a modelos rigurosos del proceso no ha sido abordada en profundidad en la literatura específica del área con las herramientas y metodologías usadas en este trabajo.

Esta tesis trata sobre la optimización, síntesis y diseño de sistemas de tratamiento de aguas residuales por barros activados para eliminación biológica de nutrientes basados en modelos, aplicando técnicas de programación matemática. A lo largo de la misma se desarrollan modelos matemáticos de complejidad y rigurosidad crecientes, cuyas soluciones y conocimientos adquiridos se utilizan sucesivamente para el planteo, representación, acotamiento del espacio de búsqueda de las soluciones, e inicialización de los modelos matemáticos subsiguientes.

El objetivo final consiste en el desarrollo de modelos basados en superestructuras del proceso que posibiliten la implementación de algoritmos para la optimización de la configuración de la planta de tratamiento (síntesis del proceso) y las variables de diseño y operación para diferentes escenarios de interés teórico y práctico.

El presente trabajo pretende aportar al desarrollo de tecnologías y/o procesos más eficientes, que demanden menores costos de inversión y costos operativos. Parte de los resultados presentados y discutidos aquí fueron difundidos en el medio científico a través de publicaciones y presentaciones en congresos nacionales e internacionales. Se espera que los resultados y productos obtenidos de esta tesis constituyan una herramienta valiosa para el diseño y optimización de plantas “reales” en particular, y en el cuidado del medio ambiente y en la utilización eficiente de los recursos en general.

TABLA DE CONTENIDOS

AGRADECIMIENTOS	ii
RESUMEN	iii
TABLA DE CONTENIDOS	iv
ÍNDICE DE FIGURAS	viii
ÍNDICE DE TABLAS	xi
CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN. ASPECTOS GENERALES	1
1.1 Tratamiento de aguas residuales	2
1.1.1 Necesidad del tratamiento.....	2
1.1.2 Sistemas de tratamiento de aguas residuales.....	3
1.1.3 Tratamiento biológico (secundario).....	5
1.1.4 Proceso de tratamiento por barros activados.....	7
1.1.5 Sistemas de tratamiento basados en barros activados	9
1.1.6 Configuraciones de plantas convencionales de tratamiento basadas en barros activados.....	10
1.2 Introducción al diseño, síntesis y optimización de procesos.....	14
1.2.1 Representación de alternativas.....	15
1.2.2 Programas matemáticos	16
1.2.3 Estrategias de solución.....	17
1.3 Modelos para sistemas de barros activados	21
1.4 Revisión bibliográfica de síntesis de procesos de tratamiento de aguas residuales	24
1.5 Motivación y diagramación de la tesis.....	28
CAPÍTULO 2. OPTIMIZACIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN	
PARA REMOCIÓN DE MATERIA ORGÁNICA Y NITRÓGENO.....	32
2.1 Introducción.....	33
2.2 Procesos convencionales de remoción de nitrógeno	34
2.3 Modelado	37
2.3.1 Modelo del sistema de barros activados (Modelo ASM3).....	37
2.3.2 Modelo de unidades de proceso y equipamiento	49
2.3.2.1 Modelo del sistema de aireación.....	49
2.3.2.2 Modelo del sedimentador.....	52
2.3.2.3 Modelo del compartimento de reacción.....	58
2.3.3 Configuraciones de planta propuestas para ser optimizadas	59
2.3.4 Modelo de optimización	73

2.3.4.1 Función objetivo y criterios de performance.....	74
2.3.4.2 Especificaciones del agua residual a tratar.....	76
2.3.4.3 Restricciones de especificación y valores máximos.....	77
2.4 Resultados.....	78
2.4.1 Configuraciones de referencia	81
2.4.2 Configuraciones con distribución de corrientes.....	82
2.5 Discusión	83
2.5.1 Comparación de las soluciones óptimas para las alternativas del esquema de <i>PreDN</i>	84
2.5.2 Comparación de las soluciones óptimas para las alternativas del esquema de <i>PostDN</i>	86
2.6 Estrategia de solución y aspectos computacionales	88
2.7 Conclusiones.....	89

CAPÍTULO 3. SÍNTESIS DE PLANTAS DE TRATAMIENTO DE EFLUENTES (REMOCIÓN DE MATERIA ORGÁNICA Y NITRÓGENO) OPTIMIZANDO COSTOS OPERATIVOS.....91

3.1 Introducción.....	92
3.2 Definición del problema	95
3.2.1 Especificaciones del agua residual afluente.....	96
3.3 Modelo del proceso. Casos de estudio	97
3.3.1 Sistema sin distribución de corrientes de proceso.....	97
3.3.1.a Modelo de la superestructura	97
3.3.1.b Modelo de optimización	100
3.3.1.c Resultados	105
3.3.2 Sistema con distribución de corrientes de proceso.....	111
3.3.2.a Modelo de la superestructura	111
3.3.2.b Modelo de optimización	112
3.3.2.c Resultados	113
3.4 Aspectos computacionales	120
3.5 Conclusiones.....	121

CAPÍTULO 4. SÍNTESIS Y DISEÑO DE PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES PARA REMOCIÓN DE NITRÓGENO.....123

4.1 Introducción.....	124
4.2 Definición del problema	127
4.3 Modelado	127
4.3.1 Superestructura planteada	127
4.3.2 Modelo de las unidades de proceso y equipamiento	129
4.3.3 Modelo de performance	131

4.3.3.1 Función objetivo. Criterio de performance	131
4.3.3.2 Restricciones de especificación y valores máximos.....	135
4.3.3.3 Casos de estudio.....	135
4.4 Resultados y discusiones.....	137
4.4.1 Caso de estudio I.....	137
4.4.1.1 Caso I.A	137
4.4.1.2 Caso I.B	139
4.4.1.3 Caso I.C	141
4.4.1.4 Distribución de costos para las soluciones del Escenario I.....	142
4.4.2 Estrategia de resolución.....	143
4.4.3 Caso de estudio II	147
4.4.3.1 Caso II.A.....	148
4.4.3.2 Caso II.B	149
4.4.3.3 Caso II.C	151
4.4.3.4 Distribución de costos para las soluciones del Escenario II.....	153
4.5 Conclusiones.....	153
4.6 Aspectos computacionales	157
4.7 Futuros trabajos	157

**CAPÍTULO 5. OPTIMIZACIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN
DE SISTEMAS CONVENCIONALES PARA REMOCIÓN
COMBINADA DE NITRÓGENO Y FÓSFORO159**

5.1 Introducción.....	160
5.2 Procesos convencionales para remoción combinada de nitrógeno y fósforo	162
5.3 Modelado	165
5.3.1 Modelo del sistema de barros activados (Modelo ASM3+Bio-P)	165
5.3.2 Modelo de unidades de proceso y equipamiento	181
5.3.2.1 Modelo de reactor	181
5.3.2.2 Modelo del decantador.....	181
5.3.3 Configuraciones de planta consideradas y sus modelos.....	181
5.3.4 Optimización.....	197
5.3.4.1 Función objetivo y criterios de performance.....	197
5.3.4.2 Especificaciones del agua residual afluente	199
5.3.4.3 Restricciones de calidad de efluente y valores máximos para variables de operación.....	200
5.4 Resultados.....	201
5.5 Aspectos computacionales	209
5.6 Conclusiones.....	210

CAPÍTULO 6. SÍNTESIS Y DISEÑO DE PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES PARA REMOCIÓN COMBINADA DE NITRÓGENO Y FÓSFORO	212
6.1 Introducción.....	213
6.2 Definición de problema.....	214
6.3 Modelado	215
6.3.1 Superestructura propuesta.....	215
6.3.2 Modelo de unidades de proceso y equipamiento	217
6.3.3 Modelo de optimización	218
6.3.3.1 Función objetivo	218
6.3.3.2 Especificaciones del agua residual afluyente y de calidad para el efluente, y valores máximos operativos.....	219
6.4 Casos de estudio.....	219
6.5 Resultados y discusiones.....	221
6.5.1 Escenario I	222
Análisis de sensibilidad de la solución I.A	225
6.5.2 Escenario II.....	231
6.5.2.1 Variaciones de la concentración de amonio en el afluyente $S_{NH_4, fresh}$	234
6.5.2.2 Variaciones de la concentración de fósforo en el afluyente $S_{PO_4, fresh}$	237
6.5.2.3 Variaciones de de sustrato lentamente biodegradable en el afluyente $X_{S, fresh}$	240
6.6 Estrategia de solución y aspectos computacionales	244
6.7 Conclusiones.....	245
CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES GENERALES Y TRABAJOS FUTUROS	247
7.1 Resultados encontrados.....	249
7.2 Trabajos futuros	252
NOTACIÓN	253
BIBLIOGRAFÍA CONSULTADA	257

ÍNDICE DE FIGURAS

CAPÍTULO 1

Figura 1.1. Esquema básico del proceso de barros activados	7
Figura 1.2. Formas de operación posible del proceso de barros activados	8
Figura 1.3. Sistemas de eliminación biológica de nutrientes	12

CAPÍTULO 2

Figura 2.1. Configuraciones de referencia (a) de <i>PreDN</i> , (b) de <i>PostDN</i> y (c) de <i>PrePostDN</i>	34
Figura 2.2. Flujo de DQO y procesos del modelo ASM3.....	41
Figura 2.3. Esquema del modelo del decantador	53
Figura 2.4. Configuraciones con distribución de la corriente de mezcla (a) de <i>PreDN</i> , (b) de <i>PostDN</i> y (c) de <i>PrePostDN</i>	61
Figura 2.5. Configuración con distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y de los reciclos interno (si corresponde) y externo (a) de <i>PreDN</i> , (b) de <i>PostDN</i> y (c) de <i>PrePostDN</i>	62
Figura 2.6. Condiciones de operación óptimas calculadas para las alternativas de procesos	80
Figura 2.7. Indicador Φ_p para las Sol. 5 y 7 con resp. a la Sol. 1.....	86
Figura 2.8. Indicador Φ_p para las Sol. 4 y 6 con respecto a la Sol. 2.....	87

CAPÍTULO 3

Figura 3.1. Superestructura para el modelo sin distribución de corrientes	98
Figura 3.2. Alternativas de proceso óptimas calculadas para las configuraciones convencionales para el caso de estudio 1	106
Figura 3.3. Alternativas de proceso óptimas calculadas para las configuraciones convencionales para el caso de estudio 2	109
Figura 3.4. Modelo de superestructura con distribución de corrientes	112
Figura 3.5. Alternativas de proceso óptimas calculadas para las configuraciones con posibilidad de distribución de corrientes para el caso de estudio 1.....	114
Figura 3.6. Alternativas de proceso óptimas calculadas para las configuraciones con posibilidad de distribución de corrientes para el caso de estudio 2.....	117

CAPÍTULO 4

Figura 4.1. Superestructura de planta de tratamiento considerada.....	128
Figura 4.2. Representación de la superestructura	128
Figura 4.3.a. Solución I.A: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso I.A.....	138
Figura 4.3.b. Solución I.B: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso I.B.....	140
Figura 4.3.c. Solución I.C: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso I.C.....	141
Figura 4.4. Distribución de costos para las soluciones del caso de estudio I.....	142
Figura 4.5. Dos configuraciones alternativas para el caso de estudio I.A- soluciones $I.A^{alt1}$ y $I.A^{alt2}$	146
Figura 4.6.a. Solución II.A: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso II.A.....	149
Figura 4.6.b. Solución II.B: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso II.B.....	150
Figura 4.6.c. Solución II.C: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso II.C.....	152
Figura 4.7. Distribución de costos para las soluciones del caso de estudio II.....	154

CAPÍTULO 5

Figura 5.1. Configuraciones más usadas de plantas de tratamiento para remoción combinada nutrientes	163
Figura 5.2. Flujo de DQO y procesos del modelo ASM3 +Bio-P	168
Figura 5.3. Configuraciones de planta consideradas en el caso de estudio 1.....	184
Figura 5.4. Estructura optimizada en el caso de estudio 2.....	193
Figura 5.5. Valores de las principales variables del proceso resultantes de la optimización de cada proceso del caso de estudio 1	202
Figura 5.6. Concentración de unidades contaminantes para valores de concentración de un contaminante	206
Figura 5.7. Configuración y valores de las principales variables óptimos para el caso de estudio 2.....	208

CAPÍTULO 6

Figura 6.1. Representación de la superestructura del proceso	216
---	-----

Figura 6.2. Configuración óptima y valores de las variables principales para (a) caso I.A (solución I.A); (b) caso I.B (solución I.B); y (c) caso I.C (solución I.C).....	223
Figura 6.3. Valores óptimos para las variables para el escenario II con variaciones de $S_{NH, fresh}$. (a) Costos operativos anuales. (b) Caudales de las corrientes distintas de cero. (c) Concentraciones de los contaminantes en el efluente.....	237
Figura 6.4. Valores óptimos para las variables para el escenario II con variaciones de $S_{PO, fresh}$. (a) Costos operativos anuales. (b) Caudales de las corrientes distintas de cero. (c) Concentraciones de los contaminantes en el efluente.....	239
Figura 6.5. Valores óptimos para las variables para el escenario II con variaciones de $X_{S, fresh}$. (a) Costos operativos anuales. (b) Caudales de las corrientes distintas de cero. (c) Concentraciones de los contaminantes en el efluente.....	244
Figura 6.6. Configuración óptima y valores de las variables principales del proceso para la síntesis y diseño de los afluentes del (a) Caso II.(-25% S_{PO}); (b) Caso II.(+25% S_{PO}).....	243

ÍNDICE DE TABLAS

CAPÍTULO 1

Tabla 1.1. Principales procesos biológicos empleados en la depuración de agua residual (Metcalf y Eddy, 1995)	5
--	---

CAPÍTULO 2

Tabla 2.1. Coeficientes estequiométricos incógnitos de la matriz ASM3	45
Tabla 2.2. Velocidad de conversión	46
Tabla 2.3. Valores de los parámetros cinéticos típicos para el modelo ASM3	48
Tabla 2.4. Valores de los parámetros estequiométricos y de composición típicos para el ASM3	48
Tabla 2.5. Parámetros del modelo del decantador y valores “default” del modelo	55
Tabla 2.6. Valores de los parámetros cinéticos empleados para el modelo ASM3 a 15 °C	58
Tabla 2.7. Alternativas de configuraciones de planta estudiadas	60
Tabla 2.8. Costos de operación anuales unitarios	74
Tabla 2.9. Factores de peso β_{cont} para los contaminantes (g unidades contaminantes g ⁻¹)	76
Tabla 2.10. Especificaciones del agua residual afluyente	76
Tabla 2.11. Valores umbral permitidos de descarga para el líquido tratado	77
Tabla 2.12. Valores máximos para las variables de operación	78
Tabla 2.13. COTA de las soluciones encontradas (€/año)	81
Tabla 2.14. Soluciones óptimas para la configuración de <i>PreDN</i> . Variables principales	85
Tabla 2.15. Soluciones óptimas para la configuración de <i>PostDN</i> . Variables principales	87

CAPÍTULO 3

Tabla 3.1. Especificaciones del agua residual afluyente	96
Tabla 3.2. Soluciones óptima y alternativas para el caso de estudio 1	107
Tabla 3.3. Soluciones óptima y alternativas para el caso de estudio 2	110
Tabla 3.4. Soluciones óptima y alternativas para el caso de estudio 1 con posibilidad de distribución de corrientes	115
Tabla 3.5. Solución óptima y alternativas para el caso de estudio 2 con posibilidad de distribución de corrientes	118

CAPÍTULO 4

Tabla 4.1. Parámetros b y α para las funciones de costo de inversión	133
Tabla 4.2. Especificaciones de las aguas residuales.....	135
Tabla 4.3.a. Solución I.A: Valores de las principales variables óptimas para el caso I.A	138
Tabla 4.3.b. Solución I.B: Valores de las principales variables óptimas para el caso I.B.....	140
Tabla 4.3.c. Solución I.C: Valores de las principales variables óptimas para el caso I.C	141
Tabla 4.4. Tres soluciones equivalentes para la "solución real o física" I.A.....	144
Tabla 4.5. Valores óptimos de las variables principales para las Soluciones $I.A^{alt1}$ y $I.A^{alt2}$	146
Tabla 4.6.a. Solución II.A: Valores de las principales variables óptimas para el caso II.A.....	149
Tabla 4.6.b. Solución II.B: Valores de las principales variables óptimas para el caso II.B.....	150
Tabla 4.6.c. Solución II.C: Valores de las principales variables óptimas para el caso II.C	152
Tabla 4.7. Costos detallados de las soluciones.....	156

CAPÍTULO 5

Tabla 5.1. Componentes del modelo ASM3 + Bio-P.....	166
Tabla 5.2. Coeficientes estequiométricos incógnitos de la matriz	174
Tabla 5.3. Velocidad de conversión.....	177
Tabla 5.4. Valores de los parámetros cinéticos del ASM+BioP a 20°C y dependencia exponencial de la temperatura ($/\theta T$); y valores a 15 °C empleados en la tesis.....	178
Tabla 5.5. Valores de los parámetros estequiométricos y de composición para el ASM3+Bio-P	180
Tabla 5.6. Especificaciones del agua residual afluyente	199
Tabla 5.7. Costos y valores de las variables principales del proceso para cada configuración del caso de estudio 1.....	204
Tabla 5.8. Costos y valores de las variables principales del proceso para el caso de estudio 2	207

CAPÍTULO 6

Tabla 6.1. Especificaciones del agua residual afluyente para el caso de estudio I.A	220
Tabla 6.2. Valores óptimos de las variables principales para (a) caso I.A (solución I.A); (b) caso I.B (solución I.B); y (c) caso I.C (solución I.C).	224
Tabla 6.3. Detalle de los costos para las soluciones óptimas para cada caso de estudio del escenario I (en Euros).....	224
Tabla 6.4. Análisis de sensibilidad de la Solución I.A.....	227
Tabla 6.5. Especificaciones de concentraciones y costos operativos para el escenario II.....	233
Tabla 6.6. Valores óptimos de las variables principales para la síntesis y diseño de los afluentes del (a) Caso II.(-25% SPO); (b) Caso II.(+25% SPO)	243

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN. ASPECTOS GENERALES

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN. ASPECTOS GENERALES	1
1.1 Tratamiento de aguas residuales	2
1.1.1 Necesidad del tratamiento	2
1.1.2 Sistemas de tratamiento de aguas residuales	3
1.1.3 Tratamiento biológico (secundario)	5
1.1.4 Proceso de tratamiento por barros activados	7
1.1.5 Sistemas de tratamiento basados en barros activados	9
1.1.6 Configuraciones de plantas convencionales de tratamiento basadas en barros activados	10
1.2 Introducción al diseño, síntesis y optimización de procesos	14
1.2.1 Representación de alternativas	15
1.2.2 Programas matemáticos	16
1.2.3 Estrategias de solución	17
1.3 Modelos para sistemas de barros activados	21
1.4 Revisión bibliográfica de síntesis de procesos de tratamiento de aguas residuales	24
1.5 Motivación y diagramación de la tesis	26

Para llevar adelante el trabajo de investigación propuesto es necesario conjugar y por tanto, estudiar y profundizar principalmente dos disciplinas en el campo de la ingeniería. Resulta fundamental el estudio de los procesos de tratamiento de aguas residuales basados en barros activados más ampliamente usados; más específicamente, el estudio y entendimiento de los mecanismos de depuración biológica de aguas residuales por barros activados y las distintas alternativas estructurales comúnmente en uso. Paralelamente, se debe abordar el estudio y aplicación de técnicas de programación matemática para desarrollar, implementar y resolver modelos de síntesis y diseño a través de algoritmos eficientes.

1.1 Tratamiento de aguas residuales

1.1.1 Necesidad del tratamiento

El descubrimiento de la conexión entre enfermedades, como el cólera, y la calidad de las aguas revolucionaron la forma de gerenciar los sistemas acuáticos. Se construyeron canales cerrados y conductos para transportar las aguas servidas y alejarlas de las áreas urbanas. El sistema de colección de aguas residuales continuó su expansión y cada vez mayores cantidades de aguas residuales se fueron depositando en zonas específicas, lejos de los cuerpos de aguas. Esto constituyó el paso más importante hacia la solución de los problemas de las epidemias transportadas por el agua, pero surgió entonces un nuevo problema: el tratamiento de esas aguas contaminadas.

Con la proliferación de la industrialización se incrementó el consumo de agua y la facilidad de la disposición final de las aguas residuales trajo aparejado un rápido crecimiento de los impactos en los ecosistemas acuáticos. A fines del siglo XIX comenzaron los descubrimientos de los efectos de las aguas residuales en los cauces de agua y, consecuentemente, los experimentos en el campo de la purificación de las aguas. La preocupación principal fue la de mejorar su aspecto físico, concentrando los esfuerzos en los procesos de filtrado y sedimentación, a los que le siguió el tratamiento químico. Los procesos de barros activados se desarrollaron a comienzos del siglo XX.

El objetivo de este proceso era la remoción de las sustancias que consumían oxígeno, mediante aireación en compartimentos de las aguas residuales mezcladas con microorganismos, favoreciendo la degradación de las sustancias indeseables antes que las aguas alcancen los cauces naturales. A comienzo de la década del '70 el interés se enfocó en la remoción de los nutrientes biológicos (nitrógeno y fósforo), acelerándose en los '80, coincidentemente con una mayor atención a las cuestiones ambientales. La gran cantidad de nitrógeno y fósforo presente en las aguas residuales es una de las principales causas de eutrofización que afecta a muchos cuerpos de agua, tanto dulce como salada. La eutrofización consiste en un aumento anormal de nutrientes en un ambiente dado. En general, el nitrógeno y el fósforo son los factores limitantes del crecimiento de la biomasa en un ecosistema. La descarga puntual de contaminantes provoca una serie de sucesos que modifican la composición y la dinámica del ecosistema: aumenta la fotosíntesis a nivel superficial con aumento de la biomasa y empobrece la biodiversidad con proliferación de algas unicelulares. Como consecuencia de ello, se produce un enturbiamiento superficial y se inhibe la fotosíntesis en la profundidad, aumentando la actividad metabólica consumidora de oxígeno, lo que hace inviable la existencia de la mayoría de las especies que conforman dicho ecosistema.

Así, el problema central en el tratamiento de aguas residuales consiste en diseñar procesos confiables y robustos que reduzcan el contenido de materia orgánica y nutrientes biológicos a los estándares regionales de vertido.

1.1.2 Sistemas de tratamiento de aguas residuales

Los *sistemas de tratamiento de aguas residuales* consisten generalmente en una secuencia de procesos que dependen de las características del agua residual a tratar y del grado de purificación requerido según los niveles de contaminación permitidos por la legislación, lo que depende fuertemente del lugar de descarga y cuerpo receptor. La secuencia de procesos consiste básicamente en una serie de tratamientos denominados tratamiento previo, primario, secundario y, eventualmente, terciario y cuaternario.

Los tratamientos previo y primario tienen como finalidad acondicionar el efluente para los tratamientos posteriores. Consisten en eliminar por medio de métodos físicos elementos que puedan dañar a los equipos o procesos subsiguientes en la planta, así como estabilizar el caudal o ajustar el pH. Estos equipos, entre los que se pueden

enumerar decantadores, sedimentadores primarios, tamices, desgrasadores y tanques de estabilización, eliminan sólidos inorgánicos de las aguas residuales y gran parte de la materia orgánica presente. También se pueden incluir dentro de esta clasificación procesos químicos de coagulación y floculación.

Los tratamientos secundarios incluyen procesos biológicos y químicos. Los procesos biológicos comprenden tratamiento por barros activados, sistemas de lecho fluidizado, lagunas aireadas, tratamientos anaerobios, tratamientos de percolación como los filtros biológicos, humedales, entre otros. El más habitual, y en el que está focalizado el estudio de esta tesis, es el proceso biológico por barros activados. En este proceso se ponen en contacto el agua residual proveniente del tratamiento primario con microorganismos que utilizan la materia orgánica y nutrientes contenidos en el agua residual para llevar a cabo sus funciones vitales; esto es, degradan la materia orgánica para la obtención de energía que utilizan para respiración, crecimiento y reproducción.

Los procesos de tratamiento secundario de las aguas residuales por barros activados emplean, en general, un reactor tubular o una serie de reactores de mezcla completa en los que se pone en contacto el efluente proveniente del tratamiento primario con un líquido que contiene microorganismos. Estos reactores tienen sistemas de burbujeo y/o agitación que garantizan las condiciones apropiadas (aerobias, anóxicas o anaerobias) para las reacciones microbiológicas. El efluente proveniente de la cadena de reactores se alimenta generalmente a un decantador que separa esta corriente en el efluente líquido clarificado y en los barros. Una fracción de estos barros se recicla a la red de reactores y la otra se desecha o purga para compensar el aumento de la concentración de biomasa debido a su crecimiento. El agua clarificada se somete a tratamientos posteriores para pulido final o se descarga en el cuerpo receptor en el caso que se hayan conseguido los estándares de calidad establecidos. Las estrategias de operación posibles incluyen la distribución de la alimentación a lo largo de la zona de reacción y el reciclaje de corrientes de un reactor a otro.

Por último, los tratamientos terciarios y cuaternarios son procesos de refinamiento y se utilizan en caso de necesidad e incluyen tratamientos como filtración, lagunaje, desinfección con cloro u ozono, precipitación química de fósforo con sales de hierro, etc. No es motivo de esta tesis el análisis de las distintas alternativas existentes. Aquí nos concentraremos en los procesos de barros activados.

1.1.3 Tratamiento biológico (secundario)

Los tratamientos biológicos se basan en la utilización de microorganismos capaces de asimilar las sustancias en suspensión o disueltas presentes en el agua residual, a fin de incorporarlas al metabolismo celular y obtener energía para sus funciones vitales. Con un control adecuado de las condiciones ambientales (presencia o ausencia de oxígeno, pH óptimo, temperatura y mezcla) es posible conseguir el desarrollo de una biomasa capaz de depurar el agua residual hasta alcanzar el grado de tratamiento deseado. Los principales procesos biológicos utilizados en el tratamiento de un agua residual se resumen en la Tabla 1.1 (Knobelsdorf, 2005; Metcalf y Eddy, 1995).

Tabla 1.1. Principales procesos biológicos empleados en la depuración de agua residual (Metcalf y Eddy, 1995)

Procesos aerobios	Cultivo en suspensión	Barros activados	Continuos	Flujo pistón
		Lagunas aireadas	Discontinuos	Mezcla completa
Procesos anóxicos	Cultivo Fijo	Biodiscos rotativos	Aireación prolongada	
		Filtros percoladores	Canales de oxidación	
Procesos anaerobios	Cultivo en suspensión	Digestión anaerobia	Nitrificación	Alta carga
		Filtro anaerobio		Baja carga
Procesos combinados (anaerobios-anóxicos-aerobios)	Cultivo fijo	Lecho expandido		Doble etapa
		Nitrificación-denitrificación		
		Nitrificación-denitrificación-eliminación de fósforo		

La depuración biológica de las aguas residuales usando alguna de las formas de los procesos de barros activados ha demostrado ser uno de los métodos más efectivos para el tratamiento tanto de efluentes municipales como de desechos orgánicos industriales (Metcalf y Eddy, 1972).

Si bien se han desarrollado diferentes tipos de procesos biológicos, los más empleados en el tratamiento de aguas residuales urbanas son el proceso de barros activados y la tecnología de biopelícula (Metcalf and Eddy, 1995; Knobelsdorf, 2005).

Los procesos biológicos que ocurren en las aguas residuales se pueden llevar a cabo en cultivo en suspensión y en cultivo fijo. En los primeros, las bacterias forman flóculos que se encuentran dispersos en todo el medio de reacción. En los segundos, las bacterias están fijadas a un material soporte. Nicolella et al. (2000) diferencian el tratamiento biológico según el grado de asociación de los agregados microbianos en tres tipos: los de biofilm estático (ej. filtros percoladores), de biofilm particulado (ej. reactores de biofilm de lecho fluidizado, reactores anaeróbicos de manto de lodo de flujo ascendente o biofilm de lecho suspendido) y en flóculos (proceso de barros activados).

Mientras que en los sistemas por barros activados los organismos se encuentran continuamente en movimiento, siendo característica esencial la agitación mecánica o de aireación para conservar los flóculos en suspensión, en los lechos bacterianos quedan unidos de forma fija al soporte inerte que les sirve de base. La fauna de los barros activados se reduce a microorganismos, mientras que en los lechos bacterianos existen formas de vida superiores, gusanos e insectos. En los sistemas por barros activados la masa microbiana en exceso se controla por medio de la purga del sistema, mientras que en los lechos bacterianos el exceso de biopelícula se elimina en los sistemas aerobios por desprendimiento de las capas profundas del biofilm por la formación de gas en condiciones anaerobias; y en los sistemas anaerobios por desprendimiento de biofilm por esfuerzo de corte entre el líquido y las partículas, o por colisiones de las partículas entre sí (Hernandez, 1996).

Esta tesis trata únicamente con procesos continuos de barros activados.

1.1.4 Proceso de tratamiento por barros activados

El proceso por barros activados es el sistema más ingenioso concebido para el tratamiento biológico de aguas residuales domésticas e industriales. Como se expresó anteriormente, es uno de los procesos tradicionales para la remoción efectiva del material orgánico carbonoso, aplicándose exitosamente en las últimas décadas para la remoción de nitrógeno y fósforo. Ha servido también de plataforma para importantes y promisorios esfuerzos de investigación en las ciencias ambientales, mejorando el entendimiento de los mecanismos microbianos involucrados (Artan y Orhon, 2005).

El esquema de llenado/vaciado, que constituye el principio básico del sistema de reactores batch secuenciales (conocido como *Sequential Batch Reactors SBR*), dio comienzo al desarrollo de los sistemas de barros activados. Una detallada revisión de la evolución histórica de los procesos de barros activados fue presentada por Wilderer et al. (2001). En 1914 Arden y Lockett reportaron que el uso repetido de los barros activados en el tratamiento de aguas residuales mejoraba el potencial de purificación de la aireación simple; observaron que la mejora estaba estrechamente relacionada con la proporción de barros activados respecto al agua residual tratada. También concluyeron que se podía obtener un efluente claro y bien oxidado después de la aireación del agua residual en contacto con los fangos activados por un período de 6 a 9 horas, período usado en la actualidad como parámetro de diseño. Experimentos similares de vaciado-llenado llevados a cabo en el mismo año en la Universidad de Illinois por Mohalmenn corroboraron la capacidad de los barros activados para estabilizar aguas residuales, y un período de aireación de 6 horas para un tratamiento satisfactorio (Artan y Orhon, 2005).

Artan y Orhon (2005) y Cooper (2002) describen con detalle los comienzos del proceso de barros activados.

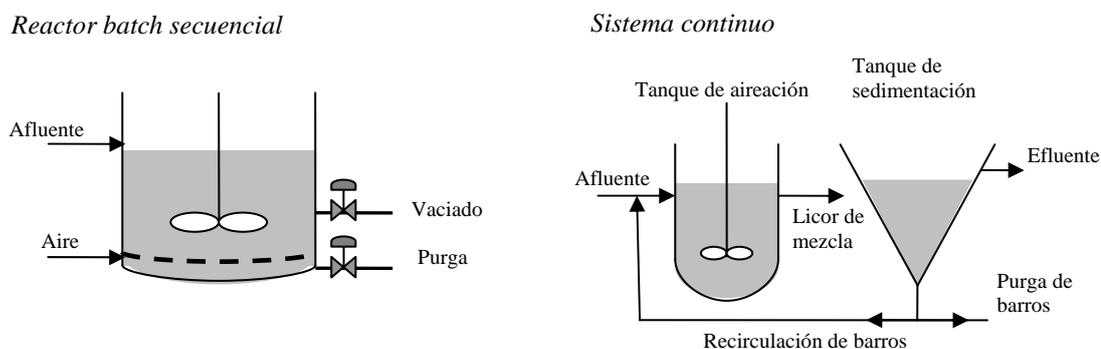
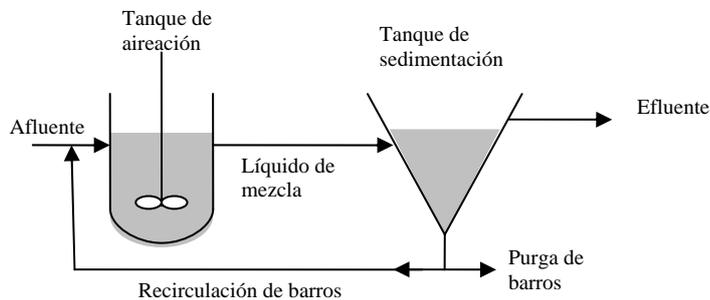


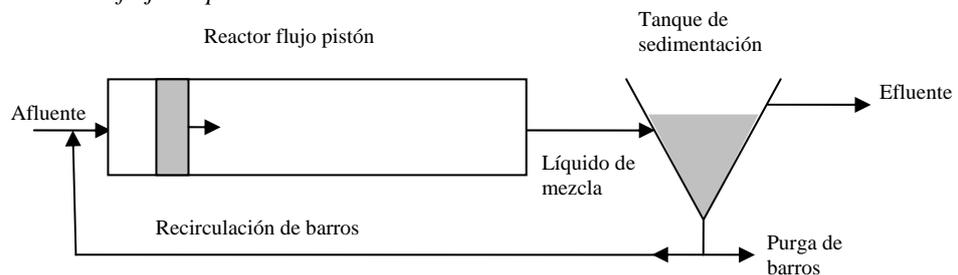
Figura 1.1. Esquema básico del proceso de barros activados

La Figura 1.1 muestra la configuración básica del proceso de barros activados. Consta de un reactor donde se mantiene en suspensión un cultivo microbiano capaz de asimilar la materia orgánica presente en el agua residual a depurar. El proceso requiere un sistema de aireación y de agitación que suministre el oxígeno requerido por las bacterias encargadas de la depuración, evite la sedimentación de los flóculos en el reactor y permita la homogeneización de los barros activados. Al cabo de un período determinado, y una vez que la materia orgánica ha sido suficientemente oxidada, el líquido de mezcla se envía a un tanque de sedimentación (decantador secundario) donde se separa el barro biológico del agua clarificada. Una parte de la biomasa decantada se recircula al reactor para mantener una concentración de microorganismos adecuada, mientras que el resto de los barros se purgan del sistema para evitar una acumulación excesiva de biomasa y controlar el tiempo medio de retención de la misma. Los barros activados están constituidos por la biomasa formada y la materia particulada aportada por el agua residual (Winkler, 1998; Lee, 1996).

a) Reactor de mezcla completa



b) Reactor de flujo en pistón



c) Reactor discontinuo

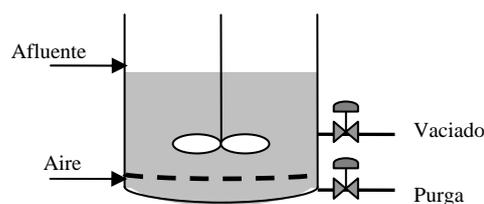


Figura 1.2. Formas de operación posible del proceso de barros activados

La Figura 1.2 muestra las diferentes formas de operación del proceso de barros activados. Si bien originalmente los reactores fueron operados en régimen discontinuo, como unidades de llenado-vaciado, la necesidad de tratar grandes caudales y problemas operacionales y de control obligaron a su transformación en reactores de flujo continuo (Knobelsdorf, 2005; Barajas, 2002).

1.1.5 Sistemas de tratamiento basados en barros activados

Un proceso de barros activados de flujo continuo para eliminación biológica de nutrientes (EBN) consta de diferentes etapas, cada una de las cuales efectúa una fase determinada del tratamiento.

La asimilación/reducción biológica de nitrógeno se consigue por dos procesos sucesivos: la nitrificación y la denitrificación. En la nitrificación, el amoníaco es oxidado a nitritos y nitratos bajo condiciones aerobias. En la denitrificación, los nitratos y los nitritos son utilizados en condiciones anóxicas por bacterias heterótrofas facultativas como aceptores finales de electrones para la respiración celular; como resultado de ello se produce nitrógeno gas que escapa a la atmósfera, así como un consumo de carbono orgánico biodegradable (Aravinthan et al., 2000). La velocidad de crecimiento de los microorganismos autótrofos, promotores de la nitrificación, es muy lenta respecto a la de los heterótrofos, siendo necesario largos tiempos de retención de los lodos para permitir la nitrificación. Esto puede causar un crecimiento excesivo de heterótrofos y acumulación de sólidos inertes. Por su parte, el proceso de denitrificación, que constituye el segundo paso en la remoción de nitrógeno, depende de la relación Carbono/Nitrógeno (C/N) de la corriente del efluente a tratar. Una relación baja limita la eficiencia de la remoción de nitrógeno.

Al igual que la de nitrógeno, la remoción biológica de fósforo (*Enhanced Biological Phosphorus Removal, EBPR*) requiere de dos ambientes bien diferenciados: uno estrictamente anaerobio con una cantidad suficiente de sustrato orgánico de rápida biodegradación, y otro aerobio o anóxico. La remoción de fósforo tiene lugar cuando un conjunto de bacterias que almacenan una cantidad de fósforo considerable, denominadas “bacterias acumuladoras de polifosfatos” (*Polyphosphate Accumulating Organisms, PAOs*), se separan por decantación del agua residual tratada. Durante la fase anaerobia, carente de nitratos y de oxígeno disuelto, las bacterias toman del medio la

materia orgánica fácilmente biodegradable acumulándola en su interior como material de reserva (biopolímeros) y liberando fosfatos (ortofosfatos) del interior de las células. A diferencia de la mayoría de las bacterias, los PAOs son capaces de almacenar ácidos grasos volátiles (VFA), principalmente en forma de polihidroxialcanoatos (PHAs) y glicógeno para ser usados durante la segunda fase del proceso de remoción biológica. La fuente de energía para esta primera fase proviene de la hidrólisis del polifosfato contenido en las células. El otro biopolímero, el glicógeno, que en general sirve como regulador del balance redox en la célula, provee también energía adicional, contribuyendo al almacenamiento de sustrato orgánico en la fase anaeróbica. En la fase aerobia, las bacterias usan el sustrato almacenado en la fase anaerobia como fuente de energía para la respiración y el crecimiento, a la vez que asimilan fósforo en cantidades mayores a las liberadas previamente. Este proceso tiene lugar en condiciones aeróbicas pero también puede ocurrir en condiciones anóxicas usando nitratos como aceptor de electrones para la respiración vía desnitrificación. El proceso depende de la disponibilidad de VFA para asegurar el almacenamiento de PHA, y de la presencia y remoción de los PAOs. Por tanto, los factores más importantes son la cantidad de VFA disponible y la separación de los barros. Otros factores importantes son el tiempo de retención en el tanque anaeróbico, la concentración de nitratos en el reactor anaeróbico y el valor del pH.

La eliminación biológica simultánea de nitrógeno y fósforo se consigue modificando el proceso de barros activados de modo que incluya zonas con y sin aireación, creando una secuencia de zonas aerobias, anóxicas y anaerobias. En cada zona de los sistemas continuos se logra, mediante selección natural, el desarrollo de bacterias especializadas que promueven los diferentes procesos necesarios para la remoción de nitrógeno y fósforo: nitrificación y desnitrificación, y acumulación de fósforo en las células y su redisolución.

1.1.6 Configuraciones de plantas convencionales de tratamiento basadas en barros activados

Según se expresó anteriormente, en general, los sistemas de barros activados emplean reactores aireados de mezcla completa o flujo pistón, o una serie de reactores de mezcla completa para facilitar las reacciones biológicas. Las estrategias empleadas

en estos sistemas para aumentar la eficiencia incluyen la distribución de la corriente de agua residual afluyente a cualquier punto de la zona de reacción y/o la incorporación de reciclos de una zona a otra. La corriente que egresa de la zona de reacción generalmente es alimentada a un sedimentador para su separación en la corriente de efluente clarificado y la corriente de barros, una fracción de la cual es reciclada a la zona de reacción. La otra fracción de barros se purga del sistema para compensar el aumento de la concentración de biomasa debido al crecimiento durante los procesos de biodegradación, y se destina para su tratamiento y disposición final.

Se han propuesto y ensayado varias alternativas y configuraciones de tratamiento. La Figura 1.3 indica algunos de los sistemas de eliminación biológica de nutrientes desarrollados hasta la fecha (Knobelsdorf, 2005; Van Haandel et al., 1981).

Cuando no se requiere la remoción de nitrógeno, un proceso conocido como *proceso A/O* (Fig. 1.3.a y b) provee la configuración más simple para la eliminación de fósforo en sistemas de barros activados de flujo continuo. La Figura 1.3.b presenta zonas anaeróbicas y aeróbicas, ambas conformadas por un reactor de mezcla completa, a diferencia de la Figura 1.3.a, en la que cada zona está representada por una secuencia de múltiples reactores. El proceso A/O consiste en una secuencia de zonas sin aireación para la actividad microbológica anaeróbica seguido por zonas aerobias. La zona aerobia está diseñada para la remoción de la materia orgánica y la zona anaerobia para la eliminación de fósforo.

Para la eliminación de nitrógeno, se modifica el proceso A/O cambiando la zona anaerobia por una zona anóxica, y se incluye un flujo de recirculación interno (reciclo de licor nitrificado) para alcanzar mayores grados de denitrificación (Fig. 1.3.c). Este último se conoce como *proceso A/O_N*, de *predenitrificación* o *Ludzack-Ettinger modificado*, y tiene la desventaja de que no se puede lograr una remoción total de nitrógeno, necesiéndose una tasa alta de reciclo interno para aumentar la eficiencia, por lo que conlleva un costo de bombeo importante. El proceso *Ludzack-Ettinger* original (Fig. 1.3.d) es similar al anterior pero utiliza los dos reactores con comunicación parcial y el reciclo de barros se realiza al reactor aerobio; como consecuencia de esto, se alcanza un grado de denitrificación muy pobre. Las configuraciones de *postdenitrificación* y de *prepostdenitrificación* son dos alternativas al proceso A/O_N, en las cuales la zona anóxica se ubica en diferentes posiciones relativas respecto a la zona aerobia.

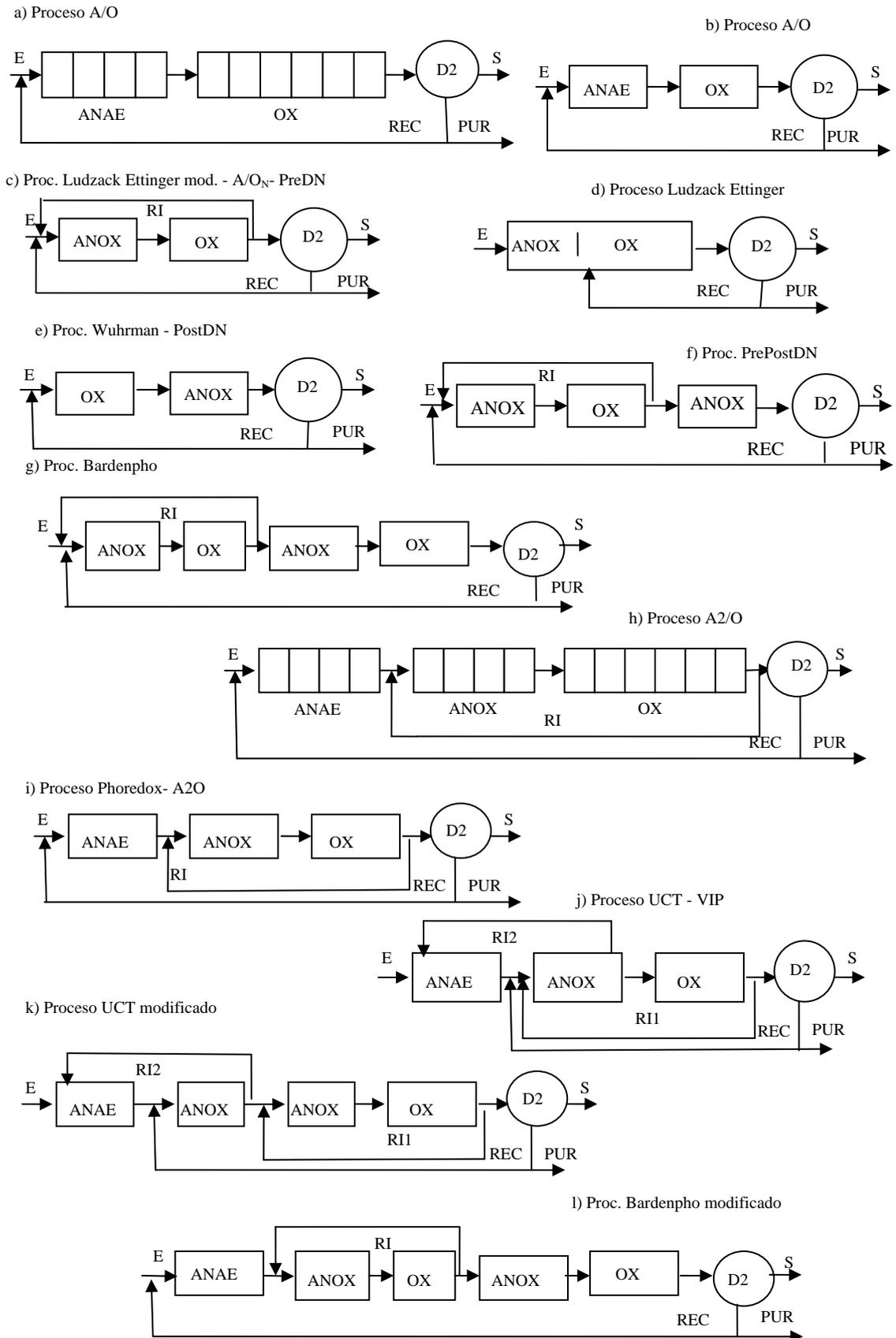


Figura 1.3. Sistemas de eliminación biológica de nutrientes

En la configuración de *postdenitrificación* o proceso *Wuhrman* (Fig. 1.3.e) la zona anóxica se encuentra ubicada a continuación de la aeróbica y, por lo tanto, carece de reciclo interno. Sin embargo, en esta configuración se puede presentar denitrificación en el decantador, lo que causa una decantación pobre y, consecuentemente, aumento de la cantidad de barros en el líquido tratado. Este esquema puede requerir generalmente la incorporación de una fuente de carbono externa ya que la DQO (demanda química de oxígeno o COD, por sus siglas en inglés) fácilmente biodegradable del efluente es consumida por la biomasa aeróbica en la primera zona.

La estructura del proceso de *prepostdenitrificación* (Fig. 1.3.f) es una combinación de los dos anteriores. Finalmente, en la Figura 1.3.g se muestra el esquema del proceso *Bardenpho de 4 etapas* con dos zonas de denitrificación y una zona aeróbica final que evita la denitrificación y la consecuente flotación de los barros en el decantador secundario.

Las Figuras 1.3.h, i, j y k muestran configuraciones para eliminación de nitrógeno y fósforo con secuencias de zonas anaeróbica, anóxica y aeróbica. Los procesos *A2/O* y *Phoredox* presentan un reciclo externo de barros desde el decantador secundario al primer reactor anaeróbico. El reciclo interno recircula el licor nitrificado desde la salida del último reactor aerobio al primer reactor anóxico. El *proceso UCT* (University of Cape Town) o *proceso VIP* (Virginia Initiative Plant) se diferencia del anterior en que la recirculación externa se realiza al reactor anóxico en vez de al reactor anaeróbico, eliminando así la entrada de oxígeno disuelto y de nitratos a esta zona. Se hace necesario incorporar en esta configuración una segunda corriente de recirculación interna desde la zona anóxica a la anaerobia. La Figura 1.3.k muestra el *proceso UCT modificado* que divide la zona anóxica en dos zonas. La primera recibe los barros activados recirculados, y desde esta misma se recircula una corriente a la zona anaeróbica previa; mientras que la segunda zona anóxica recibe el reciclo interno nitrificado desde la zona aeróbica, y es donde tiene lugar el proceso de denitrificación.

El *proceso Bardenpho de 5 etapas* mostrado en la Figura 1.3.l es una extensión del proceso *Bardenpho de 4 etapas* original de modo de facilitar la eliminación de fósforo. Este último proceso proporciona una buena remoción de nutrientes pero requiere un gran volumen total de reacción.

El diseño de los procesos existentes se basa en pruebas a escala de planta piloto o en estudios de simulación. Además de los diseños anteriormente mencionados, se han

desarrollados otros diseños de proceso con el objeto de mejorar el proceso de tratamiento tanto continuo como batch. La elección de una configuración frente a otras depende de diversos *trade-offs* y factores tecnológicos y económicos, además del tipo de aguas a tratar. De esta manera, se requiere un análisis detallado para cada caso investigado. Por esto, resulta interesante la formulación de modelos matemáticos para la síntesis sistemática de tales procesos.

1.2 Introducción al diseño, síntesis y optimización de procesos

En la presente tesis se abordará la síntesis y diseño óptimos de procesos de tratamiento de aguas residuales. Se entiende por *síntesis de proceso* la selección de las unidades y sus interconexiones para obtener la estructura (*flowsheet*) del mismo, mientras que el *diseño de procesos* comprende el dimensionamiento de las unidades. Inicialmente se abordarán problemas más simples de optimización de las condiciones operativas del proceso con el objetivo de ganar entendimiento del mismo y obtener valores adecuados para inicializar los problemas posteriores.

Existen dos principales enfoques para determinar la estructura y las condiciones de operación óptimos de un proceso. Uno es el enfoque secuencial, que opera en pasos sucesivos, fijando algunos elementos en el *flowsheet* y usando reglas heurísticas para determinar las direcciones de mejora. Si bien este enfoque es de simple implementación, la naturaleza secuencial puede derivar en soluciones sub-óptimas. El otro enfoque es la optimización simultánea usando programación matemática, que es la estrategia que se utiliza en la presente tesis para la resolución de los problemas de síntesis y diseño de procesos. Esta estrategia requiere el modelado de una superestructura que incluya equipos que pueden ser seleccionados o descartados para la conformación del *flowsheet* final, así como las interconexiones entre los mismos. Las ecuaciones que representan las unidades de proceso (balances de masa, expresiones de velocidad de reacción, estimación de propiedades físico-químicas, etc.) y sus interconexiones, y las restricciones para las condiciones de operación son incorporadas en un problema de optimización para el cual se especifica una función objetivo como la minimización de costos o la maximización del rendimiento (Yeomans y Grossmann,

1999; Grossmann et al., 1999; Grossmann et al., 2000; Westerberg, 2004; Biegler, Grossman y Westerberg, 1997).

La principal ventaja de las estrategias de programación matemática para la síntesis de procesos reside en el hecho que se lleva a cabo simultáneamente la optimización de la configuración del proceso y las condiciones de operación. La desventaja consiste en que no se pueden garantizar las condiciones de optimalidad global para modelos no lineales, a menos que se usen métodos específicos para optimización global (Yeomans y Grossmann, 1998).

Dado que los resolvedores de GAMS para problemas de programación matemática del tipo no lineal (*non linear program NLP*) que se utilizan en esta tesis no pueden garantizar optimalidad global y que los programas para optimalidad global no pueden manejar problemas de gran tamaño, como los que resultan del tipo de procesos que se tratan aquí, se necesita asegurar que se consiga una buena solución al problema. Además, es sabido que cuando se presentan fuertes y múltiples no linealidades, sumadas a un amplio espacio combinatorio desde el punto de vista estructural, es posible o habitual encontrar soluciones óptimas locales diferentes, dependiendo del punto inicial utilizado para la optimización. Por lo tanto, es necesario lograr una adecuada inicialización para asegurar un “buen” óptimo local para cada uno de los casos analizados, al igual que explorar el espacio de soluciones obtenidas.

1.2.1 Representación de alternativas

La programación matemática orientada al diseño, integración y operación de procesos, o más genéricamente, a los problemas de síntesis, consiste en tres pasos principales. El primero es el desarrollo de una representación de las alternativas, de entre las cuales se elige la solución óptima. Esta representación consiste en un modelo de *superestructura* de todas las alternativas o configuraciones de proceso posibles. El segundo paso consiste en la formulación del programa matemático que generalmente involucra variables discretas y continuas para la selección de la configuración del sistema y las variables de operación, respectivamente. Este programa matemático responde al modelo de superestructura planteado y comprende las ecuaciones que describen los distintos procesos que representan la planta a optimizar. El tercer paso es la resolución del modelo de optimización del cual se determina la solución óptima. Esta

metodología ha permitido avances significativos, ofreciendo a los ingenieros de diseño y de procesos una herramienta eficaz para la exploración de alternativas y optimización de procesos en general (Grossmann, 2000). Como ejemplos, en el área de la ingeniería química podemos mencionar la síntesis de redes de intercambiadores de calor, sistemas de separación, sistemas de reacción o sistemas de ciclos/separadores/reactores, entre otros problemas típicos.

1.2.2 Programas matemáticos

Los problemas de síntesis y diseño de procesos pueden dar lugar a problemas de optimización con variables discretas y continuas, que al ser representados en forma algebraica, corresponden a problemas de optimización del tipo mixta entera, que pueden formalizarse según el siguiente formato matemático:

$$\begin{aligned} \min & f(x, y) \\ \text{con} & h_m(x, y) = 0, m \in M, M \text{ conj. de restr. de igualdad} \\ & g_p(x, y) \leq 0, p \in P, P \text{ conj. de restr. de desigualdad} \\ & x \in X \subseteq R^n, \\ & y \in Y = \{0,1\}^l \end{aligned}$$

donde x es un vector de n variables continuas que representan generalmente a las variables de estado o de diseño, mientras y es un vector de l variables discretas, restringidas a tomar generalmente los valores 0–1 para definir la selección de un proceso o una acción. El conjunto $h_m(x, y) = 0$ son las m restricciones de igualdad que describen la performance del sistema (por ejemplo, los balances de masa y las ecuaciones de diseño), y $g_p(x, y) \leq 0$ son las p restricciones de desigualdad que corresponden a las especificaciones de diseño y a restricciones lógicas o de factibilidad. La función $f(x, y): R^n \times Y^l \rightarrow R$ es la función objetivo a optimizar (por ej. los costos, beneficios u otro criterio). Además, las variables continuas x están restringidas a un conjunto de restricciones sencillas, generalmente cotas, que definen el conjunto X .

El caso más general de este tipo de problemas, cuando alguna de las funciones es no-lineal, da lugar a un problema del tipo mixto entero no lineal (*mixed integer non*

linear program MINLP). Si todas las funciones son lineales, el problema es del tipo mixto entero lineal (*mixed integer lineal program MILP*). Si no existen variables enteras o binarias 1-0, el problema MINLP se reduce a un programa no lineal (NLP) o lineal (LP) dependiendo si las funciones no son o son lineales, respectivamente (Biegler and Grossmann, 2004).

Los problemas de programación matemática derivados a lo largo de esta tesis fueron formulados y resueltos en el sistema de modelado y optimización GAMS (*Generalized Algebraic Modeling System*) (Brooke et al., 1998).

1.2.3 Estrategias de solución

Los problemas de programación matemática a resolver de esta tesis resultan del tipo NLP (o DNLP) y MINLP.

Los revolvedores disponibles en GAMS para los problemas del tipo NLP son CONOPT, MINOS y SNOPT. Cada uno de ellos intenta encontrar un óptimo local del problema recurriendo a un algoritmo matemático diferente. Por tanto, uno puede resultar mejor que otro dependiendo del problema a resolver.

El algoritmo usado en *GAMS/CONOPT* está basado en el algoritmo de *gradiente reducido generalizado GRG*, originalmente propuesto por Abadie y Carpentier en 1969, con modificaciones para hacerlo eficiente para problemas de gran tamaño. Se recomienda *CONOPT2* para problemas con muchas restricciones no lineales y, si bien está diseñado para resolver problemas NLP, puede ser también aplicado para la resolución de problemas con funciones no diferenciables (problemas del tipo DNLP). Sin embargo, en tales casos no hay garantías de resolución y terminación exitosas. *CONOPT3* puede calcular derivadas segundas y es un resolvidor con submétodos basados en métodos como el de la pendiente más pronunciada (*steepest descent method*), de cuasi Newton, de programación secuencial lineal o de programación secuencial cuadrática (SQP), que usa Hessianas reducidas o gradientes conjugados. Los submétodos son seleccionados dinámicamente en base a estadísticas del modelo y medidas de performance.

El algoritmo implementado en *GAMS/MINOS* es capaz de resolver modelos de tipo LP, NLP, DNLP y RMINLP (*relaxed mixed integer non linear program*). GAMS/MINOS resuelve problemas de programación lineal con un método basado en el

primal simplex propuesto por Dantzig (1963), en el cual la matriz de las restricciones se particiona en dos matrices de acuerdo a las variables básicas y no básicas. Los modelos con restricciones lineales y función objetivo no lineal se resuelven empleando una técnica que combina los algoritmos de *gradiente reducido* GR (Wolfe, 1962) y uno de tipo *quasi-Newton* descrito en Murtagh y Saunders (1978). Los modelos con restricciones no lineales se resuelven con un *algoritmo de proyección Lagrangiana* basado en el método según Robinson (1972), ver Murtagh y Saunders (1982). El método resuelve en forma iterativa subproblemas con las restricciones no lineales linealizadas, así como las restricciones y cotas originales lineales y una función objetivo aumentada Lagrangiana. Este esquema iterativo implica que sólo la solución final óptima es factible para modelos no lineales, en contraste con el método de camino factible usado por CONOPT.

La idea básica del algoritmo *GR* es eliminar implícitamente las variables básicas (x_B) expresándolas en términos de las no básicas (x_N) y realizar la búsqueda del óptimo del problema NLP en el espacio reducido de las variables no básicas. En el algoritmo *GRG* se parte de una solución o punto factible, y se particiona la matriz de las restricciones en dos matrices, una básica y otra no básica; y se procede igual con las variables; siendo las variables básicas no degeneradas. Se calculan los vectores gradientes de las restricciones respecto a las variables básicas en dicho punto, y se calcula el gradiente reducido y con éste la dirección de búsqueda. Dicha dirección de búsqueda resulta cero para el único caso en que el punto sea un punto KKT, con lo cual el algoritmo finaliza. Si la dirección de búsqueda es distinta de cero (o suficientemente pequeña), se propone un salto a lo largo de esa dirección para encontrar un punto siguiente y comenzar una nueva iteración. Este nuevo punto se obtiene resolviendo un sistema de ecuaciones algebraicas para preservar factibilidad. Si en este nuevo punto alguna variable básica está en su cota, se saca de la base y se la reemplaza por una no básica.

El algoritmo *SQP* implementado en el resolvidor de *GAMS/SNOPT* se detalla en Gill et al. (2005).

Un problema de programación no lineal con derivadas discontinuas (*discontinuos no linear programming problem* DNLP) tiene matemáticamente las mismas características que un problema NLP, con la excepción de que en el primero pueden

aparecer funciones no suaves (como las funciones valor absoluto o funciones mínimo y máximo) en la función objetivo y/o en las restricciones. Si bien los revolvedores *CONOPT*, *MINOS* y *SNOPT* de *GAMS* no están diseñados específicamente para resolver problemas DNLP, tratan el problema como del tipo NLP asumiendo que las funciones son suaves. Por lo que se debe estar prevenido sobre la ocurrencia de inconvenientes en el proceso de solución. Algunas veces se puede recuperar factibilidad y continuar iterando, pero no se garantiza la terminación “normal” (exitosa) del procedimiento.

Los problemas del tipo MINLP representan un desafío importante ya que combinan las dificultades asociadas a la naturaleza combinatoria de los dominios entero y continuo. Entre los algoritmos desarrollados para la resolución de problemas MINLP se pueden mencionar:

- Descomposición generalizada de Benders (*Generalized Bender Decomposition GBD*) (Benders, 1962; Geoffrion, 1972);
- Ramificación y acotamiento (*Branch and Bound BB*) (Beale, 1977; Gupta, 1980);
- Aproximaciones exteriores (*Outer Approximation OA*; Duran y Grossmann, 1986). Aproximaciones exteriores con estrategias de relajación de igualdades (*Outer Approximation with Equality Relaxation OA/ER*) (Kocis y Grossman, 1987). Aproximaciones exteriores con estrategias de relajación de igualdades y penalidad aumentada (*Outer Approximation with Equality Relaxation and Augmented Penalty OA/ER/AP*) (Viswanathan y Grossman, 1990).

Estos son métodos iterativos que resuelven una secuencia alternada de subproblemas NLP y MILP con el objetivo de predecir cotas superior e inferior para la solución, las que son rigurosas si el problema es convexo.

En el algoritmo *GBD* se encuentra una cota superior e inferior de la solución del problema MINLP en cada iteración. La cota superior resulta de la solución del problema primal y la inferior del problema master. El problema *primal* es una “versión” del problema original con valores fijos para las variables binarias (esto es, es un problema en el espacio de las variables continuas) y su solución da como información un valor de cota máxima para la función objetivo y los multiplicadores de Lagrange asociados a las restricciones de igualdad y desigualdad. El problema *master* se deriva de la teoría de la

dualidad no lineal y usa los multiplicadores de Lagrange obtenidos en la resolución del primal; su solución da como información una cota inferior y un conjunto de valores para las variables enteras para ser usadas en la próxima iteración en el problema primal. El algoritmo procede de esta manera iterativamente. Se puede demostrar que la secuencia de cotas superiores es no creciente y la secuencia de cotas inferiores es no decreciente, y que se logra convergencia en un número finito de iteraciones (Floudas, 1995).

El algoritmo *BB* se basa en que el número de soluciones factibles enteras es finito, por lo que es posible su enumeración y la construcción de un árbol de búsqueda. Se explora el árbol de búsqueda por enumeración implícita de todas las alternativas. En cada nodo del árbol de búsqueda se resuelve un problema relajado fijando algunas de las variables binarias. Se encuentra una cota superior para el valor de la función objetivo en el caso de que la solución de uno de los nodos resulte factible por tener todas las variables enteras con valores no fraccionarios. Si al menos una variable entera tiene un valor fraccionario, se realiza una ramificación de ese nodo en dos nuevos, cada uno con un valor fijo (0 y 1) para dicha variable fraccionaria. El valor de la función objetivo de este problema relajado constituye una cota inferior para los problemas que descienden del nodo que le dio origen, en caso de ser un problema convexo. Un nodo se cierra cuando predice un valor de cota inferior mayor que la actual cota superior, cuando se llega a una solución factible, o cuando resulta infactible.

El *método de aproximaciones exteriores OA* consiste en la resolución sucesiva de problemas NLP y MILP con la obtención de cotas superiores e inferiores para la función objetivo original. El problema NLP se plantea fijando valores a las variables binarias, y da como resultado una cota superior. Las cotas inferiores surgen de la solución de un *problema master* (MILP), que es una representación aproximada del MINLP original, ya que posee aproximaciones lineales para las funciones del problema original en el punto solución del problema NLP. En problemas convexos la región factible definida por las aproximaciones lineales de las restricciones originales es una aproximación exterior a la región factible original. Si el problema master no tiene solución factible, la mejor solución es la encontrada anteriormente; si encuentra otra solución, ésta es analizada resolviendo el NLP de la próxima iteración. De esta forma se crea una sucesión de cotas inferiores no decreciente y cotas superiores no crecientes, y el algoritmo finaliza cuando la diferencia entre estas cotas está dentro de una tolerancia dada o cuando no encuentra solución factible para el problema MILP.

Kocis y Grossman (1987) proponen una modificación al anterior dando lugar al *método de aproximaciones exteriores con relajación de igualdades OA/ER*; es decir, para las igualdades $h(x) = 0$. La relajación de las igualdades no lineales está basada en el signo del multiplicador de Lagrange λ_i asociado a dicha desigualdad en la solución del problema NLP. Si el multiplicador asociado es positivo, la restricción $h_i(x) = 0$ se relaja como $h_i(x) \leq 0$; si es negativo, la restricción $h_i(x) = 0$ se relaja como $-h_i(x) \leq 0$; y finalmente, si $\lambda_i = 0$ la restricción se escribe como $[0 \cdot h_i(x) = 0]$, lo que equivale a no considerarla en la resolución del problema master. Con estas relajaciones se resuelve el problema como en AO.

Por su parte, con la alternativa propuesta por Viswanathan y Grossman (1990), conocida como de aproximaciones exteriores con relajación de igualdades y penalidad aumentada (*OA/ER/AP*), se evita tener que asumir convexidad para las funciones como en *AO/ER*. Se relajan las restricciones de igualdad del problema master, permitiendo que las mismas sean violadas introduciendo variables de holgura. La penalidad por la violación de las restricciones se agrega al problema como un nuevo conjunto de términos en la función objetivo, que consisten en las variables de holgura multiplicadas por factores de peso. Con la relajación de las restricciones se expande la región factible y se reduce la posibilidad de eliminar partes de la región factible del problema original.

Se pueden encontrar descripciones detalladas de algunos de estos métodos en Floudas (1995).

Uno de los resolvedores de GAMS para problemas del tipo MINLP es DICOPT, recurriendo a los resolvedores estándares para MIP (CPLEX, XA o XPRESS) y para NLP (CONOPT, MINOS o SNOPT) de GAMS para resolver los subproblemas MIP y NLP generados por él.

1.3 Modelos para sistemas de barros activados

En los sistemas de barros activados se llevan a cabo innumerables procesos que pueden ser influenciados por factores externos de diferentes maneras. La complejidad de estos sistemas hace muy difícil predecir en forma exacta y precisa el comportamiento global del sistema y su interacción con el entorno. Lejos de desalentar el estudio de

estos sistemas, el desafío se enfocó en el desarrollo de modelos que permitan una descripción detallada de las principales variables de interés que capturan la naturaleza del proceso y que, simultáneamente, sean de aplicación práctica desde el punto de vista computacional, atendiendo las distintas áreas de aplicación, tales como microbiología aplicada, ingeniería ambiental, ingeniería química (específicamente diseño de reactores y diseño y control de procesos), entre otras. De esta manera, en los últimos años se introdujeron cambios importantes en la teoría y práctica de diseño de los procesos biológicos de tratamiento de aguas residuales, confrontando el enfoque clásico, muchas veces empírico, a las tendencias actuales basadas en la formulación de modelos fenomenológicos determinísticos más precisos.

Es así que en 1982, la *International Association on Water Quality IAWQ* propició la formación de un grupo científico internacional, conocido como *Task Group on Mathematical Modelling for Design and Operation of Activated Sludge Process*, para abordar el modelado matemático dinámico de las plantas de tratamiento basadas en barros activados, y crear una plataforma común para su implementación y un protocolo de simulación. Las conclusiones del grupo fueron publicadas en 1987 en un informe que incluye el Modelo ASM1 (*Activated Sludge Model No 1*) (Henze et al., 1987), que describe la degradación de materia orgánica carbonosa y los procesos de nitrificación y de denitrificación en un sistema de barros activados. Específicamente, entre las contribuciones principales cuentan el consenso respecto a los procesos biológicos relevantes que deben integrar el modelo, la presentación del modelo en forma matricial clara y concisa, la propuesta de valores estándares sugeridos para los parámetros del modelo, la adopción de la DQO y sus fracciones relativas para caracterizar el líquido y el barro, un código de programación para el desarrollo de aplicaciones futuras, fundamentalmente para control del proceso, y la definición sin ambigüedades de las variables y parámetros del modelo. Respecto a esto último, debe tenerse en cuenta que los avances en esta área se produjeron en disciplinas no muy relacionadas entre sí, adoptando cada una de ellas sus propias definiciones e interpretaciones; más aún, resultados obtenidos en un área no se difundieron profusamente en las demás.

Por su parte, tal comisión científica publicó en 1995 el modelo ASM2 (*Activated Sludge Model No 2*) (Henze et al., 1995), el cual pretende predecir el comportamiento y eliminación biológica de fósforo de aguas residuales municipales. En tanto que en 1999 se presentó una modificación del modelo ASM2, conocido como modelo ASM2d

(*Activated Sludge Model No 2d*) (Henze et al., 1999), que considera, ante la evidencia experimental, la capacidad que tienen los organismos acumuladores de fósforo para denitrificar.

En 1998 el mismo grupo de trabajo decidió desarrollar una nueva “plataforma” de modelado, el modelo ASM3 (*Activated Sludge Model N° 3*) (Gujer et al., 1999), para proporcionar un instrumento que sirva de base para la siguiente generación de modelos de barros activados y sus extensiones y aplicaciones futuras. El modelo ASM3 está basado en el entendimiento de nuevos aspectos de los procesos de barros activados. Por ejemplo, permite describir y seguir los compuestos de almacenamiento interno, que tienen un papel importante en el metabolismo de los organismos.

Más recientemente, se creó el Anaerobic Digestion Modelling Taskgroup, también de IWA, con el objetivo de desarrollar una “plataforma” genérica y común de modelado para el proceso de digestión anaerobia, surgiendo así el modelo *ADMI* (*Anaerobic Digestion Model N° 1*) (Batstone et al., 2002) para digestión anaeróbica. Este modelo fue desarrollado sobre la base de la información recopilada del extenso trabajo en modelado y simulación de sistemas de digestión anaerobia de los años previos. Para la derivación del modelo, el grupo comisionado ha tratado de establecer una nomenclatura, unidades y estructura de modelado común, que sea compatible con la literatura existente sobre modelado de la digestión anaerobia y con la familia de modelos de barros activados desarrollados por IWA hasta la fecha (*Activated Sludge Models* ASM1, ASM2, ASM2d y ASM3).

En 2001, el *Swiss Federal Institute for Environmental Science and Technology EAWAG* formuló un módulo para la predicción de la remoción biológica de fósforo, conocido como módulo *EAWAG-BioP* (Rieger et al., 2001), que puede ser acoplado al modelo ASM3. Este modelo extendido (modelo conjunto) permite representar la reducción biológica simultánea de nitrógeno y fósforo.

Por otro lado, se han desarrollado paquetes de software comerciales que implementan modelos dinámicos de unidades de barros activados para realizar simulaciones de utilidad variada o para desarrollar herramientas específicas (Olsson y Newell, 1999; Copp et al., 2002). Algunos ejemplos de simuladores usados para el modelado de tratamiento de aguas residuales son:

AQUASIM (<http://www.aquasim.eawag.ch>),

BioWin (<http://www.envirosim.com>),

GPS-X (<http://www.hydomantis.com>),
SIMBA (<http://www.ifak-system.com>),
STOAT (<http://www.wrcplc.co.uk/software>),
WEST (<http://www.hemmis.com>).

Según Gujer (2006), el modelado de los sistemas de barros activados es una tecnología madura, y en realidad los esfuerzos deberían dirigirse hacia la aplicación práctica de tales modelos más que al desarrollo de nuevos modelos que conducen a un “bajo retorno marginal de la inversión (intelectual)”.

1.4 Revisión bibliográfica de síntesis de procesos de tratamiento de aguas residuales

Si bien la necesidad de lograr procesos óptimos para el tratamiento de efluentes queda reflejada en numerosas publicaciones en el área (Harremös, 2002; Otterpohl, 2002; Olsson et al., 1998) y proyectos de investigación financiados por organismos internacionales (proyecto 624 y 682 de COST-European Cooperation in the field of Scientific and Technical Research; proyecto SMAC del 5th Programa de la Comisión Europea, etc.), la aplicación de programación matemática a la síntesis y diseño óptimos de sistemas de tratamiento de efluentes por barros activados no ha sido abordado aún extensamente.

Como se mencionó anteriormente, durante los últimos años se avanzó en el modelado de los procesos de barros activados mediante el desarrollo de modelos fenomenológicos determinísticos de procesos de degradación aerobia/anóxica y anaerobia. No obstante, el modelado de plantas completas para tratamiento de aguas residuales requiere mucho tiempo debido a la alta complejidad de los modelos, un buen entendimiento de los procesos y experiencia en modelado (Gernaey y Sin, 2008). Tal hecho puede constituir la razón por la que no aparecen artículos orientados a la síntesis del proceso en recientes publicaciones referidas al estado del arte sobre modelado y simulación de barros activados (Gernaey et al., 2004). Según Rigopoulos and Linke (2002), en los últimos años se propusieron escasos diseños novedosos para el tratamiento de aguas residuales que, en su mayoría, fueron resultado de la experiencia,

intuición y creatividad del ingeniero de procesos, de costosas experiencias a escala piloto o de numerosos estudios de simulación. Esta carencia de esfuerzo puede atribuirse principalmente a dos factores. Por un lado, la alta no linealidad de los modelos mencionados desalentó su aplicación “directa” e impuso una barrera computacional para los algoritmos de optimización determinísticos; y por otro lado, los sistemas biológicos son muy difíciles de controlar. Esto último fomentó la investigación sobre aspectos de control del proceso. De esta manera, se concentró poco esfuerzo en la optimización *sistemática* de la estructura del *flowsheet* básico del mismo. Rigopoulos y Linke (2002) y Linke y Kokossis (2002) presentaron una metodología para el diseño sistemático de plantas de barros activados, basado en el modelo ASM1, proponiendo una superestructura y utilizando técnicas estocásticas de búsqueda de soluciones (*simulated annealing*) para la etapa de optimización.

Contrariamente, existen muchos trabajos sobre simulación del proceso, procurando ganar entendimiento de los procesos biológicos (Brdjanovic et al., 2000), mejorar las condiciones operativas (control de procesos existentes) o refinar el diseño de partes del proceso mediante la evaluación de diferentes alternativas. Por ejemplo, Gillot et al. (1999a y 1999b), Espírito Santo et al. (2005a y 2005b), Coop (2002) y Alex et al. (1999) se han concentrado en la obtención de la mejor combinación de las variables de proceso por medio de la simulación de dos o tres alternativas de diseño y eligiendo aquella que presenta el costo mínimo. Gillot et al. (1999a) define un índice económico que integra los costos de inversión y operativos para la estandarización de un procedimiento de cálculo de costos, y usa estos modelos de costos para simular y comparar diferentes escenarios de tratamiento. En Gillot et al. (1999b) se desarrolla una herramienta computacional para la evaluación económica de una planta de tratamiento de efluentes a lo largo de su ciclo de vida. Espírito Santo et al., (2005a) optimiza el diseño (no el *flowsheet*) y las variables de operación de cuatro plantas de tratamiento de efluentes que consisten en un sólo reactor aireado (descrito con el modelo ASM1) y un decantador secundario (descrito con el modelo ATV) usando cuatro optimizadores diferentes. Finalmente, otros trabajos consistieron en la implementación y comparación de estrategias de control en plantas de tratamiento de aguas residuales. Así, Coop (2000) propuso un *benchmark* (protocolo de simulación basado en el ASM1) para la evaluación de estrategias de control para la remoción de nitrógeno. Por su parte, Gernaey y

Jorgensen (2004) propusieron un *benchmark* para el proceso de remoción combinada de nitrógeno y fósforo.

1.5 Motivación y diagramación de la tesis

La motivación de la presente tesis se basa en que no existen trabajos publicados en la bibliografía sobre una metodología sistemática para abordar la síntesis y diseño de sistemas de tratamiento de efluentes por barros activados basados en criterios de optimización. En los últimos años se han propuesto escasos diseños novedosos para sistemas de tratamiento de efluentes que, en su mayoría, son resultado de la experiencia, intuición y creatividad del ingeniero de procesos, de costosas experiencias a escala piloto o de numerosos estudios de simulación.

Por otro lado, en los últimos años se han hecho avances importantes en el modelado de las reacciones bioquímicas de los sistemas de barros activados, lo que alentó en gran medida la optimización de la operación de las instalaciones existentes desde el enfoque de control del proceso.

Las cuestiones relacionadas con el cuidado y preservación del medio ambiente toman cada vez más importancia e inducen a cambios en la forma de ver, abordar, operar y optimizar los procesos industriales de producción desde la etapa misma de su concepción inicial, lo que se evidencia a través de las publicaciones en el área de síntesis de procesos en general, que ponderan consideraciones ambientales y aspectos de sustentabilidad. Aquí, el interés es abordar esa problemática en el campo del tratamiento de aguas residuales en particular que, paradójicamente, no ha evidenciado avances significativos. Este hecho motivó y orientó el desarrollo de esta tesis, pretendiendo ser una contribución en el área.

El diseño riguroso de plantas de barros activados que contemplen, por ejemplo, una descripción detallada de los reactores, de la cinética tanto de eliminación de nitrógeno como de fósforo y del fenómeno de sedimentación de barros implica la consideración de varias cuestiones operativas y de diseño que deben incorporarse al modelo a través de restricciones adecuadas. En ese contexto, en la tesis se desarrollan modelos matemáticos de complejidad y rigurosidad crecientes cuyas soluciones y conocimiento adquirido a partir del análisis de las mismas se utilizan sucesivamente

para el planteo, representación, acotamiento del espacio de búsqueda de las soluciones e inicialización de los modelos matemáticos subsiguientes. El objetivo final consiste en el desarrollo de modelos basados en superestructuras del proceso que posibiliten la optimización de la configuración de la planta de tratamiento (síntesis del proceso) y de las variables de diseño (dimensionamiento de equipos) y operación, minimizando costos y cumpliendo restricciones de límites de descarga permitidos, para diferentes escenarios de interés teórico y práctico.

Los problemas que resultan presentan un apreciable grado de dificultad de resolución, ya que se trata de modelos fuertemente no lineales, con funciones discontinuas, y de elevada dimensión (número de ecuaciones y variables). Por otra parte, es deseable derivar un modelo de superestructura del proceso que embeba a todas las alternativas configuracionales conocidas y que permita obtener otras nuevas. Esto implica un espacio estructural combinatorio que, además de dificultar la resolución del problema de síntesis y diseño, conlleva inherentemente la posible existencia de múltiples óptimos locales.

En los Capítulos 2, 3 y 4 de la presente tesis se aborda la optimización de plantas de tratamiento de aguas residuales por barros activados para la remoción de *nitrógeno*. En éstos se utiliza el modelo *Activated Sludge Model N° 3 -ASM3-* para la descripción de las velocidades de reacción de los procesos microbiológicos que se llevan a cabo en los reactores, y el modelo de sedimentador de Takács para la descripción del decantador secundario. Más específicamente, en el **Capítulo 2** se optimizan las variables operativas de las tres configuraciones de planta de tratamiento más extensamente usadas para remoción biológica de nitrógeno y materia orgánica; es decir, las configuraciones de predenitrificación (*PreDN*), postdenitrificación (*PostDN*) y pre-postdenitrificación (*Pre-PostDN*). También se optimizan otros modelos de plantas derivados a partir de los anteriores, que permiten diferentes posibilidades de distribución de las corrientes principales del sistema. Se procura minimizar el costo operativo total anual (COTA), cumpliendo con ciertos valores límite de descarga permitidos en el líquido tratado para un afluente de especificaciones conocidas (caudal y composición). Se supone una planta dada, constituida por cinco compartimentos de reacción y una unidad de sedimentación de barros. Dos compartimentos de reacción son anóxicos estrictos y los otros tres pueden ser anóxicos o aireados dependiendo de la velocidad de aireación que resulte de la optimización (a través del coeficiente de transferencia de oxígeno, $k_L a$). Se considera

también la posibilidad de dosificar una fuente de carbono externa a los reactores anóxicos generalmente necesaria para aquellos casos en que el agua residual afluyente presenta una relación de contenido de carbono a nitrógeno deficitaria. Para cada caso estudiado se derivan modelos del tipo DNLP, los que se implementan y resuelven en *General Algebraic Modeling System* -GAMS- usando el código CONOPT. Se comparan las soluciones obtenidas para 14 casos, y se evalúa la performance de tratamiento para cada uno mediante la definición de un indicador de performance de reacción.

En el **Capítulo 3** se aborda la síntesis y optimización de las condiciones de operación de plantas de tratamiento recurriendo a modelos de superestructura del proceso. Se presentan dos modelos de superestructura. En el primero de ellos la superestructura propuesta contempla las configuraciones de proceso para la eliminación de nitrógeno más usadas o convencionales: *PreDN*, *PostDN* y *Pre-PostDN*. En el segundo caso, la superestructura se extiende para permitir la distribución de las corrientes principales del sistema (corriente de alimentación del afluyente y la de recirculación interna y externa a lo largo de la zona de reacción). Este modelo incluye todas las configuraciones de plantas estudiadas en el capítulo anterior. En cada caso se optimiza la configuración de la planta (síntesis) y las condiciones de operación con el objeto de minimizar el costo anual total de operación, suponiendo una planta dada (número y dimensiones de los equipos disponibles), a la vez que deben cumplirse las restricciones impuestas por los límites de vertido. Ambas superestructuras derivan en modelos del tipo MINLP, que utilizan variables binarias para la selección de la configuración de proceso. El modelo se implementa en GAMS y resuelve con DICOPT como resolvidor MINLP, empleando CONOPT para los problemas DNLP y BDMLP para los problemas MIP que resultan del proceso de resolución. La optimización se lleva a cabo para dos casos de estudio que difieren en la relación del contenido de carbono al de nitrógeno en el agua residual afluyente, medida como la relación DBO (demanda bioquímica de oxígeno o BOD, por sus siglas en inglés)/NTK (nitrógeno total Kjeldahl o TKN, por sus siglas en inglés), para un caudal de alimentación dado. Se realiza una comparación de las soluciones obtenidas para esos casos de estudio considerando los dos modelos de superestructura propuestos, esto es, con y sin distribución de corrientes de proceso.

En el **Capítulo 4** se desarrolla un modelo para síntesis, diseño y optimización de las condiciones operativas de plantas de tratamiento. Se extienden las superestructuras

desarrolladas en el Capítulo 3 para permitir que el tamaño y número de equipos que conforman la planta resulten de la optimización. Esta superestructura, que incluye todas las configuraciones posibles del Capítulo 3, contempla un máximo de 5 compartimentos de reacción, cuyos volúmenes son variables de optimización, y un decantador secundario. La función objetivo a optimizar en este caso es el Valor Actual Neto (VAN), que considera costos de inversión y de operación. A diferencia de la propuesta efectuada en el Capítulo 3, aquí se formula un problema de tipo DNLP. Si el volumen de un compartimento o el caudal de alguna corriente resulta cero, se “elimina” de la superestructura, entendiéndose con esto que no forma parte de la configuración final del proceso (*flowsheet*). Se realiza la optimización para los dos escenarios o casos de estudio considerados en el capítulo anterior, es decir, para dos modelos de agua residual afluyente con diferentes relaciones de DBO a NTK. El modelo se implementa en GAMS y se resuelve con CONOPT.

En los Capítulos 5 y 6 se extienden los modelos desarrollados anteriormente para la reducción de carbono y nitrógeno de manera de considerar la remoción simultánea de fósforo, lo que constituye actualmente un aspecto central en muchas instalaciones de tratamiento. En los modelos del proceso que se derivan y resuelven en esos capítulos, se extiende el modelo *ASM3* (para remoción de carbono y nitrógeno) integrando el módulo *Bio-P* para eliminación biológica de fósforo (Rieger et al., 2001).

En el **Capítulo 5** se optimizan las condiciones de operación de plantas de tratamiento de aguas residuales por barros activados para remoción simultánea de fósforo y nitrógeno. Las cuatro configuraciones de planta a optimizar son el proceso *A2/O* o proceso *Phoredox*, el proceso *UCT* (*University of Cape Town*) o proceso *VIP*, el proceso *UCT modificado* y el proceso *Bardenpho*, que corresponden a los esquemas más usados o convencionales para remoción simultánea de nutrientes. También se optimizan las condiciones de operación de un modelo de planta (o “estructura”) que contempla la posibilidad de distribución de las corrientes principales del sistema, y que incluye, entre otras, a las configuraciones de proceso mencionadas anteriormente. En cada uno de los casos estudiados se considera una planta dada -número y tamaño de los equipos. Como los equipos que constituyen la planta se suponen dados, los costos de inversión no se consideran en este caso sino que se tratan en el próximo capítulo. La función objetivo a minimizar es el costo de operación total anual COTA que debe

afrontarse para cumplir con los valores límites de descarga permitidos para tratar un agua residual afluyente de caudal y composición conocidos.

En el **Capítulo 6** se amplía el modelo presentado anteriormente para considerar aspectos de diseño de unidades (dimensionamiento) y la consiguiente inclusión de los costos de inversión en la función objetivo. También puede considerarse como una extensión del modelo presentado en el Capítulo 4 al que se le acopla la eliminación simultánea de fósforo. Esto es, aquí se trata la optimización simultánea de la configuración del proceso (síntesis del proceso), dimensionamiento de equipos (diseño) y las condiciones de operación de plantas para remoción de fósforo y nitrógeno que minimizan el VAN. El problema se formula como un problema de tipo DNLP. La incorporación de la remoción de fósforo trae aparejado la inclusión de nuevas variables para describir los nuevos componentes y grupos bacterianos involucrados. La superestructura también se amplía para integrar las configuraciones para remoción combinada de nutrientes. Se supone que la planta opera en forma continua, y el caudal de agua residual afluyente y su composición se asumen conocidos.

Finalmente en el **Capítulo 7** se presentan las conclusiones generales y trabajos proyectados a futuro.

Dentro de este contexto, el contenido de esta tesis está relacionado con las siguientes publicaciones:

- *Optimization of the operation conditions for denitrifying wastewater treatment plants. 2nd European Modeling and Simulation Symposium EMSS2006, 2006, Barcelona. N. Alasino, M. C. Mussati, N. Scenna.*

- *Synthesis of activated sludge wastewater treatment plants for nitrogen removal. XXII Congreso Interamericano de Ingeniería Química - V Congreso Argentino de Ingeniería Química, Buenos Aires, 2006. N. Alasino, M. C. Mussati, N. Scenna.*

- *Wastewater treatment plant synthesis and design. Industrial & Engineering Chemistry Research, Vol.46, No.23, 7497-7512, 2007. N. Alasino, M. C. Mussati, N. Scenna.*

- *Combined nitrogen and phosphorus removal. Model-based process optimization. (ESCAPE-18.).Jun 1-4, 2008, Lyon, France; y elegido para su impresión en Computer Aided Chemical Engineering, Vol. 25, 2008, Pag. 163-168. N. Alasino, M. C. Mussati, N. Scenna, P. Aguirre.*

- *Wastewater treatment plant synthesis and design: combined biological nitrogen and phosphorus removal*. N. Alasino, M. Mussati, N. Scenna, P. Aguirre. (En preparación)

- *Synthesis and Design of Combined Biological Nitrogen and Phosphorus Removal WWT Plants*. (Enviado al 10th International Symposium on Process Systems Engineering - PSE2009). N. Alasino, M. Mussati, N. Scenna, P. Aguirre.

CAPÍTULO 2. OPTIMIZACIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN PARA REMOCIÓN DE MATERIA ORGÁNICA Y NITRÓGENO

CAPÍTULO 2. OPTIMIZACIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN PARA REMOCIÓN DE MATERIA ORGÁNICA Y NITRÓGENO.....	32
2.1 Introducción.....	33
2.2 Procesos convencionales de remoción de nitrógeno.....	34
2.3 Modelado	37
2.3.1 Modelo del sistema de barros activados (Modelo ASM3).....	37
2.3.2 Modelo de unidades de proceso y equipamiento	49
2.3.2.1 Modelo del sistema de aireación	49
2.3.2.2 Modelo del sedimentador	52
2.3.2.3 Modelo del compartimento de reacción	58
2.3.3 Configuraciones de planta propuestas para ser optimizadas	59
2.3.4 Modelo de optimización.....	73
2.3.4.1 Función objetivo y criterios de performance	74
2.3.4.2 Especificaciones del agua residual a tratar	76
2.3.4.3 Restricciones de especificación y valores máximos	77
2.4 Resultados.....	78
2.4.1 Configuraciones de referencia	81
2.4.2 Configuraciones con distribución de corrientes.....	82
2.5 Discusión	83
2.5.1 Comparación de las soluciones óptimas para las alternativas del esquema de <i>PreDN</i>	84
2.5.2 Comparación de las soluciones óptimas para las alternativas del esquema de <i>PostDN</i>	86
2.6 Estrategia de solución y aspectos computacionales	88
2.7 Conclusiones.....	89

2.1 Introducción

En este capítulo se aborda la optimización de las condiciones de operación, en estado estacionario, para la remoción biológica de nitrógeno y la oxidación de materia orgánica para ciertas configuraciones de planta de tratamiento seleccionadas. La optimización de cada configuración propuesta minimiza el costo de operación total anual cumpliendo con los límites de descarga permitidos. Se fija el caudal y la composición del agua residual a tratar. Los equipos constituyentes de la planta se suponen dados. Cada configuración de planta investigada consiste en cinco compartimentos de reacción (tres de los cuales poseen un sistema de aireación) y un decantador secundario.

Los procesos biológicos se describen mediante el modelo ASM3 (Activated Sludge Model N° 3) para el modelado de los compartimentos de reacción. Para el decantador secundario se adopta el modelo propuesto por Takàcs (Takàcs et al., 1991).

Los tres esquemas convencionales de planta para la remoción biológica de nitrógeno (es decir, los esquemas de predenitrificación, postdenitrificación y pre-postdenitrificación) son optimizados, así como sus correspondientes modificaciones que consideran la distribución de las corrientes principales del sistema (corriente del afluente, reciclo de nitratos y reciclo de lodos) a lo largo de la zona de reacción.

Los modelos matemáticos resultantes son problemas de programación no lineal DNLP. Se define posteriormente un indicador de la performance de las reacciones para comparar las diferentes estrategias de operación obtenidas como solución óptima para cada caso estudiado.

El objetivo de este capítulo es investigar, desde el punto de vista de la eficacia de los procesos de tratamiento y desde un punto de vista computacional, las diferentes estrategias de distribución de las principales corrientes a las diferentes zonas de tratamiento y unidades de proceso para las configuraciones de planta convencionales.

2.2 Procesos convencionales de remoción de nitrógeno

En el capítulo anterior (sección 1.1.6) se mostraron las configuraciones de planta de tratamiento de aguas residuales convencionales para remoción de nutrientes y materia orgánica. Las configuraciones más usadas aplicables a la remoción biológica de nitrógeno y oxidación de materia orgánica son los esquemas de predenitrificación (*PreDN*), postdenitrificación (*PostDN*) y el combinado de pre-postdenitrificación (*PrePostDN*) representados en la Figura 2.1. Estas configuraciones son llamadas en este capítulo como las “configuraciones de referencia”.

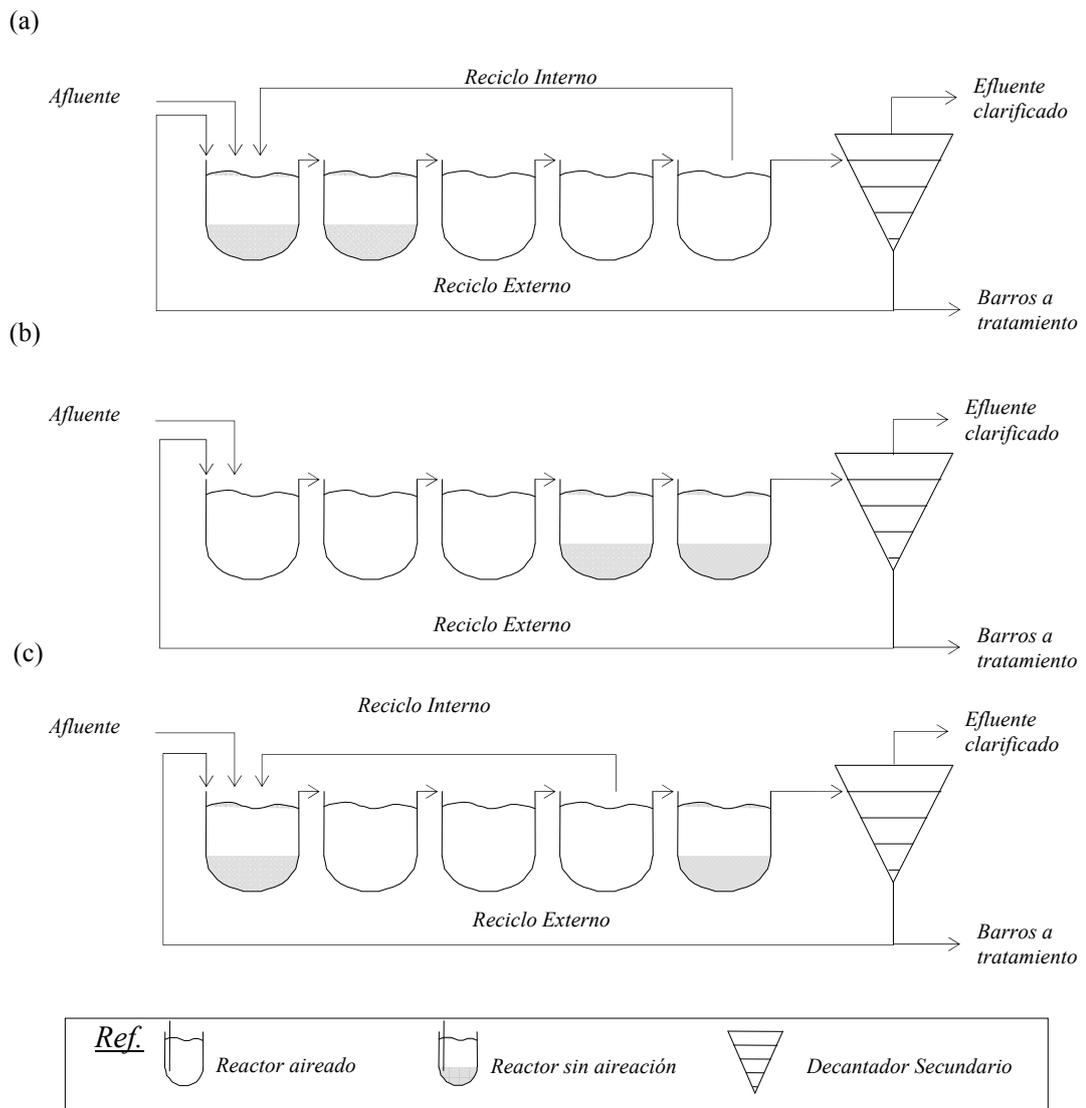


Figura 2.1. Configuraciones de referencia (a) de *PreDN*, (b) de *PostDN* y (c) de *PrePostDN*.

En la sección 2.3.3 del presente capítulo, se presentan los casos de estudio. En el *caso de estudio 1* se optimizan las tres plantas con las configuraciones de referencia que se describen a continuación.

La planta de referencia optimizada para la configuración de *PreDN* está basada en aquella adoptada por el Grupo de Tareas de *European Cooperation in the Field of Scientific and Technical Research-COST* en su protocolo de simulación o “*benchmark*” propuesto (Copp et al., 2002). Se debe remarcar que la planta seleccionada como referencia para los casos de estudio se ha analizado suficientemente en la bibliografía, desde distintos puntos de vista por lo que se convierte en un interesante punto de comparación para el modelado y análisis de los resultados obtenidos. La planta del *benchmark* consiste en cinco compartimentos de reacción y un decantador secundario. En el caso de estudio 1 se consideran que los compartimentos de reacción son reactores de mezcla completa (CSRT). Los dos primeros compartimentos funcionan bajo condiciones anóxicas estrictas y poseen un volumen de 1000 m³, y los últimos tres de 1333 m³ pueden funcionar bajo condiciones anóxicas o condiciones aeróbicas ya que poseen sistema de aireación. La selección de las condiciones de funcionamiento de estos últimos compartimentos resultan de la manipulación del caudal de aireación (vía los coeficientes de transferencia de masa de oxígeno k_La como se explica más adelante en este capítulo). Esta configuración posee corrientes de reciclo interno (de nitrato) y externo (de lodo). El primero recicla una fracción del licor de mezcla desde el último compartimento de reacción al primer compartimento, y el reciclo externo bombea una fracción de los barros decantados desde el sedimentador secundario al primer compartimento de reacción.

En la configuración de referencia para el esquema *PostDN* los dos últimos compartimentos poseen un volumen de 1000 m³ y no poseen sistema de aireación, por lo que funcionan en condiciones anóxicas estrictas; y los primeros tres, de 1333 m³ y dotados de un sistema de aireación, funcionan bajo condiciones anóxicas o aeróbicas de acuerdo a los coeficientes de transferencia de oxígeno k_La resultantes de la optimización. Esta configuración considera sólo reciclo externo, que bombea una fracción de los barros sedimentados en el decantador secundario al primer compartimento de reacción.

En la configuración *PrePostDN* el primer y último compartimento, de 1000 m³ y sin sistema de aireación, funcionan bajo condiciones anóxicas estrictas, mientras que los

otros tres, de 1333 m³ y con sistema de aireación, funcionan bajo condiciones anóxicas o aeróbicas dependiendo de los valores de $k_L a$ que resulten de la optimización. Al igual que en la configuración de *PreDN*, se necesita tanto el reciclaje interno como el externo. El primero recicla el licor de mezcla del último compartimento con sistema de aireación (que corresponde al cuarto compartimento) al primer compartimento.

Aunque algunos compartimentos de reacción son capaces de funcionar bajo condiciones anóxicas o aeróbicas para una configuración de referencia dada, no se permite alternar arbitrariamente los compartimentos para mantener el esquema de planta original para una configuración de referencia dada. Esto es, por ejemplo, en la configuración de *PreDN*, los dos primeros compartimentos funcionan bajo condiciones anóxicas estrictas y poseen un volumen de 1000 m³, y los últimos tres, de 1333 m³, bajo condiciones aeróbicas o anóxicas.

Como se describe en la sección 1.1.5, las etapas biológicas del proceso de remoción de materia orgánica y nitrógeno son promovidas por condiciones ambientales diferentes. La reducción de materia orgánica y el proceso de nitrificación son favorecidos por condiciones aeróbicas; mientras que el proceso de denitrificación se favorece por condiciones anóxicas si hay disponibilidad suficiente de materia orgánica fácilmente biodegradable. Así, la zona anóxica puede requerir la dosificación de una fuente externa de carbono para facilitar la denitrificación en el caso que la materia orgánica fácilmente biodegradable presente en el afluente sea consumida por los microorganismos aeróbicos en la zona de nitrificación. Esto es aún más evidente cuando la corriente de agua residual afluente tiene una baja relación carbono/nitrógeno. El esquema *PostDN* es propenso a esta escasez de materia orgánica fácilmente biodegradable ya que la zona aeróbica precede a la anóxica.

Por otra parte, en la configuración *PreDN* la última zona aeróbica reduce el efecto de denitrificación en el decantador secundario, lo que puede causar una decantación ineficiente debido a la generación de nitrógeno gaseoso y la consecuente flotación del lodo. El licor nitrificado es reciclado de la zona aeróbica a la zona anóxica para “alejar” la denitrificación de la zona de decantación. Así, esta configuración requiere de una alta relación de reciclaje interno para alcanzar un alto grado de eficiencia de eliminación.

En los *casos de estudio 2 al 5*, que serán presentados en la sección 2.3.3, se extienden progresivamente estas tres configuraciones incorporando más alternativas

estructurales para contemplar la posibilidad de distribución de las corrientes principales del proceso, y se optimizan las estructuras resultantes con el objetivo de minimizar los costos operativos.

Cabe aclarar aquí que en el área de *Process Systems Engineering* la optimización de una superestructura generalmente implica la síntesis del proceso. En estos casos de estudio y al igual que en el capítulo 5, si bien se hace referencia a “superestructuras”, se optimizan las condiciones de operación de planta con equipos determinados y posibilidad de distribución de las corrientes principales de dicho sistema, por lo que no debe entenderse que se hace síntesis en aquel sentido, sino que se recurre al modelo de una superestructura para seleccionar la combinación de corrientes de recicló óptima. Así planteado, se acerca más a un problema de operación óptima que a un problema de síntesis óptima. Esta distinción se hace a lo largo de la tesis para casos de estudio análogos.

La conveniencia de una configuración de planta sobre las demás depende tanto del caudal de agua residual afluyente y su composición, como de varios factores económicos y tecnológicos y los diferentes *trade-offs* o compromisos existentes.

2.3 Modelado

2.3.1 Modelo del sistema de barros activados (Modelo ASM3)

El modelo de barros activados N° 3 -ASM3- (Gujer et al., 1999) considera la eliminación de la materia carbonosa y la remoción de los compuestos nitrogenados. Actualmente, el modelo ASM3 es el modelo más extensamente aceptado para la descripción de la remoción biológica de nitrógeno, ya que ha corregido ciertos defectos que habían surgido en la aplicación del modelo ASM1 anterior (Gernaey et al., 2004.a). El modelo ASM3 puede ser extendido con el módulo *Bio-P* para remoción de fósforo (Rieger et al., 2001).

En este modelo se considera que el sustrato fácilmente biodegradable (S_s) es tomado y almacenado en las células en forma de un componente interno (X_{STO}) antes de ser usado para el crecimiento de la biomasa. Así, la biomasa heterótrofa se modela con

una estructura interna celular, similar al modelado de los organismos acumuladores de fósforo (PAOs) en los modelos de remoción biológica de fósforo. Los procesos de conversión de los organismos aerobios y heterótrofos están claramente separados y sus procesos de decaimiento se describen con modelos idénticos. Durante la derivación del modelo ASM3 se puso énfasis en la descripción del almacenaje de sustratos orgánicos en los microorganismos, un proceso que ha sido postulado y observado por muchos investigadores, y que no consideró su predecesor ASM1. Como la biomasa heterótrofa X_H se modela con una estructura interna celular, los procesos de decaimiento deben considerar ambas fracciones de la biomasa (X_H así como X_{STO}), por tanto se requiere cuatro procesos de decaimiento (los decaimientos aeróbicos y anóxicos de X_H y X_{STO}) y los procesos de crecimiento (aeróbico y anóxico) deben relacionarse con las relaciones X_{STO}/X_H .

Componentes del modelo ASM3

El modelo considera 13 compuestos (C_x), divididos en compuestos solubles y compuestos particulados, cuyas concentraciones son diferenciadas con S y X, respectivamente, y 12 procesos de transformación. Se considera que sólo los compuestos solubles poseen carga iónica.

La concentración de los componentes se introduce en el modelo en términos de demanda teórica de oxígeno (ThOD, por sus siglas en inglés), que para los componentes orgánicos es aproximada a la DQO. Para los inorgánicos, la determinación de ThOD se calcula en base a referencias redox. Se considera que cada electrón reactivo es equivalente a una ThOD de 8 g/mol. Por lo tanto, la ThOD de los diferentes elementos será: C = 32 gThOD/mol C, N = -24 gThOD/mol N, H = 8 gThOD/mol H, O = -16 gThOD/mol O, etc. En base a esto, se puede calcular la ThOD de compuestos como NO_3^- (-64 ThOD/mol NO_3^-).

Se consideran siete componentes solubles y seis particulados.

- *Oxígeno disuelto* S_O : está sujeto a transferencia líquido-gas. Estequiométricamente se introduce como ThOD negativa.

- *Material orgánico soluble inerte* S_I : no se degrada en la planta de tratamiento. Se asume que forma parte del efluente a tratar y que se produce por hidrólisis de

sustratos particulados X_S . Su concentración puede estimarse midiendo la DQO soluble remanente en el efluente de la planta de tratamiento operada a baja carga orgánica.

- *Sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación S_S* : es la fracción de DQO soluble utilizada por los heterótrofos. Se considera que antes de ser asimilado, es acumulado por las bacterias en forma de compuestos de reserva X_{STO} . Su concentración debe ser determinada preferentemente mediante bioensayos, ya que si se determina a partir de la DQO soluble ($S_I + S_S$), medida luego de filtrar el efluente sin tratar, se pueden cometer errores, debido a que compuestos particulados, como gránulos de almidón, pueden no ser retenidos por las membranas utilizadas (0.45μ) contribuyendo a la medida de DQO.

- *Nitrógeno amoniacal ($NH_4^+ - N + NH_3 - N$) S_{NH}* : se asume que se encuentra en la forma de NH_4^+ . Debido a que el ASM3 considera que los compuestos orgánicos contienen una fracción constante de nitrógeno orgánico (llamada $i_{N,x}$), la concentración de NH_4^+ en el líquido a tratar ($S_{NH, fresh}$) no puede ser observada directamente sino que debe determinarse como: N-Kjendahl – N-orgánico. Por lo tanto, $S_{NH, fresh} = C_{TKN, fresh} - \sum (i_{N,x} \cdot C_{x, fresh}) - S_{N_2, fresh} - S_{NO, fresh}$; donde $C_{TKN, fresh}$, $C_{x, fresh}$, $S_{N_2, fresh}$ y $S_{NO, fresh}$ son las concentraciones de N-Kjeldahl, compuestos orgánicos, nitrógeno gaseoso y nitratos, respectivamente, en el agua residual a tratar, e $i_{N,x}$ es el contenido de nitrógeno en el compuesto orgánico x . Sin embargo dentro de los reactores y en el efluente, la concentración de S_{NH} es equivalente a la concentración de amonio. Por último, S_{NH} no posee ThOD de acuerdo a la definición de la misma.

- *Nitrógeno gaseoso S_{N_2}* : se asume que es el único producto de la denitrificación. Si bien está sujeto a transferencia líquido-gas, su concentración en el líquido a tratar y el fenómeno de transferencia pueden despreciarse. Puede ser utilizado para calcular la cantidad de nitrógeno eliminado por denitrificación. Posee ThOD negativa.

- *Nitrato ($NO_3^- - N + NO_2^- - N$) S_{NO}* : engloba nitratos y nitritos, ya que los últimos no se incluyen como una variable separada. Se considera que S_{NO} está conformado sólo por nitratos ($NO_3^- - N$) y posee ThOD negativa.

- *Alcalinidad, S_{ALK}* : se utiliza para mantener la conservación de cargas iónicas en las reacciones biológicas. Se utiliza para obtener información sobre posibles problemas con el pH del medio, el que puede inhibir algunos procesos biológicos. A los fines del modelado, se asume que S_{ALK} está compuesta exclusivamente por bicarbonato (HCO_3^-).

- *Materia orgánica particulada inerte* X_I : no se degrada en el sistema. Puede encontrarse en el líquido no tratado y se produce en el sistema por decaimiento de la biomasa. Tiene la capacidad de flocular junto a los barros.

- *Sustrato lentamente biodegradable* X_S : está compuesto por sustratos orgánicos de alta masa molecular solubles, coloidales o particulados que se hidrolizan para ser utilizados por la biomasa heterótrofa X_H . Los productos finales de la hidrólisis son S_S y S_I . La única fuente de X_S es el líquido a tratar, ya que no se genera en el sistema.

- *Microorganismos heterótrofos*, X_H : son capaces de crecer en condiciones aeróbicas y anóxicas (denitrificación). Efectúan la hidrólisis de X_S , tienen la capacidad de metabolizar todos los sustratos orgánicos biodegradables y llevan a cabo la denitrificación. Acumulan compuestos de reserva en forma de poli-hidroxicanoatos o glucógeno. Son incapaces de realizar actividad biológica en anaerobiosis excepto la hidrólisis de X_S , que es el único proceso que puede realizarse en esas condiciones, según ASM3.

- *Compuestos intracelulares acumulados por heterótrofos*, X_{STO} : incluyen diversos compuestos, como poli-hidroxicanoatos y glucógeno. Sin embargo, no se considera el X_{STO} en el cálculo de la masa de X_H , debido a que esta variable es introducida como un componente funcional requerida para el modelado. No es identificable químicamente en forma directa, por lo que no puede ser estrictamente comparada con el contenido de poli-hidroxicanoatos y/o glucógeno intracelular. No obstante, X_{STO} se mide en términos de DQO y debe cumplir con la conservación de ThOD. Para los cálculos estequiométricos, se asume que la composición química es semejante a la del poli-hidroxibutirato $(C_4H_6O_2)_n$.

- *Microorganismos autótrofos* X_A : llevan a cabo la nitrificación. Son aerobios estrictos y quimio-lito-autótrofos. Oxidan el amonio S_{NH} directamente a nitrato S_{NO} , sin considerar como intermediario al nitrito.

- *Sólidos suspendidos*, X_{SS} : se introduce en el modelo para calcular su concentración en forma estequiométrica. Por otra parte, al ser una variable operativa comúnmente utilizada en las plantas de tratamiento de efluentes, su inclusión en el ASM3 es de gran utilidad. En el líquido a tratar, X_{SS} considera la fracción inorgánica de los sólidos suspendidos SS y la porción 'soluble' de X_S (aquella no retenida por las membranas de filtración de 0.45 μ m), por lo que la determinación de SS puede ser menor a X_{SS} . Además, si se utilizan reactivos para precipitar fósforo en el efluente no

tratado, los precipitados formados deben ser incluidos en la determinación de X_{SS} . Si se utiliza X_{SS} para modelar los sólidos suspendidos volátiles (VSS) se requiere un cambio significativo de los parámetros utilizados para definir la composición de ciertos compuestos ($i_{SS,x}$).

Las concentraciones de los compuestos particulados y solubles se expresan en masa/unidad volumétrica, excepto S_{ALK} que se expresa en concentración molar. Específicamente, S_{NH} , S_{N_2} y S_{NO} se expresan en $gN\ m^{-3}$; S_I , S_S , X_I , X_S , X_H , X_{STO} y X_A en $gDQO\ m^{-3}$; y S_O en $gO\ m^{-3}$. S_{ALK} se evalúa como $mol\ HCO_3^-\ m^{-3}$.

Procesos considerados en ASM3 y cinética

Las expresiones cinéticas del modelo ASM3 están basadas en “switching functions” o funciones de activación/desactivación, que son términos hiperbólicos o de saturación del tipo de Monod, $S/(S+K)$.

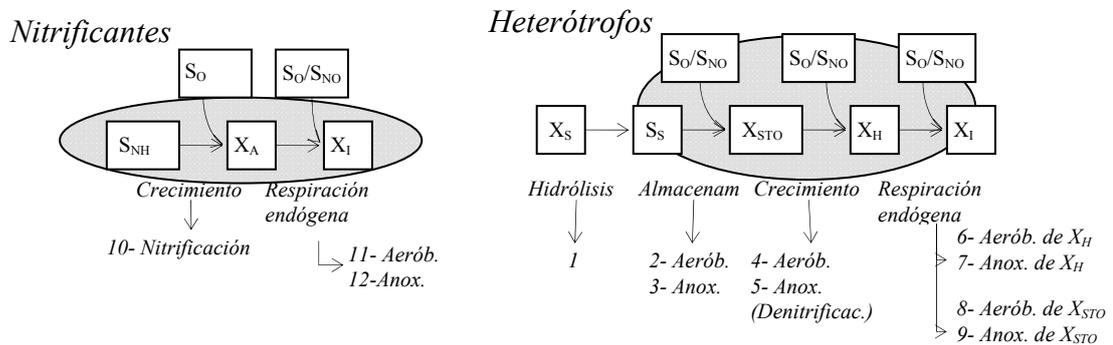


Figura 2.2. Flujo de DQO y procesos del modelo ASM3

Los procesos que considera en modelo ASM3 se esquematizan en la Figura 2.2 y se describen a continuación junto con la expresión cinética correspondiente:

- *Hidrólisis de sustratos lentamente biodegradables X_S (ρ_1):* produce compuestos solubles fácilmente biodegradables S_S para ser utilizados por la biomasa. Se asume que es independiente del donador de electrones.

$$\rho_1 = k_H \left[\frac{X_S/X_H}{K_X + X_S/X_H} \right] X_H \quad (2.1)$$

- *Almacenamiento aeróbico de sustrato fácilmente biodegradable S_S (ρ_2):* se almacena en forma de productos intracelulares de reserva X_{STO} . Para realizar esto se necesita energía, que se obtiene de la respiración aeróbica. Se asume que los sustratos son previamente almacenados, y posteriormente utilizados por la biomasa para crecimiento y como no se dispone de modelos confiables que describan la dinámica intracelular de los diferentes tipos de sustratos, se acepta esta suposición. No obstante, utilizando un bajo coeficiente de rendimiento para la acumulación (Y_{STO}) y uno alto para el crecimiento subsiguiente (Y_H) se puede aproximar el modelo a uno de crecimiento directo en S_S sin almacenamiento previo.

$$\rho_2 = k_{STO} \left[\frac{S_O}{K_{O_2} + S_O} \right] \left[\frac{S_S}{K_S + S_S} \right] X_H \quad (2.2)$$

- *Almacenamiento anóxico de sustrato fácil y rápidamente biodegradable S_S (ρ_3):* en este caso la energía necesaria se obtiene de la denitrificación. Dado que no todos los heterótrofos son capaces de denitrificar, la biomasa heterótrofa activa es menor que en aerobiosis. En ASM3 esto se considera reduciendo la velocidad de almacenamiento heterótrofa anóxica comparada con la aerobia.

$$\rho_3 = k_{STO} \cdot \eta_{NOX} \left[\frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \right] \left[\frac{S_S}{K_S + S_S} \right] X_H \quad (2.3)$$

- *Crecimiento aeróbico de heterótrofos X_H (ρ_4):* se produce exclusivamente a partir del consumo aeróbico del sustrato acumulado X_{STO} .

$$\rho_4 = \mu_H \left[\frac{S_O}{K_{O_2} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NH}}{K_{NH_4} + S_{NH}} \right] \left[\frac{S_{ALK}}{K_{ALK} + S_{ALK}} \right] \left[\frac{X_{STO}/X_H}{K_{STO} + X_{STO}/X_H} \right] X_H \quad (2.4)$$

- *Crecimiento anóxico de heterótrofos X_H (ρ_5):* en este caso la respiración está basada en la denitrificación, aunque no todos los heterótrofos son capaces de realizarla.

Análogamente al almacenamiento de sustratos en condiciones anóxicas, la velocidad total de crecimiento de X_H se reduce respecto al proceso aeróbico.

$$\rho_5 = \mu_H \cdot \eta_{NOX} \left[\frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \right] \left[\frac{S_{NH}}{K_{NH_4} + S_{NH}} \right] \left[\frac{S_{ALK}}{K_{ALK} + S_{ALK}} \right] \left[\frac{X_{STO}/X_H}{K_{STO} + X_{STO}/X_H} \right] X_H \quad (2.5)$$

- *Respiración endógena aeróbica de heterótrofos X_H (ρ_6):* engloba los requerimientos energéticos no asociados al crecimiento y todas las formas de pérdida de biomasa en un único proceso. Considera procesos como respiración endógena, lisis celular, predación, energía requerida para movilidad y mantenimiento y muerte celular.

$$\rho_6 = b_{H,O_2} \left[\frac{S_O}{K_{O_2} + S_O} \right] X_H \quad (2.6)$$

- *Respiración endógena anóxica de heterótrofos X_H (ρ_7):* ocurre a una velocidad menor que el proceso aeróbico porque los predadores son menos activos en condiciones anóxicas.

$$\rho_7 = b_{H,NOX} \left[\frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \right] X_H \quad (2.7)$$

- *Respiración aeróbica de compuestos acumulados X_{STO} (ρ_8):* este proceso es análogo a la respiración endógena. Asegura que la concentración de X_{STO} disminuya en paralelo con el decaimiento de la biomasa.

$$\rho_8 = b_{STO,O_2} \left[\frac{S_O}{K_{O_2} + S_O} \right] X_{STO} \quad (2.8)$$

- *Respiración anóxica de compuestos acumulados X_{STO} (ρ_9):* es equivalente al proceso anterior pero bajo condiciones anóxicas.

$$\rho_9 = b_{STO,NOX} \left[\frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \right] X_{STO} \quad (2.9)$$

- *Crecimiento de autótrofos X_A (ρ_{10}):* los autótrofos sólo crecen en aerobiosis. Utilizan S_{NH} produciendo la nitrificación. No utilizan compuestos orgánicos para su crecimiento.

$$\rho_{10} = \mu_A \left[\frac{S_O}{K_{A,O_2} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NH}}{K_{A,NH_4} + S_{NH}} \right] \left[\frac{S_{ALK}}{K_{A,ALK} + S_{ALK}} \right] X_A \quad (2.10)$$

- *Respiración endógena aeróbica de autótrofos X_A (ρ_{11}):* es análogo al proceso aeróbico para heterótrofos X_H .

$$\rho_{11} = b_{A,O_2} \left[\frac{S_O}{K_{A,O_2} + S_O} \right] X_A \quad (2.11)$$

- *Respiración endógena anóxica de autótrofos X_A (ρ_{12}):* es análogo al proceso anóxico para heterótrofos X_H .

$$\rho_{12} = b_{A,NOX} \left[\frac{K_{A,O_2}}{K_{A,O_2} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NOX}}{K_{A,NOX} + S_{NOX}} \right] X_A \quad (2.12)$$

Estequiometría y velocidad de conversión

En el modelo ASM3 se presenta la estequiometría en forma matricial. En la parte superior se listan los componentes y en la primera columna los procesos que se consideran. El cuerpo de la matriz contiene los coeficientes estequiométricos $v_{p,x}$ para cada proceso ρ y componente x . En la parte inferior de esta matriz se encuentra acoplada una matriz de composición con los valores $i_{c,x}$, para cada componente x y

“cantidad de conservación” c , siendo c el ThOD, el nitrógeno o la carga iónica. El valor $i_{c,x}$ indica los gramos de c por gramo de x , en las unidades en las que aparece en la matriz. Por ejemplo, $i_{N,SS}$ indica que cada gramo de DQO (o ThOD) en forma de S_s contiene $i_{N,SS}$ gramos de nitrógeno. Así, se deben cumplir las ecuaciones de conservación siguientes, para cada “cantidad de conservación” c y para cada proceso p :

$$\sum_x v_{p,x} \cdot i_{c,x} = 0, \forall c, p \quad (2.13)$$

El cumplimiento de estas ecuaciones es un chequeo de continuidad siguiendo las filas de la matriz para cada cantidad de conservación. Mediante esta ecuación se pueden fijar algunos coeficientes estequiométricos y determinar otros incógnitos o dependientes. La Tabla 2.1 muestra los valores de los coeficientes de la matriz que aparecen como incógnitos.

Tabla 2.1. Coeficientes estequiométricos incógnitos de la matriz ASM3

<i>Coeficientes x</i>	
$x_1 = 1 - f_{SI}$	$x_7 = (f_{XI} - 1) / 2.86$
$x_2 = -(1 - Y_{STO,O2})$	$x_8 = -1$
$x_3 = (Y_{STO,NOX} - 1) / 2.86$	$x_9 = -1 / 2.86$
$x_4 = 1 - (1 / Y_{H,O2})$	$x_{10} = 1 - 4.57 / Y_A$
$x_5 = [1 - (1 / Y_{H,NOX})] / 2.86$	$x_{11} = -1 + f_{XI}$
$x_6 = -(1 - f_{XI})$	$x_{12} = (f_{XI} - 1) / 2.86$
<i>Coeficientes y</i>	
$y_1 = i_{N,XS} - i_{N,SS} - f_{SI}(i_{N,SI} - i_{N,SS})$	$y_6 = i_{N,BM} - f_{XI}(i_{N,XI})$
$y_2 = i_{N,SS}$	$y_7 = i_{N,BM} - f_{XI}(i_{N,XI})$
$y_3 = i_{N,SS}$	$y_{10} = -(1 / Y_A + i_{N,BM})$
$y_4 = -i_{N,BM}$	$y_{11} = i_{N,BM} - f_{XI}(i_{N,XI})$
$y_5 = -i_{N,BM}$	$y_{12} = i_{N,BM} - f_{XI}(i_{N,XI})$
<i>Coeficientes t</i>	
$t_1 = -i_{SS,XS}$	$t_7 = f_{XI} \cdot i_{SS,XI} - i_{SS,BM}$
$t_2 = Y_{STO,O2} \cdot 0.6$	$t_8 = -0.6$
$t_3 = Y_{STO,NOX} \cdot 0.6$	$t_9 = -0.6$

$t_4 = i_{SS,BM} - 0.6/Y_{H,O_2}$	$t_{10} = i_{SS,BM}$
$t_5 = i_{SS,BM} - 0.6/Y_{H,NOX}$	$t_{11} = f_{XI} \cdot i_{SS,XI} - i_{SS,BM}$
$t_6 = f_{XI} \cdot i_{SS,XI} - i_{SS,BM}$	$t_{12} = f_{XI} \cdot i_{SS,XI} - i_{SS,BM}$
<i>Coefficientes z</i>	
$z_1 = [i_{N,XS} - i_{N,SS} - f_{SI}(i_{N,SI} - i_{N,SS})]/14$	$z_7 = [i_{N,BM} - f_{XI} \cdot i_{N,XI} - (f_{XI} - 1)/2.86]/14$
$z_2 = i_{N,SS}/14$	$z_9 = (1/2.86)/14$
$z_3 = [i_{N,SS} - (Y_{STO,NOX} - 1)/2.86]/14$	$z_{10} = -[(1/Y_A) + i_{N,BM}] + (1/Y_A)/14$
$z_4 = -i_{N,BM}/14$	$z_{11} = (i_{N,BM} - f_{XI} \cdot i_{N,XI})/14$
$z_5 = -[i_{N,BM} + (1 - (1/Y_{H,NOX}))]/2.86]/14$	$z_{12} = [i_{N,BM} - f_{XI} \cdot i_{N,XI} - (f_{XI} - 1)/2.86]/14$
$z_6 = (i_{N,BM} - f_{XI} i_{N,XI})/14$	

En base a los procesos se pueden obtener las velocidades netas de conversión r_x correspondiente a cada componente mediante un recorrido de las columnas de la matriz:

$$r_x = \sum v_{p,x} \rho_p, \forall x \quad (2.14)$$

La Tabla 2.2 muestra las velocidades de conversión para cada componente.

Tabla 2.2. Velocidad de conversión

<i>Componente</i>	<i>Velocidad de conversión</i>
S_I	$r_{SI} = f_{SI} \rho_1$
S_S	$r_{SS} = x_1 \rho_1 - \rho_2 - \rho_3$
X_I	$r_{XI} = f_{XI} (\rho_6 + \rho_7 + \rho_{11} + \rho_{12})$
X_S	$r_{XS} = -\rho_1$
X_H	$r_{XH} = \rho_4 + \rho_5 - \rho_6 - \rho_7$
X_A	$r_{XA} = \rho_{10} - \rho_{11} - \rho_{12}$
X_{STO}	$r_{XSTO} = Y_{STO,O_2} \rho_2 + Y_{STO,NOX} \rho_3 - (1/Y_{H,O_2}) \rho_4 - (1/Y_{H,NOX}) \rho_5 - \rho_8 - \rho_9$
X_{SS}	$r_{XSS} = t_1 \rho_1 + t_2 \rho_2 + t_3 \rho_3 + t_4 \rho_4 + t_5 \rho_5 + t_6 \rho_6 + t_7 \rho_7 + t_8 \rho_8 + t_9 \rho_9 + t_{10} \rho_{10} + t_{11} \rho_{11} + t_{12} \rho_{12}$
S_O	$r_{SO} = x_2 \rho_2 + x_4 \rho_4 + x_6 \rho_6 + x_8 \rho_8 + x_{10} \rho_{10} + x_{11} \rho_{11}$
S_{NOX}	$r_{SNOX} = x_3 \rho_3 + x_5 \rho_5 + x_7 \rho_7 + x_9 \rho_9 + (1/Y_A) \rho_{10} + x_{12} \rho_{12}$
S_{N2}	$r_{SN2} = -x_3 \rho_3 - x_5 \rho_5 - x_7 \rho_7 - x_9 \rho_9 - x_{12} \rho_{12}$
S_{NH}	$r_{SNH} = y_1 \rho_1 + y_2 \rho_2 + y_3 \rho_3 + y_4 \rho_4 + y_5 \rho_5 + y_6 \rho_6 + y_7 \rho_7 + y_{10} \rho_{10} + y_{11} \rho_{11} + y_{12} \rho_{12}$

$$S_{ALK} \quad r_{S_{ALK}} = z_1\rho_1 + z_2\rho_2 + z_3\rho_3 + z_4\rho_4 + z_5\rho_5 + z_6\rho_6 + z_7\rho_7 + z_9\rho_9 + z_{10}\rho_{10} + z_{11}\rho_{11} + z_{12}\rho_{12}$$

Suposiciones y limitaciones del modelo

pH: El modelo ASM3, fue desarrollado para un pH cercano a la neutralidad (de 6.5 a 7.5). La incorporación de la alcalinidad como uno de los componentes del modelo se realiza con el fin de detectar posibles problemas.

Componentes tóxicos: Cualquier factor inhibitorio en la cinética debe ser incluida o considerada en la calibración de los parámetros y con esto se representaría un efecto inhibitorio promedio.

Composición del agua residual: los modelos fueron desarrollados para el modelado del tratamiento de aguas residuales municipales. Las modificaciones más comunes son las que consideran algunos efectos inhibitorios de la nitrificación en el modelado del tratamiento de aguas residuales industriales.

Temperatura: El rango de temperatura para el que fue desarrollado el modelo es entre los 8 y 23 °C. Los parámetros cinéticos del modelo son dependientes de la temperatura, y por consiguiente se deben calibrar para una temperatura específica, o desarrollar factores de corrección apropiados para incluir la dependencia con la temperatura en la cinética de las reacciones.

La Tabla 2.3 muestra los valores de dos conjuntos de parámetros cinéticos típicos para 10 y 20 °C, y las ecuaciones 2.15 y 2.16 se pueden utilizar para calcular estos valores a otra temperatura (Gujer et al., 1999).

$$k(T) = k(20^\circ\text{C}) \cdot \exp(\theta_T \cdot (T - 20^\circ\text{C})) \quad (2.15)$$

donde θ_T (en °C) se obtiene con

$$\theta_T = \frac{\ln(k(T_1)/k(T_2))}{T_1 - T_2} \quad (2.16)$$

La Tabla 2.4 muestra un conjunto de valores para los parámetros estequiométricos y de composición típicos para el ASM3 (Gujer et al., 1999).

Tabla 2.3. Valores de los parámetros cinéticos típicos para el modelo ASM3

<i>Símbolo</i>	<i>Descripción</i>	<i>Temperatura</i>		<i>Unidad</i>
		<i>10 °C</i>	<i>20 °C</i>	
k_H	Constante de la velocidad de hidrólisis	2	3	$\text{g COD}_{XS} (\text{g COD}_{XH})^{-1} \text{d}^{-1}$
K_X	Constante de saturación para la hidrólisis	1	1	$\text{g COD}_{XS} (\text{g COD}_{XH})^{-1}$
<i>Organismos heterótrofos X_H, Actividad aeróbica y denitrificante</i>				
k_{STO}	Constante de velocidad de almacenamiento	2.5	5	$\text{g COD}_{SS} (\text{g COD}_{XH})^{-1} \text{d}^{-1}$
η_{NOX}	Factor de reducción anóxico	0.6	0.6	----
K_{O_2}	Constante de saturación para S_{O_2}	0.2	0.2	$\text{g O}_2 \text{m}^{-3}$
K_{NOX}	Constante de saturación para S_{NOX}	0.5	0.5	$\text{g N-NO}_3 \text{m}^{-3}$
K_S	Constante de saturación para el sustrato S_S	2	2	$\text{g COD}_{SS} \text{m}^{-3}$
K_{STO}	Constante de saturación para X_{STO}	1	1	$\text{g COD}_{XSTO} (\text{g COD}_{XH})^{-1}$
μ_H	Velocidad de crecim. máximo de heterótrofos X_H	1	2	d^{-1}
K_{NH_4}	Constante de saturación para el amonio, S_{NH}	0.01	0.01	g N m^{-3}
K_{ALK}	Constante de sat. para la alcalinidad para X_H	0.1	0.1	$\text{moles de HCO}_3^- \text{m}^{-3}$
b_{H,O_2}	Vel. de respiración endógena aeróbica para X_H	0.1	0.2	d^{-1}
$b_{H,NOX}$	Vel. de respiración endógena anóxica para X_H	0.05	0.1	d^{-1}
b_{STO,O_2}	Velocidad de respiración aeróbica para X_{STO}	0.1	0.2	d^{-1}
$b_{STO,NOX}$	Velocidad de respiración anóxica para X_{STO}	0.05	0.1	d^{-1}
<i>Organismos autótrofos X_A, actividad nitrificante</i>				
μ_A	Vel. de crecimiento máximo de autótrofos X_A	0.35	0.1	d^{-1}
K_{A,NH_4}	Saturación para el sustrato amónico para X_A	1	1	g N m^{-3}
K_{A,O_2}	Saturación de oxígeno para los nitrificantes	0.5	0.5	$\text{g O}_2 \text{m}^{-3}$
$K_{A,ALK}$	Saturación de bicarbonato para los nitrificantes	0.5	0.5	$\text{moles de HCO}_3^- \text{m}^{-3}$
b_{A,O_2}	Vel. de respiración endógena aeróbica para X_A	0.05	0.15	d^{-1}
$b_{A,NOX}$	Vel. de respiración endógena anóxica para X_A	0.02	0.05	d^{-1}

Tabla 2.4. Valores de los parámetros estequiométricos y de composición típicos para el ASM3

<i>Símbolo</i>	<i>Descripción</i>	<i>valor</i>	<i>Unidad</i>
f_{SI}	Producción S_I en la hidrólisis	0	$\text{g COD}_{SI} (\text{g COD}_{XS})^{-1}$
Y_{STO,O_2}	Rendimiento aeróbico de producto almacenado por S_S	0.85	$\text{g COD}_{XSTO} (\text{g COD}_{SS})^{-1}$
$Y_{STO,NO}$	Rendimiento anóxico de producto almacenado por S_S	0.80	$\text{g COD}_{XSTO} (\text{g COD}_{SS})^{-1}$
Y_{H,O_2}	Rendimiento aeróbico de biomasa heterótrofa	0.63	$\text{g COD}_{XH} (\text{g COD}_{XSTO})^{-1}$
$Y_{H,NO}$	Rendimiento aeróbico de biomasa heterótrofa	0.54	$\text{g COD}_{XH} (\text{g COD}_{XSTO})^{-1}$
Y_A	Rendimiento de biomasa autótrofa por N-NO_3^-	0.24	$\text{g COD}_{XA} (\text{g N}_{SNO})^{-1}$

f_{XI}	Producción de XI en respiración endógena	0.20	$\text{g COD}_{XI} (\text{g COD}_{XBM})^{-1}$
$i_{N,SI}$	Contenido de N de S_I	0.01	$\text{g N} (\text{g COD}_{SI})^{-1}$
$i_{N,SS}$	Contenido de N de S_s	0.03	$\text{g N} (\text{g COD}_{SS})^{-1}$
$i_{N,XI}$	Contenido de N de X_I	0.02	$\text{g N} (\text{g COD}_{XI})^{-1}$
$i_{N,XS}$	Contenido de N de X_S	0.04	$\text{g N} (\text{g COD}_{XS})^{-1}$
$i_{N,BM}$	Contenido de N de la biomasa X_H y X_A	0.07	$\text{g N} (\text{g COD}_{XBM})^{-1}$
$i_{SS,XI}$	Relación de SS a COD para X_I	0.75	$\text{g SS} (\text{g COD}_{XI})^{-1}$
$i_{SS,XS}$	Relación de SS a COD para X_S	0.75	$\text{g SS} (\text{g COD}_{XS})^{-1}$
$i_{SS,BM}$	Relación de SS a COD para la biomasa X_H y X_A	0.90	$\text{g SS} (\text{g COD}_{XBM})^{-1}$
$i_{SS,XSTO}$	Relación de SS a COD para X_{STO}	0.60	$\text{g SS} (\text{g COD}_{XSTO})^{-1}$

2.3.2 Modelo de unidades de proceso y equipamiento

2.3.2.1 Modelo del sistema de aireación

Los sistemas de aireación incluyen un compresor de aire, tuberías, y difusores que forman burbujas de aire que se dispersan en el tanque de aireación. La eficacia de la transferencia de oxígeno depende de muchos factores incluyendo el tipo, tamaño, forma y ubicación de los difusores, la geometría y tamaño del tanque de reacción (profundidad, ancho), y el caudal de aire u oxígeno. Estos parámetros determinan factores como el tamaño de burbuja y el grado de turbulencia.

El transporte de oxígeno desde las burbujas de aire a las células es complejo, y contempla varias etapas: transferencia de masa dentro de la burbuja de aire a la interfaz gas-líquido; transporte a través de la interfaz; transferencia de masa dentro de la fase líquida hacia el flóculo microbiano; transferencia de masa dentro del flóculo hasta la pared celular, y transporte a través de la interfaz celular. La etapa más lenta es el transporte a través de la interfaz gas-líquido; por lo que resulta la etapa controlante de transferencia. Este “proceso” complejo puede ser descrito mediante un coeficiente de transferencia de oxígeno k_L , que es usado como la variable manipulada en los modelos matemáticos de barros activados. Las condiciones en el licor de mezcla que se desarrollan en el tanque de aireación (temperatura, fuerza iónica, presencia de compuestos surfactantes y concentración de sólidos) también tienen impacto sobre la transferencia. La determinación experimental del k_L requiere del conocimiento del área interfacial total (A_t) y del volumen de reacción (V). Por esta razón y por lo general, para

un sistema particular la velocidad de transferencia se calcula mediante el coeficiente total de transferencia de masa $k_L a$, que integra los factores k_L y A_t/V :

$$k_L a = k_L \cdot A_t/V \quad (2.17)$$

donde $k_L a$ es el coeficiente total de transferencia de oxígeno (h^{-1}), V es el volumen del tanque (m^3), A_t es el área interfacial de transferencia de masa (m^2). $a = A_t/V$ es el área interfacial por unidad de volumen (m^2/m^3).

La ecuación básica que describe la velocidad de transferencia de oxígeno en agua es:

$$\frac{dC_{(t)}}{dt} = k_L a \cdot (C_{st} - C_{(t)}) \quad (2.18)$$

donde $dC_{(t)}/dt$ es la velocidad de transferencia de oxígeno al agua ($\text{gO}_2 \text{ m}^{-3} \text{ h}^{-1}$), $C_{(t)}$ es la concentración de oxígeno en el agua en el tiempo t ($\text{gO}_2 \text{ m}^{-3}$), C_{st} es la concentración de oxígeno de saturación o equilibrio en el agua respecto al aire en una burbuja a profundidad media ($\text{gO}_2 \text{ m}^{-3}$).

En los casos presentados en esta tesis se usan las ecuaciones propuestas en el protocolo de simulación del grupo COST (Copp et al., 2002), donde se considera aireadores de discos porosos Degrémont DP230 y una profundidad de inmersión de 4 m. También se asume que el tamaño de burbuja y las condiciones que se desarrollan en el tanque de aireación son similares a las del mencionado protocolo. Así, el caudal de aire Q_{air} necesario para alcanzar un valor definido de $k_L a$ (h^{-1}) se establece mediante la siguiente expresión:

$$k_L a = C \cdot U_{SG}^Y \quad (2.19)$$

donde C es una constante ($0.25 \text{ d m}^{-3} \text{ h}^{-1}$), el exponente Y es igual a 0.771 y U_{SG} es la velocidad superficial del gas (en $\text{m}^3 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$), que se puede calcular como:

$$U_{SG} = Q_{air} / A_b \quad (2.20)$$

con Q_{air} en (m^3d^{-1}) y el área del bioreactor A_b en (m^2).

Por su parte, la energía de aireación E_a (en kWh d^{-1}) se calcula en función del k_La según la siguiente correlación:

$$E_a = 24 \sum_I \left(0.4032 \left(\frac{k_L a_i}{24} \right)^2 + 7.8408 \left(\frac{k_L a_i}{24} \right) \right) \quad (2.21)$$

donde I representa el conjunto de compartimentos de reacción con sistema de aireación.

Como se expresó anteriormente, no hay en la literatura trabajos de optimización de este tipo de procesos, y los que se orientan a optimización, en general, realizan pruebas de simulación o experimentales, variando las condiciones operativas dentro de un rango dado y optando por aquella con la que se obtienen mejores resultados. En dichas pruebas o experimentos, una de las condiciones operativas a evaluar es la aireación o concentración de oxígeno disuelto (OD) en un reactor dado. Así, los reactores que reciben aireación, se denominan aeróbicos, y se considera que en ellos se producen las reacciones que demandan oxígeno; esto es, en el caso de plantas para remoción de nitrógeno, se considera que allí se producen las reacciones de nitrificación. Para realizar las simulaciones o experimentos, en estos reactores, se eligen determinados valores de OD (por ejemplo, 0.5 a 2 o 5 $g\ m^{-3}$) o bien reciben un cierto caudal de aireación.

Sin embargo, cabe aclarar que en la literatura, el fenómeno que ocurre bajo condiciones de baja aireación ($0.3 < OD < 0.8\ g\ m^{-3}$) es llamado nitrificación-denitrificación simultánea (SND, Simultaneous nitrification and denitrification) y actualmente está siendo estudiado por las ventajas económicas frente a los procesos convencionales de zonas aerobia y anóxicas separadas (Peng y Qi, 2007).

Se ha observado que en muchas de las soluciones obtenidas en este capítulo, algunos de los reactores que resultan aireados, poseen valores bajos de concentración de oxígeno (S_o). Esta característica de las soluciones concuerda con otros trabajos de síntesis de este tipo de procesos empleando modelos ASM (Rigopoulos y Linke, 2002; Magbanua et al., 2007). Por lo tanto, la validez de las soluciones encontradas aquí depende de la validez del modelo ASM3 para valores de concentración de oxígeno en

dicho rango. Se han encontrado trabajos recientes que aplican los modelos ASM para modelar los procesos de (SND) nitrificación-denitrificación simultánea (Lukasse et al., 1998; Wichern et al., 2001; Wichern et al., 2003; Sarioglu et al., 2008). Magbanua et al. (2007) emplearon el Modelo ASM1 y las propiedades y parámetros de aguas residuales domésticas típicas en simulaciones, y encontraron que el ASM1 puede reproducir tendencias generales del SND, pero que requerirían una mejor estimación de parámetros para ajustarlos al proceso de SND para predecir con más exactitud la remoción de nitrógeno y los resultados de las simulaciones indicaron que el retiro de nitrógeno óptimo se alcanzaba cuando la concentración de oxígeno disuelto era 0.3 mg/L.

En el ámbito de esta tesis, en estos primeros capítulos referidos a modelos para remoción de materia orgánica y nitrógeno, a los reactores que resultan con $k_L a$ mayor a cero se los denomina reactores aireados o aerobios, y aquellos que carecen de sistema de aireación se los denomina reactores anóxicos.

2.3.2.2 Modelo del sedimentador

El decantador secundario se modela como un tanque de sedimentación no reactivo subdividido en 10 capas de igual espesor, usando el modelo de velocidad de sedimentación doble exponencial propuesto por Takács et al., (1991).

Para simplificar la notación de las ecuaciones del modelo de decantador, en esta subsección la concentración de sólidos suspendidos X_{SS} es renombrada como X .

La Figura 2.3 esquematiza el modelo del decantador, que consiste en cinco grupos diferentes de capas según su posición relativa al punto de alimentación. También se muestran las corrientes generadas por el movimiento global del líquido y las provocadas por la gravedad involucradas en los balances de masa alrededor de cada capa. Este balance depende de si el componente es particulado o soluble. El movimiento de los compuestos solubles a través del decantador se debe sólo al movimiento global del líquido, mientras que el movimiento de los compuestos particulados es debido al movimiento global del líquido y a los efectos gravitatorios.

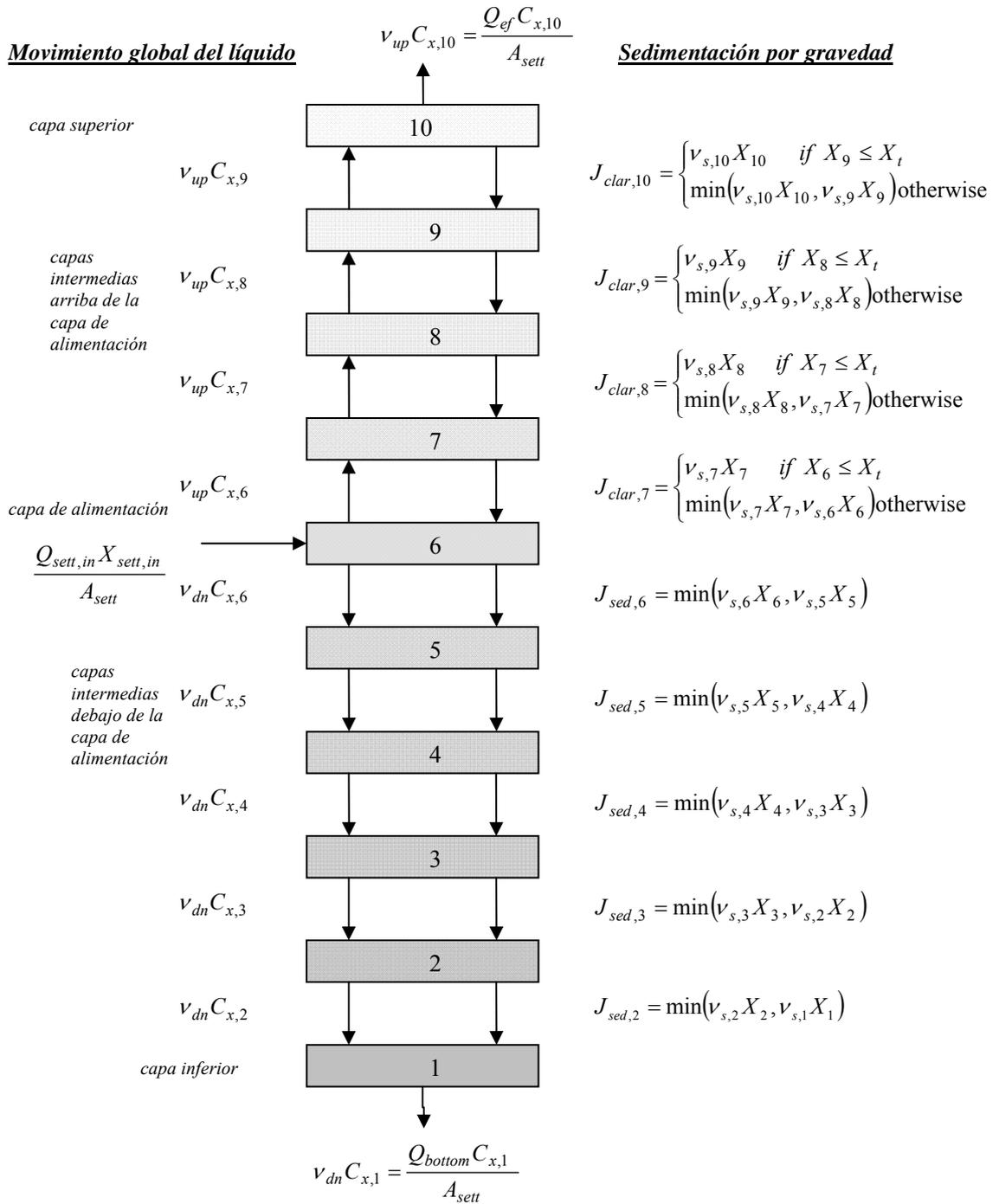


Figura 2.3. Esquema del modelo del decantador

El flujo de componentes particulados depende de la concentración de los componentes sólidos, pero no de la composición de los mismos. Para cualquier compuesto particulado X_x se cumple:

$$\frac{X_{x,sett,in}}{X_{sett,in}} = \frac{X_{x,m}}{X_m}, \quad \forall x,m \quad (2.22)$$

donde $X_{x,sett,in}$ y $X_{x,m}$ son las concentraciones del compuesto particulado x en la capa de alimentación y en la capa m , resp., y $X_{sett,in}$ y X_m son las concentraciones de sólidos suspendidos de las capas correspondientes.

Los flujos de compuestos solubles y particulados debido al movimiento global del líquido son iguales al producto de la concentración $C_{x,m}$ y la velocidad global del líquido que puede ser ascendente o descendente (v_{up} o v_{dn}) según la posición relativa de la capa con respecto al punto de alimentación:

$$v_{dn} = Q_{bottom} / A_{sett} \quad (2.23)$$

$$v_{up} = Q_{ef} / A_{sett} \quad (2.24)$$

donde Q_{bottom} y Q_{ef} son los caudales volumétricos de flujo en las zonas de sedimentación y de clarificación, respectivamente.

La función de velocidad de sedimentación doble exponencial propuesta por Takács se muestra en la Eq. (2.25), cuyos parámetros son mostrados en la Tabla 2.5:

$$v_{s,m}(X) = \max \{0, \min [v_o', v_o (e^{-r_h(X_m - X_{min})} - e^{-r_p(X_m - X_{min})})]\}, \quad \forall m \quad (2.25)$$

$$X_{min} = f_{ns} X_{sett,in} \quad (2.26)$$

donde $v_{s,m}$ es la velocidad de sedimentación en la capa m ; X_m es la concentración de sólidos suspendidos de la capa m ; X_{min} es la concentración de sólidos suspendidos mínima alcanzable; $X_{sett,in}$ es la concentración de sólidos suspendidos en el licor de mezcla que entra al tanque de sedimentación; y f_{ns} es la fracción no sedimentable.

Se asume que el punto de alimentación al decantador está situado en la sexta capa desde la base.

Tabla 2.5. Parámetros del modelo del decantador y valores “default” del modelo

Parámetro	Símbolo	Unidad	Valor
<i>Velocidad de sedimentación máxima</i>	v_0'	m d^{-1}	250
<i>Velocidad de sedimentación máxima de Vesilind</i>	v_0	m d^{-1}	474
<i>Parámetro de sedimentación de la zona de estancamiento</i>	r_h	$\text{m}^3 \text{gSS}^{-1}$	0.000576
<i>Parámetro de sedimentación de la zona de floculación</i>	r_p	$\text{m}^3 \text{gSS}^{-1}$	0.00286
<i>Fracción no sedimentable</i>	f_{ns}	-	0.00228

El flujo de compuestos particulados debido a la sedimentación por gravedad J depende de la posición relativa con respecto al punto de alimentación. Para las capas inferiores a la capa de alimentación ($m = 2$ a 6), el flujo de sedimentación $J_{sed,m}$ está determinado por

$$J_{sed,m} = \min(v_{s,m}X_m, v_{s,m-1}X_{m-1}), \quad m = 2, \dots, 6 \quad (2.27)$$

y para las capas por encima del punto de alimentación ($m = 7$ a 10), el flujo de clarificación $J_{clar,m}$ está determinado por

$$J_{clar,m} = \begin{cases} v_{s,m}X_m & \text{si } X_{m-1} \leq X_t \\ \min(v_{s,m}X_m, v_{s,m-1}X_{m-1}) & X_{m-1} > X_t \end{cases}, \quad m = 7, \dots, 10 \quad (2.28)$$

La concentración umbral X_t se adopta de manera de limitar el flujo descendente de sólidos a una cantidad que pueda ser manejada por la capa subsiguiente (inferior). Por ejemplo, encima de la capa de alimentación, el flujo que deja la capa m es restringido, de manera que si la concentración en la capa $m-1$ es mayor que el valor umbral (X_t), el flujo que deja la capa m es igual a $\min(v_{m,j}X_m, v_{m,j-1}X_{m-1})$. En el modelo de Takács se propone X_t igual a 3000 g m^{-3} .

De un análisis del proceso realizado a través de numerosas corridas de simulación, se concluyó que en la zona de clarificación así como en la capa de alimentación ($m = 6$ a 10), la concentración de sólidos suspendidos X_{SS} es menor que la concentración umbral X_t propuesta en el modelo de Takács para diferentes casos de

estudio que contemplan la mayoría de las situaciones prácticas. Este comportamiento puede ser consecuencia de la profundidad del decantador y la posición del punto de alimentación generalmente utilizados y aquí adoptados, y a las características de las aguas residuales consideradas. Por simplicidad y para evitar el tratamiento complejo de la ecuación 2.28, la misma fue simplificada considerando sólo una cláusula de las ecuaciones condicionales $J_{clar,m} = v_{s,m} X_{SS,m}$ que es válida cuando $X_{SS,m-1}$ es inferior que X_t . El cumplimiento de la restricción mencionada ha sido verificado para cada solución obtenida, y puede concluirse que es aplicable si se mantienen las relaciones geométricas consideradas, en forma general.

Los balances de los componentes en estado estacionario resultantes alrededor de cada capa son los siguientes:

Balances de masa para los barros (componentes particulados)

Capa de alimentación

$$0 = \frac{(Q_{sett,in} X_{sett,in} / A_{sett}) + J_{clar,m+1} - (v_{up} + v_{dn}) X_m - J_{sed,m}}{h_m}, \quad m = 6 \quad (2.29)$$

donde $Q_{sett,in}$ y $X_{sett,in}$ son el caudal volumétrico y la concentración de particulados que se alimenta al decantador, respectivamente. A_{sett} y h_m son el área transversal del decantador secundario y la altura de cada una de sus capas teóricas, respectivamente. La variable altura h_m se mantiene en las ecuaciones para indicar la discretización que subyace en esa dimensión.

Capas de sedimentación intermedias debajo de la capa de alimentación

$$0 = \frac{v_{dn} (X_{m+1} - X_m) + J_{sed,m+1} - J_{sed,m}}{h_m}, \quad m = 2, \dots, 5 \quad (2.30)$$

Capa inferior

$$0 = \frac{v_{dn} (X_{m+1} - X_m) + J_{sed,m+1}}{h_m}, \quad m = 1 \quad (2.31)$$

Capas de clarificación intermedias arriba de la capa de alimentación

$$0 = \frac{v_{up} (X_{m-1} - X_m) + J_{clar,m+1} - J_{clar,m}}{h_m}, \quad m = 7, \dots, 9 \quad (2.32)$$

Capa superior

$$0 = \frac{v_{up} (X_{m-1} - X_m) - J_{clar,m}}{h_m}, \quad m = 10 \quad (2.33)$$

Balances de masa para los componentes solubles S_x (incluyendo el oxígeno disuelto)

Capa de alimentación

$$0 = \frac{(Q_{sett,in} S_{x,sett,in} / A_{sett}) - (v_{up} + v_{dn}) S_{x,sett,in}}{h_m}, \quad m = 6 \quad (2.34)$$

Capas debajo de la capa de alimentación ($m=1$ a 5)

$$0 = \frac{v_{dn} (S_{x,m+1} - S_{x,m})}{h_m}, \quad m = 1, \dots, 5 \quad (2.35)$$

Capas inferiores a la capa de alimentación ($m=7$ a 10)

$$0 = \frac{v_{dn} (S_{x,m-1} - S_{x,m})}{h_m}, \quad m = 7, \dots, 10 \quad (2.36)$$

Para los procesos en estudio, se considera que el sedimentador es un tanque no reactivo de 6000 m³, con un área transversal de 1500 m² y una profundidad de 4 m. Las ecuaciones 2.22 a 2.36 mostradas en este capítulo son empleadas en los modelos presentados en la tesis.

2.3.2.3 Modelo del compartimento de reacción

Para los compartimentos de reacción, se consideran reactores de mezcla completa en estado estacionario (CSTR). Se elige el modelo ASM3 como modelo de los procesos biológicos que ocurren en los reactores, por lo que se incluyen en los modelos las variables correspondientes y las ecuaciones 2.1 a 2.12 definidas previamente.

Los valores de los parámetros cinéticos del modelo fueron interpolados a 15 °C basado en los valores de los mismos a 10 y 20 °C (Tabla 2.3) y la función de interpolación de temperaturas proporcionada por Gujer et al. (1999) (ecuación 2.15). Los parámetros cinéticos que se emplean en los modelos de este capítulo son los que se presentan en la Tabla 2.6.

Tabla 2.6. Valores de los parámetros cinéticos empleados para el modelo ASM3 a 15 °C

<i>Símbolo</i>	<i>Descripción</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidad</i>
k_H	Constante de la velocidad de hidrólisis	2.45	$\text{g COD}_{XS} (\text{g COD}_{XH})^{-1} \text{d}^{-1}$
K_X	Constante de saturación para la hidrólisis	1,00	$\text{g COD}_{XS} (\text{g COD}_{XH})^{-1}$
<i>Organismos heterótrofos XH, Actividad aeróbica y denitrificante</i>			
k_{STO}	Constante de velocidad de almacenamiento	3.54	$\text{g COD}_{SS} (\text{g COD}_{XH})^{-1} \text{d}^{-1}$
η_{NOX}	Factor de reducción anóxico	0.60	----
K_{O_2}	Constante de saturación para S_O	0.20	$\text{g O}_2 \text{m}^{-3}$
K_{NOX}	Constante de saturación para S_{NO}	0.50	$\text{g N-NO}_3^- \text{m}^{-3}$
K_S	Constante de saturación para el sustrato S_S	2.00	$\text{g COD}_{SS} \text{m}^{-3}$
K_{STO}	Constante de saturación para X_{STO}	1.00	$\text{g COD}_{XSTO} (\text{g COD}_{XH})^{-1}$
μ_H	Velocidad de crecimiento máximo de heterótrofos X_H	1.41	d^{-1}
K_{NH_4}	Constante de saturación para el amonio, S_{NH}	0.01	g N m^{-3}
K_{ALK}	Constante de saturación para la alcalinidad para X_H	0.10	$\text{moles de HCO}_3^- \text{m}^{-3}$
b_{H,O_2}	Velocidad de respiración endógena aeróbica para X_H	0.14	d^{-1}
$b_{H,NOX}$	Velocidad de respiración endógena anóxica para X_H	0.07	d^{-1}
b_{STO,O_2}	Velocidad de respiración aeróbica para X_{STO}	0.14	d^{-1}
$b_{STO,NOX}$	Velocidad de respiración anóxica para X_{STO}	0.07	d^{-1}
<i>Organismos autótrofos X_A, actividad nitrificante</i>			
μ_A	Velocidad de crecimiento máximo de autótrofos X_A	0.19	d^{-1}
K_{A,NH_4}	Saturación para el sustrato amónico para X_A	1.00	g N m^{-3}
K_{A,O_2}	Saturación de oxígeno para los nitrificantes	0.50	$\text{g O}_2 \text{m}^{-3}$
$K_{A,ALK}$	Saturación de bicarbonato para los nitrificantes	0.50	$\text{moles de HCO}_3^- \text{m}^{-3}$

b_{A,O_2}	Velocidad de respiración endógena aeróbica para X_A	0.09	d^{-1}
$b_{A,NOX}$	Velocidad de respiración endógena anóxica para X_A	0.03	d^{-1}

Los parámetros estequiométricos y de composición empleados son aquellos que se presentan en Gujer et al. (1999) como valores típicos para el modelo ASM3 (Tabla 2.4).

Por lo expuesto hasta aquí, el modelo de los procesos bioquímicos y el modelo del decantador incluyen funciones altamente no lineales con discontinuidades importantes. En efecto, el modelo de decantador incluye funciones no suaves, tales como la función *min/máx*, que conducen a los modelos llamados *DNLP*.

2.3.3 Configuraciones de planta propuestas para ser optimizadas

Como se ha mencionado en la sección 2.2, en el *caso de estudio 1* se optimizan las tres configuraciones de referencia. En los *casos de estudio 2* al *5* se parte de los tres modelos de configuraciones de referencia, y se derivan modelos que permiten la distribución de las corrientes principales de cada proceso a lo largo de la zona de reacción, ampliando el espacio de alternativas consideradas. Se estudian casos en los cuales se posibilita la distribución de la corriente de mezcla (aquella que resulta del mezclado de la corriente afluyente y los reciclos), la distribución de la corriente afluyente, o bien la distribución de las corrientes de reciclo interno y externo o combinaciones de éstas a lo largo de la zona de reacción para la tres configuración de referencia.

Concretamente, se consideran los siguientes casos:

- *Caso 1*: se optimizan las configuraciones de referencia (no se posibilita distribución de corriente alguna);

- *Caso 2*: se posibilita la distribución de la corriente de mezcla, llamando así a aquella que resulta de la combinación por medio de un mezclador de la corriente de agua residual afluyente y de los reciclos con los que cuente dicha configuración;

- *Caso 3*: sólo se posibilita la distribución del agua residual afluyente;

- *Caso 4*: se posibilita la distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y del reciclo interno (este caso no es posible para el sistema *PostDN* ya que esta configuración carece de reciclo interno);

- *Caso 5*: se posibilita la distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y de los reciclos interno y externo a lo largo de la zona de reacción para cada configuración de referencia.

La Tabla 2.7 resume las catorce alternativas de configuraciones de planta que se derivan según los casos propuestos.

Tabla 2.7. Alternativas de configuraciones de planta estudiadas

<i>Configuración</i>	<i>PreDN</i>	<i>PostDN</i>	<i>PrePostDN</i>
Configuración de Referencia	<i>Caso 1.a</i>	<i>Caso 1.b</i>	<i>Caso 1.c</i>
Distribución de la corriente de mezcla	<i>Caso 2.a</i>	<i>Caso 2.b</i>	<i>Caso 2.c</i>
Distribución de agua residual afluyente	<i>Caso 3.a</i>	<i>Caso 3.b</i>	<i>Caso 3.c</i>
Distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y del reciclo interno	<i>Caso 4.a</i>	---	<i>Caso 4.c</i>
Distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y de los reciclos interno y externo	<i>Caso 5.a</i>	<i>Caso 5.b</i>	<i>Caso 5.c</i>

Obviamente, a medida que se agregan nuevas posibilidades de distribución de corrientes, se consiguen estructuras que embeben o incluyen a la configuración de referencia y a aquéllas que posibilitan una distribución de corrientes más restringida. De esta manera, a medida que se extiende la estructura adicionando nuevas posibilidades, se logra una superestructura que aumenta la potencialidad de representación del modelo y el espacio de búsqueda y, por tanto, la complejidad del problema matemático.

Debido al incremento del espacio de alternativas consideradas en la optimización, en los casos de estudio 2 se espera encontrar soluciones mejores, o al menos tan buenas, como las encontradas en los casos 1, ya que los casos 1 están comprendidos en los casos 2. Por otro lado, se espera encontrar en los casos 5, soluciones mejores o tan buenas como las encontradas en los casos 2, ya que los casos 5 comprenden o incluyen los casos 2. Se espera también que las soluciones encontradas mejoren, o al menos sean iguales, a las soluciones precedentes de acuerdo a la secuencia 1, 3, 4 y 5 ya que en esta última secuencia se va ampliando el espacio de búsqueda, y los casos sucesivos van comprendiendo a los anteriores.

Caso 1. Configuraciones de referencia

Se optimizan las tres configuraciones de referencia que se describen en la sección 2.2.

Caso 2. Distribución de la corriente de mezcla

La Figura 2.4 ilustra las tres configuraciones con la posibilidad de distribución de la corriente de mezcla en uno o varios compartimentos de reacción. El resultado de la optimización determina el caudal volumétrico de los reciclos interno y externo, y la fracción de la mezcla (de los reciclos y el agua residual afluyente) que se alimenta a cada reactor.

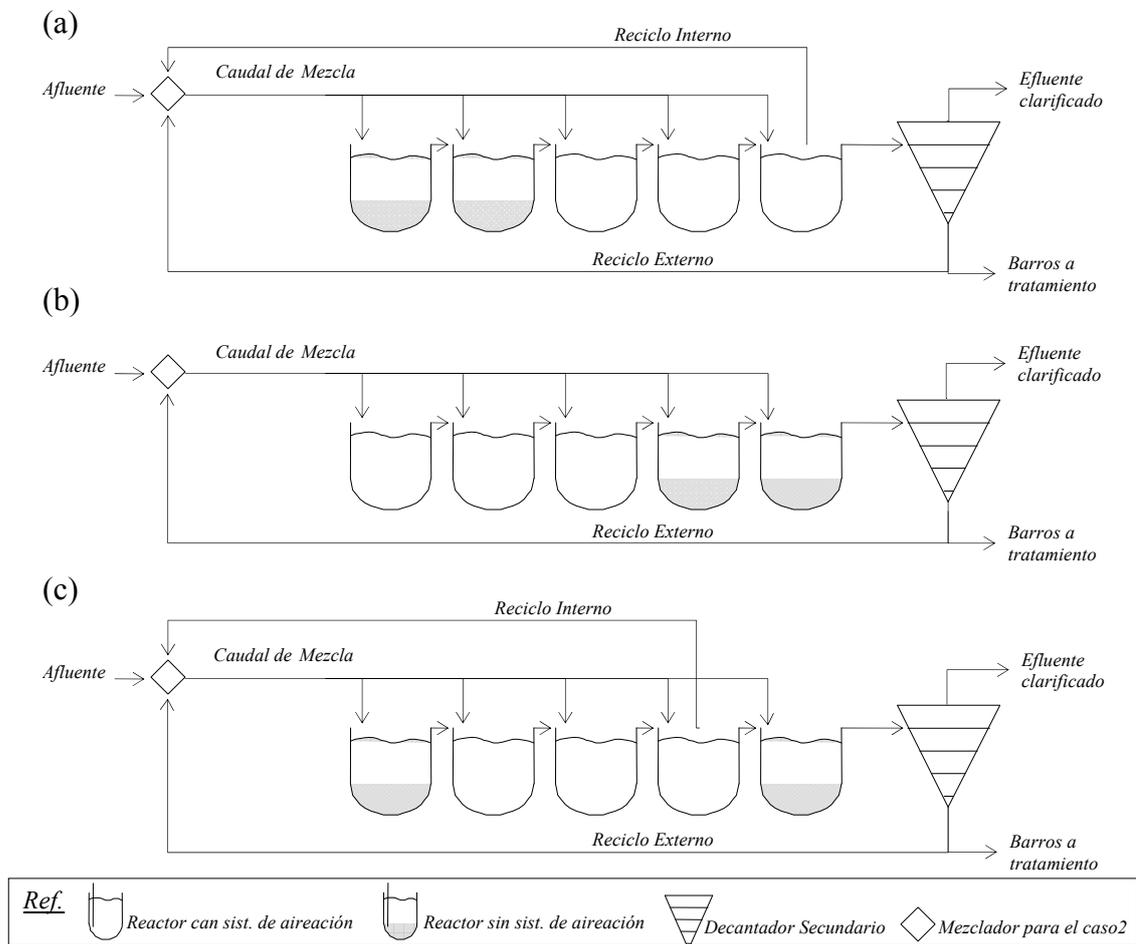


Figura 2.4. Configuraciones con distribución de la corriente de mezcla (a) de *PreDN*, (b) de *PostDN* y (c) de *PrePostDN*.

Caso 3. Distribución de agua residual afluyente

En este caso, el agua residual afluyente puede ser alimentada a uno o varios de los cinco compartimentos de reacción. Las corrientes de reciclo interno y externo se alimentan siempre al primer compartimento. (No se incluye esquema para este caso).

Caso 4. Distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y del reciclo interno

La configuración *PostDN* no posee reciclo interno. Por lo tanto esta alternativa de proceso no es aplicable a esa configuración (no se incluye esquema para este caso).

Caso 5. Distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y de los reciclos interno y externo

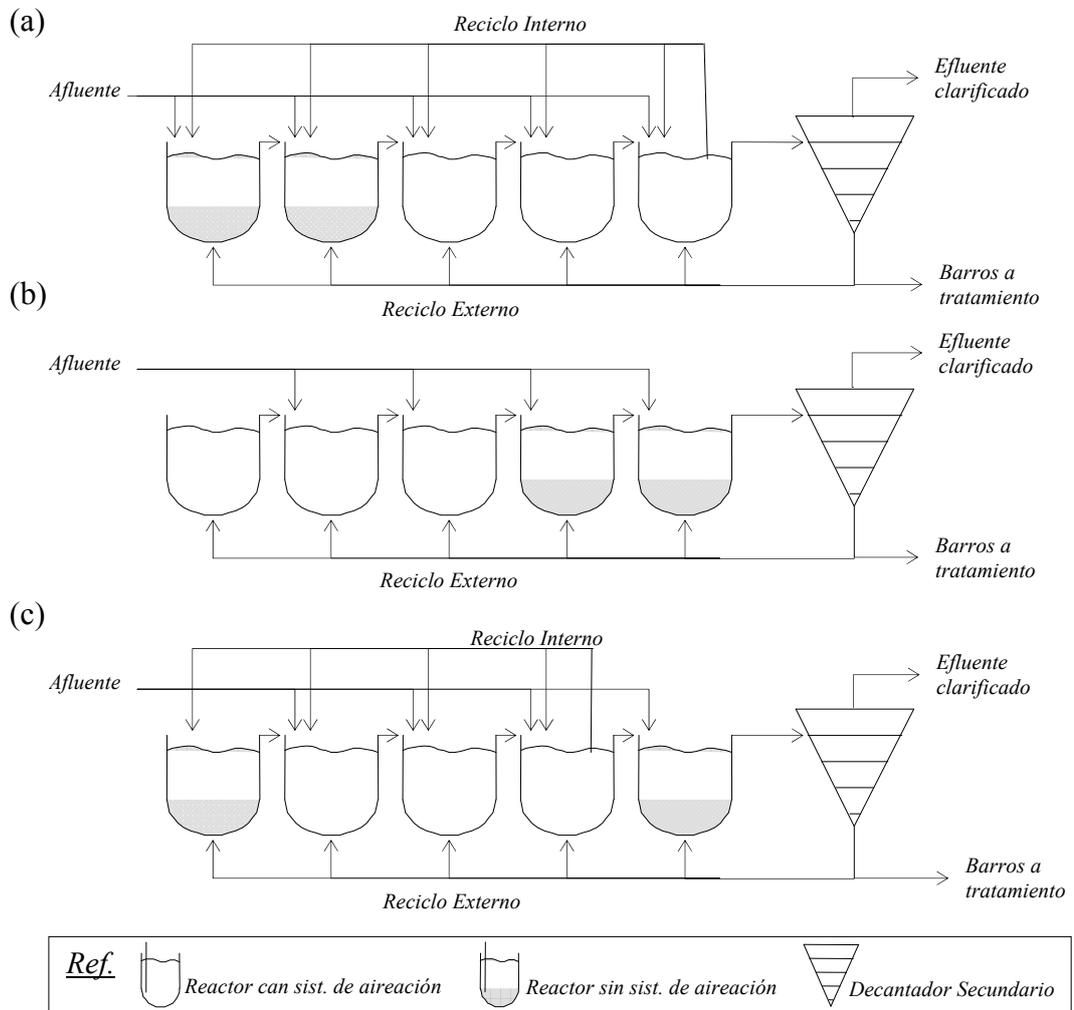


Figura 2.5. Configuración con distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y de los reciclos interno (si corresponde) y externo (a) de *PreDN*, (b) de *PostDN* y (c) de *PrePostDN*.

La Figura 2.5 ilustra las configuraciones con distribución simultánea de la corriente afluyente y de los reciclos interno y externo. Dado que la configuración *PostDN* no posee reciclo interno, la alternativa que se estudia en este caso es la de *PostDN* con distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y reciclo externo.

En todos los casos de estudio se posibilita la incorporación de una fuente de carbono externa para favorecer el proceso de denitrificación (si fuera necesario). La fuente de carbono, se supone es una solución de metanol en agua al 25 % (V/V). El costo de la misma se estima en 114 Euros/m³ de solución, lo que equivale a 0.304 Euros/kg COD.

Para presentar el resto de las ecuaciones que describen los diferentes modelos para cada caso de estudio se definen:

- Conjuntos:

$i=\{1, 2, 3, \dots, I\}$ conjunto de reactores i ,

J conjunto de reactores con sistema de aireación $J \subset I$,

K conjunto de reactores anóxicos $K \subset I$,

Previo a cada compartimento de reacción, se modela un mezclador no reactivo:

$g=\{1, 2, 3, \dots, G\}$ conjunto de mezcladores g ,

$x=\{1, 2, 3, \dots, X\}$ conjunto de componentes del modelo ASM3,

$p=\{1, 2, 3, \dots, P\}$ conjunto de procesos del modelo ASM3,

$m=\{1, 2, 3, \dots, M\}$ conjunto de capas del modelo del decantador,

$cont=\{1, 2, 3, \dots, CONT\}$ conjunto de contaminantes del efluente,

$l=\{1, 2, 3, \dots, L\}$ conjunto de variables de operación,

- Variables:

Q_i caudal volumétrico en el compartimento de reacción i ,

V_i volumen del compartimento de reacción i ,

A_{sett} área transversal del decantador (=1500m²),

h altura de cada capa del decantador (=0.4m),

$C_{x,i}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el reactor i ,

C_{cont} concentración del contaminante $cont$ en el efluente,

$C_{cont,lim}$ valor umbral de la concentración del contaminante $cont$ máximo permitido,

$C_{x,g}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el mezclador g ,

$C_{x,fresh}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el afluente,

$C_{x,r,int,5}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el reciclo interno proveniente del último reactor,

$C_{x,r,int,4}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el reciclo interno proveniente del penúltimo reactor,

$C_{x,r,ext}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el reciclo externo,

$C_{x,sett,in}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en la corriente de entrada al decantador,

$C_{x,bottom}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en la corriente de barros que abandona la zona de sedimentación del decantador,

$C_{x,ef}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en la corriente de efluente clarificado que abandona la zona de clarificación del decantador,

$\rho_{p,i}$ velocidad del proceso p en el reactor i ,

$v_{p,x}$ coeficientes estequiométricos del modelo ASM3,

$r_{x,i}$ término de reacción para cada componente x y reactor i

$k_L a_i$ coeficiente de transferencia de masa de oxígeno en el reactor i ,

Q_{fresh}^T caudal volumétrico total afluente,

$Q_{fresh,g}$ caudal de afluente dirigido al mezclador g ,

$Q_{r,int,5}^T$ caudal de reciclo interno total proveniente del último reactor,

$Q_{r,int,5,g}$ caudal de reciclo interno proveniente del último reactor dirigido al mezclador g ,

$Q_{r,int,4}^T$ caudal de reciclo interno total proveniente del penúltimo reactor,

$Q_{r,int,4,g}$ caudal de reciclo interno proveniente del penúltimo reactor dirigido al mezclador g ,

$Q_{r,ext}^T$ caudal de reciclo externo total,

$Q_{r,ext,g}$ caudal de reciclo externo dirigido al mezclador g ,

$Q_{4,5}$ caudal dirigido del 4to compartimento al último,

$Q_{sett,in}$ caudal dirigido al decantador,

Q_{bottom} corriente de barros que abandona la zona de sedimentación del decantador,

Q_{waste} es la corriente de barros que se elimina del sistema,

Q_{ef} corriente de efluente clarificado que abandona la zona de clarificación del decantador,

$u_{ECSD,g}$ es el caudal másico de la fuente de carbono externa ($u_{SS,g}$ gCOD_{SS} d⁻¹) alimentada al mezclador g ,

u_{ECSD}^T el caudal másico total de la fuente de carbono externa ($u_{SS,g}$ gCOD_{SS} d⁻¹),

VO_l variables de operación l ;

- Restricciones:

Para los volúmenes V_i y los coeficientes de transferencia de masa $k_L a_i$ de cada compartimento de reacción i , se introducen las restricciones siguientes:

$$\begin{aligned} V_i &= 1000 \text{ m}^3, \quad \forall i \in K \\ V_i &= 1333 \text{ m}^3, \quad \forall i \in J \end{aligned} \quad (2.37)$$

donde 1000 m³ corresponde al volumen del reactor anóxico y 1333 m³ a los que poseen sistema de aireación.

$$\begin{aligned} k_L a_i &= 0 \text{ d}^{-1}, \quad \forall i \in K \\ 0 \text{ d}^{-1} &\leq k_L a_i \leq k_L a_{\max} \text{ d}^{-1}, \quad \forall i \in J \end{aligned} \quad (2.38)$$

El valor $k_L a_{i,\max}$ es un límite de operación máximo permitido.

Con lo anterior, para cada uno de los esquemas de proceso estudiados se tiene:

Para el esquema de *PreDN* (casos #a)

$$\begin{aligned} J &= \{3, 4, 5\} \\ K &= \{1, 2\} \end{aligned} \quad (2.39)$$

No se tiene reciclo interno proveniente del cuarto reactor, por lo que los términos que involucran los caudales correspondientes a estas corrientes ($Q_{r,int,4}^T$ y $Q_{r,int,4,g}$) se eliminan de las ecuaciones.

Para el esquema de *PostDN* (casos #b)

$$\begin{aligned} J &= \{1, 2, 3\} \\ K &= \{4, 5\} \end{aligned} \quad (2.40)$$

En este caso no se tiene reciclos internos. Análogamente, los términos que involucran los caudales correspondientes a estas corrientes ($Q_{r,int,4}^T$, $Q_{r,int,4,g}$, $Q_{r,int,5}^T$ y $Q_{r,int,5,g}$) se eliminan de las ecuaciones.

Para el esquema de *PrePostDN* (casos #c)

$$\begin{aligned} J &= \{2, 3, 4\} \\ K &= \{1, 5\} \end{aligned} \quad (2.41)$$

No se tiene reciclo interno proveniente del último reactor. Así, los términos que involucran los caudales correspondientes a estas corrientes ($Q_{r,int,5}^T$ y $Q_{r,int,5,g}$) se eliminan de las ecuaciones.

Para el caso de estudio 1 las ecuaciones que definen los modelos son las siguientes:

- Balance de masa en cada reactor i :

$$Q_i = Q_{fresh}^T + Q_{r,int,5}^T + Q_{r,int,4}^T + Q_{r,ext}^T, \quad i = 1 \quad (2.42)$$

$$Q_i = Q_{(i-1)}, \quad \forall i \neq 1, i < I \quad (2.43)$$

$$Q_i = Q_{4,5}, \quad i = I \quad (2.44)$$

- Balance de masa total en separadores:

$$Q_4 = Q_{4,5} + Q_{r,int,4}^T \quad (2.45)$$

$$Q_5 = Q_{sett,in} + Q_{r,int,5}^T \quad (2.46)$$

$$Q_{bottom} = Q_{waste} + Q_{r,ext}^T \quad (2.47)$$

$$u^T_{ECSD} = \sum_{g=i \in K} u_{ECSD,g} \quad (2.48)$$

$$u_{ECSD,g} = 0, \quad \forall g = i \in J \quad (2.49)$$

Las ecuaciones 2.48 y 2.49 representan la dosificación de la fuente de carbono externa expresada como el flujo másico de sustrato soluble fácilmente biodegradable $u_{SS,g}$ (gCOD_{SS} d⁻¹) al mezclador g . Se considera despreciable el cambio de volumen debido a esta corriente dado que su caudal volumétrico es despreciable respecto a las demás corrientes intervinientes.

- Balance de masa en el decantador:

$$Q_{sett,in} = Q_{bottom} + Q_{ef} \quad (2.50)$$

- Balance de masa por componentes en cada reactor i :

$$\frac{Q_i}{V_i} (C_{x,g} - C_{x,i}) + r_{x,i} = 0, \quad \forall i, g = i, x \neq O_2 \quad (2.51)$$

$$\frac{Q_i}{V_i} (S_{O,g} - S_{O,i}) + k_L a_i (S_{O,sat} - S_{O,i}) + r_{S_{O,i}} = 0, \quad \forall i, g = i \quad (2.52)$$

donde $S_{O,sat}$ es la constante de saturación de oxígeno a 15 ° ($S_{O,sat} = 8 \text{ gO}_2 \text{ m}^{-3}$).

- Balance de masa por componentes en separadores, mezcladores y decantador:

$$\begin{aligned} Q_i C_{x,g} = & Q_{fresh}^T C_{x,fresh} + Q_{r,int,5}^T C_{x,r,int,5} \\ & + Q_{r,int,4}^T C_{x,r,int,4} + Q_{r,ext}^T C_{x,r,ext} + u_{x,g}, \quad i = 1, g = i, x \end{aligned} \quad (2.53)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad \forall i \neq 1, i < I, g = i, x \quad (2.54)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{4,5} C_{x,4} + u_{x,g}, \quad i = I, g = i, x \quad (2.55)$$

$$C_{x,r,int,5} = C_{x,5}, \quad \forall x \quad (2.56)$$

$$C_{x,sett,in} = C_{x,5}, \quad \forall x \quad (2.57)$$

$$C_{x,r,int,4} = C_{x,4}, \quad \forall x \quad (2.58)$$

$$C_{x,r,ext} = C_{x,bottom}, \quad \forall x \quad (2.59)$$

$$C_{x,bottom} = C_{x,m}, \quad \forall x, m = 1 \quad (2.60)$$

$$C_{x,ef} = C_{x,m}, \quad \forall x, m = 10 \quad (2.61)$$

Para el caso de estudio 2 se emplean las ecuaciones siguientes:

- Balance de masa en el mezclador principal

$$Q_{mez}^T = Q_{fresh}^T + Q_{r,int,5}^T + Q_{r,int,4}^T + Q_{r,ext}^T \quad (2.62)$$

$$Q_{mez}^T = \sum_G Q_{mez,g} \quad (2.63)$$

- Balance de masa en cada reactor

$$Q_i = Q_{mez,g}, \quad i = 1, g = i \quad (2.64)$$

$$Q_i = Q_{mez,g} + Q_{(i-1)}, \quad \forall i \neq 1, i < I, g = i \quad (2.65)$$

$$Q_i = Q_{mez,g} + Q_{4,5}, \quad i = I, g = i \quad (2.66)$$

- Balance de masa total en separadores, mezcladores y decantador.

En este caso aplican también las ecuaciones 2.45 a 2.50.

- Balance de masa por componentes en el mezclador principal:

$$Q_{mez}^T C_{x,mez} = Q_{fresh}^T C_{x,fresh} + Q_{r,int,5}^T C_{x,r,int,5} + Q_{r,int,4}^T C_{x,r,int,4} + Q_{r,ext}^T C_{x,r,ext}, \forall i \quad (2.67)$$

- Balance de masa por componentes en cada reactor:

Aplican las ecuaciones 2.51 y 2.52.

- Balance de masa por componentes en mezcladores, separadores y decantador.

$$Q_i C_{x,g} = Q_{mez,g} C_{x,mez} + u_{x,g}, \quad i = 1, g = i, x \quad (2.68)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{mez,g} C_{x,mez} + Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \forall i \neq 1, i < I, g = i, x \quad (2.69)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{mez,g} C_{x,mez} + Q_{4,5} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad i = I, g = i, x \quad (2.70)$$

Y también se emplean las ecuaciones 2.56 a 2.61.

Para el caso de estudio 3 se emplean las mismas ecuaciones que para el caso de estudio 1 (ecuaciones 2.42 a 2.61) con los cambios y agregados que se mencionan a continuación.

- Balance de masa en el separador de la corriente de alimentación.

Se agrega la siguiente ecuación respecto al caso 1 para considerar la distribución de esta corriente:

$$Q_{fresh}^T = \sum_G Q_{fresh,g} \quad (2.71)$$

- Balance de masa en cada reactor i .

Se reemplazan las ecuaciones 2.42 a 2.44 por las expresiones siguientes:

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{r,int,5}^T + Q_{r,int,4}^T + Q_{r,ext}^T, \quad i = 1, g = i \quad (2.72)$$

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{(i-1)}, \quad \forall i \neq 1, i < I, g = i \quad (2.73)$$

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{4,5}, \quad i = I, g = i \quad (2.74)$$

- Balance de masa total en separadores, mezcladores y decantador.

Las ecuaciones 2.45 a 2.50 aplican para este caso sin modificaciones.

- Balance de masa por componentes en cada reactor.

Estos balances son iguales a los del caso 1, y se describen con las ecuaciones 2.51 y 2.52.

- Balance de masa por componentes en separadores y mezcladores.

Se reemplazan las ecuaciones 2.53 a 2.55 en concordancia con el balance de masa total:

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{r,int,5}^T C_{x,r,int,5} + Q_{r,int,4}^T C_{x,r,int,4} + Q_{r,ext}^T C_{x,r,ext} + u_{x,g}, \quad i = 1, g = i, x \quad (2.75)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad \forall i \neq 1, i < I, g = i, x \quad (2.76)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{4,5} C_{x,4} + u_{x,g}, \quad \forall i = I, g = i, x \quad (2.77)$$

Y se emplean las ecuaciones 2.56 a 2.61 sin modificaciones.

Para el caso de estudio 4 se extiende el modelo anterior con las ecuaciones siguientes.

- Balance de las corrientes a distribuir.

Se emplea la ecuación 2.71 y las correspondientes a las corrientes de ciclos internos:

$$Q_{r,int,5}^T = \sum_G Q_{r,int,5,g} \quad (2.78)$$

$$Q_{r,int,4}^T = \sum_{g=1}^4 Q_{r,int,4,g} \quad (2.79)$$

$$Q_{r,int,4,5} = 0 \quad (2.80)$$

- Balance de masa en cada reactor i .

Se modifican las expresiones 2.72 a 2.74 incorporando los términos correspondientes a la distribución de los reciclos:

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{r,int,5,g} + Q_{r,int,4,g} + Q_{r,ext}^T, \quad i = 1, g = i \quad (2.81)$$

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{r,int,5,g} + Q_{r,int,4,g} + Q_{(i-1)}, \quad \forall i \neq 1, i < I, g = i \quad (2.82)$$

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{r,int,5,g} + Q_{r,int,4,g} + Q_{4,5}, \quad i = I, g = i \quad (2.83)$$

- Balance de masa total en separadores, mezcladores y decantador.

Aplican las ecuaciones 2.45 a 2.50.

- Balance de masa por componentes en cada reactor.

Se emplean las ecuaciones 2.51 y 2.52.

- Balance de masa por componentes en separadores y mezcladores.

Se reemplazan las ecuaciones 2.75 a 2.77 por:

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{r,int,5,g} C_{x,r,int,5} + Q_{r,int,4,g} C_{x,r,int,4} + Q_{r,ext}^T C_{x,r,ext} + u_{x,g}, \quad i = 1, g = i, x \quad (2.84)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{r,int,5,g} C_{x,r,int,5} + Q_{r,int,4,g} C_{x,r,int,4} + Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad \forall i \neq 1, i < I, g = i, x \quad (2.85)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{r,int,5,g} C_{x,r,int,5} + Q_{r,int,4,g} C_{x,r,int,4} + Q_{4,5} C_{x,4} + u_{x,g}, \quad i = I, g = i, x \quad (2.86)$$

Y también se emplean las ecuaciones 2.56 a 2.61 sin cambios.

En el *caso de estudio 5* se contempla la distribución de la corriente de reciclo externo, resultando:

- Balance de las corrientes a distribuir.

Se emplean las ecuaciones 2.71, 2.78, 2.79 y 2.80 y se incorpora la correspondiente a la distribución del reciclo externo:

$$Q_{r,ext}^T = \sum_G Q_{r,ext,g} \quad (2.87)$$

- Balance de masa en cada reactor i .

Se modifican las ecuaciones 2.81 a 2.83 como sigue:

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{r,int,5,g} + Q_{r,int,4,g} + Q_{r,ext,g}, \quad i = 1, g = i \quad (2.88)$$

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{r,int,5,g} + Q_{r,int,4,g} + Q_{r,ext,g} + Q_{(i-1)}, \quad \forall i \neq 1, i < I, g = i \quad (2.89)$$

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{r,int,5,g} + Q_{r,int,4,g} + Q_{r,ext,g} + Q_{4,5}, \quad i = I, g = i \quad (2.90)$$

- Balance de masa total en separadores, mezcladores y decantador.

Se emplean las ecuaciones 2.45 a 2.50.

- Balance de masa por componentes en cada reactor.

Se emplean las ecuaciones 2.51 y 2.52.

- Balance de masa por componentes en mezcladores, separadores y decantador.

Se reemplazan las ecuaciones 2.84 a 2.86 por:

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{r,int,5,g} C_{x,r,int,5} + Q_{r,int,4,g} C_{x,r,int,4} + Q_{r,ext,g} C_{x,r,ext} + u_{x,g}, \quad i = 1, g = i, x \quad (2.91)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{r,int,5,g} C_{x,r,int,5} + Q_{r,int,4,g} C_{x,r,int,4} + Q_{r,ext,g} C_{x,r,ext} + Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad \forall i \neq 1, i < I, g = i, x \quad (2.92)$$

$$\begin{aligned}
 Q_i C_{x,g} = & Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{r,int,5,g} C_{x,r,int,5} + Q_{r,int,4,g} C_{x,r,int,4} \\
 & + Q_{r,ext,g} C_{x,r,ext} + Q_{4,5} C_{x,4} + u_{x,g}, i = I, g = i, x
 \end{aligned}
 \tag{2.93}$$

Y también se emplean las ecuaciones 2.56 a 2.61.

2.3.4 Modelo de optimización

Se puede recurrir a varios índices de performance como funciones objetivo para la optimización del sistema, tales como funciones económicas, indicadores ambientales y cualquier otro indicador de performance que pueda ser expresado en función de las corrientes (caudal, composición) y del tamaño de los equipos (Carstensen et al., 1994; Vanrolleghem et al., 2002; Vanrolleghem et al., 1996).

Un proyecto ambicioso de metodología de síntesis y diseño debiera contemplar indicadores y/o criterios técnicos o funcionales (robustez, flexibilidad y eficiencia), medioambientales (emisiones y utilización de recursos como energía -incluye biogás-, disponibilidad de tierra, nutrientes y materia orgánica, agua, tratamiento de barros residuales), económicos (costos de inversión, operativos e incidencia del costo en el usuario), sociales (uso y disponibilidad de tierra, generación de olores, ruidos e impacto visual) y regulatorios (límites de vertido y multas). Esto requiere definir dichos indicadores y establecer métodos de peso para su jerarquización en un escenario determinado (Balkema et al., 2002; Lundin et al., 1999; Mels et al., 1999; Otterpohl et al., 1997; Hellström et al., 2000; Lundin and Morrison, 2002; Bradley et al., 2002).

En esta tesis la función objetivo resulta de considerar criterios económicos y los demás factores o indicadores serán considerados, eventualmente, como restricciones del problema. Más específicamente, el problema de optimización a resolver en este capítulo consiste en la minimización del costo de operación total anual, COTA o (TAOC, *total annual operation cost*), optimizando las condiciones de operación, que involucra las siguientes variables: caudales de aireación (corriente de aire), caudales de las corrientes de reciclaje interno y externo, la dosificación de la fuente de carbono externa, patrones de distribución de las corrientes del proceso, para cada configuración de planta investigada, considerando:

- (1) modelos para las diferentes unidades de proceso (Sección 2.3.2),

- (2) un conjunto de restricciones topológicas de acuerdo a la superestructura propuesta (Sección 2.3.3),
 - (3) especificaciones del agua residual afluyente (caudal y composición),
 - (4) límites de descarga permitidos del líquido tratado,
 - (5) especificaciones de las unidades de proceso disponibles (tamaño, número y características de los equipos),
 - (6) un modelo de costos.
- Los puntos 3 a 6 se desarrollan a continuación.

2.3.4.1 Función objetivo y criterios de performance

Según se expresó anteriormente, la función objetivo de los modelos presentados en este capítulo consiste en la minimización del costo de operación total anual COTA (€/año), dado por la siguiente expresión:

$$COTA = \alpha_{EQ} EQ + \alpha_E E_a + \alpha_{SLDG} u_{SLDG} + \alpha_E E_p + \alpha_{ECSD} u_{ECSD}^T \quad (2.94)$$

donde EQ es el índice de calidad del efluente (en unidades de contaminación diarias, PU); E_a y E_p es la demanda diaria de energía de aireación y de bombeo, respectivamente; u_{SLDG} es el caudal másico diario de barros producidos destinados a tratamiento; y u_{ECSD} , es caudal másico diario de la fuente de carbono externa.

Tabla 2.8. Costos de operación anuales unitarios

<i>costo unitario anual</i>	<i>Valor</i>	
α_{EQ}	50	(Euro día (kg PU año) ⁻¹)
α_E	25	(Euro día (kWh año) ⁻¹)
α_{SLDG}	75	(Euro día (kg TSS año) ⁻¹)
α_{ECSD}	109.5	(Euro día (kg COD año) ⁻¹)

Los coeficientes α son los coeficientes de costos unitarios de operación anual para cada uno de los ítems anteriores, propuestos por Vanrolleghem y Gillot (2002) y por Mussati et al. (2005) (Tabla 2.8).

Energía de bombeo E_p (kWh d^{-1})

$$E_p = \gamma (Q_{r,int,5}^T + Q_{r,int,4}^T + Q_{r,ext}^T + Q_{waste}) \quad (2.95)$$

donde γ se fija en 0.04 (kWh m^{-3}) (Coop et al., 2002). En este cálculo sólo se consideran las corrientes de reciclados internos y externo y la corriente de barros destinados a tratamiento. Se asume que las corrientes entre los compartimentos se producen por efecto de la gravedad.

Energía de aireación E_a (kWh d^{-1}) está dada por la ecuación 2.21 presentada previamente,

$$E_a = 24 \sum_i \left(0.4032 \left(\frac{k_L a_i}{24} \right)^2 + 7.8408 \left(\frac{k_L a_i}{24} \right) \right) \quad (2.21)$$

El coeficiente de transferencia debe expresarse en día $^{-1}$ (d^{-1}).

Índice de calidad del efluente (kg unidades contaminantes d^{-1}). El índice de calidad del efluente EQ se calcula computando las descargas de los compuestos que influyen significativamente en la calidad del líquido tratado y que, por lo general, se incluyen entre los parámetros de control de los entes regulatorios. Este índice puede relacionarse con las multas a imponer como consecuencia de la descarga de tales contaminantes. Se define como:

$$EQ = \left(\frac{1}{1000} \right) (\beta_{SS} X_{SS,ef} + \beta_{COD} DQO_{ef} + \beta_{BOD} DBO_{ef} + \beta_{TKN} NTK_{ef} + \beta_{NO} S_{NO,ef}) Q_{ef} \quad (2.96)$$

donde DQO_{ef} , DBO_{ef} y NTK_{ef} son la demanda química y biológica de oxígeno, y el nitrógeno total Kjeldahl en el líquido clarificado, y se calculan a través de:

$$DQO_{ef} = S_{S,ef} + S_{I,ef} + X_{S,ef} + X_{I,ef} + X_{H,ef} + X_{A,ef} + X_{STO,ef} \quad (2.97)$$

$$DBO_{ef} = 0.25 (S_{S,ef} + X_{S,ef} + 0.8 (X_{H,ef} + X_{A,ef} + X_{STO,ef})) \quad (2.98)$$

$$NTK_{ef} = \left(\begin{array}{l} 0.01 S_{I,ef} + 0.03 S_{S,ef} + S_{NH,ef} + 0.0426 X_{S,ef} \\ + 0.02 X_{I,ef} + 0.7 (X_{H,ef} + X_{A,ef}) \end{array} \right) \quad (2.99)$$

β_{cont} son los factores de peso para la conversión de las concentraciones de los contaminantes a unidades de contaminación, y son los propuestos por Vanrolleghem et al.(1996) (Tabla 2.9).

Tabla 2.9. Factores de peso β_{cont} para los contaminantes (g unidades contaminantes g^{-1})

Factor	β_{SS}	β_{COD}	β_{TKN}	β_{NO}	β_{BOD}
Valor	2	1	20	20	2

Finalmente,

Caudal de barro residual para disposición final u_{SLDGD} (en gramos de Sólidos Solubles d^{-1})

$$u_{SLDGD} = (X_{SS,waste} Q_{waste}) \quad (2.100)$$

2.3.4.2 Especificaciones del agua residual a tratar

Tabla 2.10. Especificaciones del agua residual afluente

		<i>Valor</i>
Caudal volumétrico	$Q_{fresh} (m^3 d^{-1})$	18446
Materia orgánica inerte soluble	$S_I (gCOD m^{-3})$	30
Sustrato fácilmente biodegradable	$S_S (gCOD m^{-3})$	69.5
Materia orgánica inerte particulada	$X_I (gCOD m^{-3})$	51.2
Sustrato lentamente biodegradable	$X_S (gCOD m^{-3})$	202.32
Biomasa activa heterotrofica	$X_H (gCOD m^{-3})$	28.17
Biomasa activa autótrofa	$X_A (gCOD m^{-3})$	0
Producto de almacenaje interno celular	$X_{STO} (gCOD m^{-3})$	0
Sólidos suspendidos	$X_{SS} (gCOD m^{-3})$	215.493
Oxígeno disuelto	$S_O (gCOD m^{-3})$	0
Nitrógeno de nitratos y nitritos	$S_{NOX} (gCOD m^{-3})$	0
Nitrógeno diatómico	$S_{N_2} (gCOD m^{-3})$	0

Nitrógeno amoniacal y de ión amonio	S_{NH} (gCOD m ⁻³)	36.425
Alcalinidad	S_{ALK} (gCOD m ⁻³)	7

Las especificaciones del agua residual afluyente considerada se muestran en la Tabla 2.10, las que se eligieron de manera que sea compatible con el agua residual usada en protocolo de simulación del grupo COST para el escenario de tiempo seco (Copp et. al., 2001). Debido a que el afluyente del protocolo está definido para el modelo ASM1, se modifican algunos valores de manera de tener en el modelo ASM3 la misma carga de carbono y nitrógeno (Mussati et al., 2002) mediante la relación:

$$(S_{NH})_{ASM3} = (S_{NH})_{ASM1} + (S_{ND})_{ASM1} - (i_{N,SS} S_S)_{ASM3} .$$

2.3.4.3 Restricciones de especificación y valores máximos

Restricciones de calidad del líquido tratado

Además del índice de calidad de efluente EQ , que tiene impacto en la función objetivo a minimizar, se imponen valores máximos de descarga a determinados contaminantes $cont$ a través de restricciones de desigualdad:

$$C_{cont} \leq C_{cont, lim} \quad \forall cont \quad (2.101)$$

Los contaminantes $cont$ y sus valores umbral permitidos de descarga se listan en la Tabla 2.11.

Tabla 2.11. Valores umbral permitidos de descarga para el líquido tratado

<i>Contaminante, cont</i>	<i>Valores umbral $C_{cont,lim}$</i>
$S_{NH,ef}$ (gN m ⁻³)	4
$N_{TOT,ef}$ (gN m ⁻³)	18
DBO_{ef} (gCOD m ⁻³)	10
DQO_{ef} (gCOD m ⁻³)	100
$X_{SS,ef}$ (g SS m ⁻³)	30

siendo $N_{TOT,ef}$ el nitrógeno total en el líquido clarificado calculado como:

$$N_{TOT,ef} = TKN_{ef} + S_{NO,ef} \quad (2.102)$$

DQO_{ef} y DBO_{ef} se calculan según 2.97 y 2.98.

Valores máximos para las variables de operación

$$OV_l \leq OV_{l,lim}, \quad \forall l \quad (2.103)$$

Las variables de operación l consideradas y sus valores máximos $OV_{l,lim}$ se listan en la Tabla 2.12.

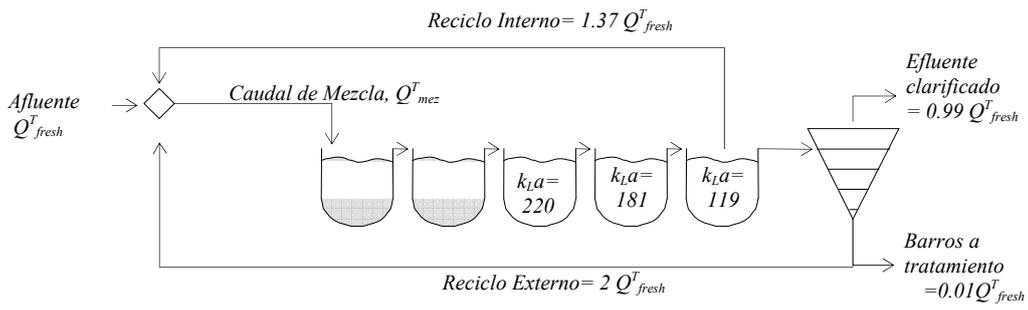
Tabla 2.12. Valores máximos para las variables de operación

<i>Variable de Operación , l</i>	<i>Valor Máximo, OV_{l,lim}</i>
$Q^T_{r,ext}, m^3 d^{-1}$	36892 (= 2 Q^T_{fresh})
$Q^T_{r,int,5}$ y $Q^T_{r,int,4}, m^3 d^{-1}$	92230 (= 5 Q^T_{fresh})
$Q_{waste}, m^3 d^{-1}$	1844.6 (=0.1 Q^T_{fresh})
$u_{ECSD,g}, gCOD d^{-1}$	2000000
$k_L a_b, d^{-1}$	360

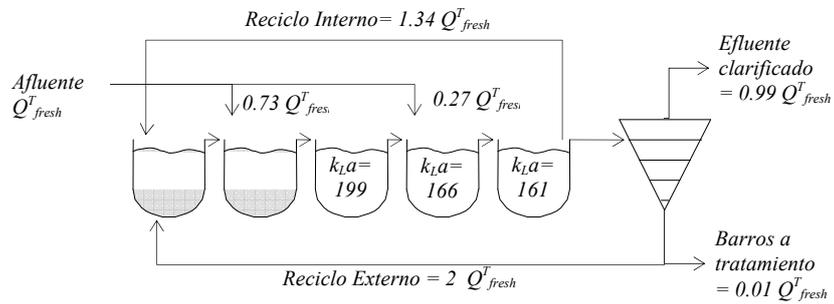
2.4 Resultados

La Figura 2.6 representa las alternativas de proceso óptimas; esto es, los patrones de distribución de corrientes obtenidos para cada configuración de proceso de referencia (*PreDN*, *PostDN* y *PrePostDN*). La figura incluye los valores de las principales variables de decisión.

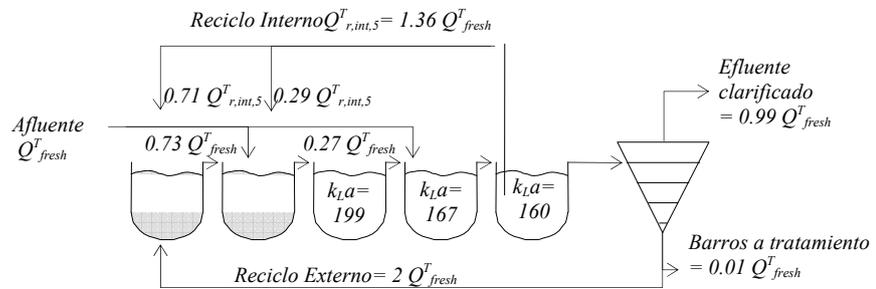
La Tabla 2.13 muestra el costo de operación total anual para las condiciones de operación óptimas para cada alternativa.



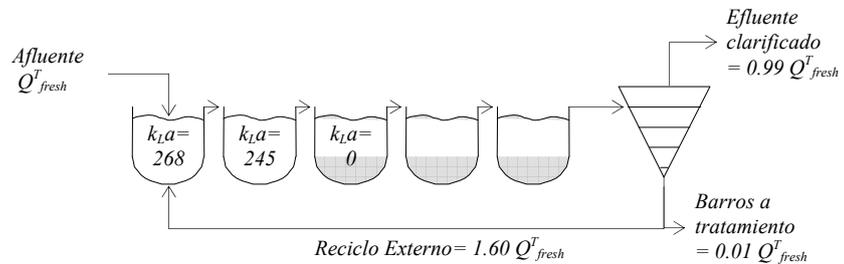
Solución 1. Solución para los casos 1.a y 2.a – COTA: 605809.3 Euros anuales



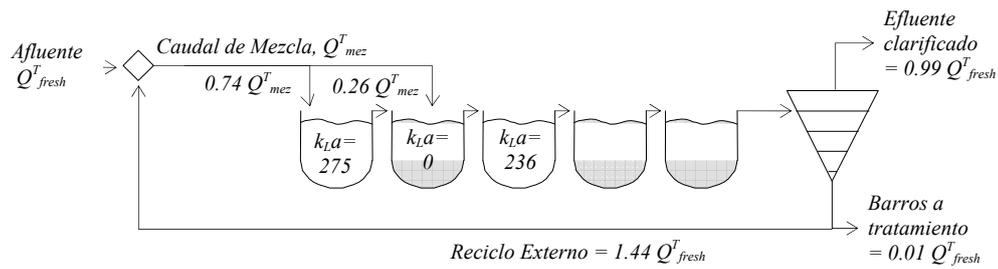
Solución 5. Solución para el caso 3.a – COTA: 602955.5 Euros anuales



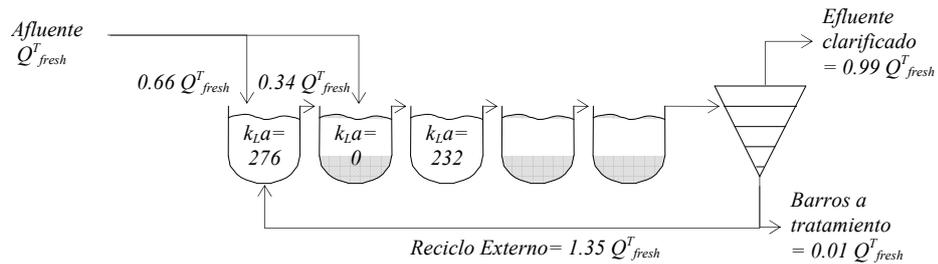
Solución 7. Solución para los casos 4.a y 5.a - COTA: 602905.1 Euros anuales



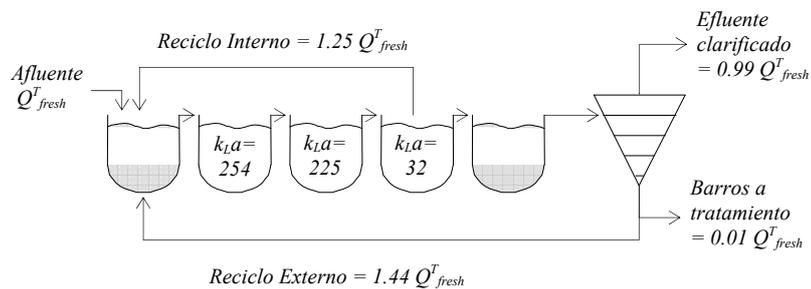
Solución 2. Solución para el caso 1.b - COTA: 528559.7 Euros anuales



Solución 4. Solución para el caso 2.b - COTA: 525249.8 Euros anuales



Solución 6. Solución para los casos 3.b y 5.b - COTA: 520301.2 Euros anuales



Solución 3. Solución para los casos 1.c a 5.c- COTA: 553775.5 Euros anuales

Figura 2.6. Condiciones de operación óptimas calculadas para las alternativas de procesos

Como muestra la Tabla 2.13, la mejor alternativa para las especificaciones de agua residual seleccionadas es la *configuración PostDN* con distribución de agua residual afluente. Para el escenario planteado, ninguna de las configuraciones de proceso estudiadas requiere la dosificación de una fuente de carbono externa para cumplir con los límites permitidos para el efluente. Seguidamente se analizan las soluciones encontradas.

Tabla 2.13. COTA de las soluciones encontradas (€/año)

<i>Configuración</i>	<i>PreDN</i> (a)	<i>PostDN</i> (b)	<i>PrePostDN</i> (c)
Caso 1. Configuración de Referencia	605809.3 (sol. 1)	528559.7 (sol. 2)	553775.5 (sol. 3)
Caso 2. Distribución de la corriente de mezcla	605809.3 (sol. 1)	525249.8 (sol.4)	553775.5 (sol. 3)
Caso 3. Distribución de agua residual afluyente	602955.5 (sol. 5)	520301.2 (sol. 6)	553775.5 (sol. 3)
Caso 4. Distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y del reciclo interno	602905.1 (sol. 7)	-----	553775.5 (sol. 3)
Caso 5. Distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y de los reciclos interno y externo	602905.1 (sol. 7)	520301.2 (sol. 6)	553775.5 (sol. 3)

2.4.1 Configuraciones de referencia

La solución obtenida para el *esquema PostDN* resulta la mejor de las tres configuraciones de referencia. El valor del coeficiente de transferencia de oxígeno para el compartimento 3 en la solución óptima resulta cero, lo que significa que este reactor opera bajo condiciones anóxicas, al igual que los compartimentos 4 y 5, que son estrictamente anóxicos en esta configuración. Así, el volumen total de la zona anóxica resulta de 3333 m³ y el de la zona aeróbica de 2666 m³, determinado una relación de volumen de la zona anóxica a la aeróbica de 1.25. La concentración de amonio S_{NH4} del efluente clarificado se encuentra en su valor límite permitido. Los valores de N_{TOT}, DQO (COD), y DBO (BOD) y SST (sólidos suspendidos totales o TSS, por sus siglas en inglés) del efluente clarificado están muy por debajo de los límites permitidos.

Las optimizaciones correspondientes de las configuraciones *PreDN* y *Pre-PostDN* brindan como resultado niveles de S_{NH4} del efluente más bajos que el en el caso de la solución óptima. Sin embargo, la solución óptima arroja valores menores de N_{TOT} y un mejor índice de calidad de efluente EQ, y en consecuencia, los costos totales de las multas son menores para el sistema *PostDN*. El consumo de energía de bombeo exigido

para la solución óptima *PostDN* es mucho menor que el predicho para las configuraciones *PreDN* y *PostPreDN* debido principalmente a la ausencia de reciclo interno. El volumen de la zona aireada en el proceso *PostDN* es más pequeño que en las demás alternativas, pero la intensidad de la aireación y su demanda de energía son mayores. Para las especificaciones de agua residual afluyente, la relación C/N resulta adecuada ya que ninguna de las configuraciones de proceso requiere la dosificación de una fuente externa de carbono para cumplir con el límite exigido de N_{TOT} en el líquido tratado. El costo del tratamiento de los barros para disposición es similar para los tres procesos. Estos elementos de costo determinan que el COTA para los sistemas de *PreDN* y *Pre-PostDN* sean un 15 y 5% superiores, respectivamente, al de la configuración óptima de *PostDN*.

2.4.2 Configuraciones con distribución de corrientes

El objetivo es buscar, analizar y comparar nuevas y, eventualmente, mejores configuraciones de proceso que la configuración de referencia correspondiente. Notar que la configuración de referencia correspondiente está embebida en las superestructuras planteadas para cada alternativa, por lo que se espera encontrar soluciones al menos tan buenas como la hallada para la configuración de referencia.

Distribución de la corriente de mezcla solamente

Los resultados de las optimizaciones realizadas para tres casos han mostrado que sólo se consigue una mejora en el esquema *PostDN* mediante la distribución de la corriente de mezcla a lo largo de la zona de reacción. La solución óptima (solución 4) determina que el 73.63% del caudal volumétrico de la corriente de mezcla (Q_{mez}^T) debe alimentarse al primer compartimento de reacción, y el resto al segundo.

En los esquemas *PreDN* y *PrePostDN* con distribución de corriente de mezcla, las soluciones óptimas encontradas son las mismas a las obtenidas para la configuración de referencia. Esto es, no se consiguen mejoras al permitir la distribución de la corriente de mezcla para el ejemplo analizado.

Distribución de agua residual afluyente solamente

Permitiendo la distribución de agua residual afluyente a lo largo de la zona de reacción se obtiene una mejora del COTA para la estructura *PreDN* comparado con su configuración de referencia. La solución óptima muestra que el 72.76 % del caudal volumétrico de agua residual afluyente (Q_{fresh}^T) debe alimentarse al segundo compartimento, y el resto al cuarto compartimento (solución 5).

Por su parte, para la alternativa *PostDN* con distribución de agua residual afluyente también se obtiene una mejora del COTA. En este caso, el 66.18 % del caudal volumétrico de agua residual afluyente (Q_{fresh}^T) es alimentado al primer compartimento y el resto al segundo (solución 6).

Distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y del reciclaje interno

En la solución correspondiente a la alternativa *PreDN* se puede observar una mejora del COTA con respecto a la de referencia, y también con respecto a la alternativa que solamente distribuye agua residual afluyente (solución 7). La corriente de agua residual afluyente es distribuida igual que en el caso anterior, es decir, entre el segundo y el cuarto compartimento (72.76 y 27.23 % del caudal volumétrico, respectivamente), y el reciclaje interno se distribuye entre el primer compartimento (71.38 %) y el segundo (28.62 %).

Distribución simultánea de la corriente de agua residual afluyente y de los reciclajes interno y externo

Con esta nueva posibilidad de distribución de reciclaje externo no se consiguen mejoras en la función objetivo con respecto a los casos anteriores.

2.5 Discusión

A fin de analizar y comparar los resultados obtenidos de los modelos de optimización para las configuraciones investigadas, se define un índice de performance de reacción (RPI) en cada reactor i para cada reacción o proceso p de la siguiente manera:

$$\text{RPI}_{i,p} = \tau_i \rho_{p,i}, \quad (\text{g m}^{-3}) \quad (2.103)$$

donde τ_i es el tiempo de retención en el compartimento de reacción i , y $\rho_{p,i}$ es la velocidad de reacción del proceso p que ocurre en el compartimento de reacción i , siendo:

$$\tau_i = \frac{V_i}{Q_i}, \quad (\text{día}) \quad (2.104)$$

Para considerar la “performance total” de cada proceso p en toda la zona de reacción (es decir, en todos los compartimentos de reacción), se define un indicador de performance de reacción global (RPI_p^*) de la siguiente forma:

$$\text{RPI}_p^* = \sum_i \text{RPI}_{i,p}, \quad (\text{g m}^{-3}) \quad (2.105)$$

Finalmente, el indicador de performance de reacción global relativo del proceso p , Φ_p , cuantifica el aumento/disminución porcentual del RPI_p^* de una solución dada y con respecto a otra solución x de la misma configuración.

$$\Phi_p = \frac{\text{RPI}_{p,\text{Solución y}}^*}{\text{RPI}_{p,\text{Solución x}}^*} \cdot 100, \quad (\%) \quad (2.106)$$

2.5.1 Comparación de las soluciones óptimas para las alternativas del esquema de *PreDN*

En la Tabla 2.13 y Figura 2.6 se puede observar que la optimización de las alternativas consideradas para el tipo de configuración *PreDN* arrojó 3 soluciones diferentes. La solución encontrada para el caso 2.a computa el mismo valor de COTA que para el caso 1.a, y la disposición de corrientes resultó idéntica en ambos casos. Por tal razón se nombran ambas soluciones como ‘Sol. 1’. Análogamente, el caso 5.a no

mostró mejoras respecto al caso anterior (caso 4.a), por lo que ambas soluciones son idénticas, denominándose ‘Sol. 7’.

La Tabla 2.14 lista los valores de las principales variables de operación de las soluciones óptimas encontradas para la configuración de *PreDN*. La Tabla 2.13 muestra que la Sol. 7 predice el COTA más bajo, mientras que el segundo COTA más bajo corresponde a la Sol. 5. Como puede esperarse, el COTA disminuye a medida que aumenta la posibilidad de distribución de las corrientes del proceso a lo largo de la zona de reacción. En este contexto, este hecho puede considerarse como una mejora de la flexibilidad del proceso. Con la estrategia resultante de distribuir el agua residual afluente en el segundo y cuarto compartimentos (en vez de hacerlo en el primero como ocurre en Sol. 1), se mejora el proceso de denitrificación ya que el tiempo de retención en la zona de anóxica aumenta (por disminución del caudal por fraccionamiento) respecto al de la Sol. 1. Esta mejora en el proceso de denitrificación queda evidenciada por los niveles de nitrógeno gaseoso S_{N_2} generado en esta zona para cada solución (resultados no mostrados).

Tabla 2.14. Soluciones óptimas para la configuración de *PreDN*. Variables principales

React	Solución 1			Solución 5				Solución 7				
	$k_L a$	Q_i	τ	$k_L a$	$Q_{fresh,i}$	Q_i	τ	$k_L a$	$Q_{fresh,i}$	$Q_{rint,i}$	Q_i	τ
1	0	80635	0.0124	0	0	61651	0.0162	0	0	17877	54769	0.0183
2	0	80635	0.0124	0	13422	75074	0.0133	0	13523	7169	75460	0.0133
3	220	80635	0.0165	199	0	75074	0.0178	199	0	0	75460	0.0177
4	181	80635	0.0165	166	5024	80097	0.0166	167	4922.5	0	80383	0.0166
5	119	80635	0.0165	161	0	80097	0.0166	160	0	0	80383	0.0166

La Figura 2.7 muestra el indicador de performance de reacción global relativo de cada proceso, Φ_p , para las Sol. 5 y 7 respecto a la Sol. 1.

Se observa un aumento significativo de tal indicador para la Sol. 5 en la mayoría de los procesos anóxicos respecto a la Sol. 1 ($\rho_5, \rho_7, \rho_9, \rho_{12}$), excepto para el proceso de almacenamiento anóxico de sustrato soluble (ρ_3). En general, las performances de los procesos aeróbicos aumentan sólo levemente ($\rho_4, \rho_6, \rho_8, \rho_{10}, \rho_{11}$), excepto el almacenamiento aeróbico de sustrato soluble (ρ_2), cuyo aumento es significativo. Respecto a la Sol. 7, los incrementos del indicador Φ_p con respecto a la Sol. 1 sigue la

misma tendencia que la Sol. 5, incluso más acentuada aún. La diferencia entre los valores de Φ_p de las Sol. 7 y 5 se debe a la posibilidad que presenta la primera en distribuir el reciclo interno lo que mejora la performance del proceso total.

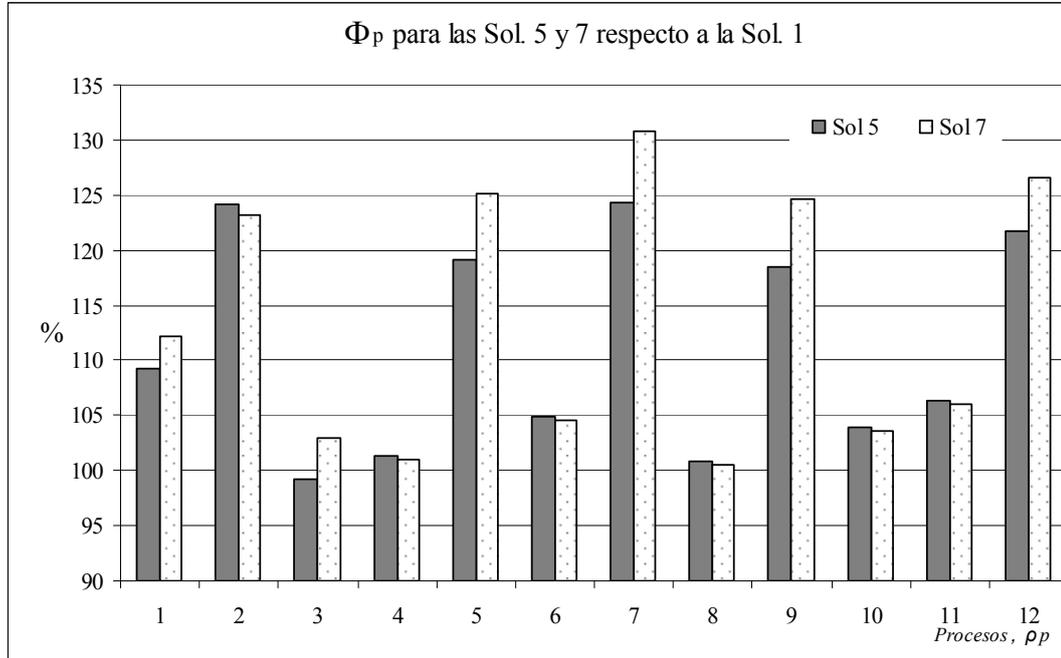


Figura 2.7. Indicador Φ_p para las Sol. 5 y 7 con resp. a la Sol. 1

2.5.2 Comparación de las soluciones óptimas para las alternativas del esquema de *PostDN*

La optimización de las 4 alternativas de *PostDN* consideradas arrojó 3 soluciones diferentes. La optimización del caso 5.b no proporcionó nuevas soluciones, ya que la mejor solución encontrada para ese caso es idéntica a la correspondiente al caso 3.b, ambas denominadas, por brevedad, Sol. 6.

La Tabla 2.15 lista las principales variables de operación de las soluciones óptimas encontradas para las alternativas del esquema de *PostDN*. La Tabla 2.13 muestra que la Sol. 6 predice el menor COTA, seguida por la Sol. 4. La Sol. 6 corresponde a la optimización distribuyendo el afluente y el reciclo externo separadamente, mientras que la Sol. 4 sólo posibilita la distribución de la mezcla, cumpliéndose que, a medida que aumenta la flexibilidad del proceso puede mejorar la performance del mismo y disminuir los costos (COTA). Posibilitando la distribución de corrientes, el sistema aumenta el tiempo de retención en los reactores y las velocidades

de los procesos biológicos convenientemente de manera de mejorar la performance del proceso. La Figura 2.8 muestra los valores de Φ_p para las Sol. 4 y 6 respecto a la Sol. 2 para las alternativas del proceso de *PostDN*.

Tabla 2.15. Soluciones óptimas para la configuración de *PostDN*. Variables principales

React	Sol. 2			Sol. 4				Sol. 6			
	k_{La}	Q_i	τ	k_{La}	$Q_{Mez,i}$	Q_i	τ	k_{La}	$Q_{fresh,i}$	Q_i	τ
1	268	47895	0.0278	275	33211	33211	0.0401	276	12208	37133	0.0359
2	245	47895	0.0278	0	11894	45105	0.0296	0	6238	43371	0.0307
3	0	47895	0.0278	236	0	45105	0.0296	232	0	43371	0.0307
4	0	47895	0.0209	0	0	45105	0.0222	0	0	43371	0.0231
5	0	47895	0.0209	0	0	45105	0.0222	0	0	43371	0.0231

Contrariamente al caso anterior (*PreDN*), en este caso aumenta la performance de la mayoría de los procesos aeróbicos ($\rho_4, \rho_6, \rho_8, \rho_{10}, \rho_{11}$) en lugar de los anóxicos, y el proceso de almacenamiento anóxico de sustrato soluble (ρ_3) que también aumenta considerablemente; la performance del resto de los procesos anóxicos aumenta levemente con respecto a la configuración de referencia ($\rho_5, \rho_7, \rho_9, \rho_{12}$), contrariamente a lo que ocurre para la configuración *PreDN*.

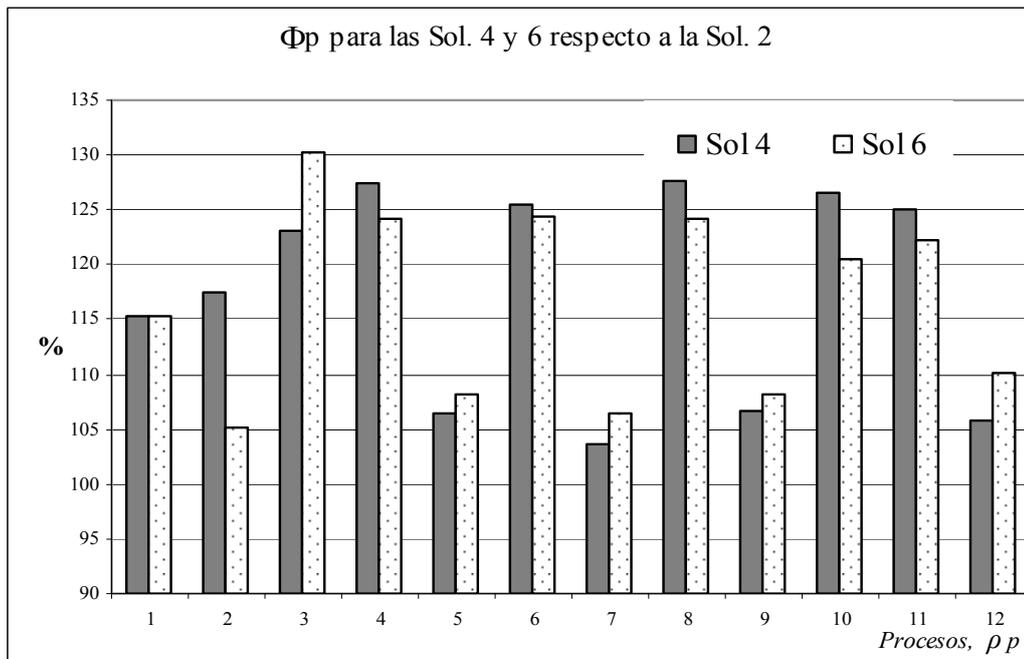


Figura 2.8. Indicador Φ_p para las Sol. 4 y 6 con respecto a la Sol. 2.

2.6 Estrategia de solución y aspectos computacionales

Debido a la naturaleza del problema (fuertemente no lineal, existencia de óptimos locales, existencia de diferentes soluciones con, prácticamente, el mismo valor de la función objetivo, procesos biológicos estrechamente acoplados), la estrategia de solución consistió en resolver modelos crecientes en complejidad y tamaño, a los fines de analizar, por un lado, su performance y, por otro, verificar los resultados obtenidos desde el punto de vista de la eficiencia de tratamiento. Esta idea justifica, aquí y a lo largo de la presente tesis, el desarrollo de modelos que incrementan progresivamente el grado de detalle y representación del proceso. En otras palabras, el interés se concentró en adoptar una metodología de modelado y resolución que conduzca progresivamente a la formulación de un modelo del proceso detallado, flexible y robusto, asegurando para tal fin una adecuada performance en los sucesivos estadios. Una metodología alternativa, y en cierta manera opuesta a la seguida aquí, consiste en proponer inicialmente un modelo detallado del proceso y simplificarlo progresivamente y/o resolverlo para situaciones y escenarios definidos en base al conocimiento que se tiene *a priori* del proceso. La naturaleza del proceso que se trata aquí y ensayos preliminares efectuados, hicieron que esta última estrategia sea considerada desaconsejable para este caso particular.

Esta metodología secuencial para la resolución de los modelos más complejos tiene la ventaja de que se dispone de “buenos” valores iniciales proporcionados por la previa resolución de modelos más simplificados que involucran, no obstante, las variables más críticas y relevantes del proceso.

Los modelos fueron implementados y resueltos empleando *General Algebraic Modelling System GAMS* (Brooke, et al. 1992). El algoritmo de gradiente reducido generalizado, codificado en el resolutor *CONOPT* (Drud 1996), se usó para la solución de los problemas *NLP*. Para todos los modelos resueltos, las soluciones óptimas reportadas fueron obtenidas siguiendo la estrategia de puntos iniciales múltiples; esto es, empleando un conjunto ordenado de puntos iniciales diferentes para detectar la ocurrencia de óptimos locales y retener las “mejores” soluciones. La

solución óptima global no puede ser garantizada debido a que los modelos matemáticos resultantes presentan no convexidades y a que el resolutor utilizado es de tipo local.

Un conjunto de valores iniciales para resolver el modelo para la configuración de referencia de *PreDN*, y ciertamente, uno de los primeros considerados, consistió en los valores de las variables proporcionados por el *benchmark* del *COST* (Copp, 2002).

Otro aspecto de la estrategia o metodología seguida para resolver un modelo en particular, y aprovechando la facilidad que ofrece *GAMS* en ese sentido, consistió en resolver primero el problema a factibilidad para un conjunto definido de valores iniciales, adoptando una función objetivo “ficticia” (insensible a las variables del problema), de manera que inicialmente sólo se satisfagan los balances de masa globales y por componentes y las restricciones del problema (límites de descarga permitidos y valores máximos y mínimos recomendados para las principales variables del proceso). Posteriormente se resuelve el problema usando la función objetivo “real” (minimización del COTA) usando como punto inicial los valores proporcionados por el modelo resuelto solamente a factibilidad. Esta metodología se aplica para cada conjunto de valores iniciales de la estrategia de puntos iniciales múltiples descrita anteriormente.

Finalmente, y tal como se explicó anteriormente, si se trata de un modelo simplificado del problema que se quiere resolver, los valores de la solución óptima obtenida con ese modelo constituyen el conjunto de valores iniciales para la resolución del subsiguiente modelo más detallado. En *GAMS*, esto se consigue en forma automática.

A modo ilustrativo, el modelo de la configuración de *PreDN* con distribución de todas las corrientes presentes posee un total de 492 variables y 465 ecuaciones, y el tiempo de CPU requerido para su solución es de aproximadamente 1 segundo en una PC con procesador Intel Pentium IV 2.40GHz con memoria RAM de 248 MB.

2.7 Conclusiones

La configuración de sistema óptima para el ejemplo presentado en este capítulo es la configuración de *PostDN* con distribución de la corriente de agua residual afluyente a lo largo de la zona de reacción. Para el escenario analizado, ninguna de las

alternativas de proceso estudiadas requiere la dosificación de una fuente externa de carbono para favorecer el proceso de denitrificación y cumplir con los límites de descarga exigidos para el líquido tratado.

Los resultados de las optimizaciones realizadas para las tres configuraciones muestran que sólo en el esquema de *PostDN* se consigue una mejora del COTA con la estrategia de distribución de la corriente de mezcla a lo largo de la zona de reacción.

En la configuración de *PreDN* se consigue mejorar el COTA por medio de la distribución de la corriente de agua residual afluyente así como del reciclo interno, respecto a la configuración de referencia correspondiente. Las mejoras se logran por el efecto favorable que produce el fraccionamiento de la corriente sobre los procesos biológicos, reflejado por el aumento del indicador de performance global, principalmente de los procesos anóxicos, y por consiguiente, sobre la performance total del proceso.

Para la configuración *PostDN*, la posibilidad de distribuir corrientes aumenta principalmente el indicador de performance global de los procesos aeróbicos, en vez de los anóxicos, contrariamente a lo que ocurre con la configuración de *PreDN*.

Los resultados de las optimizaciones no predicen mejoras en el COTA por aplicación de la estrategia de distribución del reciclo externo (de barros) para los casos y escenario investigados.

Para el ejemplo estudiado, se observó que el proceso de tratamiento continuo de barros activados para la remoción de nitrógeno también se beneficia mediante el uso de diferentes estrategias operacionales, como el empleo de aireación secuencial (esto es, alternancia espacial de zonas aeróbicas y anóxicas) y el uso de patrones de distribución de corrientes, existiendo un paralelismo con los sistemas de tratamiento alternantes (esto es, alternancia temporal de zonas aeróbicas y anóxicas), como se observa en los sistemas de reactores batch secuenciados (*Sequencing Batch Reactor SBR*).

CAPÍTULO 3. SÍNTESIS DE PLANTAS DE TRATAMIENTO DE EFLUENTES (REMOCIÓN DE MATERIA ORGÁNICA Y NITRÓGENO) OPTIMIZANDO COSTOS OPERATIVOS

CAPÍTULO 3. SÍNTESIS DE PLANTAS DE TRATAMIENTO DE EFLUENTES (REMOCIÓN DE MATERIA ORGÁNICA Y NITRÓGENO) OPTIMIZANDO COSTOS OPERATIVOS	91
3.1 Introducción.....	92
3.2 Definición del problema	95
3.2.1 Especificaciones del agua residual afluente.....	96
3.3 Modelo del proceso. Casos de estudio.....	97
3.3.1 Sistema sin distribución de corrientes de proceso.....	97
3.3.1.a Modelo de la superestructura.....	97
3.3.1.b Modelo de optimización	100
3.3.1.c Resultados.....	105
3.3.2 Sistema con distribución de corrientes de proceso.....	111
3.3.2.a Modelo de la superestructura.....	111
3.3.2.b Modelo de optimización	112
3.3.2.c Resultados.....	113
Caso de estudio 1.....	113
Caso de estudio 2.....	117
3.4 Aspectos computacionales.....	120
3.5 Conclusiones.....	121

3.1 Introducción

Según se destacó en los capítulos anteriores, uno de los procesos más usados para la remoción biológica de nitrógeno y materia carbonosa de las aguas residuales municipales e industriales es el proceso de lodos activados. Debido a la importancia de los sistemas de tratamiento basados en tales procesos y al gran número de instalaciones existentes, el esfuerzo de investigación se ha focalizado en la optimización de las estrategias de operación y/o en el mejoramiento del diseño de equipos individuales o partes del proceso, pero no en la optimización sistemática de la estructura de proceso (*flowsheet*) basada en modelos del mismo. Según Rigopoulos y Linke (2002) esta falta de interés y motivación puede ser atribuida principalmente al hecho que los modelos descriptivos de estos procesos implican un gran número de reacciones bioquímicas con cinética altamente no lineales, planteando así una barrera computacional a los algoritmos de optimización deterministas más extensamente usados. En general, los sistemas biológicos son difíciles de controlar y, por sus características propias, más aún aquellos basados en barros activados, lo que determinó que en los últimos años la investigación se dirija hacia el control de los sistemas existentes, desalentando la optimización de la configuración de proceso.

Sin embargo, recientes avances en el modelado de las reacciones bioquímicas que ocurren en los sistemas de barros activados paralelamente al avance en el área de la síntesis de procesos, y progresos en el desarrollo de eficientes métodos de optimización y su codificación en software específicos (que han demostrado su habilidad para resolver problemas complejos a gran escala), han abierto la posibilidad de abordar la síntesis, diseño y operación óptimos de estos procesos en base a modelos rigurosos. En la bibliografía sobre tratamiento de aguas residuales, son sumamente escasos los trabajos que tratan la síntesis sistemática de estos procesos recurriendo a métodos de optimización algorítmica. Los trabajos de Rigopoulos y Linke (2002) y Linke y Kokossis (2004) son algunos de los primeros en esa dirección. No obstante, cabe aclarar que se hicieron intentos por optimizar diferentes aspectos de estos procesos pero recurriendo a simulaciones sucesivas.

La programación mixta entera no lineal (*MINLP*) es una técnica de programación matemática que permite resolver problemas con variables binarias y continuas y ecuaciones, restricciones y/o funciones objetivo no lineales. Es la metodología natural para la formulación de problemas de optimización simultánea de la estructura del sistema y las condiciones de operación; y ha sido aplicada en varios campos de estudio con resultados satisfactorios.

Una descripción detallada de la metodología *MINLP* y sus aplicaciones se puede encontrar en Floudas (1995), Adjiman et al. (1998) y Grossmann et al. (2000). Sin embargo, como se ha expresado en los párrafos anteriores, en el campo del tratamiento de aguas residuales y en lo relativo al tratamiento por barros activados, pocos trabajos han abordado la síntesis del proceso basada en formulaciones de tipo *MINLP*, y en programación matemática en general.

Gutierrez y Vega (2002) presentaron un modelo muy simplificado para síntesis y diseño (estructura y dimensiones de las unidades) para una planta de tratamiento para reducir la demanda química de oxígeno (COD o DQO) del influente, resolviendo un problema *MINLP* que minimiza una función de costos que contempla el costo de inversión de las unidades y los costos operativos de aireación. La superestructura planteada consiste en sólo 2 reactores y un decantador, lo que determina un número limitado de configuraciones de proceso posibles, mientras que las reacciones/procesos dentro de los reactores y decantador se representan por modelos sencillos que sólo tienen en cuenta tres componentes: sustrato, biomasa y oxígeno. Los procesos para la remoción de nitrógeno, que se encuentra en forma de nitrato (denitrificación), no son tenidos en cuenta. Las variables binarias se usan para modelar la existencia o no del segundo reactor y decantador y de las corrientes involucradas en dichos equipos. El problema *MINLP* resultante se resuelve mediante el algoritmo de descomposición de Benders (*GBD*).

En Rigopoulos y Linke (2002) y Linke y Kokossis (2004) se presenta un procedimiento sistemático para diseñar plantas de tratamiento de aguas residuales por barros activados para remoción simultánea de materia orgánica y nitrógeno. Se emplea una metodología de síntesis basada en la optimización estocástica, aplicable a redes de separación/reacción, de una superestructura recurriendo a algoritmos genéticos. Los reactores se modelan como sistemas multifásicos, de mezcla completa o de flujo en pistón (como una serie de reactores de mezcla completa), y se utiliza el modelo ASM1

(Henze et al., 1987) para la descripción de las reacciones. No se utiliza un modelo físico riguroso para el sedimentador, asumiéndose que todos los componentes solubles están contenidos en la corriente acuosa y los no solubles en la de sólidos, y se supone además que la corriente acuosa se distribuye en una proporción fija entre la corriente de efluente clarificado y la corriente de barros, mientras que la corriente de sólidos constituye en su totalidad la corriente de barros. La superestructura está compuesta por un máximo de tres unidades de reacción y una de separación, los mezcladores necesarios y todas las posibilidades de interconexión entre unidades. La función objetivo consiste en la minimización de la DQO y el nitrógeno total del afluente a tratar. La naturaleza estocástica de la optimización muestra una dependencia de la solución con el punto de inicialización empleado, un hecho bien conocido e importante en este tipo de problemas, ya que existen potenciales soluciones similares que difieren en costos reducidos.

En este capítulo se aborda la síntesis óptima (optimización simultánea de la configuración de proceso y las condiciones de operación) de plantas de tratamiento de aguas residuales de barros activados para la remoción de materia orgánica y nitrógeno por medio de modelos de superestructuras que incluyen las tres configuraciones más usadas de procesos de barros activados (predenitrificación *PreDN*, postdenitrificación *PostDN* y pre-postdenitrificación *PrePostDN*), en base a formulaciones de problemas del tipo *MINLP*, para tratar una corriente de agua residual de características determinadas para un escenario con límites de descarga permitidos y estructura de costos dado.

Se presentan dos modelos de superestructuras. El primer modelo no permite la distribución de las corrientes principales del sistema. El segundo modelo contempla tal posibilidad; es decir, es posible distribuir la corriente del reciclo de licor nitrificado y de los barros y la corriente de agua residual afluente a lo largo de la zona de reacción.

El objetivo de éste capítulo es la obtención de modelos de síntesis basados en superestructuras que permitan hallar mediante *una sola optimización* la configuración y variables operativas más convenientes para una corriente de agua residual de características determinadas y bajo cierto escenario que determine las restricciones y modelo de costos.

3.2 Definición del problema

Como se mencionó anteriormente, el problema abordado en esta sección es la optimización simultánea de la estructura del sistema (configuración del proceso) y las condiciones de operación (caudales de las corrientes de proceso y concentraciones de componentes) de plantas de tratamiento para la remoción de materia orgánica y nitrógeno por barros activados, tendientes a minimizar el costo de operación total anual, satisfaciendo los límites de descarga permitidos. Para esto se asumen conocidas las especificaciones del agua residual afluyente (caudal y composición), los límites permitidos para descarga del líquido tratado, el número y dimensiones de equipos disponibles, el modelo de costos y un conjunto de configuraciones de proceso o restricciones topológicas.

Debido a que en este caso el equipamiento de la planta se supone dado, no se consideran los costos de inversión del mismo. El costo operativo computa la demanda de energía para bombeo y aireación, la dosificación de una fuente de carbono externa, el pago de multas incurridas por descarga de contaminantes con el líquido tratado, y el tratamiento de los barros que se eliminan del sistema.

El modelo de barros activados *ASM3* (*Activated Sludge Model No. 3*) y el modelo de sedimentación propuesto por Takàcs (Takàcs et al., 1991) son usados para modelar los compartimentos de reacción y el sedimentador secundario, respectivamente, lo que resulta en un modelo de programación matemática altamente no lineal. Como se mencionó en secciones anteriores, la superestructura propuesta, que incluye las configuraciones de *Pre*, *Post* y *Pre-Post-Denitrificación*, se modela como un problema de programación matemática mixta entera no lineal *MINLP*, donde las variables binarias (0/1) son usadas para la selección de la configuración del proceso óptimo, y las continuas para representar las variables de proceso (caudales de aireación, de alimentación del líquido afluyente, de barros para disposición final, de reciclos, de dosificación de la fuente externa de carbono, y las concentraciones de los componentes en cada corriente).

3.2.1 Especificaciones del agua residual afluyente

Para mostrar la performance de los modelos, se seleccionan dos casos de estudio con especificaciones de agua residual afluyente diferentes. Para el *caso de estudio 1* se consideran las mismas especificaciones de agua residual afluyente que en el ejemplo del capítulo anterior (Tabla 2.12). Para el *caso de estudio 2* se elige una corriente de agua residual afluyente que presenta una relación C/N (Carbono/nitrógeno) menor a la anterior, medido por las contribuciones a DQO de la materia orgánica lentamente degradable X_S y fácilmente degradable S_S , y como Nitrógeno Total Kjeldahl (NTK), respectivamente. Las composiciones de las aguas residuales usadas en los casos de estudio son mostradas en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1. Especificaciones del agua residual afluyente

	<i>Caso 1</i>	<i>Caso 2</i>
<i>Componente</i>	<i>Valor</i>	<i>Valor</i>
Materia orgánica inerte soluble, S_I (gCOD m ⁻³)	30	30
Sustrato fácilmente biodegradable, S_S (gCOD m ⁻³)	69.5	8.6875
Materia orgánica inerte particulada, X_I (gCOD m ⁻³)	51.2	51.2
Sustrato lentamente biodegradable, X_S (gCOD m ⁻³)	202.32	134.88
Biomasa activa heterótrofa, X_H (gCOD m ⁻³)	28.17	28.17
Biomasa activa autótrofa, X_A (gCOD m ⁻³)	0	0
Producto de almacenaje celular interno, X_{STO} (gCOD m ⁻³)	0	0
Sólidos suspendidos, X_{SS} (gCOD m ⁻³)	215.493	164.913
Oxígeno disuelto, S_O (gCOD m ⁻³)	0	0
Nitrógeno de nitratos y nitritos, S_{NOX} (gCOD m ⁻³)	0	0
Nitrógeno, S_{N_2} (gCOD m ⁻³)	0	0
Nitrógeno amoniacal y de ión amonio, S_{NH} (gCOD m ⁻³)	36.425	36.425
Alcalinidad, S_{ALK} (gCOD m ⁻³)	7	7
Caudal volumétrico afluyente (m ³ d ⁻¹)	18446	18446
COD_{(X_S+S_S)/TKN}	5.39	3.14

3.3 Modelo del proceso. Casos de estudio

Se presentan dos modelos de superestructura que incluyen las configuraciones de proceso convencionales más usadas (*PreDN*, *PostDN* y *Pre-PostDN*). El primer modelo de superestructura planteado no permite la posibilidad de distribución de corrientes. El segundo contempla tal posibilidad; es decir, es posible distribuir las corrientes de recirculación de licor nitrificado y de barros, y la corriente de agua residual afluyente a lo largo de la zona de reacción.

Los modelos desarrollados pueden ser empleados para síntesis y optimización de las condiciones operativas (esto es, para la selección de la configuración y de las condiciones operativas por medio de la optimización de las variables binarias y continuas, respectivamente), o sólo para optimización de las variables operativas fijando las correspondientes variables binarias, o bien para realizar simulaciones fijando la totalidad de las variables de síntesis y operación. Con los resultados obtenidos se pretende identificar patrones de diseño que mejoren la performance del proceso, compuesto por una red de reactores biológicos con separación de barros y recirculaciones.

En el caso de estudio 1, el número y tamaño de los equipos que conforman cada opción de configuración de planta en ambas superestructuras, las características de agua residual afluyente y especificaciones de concentraciones en el efluente, así como las restricciones para las variables operativas empleadas y el modelo de costos empleados en estos modelos son idénticos a los descritos en el capítulo anterior. Por tanto, las soluciones que se obtienen en los casos de estudio 1, son consistentes con las presentadas en el capítulo anterior.

3.3.1 Sistema sin distribución de corrientes de proceso

3.3.1.a Modelo de la superestructura

La Figura 3.1 muestra la superestructura para el modelo sin distribución de corrientes.

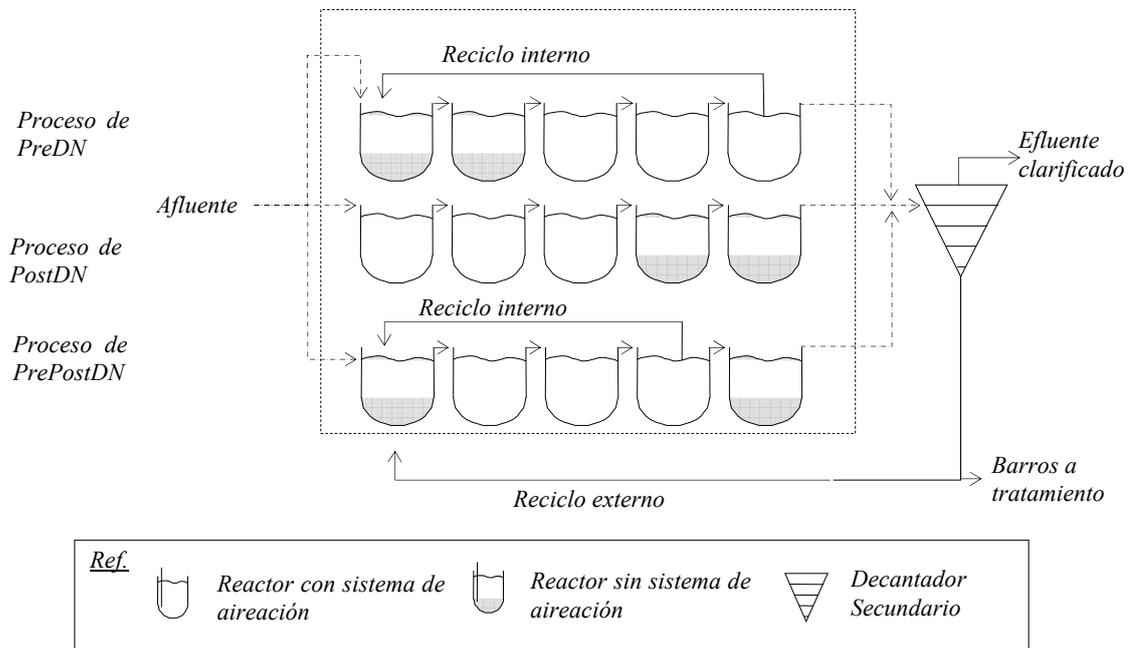


Figura 3.1. Superestructura para el modelo sin distribución de corrientes

El modelo de superestructura considera zonas aeróbicas y anóxicas a través de cinco compartimentos de reacción seguidos por una zona de sedimentación. Los equipos se suponen dados, y consisten en dos reactores de 1000 m^3 que operan bajo condiciones anóxicas estrictas, tres compartimentos de 1333 m^3 que pueden operar bajo condiciones aeróbicas o anóxicas de acuerdo al caudal de aireación que resulte de la optimización (vía los coeficientes de transferencia de masa para el oxígeno $k_L a$) ya que poseen sistemas de aireación, y un decantador secundario de 6000 m^3 con una altura de 4 m y área transversal de 1500 m^2 .

Debido a que la superestructura contempla sólo los tres esquemas de tratamiento previamente mencionados, el orden de los compartimentos de reacción, las corrientes de reciclos existentes y las zonas de alimentación de la fuente externa de carbono están determinadas por la configuración seleccionada. Se emplean tres variables binarias y_1 , y_2 e y_3 para la selección de la configuración del proceso. Por ejemplo, para la selección del proceso *PreDN*, los valores de las variables binarias correspondientes son $y_1=1$ e $y_2 = y_3 = 0$, lográndose un esquema de reacción consistente en la secuencia de dos compartimentos anóxicos en serie seguidos de tres compartimentos aireados o anóxicos.

Además, se contempla el reciclo externo (de barros) desde la zona de decantación al primer reactor, así como el interno que recicla parte del licor nitrificado desde el último compartimento al primero, al igual que la alimentación de la fuente externa de carbono al primer y segundo compartimento. Si el proceso *PostDN* es seleccionado, las variables binarias toman valores $y_2=1$ e $y_1 = y_3 = 0$. La zona de reacción consiste en tres compartimentos aireados o anóxicos (dependiendo de los valores de k_{La}) seguidos de dos compartimentos anóxicos en serie; se considera sólo el reciclo externo (de barros), y la alimentación de la fuente externa de carbono se localiza en el cuarto (penúltimo) y último compartimento. Finalmente, si el proceso *Pre-PostDN* es seleccionado ($y_3=1$ e $y_1 = y_2 = 0$), resulta un esquema de reacción formado por un compartimento anóxico seguido por tres compartimentos aireados o anóxicos, y por último una unidad anóxica, considerándose el reciclo externo y el interno que recircula parte del licor nitrificado desde el *cuarto* compartimento al primero, y la alimentación de la fuente externa de carbono al primer y último compartimento. Las condiciones de operación como caudales de las corrientes principales del proceso (caudales de efluente clarificado, de barros purgados y destinados a tratamiento, reciclos internos y externo, caudales de aireación y la dosificación de la fuente de carbono externa) y las concentraciones de los componentes en cada equipo y corriente, entre otros, son representadas por variables continuas.

La zona anóxica puede requerir la dosificación de una fuente externa de carbono para facilitar la denitrificación en el caso en el que la materia orgánica fácilmente biodegradable contenida en el agua residual influente sea consumida por los microorganismos aeróbicos en la zona de nitrificación. Esto se acentúa si la proporción carbono/nitrógeno del agua residual influente es baja. El esquema *PostDN* es propenso a esta escasez de materia orgánica fácilmente biodegradable ya que la zona aeróbica precede a la anóxica. Por otra parte, la última zona aeróbica en la configuración *PreDN* reduce el efecto indeseable de denitrificación en el sedimentador secundario, que puede provocar un deterioro del proceso de decantación debido a la formación de gas. Como el licor nitrificado es reciclado de la zona aeróbica a la zona anóxica para denitrificación, la configuración *PreDN* requiere una alta relación de reciclo interno para operar eficientemente.

3.3.1.b Modelo de optimización

- Ecuaciones del modelo

Para el modelado de la superestructura se utiliza básicamente el modelo presentado en el caso 1 del capítulo anterior, agregándose otros conjuntos, variables binarias y reales y ecuaciones/restricciones, como se muestra a continuación. Se definen:

Conjuntos

$i = \{1, 2, 3, \dots, I\}$ conjunto de reactores i ,

$q = \{1, 2, 3\}$ conjunto de configuraciones de proceso posibles,

$ANXr = \{(i, q) / (i, q) = \text{reactor anóxico}\}$,

$ANXr = \{(1,1); (1,3); (2,1); (4,2); (5,2); (5,3)\}$,

$AERr = \{(i, q) / (i, q) = \text{reactor aeróbico}\}$,

$AERr = \{(1,2); (2,2); (2,3); (3,1); (3,2); (3,3); (4,1); (4,3); (5,1)\}$,

$ANXm = \{(g, q) / (g, q) = \text{mezclador previo a un reactor anóxico}\}$

$ANXm = \{(1,1); (1,3); (2,1); (4,2); (5,2); (5,3)\}$,

$AERm = \{(g, q) / (g, q) = \text{mezclador previo a un reactor aeróbico}\}$,

$AERm = \{(1,2); (2,2); (2,3); (3,1); (3,2); (3,3); (4,1); (4,3); (5,1)\}$,

Variables,

y_q variable binaria para seleccionar la configuración del proceso q . Denotan la selección ($y_q=1$) o no ($y_q=0$) de una configuración de proceso dada, según lo explicado en el punto anterior.

$k_{La,i,q}$ coeficiente de transferencia en el reactor i para el proceso q ,

$u_{ECSD,g,q}$ dosificación de la fuente externa de carbono al mezclador g en el proceso q ,

Los compartimentos de reacción se modelan como reactores de mezcla completa (CSTR) en estado estacionario. Las reacciones que ocurren dentro de los reactores se describen a través de las ecuaciones 2.1 a 2.12. Se emplean los valores de los parámetros cinéticos a 15 °C (Tabla 2.6) y los parámetros estequiométricos y de

composición sugeridos originalmente para el modelo ASM3 (Tabla 2.4, Gujer et al., 1999). El decantador secundario se modela como un tanque no reactivo de 6000 m³, con un área transversal de 1500 m² y una profundidad de 4 m y se emplean las ecuaciones 2.22 a 2.36. Se asume que el punto de alimentación al decantador está situado a 2.2 m desde la base, y corresponde a la capa 6 del modelo del mismo.

- Restricciones estructurales

La configuración de proceso se selecciona por medio de la asignación del valor 1 a una y solamente una de las variables binarias definidas. La restricción estructural correspondiente se escribe de la siguiente forma:

$$\sum_Q y_q = 1 \quad (3.1)$$

donde $q = 1, 2, 3$ hace referencia a los procesos de *PreDN*, *PostDN* y *Pre-PostDN*, respectivamente.

Los volúmenes de los compartimentos anóxicos y aeróbicos se suponen dados ($V_{anx} = 1000 \text{ m}^3$ y $V_{aerb} = 1333 \text{ m}^3$, respectivamente) y, de acuerdo a la configuración de proceso elegida, se deben satisfacer las restricciones de volumen siguientes:

$$V_i = V_{anx} \cdot \left(\sum_{q/(i,q) \in ANX} y_q \right) + V_{aerb} \cdot \left(\sum_{q/(i,q) \in AER} y_q \right), \forall i \quad (3.2)$$

Así, el tercer compartimento resulta con un volumen de 1333 m³ para cualquiera de las configuraciones que se elija.

Como se explicó en el capítulo anterior, el caudal de aireación para el compartimento i es proporcional al coeficiente de transferencia $k_L a_i$. En el presente modelo:

$$k_L a_i = \sum_Q k_L a_{i,q}, \quad \forall i \quad (3.3)$$

donde $k_L a_{i,q}$ es el coeficiente de transferencia en el reactor i para el proceso q , que es distinto de cero si se cumplen las dos condiciones siguientes: (a) que el proceso q sea seleccionado, y (b) que en el proceso q el reactor i sea un compartimento aireado. Así, las restricciones siguientes deben ser satisfechas:

$$k_L a_{i,q} \leq M \cdot y_q, \quad \forall (i,q) \quad (3.4)$$

$$k_L a_{i,q} \leq M \cdot (1 - y_q), \quad \forall (i,q) \in ANX \quad (3.5)$$

donde M es un número (positivo) suficientemente grande. El cumplimiento de estas restricciones asegura que el compartimento funciona bajo condiciones anóxicas o aeróbicas dependiendo del proceso seleccionado. Como ejemplo, el coeficiente de transferencia de oxígeno correspondiente al primer compartimento ($i = 1$), $k_L a_1$, tiene que satisfacer:

$$k_L a_1 = \sum_{q=1}^3 k_L a_{1,q}$$

$$k_L a_{1,q} \leq M \cdot (1 - y_q), \quad k_L a_{1,q} \leq M \cdot y_q, \quad \forall q = 1, 3$$

$$k_L a_{1,q} \leq M \cdot y_q, \quad \forall q = 2$$

El cumplimiento de estas restricciones asegura que el coeficiente $k_L a_1$ es cero si el proceso “1” (*PreDN*) o el proceso “3” (*Pre-PostDN*) es seleccionado; de esa manera, el compartimento “1” opera en condiciones anóxicas. Mientras que si el proceso “2” (*PostDN*) es seleccionado, tal compartimento opera en condiciones aeróbicas o anóxicas, según sea el valor óptimo de $k_L a_1$. Se aplican restricciones similares a los compartimentos de reacción 2, 4 y 5. Como el tercer compartimento no tiene que funcionar necesariamente en condiciones anóxicas estrictas en ninguno de los esquemas de proceso considerados, el valor de $k_L a_3$ resulta:

$$k_L a_3 = \sum_{j=1}^3 k_L a_{3,q} \quad \text{y} \quad k_L a_{3,q} \leq M \cdot y_q, \quad \forall q = 1, 2, 3$$

La fuente externa de carbono sólo se dosifica a los mezcladores previos a los compartimentos de reacción anóxicos estrictos. Así, las restricciones siguientes tienen que ser verificadas para el mezclador g :

$$u_{ECSD,g} = \sum_Q u_{ECSD,g,q}, \quad \forall g \quad (3.6)$$

$$u_{ECSD,g,q} \leq M \cdot y_q, \quad \forall (g,q) \quad (3.7)$$

$$u_{ECSD,g,q} \leq M \cdot (1 - y_q), \quad \forall (g,q) \in AER \quad (3.8)$$

El cumplimiento de estas restricciones asegura que la fuente externa de carbono puede ser dosificada a un mezclador si el compartimento siguiente resulta no aireado (compartimento anóxico estricto) en la configuración de proceso seleccionado. Por ejemplo, las restricciones siguientes tienen que ser satisfechas para el compartimento 1,

$$u_{ECSD,1} = \sum_{q=1}^3 u_{ECSD,1,q}$$

$$u_{ECSD,1,q} \leq M \cdot y_q, \quad q = 1, 3$$

$$u_{ECSD,1,q} \leq M \cdot (1 - y_q), \quad u_{ECSD,1,q} \leq M \cdot y_q, \quad q = 2$$

El cumplimiento de la última restricción asegura que $u_{ECSD,1}$ sea cero si el proceso 2 es seleccionado.

La dosificación total de carbono externo añadido al sistema es:

$$u_{ECSD}^T = \sum_G u_{ECSD,g} \quad (3.9)$$

Los caudales de los reciclos internos deben verificar las siguientes restricciones estructurales o topológicas:

$$Q_{r,int,4}^T \leq M \cdot y_q, \quad \forall q \quad (3.10)$$

$$Q_{r,int,4}^T \leq M \cdot (1 - y_q), \quad q = 1,2 \quad (3.11)$$

$$Q_{r,int,5}^T \leq M \cdot y_q, \quad \forall q \quad (3.12)$$

$$Q_{r,int,5}^T \leq M \cdot (1 - y_q), \quad q = 2,3 \quad (3.13)$$

De esta manera, si el proceso $q = 1$ (*PreDN*) es elegido se hace cero el $Q_{r,int,4}^T$, mientras se contempla la posibilidad de la existencia de un caudal $Q_{r,int,5}^T$ que corresponde al reciclo que retorna parte del licor nitrificado desde el quinto compartimento al primero. Si el proceso $q = 3$ (*PrePostDN*) es elegido se hace cero $Q_{r,int,5}^T$, mientras se posibilita la existencia de un caudal $Q_{r,int,4}^T$ que corresponde al reciclo que retorna parte del licor desde el cuarto al primer compartimento. En caso que el proceso $q = 2$ (*PostDN*) se elija, los dos reciclos internos se hacen cero.

- Balances de masa

Se emplean las ecuaciones 2.42 a 2.44 correspondientes a los balances de masa en los reactores, las ecuaciones 2.45 a 2.47 correspondientes a los balances de masa en los separadores, la ecuación 2.50 de balance total en el decantador, y las ecuaciones 2.51 a 2.61 correspondientes a los balances de masa por componentes en reactores, mezcladores, separadores y decantador.

- Restricciones de especificación de vertido y valores máximos para variables de operación

Las restricciones de valores límite o umbral para las concentraciones de algunos contaminantes del efluente están dadas por la ecuación 2.101 y sus valores están

listados en la Tabla 2.11 del capítulo precedente. Los valores máximos para las variables de operación están representados por la ecuación 2.103 y listados en la Tabla 2.12.

- Función objetivo y funciones de costos

Análogamente al capítulo 2, la función objetivo a minimizar consiste en el costo total de operación anual (COTA) dado por la ecuación 2.94.

Los costos unitarios se muestran en la Tabla 2.8 del capítulo 2. Se emplean las ecuaciones 2.95, 2.96 y 2.100 para calcular la energía de bombeo, el índice de calidad del efluente y el caudal de barros para tratamiento, y la ecuación 2.21 para calcular la energía de aireación. La Tabla 2.9 muestra los factores de peso β_y para la conversión de las concentraciones de los contaminantes a unidades de contaminación.

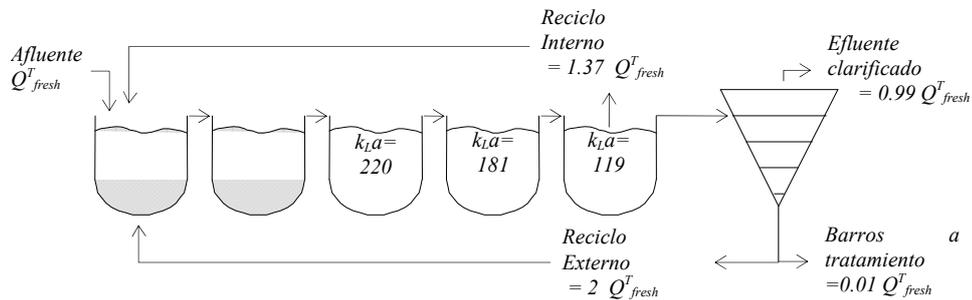
3.3.1.c Resultados

Como se mencionó en la sección 3.2.1, se seleccionan dos casos de estudio con especificaciones de agua residual afluyente diferentes. Para el *caso de estudio 1* se consideran las mismas especificaciones que en el ejemplo del capítulo anterior (Tabla 2.10). Para el *caso de estudio 2* se elige una corriente de agua residual afluyente que presenta una relación entre el contenido de carbono y el nitrógeno menor al caso anterior, medidos, respectivamente, por las contribuciones a la DQO de la materia orgánica lentamente degradable X_S y fácilmente degradable S_S , y como Nitrógeno Total Kjeldahl (NTK). Las composiciones de las aguas residuales usadas en los casos de estudio son mostradas en la Tabla 3.1.

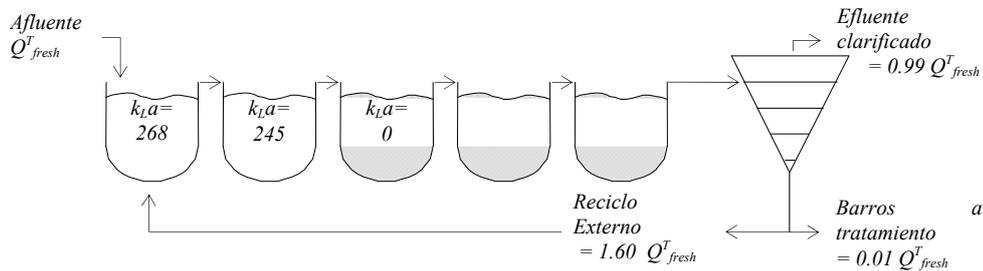
Caso de estudio 1

Los resultados de la optimización obtenidos determinan que el esquema de *PostDN* convencional es la configuración óptima para el caso analizado (Figura 3.2.b); es decir, resulta una zona aireada seguida de una única zona anóxica. El COTA resulta en 528559.78 Euros. La segunda columna de la Tabla 3.2 lista los valores óptimos de las principales variables de operación.

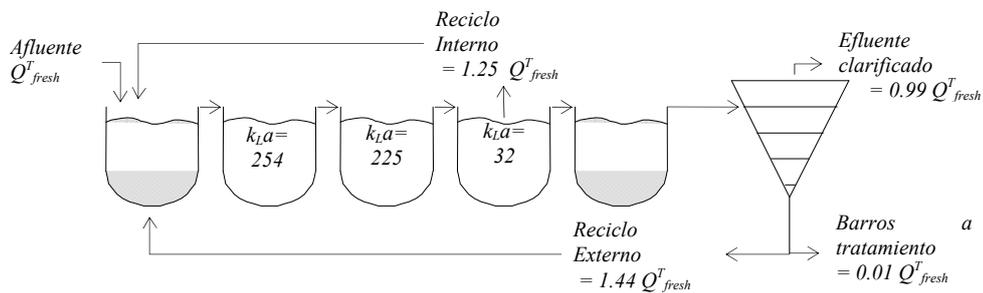
Ahora bien, si se fijan adecuadamente los valores de las correspondientes variables binarias se pueden seleccionar (una por vez) las restantes configuraciones del proceso, pudiéndose optimizar, consecuentemente, las condiciones de operación para cada una de ellas. Así, y a los fines de su comparación con la solución óptima que resulta de la superestructura, las condiciones operativas que resultan de la optimización (individual) de la configuración de *PreDN* se muestran en la Figura 3.2.a y listan en la tercer columna de la Tabla 3.2; mientras que los correspondientes a la de *PrePostDN* se presentan en la Figura 3.2.c y última columna de la Tabla 3.2.



a. Optimización de la configuración de *PreDN*, COTA: 605809.34



b. Solución óptima: configuración de *PostDN*, COTA: 528559.78



c. Optimización de la configuración de *PrePostDN*, COTA: 553775.59

Figura 3.2. Alternativas de proceso óptimas calculadas para las configuraciones convencionales para el caso de estudio 1

Tabla 3.2. Soluciones óptima y alternativas para el caso de estudio 1

	Solución óptima	Conf. alternativas	
	b. <i>PostDN</i>	a. <i>PreDN</i>	c. <i>PrePostDN</i>
y_1 (<i>PreDN</i>)	0	1	0
y_2 (<i>PostDN</i>)	1	0	0
y_3 (<i>PrePostDN</i>)	0	0	1
Coef transferencia de oxígeno $k_L a$, d^{-1}			
Reactor i = 1	267.91	0	0
Reactor i = 2	245.03	0	254.30
Reactor i = 3	0	219.61	224.92
Reactor i = 4	0	181.43	32.51
Reactor i = 5	0	119.37	0
Caudal de recicló interno, $m^3 d^{-1}$	0.0	25296.75	23010.57
Caudal de recicló externo, $m^3 d^{-1}$	29635.63	36892.00	26629.45
Caudal de barros para tratamiento, $m^3 d^{-1}$	214.67	228.77	213.13
Caudal entre compartimentos, $m^3 d^{-1}$	48081.63	80634.75	68086.02
Caudal de efluente clarificado, $m^3 d^{-1}$	18231.33	18217.23	18232.87
Dosificación de la fuente de carbono externa, $gCOD d^{-1}$	0.00	0.00	0.00
Índice de calidad del efluente, $kg PU d^{-1}$	3951.99	5102.20	4135.92
Demanda de energía de bombeo, $kWh d^{-1}$	1194.01	2496.70	1994.13
Demanda de energía de aireación, $kWh d^{-1}$	6236.30	5682.99	5966.43
Barros para tratamiento, $kg d^{-1}$	1936.07	1949.43	1972.87
Conc. de S_{NH_4} en efluente clarificado, $gN m^{-3}$ (límite 4)	4.00	2.05	3.04
N_{TOT} del efluente clarificado, $g N m^{-3}$ (límite 18)	6.34	9.46	6.89
BOD del efluente clarificado, $g m^{-3}$ (límite 10)	2.40	2.43	2.40
COD del efluente clarificado, $g COD m^{-3}$ (límite 100)	51.25	51.52	50.91
TSS del efluente clarificado, $g SS m^{-3}$ (límite 30)	16.93	17.27	16.71
Costos operativos (Euros año⁻¹)			
Energía de aireación	155907.56	142074.66	149160.78
Energía de bombeo	29850.30	62417.52	49853.14
Tratamiento de los barros	145205.22	146207.13	147965.60
Multas	197599.53	255110.03	206796.06
Dosificación de la fuente de C externa	0.0	0.0	0.0
Costo de operación Total Anual	528559.78	605809.34	553775.59

Nótese que estas tres soluciones obtenidas concuerdan con las soluciones óptimas encontradas para los modelos NLP correspondientes a los casos 1.a, 1.b y 1.c del capítulo anterior (Soluciones 1 a 3, respectivamente).

Como se mencionó anteriormente, en la solución óptima el coeficiente de transferencia de oxígeno para el compartimento 3 resulta cero; por lo tanto, los compartimentos 3, 4 y 5 operan bajo condiciones anóxicas, resultando en un volumen total de la zona anóxica de 3333 m³ y el de la zona aeróbica de 2666 m³. El volumen de la zona aireada en el proceso *PostDN* es menor que en las demás alternativas, pero la intensidad de la aireación y su demanda de energía son mayores. Como muestra la Tabla 3.2, la concentración de S_{NH} en el efluente tratado (S_{NH,ef}) se encuentra en su valor límite permitido, mientras los valores de N_{TOT}, DQO, DBO y SST están muy por debajo de los límites permitidos.

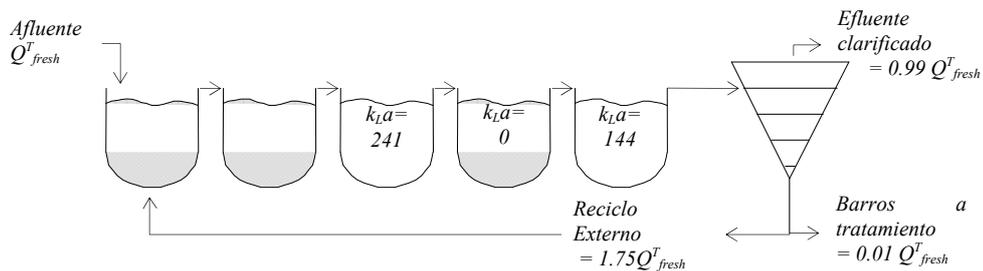
La Tabla 3.2 muestra que ambas configuraciones *alternativas* predicen niveles de S_{NH4} en el efluente más bajos que la solución óptima, pero esta última proporciona mejores valores de N_{tot} e índice de calidad de efluente *EQ* y, en consecuencia, el costo total de las multas es menor. Para la solución óptima de *PostDN* el consumo de energía de aireación es mayor mientras que el de bombeo es mucho menor -debido principalmente a la ausencia de reciclo interno- necesario en las soluciones de *PreDN* y *PrePostDN*.

Como se mencionó en el capítulo anterior, la relación C/N del agua residual afluyente para este caso de estudio resulta adecuada para las configuraciones y tamaño de equipos dados, ya que ninguna configuración de proceso requiere la dosificación de una fuente externa de carbono para cumplir con la restricción límite de N_{tot} del efluente. El costo del tratamiento de los barros eliminados del sistema es similar para las tres soluciones. Así, el costo operativo total anual (COTA) para los sistemas de *PreDN* y *Pre-PostDN* resultan un 15 y 5% superiores, respectivamente, respecto al de la solución óptima que proporciona la superestructura.

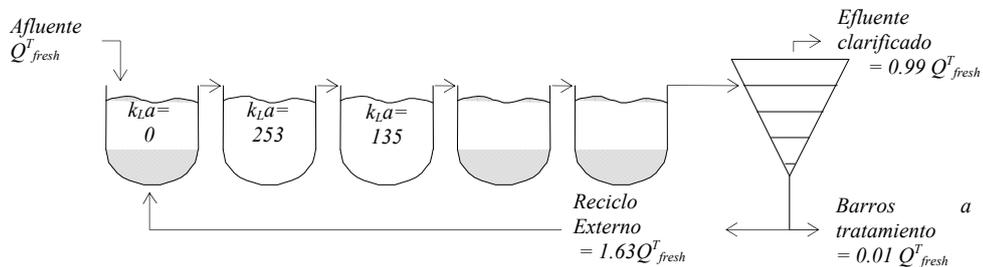
Caso de estudio 2

Como muestra la Figura 3.3.c y la Tabla 3.3, el esquema *PrePostDN* resulta la configuración óptima que proporciona la superestructura sin distribución de corrientes para las especificaciones del afluyente del *caso de estudio 2*. Es interesante notar que

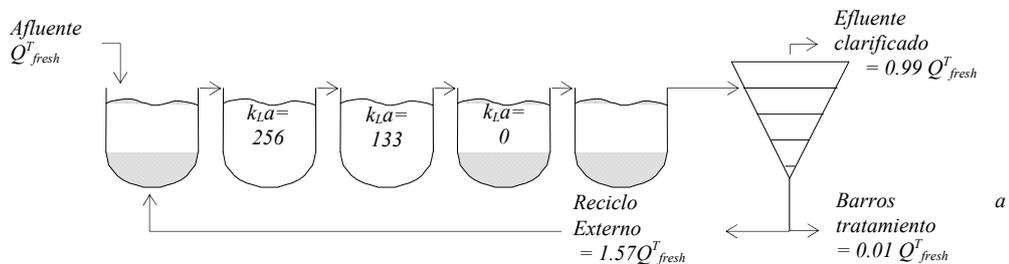
aunque el agua residual afluyente del *caso de estudio 2* tiene una carga orgánica inferior a la del *caso de estudio 1*, el COTA de la configuración óptima aumenta 12 % respecto a aquél. La concentración de S_{NH4} en el efluente está en su valor límite permitido y el valor del N_{tot} está por debajo del límite, pero esta concentración es superior a la del caso de estudio 1. En esta configuración uno de los tres reactores que dispone de sistema de aireación opera como un compartimento anóxico ($k_L a = 0$), lo que resulta en un volumen total de la zona anóxica de 3333 m³ y de la zona aeróbica de 2666 m³.



a. Optimización de la configuración de *PreDN*, COTA: 594201.32



b. Optimización de la configuración de *PostDN*, COTA: 592463.16



c. Solución óptima: configuración de *PrePostDN*, COTA: 591586.28

Figura 3.3. Alternativas de proceso óptimas calculadas para las configuraciones convencionales para el caso de estudio 2

Tabla 3.3. Soluciones óptima y alternativas para el caso de estudio 2

	Solución óptima	Conf.Alternativas	
	c.PrePostDN	a. PreDN	b. PostDN
y_1 (PreDN)	0	1	0
y_2 (PostDN)	0	0	1
y_3 (PrePostDN)	1	0	0
Coef transferencia de oxígeno $k_L a$, d ⁻¹			
Reactor i = 1	0	0	0
Reactor i = 2	256.83	0	253.35
Reactor i = 3	132.69	241.40	134.91
Reactor i = 4	0	0	0
Reactor i = 5	0	143.79	0
Caudal de reciclo interno, m ³ d ⁻¹	0	0	0
Caudal de reciclo externo, m ³ d ⁻¹	29036.29	32354.72	30026.25
Caudal de barros para tratamiento, m ³ d ⁻¹	135.37	139.74	136.61
Caudal de efluente clarificado, m ³ d ⁻¹	18310.63	18306.26	18309.39
Dosificación de la fuente de carbono externa, gCOD d ⁻¹	0.00	0.00	0.00
Conc. de S _{NH4} del efluente clarificado, gN m ⁻³ (limite 4)	4.00	4.00	4.00
N _{TOT} del efluente clarificado, g N m ⁻³ (limite 18)	15.16	15.22	15.18
BOD del efluente clarificado, g m ⁻³ (limite 10)	1.74	1.76	1.75
COD del efluente clarificado, g COD m ⁻³ (limite 100)	51.43	51.60	51.50
TSS del efluente clarificado, g SS m ⁻³ (limite 30)	16.90	17.10	16.97
Costos operativos (Euros año⁻¹)			
Energía de aireación	111453.29	108662.46	110712.71
Energía de bombeo	29171.66	32494.46	30162.86
Tratamiento de los barros	92092.17	92502.46	92159.72
Multas	358869.16	360541.95	359427.87
Dosificación de la fuente de C externa	0.0	0.0	0.0
Costo de operación Total Anual	591586.28	594201.32	592463.15

Comparando la solución óptima de este caso de estudio respecto al anterior, se observa que el COTA de la configuración óptima aumenta en aproximadamente un 12 %. La mayor diferencia se observa en los costos correspondientes a las multas, debido a una elevada concentración de nitratos del efluente. Sin embargo, los costos de

tratamiento de barros y aireación disminuyen en aproximadamente 37 y 28 %, respectivamente.

Procediendo análogamente al caso anterior, si se fijan las variables binarias adecuadamente se obtienen las soluciones para los esquemas de *PreDN* y de *PostDN* (Figura 3.3.a y b y Tabla 3.3). Se observa que el aumento del COTA de estas dos configuraciones alternativas es muy pequeño (solamente 0.44 y 0.15 % para *PreDN* y *PostDN*, respectivamente) respecto a la solución óptima (*PrePostDN*).

Ninguna de las soluciones óptimas presenta reciclo interno. El N_{tot} está por debajo del límite, pero su concentración es superior a la del caso de estudio 1. Estos dos hechos indican que la materia carbonosa del influente no es suficiente para un proceso de denitrificación adecuado; sin embargo, la dosificación de una fuente externa de carbono no parece ser conveniente desde el punto de vista económico; esto es, es preferible el pago de multas debido al alto valor de N_{tot} (pero que no sobrepasa el límite) a la dosificación de carbono externo para reducir el nivel de nitratos del efluente.

3.3.2 Sistema con distribución de corrientes de proceso

3.3.2.a Modelo de la superestructura

En esta sección se extiende el modelo de superestructura propuesto en la sección anterior para posibilitar la distribución de las corrientes principales del proceso, como la corriente de recirculación de licor nitrificado y de barros y la corriente de agua residual afluyente, a lo largo de la zona de reacción.

La Figura 3.4 muestra que las corrientes de agua residual afluyente y de reciclo externo pueden ser alimentadas a uno o varios de los cinco compartimentos de reacción. La corriente de reciclo interno también puede ser distribuida a lo largo de la zona de reacción en los casos de las configuraciones de *PreDN* y *PrePostDN*. La configuración *PostDN* no incluye reciclo interno.

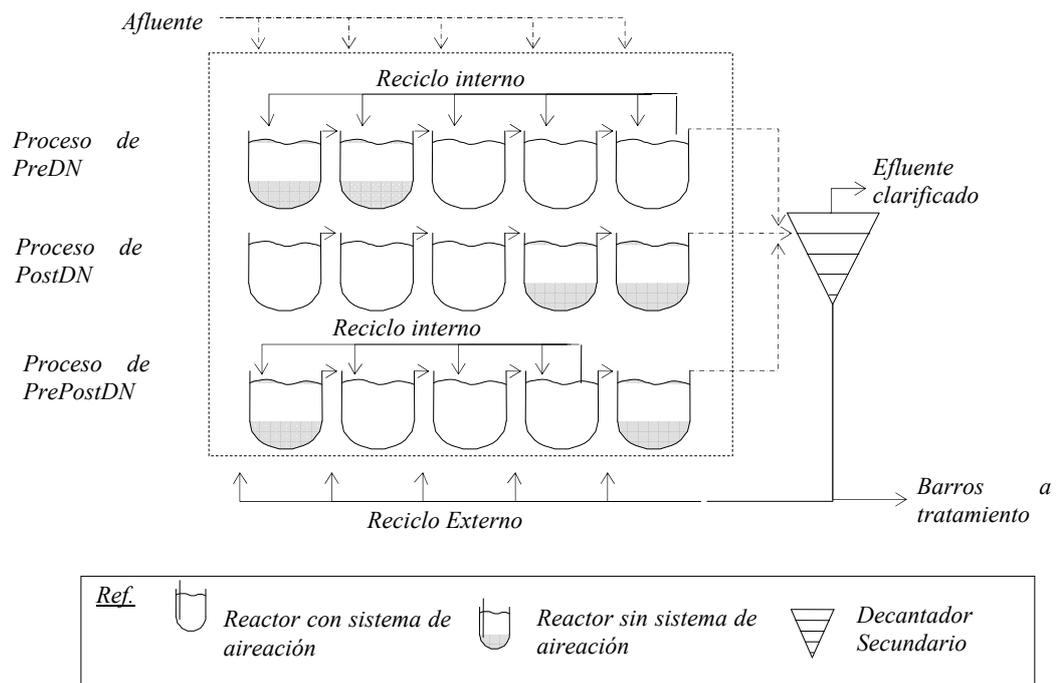


Figura 3.4. Modelo de superestructura con distribución de corrientes

Es oportuno destacar aquí que la posibilidad de distribución de las corrientes de proceso hace que, en general, pierdan “identidad” las configuraciones convencionales o de referencia. Esto es, una configuración “convencional” que incorpore un patrón de distribución de alguna corriente de proceso, no respondería estrictamente a la denominación “convencional”. Sin embargo, en esta tesis, para brevedad y solamente en aquellos casos y situaciones que no conduzcan a ambigüedades, la configuración resultante de una optimización dada puede describirse en base a la configuración convencional “más cercana” (en términos de apariencia) y destacando su particularidad que la distingue de aquella.

3.3.2.b Modelo de optimización

- Ecuaciones del modelo

El modelo descrito en la sección 3.3.1.a se amplía agregando y modificando ecuaciones para considerar la distribución de corrientes. Se agregan las ecuaciones 2.71, 2.78 a 2.80 y 2.87 para considerar los separadores de las corrientes de agua residual y

reciclos internos y externo, respectivamente. Las ecuaciones 2.42 a 2.44 se reemplazan por las ecuaciones 2.88 a 2.90 correspondientes a los balances de masa totales, y las ecuaciones 2.53 a 2.55 por las ecuaciones 2.91 a 2.93 para los balances de masa por componentes. El resto del modelo permanece sin alteraciones.

Este modelo MINLP resulta en un total de 3 variables discretas, 550 variables continuas y 568 restricciones de igualdad y desigualdad.

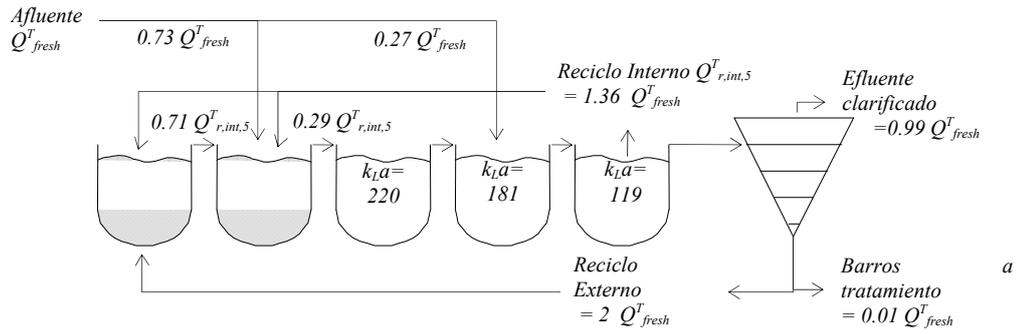
3.3.2.c Resultados

Los casos de estudio seleccionados son los mismos que los usados para presentar los resultados del modelo de superestructura que no contempla la posibilidad de distribución de corrientes, cuyos detalles se presentan en la Tabla 3.1.

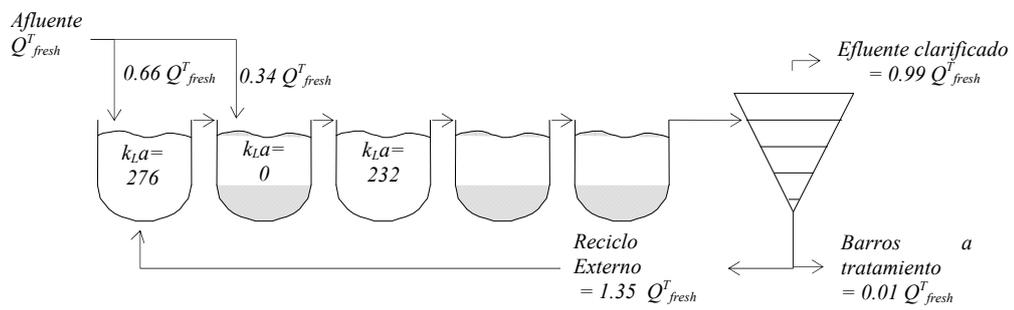
Caso de estudio 1

La Figura 3.5.b y la Tabla 3.4 (segunda columna) muestran la configuración de planta y las condiciones de operación resultantes de la optimización de la superestructura propuesta con distribución de corrientes para el *caso de estudio 1*. La configuración óptima que resulta es el esquema de *PostDN* convencional que incorpora una región anóxica intermedia. Estrictamente, la configuración resultante es un sistema híbrido, en el sentido que no responde a la configuración de *PostDN* convencional. Específicamente, en la solución óptima, el segundo compartimento, que dispone de sistema de aireación, opera como un compartimento anóxico ($k_{La} = 0$). La Tabla 3.4 y las Figuras 3.5.a y c muestran también las condiciones de operación óptimas para las configuraciones *PreDN* y *PrePostDN* que resultan al permitir la distribución de las corrientes principales del proceso, fijando las variables binarias correspondientes. Notar que estas tres soluciones concuerdan con las encontradas para los modelos NLP de los casos 5.a, b y c descritos en el capítulo anterior (Soluciones 6, 7 y 3, respectivamente).

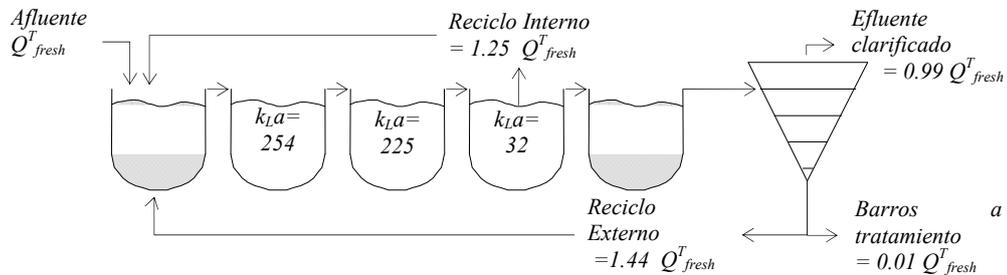
En la solución óptima aproximadamente el 66 % del caudal de agua residual afluente es alimentado al primer compartimento y el resto al segundo. No se distribuye la corriente de reciclo externo y tampoco se dosifica carbono externo al proceso. Ninguno de los indicadores de contaminación del efluente tratado está en su valor límite permitido.



a. Optimización de la configuración de PreDN, COTA: 602905.10



b. Solución óptima: Configuración de PostDN, COTA: 520301.22



c. Optimización de la configuración de PrePost DN, COTA: 553775.59

Figura 3.5. Alternativas de proceso óptimas calculadas para las configuraciones con posibilidad de distribución de corrientes para el caso de estudio 1

Tabla 3.4. Soluciones óptima y alternativas para el caso de estudio 1 con posibilidad de distribución de corrientes

	Solución óptima			Conf. alternativas	
		b. PostDN	a. PreDN	c. PrePostDN	
y_1 (PreDN)		0	1	0	
y_2 (PostDN)		1	0	0	
y_3 (PrePostDN)		0	0	1	
Cof transferencia de oxígeno $k_L a$, d^{-1}					
	Reactor i = 1	276.08	0	0	
	Reactor i = 2	0	0	254.30	
	Reactor i = 3	232.48	198.79	224.92	
	Reactor i = 4	0	166.98	32.51	
	Reactor i = 5	0	160.41	0	
Caudal de reciclo interno, $m^3 d^{-1}$					
		0.0	25044.99	23010.54	
Caudal de reciclo externo, $m^3 d^{-1}$					
		24925.36	36892.00	26629.52	
Caudal de barros para tratamiento, $m^3 d^{-1}$					
		206.81	223.04	213.13	
Caudal de efluente clarificado, $m^3 d^{-1}$					
		18239.19	18222.96	18232.87	
Dosificación de la fuente de carbono externa, $gCOD d^{-1}$					
		0.00	0.00	0.00	
Caudal de agua residual influente, $m^3 d^{-1}$					
	R ₁	12208.04	0	18446	
	R ₂	6237.96	13523.47	0	
	R ₃	0	0	0	
	R ₄	0	4922.53	0	
	R ₅	0	0	0	
Caudal de reciclo interno, $m^3 d^{-1}$					
	R ₁	0	17876.52	23010.54	
	R ₂	0	7168.47	0	
	R ₃	0	0	0	
	R ₄	0	0	0	
	R ₅	0	0	0	
Conc. de S_{NH4} del efluente clarificado, $gN m^{-3}$ (limite 4)					
		3.96	1.99	3.04	
N_{TOT} del efluente clarificado, $g N m^{-3}$ (limite 18)					
		6.28	9.50	6.89	
BOD del efluente clarificado, $g m^{-3}$ (limite 10)					
		2.40	3.37	2.40	
COD del efluente clarificado, $g COD m^{-3}$ (limite 100)					
		50.97	51.53	50.91	
TSS del efluente clarificado, $g SS m^{-3}$ (limite 30)					
		16.72	17.27	16.71	
Costos operativos (Euros año⁻¹)					
	Energía de aireación	154389.30	142255.16	149160.86	
	Energía de bombeo	25132.17	62160.03	49853.2	
	Tratamiento de los barros	145850.86	142553.45	147965.59	
	Multas	194919.89	255936.46	206795.95	
	Dosificación de la fuente de C externa	0.0	0.0	0.0	
	Costo de operación Total Anual	520301.22	602905.10	553775.59	

La solución óptima para la configuración *PreDN* (fijando las correspondientes variables binarias en la superestructura) presenta una zona anóxica (Reactores 1 y 2) seguida de otra aeróbica con una intensidad de aireación decreciente, ya que los valores de k_{La} resultantes son 199, 167 y 160 d^{-1} para los compartimentos 3, 4 y 5, respectivamente. La corriente de agua residual afluyente es distribuida al segundo y cuarto compartimento con el 73 y 27 % del caudal volumétrico afluyente, respectivamente; mientras que el reciclo interno es fraccionado al primer compartimento (71 %) y al segundo (29 %). La corriente de reciclo externo no se distribuye, siendo alimentada al primer compartimento de reacción junto con una parte del reciclo interno.

La optimización de la configuración *PrePostDN* conduce a la misma solución que resulta de la superestructura que no posibilita la distribución de corrientes; esto es, presenta dos zonas anóxicas (reactores 1 y 5) y una aireada que exhibe un perfil de aireación decreciente a lo largo de la misma (k_{La} de 254, 225 y 32 d^{-1} para los compartimentos 2, 3 y 4, respectivamente). Respecto a las configuraciones de *PostDN* y *PreDN*, la mejora de sus costos operativos respecto al caso que no permite la posibilidad de distribución de corrientes es mínima para las especificaciones del agua residual de este caso de estudio, ya que las reducciones en el COTA son solamente del 1.6 y 0.5 %, respectivamente,

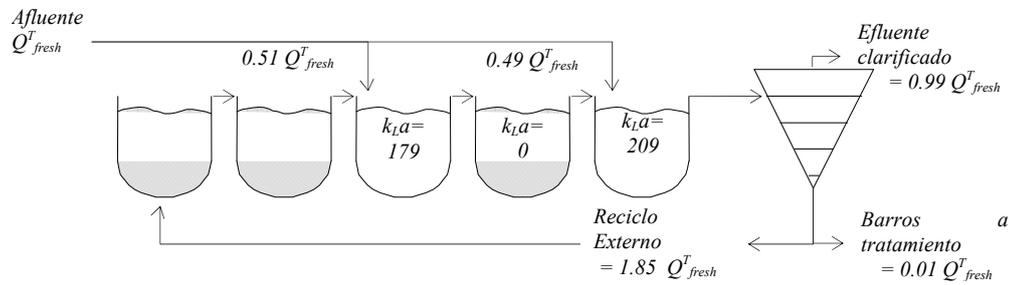
Ninguna configuración alternativa requiere la dosificación de carbono externo para cumplir con las exigencias impuestas para el nitrógeno; más aún, no se alcanza ningún valor de concentración límite permitida en el líquido tratado. Tales restricciones se satisfacen con cierta holgura.

Resumidamente, para el escenario que define el caso de estudio 1 (modelo de costos, especificaciones del agua residual, límites de descarga permitidos y equipos dados), el hecho de posibilitar la distribución de corrientes de proceso favorece, hasta cierta extensión, determinadas etapas biológicas y sus velocidades relativas, y mejora aspectos de flexibilidad del proceso. No obstante, esta mejora no se traduce en una reducción significativa de los costos operativos. En otras palabras, la resolución del modelo extendido para este caso de estudio permite ganar entendimiento de los intrincados compromisos presentes en el proceso pero no conducen a una solución notablemente mejor desde el punto de vista de la economía del proceso respecto al esquema que no contempla patrones de distribución. Es de esperar que una corriente de

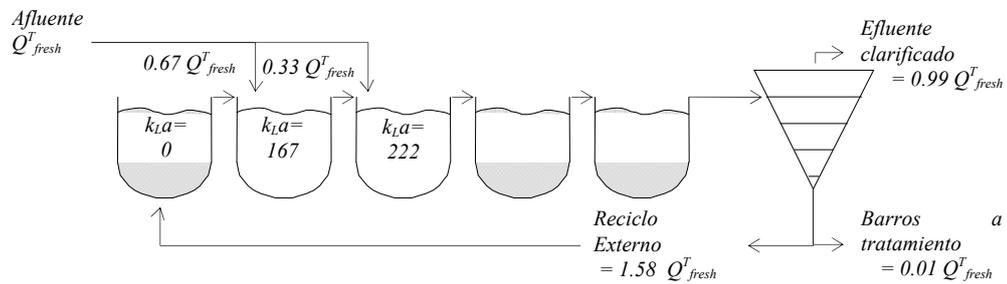
agua residual más difícil de tratar (en términos de las cantidades relativas de sus contaminantes) evidencie las ventajas y beneficios de otorgar al proceso más grados de libertad y, consecuentemente, de resolver los modelos derivados a partir de esas consideraciones.

Caso de estudio 2

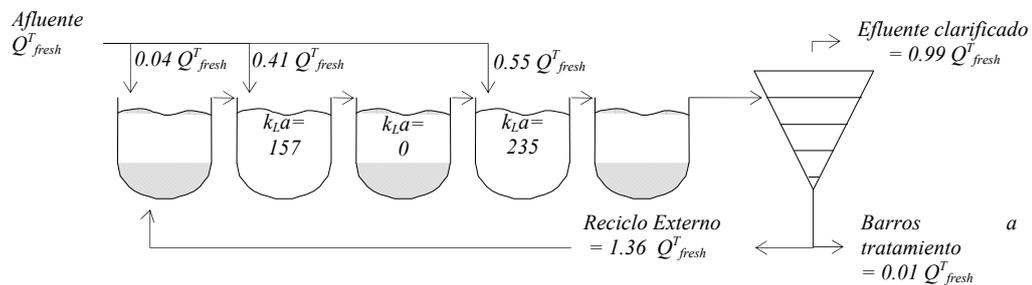
La Figura 3.6.c y la Tabla 3.5 muestran la configuración de planta y las condiciones de operación resultantes de la optimización de la superestructura propuesta para el caso de estudio 2.



a. Optimización de la configuración de *PreDN*, COTA: 565765.57



b. Optimización de la configuración de *PostDN* óptima, COTA: 570293.53



c. Solución óptima: Configuración de *PrePostDN*, COTA: 560940.06

Figura 3.6. Alternativas de proceso óptimas calculadas para las configuraciones con posibilidad de distribución de corrientes para el caso de estudio 2

Tabla 3.5. Soluciones óptima y alternativas para el caso de estudio 2 con posibilidad de distribución de corrientes

		Solución óptima	Conf. alternativas	
		<i>c.PrePostDN</i>	a. <i>PreDN</i>	b. <i>PostDN</i>
y_1 (PreDN)		0	1	0
y_2 (PostDN)		0	0	1
y_3 (PrePostDN)		1	0	0
Coef transferencia de oxígeno $k_L a$, d^{-1}				
	Reactor $i = 1$	0	0	0
	Reactor $i = 2$	157.71	0	167.39
	Reactor $i = 3$	0	178.87	222.26
	Reactor $i = 4$	235.38	0	0
	Reactor $i = 5$	0	208.70	0
Caudal de reciclo interno, $m^3 d^{-1}$				
		0	0	0
Caudal de reciclo externo, $m^3 d^{-1}$				
		25056.00	34168.22	29127.18
Caudal de barros para tratamiento, $m^3 d^{-1}$				
		124.76	133.08	130.32
Caudal de efluente clarificado, $m^3 d^{-1}$				
		18321.24	18312.92	18315.68
Dosificación de la fuente de carbono externa, $gCOD d^{-1}$				
		0.00	0.00	0.00
Caudal de agua residual influente, $m^3 d^{-1}$				
	R ₁	641.77	0	0
	R ₂	7587.55	0	12584.72
	R ₃	0	9311.89	5861.28
	R ₄	10216.68	0	0
	R ₅	0	9134.11	0
Conc. de S_{NH4} del efluente clarificado, $g N m^{-3}$ (limite 4)				
		4.00	4.00	4.00
N_{TOT} del efluente clarificado, $g N m^{-3}$ (limite 18)				
		14.02	13.93	14.33
BOD del efluente clarificado, $g m^{-3}$ (limite 10)				
		1.58	1.61	1.64
COD del efluente clarificado, $g COD m^{-3}$ (limite 100)				
		51.11	51.82	51.50
TSS del efluente clarificado, $g SS m^{-3}$ (limite 30)				
		16.58	17.18	16.91
Costos operativos (Euros año⁻¹)				
	Energía de aireación	110768.72	107700.13	108895.35
	Energía de bombeo	25180.76	34301.30	29257.50
	Tratamiento de los barros	87945.68	86866.33	88589.05
	Multas	337044.90	336897.82	343551.63
	Dosificación de la fuente de C externa	0.0	0.0	0.0
	Costo de operación Total Anual	560940.06	565765.57	570293.53

El esquema de *PrePostDN* con distribución del agua residual afluente, con un reactor intermedio anóxico, resulta la configuración óptima para el escenario investigado. Para ser estrictos, y tal como se discutió anteriormente, en este caso la

configuración *PrePostDN* original pierde ciertamente su “identidad”, degenerando en una configuración híbrida con tres regiones anóxicas separadas, en lugar de las dos que presenta la configuración *PrePostDN* convencional. El caudal de agua residual influente se distribuye alimentando aproximadamente el 4, 41 y 55 % al primer, segundo y cuarto compartimento, respectivamente. Esta solución óptima no presenta reciclo interno y la corriente de reciclo externo se alimenta completamente al primer reactor. La concentración de S_{NH_4} del efluente está en su valor límite permitido pero el N_{tot} no alcanza su valor límite. No se requiere la dosificación de fuente externa de carbono al proceso para mejorar la denitrificación.

La Tabla 3.5 y la Figura 3.6.a y b muestran las condiciones de operación óptimas para las configuraciones *PreDN* y *PostDN* que se obtienen fijando las correspondientes variables binarias en el modelo de MINLP. La optimización del esquema que resulta de fijar las variables binarias para recuperar la configuración de *PreDN* de la superestructura agrega un compartimento anóxico entre dos compartimentos aireados, además de la región anóxica que caracteriza este esquema. Por lo tanto, y análogamente al caso anterior, la configuración de *PreDN* original pierde, en cierta forma, su “identidad”. La corriente de agua residual afluyente se distribuye prácticamente en forma equitativa entre el tercer y quinto compartimento (51 y 49 %, respectivamente, del caudal total). La totalidad de la corriente de reciclo externo es alimentada al primer reactor, y el reciclo interno resulta cero. Por su parte, la optimización del esquema de *PostDN* (fijando las correspondientes variables binarias en la superestructura) resulta en un esquema en el que uno de los reactores que dispone de sistema de aireación (cuarto compartimento) opera como un compartimento anóxico; es decir, su valor óptimo de k_La es cero. A diferencia de los dos casos anteriores, aquí la configuración de *PostDN* mantiene su identidad, ya que no se incorpora una nueva región anóxica intermedia sino que se amplía una de las dos regiones anóxicas existentes. La corriente de agua residual afluyente se distribuye entre el segundo compartimento (67 % del caudal total) y el tercero (33 %). La concentración de S_{NH_4} en el efluente tratado alcanza su valor límite permitido, pero el contenido de N_{tot} está por debajo del límite. Los resultados de la optimización para estas configuraciones alternativas indican que no se requiere la dosificación de una fuente externa de carbono.

De estos resultados se observa que para todas las configuraciones es suficiente con aumentar la relación de volumen de la zona anóxica a la zona aireada para

satisfacer las restricciones del problema. Tal aumento favorece el proceso de eliminación de nitrógeno para este efluente, que muestra una relación C/N comparativamente más baja que para el caso de estudio 1. Una alternativa para favorecer tal eliminación es aumentar el reciclo interno, pero eso conllevaría un aumento del costo de bombeo, lo que es “desalentado” por la optimización, ya que conviene aumentar la proporción de la zona anóxica frente a la aireada, a costo cero.

Se obtienen mejoras en los valores de COTA predichos para las tres configuraciones para este caso de estudio respecto a las correspondientes a la superestructura anterior (sin distribución de corrientes). Estas reducciones alcanzan el 5.2, 4.8 y 3.7 % para las configuraciones de *PrePostDN*, *PreDN* y *PostDN*, respectivamente. A diferencia de lo concluido para el escaso de estudio 1, aquí se reflejan las ventajas y beneficios, tanto desde el punto de vista de la economía del proceso como de la performance de los procesos biológicos, al otorgar al proceso más grados de libertad y, consecuentemente, resolver los modelos derivados a partir de un modelo de superestructura más abarcativo en cuanto a posibilidad de interconexiones y distribución de corrientes.

3.4 Aspectos computacionales

El modelo propuesto fue implementado y resuelto usando la herramienta para modelado y optimización *General Algebraic Modeling System GAMS* (Brooke, et al., 1992). Se utilizó el algoritmo de aproximaciones exteriores con el de estrategias de relajaciones de igualdad. DICOPT se utilizó como resolvidor MINLP, el algoritmo de gradiente reducido generalizado CONOPT como resolvidor de los de NLP y el algoritmo BDMLP como resolvidor de MIP. Las soluciones óptimas se obtuvieron en un tiempo de CPU de 60 segundos aproximadamente en una Intel Pentium IV 2.40GHz con 248 MB de RAM. Para todos los casos se empleó la estrategia de múltiples puntos iniciales. Sin embargo, la solución óptima global no se puede garantizar debido a la presencia de no convexidades en el modelo matemático, como por ejemplo la presencia de términos bilineales.

3.5 Conclusiones

Se presentaron dos modelos de superestructura para síntesis óptima de plantas de tratamiento de aguas residuales por barros activados para remoción de nitrógeno y materia orgánica. La primera superestructura planteada incluye los tres esquemas de procesos más usados de plantas de tratamiento para remoción de nitrógeno y materia orgánica de aguas residuales, que son los esquemas de pre-denitrificación *PreDN*, post-denitrificación *PostDN* y pre-post-denitrificación *PrePostDN*. La segunda superestructura es una ampliación de la anterior en la que se posibilita la distribución de las corrientes principales del sistema. Para cada una de las superestructuras planteadas se analizaron dos casos de estudio, que difieren en las especificaciones del agua residual a tratar, fundamentalmente en la relación del contenido de carbono al de nitrógeno. El modelo resultó en un problema de programación del tipo MINLP.

Para el primer caso de estudio, con la mayor relación C/N, el esquema de *PostDN* resulta ser la configuración óptima para ambas superestructuras (esto es, sin posibilidad de distribución de corrientes y con posibilidad de distribución de corrientes) y se observa que en ambas soluciones uno de los reactores con posibilidad de aireación funciona como un reactor anóxico. En el caso de la superestructura con posibilidad de distribución de corrientes incorpora una región anóxica intermedia. Estrictamente, la configuración resultante es un sistema híbrido en el sentido que no responde a la configuración de *PostDN* convencional.

Para el escenario planteado en el caso de estudio 2 (menor relación C/N), el esquema de *PrePostDN* es la configuración óptima que resulta de ambas superestructuras, y se observa también que en ambas soluciones uno de los reactores con posibilidad de aireación funciona como un reactor anóxico. En el caso de la superestructura con posibilidad de distribución de corrientes el esquema de *PrePostDN* se degenera en una configuración híbrida con tres regiones anóxicas separadas (en lugar de las dos que presenta la configuración *PrePostDN* convencional).

La robustez y flexibilidad del modelo permiten fijar las variables binarias de manera de seleccionar una configuración en particular y encontrar las condiciones de operación óptimas para tales esquemas alternativos con el fin de comparar costos, condiciones de funcionamiento y eficiencia del proceso.

Como es de esperar, el costo de operación total anual mejora en cada caso cuando se posibilita la distribución de las corrientes del proceso a lo largo de los compartimentos de reacción, ya que se aumenta la flexibilidad del proceso, ésta última entendida como la posibilidad de evaluar más configuraciones candidatas. La mejora relativa depende fuertemente de las características (composición) del líquido a tratar, sobretodo cuando el agua residual afluente es deficitaria en la relación del contenido de materia orgánica a nitrógeno. Esta relación determina la eficiencia de eliminación de nitrógeno del medio que se puede alcanzar.

Los modelos desarrollados en este capítulo, tienen la ventaja respecto a los del capítulo precedente, en que permiten hallar mediante *una sola optimización* la configuración y variables operativas más convenientes para una corriente de agua residual de características determinadas y bajo cierto escenario que determine las restricciones y modelo de costos. Como en el capítulo anterior, debido a las no convexidades de los modelos matemáticos, la solución óptima global no puede ser garantizada, por tanto, para cada uno de los casos resueltos, las soluciones óptimas reportadas fueron obtenidas empleando la estrategia de múltiples puntos iniciales y presentando la mejor solución encontrada. Sin embargo, en los modelos NLP del capítulo anterior, se obtuvieron respuestas para un alto porcentaje de puntos iniciales propuestos, a diferencia de estos modelos con variables enteras (MINLP), en los que el porcentaje de puntos iniciales que arriban a una solución exitosamente disminuyó marcadamente (muchos puntos iniciales derivan en infactibilidad). Debido a esto, en los modelos que se desarrollaron y muestran posteriormente para este tipo de procesos, se ha intentado explotar esta característica de los modelos NLP.

CAPÍTULO 4. SÍNTESIS Y DISEÑO DE PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES PARA REMOCIÓN DE NITRÓGENO

CAPÍTULO 4. SÍNTESIS Y DISEÑO DE PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES PARA REMOCIÓN DE NITRÓGENO.....	123
4.1 Introducción.....	124
4.2 Definición del problema	127
4.3 Modelado	127
4.3.1 Superestructura planteada	127
4.3.2 Modelo de las unidades de proceso y equipamiento	129
4.3.3 Modelo de performance	131
4.3.3.1 Función objetivo. Criterio de performance	131
4.3.3.2 Restricciones de especificación y valores máximos	135
4.3.3.3 Casos de estudio	135
4.4 Resultados y discusiones	137
4.4.1 Caso de estudio I.....	137
4.4.1.1 Caso I.A.....	137
4.4.1.2 Caso I.B.....	139
4.4.1.3 Caso I.C.....	141
4.4.1.4 Distribución de costos para las soluciones del Escenario I	142
4.4.2 Estrategia de resolución	143
4.4.3 Caso de estudio II.....	147
4.4.3.1 Caso II.A	148
4.4.3.2 Caso II.B.....	149
4.4.3.3 Caso II.C.....	151
4.4.3.4 Distribución de costos para las soluciones del Escenario II	152
4.5 Conclusiones.....	153
4.6 Aspectos computacionales.....	157
4.7 Futuros trabajos	157

4.1 Introducción

En el presente capítulo se presenta la optimización simultánea de la configuración del proceso y dimensionamiento de equipos (síntesis y diseño del proceso) y las condiciones de operación de plantas de tratamiento de aguas residuales por barros activados para la remoción de nitrógeno, basados en un modelo de superestructura.

El modelo que se propone con este fin contempla hasta cinco compartimentos de reacción y un decantador secundario, y permite la distribución de flujo de las corrientes principales del proceso a lo largo de la zona de reacción, tales como los reciclos de licor nitrificado y de barros, y la corriente de agua residual afluyente.

El objetivo que se persigue es la minimización del costo total, considerando costos de inversión y operativos. La función objetivo que se pretende minimizar es el valor presente neto (valor actual neto) compuesto por los costos de inversión y costos de operación, verificando el cumplimiento de límites permitidos para la concentración de algunos contaminantes en el efluente. El costo de inversión computa el costo de los compartimentos de reacción, sistemas de aireación, decantador secundario, estación de bombeo del agua afluyente y de la bomba para el reciclo de los barros. El costo de operación resulta de considerar los mismos ítems de costos que en los modelos presentados en los capítulos 2 y 3; esto es, el costo de energía requerida para bombeo y aireación, de una fuente externa de carbono, de tratamiento de los barros en exceso, y de las multas correspondientes a las unidades de contaminación descargadas.

El modelo de barros activados ASM3 y el modelo propuesto por Takacs son seleccionados para la descripción de los procesos bioquímicos en los compartimentos de reacción y la sedimentación en el decantador secundario, respectivamente (ambos modelos fueron descritos en extenso en el Capítulo 2). Esto conduce a un sistema altamente no lineal con funciones no suaves. Debido a la naturaleza del problema, y explotando el alto porcentaje de puntos iniciales que arriban a una solución exitosamente en los problemas DNLP frente a los MINLP desarrollados previamente, se plantea en este caso, un modelo DNLP. Se analizan las soluciones obtenidas para capturar tendencias, desde el punto de vista del proceso propiamente dicho y del de su

economía, que resultan de considerar diferentes escenarios. Estas tendencias permiten, por un lado, ganar entendimiento del proceso global y de los compromisos existentes; y por otro lado, facilitar aspectos referidos a la resolución de(los) problema(s), tales como inicialización de modelos sucesivos más detallados. Al igual que en los capítulos anteriores y en lo que resta de la presente tesis, el modelo fue implementado y resuelto usando la herramienta para modelado y optimización *General Algebraic Modeling System GAMS* (Brooke, et al., 1992)

Los trabajos publicados previamente para la síntesis de sistemas de barros activados que agregan costos de inversión a los costos operativos y que usan modelos de la familia ASM de la *International Water Association -IWA-* y el modelo de la doble exponencial para la velocidad de sedimentación, han concentrado la investigación en obtener la mejor combinación de las variables de operación mediante la simulación de dos o tres diseños alternativos y escogiendo aquél que resulte con el costo más bajo (Gillot et al., 1999a; Gillot et al., 1999b; Espírito-Santo et al., 2005a; Espírito-Santo et al., 2005b; Coop, 2002). Gillot et al. (1999a) usan el valor presente neto VPN (o valor actual neto VAN), el cual computa costos de inversión y de operación de una planta de tratamiento de aguas residuales, para estandarizar el procedimiento de cálculo de costos, y utiliza dicho modelo de costos para la comparación de diferentes escenarios de tratamiento mediante simulación. En el trabajo de Gillot et al. (1999b) se hace referencia al desarrollo de un *software* para la evaluación económica de una planta de tratamiento durante la totalidad de su ciclo de vida. Espírito-Santo et al. (2005a) optimizan el diseño y las variables de operación de cuatro plantas de tratamiento, que consisten en un tanque de aireación (descrito con el modelo ASM1) y un decantador secundario (descrito con el modelo propuesto por la *Asociación Alemana de Ingeniería Sanitaria- Abwassertechnischen Vereinigung ATV* o modelo *ATV* (Ekama et al., 1997)) mediante la utilización de cuatro optimizadores diferentes, pero no abordan la síntesis del proceso.

De esta manera, puede reflejarse que el modelado riguroso para la síntesis, diseño y operación óptimos de plantas de tratamiento de aguas residuales por barros activados por programación matemática que contemple todas las posibilidades estructurales, esto es, integrando un conjunto de compartimentos de reacción, un decantador secundario modelado en forma rigurosa y las interconexiones de unidades para la minimización del *VAN*, es una tarea ciertamente dificultosa que no han sido abordada aún en forma completa y rigurosa en la literatura del área.

En los capítulos precedentes, si bien se contemplaron todas las posibilidades estructurales por medio del desarrollo de un modelo de superestructura, las variables de diseño correspondientes a la cantidad y tamaño de los equipos, como el volumen de los reactores y dimensiones del decantador, se suponían dados, y no se incluyeron en el modelo los costos de inversión.

Las funciones de costos de inversión rigurosas reportadas en la bibliografía para este tipo de procesos consideran, por lo general, funciones que son discontinuas, teniendo diferentes valores de parámetros de la función según el rango de la dimensión característica del equipo. Una forma de tratar este tipo de funciones es mediante la introducción de una variable entera (binaria). Finalmente, en un problema de diseño, las dimensiones del decantador secundario (profundidad y área transversal) y el punto de alimentación podrían ser variables de optimización. Para considerar este último aspecto, es decir, la localización óptima del punto de alimentación del decantador, podría introducirse en el modelo una variable binaria adicional.

El objetivo de este capítulo es abordar la optimización simultánea de la configuración del proceso y el dimensionamiento de los equipos (síntesis y diseño del proceso) y las condiciones de operación de sistemas de barros activados para la remoción de nitrógeno, basado en un modelo de superestructura del proceso, procurando optimizar una función de costos, satisfaciendo a la vez límites de descarga permitidos. En este caso se propone un modelo de tipo *DNLP* para obtener “buenas” soluciones e identificar tendencias para la construcción y resolución de modelos más rigurosos. El modelo de superestructura integra hasta cinco compartimentos de reacción y un decantador secundario, y permite la distribución de flujo de las corrientes principales del proceso, como se ha explicado en los capítulos anteriores. La función objetivo a minimizar es el Valor Actual (o Presente) Neto (VAN o VPN) que considera los costos de inversión y de operación.

Para todos los casos de estudio, una cadena de compartimentos de reacción seguidos de un decantador secundario son las unidades de proceso disponibles, cuyas dimensiones -representadas por variables continuas- deben ser optimizadas. La selección del tipo de compartimento (aireado o anóxico) se escoge a través de una variable continua: el flujo de aireación; más precisamente, a través del coeficiente de transferencia $k_L a$. Cuando una variable continua (el volumen de un compartimento de reacción, el área transversal del decantador, el flujo de aireación, flujo de agua residual fresca, reciclos o la dosificación de la fuente de carbono externa a cada compartimento

de reacción) toma el valor cero en una solución (o un valor despreciable que resulta de la conveniencia numérica en fijar cotas inferiores en ciertas variables críticas), la unidad correspondiente y/o la corriente son “removidas” de la superestructura; entendiéndose con esto que no forma parte de la configuración final del proceso (*flowsheet*), y no en el sentido que la representación matemática de esa unidad y/o corriente particular son eliminadas del modelo matemático.

4.2 Definición del problema

El problema que se aborda en este capítulo consiste en la optimización simultánea de la estructura del sistema (la configuración de proceso), el diseño (dimensiones de equipo, como son, el volumen de los compartimentos de reacción y el área transversal del decantador secundario) y las condiciones de operación (los caudales de aireación, reciclos y de agua residual afluyente a cada compartimento de reacción y la dosificación de la fuente de carbono externa) de una planta de tratamiento de aguas residuales por barros activados para la remoción de nitrógeno, con el objetivo de minimizar el valor actual neto (*VAN*), considerando: (1) especificaciones del agua residual afluyente (composición y caudal), (2) límites permitidos para contaminantes del efluente, (3) un modelo de superestructura del proceso con un máximo de cinco compartimentos de reacción y un decantador secundario, y (4) un modelo de costos que computa los costos de operación y de inversión.

Se propone un modelo *DNLP* y se soluciona para diversos casos de estudio.

4.3 Modelado

4.3.1 Superestructura planteada

La superestructura de proceso considerada se muestra en el Figura 4.1. Para facilitar la descripción del modelo, un esquema más detallado de la superestructura se presenta en la Figura 4.2.

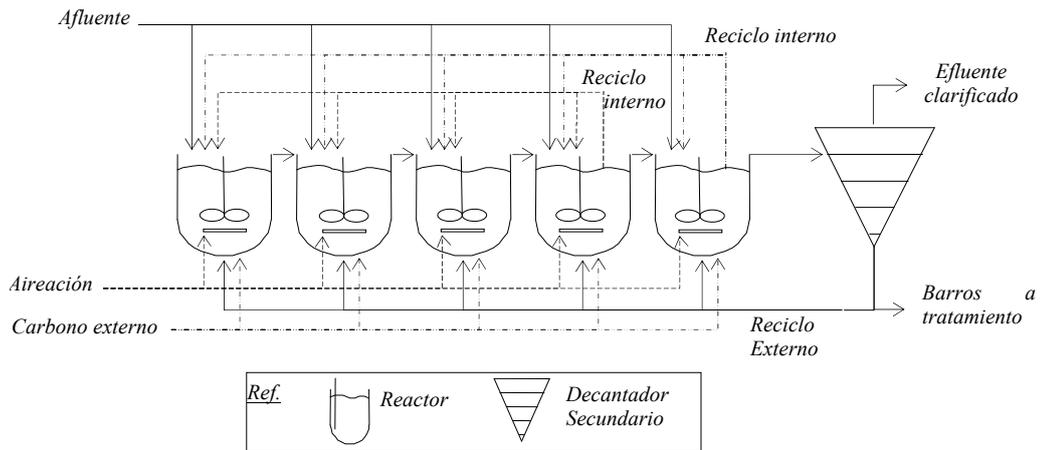


Figura 4.1. Superestructura de planta de tratamiento considerada

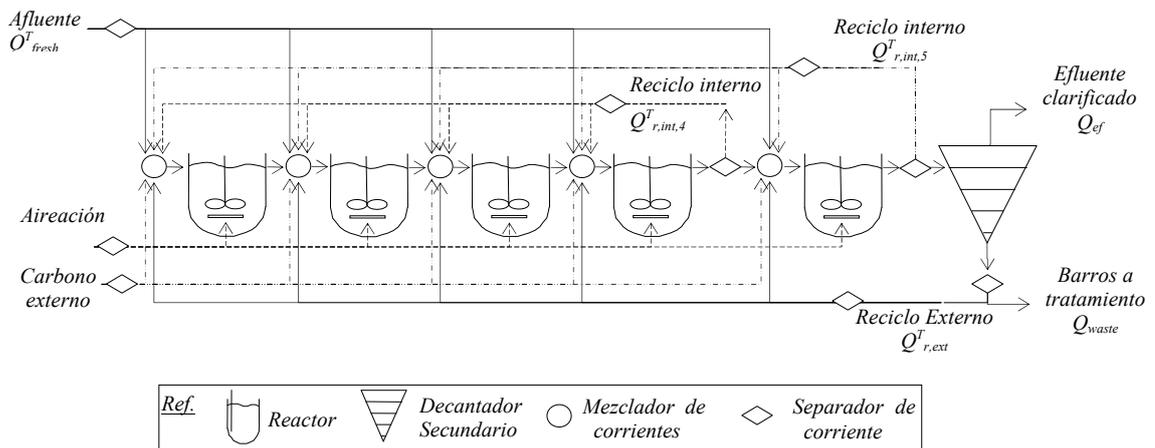


Figura 4.2. Representación de la superestructura

Básicamente, el modelo de superestructura de planta consta en un máximo de cinco compartimentos de reacción, un decantador secundario, bombas y mezcladores y separadores de corrientes. A diferencia del capítulo anterior, aquí las variables de diseño (el volumen de cada compartimento (V_i) y el área transversal del decantador secundario (A_{sett})) son también optimizadas, además de las variables de operación (los caudales de aireación y de las corrientes del proceso). El caudal de agua residual afluente (Q_{fresh}^T), las corrientes de reciclos (Q_r^T) y la dosificación de la fuente de carbono externa (u_{ECSD}^T) pueden ser alimentadas a uno o distribuidas a varios de los cinco compartimentos de reacción. La superestructura tiene dos tipos de corrientes de reciclo posibles, denominados reciclo interno (de nitratos) y externo (de barros). La corriente de reciclo externo ($Q_{r,ext}^T$) bombea una fracción de los barros sedimentados en

el decantador secundario a la zona de reacción. Los dos reciclos internos posibles (de nitratos) son $Q_{r,int,5}^T$ y $Q_{r,int,4}^T$. El primero, $Q_{r,int,5}^T$, recicla una fracción del licor que egresa del último compartimento de reacción a los precedentes, y $Q_{r,int,4}^T$ recicla una fracción del licor que egresa del cuarto compartimento a los precedentes, tal como se muestra en las figuras. Las variables que representan los volúmenes de los compartimento de reacción pueden tomar valores desde cero a un valor máximo dado (suficientemente grande). Si una variable de volumen toma el valor cero (o despreciable) en una solución, el compartimento correspondiente se elimina de la superestructura. Finalmente, los compartimentos de reacción pueden funcionar bajo condiciones anóxicas o condiciones aeróbicas, dependiendo del valor que tome la variable correspondiente al coeficiente de transferencia de oxígeno k_{La_i} , de dicho compartimento. Si el valor de la variable para k_{La_i} para un compartimento dado es cero, dicho reactor opera bajo condiciones anóxicas.

La preferencia por una configuración de planta dada sobre las demás depende de la superestructura planteada, los modelos usados y de los valores utilizados para sus parámetros (cinéticos y de costos), así como del caudal y composición del agua residual afluente y de las especificaciones del efluente, dando como resultado determinados *trade-offs* (compensaciones) entre los aspectos económicos y tecnológicos.

4.3.2 Modelo de las unidades de proceso y equipamiento

Para la formulación del modelo se utilizan las variables definidas en la sección 2.3.3 y algunas de las ecuaciones presentadas en los capítulos anteriores y se agregan otras que se mencionan seguidamente.

Los compartimentos de reacción se modelan como reactores de mezcla completa en estado estacionario (CSTR). Para el modelado de los procesos biológicos que ocurren en los reactores se emplea el modelo de barros activados ASM 3 (Gujer et al., 1999) con empleo de las variables para los componentes descritas en 2.3.1 y de las ecuaciones 2.1 a 2.12. Se usan los valores de los parámetros cinéticos del modelo interpolados a 15 °C (mostrados en el capítulo 2, Tabla 2.1), y los parámetros estequiométricos y de composición empleados son aquellos que se presentan como valores típicos para el modelo ASM3 en Gujer et al. (1999) (mostrados en el capítulo 2, Tabla 2.6).

El decantador secundario se modela, nuevamente aquí, como un tanque no reactivo de sedimentación subdividido en 10 capas, empleando el modelo de velocidad de sedimentación doble exponencial propuesta por Takács (1991). En consecuencia, también se emplean las ecuaciones 2.22 a 2.36. En este modelo se adopta una profundidad fija de 4 m y se asume que la alimentación al decantador se ubica en la sexta capa desde la base (a 2.2 m desde la base). El área transversal del decantador A_{sett} se deja como variable de optimización. De esta manera se mantiene una semejanza con el diseño típico práctico utilizado para este equipo y aconsejado en la literatura.

En este problema, a diferencia de los modelos anteriormente mostrados, los volúmenes de los compartimentos de reacción V_i son variables a optimizar, y deben satisfacer las restricciones siguientes:

$$V_i \leq V_{max}, \quad \forall i \quad (4.1)$$

donde V_{max} es una cota superior suficientemente grande para el volumen del reactor. Para evitar problemas numéricos (como la división por cero) se fijan cotas inferiores muy pequeñas para el volumen de los compartimentos de reacción ($V_i \geq V_{i,min}, \forall i$; con $V_{i,min} = 0.01 \text{ m}^3$); sin embargo, cuando un volumen de reacción V_i alcanza la cota inferior en una solución, es considerado como un compartimento de reacción de volumen cero, y por consiguiente es "eliminado" de la superestructura en la solución final.

Finalmente, las restricciones siguientes son consideradas para los coeficientes de transferencia de masa $k_L a_i$ en cada compartimento de reacción i :

$$k_L a_i \leq k_L a_{i,max}, \quad \forall i \quad (4.2)$$

donde $k_L a_{i,max}$ es un límite de operación máximo ($k_L a_{i,max} = 360 \text{ d}^{-1}$). Análogamente, para evitar problemas numéricos, se eligen para los coeficientes de transferencia de masa de oxígeno cotas inferiores muy pequeñas ($k_L a_i \geq k_L a_{i,min}, \forall i$; con $k_L a_{i,min} = 0.0001 \text{ d}^{-1}$); sin embargo, cuando una variable $k_L a_i$ alcanza la cota inferior, se considera cero, y por consiguiente, el compartimento de reacción correspondiente se asume como anóxico en la solución final.

Balances de masa

Se emplean las ecuaciones 2.71, 2.78 a 2.80 y 2.87 para considerar los distribuidores de las corrientes de agua residual y reciclos internos y externo, respectivamente y la 3.9 para el distribuidor de la corriente de carbono externo. Para el balance de masa en los reactores se emplean las ecuaciones 2.88 a 2.90 y para los separadores de corrientes restantes se emplean las ecuaciones 2.45 a 2.47; y la 2.50 para el balance total en el decantador. Para los balances de masa por componentes en reactores, mezcladores, separadores y decantador se usan las ecuaciones 2.51 y 2.52, 2.91 a 2.93 y 2.56 a 2.61, respectivamente.

4.3.3 Modelo de performance

4.3.3.1 Función objetivo. Criterio de performance

En trabajos anteriores sobre optimización de procesos de tratamiento de aguas residuales, el costo de planta total fue evaluado usando el Valor Actual Neto (*VAN*) o Valor Presente Neto (*VPN*) (Gillot et al., 1999.a y .b y Espírito-Santo et al., 2005.a y .b). Aquí, también se adopta el *VAN* como la función objetivo a minimizar. El costo total se calcula como la suma de los costos de inversión (CI^T) y de operación (CO^T):

$$VAN = CI^T + CO^T \quad (4.3)$$

$$CI^T = \sum_o CI_o \quad (4.4)$$

$$CO^T = \Gamma CO^{T,Annual} = \Gamma \sum_o CO_o^{Annual} \quad (4.5)$$

donde CI_o representa el costo de inversión del ítem o y CO_o^{Annual} el costo anual de operación del ítem o . $CO^{T,Annual}$ es el costo de operación total anual de la planta y en su cómputo se consideran los mismos ítems que en los capítulos 2 y 3, por lo tanto coincide con el COTA de los capítulos anteriores. O es el conjunto de los ítems tenidos en cuenta en los costos (operativos o de inversión), y Γ es el factor de actualización

usado para actualizar los costos operativos futuros a un valor presente. El término de actualización Γ se calcula:

$$\Gamma = \sum_{n=1}^N \frac{1}{(1+id)^n} = \frac{1-(1+id)^{-N}}{id} \quad (4.6)$$

donde id es la tasa de interés (el índice de descuento) y N es la vida útil de la planta de tratamiento. En este modelo se consideraron un índice de descuento id de 0.05 y una vida útil para la planta de tratamiento de 20 años.

Las ítems tenidos en cuenta para el costo de inversión son: el costo de los compartimentos de reacción (CI_t), de los sistemas de aireación (CI_a), del decantador secundario (CI_{sett}), de estación de bombeo del agua residual afluyente (CI_{ips}) y de la bomba de reciclo de barros (CI_{sr}). Las funciones de costo de inversión CI_o tienen la estructura básica $CI_o = b_o Z_o^{\delta_o}$, donde b_o y δ_o son parámetros de costo y Z_o es una dimensión característica del equipo; por ejemplo, para la inversión de los compartimentos de reacción se considera el volumen V_i de cada compartimento i y para los sistemas de aireación se usan las capacidades de oxigenación $CaOx_i$ ($CaOx_i = B k_L a_i V_i$) como dimensión característica. Para el decantador secundario se considera el área transversal A_{sett} , y se computan dos costos de inversión a saber, el de la construcción del tanque de decantación y el costo del sistema electromecánico correspondiente. Para el cálculo del costo de inversión de la estación de bombeo del agua residual afluyente, se consideran los costos relacionados a la construcción de la estructura de hormigón, de tornillos y de cribas, y la dimensión característica empleada es el flujo de agua residual afluyente (Q_{fresh}^T). Finalmente, el caudal de reciclo de barros ($Q_{r,ext}^T$) es usado como la dimensión característica para el costo de la bomba de reciclo de barros. El costo de inversión de la planta se calcula de la siguiente forma (Gillot et al., 1999a):

$$CI^T = CI_t + CI_a + CI_{sett} + CI_{ips} + CI_{sr} \quad (4.7)$$

donde,

$$CI_t = \left(\sum_{i=1}^5 b_t V_i^{\delta_t} \right) \quad (4.8)$$

$$CI_a = \left(\sum_{i=1}^5 b_a CaOx_i^{\delta_a} \right) \quad (4.9)$$

$$CI_{set} = b_{sett,1} A_{sett}^{\delta_{sett,1}} + b_{sett,2} A_{sett}^{\delta_{sett,2}} \quad (4.10)$$

$$CI_{ips} = b_{ips,1} Q_{fresh}^T \delta_{ips,1} + b_{ips,2} Q_{fresh}^T \delta_{ips,2} + b_{ips,3} Q_{fresh}^T \delta_{ips,3} \quad (4.11)$$

$$CI_{sr} = b_{sr} Q_{r,ext}^T \delta_{sr} \quad (4.12)$$

La Tabla 4.1 muestra los parámetros b y δ para las funciones de costo de inversión que fueron adoptadas del trabajo de Gillot et al., (1999b). Los autores también proponen un rango de aplicación para estas funciones de costo. Aquí estas funciones son consideradas válidas en todo el espacio de búsqueda definido por las restricciones del problema.

Las ítems tenidos en cuenta para el cálculo del costo de operación son los mismos que los mencionados anteriormente en los capítulos 2 y 3 y comprenden los costos de energía de aireación y bombeo, los costos relacionados a las multas por las unidades de contaminación descargadas con el efluente, el costo del tratamiento de los barros en exceso y el costo de la fuente de carbono externa adicionada.

Tabla 4.1. Parámetros b y α para las funciones de costo de inversión

b_t	10304	α_t	0.477
b_a	8590	α_a	0.433
$b_{sett,1}$	2630	$\alpha_{sett,1}$	0.678
$b_{sett,2}$	6338	$\alpha_{sett,2}$	0.325
$b_{ips,1}$	2334	$\alpha_{ips,1}$	0.637
$b_{ips,2}$	2123	$\alpha_{ips,2}$	0.540
$b_{ips,3}$	3090	$\alpha_{ips,3}$	0.349
b_{sr}	5038	α_{sr}	0.304

El costo de operación total se calcula:

$$CO^T = CO_a^T + CO_p^T + CO_{EQ}^T + CO_{SLDGD}^T + CO_{ECSD}^T \quad (4.13)$$

donde CO_o^T es el costo operativo del ítem o a lo largo de la vida útil de la planta, a su vez, $CO_o^T = \Gamma CO_o^{Annual}$. Con:

$$CO_a^T = \Gamma (\alpha_E E_a) \quad (4.14)$$

$$CO_p^T = \Gamma (\alpha_E E_p) \quad (4.15)$$

$$CO_{EQ}^T = \Gamma (\alpha_{EQ} EQ) \quad (4.16)$$

$$CO_{SLDGD}^T = \Gamma (\alpha_{SLDGD} u_{SLDGD} (Kg\ 1000^{-1} g^{-1})) \quad (4.17)$$

$$CO_{ECSD}^T = \Gamma (\alpha_{ECSD} u_{ECSD}^T (Kg\ 1000^{-1} g^{-1})) \quad (4.18)$$

Notar que cada uno de estos costos coinciden con los tenidos en cuenta en los modelos anteriores (ver capítulo 2, ecuación 2.94); así, E_p , EQ , u_{SLDGD} y u_{ECSD}^T son la demanda de energía para bombeo, el índice de calidad de efluente, el caudal másico de producción de barros destinados a tratamiento y el caudal másico de fuente de carbono externa dosificada, respectivamente; calculados como en los capítulos precedentes con las ecuaciones 2.95, 2.96, 2.100 y 3.9, respectivamente. Los costos unitarios de operación anual (coeficientes α) empleados son aquellos mostrados en la Tabla 2.8.

La expresión 2.21 no es válida para el cálculo de la energía destinada a aireación, ya que en este modelo los volúmenes de los reactores son variables de optimización. Para calcular la demanda de energía para aireación se propone la siguiente expresión (E_a en kWh d⁻¹):

$$E_a = 24 \sum_I \left(2,267 \cdot 10^{-7} \left(\frac{k_L a_i V_i}{24} \right)^2 + 5.612 \cdot 10^{-3} \left(\frac{k_L a_i V_i}{24} \right) \right) \quad (4.19)$$

4.3.3.2 Restricciones de especificación y valores máximos

Para las concentraciones de contaminantes del efluente se aplican las restricciones de valores límite o umbral presentados en la ecuación 2.101 y Tabla 2.11 del capítulo 2 y para los valores máximos de variables de operación se emplea la ecuación 2.103 considerando los ítems presentados en la Tabla 2.12.

4.3.3.3 Casos de estudio

El modelo *DNLP* resultante es usado para la síntesis y diseño óptimos, y la optimización de las variables de operación de plantas de tratamiento de aguas residuales.

Para mostrar las capacidades del modelo, principalmente su robustez y flexibilidad se emplearon tres especificaciones de agua residual afluente diferentes (Tabla 4.2). Para el caso de estudio A se usó el modelo de agua residual afluente propuesta originalmente por el grupo COST (la Cooperación europea en el campo de Investigación Técnica) en su protocolo de simulación para el modelo ASM1 modificado como se explicó en el capítulo 2 para hacerlo compatible con el modelo ASM3. Las otras dos especificaciones de aguas residuales empleadas son caracterizadas por una relación Carbono/Nitrógeno (C/N) más baja y más alta (casos B y C) comparadas con la primera. La proporción C/N se mide como relación entre la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) y el nitrógeno total Kjendahl (NTK) de las aguas residuales afluentes. Las diferentes proporciones C/N fueron obtenidas variando el contenido de X_S y S_S del afluente. Las especificaciones de las aguas residuales empleadas en los ejemplos se muestran en la Tabla 4.2 como A, B y C, respectivamente. El caudal de agua residual se fija en $18446 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$ para todos los casos de estudio en este capítulo.

Tabla 4.2. Especificaciones de las aguas residuales

<i>Componente</i>	<i>Valor</i>		
	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>
$S_I \text{ (gCOD m}^{-3}\text{)}$	30	30	30
$S_S \text{ (gCOD m}^{-3}\text{)}$	69.5	34.75	139
$X_I \text{ (gCOD m}^{-3}\text{)}$	51.2	51.2	51.2

X_S (gCOD m ⁻³)	202.32	134.88	303.48
X_H (gCOD m ⁻³)	28.17	28.17	28.17
X_A (gCOD m ⁻³)	0	0	0
X_{STO} (gCOD m ⁻³)	0	0	0
X_{SS} (gSS m ⁻³)	215.493	164.913	291.96
S_O (gCOD m ⁻³)	0	0	0
S_{NOX} (gN m ⁻³)	0	0	0
S_{N_2} (gN m ⁻³)	0	0	0
S_{NH} (gN m ⁻³)	36.425	36.425	36.425
S_{ALK} (gCOD m ⁻³)	7	7	7
BOD/TKN	3.79	2.69	5.33

Dos escenarios diferentes son seleccionados como casos de estudio. En el caso de estudio I, los volúmenes de los compartimentos de reacción y el área transversal del decantador son variables de optimización. En caso del estudio II, los volúmenes de los compartimentos de reacción se fijan en 1333 m³, y el área transversal del decantador secundario en 1500 m². Como se mencionó anteriormente en este capítulo, la profundidad del decantador se considera de 4 m en ambos casos de estudio.

Las soluciones óptimas resultantes para cada escenario I y II y para cada especificación de agua residual A, B, y C son comparadas y analizadas (soluciones I.A, I.B, I.C, II.A, II.B y II.C, respectivamente).

Dado que el caudal total de afluente está fijo para todos los casos de estudio en ambos escenarios, el costo de inversión de la estación de bombeo del afluente (ecuación 4.11) es un valor fijo.

Notar que el costo de inversión de los equipos no considera costo fijo, resultando proporcional a la dimensión característica (ver ecuaciones 4.8 a 4.12); de manera que si el valor de la dimensión característica es nulo o muy pequeño, el costo de inversión de la unidad o ítem correspondiente también lo será. En un modelo más riguroso de costos de inversión considerando costos fijos, se deberían introducir variables binarias, y aquellas soluciones con valores bajos de las dimensiones características que intervienen en los costos no se verían favorecidos, ya que el costo fijo de dicha unidad sería proporcionalmente más significativo en el costo de inversión total. En este contexto, el uso de estas funciones de costo simples, simplifican el modelo pero a la vez constituyen una debilidad del mismo.

4.4 Resultados y discusiones

4.4.1 Caso de estudio I

El modelo DNLP presentado se utiliza aquí para la síntesis y diseño óptimos, y la optimización de las variables de operación para un caudal de agua residual afluyente de $18446 \text{ m}^3\text{d}^{-1}$ y los datos de concentraciones mostrados en la Tabla 4.2 para los casos I.A, I.B y I.C.

Se utilizó la estrategia de múltiples puntos iniciales para la optimización y, como se esperaba, se encontraron para cada caso estudiado, un conjunto de soluciones óptimas. La configuración de planta resultado de la optimización del modelo de superestructura propuesto, que presenta el mejor valor de costo (VAN) para cada caso I.A, I.B y I.C se representan en las Figuras 4.3.a, b y c, respectivamente, llamado a estas soluciones I.A, I.B y I.C.

Las Tablas 4.3.a, b y c muestran los valores de los contaminantes en el efluente clarificado, los valores óptimos de las variables principales y los costos. En la Tabla 4.7 se presenta una lista detallada de los costos de estas soluciones óptimas.

4.4.1.1 Caso I.A

Como se muestra en la Figura 4.3.a, la solución I.A presenta tres compartimentos de reacción con volúmenes de 1083, 9096 y 6099 m^3 , respectivamente. Es decir, la configuración óptima incluye tres de los cinco compartimentos de reacción disponibles. Los volúmenes óptimos de los dos últimos compartimentos resultan cero (en realidad alcanzan la cota inferior 0.01 m^3) y no se representan en la figura.

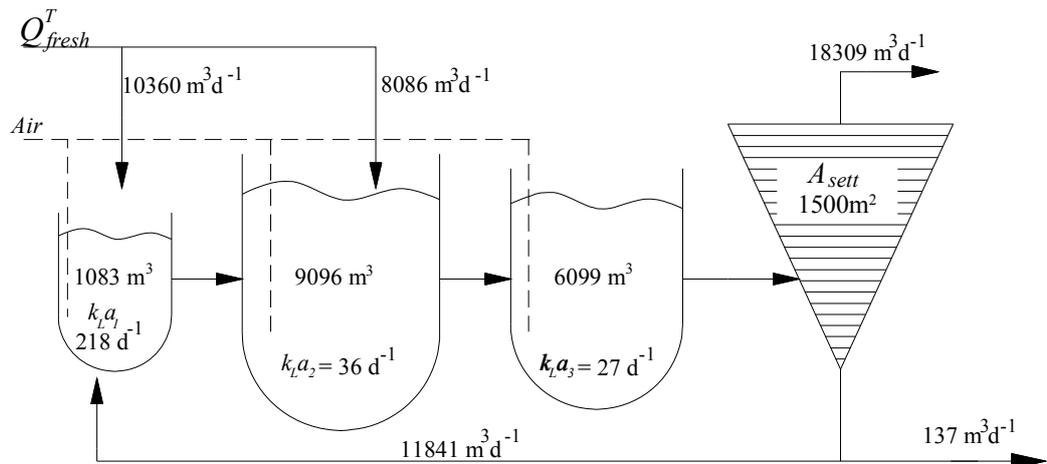


Figura 4.3.a. Solución I.A: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso I.A

Tabla 4.3.a. Solución I.A: Valores de las principales variables óptimas para el caso I.A

<i>Concentraciones de los Contaminantes del efluente</i>		<i>Costos</i>	
$S_{NH,ef}$, g N m ⁻³	0.69	CO ^{1,Annual}	386149
$N_{TOT,ef}$, g N m ⁻³	2.18	CI ^T	2662506
BOD_{ef} , g m ⁻³	1.41	VAN	7473917
COD_{ef} , g COD m ⁻³	48.18		
$X_{SS,ef}$, g SS m ⁻³	14.36		

Esta planta consiste en un primer compartimento pequeño, con aireación moderada, seguido por dos compartimentos más grandes, aireados ligeramente. Como consecuencia del gran volumen total empleado para el tratamiento ($V^T = (1083+9096+6099) \text{ m}^3 = 16278 \text{ m}^3$), la descarga de contaminantes en los cuerpos de agua receptores es baja, y lo que se aprecia en el bajo valor del índice EQ y su costo asociado (ver CO^T_{EQ} en la Tabla 4.7). Esta solución óptima considera distribución de agua residual afluyente: alrededor del 56 % del caudal de agua residual afluyente (10360 m^3) se alimenta al primer compartimento y el resto al segundo. La solución no posee distribución de reciclaje externo, carece de reciclajes internos y no se necesita la dosificación de la fuente externa de carbono. Como se puede ver en la Tabla 4.3.a, ninguno de los componentes del efluente alcanza el valor de su concentración umbral.

En los modelos desarrollados en capítulos 2 y 3, se consideró el tratamiento de un efluente de las mismas características que en este caso. Aquellos modelos optimizaban condiciones operativas para una planta que se suponía fija, para diferentes casos de posibilidades de distribución de las corrientes principales del proceso. La mejor solución obtenida para este efluente arrojaba un valor de $CO^{T,Annual}$ ($COTA$) de 520301.22 Euros anuales (solución de PostDN con distribución de corrientes, Figura 3.5.b). Comparando este resultado anterior, con el mostrado en la Tabla 4.3.a, se puede ver que el costo operativo disminuyó, en este último caso, en un 25.78 %. Sin embargo, el costo de inversión de una planta para dicha solución (según ecuación 4.7) sería de 2 398541.05 Euros, lo que daría un total de VAN (según ecuación 4.3) de 8881494.28. En términos de VAN la reducción, en esta nueva solución, es del 15.85 %.

4.4.1.2 Caso I.B

La relación C/N disminuye de 3.79 a 2.69 desde el afluente A al B, ya que disminuyen los niveles de X_S y S_S . La optimización del caso I.B da como resultado la solución representada en la Figura 4.3.b. La Tabla 4.3.b muestra los valores óptimos de las variables principales. Esta solución consiste en tres compartimentos de reacción con volúmenes de 946, 1247 y 22672 m³, respectivamente. Como en el caso anterior, los dos últimos compartimentos resultan con volumen cero. En esta configuración los dos primeros compartimentos funcionan aireados moderadamente, mientras el último resulta muy levemente aireado. Alrededor del 67 % del caudal de agua residual afluente (12427 m³) se alimenta al primer compartimento y el resto al segundo. La solución no presenta distribución de la corriente de reciclado externo, carece de reciclado interno y de dosificación de la fuente de carbono externa. Como se muestra en la Tabla 4.3.b, la concentración de ninguno de los componentes en la corriente de efluente clarificado está en su valor umbral; ni siquiera el $S_{NH,ef}$; a pesar del hecho de que la DBO es inferior que en el caso I.A.

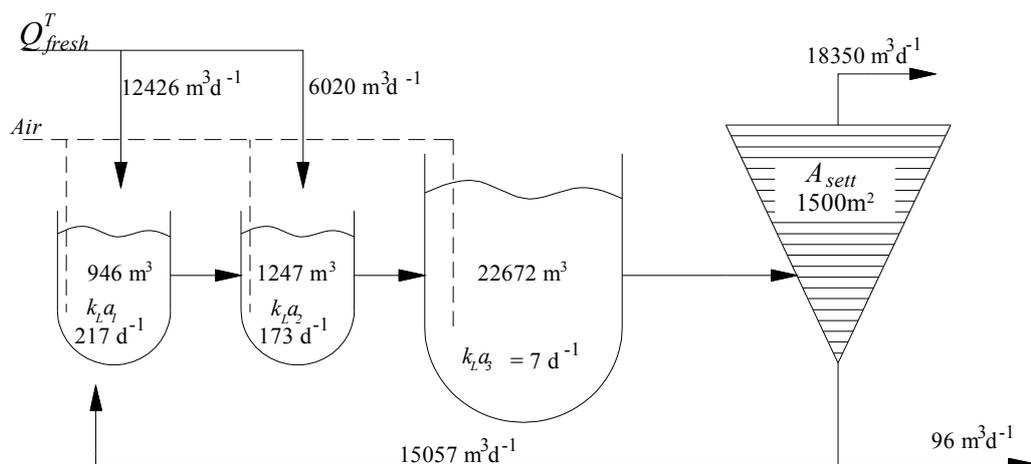


Figura 4.3.b. Solución I.B: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso I.B

Tabla 4.3.b. Solución I.B: Valores de las principales variables óptimas para el caso I.B

Concentraciones de los Contaminantes del efluente		Costos	
$S_{NH,ef}$, g N m ⁻³	1.94	CO ^T ,Annual	345130.02
$N_{TOT,ef}$, g N m ⁻³	3.82	CI ^T	2717580.57
BOD_{ef} , g m ⁻³	0.90	VAN	7017900.62
COD_{ef} , g COD m ⁻³	49.58		
$X_{SS,ef}$, g SS m ⁻³	15.15		

En este caso de estudio también resulta conveniente escoger una planta con volumen total de tratamiento grande ($V^T = 24865 \text{ m}^3$) y, como consecuencia, con costo de inversión elevado pero con inferiores costos operativos correspondientes a multas, y por consiguiente CO^T inferiores; que una planta pequeña y $S_{NH,ef}$ en su valor umbral (disminuyendo CI^T pero aumentando CO^T). La DBO del afluente en este caso es menor comparado al caso I.A y en consecuencia el VAN disminuye -6%- (ver la Tabla 4.7 para la comparación). Mientras el CI^T aumenta (2%), principalmente debido a un mayor volumen total de reacción (el CI^T_i aumenta el 4%), la disminución del CO^T es considerable (el 11%). El costo para la energía de aireación, CO^T_a , y para el tratamiento de los barros desechados, CO^T_{SLDG} , disminuyen en un 26 y 33 %, respectivamente, mientras las multas, CO^T_{EQ} , aumentan en un 28 %. El aumento de las multas, como consecuencia de una calidad de efluente inferior comparada a la del caso I.A (ya que las

concentraciones de $S_{NH,ef}$ y $N_{TOT,ef}$ son mayores), es probablemente debido a una relación C/N del afluente desfavorable desde un punto de vista de la eficacia de tratamiento. Las otras variaciones de costos son menos relevantes.

4.4.1.3 Caso I.C

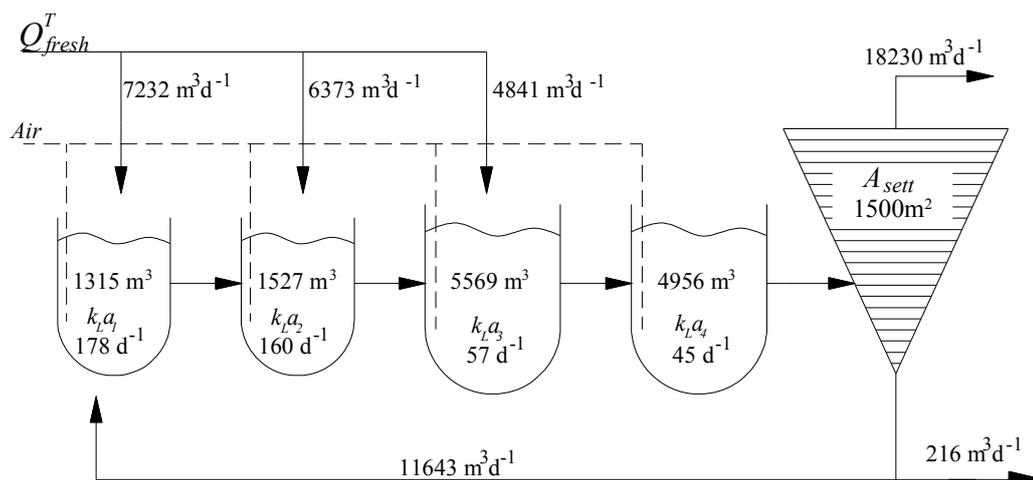


Figura 4.3.c. Solución I.C: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso I.C

Tabla 4.3.c. Solución I.C: Valores de las principales variables óptimas para el caso I.C

Concentraciones de los Contaminantes del efluente		Costos	
$S_{NH,ef}$, g N m ⁻³	0.38	CO ^{1,Annual}	501878.11
$N_{TOT,ef}$, g N m ⁻³	1.82	CI ^T	2864144.88
BOD_{ef} , g m ⁻³	1.92	VAN	9117546.13
COD_{ef} , g COD m ⁻³	47.77		
$X_{SS,ef}$, g SS m ⁻³	14.31		

La Figura 4.3.c y la Tabla 4.3.c muestran la configuración y las condiciones de operación de la planta para el caso I.C con el mínimo VAN encontrado mediante la optimización de la superestructura propuesta. La solución I.C consiste en cuatro compartimentos de reacción con los volúmenes de 1315, 1527, 5569 y 4956 m³, respectivamente. Aquí, el último compartimento resulta de volumen cero, y no se representa en la figura. Los cuatro compartimentos que constituyen la zona de reacción resultan aireados. Alrededor del 39 % del caudal de agua residual afluente (7232 m³) se

alimenta al primer compartimento, el 35 % al segundo y el 26 % al tercer compartimento. El reciclo externo no se distribuye y no son necesarios el reciclo interno ni la dosificación de la fuente externa de carbono. La concentración de ninguno de los contaminantes del efluente considerados está en su valor umbral.

El DBO del afluente es mayor a la del caso I.A, y el VAN aumenta para esta solución un 22 % comparada a la solución I.A. Los incrementos en el CI^T y CO^T son 8 y 30 %, respectivamente (ver la Tabla 4.7 para la comparación). La diferencia más importante reside en el costo de operación; por ejemplo el costo de la energía de aireación (CO_a^T) aumenta el 39 % y el costo de tratamiento de los barros (CO_{SLDGD}^T) aumenta el 58 %. Sin embargo, la calidad del efluente (EQ) alcanzado es mejor que el de la solución I.A (el CO_{EQ}^T disminuye en un 6 %). El principal incremento en el costo de inversión, CI^T , se debe al costo de los compartimentos de reacción (incremento del 8 % comparado con la solución I.A), en este caso cuatro compartimentos son necesarios en vez de tres; sin embargo, el volumen de reacción total ($V^T = 13367 \text{ m}^3$) disminuye, por lo que podemos concluir que la eficacia del tratamiento para esta relación C/N del afluente es mejor que para el caso anterior.

4.4.1.4 Distribución de costos para las soluciones del Escenario I

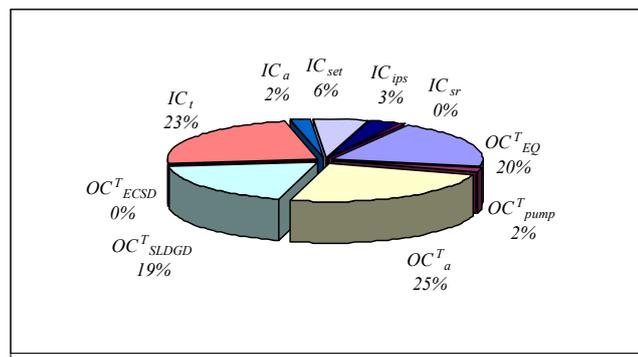


Figura 4.4. Distribución de costos para las soluciones del caso de estudio I

La distribución promedio de costos para las soluciones I.A, I.B y I.C se muestra en la Figura 4.4. Alrededor del 65 ± 4 % del VAN corresponde a los costos operativos y el 35 ± 4 % a los de inversión. En orden de importancia cada costo contribuye al VAN de la siguiente forma: el costo de la energía de aireación representa el 24 ± 4 %, el costo de inversión de los tanques el 23 ± 3 %, el costo de las multas por las unidades de

contaminación descargadas con el efluente representan el $20\pm 6\%$, el del tratamiento de los barros el $19\pm 5\%$, la inversión del decantador constituye el $6\pm 1\%$, de la estación de bombeo del afluente el $3\pm 0.5\%$, la inversión de los sistemas de aireación el $2\pm 0.2\%$, de la energía de bombeo el $2\pm 0.5\%$, y finalmente la inversión de la bomba de recirculación de barros representa el $0.5\pm 0.1\%$ del total.

4.4.2 Estrategia de resolución

Debido a la característica altamente combinatoria del problema, dado al gran número de alternativas estructurales al permitir recirculación y partición de corrientes, y la fuerte no linealidad del modelo, es esperable la presencia de soluciones múltiples según sea el punto de inicialización o de partida del algoritmo utilizado.

En efecto, para todos los casos de estudio se encontraron varias soluciones óptimas locales según el punto inicial usado para la optimización. Para analizar este comportamiento se adoptó una estrategia de múltiples puntos de inicialización, que fueron generados combinando varios valores iniciales para algunas de las variables críticas, como por ejemplo valores de V_i^{inicial} en el rango de 1000 a 5000 m^3 , y usando diferentes patrones de aireación a lo largo de la zona de reacción (por ejemplo perfiles de aireación crecientes o decrecientes, o que alternen zonas aeróbicas con anóxicas). Otros puntos iniciales fueron generados solucionando el problema para diferentes funciones objetivo "secundarias" (como la minimización de los costos de operación o de inversión), y luego utilizando la función objetivo real.

Utilizando los múltiples puntos iniciales así generados se encontraron varias soluciones "matemáticas" óptimas locales para cada caso de estudio. Una "solución matemática" se refiere aquí a un vector solución único, cuyas componentes son los valores de las variables de optimización. Como consecuencia del modelo adoptado para la representación de la superestructura y la formulación matemática del modelo, diferentes soluciones matemáticas (con idéntico valor para la función objetivo) pueden representar la misma "solución real o física", ya que resultan equivalentes en cuanto a que representan una única alternativa estructural de la planta real (flowsheet) con condiciones de operación únicas.

Como ejemplo, la Tabla 4.4 muestra tres soluciones matemáticas diferentes pero físicamente equivalentes para el caso de estudio I.A (soluciones $I.A^{eq1}$, $I.A^{eq2}$ y $I.A^{eq3}$).

Estas tres diferentes soluciones matemáticas representan la misma "solución real o física" llamada anteriormente solución I.A, mostrada previamente.

En la Tabla 4.4 se puede ver que estas soluciones representan el mismo *flowsheet* final y conducen al mismo diseño y tamaño de planta que corresponde al mostrado en la Figura 4.3.a. Las concentraciones de los contaminantes del efluente y costos son también los mismos (Tablas 4.3.a y 4.7). Expresamente, los compartimentos de reacción que resultan de volumen cero para la solución IA^{eq1} son los dos últimos, para la solución IA^{eq2} resultan de volumen nulo el primero y el segundo, y para la solución IA^{eq3} el primero y el cuarto. Los compartimentos de volúmenes no nulos son colocados en la misma secuencia después de la supresión de aquellos de volumen cero, y tienen idénticos valores de $k_L a$ y el mismo patrón de distribución de agua residual afluente. El conjunto de todas estas soluciones representan una planta que consiste en tres compartimentos de reacción de 1083, 9096 y 6099 m³, con valores de $k_L a$ de 218, 36 y 27 d⁻¹, respectivamente. El caudal de agua residual afluente es alimentado al primer y segundo reactor (59 y 41 %, respectivamente). Igualmente, debido a que en la solución IA^{eq2} los dos primeros compartimentos de reacción resultan de volumen cero, la suma de los caudales ($Q_{fresh,i}$) al primer, segundo y tercer reactores se alimenta al primer reactor no nulo (el tercer compartimento de reacción), que es el primero en la configuración "real" de planta de tratamiento solución.

Tabla 4.4. Tres soluciones equivalentes para la "solución real o física" I.A

R_i	Solución IA^{eq1}			Solución IA^{eq2}			Solución IA^{eq3}		
	V_i, m^3	$k_L a_i, d^{-1}$	$Q_{fresh,i}, m^3 d^{-1}$	V_i, m^3	$k_L a_i, d^{-1}$	$Q_{fresh,i}, m^3 d^{-1}$	V_i, m^3	$k_L a_i, d^{-1}$	$Q_{fresh,i}, m^3 d^{-1}$
1	1083	218	10360	0	0	5690	0	0	10360
2	9096	36	8086	0	0	4009	1083	218	0
3	6099	27	0	1083	218	661	9096	36	8086
4	0	0	0	9096	36	8086	0	0	0
5	0	0	0	6099	27	0	6099	27	0

Una vez representados cada conjunto de "soluciones matemáticas" para identificar las "soluciones reales", se concluye que existen varias soluciones óptimas locales para cada caso de estudio. En cada una de estas soluciones, obviamente el *flowsheet* final, el tamaño de los equipos y/o el valor de las variables de operación son

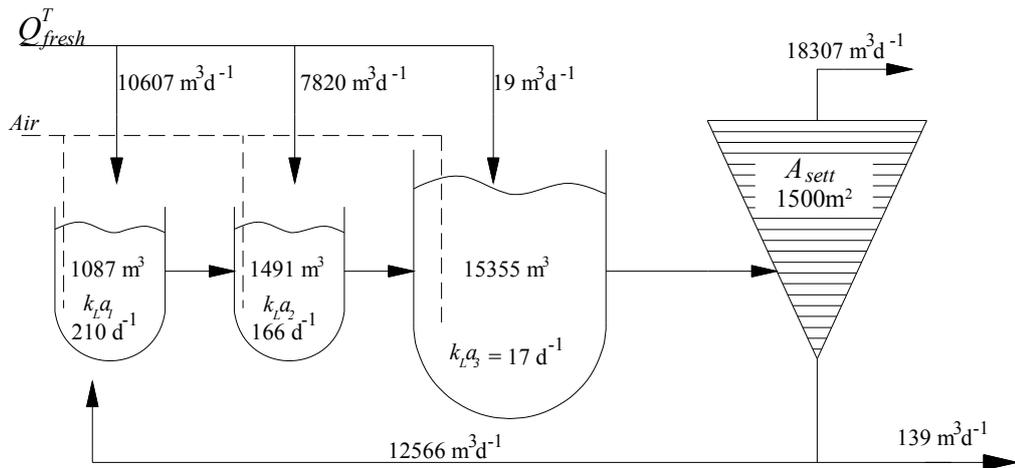
diferentes. Los valores de costo VAN correspondientes pueden ser muy similares o bastante diferentes.

En los puntos anteriores, las soluciones que se presentaron en esta sección son aquellas con VAN más bajo para cada caso de estudio. Para ejemplificar, dos de las soluciones alternativas encontradas para el caso de estudio I.A se muestran en la Figura 4.5 y Tabla 4.5 (soluciones $I.A^{alt1}$ y $I.A^{alt2}$). En otras palabras, para el caso I.A, se muestran tres soluciones reales óptimos locales: las soluciones I.A (Figura 4.3.a y Tabla 4.3.a), $I.A^{alt1}$ y $I.A^{alt2}$ (Figura 4.5 y Tabla 4.5). Note que estas soluciones o configuraciones de planta presentan VAN muy similares (difieren en menos del 1 %). La Tabla 4.7 también muestra los costos detallados para las soluciones $I.A^{alt1}$ y $I.A^{alt2}$.

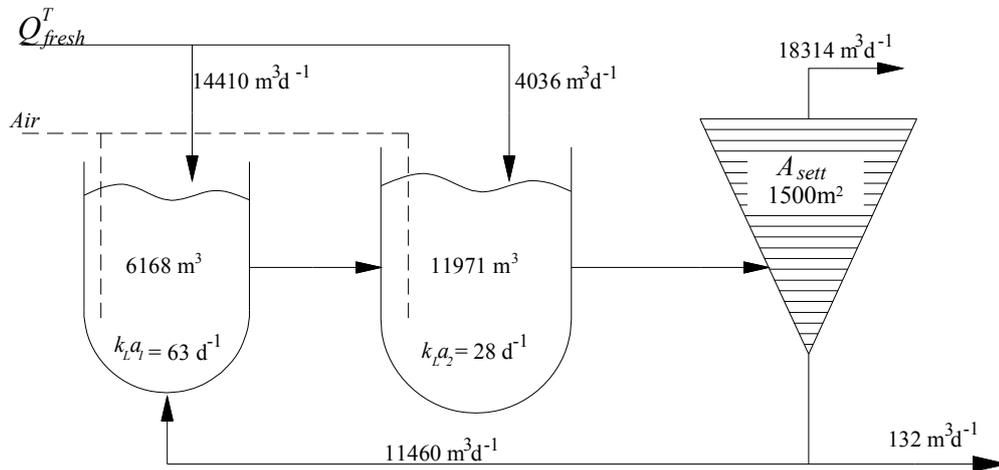
La Figura 4.5.a muestra la solución $I.A^{alt1}$, y se puede apreciar su similitud con la solución I.A (Figura 4.3.a). Ambas tienen un primer reactor moderadamente aireado con un volumen de 1085 m^3 , seguido de dos reactores aireados levemente cuyos volúmenes suman un total de alrededor de 16000 m^3 . El VAN es casi el mismo debido a un trade-off (compensaciones) entre el CO^T -que aumenta 2%- y el CI^T - que disminuye 3.5 %-. Principalmente, los aumentos en el CO^T se deben a las multas (el CO^T_{EQ} aumenta el 6.3%) y las disminuciones del CI^T se debe al costo de inversión de los tanques de reacción (el CI_t disminuye el 5.5 %).

Otras soluciones alternativas que presentaban las mismas características que las soluciones $I.A^{alt1}$ y I.A: un primer compartimento moderadamente aireado de 1085 m^3 seguido de dos reactores menos aireados que sumaban un volumen de alrededor 16000 m^3 , también fueron encontradas para este caso.

La solución $I.A^{alt2}$ consiste en una planta conformada por dos reactores aireados con distribución del afluente. El VAN aumenta sólo el 0.86 %, con un aumento del CO^T del 6 % y disminución del CI^T del 8 %, respecto a la solución I.A. Los aumentos del CO^T se deben principalmente a un incremento en el costo de la energía para aireación (el CO^T_a aumenta el 11%), y la disminución del CI^T principalmente es atribuida a la disminución del costo de los tanques de reacción (el CI_t disminuye el 10%).



(a)



(b)

Figura 4.5. Dos configuraciones alternativas para el caso de estudio I.A- soluciones IA^{alt1} y IA^{alt2}

Tabla 4.5. Valores óptimos de las variables principales para las Soluciones IA^{alt1} y IA^{alt2}

IA^{alt1}		IA^{alt2}	
Conc. cont. efluente	Costos	Conc. cont. efluente	Costos
$S_{NH,ef}$ g N m ⁻³	0.87 CO ^{T,Annual} 394016.4	$S_{NH,ef}$ g N m ⁻³	1.11 CO ^{T,Annual} 407977.5
$N_{TOT,ef}$ g N m ⁻³	2.53 CI ^T 2570061.6	$N_{TOT,ef}$ g N m ⁻³	2.69 CI ^T 2455421.7
BOD_{ef} g m ⁻³	1.45 VAN 7479505.6	BOD_{ef} g m ⁻³	1.33 VAN 7538821.5
COD_{ef} g COD m ⁻³	48.44	COD_{ef} g COD m ⁻³	48.11
$X_{SS,ef}$ g SS m ⁻³	14.56	$X_{SS,ef}$ g SS m ⁻³	14.24

Es interesante notar que de los 41 puntos iniciales utilizados para la resolución del caso de estudio I.A, 34 resultaron factibles (y 7 puntos iniciales resultaron

infactibles). De los 34 puntos iniciales que resultaron factibles, se contaron 29 "soluciones matemáticas" diferentes. No obstante, ellas representan 6 "soluciones reales o físicas" (configuraciones de plantas) distintas. Doce de las 29 "soluciones matemáticas" diferentes representan "la solución real o física" presentada como solución I.A, que muestra el VAN más bajo.

El problema planteado y la estrategia de resolución de múltiples puntos iniciales propuesta, mostraron robustez y flexibilidad ya que logran converger y resolver los problemas abordados; mas aún, permiten obtener también un conjunto de soluciones alternativas. De esta manera, es posible seleccionar una solución óptima local conveniente entre todas las encontradas a partir de la minimización del VAN, considerando otros aspectos (recordar que las condiciones operativas y estructurales de cada solución pueden ser bastante diferentes) que no han sido tenidos en cuenta en el modelo. En otras palabras, este aspecto resulta conveniente para el diseñador ya que puede recopilar información sobre las características comunes de las soluciones localmente óptimas; y/o conocer las estructuras o condiciones de funcionamiento diferentes que tienen costos similares y permite la elección posterior de alguna de las alternativas según varios aspectos que son difíciles de introducir simultáneamente en el modelo DNLP, como la flexibilidad (considerando tendencias y predicciones de futuras exigencias), la confiabilidad (eligiendo la alternativa de riesgo mínimo de fracaso debido a los complejos sistemas de tratamiento) y controlabilidad, entre otros.

4.4.3 Caso de estudio II

Aquí, el modelo de DNLP se resuelve para la optimización de las variables de operación asumiendo que los compartimentos de reacción y el decantador secundario están dados (lo que fija los volúmenes de los reactores y el área transversal del decantador en el modelo), para los tres casos de especificaciones de aguas residuales mostrados en la Tabla 4.2.

Los volúmenes de los compartimentos se fijan en 1333 m^3 y el área transversal del decantador secundario en 1500 m^2 . El caudal de agua residual afluente se fija en $18446 \text{ m}^3 \text{d}^{-1}$ como en el caso I. Así, se optimizan tres casos, llamados casos II.A, II.B y II.C. A pesar de que los volúmenes de los compartimentos de reacción y el área

transversal del decantador secundario están fijos, el resto de las variables son resultado de la optimización.

Como en los casos anteriores se empleó la estrategia de múltiples puntos iniciales lo que condujo a un conjunto de soluciones diferentes para cada caso de estudio. Las configuraciones de planta que resultaron de la optimización del modelo propuesto y que presentaron los mejores valores de VAN para los casos II.A, II.B y II.C se representan en las Figuras 4.6.a, b y c, respectivamente; y se las llama por simplicidad soluciones II.A, II.B y II.C.

Las Tablas 4.6.a, b y c muestran los valores de los contaminantes en el efluente, y los valores óptimos de las variables principales y los costos. La Tabla 4.7 muestra una lista detallada de los costos para cada caso de estudio. Como se esperaba en este caso, al estar fijos los volúmenes de los compartimentos de reacción y el área transversal del decantador secundario la región de búsqueda de soluciones factibles se ve reducida comparado a los casos I.A, I.B, y I.C y, por consiguiente, los valores de VAN son comparativamente superiores que en los casos respectivos anteriores.

4.4.3.1 Caso II.A

La Figura 4.6.a muestra la solución óptima para el caso II.A. Se observa una distribución decreciente del afluente a los tres primeros reactores (alrededor del 44% del caudal es alimentado al primer compartimento, el 36% al segundo y el 20 % al tercero). El primer, segundo y cuarto compartimentos resultan aeróbicos, mientras el tercero y quinto resultan anóxicos. Es decir, esta solución presenta zonas aireadas alternadas con zonas anóxicas. No se produce distribución del reciclaje externo, y no son necesarios reciclajes internos ni la dosificación de fuente externa de carbono al proceso. Como se puede ver en la Tabla 4.6.a, ninguno de los contaminantes del efluente alcanza su valor umbral. Como se esperaba, el VAN aumenta el 15 % comparado al caso I.A, con un aumento del 26 % en el CO^T y una disminución del 6 % en el CI^T (ver Tabla 4.7). El incremento principal se observa en el costo de las multas CO_{EQ}^T (71%), ya que la calidad del efluente es baja comparada a la solución del caso I.A. La variación de costos para los ítems restantes en orden decreciente de importancia o impacto en el VAN consiste en: un incremento del 22% en el costo del tratamiento de barros en exceso, una disminución del 12% en el costo de energía de aireación y del 9% en el costo de inversión de los tanques de reacción y finalmente un incremento del 93% en el

costo de la energía de bombeo. La variación de costos para los otros ítems es irrelevante.

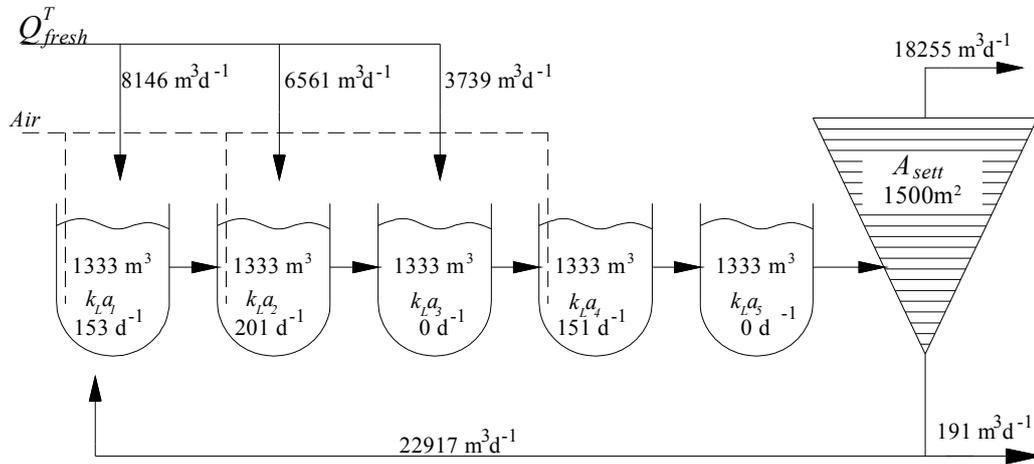


Figura 4.6.a. Solución II.A: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso II.A

Tabla 4.6.a. Solución II.A: Valores de las principales variables óptimas para el caso II.A

<i>Concentraciones de Contaminantes del efluente</i>		<i>Costos</i>	
$S_{NH,ef}$ g N m ⁻³	3.59	CO ^{1,Annual}	485265.65
$N_{TOT,ef}$ g N m ⁻³	6.22	CI ¹	2512861.77
BOD_{ef} g m ⁻³	2.18	VAN	8559271.77
COD_{ef} g COD m ⁻³	50.55		
$X_{SS,ef}$ g SS m ⁻³	16.37		

4.4.3.2 Caso II.B

La optimización del caso II.B conduce a la solución II.B representada en la Figura 4.6.b. La solución presenta distribución del afluente: alrededor del 55 % del agua residual afluente se alimenta al primer compartimento y el resto al tercero. El primer y cuarto compartimentos de reacción funcionan como reactores aireados y los otros tres como anóxicos; similarmente a la solución anterior se evidencian zonas aireadas alternadas con zonas anóxicas. Esta solución tampoco distribuye la corriente de reciclaje externo, carece de reciclaje interno y no necesita la dosificación de fuente externa de

carbono al proceso. Como se muestra en la Tabla 4.6.b, la concentración $S_{NH,ef}$ está en su valor umbral. Como la relación C/N del afluente disminuye respecto al afluente A, debido a niveles más bajos de X_S y S_S , el proceso de denitrificación es limitado.

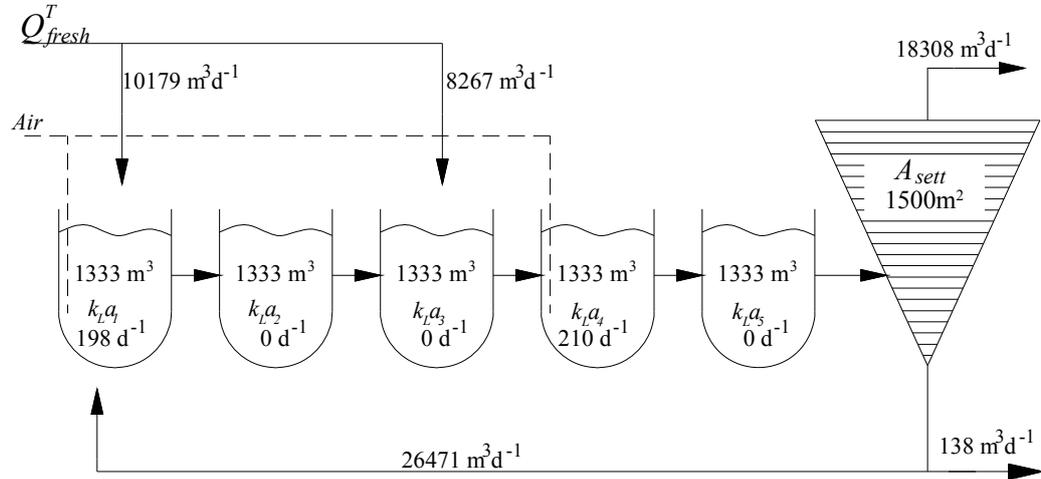


Figura 4.6.b. Solución II.B: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso II.B

Tabla 4.6.b. Solución II.B: Valores de las principales variables óptimas para el caso II.B

Concentraciones de los Contaminantes del efluente		Costos	
$S_{NH,ef}$, g N m ⁻³	4	CO ^{1,Annual}	513409.46
$N_{TOT,ef}$, g N m ⁻³	10.85	CI ^T	2469361.72
BOD_{ef} , g m ⁻³	1.71	VAN	8866443.59
COD_{ef} , g COD m ⁻³	51.15		
$X_{SS,ef}$, g SS m ⁻³	16.71		

Comparando esta solución con la solución I.B, el VAN aumenta el 26 %, el CO^T aumenta el 49% y el CI^T disminuye el 9%. El incremento principal de los costos se observa en las multas CO_{EQ}^T (93%) mientras el incremento del costo para tratar los barros en exceso es del 27%, el decremento de la inversión en tanques es del 12%; finalmente, los incrementos para la energía de bombeo es del 76%, y para la energía de aireación del 2% (en orden de la importancia).

A pesar de la reducción del contenido de X_S y S_S del afluente en este caso comparado al caso II.A, el VAN aumenta el 4%, el CO^T aumenta el 6% y CI^T disminuye el 2% respecto a la solución II.A. Este hecho puede ser explicado por la

desfavorable relación C/N desde un punto de vista de la eficiencia del tratamiento. El incremento principal se observa en las multas CO_{EQ}^T (44%) pero los gastos del tratamiento de los barros, de la energía para aireación y la inversión de los tanques disminuyen en 30, 15 y el 27%, respectivamente.

Los resultados de otros casos de estudio cuyos resultados no se presentan aquí, se observó que variando el contenido de X_S y S_S del afluente (y por consiguiente la relación C/N), y manteniendo constante el resto de las concentraciones de los componentes del afluente, para el caso de estudio II en el cual los volúmenes de reacción y el área del sedimentador están fijos en el modelo, el VAN presenta un mínimo entre la relación C/N de las aguas residuales A y B.

4.4.3.3 Caso II.C

Como se muestra en la Figura 4.6.c y la Tabla 4.6.c, la solución II.C tiene distribución decreciente del afluente (alrededor del 41, 26, 30 y el 3% del caudal, respectivamente) a los cuatro primeros compartimentos que son los que operan bajo condiciones aerobias. En esta solución tampoco se distribuye la corriente de reciclo externo, ni son necesarios el reciclo interno ni la dosificación de la fuente externa de carbono al proceso. La concentración de ninguno de los contaminantes del efluente alcanza su valor umbral.

Como se esperaba, el VAN aumenta el 9% comparado al de la solución I.C, los costos de operación aumentan el 17% y el costo de inversión disminuye el 10%. El incremento más importante se observa en las multas (58%) debido a una calidad de efluente deteriorada. El costo del tratamiento de los barros en exceso también aumenta (20%), pero el costo de energía para aireación disminuye (11%) comparando con la solución I.C. El costo de inversión de los tanques disminuye un 15 %, y el resto de las variaciones de costo son menos relevantes sobre el VAN.

Respecto a la solución II.A, el VAN, el CO^T y el CI^T aumentan 16, 21 y el 2%, respectivamente. Los incrementos principales en el CO^T son los correspondientes al tratamiento de los barros en exceso (56 %) y a la energía de aireación (40%). A pesar de que el DBO del afluente es mayor que en caso de I.A, las multas por los contaminantes descargados disminuye (13%), como consecuencia de una relación C/N más conveniente desde un punto de vista de la eficacia del tratamiento. El incremento

principal del CI^T se debe al incremento de los costos de los sistemas de aireación (36%). Las variaciones de costos restantes tienen menos impacto sobre el VAN.

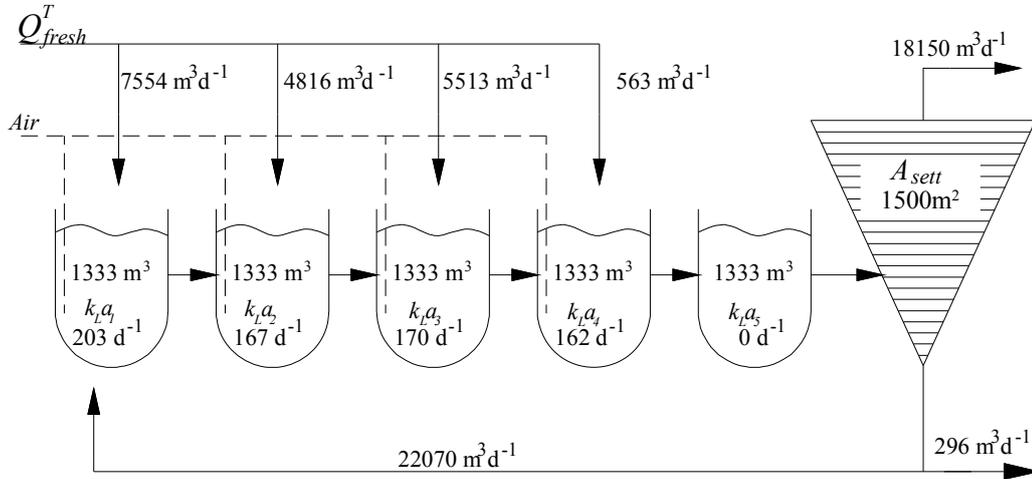


Figura 4.6.c. Solución II.C: Configuración óptima y valores de las principales variables del proceso para el caso II.C

Tabla 4.6.c. Solución II.C: Valores de las principales variables óptimas para el caso II.C

<i>Concentraciones de contaminantes del efluente</i>		<i>Costos</i>	
$S_{NH,ef}$ g N m ⁻³	2.61	CO ^{1,Annual}	588803.57
$N_{TOT,ef}$ g N m ⁻³	4.87	CI ^T	2572254.88
BOD_{ef} g m ⁻³	2.68	VAN	9908747.36
COD_{ef} g COD m ⁻³	50.29		
$X_{SS,ef}$ g SS m ⁻³	16.27		

4.4.3.4 Distribución de costos para las soluciones del Escenario II

La distribución de costos promedio para las soluciones II.A, II.B y II.C se muestra en la Figura 4.7. Alrededor del 72±2% del VAN corresponde al CO^T y el 28±2% al CI^T. En orden de importancia, cada costo contribuye al VAN de la siguiente manera (promedio de las soluciones II.A, II.B y II.C): el costo de las multas representa el 30±9%, el de tratamiento de barros el 20±7%, el de energía para aireación el 19±4%, la inversión de los tanques representa el 18±1%, la inversión del decantador el 5±0.5%, la inversión de la estación de bombeo del afluente el 3±0.5%, el costo de la energía de

bombeo el $3\pm 0.5\%$, la inversión del sistema de aireación el $2\pm 0.5\%$, y, finalmente, el costo de la bomba de recirculación de barros el $0.5\pm 0.1\%$.

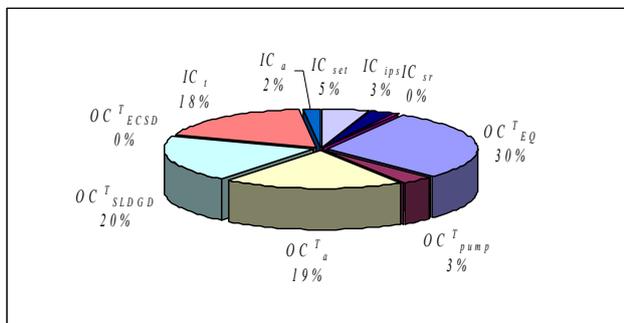


Figura 4.7. Distribución de costos para las soluciones del caso de estudio II

4.5 Conclusiones

En resumen, para las suposiciones hechas y los valores de los parámetros usados en el modelo, se observó que:

- Para el caso I, el valor del VAN más bajo encontrado corresponde a la solución I.B, seguido de las soluciones I.A y I.C.

- Para el caso II, el valor de VAN más bajo corresponde a la solución II.A (a pesar de no ser el caso de afluente menos contaminado), seguido de las soluciones II.B Y II.C.

- Las optimizaciones realizadas arrojan resultados que favorecen la elección de plantas de tratamiento con grandes volúmenes de reacción y gran capacidad de tratamiento de manera de minimizar las multas, y conseguir CO^T bajos, en vez de una planta con volumen de tratamiento pequeño (lo que reduce el costo de inversión de la misma) pero con concentraciones de los contaminantes en el efluente en su valor umbral (aumentando CO^T por multas).

- Se observa que la performance del tratamiento se beneficia con el empleo de estrategias operacionales como el empleo de diferentes patrones de aireación y alimentación del afluente, principalmente en los casos donde los volúmenes de reacción estaban fijos.

Tabla 4.7. Costos detallados de las soluciones

	CO^T_{EQ}	CO^T_p	CO^T_a	CO^T_{SLDGD}	CO^T_{ECSD}	CO^T	CI_t	CI_a	CI_{set}	CI_{ips}	CI_{sr}	CI^T	VAN
I.A	1407398	149247	1843952	1410813	0	4811410	1746404	171258	442671	268985	33188	2662506	7473917
I.B	1806487	188809	1359139	945885	0	4300320	1813635	156587	442671	268985	35703	2717581	7017901
I.C	1324757	147767	2556543	2224335	0	6253401	1885135	234335	442671	268985	33019	2864145	9117546
II.A	2412190	287928	1631151	1715142	0	6046410	1594116	166524	442671	268985	40566	2512862	8559272
II.B	3478411	331551	1386819	1200302	0	6397081	1594116	121207	442671	268985	42383	2469362	8866444
II.C	2098800	278685	2285708	2673300	0	7336492	1594116	226379	442671	268985	40104	2572255	9908747
$I.A^{alt1}$	1495701	158308	1838564	1416870	0	4909444	1650699	173913	442671	268985	33793	2570062	7479506
$I.A^{alt2}$	1519135	144431	2055377	1364457	0	5083399	1573881	137025	442671	268985	32860	2455422	7538821

- La distribución promedio de costos para las soluciones I.A, I.B y I.C se muestra en la Figura 4.4. Alrededor del $65\pm 4\%$ del VAN corresponde a los costos operativos y el $35\pm 4\%$ a los de inversión. En orden de importancia cada costo contribuye al VAN de la siguiente forma: el costo de la energía de aireación representa el $24\pm 4\%$, el costo de inversión de los tanques el $23\pm 3\%$, el costo de las multas por las unidades de contaminación descargadas con el efluente representan el $20\pm 6\%$, el del tratamiento de los barros el $19\pm 5\%$, la inversión del decantador constituye el $6\pm 1\%$, de la estación de bombeo del afluente el $3\pm 0.5\%$, la inversión de los sistemas de aireación el $2\pm 0.2\%$, de la energía de bombeo el $2\pm 0.5\%$, y finalmente la inversión de la bomba de recirculación de barros representa el $0.5\pm 0.1\%$ del total.

- La distribución de costos promedio para las soluciones II.A, II.B y II.C se muestra en la Figura 4.7. Alrededor del $72\pm 2\%$ del VAN corresponde al CO^T y el $28\pm 2\%$ al CI^T . En orden de importancia, cada costo contribuye al VAN de la siguiente manera (promedio de las soluciones II.A, II.B y II.C): el costo de las multas representa el $30\pm 9\%$, el de tratamiento de barros el $20\pm 7\%$, el de energía para aireación el $19\pm 4\%$, la inversión de los tanques representa el $18\pm 1\%$, la inversión del decantador el $5\pm 0.5\%$, la inversión de la estación de bombeo del afluente el $3\pm 0.5\%$, el costo de la energía de bombeo el $3\pm 0.5\%$, la inversión del sistema de aireación el $2\pm 0.5\%$, y, finalmente, el costo de la bomba de recirculación de barros el $0.5\pm 0.1\%$.

- Los valores de VAN para las Soluciones II respecto a las Soluciones I aumentan en un $17\pm 9\%$. Este hecho es consecuencia de una reducción de las regiones de búsqueda de la solución, ya que se fijan los valores de las variables de volúmenes de los compartimentos de reacción y del área transversal del decantador secundario. El costo de la inversión disminuye el $8\pm 2\%$ mientras los costos de operación aumentan el $31\pm 16\%$. El incremento principal en el CO^T se observa en las multas ($74\pm 17\%$) y la disminución principal del CI^T se observa en el costo de inversión de los compartimentos de reacción (el $12\pm 3\%$). Los restantes costos de inversión tienen bajo impacto en la variación del VAN. Otros dos costos de operación que varían considerablemente de las soluciones del caso I al II son el costo del tratamiento de los barros, que aumenta el $23\pm 4\%$ y el costo de la energía para aireación, que aumenta o disminuye según las características del agua residual. Estas dos últimas variaciones de costo son significativas en particular en el caso del agua residual C. Finalmente, el costo de inversión de la bomba para el reciclo de los barros aumenta el $86\pm 9\%$, pero tiene un impacto bajo sobre la variación del VAN.

El modelo resultó flexible y robusto y capaz de ser usado para síntesis de proceso, optimización de proceso fijando las variables estructurales, y también para la simulación de una planta y condiciones de operación dados. Por ejemplo, la configuración, diseño y condiciones de operación óptimas obtenidas para el afluente A en caso I [ver Figura 4.3.a, valores óptimos: $V_i = (1083, 9096, 6099, 0, 0)$; $A_{sett} = 1500$; $k_L a_i = (218, 36, 27, 0, 0)$; $Q_{fresh,i} = (10360, 8086, 0, 0, 0)$, $Q_{r,int,5}^T = 0$; $Q_{r,int,4}^T = 0$; $Q_{r,ext,i} = (11841, 0, 0, 0, 0)$; $u_{ECSD}^T = 0$], fueron simulados para la alimentación de los afluentes B y C. En estas dos corridas, las restricciones que imponen valores máximos o umbral para los contaminantes del efluente se anularon, dado que se realizan simulaciones en vez de optimizaciones. Se encontró que en ambos casos, las condiciones de calidad de efluente no fueron alcanzadas (las concentraciones de los contaminantes del efluente resultaron superiores a los límites permitidos o valores umbral que se utilizaron en las optimizaciones) y los valores de VAN aumentaron 71 y el 83% respectivamente, comparando estas simulaciones con las soluciones óptimas encontradas con el modelo de optimización completo para cada uno de dichos casos de estudio (Soluciones I.B y I.C, respectivamente).

Por otra parte, si los compartimentos de reacción y el decantador secundario se suponen dados, el modelo puede ser usado para la optimización de las condiciones de operación. Por ejemplo, fijando los volúmenes de los tanques de reacción y el área transversal del decantador a los valores óptimos alcanzados para el caso I.A: [$V_i = (1083, 9096, 6099, 0, 0)$; $A_{sett} = 1500$] y se optimizan el resto de las variables, para una alimentación correspondiente al afluente B, se encuentran los siguientes valores óptimos para las principales variables restantes: [$k_L a_i = (238, 19, 20, 0, 0)$; $Q_{fresh,i} = (12565, 5173, 708, 0, 0)$; $Q_{r,int,5}^T = 0$; $Q_{r,int,4}^T = 0$; $Q_{r,ext,i} = (18042, 0, 0, 0, 0)$; $u_{ECSD}^T = 0$]. Al tratarse de una optimización, las restricciones de calidad de efluente no fueron anuladas y por tanto fueron satisfechas y el VAN aumentó sólo el 5% respecto a la configuración óptima para este afluente (solución I.B). Finalmente, alimentando el afluente C, los valores principales óptimos resultan: [$k_L a_i = (256, 53, 45, 0, 0)$; $Q_{fresh,i} = (9228, 9218, 0, 0, 0)$; $Q_{r,int,5}^T = 0$, $Q_{r,int,4}^T = 0$; $Q_{r,ext,i} = (10426, 0, 0, 0, 0)$; $u_{ECSD}^T = 0$]. Otra vez, las restricciones de calidad de efluente fueron satisfechas y el VAN aumentó sólo el 1% respecto a la configuración óptima para este afluente (solución I.C).

Se hace evidente que mediante el empleo de patrones de aireación, alimentación y reciclos convenientes se puede mejorar notoriamente la performance del sistema frente a una variación de composición del afluente. Esto también evidencia la

importancia de la optimización de los modos de operación del proceso para condiciones de afluente variable. El diseño bajo incertidumbre o diseño flexible será abordado en futuros trabajos.

4.6 Aspectos computacionales

Los modelos fueron implementados y resueltos usando el sistemas de modelado generales algebraico (General Algebraic Modelling Systems) *GAMS* (Brooke, et al. 1992). El modelo resulta en 536 variables y 509 ecuaciones. El código *CONOPT* (Drud 1996) fue empleado para solucionar el problema *DNLP*. El tiempo de CPU total para la resolución de cada modelo está comprendido entre 8.7 y 16.3 segundos. El tiempo de CPU promedio fue de 12.9 segundos utilizando una PC con procesador Intel Pentium IV de 2.40GHz y con 248 MB de RAM.

4.7 Futuros trabajos

En este capítulo se presentó un modelo de *DNLP* para la síntesis y diseño y optimización de las variables de operación óptimas de plantas de tratamiento de aguas residuales, mediante la utilización de una superestructura. Dos escenarios diferentes son seleccionados como casos de estudio. En el caso de estudio I, los volúmenes de los compartimentos de reacción y el área transversal del decantador secundario son variables de optimización. En caso del estudio II, los volúmenes de los compartimentos de reacción se fijan en 1333 m³, y el área transversal del decantador secundario en 1500 m². Como se mencionó, la profundidad de decantador se supone de 4 m para ambos casos. Tres composiciones de aguas residuales diferentes caracterizadas por relaciones Carbón/Nitrógeno diferentes fueron usadas para mostrar las capacidades del modelo, principalmente su robustez y flexibilidad. Las diferentes relaciones C/N fueron obtenidas variando el contenido de X_S y S_S del afluente. En cada escenario estudiado, se analizaron y compararon las soluciones óptimas encontradas para los diferentes afluentes con relaciones C/N en aumento: (B<A<C).

Los modelos fueron implementados en *GAMS*. El código *CONOPT* fue empleado para solucionar los problemas *DNLP*. Como consecuencia de la naturaleza del problema y características del resolvidor, se adoptó la estrategia de múltiples puntos iniciales, verificando la presencia de soluciones óptimas locales. Esto es, un conjunto de soluciones óptimas locales diferentes fueron encontradas para cada caso de estudio.

Dada la flexibilidad y robustez demostradas por el modelo y el método de resolución propuesto, se concluye que resulta un instrumento útil de ayuda al ingeniero de diseño. Después de encontrar las diferentes soluciones al problema de optimización que se plantee, se puede realizar una selección entre éstas, considerando otros aspectos del diseño como la flexibilidad, confiabilidad y controlabilidad, aspectos que son difíciles de incorporar en el modelo de diseño.

A pesar de la existencia de funciones no suaves, el resolvidor *CONOPT* solucionó los modelos aceptablemente, proporcionando soluciones para más del 80 % de los puntos iniciales diferentes empleados. También, la existencia y el tipo de compartimentos de reacción y corrientes de proceso fueron manejados satisfactoriamente con el empleo de cotas inferiores muy pequeñas (prácticamente el cero), que introducen un error muy pequeño en el cálculo de la función objetivo si el equipo asociado es eliminado de la superestructura para alcanzar el flowsheet óptimo real.

Sin embargo, es interesante notar que, en algunos casos, se hallaron soluciones con pequeños valores de $k_L a$ (pero no el valor de cota inferior), que pueden resultar inconsistentes desde un punto de vista ingenieril.

En futuros trabajos, se presentarán nuevos modelos matemáticos basados en programación *MINLP* o *GDP*. Esto también permitirá la incorporación de nuevas variables de optimización como la profundidad del decantador y su punto de alimentación, y permitirá el empleo de funciones de costos más rigurosas. Toda la experiencia adquirida mediante los resultados obtenidos del modelo aquí propuesto puede ser usada como punto de partida para el desarrollo de nuevos y mejores modelos. Finalmente, el diseño bajo incertidumbre o el diseño flexible también serán abordados.

CAPÍTULO 5. OPTIMIZACIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN DE SISTEMAS CONVENCIONALES PARA REMOCIÓN COMBINADA DE NITRÓGENO Y FÓSFORO

CAPÍTULO 5. OPTIMIZACIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN DE SISTEMAS CONVENCIONALES PARA REMOCIÓN COMBINADA DE NITRÓGENO Y FÓSFORO	159
5.1 Introducción	160
5.2 Procesos convencionales para remoción combinada de nitrógeno y fósforo	162
5.3 Modelado	165
5.3.1 Modelo del sistema de barros activados (Modelo ASM3+Bio-P).....	165
5.3.2 Modelo de unidades de proceso y equipamiento.....	181
5.3.2.1 Modelo de reactor	181
5.3.2.2 Modelo del decantador	181
5.3.3 Configuraciones de planta consideradas y sus modelos.....	181
5.3.4 Optimización.....	197
5.3.4.1 Función objetivo y criterios de performance	197
5.3.4.2 Especificaciones del agua residual afluyente.....	199
5.3.4.3 Restricciones de calidad de efluente y valores máximos para variables de operación	200
5.4 Resultados.....	201
5.5 Aspectos computacionales	209
5.6 Conclusiones.....	210

5.1 Introducción

La remoción de fósforo (P) es actualmente un problema clave en muchas plantas de tratamiento de aguas residuales municipales basadas en el proceso biológico de barros activados. En Europa, la remoción biológica de fósforo se propone como alternativa a la remoción química mediante precipitación con sales metálicas como FeCl_3 (Gernaey y Jørgensen, 2004). A lo largo del proceso de tratamiento por barros activados, la corriente de agua residual puede ser expuesta a diferentes condiciones ambientales (anaerobias, anóxicas o aerobias) para favorecer los diferentes procesos microbiológicos como liberación/absorción de fósforo y los procesos de nitrificación/denitrificación.

Los modelos de barros activados desarrollados para describir la remoción biológica de materia orgánica (C) y nitrógeno (N) han demostrado ser muy útiles para evaluar la performance de plantas a escala completa y seleccionar alternativas de operación mediante simulación. Además, tal como quedó reflejado en los primeros capítulos, resultan útiles para abordar la síntesis y el diseño óptimos de estos procesos.

De esta manera, y atendiendo a la demanda de modelos que consideren el fósforo, se han desarrollado modelos que contemplan su remoción biológica como, por ejemplo, el *Activated Sludge Model N° 2 ASM2* (Henze et al., 1995) y su variante *ASM2d* (Henze et al., 1999), el modelo de *ByD* (Barker y Dold, 1997), el modelo *TUDP* (Brdjanovic et al., 2000), y el módulo *Bio-P* para ser acoplado al modelo ASM3 (Rieger et al., 2001).

En este contexto, se proponen aquí y en el capítulo siguiente, modelos de optimización de plantas de tratamiento de aguas residuales que contemplan la posibilidad de eliminar fósforo conjuntamente con materia orgánica y nitrógeno. Más específicamente, se derivan modelos que incrementan progresivamente su grado de detalle (entiéndase por esto último una representación más detallada del proceso global y/o del modelo de costos y no de la descripción fenomenológica de los procesos biológicos ni de la etapa de sedimentación de barros). Así, se propone:

- optimización de las condiciones de operación que minimizan los costos operativos de las configuraciones de plantas más extensamente usadas, y de una

superestructura que contempla la posibilidad de distribución de las corrientes principales del sistema, considerando en cada caso una planta dada -número y tamaño de los equipos. (En este último caso se recurre a una superestructura para obtener la combinación de corrientes de reciclaje óptima, y no para abordar un problema de síntesis óptima en el sentido estricto del término, tal como se explicó en el capítulo 2).

- síntesis, diseño y optimización de las condiciones de operación en base a una superestructura del proceso que minimice el costo total, considerando costo operativo y de inversión - lo que determinará el número y tamaño de los equipos (Capítulo 6);

Así, en este capítulo, se amplían los modelos presentados en el capítulo 2 para la optimización de las condiciones de operación de plantas de tratamiento de aguas residuales por barros activados para contemplar tanto la remoción de fósforo como de nitrógeno. Las configuraciones de planta a optimizar son en este caso más complejas ya que requieren de una zona anaerobia para el proceso de eliminación de fósforo.

Se optimizan los esquemas convencionales para la remoción combinada de nutrientes, esto es, las configuraciones de proceso *A2/O* o *proceso Phoredox*, *proceso UCT* (University of Cape Town) o *proceso VIP*, *proceso UCT modificado* y el *proceso Bardenpho*. Se optimiza también una superestructura que contempla la posibilidad de distribución de las corrientes principales del sistema.

Se supone que cada planta opera en forma continua y que el caudal de agua residual afluente y su composición son conocidos. El criterio de performance seleccionado para la optimización corresponde a la minimización del costo de operación total anual mientras se cumplen límites que se imponen para la concentración de contaminantes en el efluente. Como en los capítulos anteriores, el costo de operación computa los costos para la energía de bombeo y aireación, de la fuente externa de carbono, del tratamiento de los barros en exceso que son eliminados del sistema, y de las multas según las unidades de contaminación descargadas. Como los equipos que constituyen la planta se suponen dados, los costos de inversión no se consideran en estos casos.

Para el modelado de las reacciones que tienen lugar en los compartimentos de reacción se emplea el Modelo de Barros Activados N° 3 ampliado con el módulo de Bio-P (Rieger et al., 2001) para contemplar la remoción biológica de fósforo. Lübken et al. (2003) concluyen que el Modelo de Barros Activados No 3 ampliado con el módulo

de Bio-P (ASM3+Bio-P) describe convenientemente el funcionamiento de una planta piloto y que, debido a su baja complejidad que lo hace más manejable, el módulo Bio-P de la *EAWAG* es más conveniente que el modelo de Delft (Murnleitner et al., 1997). Sin embargo, el modelo ASM3+Bio-P no ha sido empleado hasta el presente extensamente en la literatura. Para modelar el decantador secundario se usa el modelo propuesto por Takács et al. (1991).

Se incorporan entonces al modelo nuevas variables y ecuaciones para considerar los componentes para los procesos de remoción de fósforo. Por su parte, las configuraciones de proceso consideradas también se amplía para integrar aquellas para remoción biológica combinada de nutrientes (nitrógeno y fósforo) más empleadas.

Los problemas de optimización se formulan como problemas NLP; más específicamente, como problemas de programación no lineal con derivadas discontinuas (*DNLP*). Los modelos se implementan y resuelven usando *General Algebraic Modelling System (GAMS)*, mostrando características de robustez y flexibilidad.

5.2 Procesos convencionales para remoción combinada de nitrógeno y fósforo

En los procesos de barros activados, la corriente de agua residual afluyente se expone a condiciones ambientales diferentes (zonas anaerobias, anóxicas y aerobias) para facilitar los diferentes procesos microbiológicos como la liberación o absorción de fósforo, y la nitrificación y denitrificación. La reducción de materia orgánica y el proceso de nitrificación (el amonio se convierte en nitrato por los microorganismos autótrofos) son favorecidos por condiciones aeróbicas; mientras el proceso de denitrificación (el nitrato se convierte en gas nitrógeno por microorganismos heterótrofos) es favorecido por condiciones anóxicas mientras exista disponible una fuente de carbono fácilmente biodegradable. La remoción biológica de fósforo se basa en la absorción de éste por organismos heterótrofos conocidos como organismos acumuladores de fosfato (*phosphate accumulating organisms PAOs*) capaces de almacenar ortofosfatos en cantidades superiores a las requeridas para su crecimiento.

Bajo condiciones anaerobias, los *PAOs* convierten la materia orgánica fácilmente disponible (por ej. ácidos grasos volátiles *VFA*s) a compuestos de carbono llamados polihidroxicanoatos (*PHAs*). Los *PAOs* usan la energía generada por la ruptura de las moléculas de polifosfato para crear *PHAs*. Esta ruptura causa la liberación de fósforo. Posteriormente, bajo condiciones aeróbicas o anóxicas, los *PAOs* usan como fuente de energía los *PHAs* almacenados para absorber el fósforo que fue liberado en la zona anaerobia, y absorben además fosfato adicional presente en el agua residual.

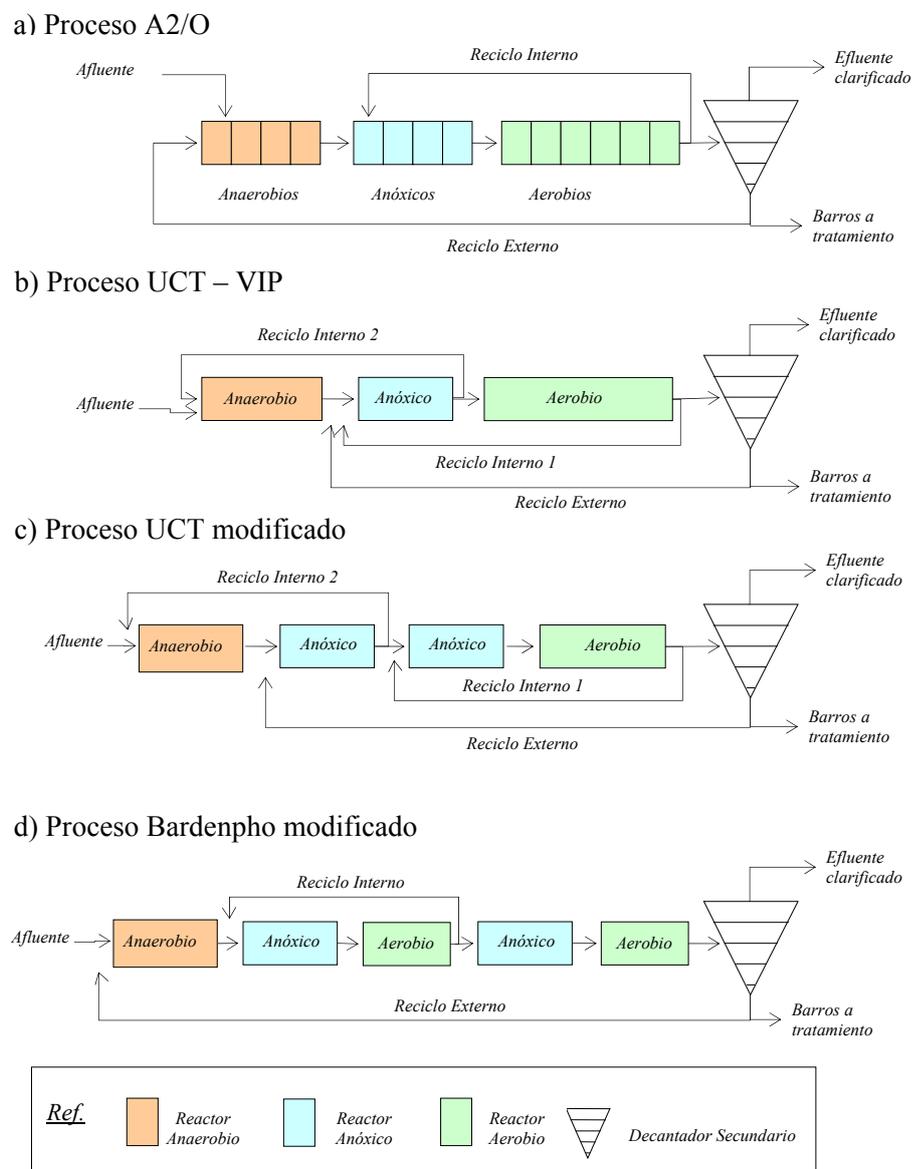


Figura 5.1. Configuraciones más usadas de plantas de tratamiento para remoción combinada nutrientes

La Figura 5.1 presenta las configuraciones más ampliamente usadas de plantas para la remoción combinada de nitrógeno y fósforo. Las condiciones de operación de plantas que poseen estas configuraciones, se optimizan en el *caso de estudio 1*.

El *proceso A2/O* presenta una secuencia de reactores anaerobios (para promover el crecimiento de los *PAOs*) seguido de una secuencia de reactores anóxicos para promover la denitrificación, y finalmente reactores aeróbicos. Posee un reciclaje interno y uno externo. El primero recicla una fracción de la corriente de licor nitrificado desde el último reactor aeróbico al primer compartimento anóxico, y el externo recicla una fracción del barro de la corriente inferior del tanque de sedimentación al primer compartimento (anaerobio).

En el *proceso UCT* (University of Cape Town) la secuencia de reactores es la misma, pero las dos corrientes de reciclaje son alimentadas a la zona anóxica, y posee también un segundo reciclaje interno (para proveer biomasa al primer reactor) desde el compartimento anóxico al compartimento anaerobio.

El *proceso UCT modificado* posee también dos reciclajes internos y uno externo como el *UCT* original pero su zona anóxica está dividida en dos. El reciclaje externo proviene de la corriente inferior del decantador y se alimenta al primer reactor de la zona anóxica. El primer reciclaje interno recicla una fracción del licor nitrificado proveniente de la zona aeróbica a la segunda zona anóxica. Finalmente, el segundo reciclaje interno dirige una fracción del licor de mezcla desde el primer reactor anóxico al compartimento anaerobio.

La configuración de *proceso Bardenpho* cuenta con un reciclaje externo desde la zona inferior del tanque de sedimentación a la zona anaerobia y con un reciclaje interno desde la primera zona aeróbica a la primera zona anóxica.

En general, la adición de una fuente de carbono externa a la zona anóxica podría ser perjudicial para el proceso de remoción de fósforo en una planta de remoción combinada de nutrientes, ya que los organismos heterótrofos comunes tienen ventajas competitivas para el nitrato sobre los *PAOs* denitrificantes, lo que causa una absorción de fósforo anóxica pobre. Es recomendable que la fuente de carbono externa, si fuera necesaria, sea añadida a la zona anaerobia de una planta para remoción combinada de nutrientes. La fuente de carbono es así utilizada por los *PAOs* para formar compuestos

de carbono de almacenaje intracelular, cuyo empleo mejora tanto la remoción de fósforo como la de nitrógeno en condiciones anóxicas (Olsson et al., 2005).

En el *caso de estudio 2*, se considera la posibilidad de distribución de las corrientes principales del sistema. Se optimizan las condiciones de operación de una superestructura que incluye las configuraciones de proceso del tipo *A2/O*, *UCT*, *UCT modificado* y *Bardenpho de 5 etapas*, y agrega nuevas posibilidades de reciclos y distribución de corrientes a las correspondientes a los procesos mencionados. Al igual que en el capítulo 2, si bien se hace referencia a “superestructuras” no se trata estrictamente de un problema de síntesis óptima (presencia o ausencia de compartimentos de reacción), sino que se recurre al modelo de una superestructura para seleccionar la combinación de corrientes de recicló óptima para una secuencia fija de compartimentos, considerándose así como un problema de operación óptima.

5.3 Modelado

5.3.1 Modelo del sistema de barros activados (Modelo ASM3+Bio-P)

El módulo Bio-P de la *EAWAG (Swiss Federal Institute for Environmental Science and Technology)* (Rieger et al., 2001) se desarrolló para extender el modelo ASM3 de manera de considerar también la eliminación de fósforo. El decaimiento de la biomasa (heterótrofa, autótrofa y la correspondiente a los microorganismos acumuladores de fosfatos) se representa como en el modelo ASM3; es decir, en forma de respiración endógena. El modelo no considera el *pool* de glicógeno, desprecia la fermentación del sustrato orgánico fácilmente biodegradable y no considera la precipitación de fósforo. En el modelo ASM3+Bio-P, la hidrólisis y los procesos en los que intervienen microorganismos autótrofos y heterótrofos resultan idénticos a los del modelo ASM3, pero con algunas limitaciones relativas al fósforo en los procesos de crecimiento. El modelo fue desarrollado en base a la versión calibrada del modelo ASM3 por Koch et al. (2000), quienes proponen valores de los parámetros estimados a partir de resultados experimentales.

El modelo ASM3+Bio-P involucra 23 procesos de transformación, y considera 17 compuestos (C_x), que se dividen en solubles y particulados, cuyas concentraciones son indicadas por S y X , respectivamente.

Componentes del modelo ASM3+Bio-P

Los compuestos del modelo ASM3+Bio-P se listan en la Tabla 5.1.

Tabla 5.1. Componentes del modelo ASM3 + Bio-P

<i>Símbolo</i>	<i>Componente</i>	<i>Unidad</i>
S_I	<i>Materia orgánica soluble inerte</i>	gDQO m^{-3}
S_S	<i>Sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación</i>	gDQO m^{-3}
X_I	<i>Materia orgánica particulada inerte</i>	gDQO m^{-3}
X_S	<i>Sustrato lentamente biodegradable</i>	gDQO m^{-3}
X_H	<i>Microorganismos heterótrofos</i>	gDQO m^{-3}
X_A	<i>Microorganismos autótrofos</i>	gDQO m^{-3}
X_{STO}	<i>Compuestos intracelulares acumulados por heterótrofos</i>	gDQO m^{-3}
X_{SS}	<i>Sólidos suspendidos</i>	gSS m^{-3}
S_O	<i>Oxígeno disuelto</i>	$\text{gO}_2 \text{m}^{-3}$
S_{NO}	<i>Nitrato ($\text{NO}_3^- \text{-N} + \text{NO}_2^- \text{-N}$)</i>	gN m^{-3}
S_{N2}	<i>Nitrógeno gaseoso</i>	gN m^{-3}
S_{NH}	<i>Nitrógeno amoniacal ($\text{NH}_4^+ \text{-N} + \text{NH}_3 \text{-N}$)</i>	gN m^{-3}
S_{HCO}	<i>Alcalinidad</i>	$\text{mol HCO}_3^- \text{m}^{-3}$
S_{PO}	<i>Fósforo inorgánico soluble</i>	gP m^{-3}
X_{PAO}	<i>Organismos acumuladores de fósforo</i>	gDQO m^{-3}
X_{PHA}	<i>Compuestos de almacenamiento celular interno , polihidroxialcanoatos y glicógeno</i>	gDQO m^{-3}
X_{PP}	<i>Compuestos de almacenamiento celular interno, Polifosfato</i>	gP m^{-3}

El módulo Bio-P requiere cuatro variables de estado adicionales a los 13 componentes definidos en el modelo ASM3 para considerar la remoción biológica de fósforo. Para simplificar el modelo se considera un solo *pool* de sustrato interno, despreciando el glicógeno. Los cuatro componentes adicionales en el módulo Bio-P son:

- *Fósforo inorgánico soluble, principalmente ortofosfatos S_{PO4}* : Para simplificar el balance de carga iónica (eléctrica), se asume que el 50 % del S_{PO4} consiste en $H_2PO_4^-$ y el 50 % restante en HPO_4^{2-} ; por lo tanto, tiene una carga eléctrica de 1.5/31.

- *Organismos acumuladores de fósforo X_{PAO}* : Se asume que estos organismos representan todos los tipos de organismos acumuladores de fósforo presentes. Se asume que su crecimiento ocurre bajo condiciones aerobias y algunos de ellos bajo condiciones anóxicas. La concentración X_{PAO} no incluye los productos de almacenamiento internos celulares X_{PP} y X_{PHA} , sólo la biomasa "verdadera".

- *Compuestos de almacenamiento interno celular, principalmente poli-hidroxialcanoatos (PHA) y glicógeno X_{PHA}* : son productos de almacenamiento celular interno de los organismos que acumulan fósforo. Aunque se encuentran asociados a la biomasa X_{PAO} , no se incluyen en el cómputo de la concentración de dicha biomasa. X_{PHA} no puede compararse directamente con la medición analítica de la concentración de *PHA*; es un componente requerido para el modelado, pero no puede ser identificado químicamente en forma directa. Sin embargo, debe satisfacer la conservación de ThOD. Para consideraciones estequiométricas, se asume que X_{PHA} tiene la composición química del poli-hidroxi-butilato $(C_4H_6O_2)_n$.

- *Producto de almacenamiento celular interno, polifosfato X_{PP}* : es un producto de almacenamiento celular interno inorgánico de los PAOs. Se asume que se encuentra asociado a la biomasa X_{PAO} , pero no se incluye en el cómputo de su concentración. Forma parte del fósforo particulado y puede ser detectado analíticamente. Para consideraciones estequiométricas, se asume que los polifosfatos tienen la composición $(K_{0.34}Mg_{0.33}PO_3)_n$. Ya que el módulo Bio-P no considera elementos como el ión potasio K^+ o magnesio Mg^{2+} , se incluye una carga eléctrica de -1/31 para compensar este término.

Procesos considerados en el modelo ASM3+Bio-P y sus expresiones cinéticas.

El módulo Bio-P de la *EAWAG* incorpora la eliminación biológica de fósforo al modelo ASM3; esto es, se considera tanto la remoción de fósforo requerida para las funciones fisiológicas y crecimiento de todos los organismos como la remoción biológica mejorada o aumentada de fósforo (*enhanced biological phosphorus removal-EBPR*) de los *PAOs*. Para la remoción de fósforo debido a las funciones fisiológicas, los

procesos de crecimiento del modelo ASM3 deben ser corregidos con términos para la limitación debido al fósforo. La remoción biológica mejorada o aumentada de fósforo (*EBPR*) se describe mediante 11 procesos adicionales.

Además de despreciar el proceso de fermentación, considera que las velocidades de decaimiento anóxico son inferiores a las aeróbicas. Mediante experimentos *batch* se pudo determinar que el decaimiento anaerobio es despreciable (Siegrist et al., 1999), por lo que se desprecia en el modelo. A pH menores a 7.5 y temperaturas menores a 20°C, condiciones que prevalecen en la mayoría de las plantas municipales, la precipitación biológicamente inducida de fósforo es despreciable (Maurer et al., 1999). El módulo Bio-P no incluye la precipitación química de fósforo.

En síntesis, los procesos del modelo ASM3+Bio-P incluyen los mismos procesos que los descritos para el modelo ASM3, pero las expresiones de la cinética del modelo ASM3 se corrigen para considerar las limitaciones debido al fósforo, como se muestra a continuación (ecuaciones 5.1 a 5.12). La Figura 5.2 esquematiza los procesos considerados.

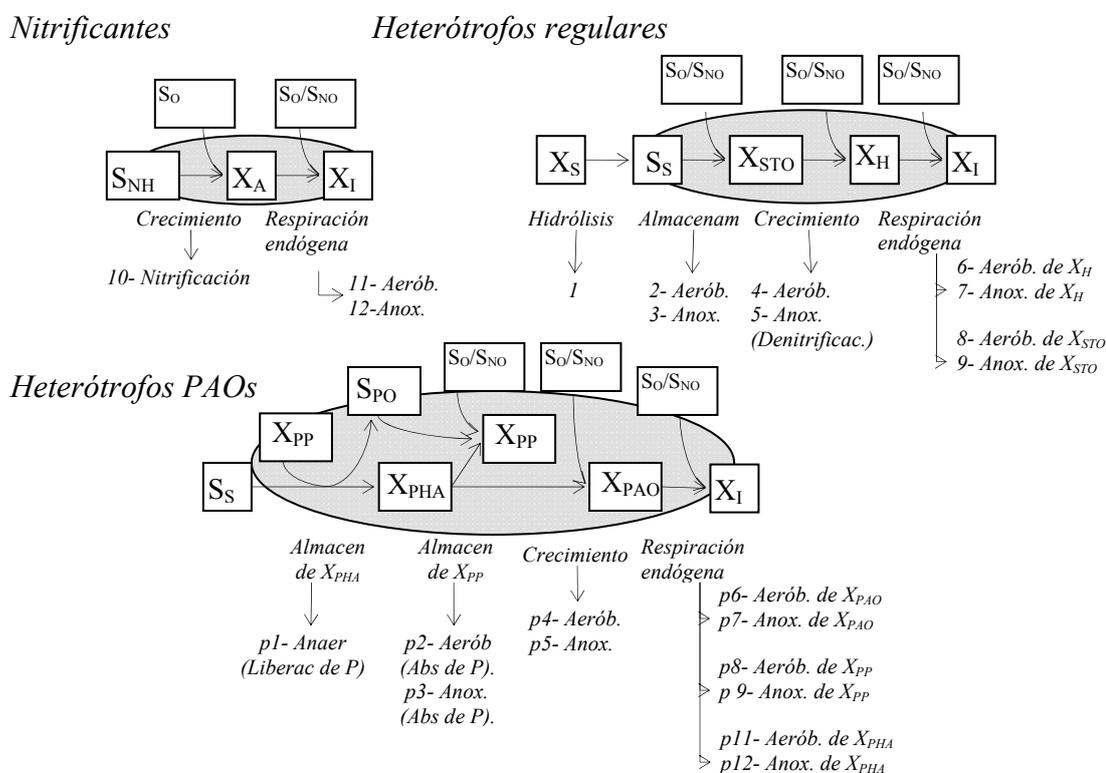


Figura 5.2. Flujo de DQO y procesos del modelo ASM3 +Bio-P

Procesos y expresiones cinéticas del modelo ASM3 corregidos para el modelo ASM3+Bio-P:

- Hidrólisis de material particulado lentamente degradable X_S

$$\rho_1 = k_H \left[\frac{X_S/X_H}{K_X + X_S/X_H} \right] X_H \quad (5.1)$$

- Almacenamiento aeróbico de sustrato soluble rápidamente degradable S_S

$$\rho_2 = k_{STO} \left[\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right] \left[\frac{S_S}{K_{SS,H} + S_S} \right] X_H \quad (5.2)$$

- Almacenamiento anóxico de sustrato soluble rápidamente degradable S_S

$$\rho_3 = k_{STO} \cdot \eta_{NO,H} \left[\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO,H} + S_{NO}} \right] \left[\frac{S_S}{K_{SS,H} + S_S} \right] X_H \quad (5.3)$$

- Crecimiento aeróbico de heterótrofos X_H

$$\rho_4 = \mu_H \left[\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NH}}{K_{NH,H} + S_{NH}} \right] \left[\frac{S_{HCO}}{K_{HCO,H} + S_{HCO}} \right] \left[\frac{S_{PO4}}{K_{PO4,H} + S_{PO4}} \right] \left[\frac{X_{STO}/X_H}{K_{STO} + X_{STO}/X_H} \right] X_H \quad (5.4)$$

- Crecimiento anóxico de heterótrofos X_H (denitrificación)

$$\rho_5 = \mu_H \cdot \eta_{NO,H} \left[\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO,H} + S_{NO}} \right] \left[\frac{S_{PO4}}{K_{PO4,H} + S_{PO4}} \right] \left[\frac{S_{NH}}{K_{NH,H} + S_{NH}} \right] \left[\frac{S_{HCO}}{K_{HCO,H} + S_{HCO}} \right] \left[\frac{X_{STO}/X_H}{K_{STO} + X_{STO}/X_H} \right] X_H \quad (5.5)$$

- Respiración endógena aeróbica de heterótrofos X_H

$$\rho_6 = b_H \left[\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right] X_H \quad (5.6)$$

- Respiración endógena anóxica de heterótrofos X_H

$$\rho_7 = b_H \eta_{NO,end,H} \left[\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right] X_H \quad (5.7)$$

- Respiración aeróbica de compuestos intracelulares X_{STO}

$$\rho_8 = b_{STO} \left[\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right] X_{STO} \quad (5.8)$$

- Respiración anóxica de compuestos intracelulares X_{STO}

$$\rho_9 = b_{STO} \eta_{NO,end,H} \left[\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right] X_{STO} \quad (5.9)$$

- Crecimiento de autótrofos X_A (nitrificación)

$$\rho_{10} = \mu_A \left[\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NH}}{K_{NH,A} + S_{NH}} \right] \left[\frac{S_{PO4}}{K_{PO4,A} + S_{PO4}} \right] \left[\frac{S_{HCO}}{K_{HCO,A} + S_{HCO}} \right] X_A \quad (5.10)$$

- Respiración endógena aeróbica de autótrofos X_A

$$\rho_{11} = b_A \left[\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right] X_A \quad (5.11)$$

- Respiración endógena anóxica de autótrofos X_A

$$\rho_{12} = b_A \eta_{NO, end, A} \left[\frac{K_{O,A}}{K_{O,A} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO,A} + S_{NO}} \right] X_A \quad (5.12)$$

Procesos específicos para eliminación de fósforo considerados en el módulo Bio-P y sus expresiones cinéticas:

- Almacenamiento de compuestos de almacenamiento celular interno, polihidroxialcanoatos y glicógeno X_{PHA} (proceso ρ_{p1}): este proceso describe el almacenamiento de sustrato fácilmente biodegradable (S_S) en forma de productos celulares internos (X_{PHA}). Este proceso de almacenamiento se relaciona directamente con la liberación de fósforo a través del parámetro estequiométrico Y_{PO4} . La energía que se dispone durante la liberación de polifosfatos (X_{PP}) se usa para el almacenamiento de sustrato.

Este proceso ocurre principalmente bajo condiciones anaerobias, pero también se observa en zonas aerobias y anóxicas. Por esta razón, no aparecen términos de inhibición en la expresión cinética. La influencia del oxígeno o nitratos sobre la liberación de fósforo se modela sólo mediante la competencia por el sustrato entre los PAOs y los otros organismos heterótrofos.

$$\rho_{p1} = q_{PHA} \left[\frac{S_S}{K_{SS,PAO} + S_S} \right] \left[\frac{S_{HCO}}{K_{HCO,PAO} + S_{HCO}} \right] \left[\frac{X_{PP}/X_{PAO}}{K_{PP,PAO} + X_{PP}/X_{PAO}} \right] X_{PAO} \quad (5.13)$$

- Almacenamiento aeróbico (ρ_{p2}) y anóxico (ρ_{p3}) de compuestos de almacenamiento celular interno, polifosfato X_{PP} : los PAOs requieren energía para la absorción de ortofosfatos (S_{PO4}) y su almacenamiento celular interno en forma de polifosfatos (X_{PP}). Esta energía puede ser obtenida de la respiración aeróbica o anóxica de X_{PHA} . La regeneración del *pool* de polifosfatos (X_{PP}) es esencial para el crecimiento de los PAOs porque la absorción de sustrato sólo ocurre paralelamente a la liberación de fósforo. Se considera un término de inhibición para el almacenamiento máximo de

fósforo en los PAOs. Este término se hace activo cuando la relación X_{PP}/X_{PAO} se acerca al valor máximo permitido K_{max} .

Durante el almacenamiento anóxico de fósforo, se utiliza el nitrato en vez del oxígeno para la respiración. Se introduce un factor de reducción ($\eta_{NO,PAO}$) ya que no todos los PAOs son capaces de denitrificar, hecho que sólo se produce a una velocidad reducida comparada con el almacenamiento aeróbico.

$$\rho_{p2} = q_{PP} \left[\frac{S_O}{K_{O,PAO} + S_O} \right] \left[\frac{S_{PO}}{K_{PO4,PP} + S_{PO}} \right] \left[\frac{S_{HCO}}{K_{HCO,PAO} + S_{HCO}} \right] \left[\frac{X_{PHA}/X_{PAO}}{K_{PHA} + X_{PHA}/X_{PAO}} \right] \left[\frac{K_{max,PAO} - X_{PP}/X_{PAO}}{K_{iPP,PAO} + K_{max,PAO} - X_{PP}/X_{PAO}} \right] X_{PAO} \quad (5.14)$$

$$\rho_{p3} = q_{PP} \eta_{NO,PAO} \left[\frac{K_{O,PAO}}{K_{O,PAO} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO,PAO} + S_{NO}} \right] \left[\frac{S_{PO}}{K_{PO4,PP} + S_{PO}} \right] \left[\frac{S_{HCO}}{K_{HCO,PAO} + S_{HCO}} \right] \left[\frac{X_{PHA}/X_{PAO}}{K_{PHA} + X_{PHA}/X_{PAO}} \right] \left[\frac{K_{max,PAO} - X_{PP}/X_{PAO}}{K_{iPP,PAO} + K_{max,PAO} - X_{PP}/X_{PAO}} \right] X_{PAO} \quad (5.15)$$

- *Crecimiento aeróbico (ρ_{p4}) y anóxico (ρ_{p5}) de los organismos acumuladores de fósforo X_{PAO} :* en este modelo, se asume que los PAOs crecen sólo a expensas de los productos de almacenamiento celular interno (X_{PHA}). Para el crecimiento anóxico de los PAOs, se emplea el mismo factor de reducción ($\eta_{NO,PAO}$) que en el proceso $p3$.

$$\rho_{p4} = \mu_{PAO} \left[\frac{S_O}{K_{O,PAO} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NH}}{K_{NH,PAO} + S_{NH}} \right] \left[\frac{S_{PO}}{K_{PO4,PAO} + S_{PO}} \right] \left[\frac{S_{HCO}}{K_{HCO,PAO} + S_{HCO}} \right] \left[\frac{X_{PHA}/X_{PAO}}{K_{PHA} + X_{PHA}/X_{PAO}} \right] X_{PAO} \quad (5.16)$$

$$\rho_{p5} = \mu_{PAO} \eta_{NO,PAO} \left[\frac{K_{O,PAO}}{K_{O,PAO} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO,PAO} + S_{NO}} \right] \left[\frac{S_{NH}}{K_{NH,PAO} + S_{NH}} \right] \left[\frac{S_{PO}}{K_{PO4,PAO} + S_{PO}} \right] \left[\frac{S_{HCO}}{K_{HCO,PAO} + S_{HCO}} \right] \left[\frac{X_{PHA}/X_{PAO}}{K_{PHA} + X_{PHA}/X_{PAO}} \right] X_{PAO} \quad (5.17)$$

- *Respiración endógena aeróbica (ρ_{p6}) y anóxica (ρ_{p7}):* estos procesos, que son presentados en el modelo ASM3, describen todas las formas de pérdida de biomasa y exigencias de energía no asociadas al crecimiento, considerando la respiración bajo condiciones aeróbicas y anóxicas relacionada con decaimiento, (mantenimiento), respiración endógena, lisis, depredación, movilidad, muerte, etc. La descripción de la respiración endógena anóxica es similar al proceso aeróbico, pero incluye el factor de reducción $\eta_{NO,end,PAO}$.

$$\rho_{p6} = b_{PAO} \left[\frac{S_O}{K_{O,PAO} + S_O} \right] X_{PAO} \quad (5.18)$$

$$\rho_{p7} = b_{PAO} \eta_{NO,end,PAO} \left[\frac{K_{O,PAO}}{K_{O,PAO} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO,PAO} + S_{NO}} \right] X_{PAO} \quad (5.19)$$

- *Lisis y respiración aeróbicas (ρ_{p8} , ρ_{p10}) y anóxicas (ρ_{p9} , ρ_{p11}) de los productos de almacenamiento celular interno:* estos procesos son análogos a la respiración endógena de la biomasa, y aseguran que los productos de almacenamiento decaigan junto con la biomasa. Los procesos anóxicos están afectados por los factores de reducción $\eta_{NO,resp,PAO}$ y $\eta_{NO,lys,PAO}$.

$$\rho_{p8} = b_{PP} \left[\frac{S_O}{K_{O,PAO} + S_O} \right] X_{PP} \quad (5.20)$$

$$\rho_{p9} = b_{PP} \eta_{NO,lys,PP} \left[\frac{K_{O,PAO}}{K_{O,PAO} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO,PAO} + S_{NO}} \right] X_{PP} \quad (5.21)$$

$$\rho_{p10} = b_{PHA} \left[\frac{S_O}{K_{O,PAO} + S_O} \right] X_{PHA} \quad (5.22)$$

$$\rho_{p11} = b_{PHA} \eta_{NO,resp,PHA} \left[\frac{K_{O,PAO}}{K_{O,PAO} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO,PAO} + S_{NO}} \right] X_{PHA} \quad (5.23)$$

Estequiometría y cinética

En el modelo se presenta la matriz estequiométrica para el ASM3+Bio-P. Según se mencionó anteriormente, este modelo agrega 4 componentes x y 11 procesos p al modelo ASM3, y las cantidades de conservación c para este caso son el ThOD, el nitrógeno, la carga iónica, el fósforo y los sólidos solubles.

Para esta nueva matriz se deben cumplir las ecuaciones de conservación 2.13 de manera de poder determinar los coeficientes estequiométricos desconocidos o dependientes, como se explicó para el modelo ASM3. La Tabla 5.2 muestra los valores de los coeficientes de la matriz que aparecen como incógnitos.

Tabla 5.2. Coeficientes estequiométricos incógnitos de la matriz

x_1	$1 - f_{SI}$		
x_2	$-1 + Y_{STO,O2}$	x_{p2}	$-Y_{PHA}$
x_3	$(Y_{STO,NO} - 1)/2.86$	x_{p3}	$-Y_{PHA}/2.86$
x_4	$1 - (1/Y_{H,O2})$	x_{p4}	$1 - (1/Y_{PAO,O2})$
x_5	$[1 - (1/Y_{H,NO})]/2.86$	x_{p5}	$[1 - (1/Y_{PAO,NO})]/2.86$
x_6	$-1 + f_{XI}$	x_{p6}	$-1 + f_{XI}$
x_7	$(f_{XI} - 1)/2.86$	x_{p7}	$(f_{XI} - 1)/2.86$
x_8	-1		
x_9	$-1/2.86$		
x_{10}	$1 - (4.57/Y_A)$	x_{p10}	-1
x_{11}	$-1 + f_{XI}$	x_{p11}	$-1/2.86$
x_{12}	$(f_{XI} - 1)/2.86$		

y_1	$i_{N,XS} - i_{N,SS} - f_{SI}(i_{N,SI} - i_{N,SS})$	y_{p1}	$i_{N,SS}$
y_2	$i_{N,SS}$		
y_3	$i_{N,SS}$		
y_4	$-i_{N,BM}$	y_{p4}	$-i_{N,BM}$
y_5	$-i_{N,BM}$	y_{p5}	$-i_{N,BM}$
y_6	$i_{N,BM} - f_{XI}(i_{N,XI})$	y_{p6}	$i_{N,BM} - f_{XI}(i_{N,XI})$
y_7	$i_{N,BM} - f_{XI}(i_{N,XI})$	y_{p7}	$i_{N,BM} - f_{XI}(i_{N,XI})$
y_{10}	$-(1/Y_A + i_{N,BM})$		
y_{11}	$i_{N,BM} - f_{XI}(i_{N,XI})$		
y_{12}	$i_{N,BM} - f_{XI}(i_{N,XI})$		
t_1	$-i_{SS,XS}$	t_{p1}	$-i_{SS,XPP}Y_{PO4} + i_{SS,STO}$
t_2	$Y_{STO,O2}i_{SS,STO}$	t_{p2}	$i_{SS,XPP} - i_{SS,STO}Y_{PHA}$
t_3	$Y_{STO,NO}i_{SS,STO}$	t_{p3}	$i_{SS,XPP} - i_{SS,STO}Y_{PHA}$
t_4	$i_{SS,BM} - (i_{SS,STO}/Y_{H,O2})$	t_{p4}	$i_{SS,BM} - (i_{SS,STO}/Y_{PAO,O2})$
t_5	$i_{SS,BM} - (i_{SS,STO}/Y_{H,NO})$	t_{p5}	$i_{SS,BM} - (i_{SS,STO}/Y_{PAO,NO})$
t_6	$f_{XI}i_{SS,XI} - i_{SS,BM}$	t_{p6}	$f_{XI}i_{SS,XI} - i_{SS,BM}$
t_7	$f_{XI}i_{SS,XI} - i_{SS,BM}$	t_{p7}	$f_{XI}i_{SS,XI} - i_{SS,BM}$
t_8	$-i_{SS,STO}$	t_{p8}	$-i_{SS,XPP}$
t_9	$-i_{SS,STO}$	t_{p9}	$-i_{SS,XPP}$
t_{10}	$i_{SS,BM}$	t_{p10}	$-i_{SS,STO}$
t_{11}	$f_{XI}i_{SS,XI} - i_{SS,BM}$	t_{p11}	$-i_{SS,STO}$
t_{12}	$f_{XI}i_{SS,XI} - i_{SS,BM}$		
z_1	$[i_{N,XS} - i_{N,SS} - f_{SI}(i_{N,SI} - i_{N,SS})]/14$ $- [i_{P,XS} - i_{P,SS} - f_{SI}(i_{P,SI} - i_{P,SS})](1.5/31)$	z_{p1}	$i_{N,SS}/14 - i_{P,SS}(1.5/31)$ $+ Y_{PO4}((1/31) - (1.5/31))$
z_2	$i_{N,SS}/14 - i_{P,SS}(1.5/31)$	z_{p2}	$-(1/31) + (1.5/31)$

z_3	$[i_{N,SS} - (Y_{STO,NO} - 1)/2.86]/14 - i_{P,SS}(1.5/31)$	z_{p3}	$(Y_{PHA}/2.86 \cdot 14) - (1/.31) + (1.5/31)$
z_4	$-i_{N,BM}/14 + i_{P,BM}(1.5/31)$	z_{p4}	$-i_{N,BM}/14 + i_{P,BM}(1.5/31)$
z_5	$-[i_{N,BM} + (1 - (1/Y_{H,NO}))]/2.86]/14 + i_{P,BM}(1.5/31)$	z_{p5}	$-[i_{N,BM} + (1 - (1/Y_{PAO,NO}))]/2.86]/14 + i_{P,BM}(1.5/31)$
z_6	$(i_{N,BM} - f_{XI}i_{N,XI})/14 - (i_{P,BM} - f_{XI}i_{P,XI})(1.5/31)$	z_{p6}	$(i_{N,BM} - f_{XI}i_{N,XI})/14 - (i_{P,BM} - f_{XI}i_{P,XI})(1.5/31)$
z_7	$[i_{N,BM} - f_{XI}i_{N,XI} - (f_{XI} - 1)/2.86]/14 - [i_{P,BM} - f_{XI}i_{P,XI}](1.5/31)$	z_{p7}	$[i_{N,BM} - f_{XI}i_{N,XI} - ((f_{XI} - 1)/2.86)]/14 - [i_{P,BM} - f_{XI}i_{P,XI}](1.5/31)$
		z_{p8}	$(1/31) - (1.5/31)$
z_9	$(1/2.86)/14$	z_{p9}	$(1/31) - (1.5/31)$
z_{10}	$-[i_{N,BM} + (2/Y_A)]/14 + i_{P,BM}(1.5/31)$		
z_{11}	$(i_{N,BM} - f_{XI} \cdot i_{N,XI})/14 - (i_{P,BM} - f_{XI} \cdot i_{P,XI})(1.5/31)$	z_{p11}	$1/(14 \cdot 2.86)$
z_{12}	$[i_{N,BM} - f_{XI}i_{N,XI} - ((f_{XI} - 1)/2.86)]/14 - (i_{P,BM} - f_{XI}i_{P,XI})(1.5/31)$		
p_1	$i_{P,XS} - i_{P,SS} - f_{SI}(i_{P,SI} - i_{P,SS})$	p_{p1}	$i_{P,SS} + Y_{PO4}$
p_2	$i_{P,SS}$	p_{p2}	-1
p_3	$i_{P,SS}$	p_{p3}	-1
p_4	$-i_{P,BM}$	p_{p4}	$-i_{P,BM}$
p_5	$-i_{P,BM}$	p_{p5}	$-i_{P,BM}$
p_6	$i_{P,BM} - f_{XI}(i_{P,XI})$	p_{p6}	$i_{P,BM} - f_{XI}(i_{P,XI})$
p_7	$i_{P,BM} - f_{XI}(i_{P,XI})$	p_{p7}	$i_{P,BM} - f_{XI}(i_{P,XI})$
		p_{p8}	1
		p_{p9}	1
p_{10}	$-i_{P,BM}$		
p_{11}	$i_{P,BM} - f_{XI}(i_{P,XI})$		
p_{12}	$i_{P,BM} - f_{XI}(i_{P,XI})$		

Mediante la ecuación 2.14 se pueden obtener las velocidades netas de conversión r_x correspondiente a cada componente (Tabla 5.3).

Tabla 5.3. Velocidad de conversión

<i>Componente</i>	<i>Velocidad de conversión</i>
S_I	$r_{SI} = f_{SI} \rho_1$
S_S	$r_{SS} = x_1 \rho_1 - \rho_2 - \rho_3 - \rho_{P1}$
X_I	$r_{XI} = f_{XI} (\rho_6 + \rho_7 + \rho_{11} + \rho_{12}) + f_{XI} (\rho_{P6} + \rho_{P7})$
X_S	$r_{XS} = -\rho_1$
X_H	$r_{XH} = \rho_4 + \rho_5 - \rho_6 - \rho_7$
X_A	$r_{XA} = \rho_{10} - \rho_{11} - \rho_{12}$
X_{STO}	$r_{XSTO} = Y_{STO,O2} \rho_2 + Y_{STO,NO} \rho_3 - (1/Y_{H,O2}) \rho_4 - (1/Y_{H,NO}) \rho_5 - \rho_8 - \rho_9$
X_{SS}	$r_{XSS} = t_1 \rho_1 + t_2 \rho_2 + t_3 \rho_3 + t_4 \rho_4 + t_5 \rho_5 + t_6 \rho_6 + t_7 \rho_7 + t_8 \rho_8 + t_9 \rho_9 + t_{10} \rho_{10}$ $+ t_{11} \rho_{11} + t_{12} \rho_{12} + t_{P1} \rho_{P1} + t_{P2} \rho_{P2} + t_{P3} \rho_{P3} + t_{P4} \rho_{P4} + t_{P5} \rho_{P5} + t_{P6} \rho_{P6}$ $+ t_{P7} \rho_{P7} + t_{P8} \rho_{P8} + t_{P9} \rho_{P9} + t_{P10} \rho_{P10} + t_{P11} \rho_{P11}$
S_O	$r_{SO} = x_2 \rho_2 + x_4 \rho_4 + x_6 \rho_6 + x_8 \rho_8 + x_{10} \rho_{10} + x_{11} \rho_{11}$ $+ x_{P2} \rho_{P2} + x_{P4} \rho_{P4} + x_{P6} \rho_{P6} + x_{P10} \rho_{P10}$
S_{NO}	$r_{SNO} = x_3 \rho_3 + x_5 \rho_5 + x_7 \rho_7 + x_9 \rho_9 + (1/Y_A) \rho_{10} + x_{12} \rho_{12}$ $+ x_{P3} \rho_{P3} + x_{P5} \rho_{P5} + x_{P7} \rho_{P7} + x_{P11} \rho_{P11}$
S_{N2}	$r_{SN2} = -x_3 \rho_3 - x_5 \rho_5 - x_7 \rho_7 - x_9 \rho_9 - x_{12} \rho_{12}$ $- x_{P3} \rho_{P3} - x_{P5} \rho_{P5} - x_{P7} \rho_{P7} - x_{P11} \rho_{P11}$
S_{NH}	$r_{SNH} = y_1 \rho_1 + y_2 \rho_2 + y_3 \rho_3 + y_4 \rho_4 + y_5 \rho_5 + y_6 \rho_6 + y_7 \rho_7 + y_{10} \rho_{10} + y_{11} \rho_{11}$ $+ y_{12} \rho_{12} + y_{P1} \rho_{P1} + y_{P4} \rho_{P4} + y_{P5} \rho_{P5} + y_{P6} \rho_{P6} + y_{P7} \rho_{P7}$
S_{HCO}	$r_{SHCO} = z_1 \rho_1 + z_2 \rho_2 + z_3 \rho_3 + z_4 \rho_4 + z_5 \rho_5 + z_6 \rho_6 + z_7 \rho_7 + z_9 \rho_9 + z_{10} \rho_{10}$ $+ z_{11} \rho_{11} + z_{12} \rho_{12} + z_{P1} \rho_{P1} + z_{P2} \rho_{P2} + z_{P3} \rho_{P3} + z_{P4} \rho_{P4} + z_{P5} \rho_{P5}$ $+ z_{P6} \rho_{P6} + z_{P7} \rho_{P7} + z_{P8} \rho_{P8} + z_{P9} \rho_{P9} + z_{P11} \rho_{P11}$
S_{PO}	$r_{SPO} = p_1 \rho_1 + p_2 \rho_2 + p_3 \rho_3 + p_4 \rho_4 + p_5 \rho_5 + p_6 \rho_6 + p_7 \rho_7 + p_{10} \rho_{10} + p_{11} \rho_{11}$ $+ p_{12} \rho_{12} + p_{P1} \rho_{P1} + p_{P2} \rho_{P2} + p_{P3} \rho_{P3} + p_{P4} \rho_{P4} + p_{P5} \rho_{P5} + p_{P6} \rho_{P6}$ $+ p_{P7} \rho_{P7} + p_{P8} \rho_{P8} + p_{P9} \rho_{P9}$
X_{PHA}	$r_{XPHA} = \rho_{P1} - Y_{PHA} \rho_{P2} - Y_{PHA} \rho_{P3} - (1/Y_{PAO,O2}) \rho_{P4} - (1/Y_{PAO,NO}) \rho_{P5}$ $- \rho_{P10} - \rho_{P11}$

X_{PP}	$r_{XPP} = -Y_{PO4} \rho_{P1} + \rho_{P2} + \rho_{P3} - \rho_{P8} - \rho_{P9}$
X_{PAO}	$r_{XPAO} = \rho_{P4} + \rho_{P5} - \rho_{P6} - \rho_{P7}$

Parámetros cinéticos y estequiométricos

La Tabla 5.4 lista los valores de los parámetros cinéticos para una temperatura de 20°C publicados con el modelo ASM3+BioP y los coeficientes de temperatura θ_T correspondientes a la función de interpolación propuesta por Gujer *et al.* (1999) (ecuación 2.15) para su estimación a otras temperaturas. En la cuarta columna se incluyen los valores calculados a 15°C, que son los utilizados en esta tesis. Por su parte, la Tabla 5.5 lista los valores de los coeficientes estequiométricos y de composición propuestos por *EAWAG* para un agua residual típica de Suiza correspondientes a la calibración del modelo ASM3 realizada por Koch *et al.* (2000).

Tabla 5.4. Valores de los parámetros cinéticos del ASM+BioP a 20°C y dependencia exponencial de la temperatura (θ_T); y valores a 15 °C empleados en la tesis

Símbolo	Descripción	Valores ASM3+ Bio-P a 20 °C /θ_T	Valores a 15 °C	Unidad
k_H	Constante de la velocidad de hidrólisis	9/0.04	7.369	$\text{gCOD}_{XS} \text{gCOD}_{XH}^{-1} \text{d}^{-1}$
K_X	Constante de saturación para la hidrólisis	1	1	$\text{g COD}_{XS} \text{g COD}_{XH}^{-1}$

Organismos heterótrofos X_H , Actividad aeróbica y desnitrificante

k_{STO}	Constante de velocidad de almacenamiento	12.5/0.07	8.809	$\text{gCOD}_{SS} \text{gCOD}_{XH}^{-1} \text{d}^{-1}$
$\eta_{NO,H}$	Factor de reducción anóxico para crecimiento/almacenamiento	0.8	0.8	----
$K_{O,H}$	Constante de saturación/inhibición para S_O	0.2	0.2	$\text{g O}_2 \text{m}^{-3}$
$K_{NO,H}$	Constante de saturación/inhibición para S_{NO}	0.5	0.5	$\text{g N-NO}_3^- \text{m}^{-3}$
$K_{SS,H}$	Constante de saturación para el sustrato S_S	10	10	$\text{g COD}_{SS} \text{m}^{-3}$
K_{STO}	Constante de saturación para X_{STO}	0.1	0.1	$\text{gCOD}_{XSTO} \text{gCOD}_{XH}^{-1}$
μ_H	Velocidad de crecimiento máximo de X_H	3/0.07	2.114	d^{-1}
$K_{NH,H}$	Constante de saturación para el amonio S_{NH}	0.01	0.01	g N m^{-3}
$K_{PO,H}$	Constante de sat. para ortofosfatos S_{PO}	0.011	0.011	g P m^{-3}
$K_{HCO,H}$	Constante de saturación para S_{HCO} para X_H	0.10	0.10	$\text{moles de HCO}_3^- \text{m}^{-3}$

b_H	Velo. de respiración endóg. máxima de X_H	0.3/0.07	0.211	d^{-1}
b_{STO}	Velocidad de respiración para X_{STO}	0.3/0.07	0.211	d^{-1}
$\eta_{NO,end,H}$	Factor de reducción anóxico para resp. endóg.	0.33	0.33	----

Organismos autótrofos X_A , actividad nitrificante

μ_A	Velocidad de crecimiento máximo de autótrofos X_A	0.9-1.8 /0.105	0.799	d^{-1}
$K_{NH,A}$	Constante de saturación para S_{NH}	1.0	1.0	$g\ N\ m^{-3}$
$K_{O,A}$	Constante de saturación para oxígeno	0.5	0.5	$g\ O_2\ m^{-3}$
$K_{HCO,A}$	Constante de saturación de bicarbonato	0.5	0.5	moles de $HCO_3^-\ m^{-3}$
$K_{PO_4,A}$	Constante de saturación para ortofosfatos	0.01	0.01	$g\ P\ m^{-3}$
b_A	Velocidad de respiración endógena para X_A	0.2/0.105	0.118	d^{-1}
$\eta_{NO,end,A}$	Factor de reducción anóxico para resp. endóg.	0.5	0.5	---

Organismos Acumuladores de fósforo

q_{PHA}	Constante de vel. para el almacenam. de X_{PHA}	6/0.04	4.912	d^{-1}
q_{PP}	Constante de vel. para el almacenam. de X_{PP}	1.5/0.04	1.228	d^{-1}
μ_{PAO}	Velocidad de crecimiento máximo de X_{PAO}	1 /0.07	0.705	d^{-1}
$\eta_{NO,PAO}$	Factor de reducc. anóxico para el crecim. X_{PAO}	0.6	0.6	----
b_{PAO}	Vel. de respiración endógena máx. para X_{PAO}	0.2/0.07	0.141	d^{-1}
$\eta_{NO,end,PAO}$	Factor reducc. anóxico para la resp endóg X_{PAO}	0.33	0.33	---
b_{PP}	Velocidad para la lisis de X_{PP}	0.2/0.07	0.141	d^{-1}
$\eta_{NO,lys,PP}$	Factor de reducción anóxico para la lisis de X_{PP}	0.33	0.33	---
b_{PHA}	Velocidad de respiración para X_{PHA}	0.2/0.07	0.141	d^{-1}
$\eta_{NO,resp,PHA}$	Factor de reducc. anóxico para la resp. de X_{PHA}	0.33	0.33	---
$K_{SS,PAO}$	Constante de saturación para S_S	10	10	$g\ COD_{SS}\ m^{-3}$
$K_{HCO,PAO}$	Constante de saturación para S_{HCO}	0.10	0.10	moles de $HCO_3^-\ m^{-3}$
$K_{PP,PAO}$	Constante de saturación para X_{PP}/X_{PAO}	0.05	0.05	$g\ P_{XPP}\ g\ COD_{XPAO}^{-1}$
$K_{O,PAO}$	Constante de saturación de oxígeno para X_{PAO}	0.2	0.2	$g\ O_2\ m^{-3}$
K_{PHA}	Constante de saturación para X_{PHA}/X_{PAO}	0.1	0.1	$gCOD_{XPHA}\ gCOD_{XPAO}^{-1}$
$K_{max,PAO}$	Relación máxima de X_{PP}/X_{PAO}	0.2	0.2	$g\ P_{XPP}\ g\ COD_{XPAO}^{-1}$
$K_{iPP,PAO}$	Const. de sat. para $[K_{max,PAO} - (X_{PP}/X_{PAO})]$	0.05	0.05	$g\ P_{XPP}\ g\ COD_{XPAO}^{-1}$
$K_{NO,PAO}$	Constante de saturación para S_{NO}	0.5	0.5	$g\ N\ m^{-3}$
$K_{PO,PP}$	Constante de sat. para S_{PO} (almacen de X_{PP})	0.2	0.2	$g\ P\ m^{-3}$
$K_{PO,PAO}$	Constante de sat. para S_{PO} (crecim de X_{PAO})	0.01	0.01	$g\ P\ m^{-3}$
$K_{NH,PAO}$	Coef. de saturación para S_{NH}	0.05	0.05	$g\ N\ m^{-3}$

Tabla 5.5. Valores de los parámetros estequiométricos y de composición para el ASM3+Bio-P

<i>Símbolo</i>	<i>Descripción</i>	<i>ASM3 +Bio-P</i>	<i>Unidad</i>
f_{SI}	Producción S_I en la hidrólisis	0	$\text{g COD}_{SI} \text{ g COD}_{XS}^{-1}$
Y_{STO,O_2}	Rendimiento aeróbico de producto almacenado por S_S	0.80	$\text{gCOD}_{XSTO} \text{ gCOD}_{SS}^{-1}$
$Y_{STO,NO}$	Rendimiento anóxico de producto almacenado por S_S	0.70	$\text{g COD}_{XSTO} \text{ gCOD}_{SS}^{-1}$
Y_{H,O_2}	Rendimiento aeróbico de biomasa heterótrofa	0.80	$\text{gCOD}_{XH} \text{ gCOD}_{XSTO}^{-1}$
$Y_{H,NO}$	Rendimiento anóxico de biomasa heterótrofa	0.65	$\text{gCOD}_{XH} \text{ gCOD}_{XSTO}^{-1}$
Y_A	Rendimiento de biomasa autótrofa por $N\text{-NO}_3^-$	0.24	$\text{g COD}_{XA} \text{ g N}_{SNO}^{-1}$
Y_{PAO,O_2}	Rendimiento aeróbico de biomasa PAOs	0.6	$\text{gCOD}_{XPAO} \text{ gCOD}_{SO}^{-1}$
$Y_{PAO,NO}$	Rendimiento anóxico de biomasa PAOs	0.5	$\text{gCOD}_{XPAO} \text{ gCOD}_{SNO}$
Y_{PHA}	Requerim. de X_{PHA} por X_{PP} almacen. (Almacen. de P)	0.2	$\text{g COD}_{XPHA} \text{ g P}_{XPP}^{-1}$
Y_{PO_4}	Requerim. de X_{PP} por X_{PHA} almacen. (liberación de P)	0.35	$\text{g P}_{XPP} (\text{g COD}_{XPHA})^{-1}$
f_{XI}	Producción de X_I en respiración endógena	0.20	$\text{gCOD}_{XI} (\text{gCOD}_{XBM})^{-1}$
$i_{N,SI}$	Contenido de N de S_I	0.01	$\text{g N} (\text{g COD}_{SI})^{-1}$
$i_{N,SS}$	Contenido de N de S_S	0.03	$\text{g N} (\text{g COD}_{SS})^{-1}$
$i_{N,XI}$	Contenido de N de X_I	0.04	$\text{g N} (\text{g COD}_{XI})^{-1}$
$i_{N,XS}$	Contenido de N de X_S	0.03	$\text{g N} (\text{g COD}_{XS})^{-1}$
$i_{N,BM}$	Contenido de N de la biomasa X_H y X_A	0.07	$\text{g N} (\text{g COD}_{XBM})^{-1}$
$i_{P,SI}$	Contenido de P de S_I	0	$\text{g P} (\text{g COD}_{SI})^{-1}$
$i_{P,SS}$	Contenido de P de S_S	0	$\text{g P} (\text{g COD}_{SS})^{-1}$
$i_{P,XI}$	Contenido de P de X_I	0.01	$\text{g P} (\text{g COD}_{XI})^{-1}$
$i_{P,XS}$	Contenido de P de X_S	0.005	$\text{g P} (\text{g COD}_{XS})^{-1}$
$i_{P,BM}$	Contenido de P de la biomasa X_H , X_A y X_{PAO}	0.014	$\text{g P} (\text{g COD}_{XBM})^{-1}$
$i_{SS,XI}$	Relación de SS a COD para X_I	0.75	$\text{g SS} (\text{g COD}_{XI})^{-1}$
$i_{SS,XS}$	Relación de SS a COD para X_S	0.75	$\text{g SS} (\text{g COD}_{XS})^{-1}$
$i_{SS,BM}$	Relación de SS a COD para la biomasa X_H , X_A y X_{PAO}	0.90	$\text{g SS} (\text{g COD}_{XBM})^{-1}$
$i_{SS,XSTO}$	Relación de SS a COD para X_{STO}	0.60	$\text{g SS} (\text{g COD}_{XSTO})^{-1}$
$i_{SS,XPP}$	Relación de SS a P para X_{PP}	3.23	$\text{g SS} (\text{g COD}_{XPP})^{-1}$

5.3.2 Modelo de unidades de proceso y equipamiento

5.3.2.1 Modelo de reactor

Para los compartimentos de reacción, se consideran reactores de mezcla completa en estado estacionario (CSTR). Se elige el modelo ASM3+Bio-P (Rieger et al., 2001) para representar los procesos biológicos que ocurren en los reactores, por lo que se incluyen las ecuaciones 5.1 a 5.12 y 5.13 a 5.22 introducidas previamente.

Los valores utilizados para los coeficientes estequiométricos y de composición del modelo ASM3+BioP son aquellos calibrados y presentados con el modelo del módulo Bio-P de la EAWAG (Tabla 5.5) y los parámetros cinéticos empleados son aquellos calculados para 15°C (Tabla 5.4) mostrados en la sección anterior.

Las consideraciones respecto a los sistemas de aireación descritas en el Capítulo 2 aplican para los modelos desarrollados en este capítulo. Para el cálculo de la energía de aireación se utiliza la ecuación 2.21 sin necesidad de modificarla como en el Capítulo 4, ya que los compartimentos que tienen posibilidad de aireación poseen en este caso un volumen de 1333 m³.

5.3.2.2 Modelo del decantador

Para el modelado del decantador secundario se considera un tanque de sedimentación no reactivo, subdividido en 10 capas, y se usa el modelo de velocidad de sedimentación doble exponencial propuesta por Takács et al. (1991). Igual que en casos anteriores, se supone un volumen de 6000 m³, con un área transversal de 1500 m² y una profundidad de 4 m. Las ecuaciones 2.22 a 2.36 mostradas en el Capítulo 2 también aplican aquí.

5.3.3 Configuraciones de planta consideradas y sus modelos

La planta de referencia utilizada como punto de partida es aquella adoptada por Gernaey y Jorgensen (2004) en su protocolo de simulación o “*benchmark*” desarrollado para la evaluación y comparación de estrategias de control en plantas de tratamiento de

aguas residuales con remoción combinada de nutrientes, y corresponde a la configuración de proceso *A2/O* (o proceso *Phoredox*). La planta del protocolo mencionado consiste en siete compartimentos de reacción y un decantador secundario. Se considera que los compartimentos de reacción son reactores de mezcla completa (CSRT). En la configuración de proceso *A2/O* propuesta en el protocolo, los dos primeros compartimentos de reacción operan bajo condiciones anaeróbicas, el tercero y cuarto bajo condiciones anóxicas y los últimos tres bajo condiciones aeróbicas. El primer reactor tiene un volumen de 500 m³, el segundo, tercer y cuarto reactores son de 750 m³, y los últimos tres reactores son de 1333 m³. Finalmente, el decantador secundario se asume con un volumen total de 6000 m³, con 1500 m² de área transversal y 4 m de profundidad, con el punto de alimentación ubicado a 2.2 m de la base. Esta configuración posee dos reciclos, uno interno y otro externo. El reciclo interno alimenta parte del licor nitrificado proveniente del último al tercer reactor, y el externo recircula parte de los barros decantados en el sedimentador al primer compartimento. Los valores para las principales variables y parámetros de operación que se proponen en el *benchmark* son: coeficiente de transferencia gas-líquido $k_L a$ de 240 d⁻¹ para la velocidad de aireación de los reactores quinto y sexto y de 60 d⁻¹ para el último reactor; una relación de recirculación para el reciclo interno de 300% del caudal volumétrico afluente (55338 m³ d⁻¹), y para el reciclo externo de 100% (18446 m³ d⁻¹); y una corriente de barros de la zona inferior del decantador de 400 m³ d⁻¹.

Caso de estudio 1

En el *caso de estudio 1.a* de este capítulo se optimizan primeramente las condiciones operativas de la planta propuesta en el protocolo para estado estacionario, y posteriormente casos de plantas correspondientes a las configuraciones de proceso *UCT*, *UCT modificado* y *Bardenpho modificado* para el mismo modelo de afluente (*casos de estudio 1.a* a *1.d*, respectivamente). Las plantas propuestas para esos casos poseen los mismos equipos y secuencia que la correspondiente a la configuración *A2/O* (un reactor de 500 m³ seguido de tres de 750 m³, luego tres de 1333 m³ y, finalmente, un decantador secundario de 6000 m³, con 1500 m² de área transversal y 4 m de profundidad, alimentado a 2.2 m desde la base), pero difieren en los reciclos posibles

que caracterizan a cada configuración. En cada caso, se posibilita la dosificación de una fuente externa de carbono a cualquiera de los reactores.

Las variables operativas a optimizar para cada configuración son los caudales de los reciclos interno y externo, de aireación, de la fuente externa de carbono, del efluente clarificado y de la corriente de barros decantados, y de los barros destinados a tratamiento. Cada compartimento funcionará bajo condiciones aeróbicas, anóxicas o anaeróbicas dependiendo de las condiciones que prevalezcan como consecuencia de las corrientes alimentadas al mismo y la aireación recibida. En los modelos, esta última resulta de la “manipulación” del coeficiente de transferencia de masa de oxígeno $k_L a$, como se explicó en capítulos anteriores. La Figura 5.3 muestra la configuración de planta que se optimiza en cada caso.

En la configuración de planta *A2/O* los reactores quinto, sexto y séptimo pueden operar como compartimentos aireados, dependiendo del resultado de la optimización, y existe la posibilidad de un reciclo interno que recircule parte del licor nitrificado desde el séptimo compartimento al tercero, y también un reciclo externo que recircule parte de los barros decantados al primer reactor.

Para representar la configuración *UCT*, se contempla también la aireación de los últimos tres reactores. El reciclo externo alimenta parte de los barros decantados al tercer reactor. El primer reciclo interno recircula parte del licor nitrificado desde el séptimo compartimento al tercero, y el segundo reciclo interno deriva una parte de la corriente que egresa del cuarto reactor al primero.

Para la configuración de proceso *UCT modificado*, los reactores con posibilidad de aireación son también el quinto, sexto y séptimo, y el reciclo externo alimenta una fracción de los barros desde el decantador al tercer reactor. El primer reciclo interno recircula una fracción del licor nitrificado desde el séptimo compartimento al cuarto y el segundo reciclo interno deriva una parte de la corriente que egresa del tercer reactor al primero.

La representación de la configuración de proceso *Bardenpho* se logra mediante la posibilidad de aireación del quinto y séptimo compartimento (el sexto no tiene posibilidad de aireación) y las corrientes de recirculación posibles corresponden a un reciclo externo que alimenta parte de los barros decantados al primer reactor, y un reciclo interno que recircula parte de la corriente que abandona el quinto compartimento al tercero.

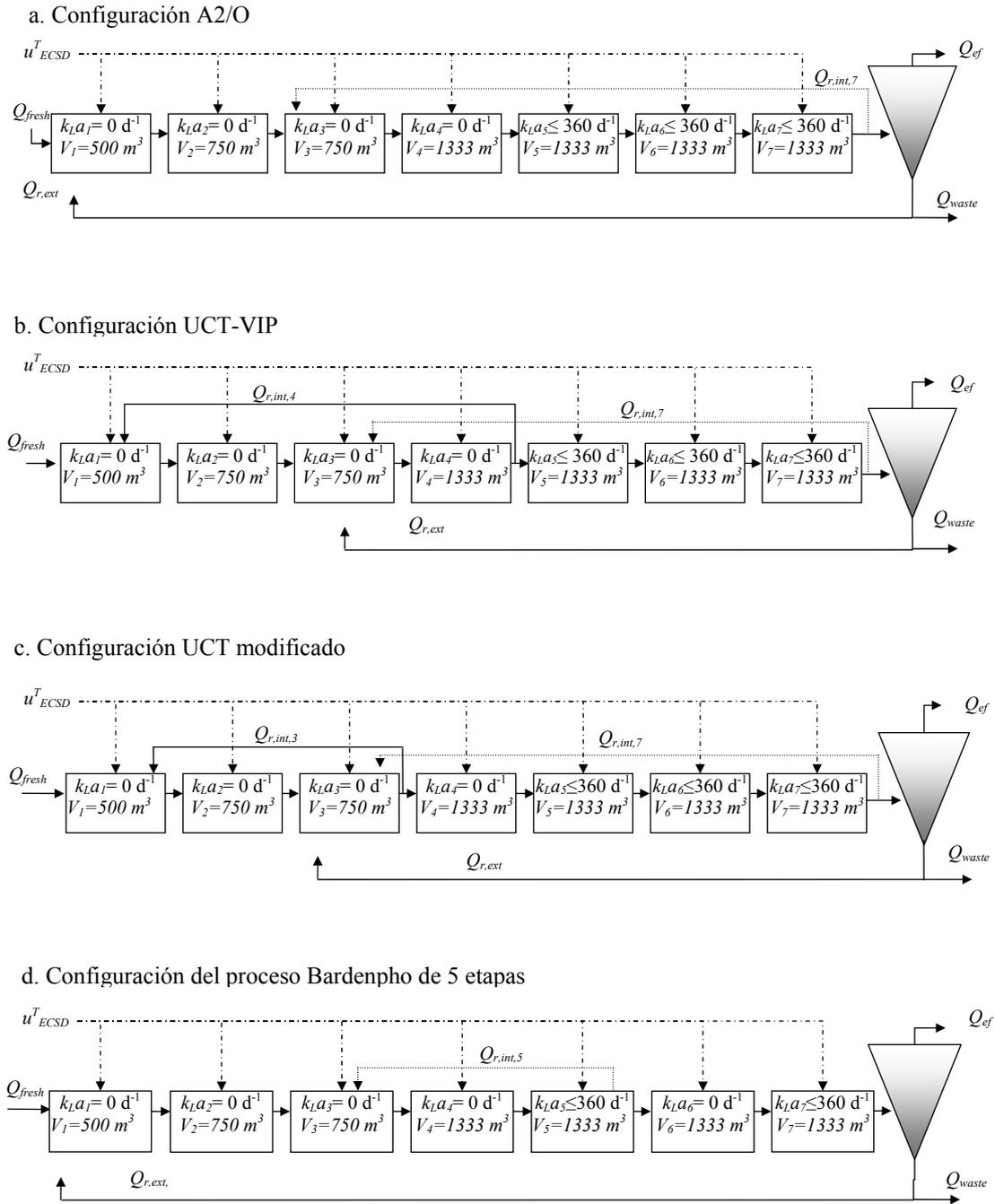


Figura 5.3. Configuraciones de planta consideradas en el caso de estudio 1

Para presentar el resto de las ecuaciones que describen los diferentes modelos para los casos de estudio 1 se definen:

- Conjuntos:

$i = \{ 1, 2, 3, \dots, I \}$ conjunto de reactores i ,

Previo a cada compartimento de reacción, se modela un mezclador no reactivo:

$g = \{ 1, 2, 3, \dots, G \}$ conjunto de mezcladores g ,

$x = \{ 1, 2, 3, \dots, X \}$ conjunto de componentes del modelo ASM3+Bio-P,

$p = \{ 1, 2, 3, \dots, P, p1, p2, p3, \dots, pP \}$ conjunto de procesos del modelo ASM3+Bio-P,

$m = \{ 1, 2, 3, \dots, M \}$ conjunto de capas del modelo del decantador,

$cont = \{ 1, 2, 3, \dots, CONT \}$ conjunto de contaminantes del efluente,

$l = \{ 1, 2, 3, \dots, L \}$ conjunto de variables de operación.

- Variables:

Q_i caudal volumétrico en el compartimento de reacción i ,

V_i volumen del compartimento de reacción i ,

A_{sett} área transversal del decantador ($=1500\text{m}^2$),

h altura de cada capa del decantador ($=0.4\text{m}$),

$C_{x,i}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el reactor i ,

C_{cont} concentración del contaminante $cont$ en el efluente,

$C_{cont,lim}$ valor límite permitido de concentración del contaminante $cont$,

$C_{x,g}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el mezclador g ,

$C_{x,fresh}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el afluente,

$C_{x,r,int,i}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el reciclo interno proveniente del reactor i ,

$C_{x,r,ext}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en el reciclo externo,

$C_{x,sett,in}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en la corriente de entrada al decantador,

$C_{x,bottom}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en la corriente de barros que abandona la zona de sedimentación del decantador,

$C_{x,ef}$ concentración del componente x (S_x o X_x) en la corriente de efluente clarificado que abandona la zona de clarificación del decantador,

$\rho_{p,i}$ velocidad del proceso p en el reactor i ,

$v_{p,x}$ coeficientes estequiométricos del modelo ASM3+Bio-P,

$r_{x,i}$ término de reacción para cada componente x y reactor i ,

$k_L a_i$ coeficiente de transferencia de masa de oxígeno en el reactor i ,
 Q_{fresh} caudal volumétrico afluente,
 $Q_{r,int,i}$ caudal de reciclaje interno proveniente del reactor i ,
 $Q_{r,ext}$ caudal de reciclaje externo,
 $Q_{i,i'}$ caudal dirigido del compartimento i al compartimento i' ,
 $Q_{sett,in}$ caudal dirigido al decantador,
 Q_{bottom} corriente de barros que abandona la zona de sedimentación del decantador,
 Q_{waste} es la corriente de barros que se elimina del sistema,
 Q_{ef} corriente de efluente clarificado que abandona la zona de clarificación del decantador,
 $u_{ECSD,g}$ es el caudal másico de la fuente de carbono externa ($u_{SS,g}$ gCOD_{SS} d⁻¹) alimentada al mezclador g ,
 u_{ECSD}^T el caudal másico total de la fuente de carbono externa ($u_{SS,g}$ gCOD_{SS} d⁻¹),
 OV_l variables de operación l ;

- Restricciones:

Para los volúmenes V_i y los coeficientes de transferencia de masa $k_L a_i$ de cada compartimento de reacción i , se introducen las restricciones siguientes:

$$\begin{aligned}
 V_1 &= 500 \text{ m}^3, \\
 V_2 &= 750 \text{ m}^3, \\
 V_3 &= 750 \text{ m}^3, \\
 V_4 &= 750 \text{ m}^3, \\
 V_5 &= 1333 \text{ m}^3, \\
 V_6 &= 1333 \text{ m}^3, \\
 V_7 &= 1333 \text{ m}^3,
 \end{aligned} \tag{5.24}$$

$$\begin{aligned}
 k_L a_i &= 0 \text{ d}^{-1}, \quad i = 1,2,3,4 \\
 0 \text{ d}^{-1} &\leq k_L a_i \leq k_L a_{\max} \text{ d}^{-1}, \quad i = 5,6,7
 \end{aligned} \tag{5.25}$$

El valor $k_L a_{i,max}$ es el valor de operación máximo permitido.

Las ecuaciones que definen los modelos para cada esquema de proceso estudiado en el caso 1 son las siguientes:

- Caso 1.a: configuración A2/O

Se tiene reciclo interno desde el séptimo compartimento al mezclador previo al tercer compartimento, y el resto de los reciclos internos se anulan. El reciclo externo recircula una fracción de la corriente de los barros decantados al primer reactor.

- Balance de masa en cada reactor i :

$$Q_i = Q_{fresh} + Q_{r,ext}, \quad i = 1 \quad (5.26)$$

$$Q_i = Q_{(i-1)} + Q_{r,int,7}, \quad i = 3 \quad (5.27)$$

$$Q_i = Q_{(i-1)}, \quad i = 2,4,5,6,7 \quad (5.28)$$

- Balance de masa total en separadores:

$$Q_7 = Q_{sett,in} + Q_{r,int,7} \quad (5.29)$$

$$Q_{bottom} = Q_{waste} + Q_{r,ext}^T \quad (5.30)$$

$$u^T_{ECSD} = \sum_G u_{ECSD,g} \quad (5.31)$$

La ecuación 5.31 representa la dosificación de la fuente de carbono externa expresada como el flujo másico de sustrato soluble fácilmente biodegradable $u_{SS,g}$ (gCOD_{SS} d⁻¹) al mezclador g . Se considera despreciable el cambio de volumen debido a esta corriente dado que su caudal volumétrico es despreciable respecto a las demás corrientes intervinientes.

- Balance de masa en el decantador:

$$Q_{sett,in} = Q_{bottom} + Q_{ef} \quad (5.32)$$

- Balance de masa por componentes en cada reactor i :

$$\frac{Q_i}{V_i} (C_{x,g} - C_{x,i}) + r_{x,i} = 0, \quad \forall i, g = i, x \neq O_2 \quad (5.33)$$

$$\frac{Q_i}{V_i} (S_{O,g} - S_{O,i}) + k_L a_i (S_{O,sat} - S_{O,i}) + r_{S_{O,i}} = 0, \quad \forall i, g = i \quad (5.34)$$

donde $S_{O,sat}$ es la constante de saturación de oxígeno a 15 ° ($S_{O,sat} = 8 \text{ gO}_2 \text{ m}^{-3}$).

- Balance de masa por componentes en mezcladores, separadores y decantador:

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh} C_{x,fresh} + Q_{r,ext} C_{x,r,ext} + u_{x,g}, \quad i = 1, g = i, x \quad (5.35)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + Q_{r,int,7} C_{x,r,int,7} + u_{x,g}, \quad i = 3, g = i, x \quad (5.36)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad i = 2, 4, 5, 6, 7, g = i, x \quad (5.37)$$

$$C_{x,r,int,i} = C_{x,i}, \quad \forall x, i = I \quad (5.38)$$

$$C_{x,sett,in} = C_{x,i}, \quad \forall x, i = I \quad (5.39)$$

$$C_{x,r,ext} = C_{x,bottom}, \quad \forall x \quad (5.40)$$

$$C_{x,bottom} = C_{x,m}, \quad \forall x, m = 1 \quad (5.41)$$

$$C_{x,ef} = C_{x,m}, \quad \forall x, m = 10 \quad (5.42)$$

- Caso 1.b: configuración UCT

Se tienen dos reciclos internos; el primero recircula una fracción de la corriente del séptimo reactor al mezclador previo al tercer reactor, y el segundo deriva una parte de la corriente que egresa del cuarto reactor al primero. El resto de los reciclos internos se anulan. El reciclo externo dirige una fracción de los barros decantados al tercer reactor.

- Balance de masa en cada reactor i :

$$Q_i = Q_{fresh} + Q_{r,int,4}, \quad i = 1 \quad (5.43)$$

$$Q_i = Q_{(i-1)} + Q_{r,int,7} + Q_{r,ext}, \quad i = 3 \quad (5.44)$$

$$Q_i = Q_{(i-1)}, \quad i = 2, 4, 6, 7 \quad (5.45)$$

$$Q_i = Q_{4,5}, \quad i = 5 \quad (5.46)$$

- Balance de masa total en separadores:

$$Q_4 = Q_{4,5} + Q_{r,int,4} \quad (5.47)$$

Las ecuaciones 5.29 a 5.31 aplican también para el balance de masa en el separador a la salida del último reactor, en el separador de la corriente de barros decantados y en el de la corriente de la fuente de carbono externa que alimenta a los distintos mezcladores.

- Balance de masa en el decantador:

Aplica la ecuación 5.32.

- Balance de masa por componentes en cada reactor i :

Aplican las ecuaciones 5.33 y 5.34.

- Balance de masa por componentes en mezcladores, separadores y decantador:

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh} C_{x,fresh} + Q_{r,int,4} C_{x,r,int,4} + u_{x,g}, \quad i = 1, g = i, x \quad (5.48)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + Q_{r,int,7} C_{x,r,int,7} + Q_{r,ext} C_{x,r,ext} + u_{x,g}, i = 3, g = i, x \quad (5.49)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad i = 2, 4, 6, 7, g = i, x \quad (5.50)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{4,5} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad i = 5, g = i, x \quad (5.51)$$

$$C_{x,r,int,4} = C_{x,4}, \quad \forall x \quad (5.52)$$

Se deben considerar además las ecuaciones 5.38 a 5.42.

- Caso 1.c: configuración UCT modificado

En esta configuración se tienen dos reciclos internos; el primero recircula una fracción de licor nitrificado desde el séptimo compartimento al cuarto, y el segundo deriva una parte de la corriente que egresa del tercer reactor al primero. El resto de los reciclos internos se anulan. El reciclo externo alimenta una fracción de los barros sedimentados al tercer reactor.

- Balance de masa en cada reactor i :

$$Q_i = Q_{fresh} + Q_{r,int,3}, \quad i = 1 \quad (5.53)$$

$$Q_i = Q_{(i-1)} + Q_{r,ext}, \quad i = 3 \quad (5.54)$$

$$Q_i = Q_{3,4} + Q_{r,int,7}, \quad i = 4 \quad (5.55)$$

$$Q_i = Q_{(i-1)}, \quad i = 2, 5, 6, 7 \quad (5.56)$$

- Balance de masa total en separadores:

$$Q_3 = Q_{3,4} + Q_{r,int,3} \quad (5.57)$$

Las ecuaciones 5.29 a 5.31 aplican también para el balance de masa en el separador a la salida del último reactor, en el separador de la corriente de barros decantados y en el de la corriente de la fuente de carbono externa que alimenta a los mezcladores.

- Balance de masa en el decantador:

Aplica la ecuación 5.32.

- Balance de masa por componentes en cada reactor i :

Aplican las ecuaciones 5.33 y 5.34.

- Balance de masa por componentes en mezcladores, separadores y decantador:

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh} C_{x,fresh} + Q_{r,int,3} C_{x,r,int,3} + u_{x,g}, \quad i = 1, g = i, x \quad (5.58)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + Q_{r,ext} C_{x,r,ext} + u_{x,g}, \quad i = 3, g = i, x \quad (5.59)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{3,4} C_{x,(i-1)} + Q_{r,int,7} C_{x,r,int,7} + u_{x,g}, \quad i = 4, g = i, x \quad (5.60)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad i = 2, 5, 6, 7, g = i, x \quad (5.61)$$

$$C_{x,r,int,3} = C_{x,3}, \quad \forall x \quad (5.62)$$

Se emplean además las ecuaciones 5.38 a 5.42.

- Caso 1.d: configuración Bardenpho modificado

En esta configuración se tiene sólo posibilidad de aireación del quinto y séptimo compartimento (el sexto no tiene aireación). Por tanto, las ecuaciones 5.25 se reemplazan por las siguientes:

$$\begin{aligned} k_L a_i &= 0 \, d^{-1}, \quad i = 1, 2, 3, 4, 6 \\ 0 \, d^{-1} &\leq k_L a_i \leq k_L a_{\max} \, d^{-1}, \quad i = 5, 7 \end{aligned} \quad (5.63)$$

Las corrientes de recirculación posibles corresponden a un reciclo externo que alimenta parte de los barros decantados al primer reactor, y uno interno que recircula parte de la corriente que sale del quinto compartimento al tercero.

- Balance de masa en cada reactor i :

$$Q_i = Q_{fresh} + Q_{r,ext}, \quad i = 1 \quad (5.64)$$

$$Q_i = Q_{(i-1)} + Q_{r,int,5}, \quad i = 3 \quad (5.65)$$

$$Q_i = Q_{(i-1)}, \quad i = 2, 4, 5, 7 \quad (5.66)$$

$$Q_i = Q_{5,6}, \quad i = 6 \quad (5.67)$$

- Balance de masa total en separadores:

$$Q_5 = Q_{5,6} + Q_{r,int,5} \quad (5.68)$$

Las ecuaciones 5.29 a 5.31 aplican también para los balances de masa de los separadores de la corriente de salida del último reactor, de la corriente de barros decantados y de la corriente de la fuente de carbono externa que alimenta a los mezcladores.

- Balance de masa en el decantador:

Aplica la ecuación 5.32.

- Balance de masa por componentes en cada reactor i :

Aplican las ecuaciones 5.33 y 5.34.

- Balance de masa por componentes en mezcladores, separadores y decantador:

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh} C_{x,fresh} + Q_{r,ext} C_{x,r,ext} + u_{x,g}, \quad i = 1, g = i, x \quad (5.69)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + Q_{r,int,5} C_{x,r,int,5} + u_{x,g}, \quad i = 3, g = i, x \quad (5.70)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad i = 2,4,5,7, g = i, x \quad (5.71)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{5,6} C_{x,(i-1)} + u_{x,g}, \quad i = 6, g = i, x \quad (5.72)$$

$$C_{x,r,int,5} = C_{x,5}, \quad \forall x \quad (5.73)$$

Se emplean además las ecuaciones 5.38 a 5.42.

Caso de estudio 2

En el caso de estudio 2, se optimizan las condiciones de operación de un modelo de planta de tratamiento que posee los mismos equipos y secuencia que los descriptos para el caso de estudio 1, pero contemplando la posibilidad de distribución de las corrientes principales del sistema. La Figura 5.4 presenta un esquema de la superestructura a optimizar.

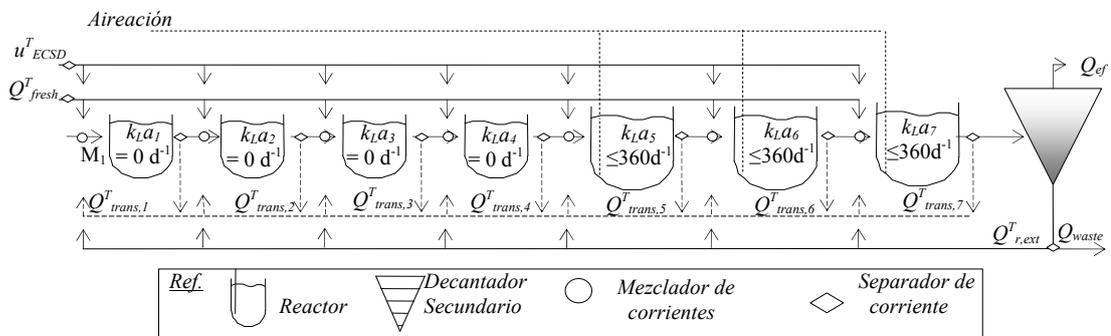


Figura 5.4. Superestructura optimizada en el caso de estudio 2

La superestructura consiste en 7 compartimentos de reacción con un volumen total de 6749 m³, y un decantador secundario de 6000 m³. Los cuatro primeros compartimentos carecen de sistema de aireación, por lo que constituirán las eventuales regiones anaerobias y/o anóxicas del proceso de tratamiento. Los últimos tres, que poseen sistema de aireación, podrán constituir la zona aerobia u operar en condiciones anóxicas o anaerobias, según conveniencia. El primer compartimento posee un volumen

de 500 m³, los siguientes tres de 750 m³, y los últimos tres compartimentos de 1333 m³. Para el decantador, se supone un área transversal de 1500 m² y una profundidad de 4 m, con el punto de alimentación ubicado a 2.2 m desde la base. La estructura propuesta incluye las cuatro alternativas de proceso descritas en el caso precedente y contempla también otras posibilidades de recirculaciones, derivaciones (*bypasses*) y distribuciones de corrientes.

La corriente de agua residual afluyente fresca (Q_{fresh}^T), las corrientes de reciclo entre compartimentos y *bypasses* ($Q_{trans,i}^T$), la corriente de reciclo externo -de barros- ($Q_{r,ext}^T$) y la corriente de la fuente de carbono externa (u_{ECSD}^T) pueden ser distribuidas y/o alimentadas a uno o varios de los siete compartimentos de reacción. La corriente de reciclo externo bombea una fracción de los barros que salen de la zona de sedimentación a la zona de reacción. Se consideran corrientes entre compartimentos ($Q_{trans,i}^T$) que pueden recircular y/o derivar (*bypass*) parte del flujo de cada reactor *i*. Por ejemplo, la corriente que egresa del reactor 2 se divide en dos corrientes: una es alimentada al reactor 3 ($Q_{2,3}$), y la otra, llamada corriente transversal ($Q_{trans,2}^T$), puede distribuirse hacia los compartimentos subsiguientes (cuarto a séptimo) o precedentes (primero), como se muestra en la Figura 6.1. Así, esta corriente se calcula como $Q_{trans,2}^T = Q_{trans,2,1} + Q_{trans,2,4} + Q_{trans,2,5} + Q_{trans,2,6} + Q_{trans,2,7}$, ya que $Q_{trans,2,3} = 0$).

Como se comentó previamente, a medida que se extiende la estructura adicionando nuevas posibles corrientes de proceso, fundamentalmente de recirculación y patrones de distribución de las mismas, se amplía el espacio de búsqueda de soluciones y, por tanto, la complejidad del problema matemático. A medida que se agregan nuevas posibilidades, se consiguen superestructuras que incluyen a configuraciones más sencillas o a aquellas que posibilitan una distribución de corrientes más restringida. Por lo tanto, debido al incremento del espacio de alternativas consideradas en esta superestructura, se espera encontrar soluciones mejores, o al menos tan buenas, como las encontradas en la optimización de los modelos estudiados en el caso anterior, ya que los mismos están comprendidos en el modelo que aquí se plantea.

El resto de las ecuaciones que describen el modelo propuesto en el caso de estudio 2, se listan a continuación. Para ello, se consideran los mismos conjuntos y la mayoría de las variables que se definieron para los modelos del caso anterior. Se reemplazan las siguientes variables asociadas a corrientes del proceso:

Q_{fresh} caudal volumétrico total afluente,

$Q_{r,int,i}$ caudal de reciclo interno total proveniente del reactor i ,

$Q_{r,ext}$ caudal de reciclo externo total,

por las variables:

Q_{fresh}^T caudal volumétrico total afluente,

$Q_{trans,i}^T$ caudal de la corriente transversal total proveniente del reactor i (que constituirá el reciclo interno y *bypass* de dicho reactor),

$Q_{r,ext}^T$ caudal de reciclo externo total,

Finalmente, es necesario definir nuevas variables asociadas a corrientes:

$Q_{fresh,g}$ caudal volumétrico afluente alimentado al mezclador g ,

$Q_{trans,,i,g}$ caudal de la corriente transversal proveniente del reactor i y alimentado al mezclador g .

$Q_{r,ext,g}$ caudal de reciclo externo alimentado al mezclador g ,

Las restricciones 5.24 y 5.25 se aplican para fijar los volúmenes y aireación.

- Balance de masa total en los mezcladores:

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{r,ext,g} + \sum_I Q_{trans,i',g}, \quad \forall i', i=1, g=i \quad (5.74)$$

$$Q_i = Q_{fresh,g} + Q_{r,ext,g} + \sum_I Q_{trans,i',g} + Q_{(i-1),i}, \quad \forall i \neq 1, g=i, \forall i' \quad (5.75)$$

- Balance de masa total en separadores:

$$Q_{fresh}^T = \sum_G Q_{fresh,g} \quad (5.76)$$

$$Q_i = Q_{i,(i+1)} + Q_{trans,i}^T, \quad \forall i \neq I \quad (5.77)$$

$$Q_i = Q_{sett,in} + Q_{trans,i}^T, \quad i = I \quad (5.78)$$

$$Q^T_{trans,i} = \sum_G Q_{trans,i,g} \quad \forall i \quad (5.79)$$

$$Q_{trans,i,g} = 0 \quad \forall i \neq I, g = (i+1) \quad (5.80)$$

Esta ecuación permite anular la corriente transversal que alimentaría al reactor siguiente; esto es, la corriente del reactor 1 al 2, la del 2 al 3 y, así, sucesivamente. La solución permite computar el valor óptimo de la energía necesaria para bombeo (ver ec. 5.89.b para el cálculo de energía para bombeo). Notar que el flujo de un compartimento al siguiente es debido a la acción de la gravedad; en cambio, las corrientes de recirculación a compartimentos anteriores o *bypass* a otras zonas de reacción, son debidas a bombeo.

$$Q^T_{r,ext} = \sum_G Q_{r,ext,g} \quad (5.81)$$

Las ecuaciones 5.30 y 5.31 aplican también para el balance de masa en el separador de la corriente de barros decantados y en el de la corriente de la fuente de carbono externa que alimenta a los distintos mezcladores.

- Balance de masa en el decantador:

Aplica la ecuación 5.32.

- Balance de masa por componentes en cada compartimento i :

Aplican las ecuaciones 5.33 y 5.34.

- Balance de masa por componentes en mezcladores, separadores y decantador:

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{r,ext,g} C_{x,r,ext} + \sum_{I'} Q_{trans,i',g} C_{x,i'} + u_{x,g}, \quad \forall i', i = 1, g = i, x \quad (5.82)$$

$$Q_i C_{x,g} = Q_{fresh,g} C_{x,fresh} + Q_{(i-1)} C_{x,(i-1)} + Q_{r,ext,g} C_{x,r,ext} + \sum_{I'} Q_{trans,i',g} C_{x,i'} + u_{x,g}, \quad \forall i \neq 1, g = i, x, i' \quad (5.83)$$

Se deben considerar además las ecuaciones 5.39 a 5.42.

5.3.4 Optimización

5.3.4.1 Función objetivo y criterios de performance

El criterio de optimización consiste en la minimización del costo de operación total anual, COTA (€/año), dado por la expresión 2.94 presentada en el capítulo 2:

$$COTA = \alpha_{EQ} EQ + \alpha_E E_a + \alpha_{SLDG} u_{SLDG} + \alpha_E E_p + \alpha_{ECS D} u^T_{ECS D} \quad (2.94)$$

Los coeficientes de costos unitarios de operación anual α para cada ítem son los introducidos en el Capítulo 2 (Tabla 2.8): $\alpha_{EQ} = 50$ Euro día $(\text{kg PU año})^{-1}$, $\alpha_E = 25$ Euro día $(\text{kWh año})^{-1}$, $\alpha_{SLDG D} = 75$ Euro día $(\text{kgSS año})^{-1}$, y $\alpha_{ECS D} = 109.5$ Euro día $(\text{kgCOD año})^{-1}$. Cada ítem de costo se describe mediante las siguientes expresiones:

Índice de calidad del efluente EQ (kg unidades contaminantes d^{-1}):

$$EQ = \left(\frac{1}{1000} \right) \left(\beta_{SS} X_{SS,ef} + \beta_{COD} DQO_{ef} + \beta_{BOD} DBO_{ef} \right) Q_{ef} + \beta_{TKN} NTK_{ef} + \beta_{NO} S_{NO,ef} + \beta_{P_{tot}} P_{tot,ef} \quad (5.84)$$

donde DQO_{ef} , DBO_{ef} , NTK_{ef} y $P_{tot,ef}$ son, respectivamente, la demanda química y biológica de oxígeno, el contenido de nitrógeno total Kjeldahl y de fósforo total en el líquido clarificado, y se calculan a través de:

$$DQO_{ef} = S_{S,ef} + S_{I,ef} + X_{S,ef} + X_{I,ef} + X_{H,ef} + X_{A,ef} + X_{STO,ef} + X_{PHA,ef} + X_{PAO,ef} \quad (5.85)$$

$$DBO_{ef} = 0.25 \left(S_{S,ef} + (1 - f_{S_I}) X_{S,ef} + (1 - f_{X_I}) \left(\begin{array}{l} X_{H,ef} + X_{A,ef} + X_{STO,ef} \\ + X_{PAO,ef} + X_{PHA,ef} \end{array} \right) \right) \quad (5.86)$$

$$NTK_{ef} = \left(\begin{array}{l} i_{N,SI} S_{I,ef} + i_{N,SS} S_{S,ef} + S_{NH,ef} + i_{N,XS} X_{S,ef} + i_{N,XI} X_{I,ef} \\ + i_{N,BM} (X_{H,ef} + X_{A,ef} + X_{PAO,ef}) \end{array} \right) \quad (5.87)$$

$$P_{TOT,ef} = \left(\begin{array}{l} i_{P,SI} S_{I,ef} + i_{P,SS} S_{S,ef} + S_{PO4,ef} + i_{P,XS} X_{S,ef} + i_{P,XI} X_{I,ef} + X_{PP,ef} \\ + i_{P,BM} (X_{H,ef} + X_{A,ef} + X_{PAO,ef}) \end{array} \right) \quad (5.88)$$

Los factores de peso β_y para los componentes contaminantes empleados en el modelo son (g de unidades contaminantes g^{-1}): $\beta_{SS} = 2$, $\beta_{COD} = 1$, $\beta_{TKN} = 20$, $\beta_{Ptot} = 20$, $\beta_{NO} = 20$, y $\beta_{BOD} = 2$; y son los mismos a los definidos en los capítulos anteriores, a excepción del coeficiente introducido para fósforo β_{Ptot} , tomado de Gernaey y Jorgensen (2004).

La *demanda diaria de energía de aireación* E_a se define por la ecuación 2.21:

$$E_a = 24 \sum_I \left(0.4032 \left(\frac{k_L a_i}{24} \right)^2 + 7.8408 \left(\frac{k_L a_i}{24} \right) \right) \quad (2.21)$$

La *demanda de energía de bombeo* para los modelos del caso de estudio 1 se calcula mediante:

$$E_p = \gamma \left(\sum Q_{r,int,i} + Q_{r,ext} + Q_{waste} \right) \quad (5.89.a)$$

y para el modelo del caso de estudio 2 se emplea:

$$E_p = \gamma \left(\sum Q^T_{trans,i} + Q^T_{r,ext} + Q_{waste} \right) \quad (5.89.b)$$

con $\gamma = 0.04 \text{ (kWh m}^{-3}\text{)}$ (Coop et al., 2002).

El caudal másico diario de barros producidos destinados a tratamiento u_{SLDG} se computa mediante la siguiente ecuación:

$$u_{SLDG} = (X_{SS,waste} Q_{waste}) \quad (2.100)$$

Finalmente, u_{ECSD}^T es el caudal másico diario de la fuente de carbono externa, y se calcula mediante la ecuación 5.31.

5.3.4.2 Especificaciones del agua residual afluyente

Las concentraciones de los componentes del agua residual afluyente usadas corresponden al promedio ponderado de las concentraciones para el afluyente en tiempo seco propuestas en el *benchmark* de COST (Copp et al., 2001) para el modelo ASM1, modificadas para hacerlas compatible con el modelo ASM3+Bio-P, y de manera de tener el mismo contenido de nitrógeno total biodegradable ($= TKN - i_{N,SI} S_I - i_{N,XI} X_I$) mediante la relación :

$$\begin{aligned} (S_{NH})_{ASM3+Bio-P} = & (S_{NH} + S_{ND} + X_{ND})_{ASM1} - (i_{N,SS} S_S + i_{N,XS} X_S)_{ASM3+Bio-P} \\ & + \left[(i_{N,BM})_{ASM1} - (i_{N,BM})_{ASM3+Bio-P} \right] (X_H + X_A + X_{PAO}) \end{aligned} \quad (5.90)$$

La concentración de $PO_4^{=}$ en el afluyente (S_{PO}) fue tomada de Gernaey y Jorgensen (2004). Basado en el *benchmark* del COST (Coop et al., 2002), el caudal de agua residual afluyente se fija en $18446 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$. La Tabla 5.6 muestra las especificaciones del afluyente usado en los casos de estudio.

Tabla 5.6. Especificaciones del agua residual afluyente

		<i>Valor</i>
<i>Caudal volumétrico</i>	$Q_{fresh} \text{ (m}^3 \text{ d}^{-1}\text{)}$	18446

<i>Componente</i>		<i>Concentración</i>
Materia orgánica inerte soluble	S_I (gCOD m ⁻³)	30.00
Sustrato fácilmente biodegradable	S_S (gCOD m ⁻³)	69.50
Materia orgánica inerte particulada	X_I (gCOD m ⁻³)	51.20
Sustrato lentamente biodegradable	X_S (gCOD m ⁻³)	202.32
Biomasa heterotrófica activa	X_H (gCOD m ⁻³)	28.17
Biomasa autótrofa activa	X_A (gCOD m ⁻³)	0.00
Producto de almacenaje interno celular	X_{STO} (gCOD m ⁻³)	0.00
Sólidos suspendidos	X_{SS} (gCOD m ⁻³)	215.5
Oxígeno disuelto	S_O (gCOD m ⁻³)	0.00
Nitrógeno de nitratos y nitritos	S_{NO} (gCOD m ⁻³)	0.00
Nitrógeno gaseoso	S_{N_2} (gCOD m ⁻³)	0.00
Nitrógeno amoniacal y de ión amonio	S_{NH} (gCOD m ⁻³)	40.601
Alcalinidad	S_{HCO} (gCOD m ⁻³)	7.00
Fósforo inorgánico soluble, (ortofosfatos)	S_{PO_4} (gP m ⁻³)	9.01
Organismos acumuladores de fósforo	X_{PAO} (gCOD m ⁻³)	0.00
Comp. de almacen. int. celular, (PHA)	X_{PHA} (gCOD m ⁻³)	0.00
Comp. de almacen. int. celular, (Polifosfato)	X_{PP} (gP m ⁻³)	0.00

5.3.4.3 Restricciones de calidad de efluente y valores máximos para variables de operación

Restricciones de calidad del líquido tratado

Se consideran los contaminantes y los valores máximos de descarga permitidos que se introdujeron en el Capítulo 2 (Tabla 2.11) a través de las restricciones de desigualdad 2.101, a las que se agrega una nueva restricción para el $P_{TOT,ef}$ (Gernaey y Jorgensen, 2004) según el estándar de calidad danés para fósforo: 1.5 g P m⁻³. Así, los valores límite utilizados aquí son los siguientes: $S_{NH,ef} = 4$ gN m⁻³, $P_{TOT,ef} = 1.5$ gP m⁻³, $N_{TOT,ef} = 18$ gN m⁻³, $BOD_{ef} = 10$ gCOD m⁻³, $COD_{ef} = 100$ gCOD m⁻³, $X_{SS,ef} = 30$ gSS m⁻³.

Valores máximos para las variables de operación

Las restricciones de valores máximos para las variables de operación recomendadas según la práctica habitual de estos procesos están descritas en la Tabla 2.12, e incorporadas mediante las ecuaciones de desigualdad 2.103.

5.4 Resultados

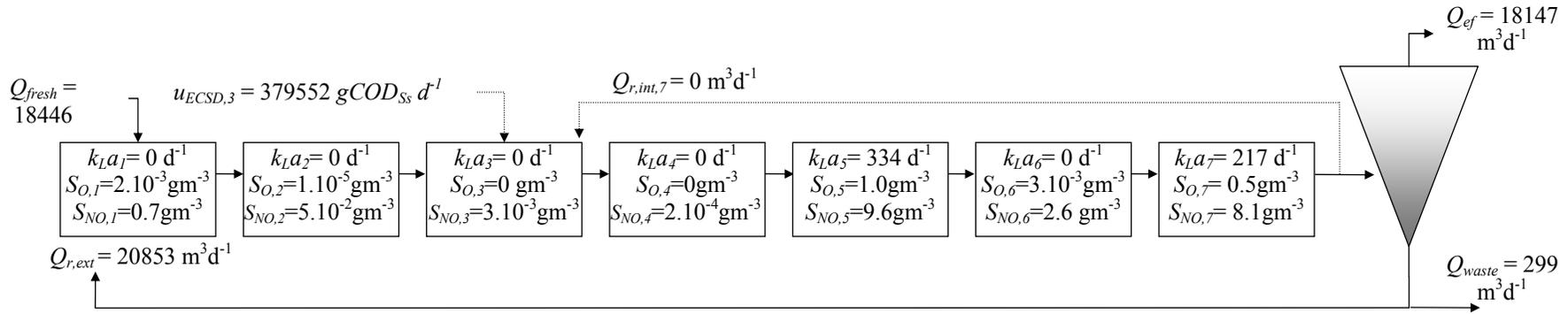
Las Figuras 5.5.a a d y la Tabla 5.7 muestran las soluciones obtenidas para la optimización de los modelos de plantas propuestos en el caso de estudio 1 para los procesos convencionales (*A2/O* o proceso *Phoredox*, *UCT*, *UCT modificado* y el proceso *Bardenpho*).

En los reactores pueden prevalecer condiciones anaerobias, anóxicas o aerobias dependiendo de las concentraciones de oxígeno disuelto (S_O) y nitratos y nitritos (S_{NO}), las que son función de la aireación recibida y de las corrientes alimentadas a cada uno de los compartimentos. Sin embargo, no hay un indicador definido a partir del cual se establece claramente que una zona es anaerobia o anóxica. A los fines de esta tesis, se dice que las zonas aerobias son aquellas que resultan aireadas ($k_L a > 0$); en ese sentido, es más apropiado referirse a que un compartimento dado es aireado. No obstante, aquí se usan indistintamente. Por otro lado, se dice que una zona posee más “carácter” anaerobio o anóxico que otra de la misma configuración según las concentraciones de S_O , S_{NO} , de la diferencia de concentraciones de S_{NH} , S_{NO} y S_{PO} a la entrada y salida de cada reactor, así como de las velocidades de los procesos en cada reactor. Para ello, se consideran las velocidades de los siguientes procesos: - denitrificación o crecimiento anóxico (ρ_5), - nitrificación o crecimiento de autótrofos (ρ_{10}), - almacenamiento (anaerobio) de X_{PHA} o liberación de fosfatos (ρ_{p1}), - almacenamiento (aerobio) de X_{PP} o absorción de fosfatos (ρ_{p2}), y -almacenamiento (anóxico) de X_{PP} o absorción de fosfatos (ρ_{p3}). El análisis de estos indicadores no se muestra aquí.

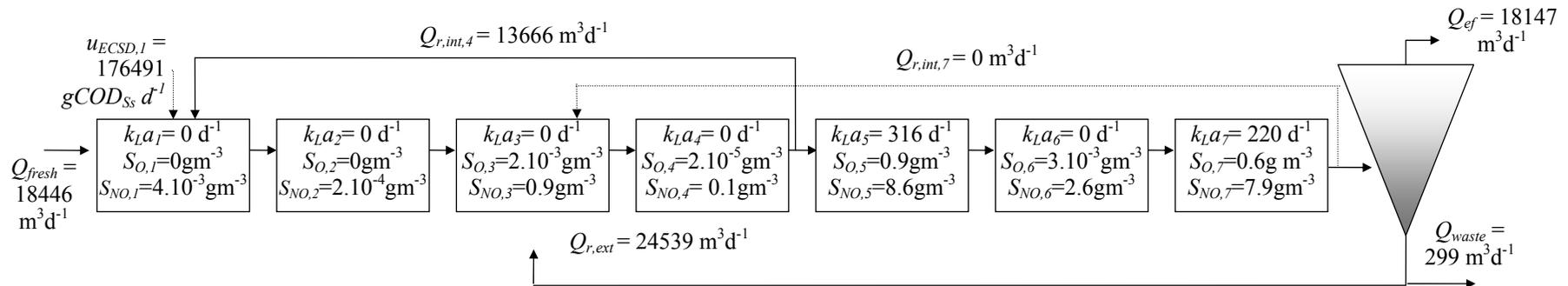
Según las especificaciones del afluente y las configuraciones de planta propuestas en los casos de estudio, el contaminante más difícil de eliminar es el fósforo, por lo que las optimizaciones de los casos propuestos tienden a favorecer los procesos de remoción de este nutriente. Todas las soluciones óptimas obtenidas predicen la dosificación de la fuente externa de carbono. En ninguna de las cuatro configuraciones de la Figura 5.5 se requiere el reciclo interno desde la zona aeróbica -es decir el reciclo de licor nitrificado-. Así, se favorece el “carácter” anaerobio de la primera zona (del primer al cuarto reactor) y, consecuentemente, la liberación de fósforo.

Figura 5.5. Valores de las principales variables del proceso resultantes de la optimización de cada proceso del caso de estudio 1

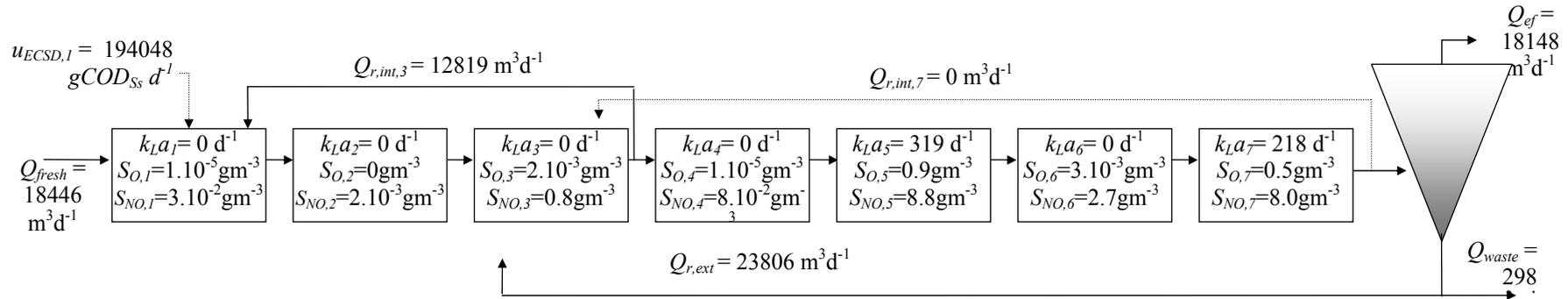
a. Optimización de la configuración del proceso A2/O ($CO = 801929$ Euros año⁻¹)



b. Optimización de la configuración del proceso VIP ($CO = 779166$ Euros año⁻¹)



c. Optimización de la configuración del proceso UCT modificado ($CO = 781981$ Euros año⁻¹)



d. Optimización de la configuración del proceso Bardenpho de 5 etapas ($CO = 801928$ Euros año⁻¹)

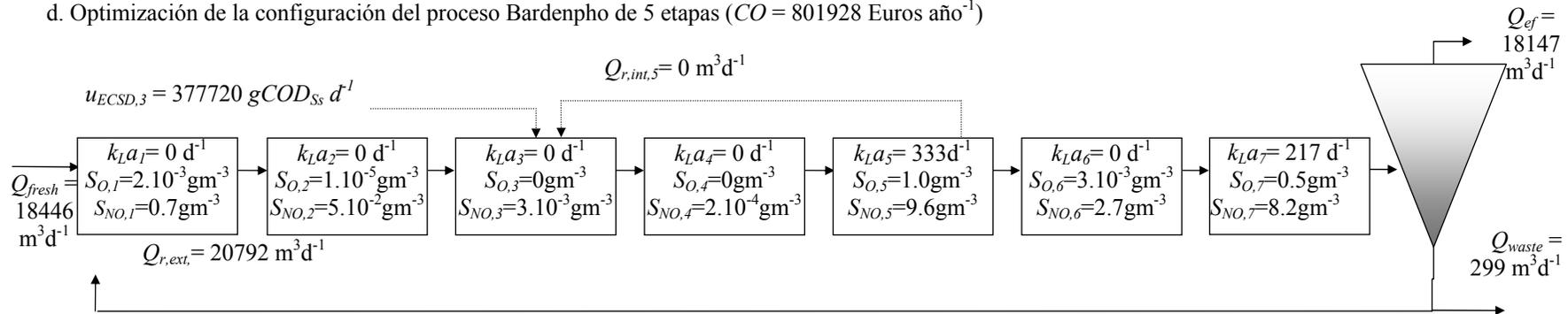


Tabla 5.7. Costos y valores de las variables principales del proceso óptimos para cada configuración del caso de estudio 1

<i>Solución</i>	<i>A2/O</i>	<i>VIP</i>	<i>UCT Mod.</i>	<i>Barden. 5 st.</i>
<i>COTA</i> (Euro año ⁻¹)	801 929	779 166	781 981	801 928
<i>EQ_{ef}</i> (kg PU d ⁻¹)	6 904.80	6 855.87	6 870.22	6 910.02
<i>E_a</i> (kWh d ⁻¹)	6 970.10	6 692.08	6 723.81	6 970.36
<i>E_p</i> (kWh d ⁻¹)	846.11	1 540.15	1 476.92	843.64
<i>u_{SLDGD}</i> (kgSS d ⁻¹)	2 929.63	2 816.55	2 829.37	2 929.56
<i>u_{ECSd}</i> (kgCOD _{ss} d ⁻¹)	379.55	176.49	194.05	377.72
<i>S_{NH,ef}</i> (g N m ⁻³)	4.00	4.00	4.00	4.00
<i>N_{TOT,ef}</i> (g N m ⁻³)	13.37	13.18	13.23	13.39
<i>BOD_{ef}</i> (g COD m ⁻³)	2.09	2.08	2.08	2.09
<i>COD_{ef}</i> (g COD m ⁻³)	46.58	46.89	46.83	46.57
<i>P_{tot,ef}</i> (g P m ⁻³)	1.50	1.50	1.50	1.50
<i>X_{SS,ef}</i> (g SS m ⁻³)	16.12	16.52	16.45	16.11
<i>Q_{r,ext}</i> (m ³ d ⁻¹)	20853	24539	23806	20792
<i>Q_{r,int,7}</i> (m ³ d ⁻¹)	0	0	0	-
<i>Q_{r,int,4}</i> (m ³ d ⁻¹)	-	13666	-	-
<i>Q_{r,int,3}</i> (m ³ d ⁻¹)	-	-	12819	-
<i>Q_{r,int,5}</i> (m ³ d ⁻¹)	-	-	-	0
<i>u_{ECSd,i}</i> (g COD d ⁻¹)	0	176491	194048	0
<i>u_{ECSd,3}</i> (g COD d ⁻¹)	379552	0	0	377720

A los fines prácticos, las soluciones óptimas obtenidas para las configuraciones de los procesos *A2/O* y *Bardenpho de 5 etapas* son esencialmente la misma solución, ya que el reciclado interno desaparece. (Las diferencias observadas se deben a aspectos numéricos). Ambas soluciones presentan una zona con condiciones anóxicas (primer y segundo reactor), seguidas de una zona con condiciones anaerobias (tercer y cuarto reactor), y finalmente una zona aireada con una zona intermedia sin aireación. La fuente externa de carbono se añade a la zona anaerobia (tercer reactor). En una simulación realizada empleando condiciones de operación convencionales para estas configuraciones (con un caudal de reciclado interno no nulo), se observa que en la primera zona (primer y segundo reactor) se desarrollan condiciones anaerobias, y en la segunda zona (tercer y cuarto reactor) condiciones anóxicas, es decir, en la primera zona crece el carácter anaerobio en comparación con la segunda zona.

En las configuraciones *VIP* y *UCT modificada* el reciclo de barros se dirige al tercer reactor, facilitando el desarrollo de condiciones anaerobias en la primer zona (primer y segundo reactor). Los reciclos internos provenientes de la zona anóxica (tercer o cuarto reactor) no pueden ser suprimidos ya que son los responsables del aporte de biomasa a la primer zona. Estos reciclos tienen una concentración baja de nitratos y nitritos, S_{NO} . Como consecuencia, en estas configuraciones, la materia orgánica fácilmente biodegradable (S_S) contenida en el afluente y el carbono externo pueden ser empleados de una manera más eficiente por los organismos acumuladores de fósforo (X_{PAO}) para la liberación de S_{PO} en la primer zona anaerobia (primer y segundo reactor), aumentando la eficacia de la remoción de fósforo.

La simulación de la configuración de planta *A2/O* según las condiciones de operación propuestas por Gernaey y Jorgensen (2004) (esto es, aireación de los reactores quinto, sexto y séptimo fijando valores de k_{La} de 240, 240 y 60 d^{-1} , respectivamente, caudal de reciclo interno y externo de 55338 y 18446 $m^3 d^{-1}$ respectivamente, y caudal de barros destinados a tratamiento de 400 $m^3 d^{-1}$), y liberando las especificaciones de valores límites permitidos para el efluente (ya que se trata de una *simulación*), computa un valor de COTA de 818474 Euros/año para el modelo de costos empleado aquí. Sin embargo, no se cumplen los valores límites permitidos para el efluente, siendo $S_{NH,ef} = 4.16 \text{ g N m}^{-3}$ y $P_{tot,ef} = 5.28 \text{ g P m}^{-3}$. Si bien la *optimización* de esta configuración de planta que se propone aquí mejora los costos operativos anuales para el afluente en cuestión en sólo un 2 % (818474 frente 801929 Euros/año, Tabla 5.7), se consiguen cumplir los valores límites impuestos para el efluente. Nótese que el modelo de costos que se propone aquí es sólo válido mientras se cumplan los límites permitidos para el efluente; por lo tanto, el valor de 818474 Euros/año debería ser aún mayor empleando un modelo que considere el incumplimiento de los límites y, consecuentemente, la mejora en el costo sería más importante.

Los factores de peso β para los componentes contaminantes aumentan al exceder el valor de concentración de descarga permitido del mismo, como se explica en Vanrolleghem et al. (1996) y se representa en la gráfica siguiente:

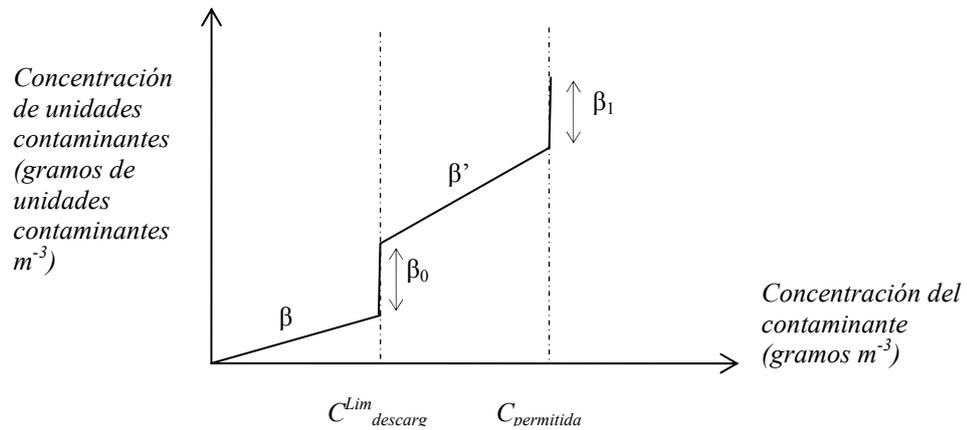


Figura 5.6. Concentración de unidades contaminantes para valores de concentración de un contaminante

Los β y β' de la gráfica representan las pendientes del gráfico de concentración de unidades contaminantes (siendo ésta proporcional al costo de las multas) para valores de concentración de un contaminante por debajo y por encima de la concentración límite de descarga permitidas ($C_{lim_descarg}^{Lim}$). Para valores de concentración del contaminante por debajo de $C_{lim_descarg}^{Lim}$, la concentración de unidades contaminantes se calcula como $\beta \cdot C_{cont}$. Si la concentración del contaminante excede dicho límite se incurre en un costo adicional proporcional a β_0 y la concentración de unidades contaminantes se calcula como $\beta \cdot C_{lim_descarg}^{Lim} + \beta_0 + \beta' \cdot (C_{cont} - C_{lim_descarg}^{Lim})$. Por la violación del límite $C_{permitida}$ se incurriría en un costo proporcional a β_1 muy elevado o bien provocaría la clausura de la planta (Vanrolleghem et al., 1996).

Con fines comparativos, se *simula* la configuración de planta *UCT* para condiciones de operación estándares. Más específicamente, se considera aireación de los reactores quinto, sexto y séptimo fijando valores de $k_L a$ de 240, 240 y 60 d^{-1} , respectivamente, un caudal para ambos reciclos internos ($Q_{r,int,4}$ y $Q_{r,int,7}$) de 27669 $m^3 d^{-1}$ ($=1.5 \cdot Q_{fresh}$ siendo el recomendado entre 1 a 2 veces Q_{fresh}), un caudal de reciclo externo de 18446 $m^3 d^{-1}$ ($=1 \cdot Q_{fresh}$ siendo el recomendado entre 0.5 a 1 veces Q_{fresh}), y un caudal de barros destinados a tratamiento (Q_{waste}) de 400 $m^3 d^{-1}$. Además, se liberan las especificaciones de valores límites permitidos para el efluente (ya que se trata de una simulación). Con tales suposiciones y para el modelo de costos empleado aquí, se obtiene un valor de COTA de 843701 Euros/año. Por su parte, se exceden algunos valores límites permitidos para el efluente: $S_{NH,ef} = 4.30 \text{ g N m}^{-3}$ y $P_{tot,ef} = 4.36 \text{ g P m}^{-3}$.

Así, la optimización de esta configuración de planta mejora los costos operativos anuales para el afluente en cuestión en 8 % (comparar aquel valor con el listado en la Tabla 5.7: 779166 Euros/año). Además, la optimización permite cumplir con los valores límites impuestos para el efluente. Tal como se comentó para la configuración *A2/O*, si el modelo de costos se adaptara a los casos en los que no se cumplen los límites permitidos para el efluente, el valor del COTA resultante de la simulación sería aún mayor y la mejora en el costo sería, evidentemente, más significativa.

La Figura 5.7 muestra la estructura óptima y valores de algunas variables de optimización para el caso de estudio 2, que se complementan con los valores óptimos listados en la Tabla 5.8.

Tabla 5.8. Costos y valores de las variables principales del proceso óptimos para el caso de estudio 2

$COTA$ (Euro año ¹)	762 678
EQ_{ef} (kg PU d ⁻¹)	7 121.22
$E_{a,ef}$ (kWh d ⁻¹)	6 630.72
$E_{pump,ef}$ (kWh d ⁻¹)	963.46
$u_{SLDGD,ef}$ (kg SS d ⁻¹)	2 793.95
$u_{ECSD,ef}$ (kg COD _{SS} d ⁻¹)	65.90
$S_{NH,ef}$ (g N m ⁻³)	4.00
$N_{TOT,ef}$ (g N m ⁻³)	13.96
BOD_{ef} (g COD m ⁻³)	2.03
COD_{ef} (g COD m ⁻³)	46.53
$P_{tot,ef}$ (g P m ⁻³)	1.50
$X_{SS,ef}$ (g SS m ⁻³)	16.17
$Q_{fresh,1}$ (m ³ d ⁻¹)	1167
$Q_{fresh,2}$ (m ³ d ⁻¹)	17279
$Q_{r,ext,1}$ (m ³ d ⁻¹)	9119
$Q_{r,ext,4}$ (m ³ d ⁻¹)	12148
$Q_{trans,7,4}$ (m ³ d ⁻¹)	2533
$u_{ECSD,2}$ (g COD d ⁻¹)	65904
Q_{ef} (m ³ d ⁻¹)	18159
Q_{waste} (m ³ d ⁻¹)	287

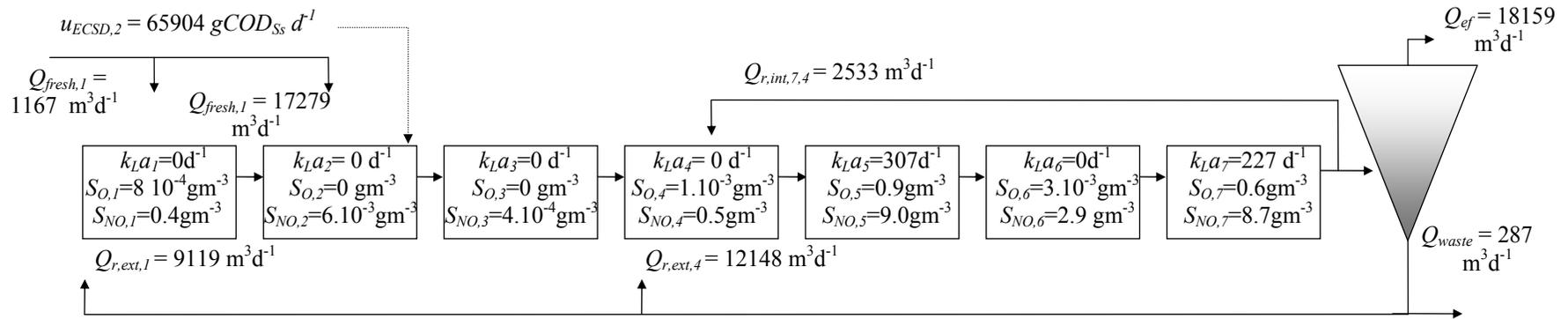


Figura 5.7. Configuración y valores de las principales variables óptimos para el caso de estudio 2

La Figura 5.7 muestra que esta solución requiere dosificación de la fuente externa de carbono al segundo reactor, distribución del agua residual afluyente al primer y segundo compartimentos, distribución del reciclo externo al primer y cuarto compartimento y presencia de reciclo interno desde el séptimo al cuarto compartimento.

Los reactores resultan de carácter anaerobio, anóxico o aeróbico dependiendo de las concentraciones de oxígeno disuelto (S_O) y nitratos y nitritos (S_{NO}) dentro de cada uno de los compartimentos. La solución obtenida presenta una zona con condiciones anóxicas (primer compartimento) ($S_O=8 \cdot 10^{-4} \text{ g m}^{-3}$; $S_{NO}=0.4 \text{ g m}^{-3}$) seguido de una zona (segundo y tercer compartimento) con condiciones anaerobias ($S_O < 1 \cdot 10^{-5} \text{ g m}^{-3}$; $S_{NO}=6 \cdot 10^{-3}$ y $4 \cdot 10^{-4} \text{ g m}^{-3}$), una segunda zona (cuarto reactor) con condiciones anóxicas ($S_O=1 \cdot 10^{-3} \text{ g m}^{-3}$; $S_{NO}=0.5 \text{ g m}^{-3}$), y finalmente un región aireada alternada con una zona no aireada ($S_O=0.9, 3 \cdot 10^{-3}$ y 0.6 g m^{-3} ; $S_{NO}=9.0, 2.9$ y 8.7 g m^{-3}).

Como se expresó en los resultados del caso anterior, con la simulación de la configuración de planta *A2/O* fijando las condiciones de operación propuestas por Gernaey y Jorgensen (2004), y liberando las especificaciones de valores límites permitidos para el efluente (ya que se trata de una simulación), se consigue un valor de COTA de 818474 Euros/año, según el modelo de costos empleado. Sin embargo, no se cumplen los valores límites permitidos para el efluente ($S_{NH,ef} = 4.16 \text{ g N m}^{-3}$ y de $P_{tot,ef} = 5.28 \text{ g P m}^{-3}$). Así, la solución que se obtiene mediante la optimización de la superestructura mejora los costos operativos anuales en un 7 %, para el afluyente en cuestión, y se consiguen cumplir con los valores límites impuestos para el efluente; mientras que la configuración y condiciones de funcionamiento propuestas por Gernaey y Jorgensen no permiten satisfacer la calidad de efluente requerida. Notar nuevamente que si el modelo de costos se ajustara para considerar los casos en que no se cumplen los límites, la mejora relativa en el costo sería más significativa aún.

5.5 Aspectos computacionales

La implementación y resolución de los modelos se realizó empleando *GAMS*-General Algebraic Modelling System (Brooke, et al. 1992). Se empleó el algoritmo *CONOPT* (Drud A.S., 1996) de gradiente reducido generalizado para la solución de los

problemas DNLP resultantes. Para cada caso de estudio se implementó una estrategia de puntos iniciales múltiples y se encontraron varias soluciones. Las soluciones presentadas para cada caso corresponden a las mejores encontradas. El número de variables y ecuaciones para cada modelo es: 754 variables y 733 ecuaciones para el modelo correspondiente a la configuración *A2/O*; 773 variables y 751 ecuaciones para el modelo del proceso *UCT* o *VIP*; 774 variables y 752 ecuaciones para el proceso *UCT modificado*; 754 variables y 733 ecuaciones para el procesos *Bardenpho modificado*; y 937 variables y 856 ecuaciones para el modelo de estructura propuesto en el caso de estudio 2. El tiempo de CPU requerido para la resolución de los modelos es de 2 a 3 s., aproximadamente, en una PC con procesador Intel Pentium IV 2.40GHz y memoria RAM de 248 MB.

5.6 Conclusiones

Es posible la implementación de modelos de plantas de tratamiento para remoción combinada de nutrientes mediante el modelo ASM3+Bio-P.

Los modelos de optimización de las condiciones operativas de las configuraciones de planta convencionales resultan robustos y convergen con relativa facilidad, aunque puede obtenerse más de una solución, según la inicialización del problema, por la naturaleza altamente no lineal del modelo y las características del resolvidor utilizado (resolvidor local).

Según las especificaciones del afluente y las configuraciones de planta propuestas en los casos de estudio de este capítulo, el contaminante más difícil de eliminar es el fósforo, por lo que las optimizaciones de los casos propuestos tienden a favorecer los procesos de remoción de este nutriente. Todas las soluciones óptimas obtenidas predicen la dosificación de la fuente externa de carbono. En ninguna de las cuatro configuraciones analizadas se requiere el reciclaje interno desde la zona aeróbica - es decir el reciclaje de licor nitrificado-. Así, se favorece el “carácter” anaerobio de la primera zona (del primer al cuarto reactor) y, consecuentemente, la liberación de fósforo.

Comparando los resultados obtenidos de la *optimización* de las condiciones operativas para la configuración *A2/O* con los resultados de la *simulación* de esa

configuración para las condiciones operativas propuestas por Gernaey y Jorgensen (2004) para el mismo afluente, se observa que el costo operativo anual se reduce 2 % para el mismo modelo de costos. Sin embargo, en la optimización se consigue cumplir con la calidad de efluente especificada mientras que los resultados de la simulación muestran que los límites permitidos están excedidos. Si el modelo de costos se ajustara para considerar los casos en los que no se cumplen los límites, la mejora en el costo será más significativa.

Análogamente, la optimización de la configuración de planta *UCT* mejora en 8% el valor del COTA respecto a la simulación de esa configuración para las condiciones de operación estándares, para el afluente en cuestión y para el mismo modelo de costos. La optimización permite satisfacer los valores límites impuestos para el líquido tratado, mientras que la simulación, para las condiciones mencionadas, predice valores de concentración que exceden los límites requeridos.

En el caso de estudio 2 se presenta un modelo de superestructura para la optimización de las condiciones de operación minimizando costos operativos. Como se esperaba, la solución obtenida con este modelo es mejor (menores valores de COTA) a los correspondientes a las optimizaciones de las configuraciones de plantas convencionales presentadas en el caso anterior para las mismas especificaciones de afluente.

Los costos operativos disminuyen 7 % respecto a los mismos equipos dispuestos con una configuración convencional del tipo *A2/O* y operada en las condiciones estándares sugeridas por Gernaey y Jorgensen (2004), y se logra cumplir, a su vez, con las especificaciones de calidad impuestas para el efluente, mientras que para la configuración y condiciones de funcionamiento estándares mencionadas dichos valores no se cumplen. Si el modelo de costos se ajustara para considerar los casos en los que no se cumplen los límites, la mejora en el costo sería más significativa.

Por último, si se fijan las variables adecuadamente en el modelo propuesto en el caso de estudio 2 anulando las variables correspondientes, las soluciones encontradas coinciden con las del caso de estudio anterior, como era de esperar.

CAPÍTULO 6. SÍNTESIS Y DISEÑO DE PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES PARA REMOCIÓN COMBINADA DE NITRÓGENO Y FÓSFORO

CAPÍTULO 6. SÍNTESIS Y DISEÑO DE PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES PARA REMOCIÓN COMBINADA DE NITRÓGENO Y FÓSFORO	212
6.1 Introducción.....	213
6.2 Definición de problema.....	214
6.3 Modelado	215
6.3.1 Superestructura propuesta	215
6.3.2 Modelo de unidades de proceso y equipamiento.....	217
6.3.3 Modelo de optimización.....	218
6.3.3.1 Función objetivo.....	218
6.3.3.2 Especificaciones del agua residual afluente y de calidad para el efluente, y valores máximos operativos.....	219
6.4 Casos de estudio.....	219
6.5 Resultados y discusiones.....	221
6.5.1 Escenario I	222
<i>Análisis de sensibilidad de la solución I.A</i>	225
6.5.2 Escenario II	231
6.5.2.1 Variaciones de la concentración de amonio en el afluente $S_{NH, fresh}$	234
6.5.2.2 Variaciones de la concentración de fósforo en el afluente $S_{PO, fresh}$	237
6.5.2.3 Variaciones de sustrato lentamente biodegradable en el afluente $X_{S, fresh}$	240
6.6 Estrategia de solución y aspectos computacionales	244
6.7 Conclusiones.....	245

6.1 Introducción

En el capítulo anterior se estudiaron las condiciones de operación óptimas para las configuraciones de plantas más extensamente usadas para remoción combinada de nutrientes, y posteriormente para una estructura con posibilidad de distribución de las corrientes principales del sistema, con el objetivo de minimizar los costos operativos anuales para especificaciones dadas de agua residual. Los equipos de la planta a optimizar se suponían dados y no se consideraron los costos de inversión. En este capítulo se amplía el modelo presentado en el anterior para considerar la síntesis y diseño (dimensionamiento y número de equipos que constituyen la planta). De esta forma, se extiende el modelo de superestructura presentado en el capítulo 4 para la optimización simultánea de la configuración del proceso, dimensionamiento de equipos y las condiciones de operación de plantas de tratamiento de aguas residuales por barros activados para contemplar la remoción de fósforo así como de nitrógeno. Como se expresó previamente respecto a síntesis y diseño para remoción de nitrógeno, el modelo presentado en el capítulo 4 constituyó uno de los primeros trabajos basados en modelos de superestructuras. El problema se formuló como un problema *NLP*; más específicamente, como un problema de programación no lineal con derivadas discontinuas *DNLP*, utilizando cotas inferiores muy pequeñas (en caso de ser necesario por cuestiones numéricas, pero sin incidencia desde el punto de vista práctico), y la utilización de funciones de costos rigurosas aunque sin contemplar la componente de costos fijos.

Al tratar en este capítulo la remoción de fósforo, se incorporan nuevas variables para los componentes y, consecuentemente, nuevas ecuaciones al modelo. El modelo de superestructura también se amplía para integrar las configuraciones más extensamente usadas para la remoción combinada de nitrógeno y fósforo, ya que los procesos de remoción de fósforo requieren también condiciones anaerobias, además de anóxicas y aeróbicas. En consecuencia, el modelo matemático resulta más complejo y difícil de resolver.

La superestructura contempla hasta siete compartimentos de reacción y un decantador secundario. Los volúmenes de los compartimentos de reacción son variables

de optimización; el decantador tiene dimensiones fijas. Se permite la distribución de las corrientes principales del proceso, como la de recirculación de licor de mezcla y de barros, de alimentación de afluente y de la fuente de carbono externa, como así también sus posibles *bypasses*, a lo largo de la zona de reacción. Cada compartimento funcionará bajo condiciones aeróbicas, anóxicas o anaerobias según el caudal de aireación computado y de las corrientes alimentadas. Al igual que en el capítulo 4, todas las variables de decisión se modelan como variables continuas y se emplean, de ser necesario, cotas inferiores muy pequeñas para evitar problemas numéricos, tal como se expresó. Cuando una variable continua (como el volumen de un compartimento de reacción, el flujo de aireación de un compartimento, el caudal de agua residual fresca, de corrientes de recirculación o de dosificación de la fuente de carbono externa, o *bypasses*) toma el valor cero o un valor muy próximo a cero en un punto solución, la unidad y/o corriente correspondiente es eliminada de la superestructura y no forma parte de la configuración final del proceso (*flowsheet*), pero no se elimina la representación matemática de esa unidad y/o corriente particular del modelo matemático.

El criterio de performance seleccionado para la optimización corresponde a la minimización del Valor Actual Neto (VAN) considerando costos de inversión y de operación, cumpliendo con especificaciones de calidad de vertido impuestas para algunos contaminantes. El costo de inversión incluye los costos de los compartimentos de reacción, de los sistemas de aireación, del decantador secundario, de la estación de bombeo del afluente, y de la bomba de barros. El costo de operación computa los costos para la energía de bombeo y aireación, de la fuente externa de carbono, del tratamiento de los barros para disposición final, y las multas incurridas por las unidades de contaminación descargadas.

6.2 Definición de problema

Como se ha expresado, el problema abordado aquí es la optimización simultánea de la estructura del sistema (configuración de proceso), diseño (dimensionamiento de equipos) y de las condiciones de operación de plantas de tratamiento biológico de aguas residuales por barros activados para la remoción combinada de nitrógeno y fósforo y la oxidación de la materia orgánica, con el objetivo de minimizar el Valor Actual Neto

VAN, dados: (1) un conjunto de especificaciones (composición y caudal) del agua residual afluyente, (2) valores límite para concentraciones de contaminantes en el efluente, (3) un modelo de superestructura del proceso que admite hasta un máximo de siete compartimentos de reacción y un decantador secundario, y (4) un modelo de costos que computa costos de inversión y operación.

Se propone un problema *NLP* (*DNLP*) y se resuelve para diferentes casos de estudio.

6.3 Modelado

6.3.1 Superestructura propuesta

La superestructura de proceso considerada se muestra en la Figura 6.1, la que como puede apreciarse, coincide con la mostrada en el caso 2 del capítulo anterior. Como se mencionó anteriormente, la superestructura considera hasta siete compartimentos de reacción, cuyos volúmenes, a diferencia del capítulo anterior, son variables a optimizar, seguidos de un decantador secundario de dimensiones fijas (área transversal $A_{sett}=1500 \text{ m}^2$ y altura $h_{sett}= 4 \text{ m}$). Las bombas, los mezcladores y divisores de corrientes son los elementos que completan la superestructura, permitiendo los reciclos, *bypasses*, distribuciones de corrientes y dosificación de la fuente de carbono externa a lo largo de la zona de reacción.

Las variables de diseño (volumen de cada compartimento V_i) deben ser optimizadas junto con las variables de operación (caudales de agua residual afluyente a cada compartimento ($Q_{fresh,g}$), de reciclo y *bypass* ($Q_{trans,i}^T$, $Q_{trans,i,g}$, $Q_{r,int}^T$, $Q_{r,int,g}$), de la corriente de recirculación de barros ($Q_{r,ext}^T$, $Q_{r,ext,g}$), de dosificación de la fuente de carbono externa (u_{ECSD}^T , $u_{ECSD,g}$), de líquido clarificado (Q_{ef}) y barros destinados a tratamiento (Q_{waste})).

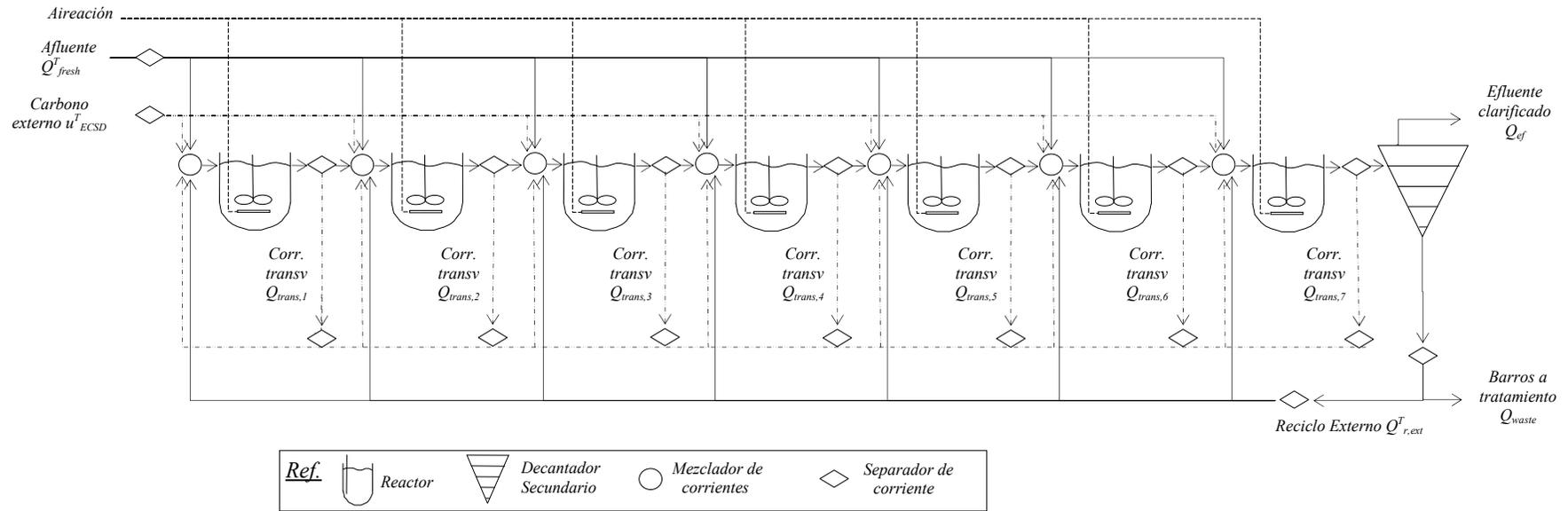


Figura 6.1. Representación de la superestructura del proceso

A los fines de la implementación del modelo, se acotan los volúmenes de los compartimentos de reacción; más específicamente, se fijan cotas inferiores muy pequeñas (esencialmente cero desde el punto de vista práctico) y cotas superiores a un valor máximo dado arbitrario. Finalmente, los compartimentos de reacción pueden funcionar bajo condiciones anóxicas, aeróbicas o anaerobias, según el valor óptimo calculado para el coeficiente de transferencia de oxígeno $k_L a$ (proporcional al caudal de aireación). Si el valor de $k_L a_i$ para un compartimento dado es un muy pequeño (prácticamente cero), dicho reactor funcionará como un compartimento anóxico o anaerobio de acuerdo a las corrientes que lo alimentan, determinando los niveles de nitratos S_{NO} , oxígeno S_O y la velocidad de los procesos dominantes.

6.3.2 Modelo de unidades de proceso y equipamiento

Para el modelado de los compartimentos de reacción se realizan las mismas consideraciones que en el capítulo 5, asumiendo reactores de mezcla completa y empleando el modelo ASM3+Bio-P para los procesos biológicos (ecuaciones 5.1 a 5.22) con los coeficientes estequiométricos y de composición y los parámetros cinéticos a 15°C listados en la Tabla 5.5 y 5.4. El decantador secundario también se modela aquí como un tanque no reactivo de 10 capas usando el modelo de Takács, considerando sus dimensiones dadas (profundidad de 4 m y área transversal de 1500 m²). Se emplean las ecuaciones 2.22 a 2.36.

Finalmente, definiendo los mismos conjuntos y variables que para el modelo de “superestructura” del caso de estudio 2 del capítulo 5 se lista, a continuación, el resto de las ecuaciones que describen el modelo propuesto.

Los balances de masa total en los mezcladores se describe mediante las ecuaciones 5.74 y 5.75, los correspondientes a los divisores de corriente mediante las ecuaciones 5.30, 5.31 y 5.76 a 5.81, y para el balance de masa en el decantador se utiliza la 5.32. Para los balances de masa por componentes en los compartimentos se emplean las ecuaciones 5.33 y 5.34, mientras que en mezcladores, divisores y decantador se emplean las ecuaciones 5.39 a 5.42, 5.82 y 5.83.

Por su parte, en este problema, los volúmenes de los compartimentos de reacción V_i son variables a optimizar, y deben satisfacer las restricciones siguientes:

$$V_{i,\min} \leq V_i \leq V_{i,\max}, \quad \forall i \quad (6.1)$$

donde $V_{i,\max}$ es una cota superior suficientemente grande para el volumen del compartimento; $V_{i,\min}$ es una cota inferior muy pequeña ($V_{i,\min} = 0.01 \text{ m}^3$), que se aplica para evitar problemas numéricos (como la división por cero). Al igual que en el modelo equivalente para remoción de nitrógeno presentado en el capítulo 4, si el volumen de un compartimento de reacción alcanza la cota inferior en una solución, es considerado como un compartimento de volumen nulo y, por consiguiente, es eliminado de la superestructura.

Para los coeficientes de transferencia de masa $k_L a_i$:

$$k_L a_{\min} d^{-1} \leq k_L a_i \leq k_L a_{\max} d^{-1}, \quad \forall i \quad (6.2)$$

donde $k_L a_{i,\max}$ ($= 360 \text{ d}^{-1}$) es un límite de operación máximo recomendado y $k_L a_{i,\min}$ ($= 0.0001 \text{ d}^{-1}$) se agrega para evitar problemas numéricos. Como se explicó, cuando una variable $k_L a_i$ alcanza tal cota inferior, se considera esencialmente cero, correspondiendo en ese caso a un compartimento de reacción que carece de sistema de aireación, resultando anóxico o anaerobio según la combinación de las demás variables ambientales determinantes.

6.3.3 Modelo de optimización

6.3.3.1 Función objetivo

Al igual que en el capítulo 4, se adopta el Valor Actual Neto (VAN), computando costos de inversión y de operación. Se emplean, así, las ecuaciones y valores de parámetros presentados en la sección 4.3.3.1. La ecuación empleada en los capítulos 2 y 4 para el cálculo de la energía necesaria para el bombeo (ecuación 2.95) se reemplaza por la ecuación 5.89.b introducida en el capítulo anterior, la que considera el bombeo de los reciclos de licor de mezcla y *bypasses*.

6.3.3.2 Especificaciones del agua residual afluyente y de calidad para el efluente, y valores máximos operativos

Las restricciones para la calidad del líquido tratado y los valores máximos para las variables de operación usadas en este modelo son los mismos que en el capítulo 5 (sección 5.3.4.3), y se consideran las mismas especificaciones del agua residual afluyente listadas en la Tabla 5.6 para el primer caso de estudio aquí considerado (caso I.A). Para los demás casos, las especificaciones del agua residual se detallan en la próxima sección.

6.4 Casos de estudio

En este capítulo se seleccionan dos escenarios (*I* y *II*) que difieren en el problema de optimización que se resuelve. A su vez, cada escenario se resuelve para un conjunto de casos, los que difieren en las especificaciones del agua residual a tratar. Los casos de estudio considerados, permiten mostrar las capacidades del modelo, principalmente su robustez y flexibilidad.

En el *escenario I* se emplea el modelo de superestructura descrito anteriormente para la optimización simultánea de la configuración de proceso y el dimensionamiento de equipos -esto es, para síntesis y diseño del proceso- y las condiciones de operación para tres niveles de *caudal* de agua residual afluyente dados. El caudal de agua residual afluyente para el *caso I.A* se fija en $18446 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$. La Tabla 7.1 muestra el conjunto de especificaciones del agua residual afluyente para el caso de estudio *I.A*.

Luego de presentar la solución obtenida para el caso *I.A*, se realiza un análisis de sensibilidad de la solución óptima local obtenida para algunos parámetros seleccionados del modelo. El parámetro más relevante resultó ser el caudal de agua residual afluyente. En base a esto, se definen los *casos de estudio I.B* y *I.C*, disminuyendo y aumentando, respectivamente, el caudal afluyente un 25 % con respecto al caso *I.A*. Se comparan y analizan las soluciones óptimas que resultan para estos tres casos.

En el *escenario II* se supone que la planta de tratamiento y el tamaño de los equipos están dados, fijando, consecuentemente, su costo de inversión IC^T . Más precisamente, se escoge la configuración de planta solución óptima obtenida para el

caso *I.A.*, Aquí, el modelo se emplea para la optimización de las condiciones de operación con el objetivo de minimizar el costo operativo OC^T para diferentes *composiciones* de agua residual afluyente. Las concentraciones de los componentes más relevantes del agua residual afluyente del caso *I.A.* (detectadas mediante el análisis de sensibilidad) son disminuidas y aumentadas hasta un 25 %, dando lugar a 31 casos de estudio, manteniendo el caudal de agua residual afluyente en $18446 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$ como en el caso *I.A.*

Tabla 6.1. Especificaciones del agua residual afluyente para el caso de estudio *I.A.*

		<i>Valor</i>
<i>Caudal volumétrico</i>	$Q_{\text{fresh}} (\text{m}^3 \text{ d}^{-1})$	18446
<i>Componente</i>		<i>Concentración</i>
Materia orgánica inerte soluble	$S_I (\text{gCOD m}^{-3})$	30.00
Sustrato fácilmente biodegradable	$S_S (\text{gCOD m}^{-3})$	69.50
Materia orgánica inerte particulada	$X_I (\text{gCOD m}^{-3})$	51.20
Sustrato lentamente biodegradable	$X_S (\text{gCOD m}^{-3})$	202.32
Biomasa heterotrófica activa	$X_H (\text{gCOD m}^{-3})$	28.17
Biomasa autótrofa activa	$X_A (\text{gCOD m}^{-3})$	0.00
Producto de almacenaje interno celular	$X_{\text{STO}} (\text{gCOD m}^{-3})$	0.00
Sólidos suspendidos	$X_{\text{SS}} (\text{gCOD m}^{-3})$	215.5
Oxígeno disuelto	$S_O (\text{gCOD m}^{-3})$	0.00
Nitrógeno de nitratos y nitritos	$S_{\text{NO}} (\text{gCOD m}^{-3})$	0.00
Nitrógeno gaseoso	$S_{\text{N}_2} (\text{gCOD m}^{-3})$	0.00
Nitrógeno amoniacal y de ión amonio	$S_{\text{NH}} (\text{gCOD m}^{-3})$	40.601
Alcalinidad	$S_{\text{HCO}} (\text{gCOD m}^{-3})$	7.00
Fósforo inorgánico soluble, (ortofosfatos)	$S_{\text{PO}_4} (\text{gP m}^{-3})$	9.01
Organismos acumuladores de fósforo	$X_{\text{PAO}} (\text{gCOD m}^{-3})$	0.00
Comp. de almacen. int. celular, (PHA)	$X_{\text{PHA}} (\text{gCOD m}^{-3})$	0.00
Comp. de almacen. int. celular, (Polifosfato)	$X_{\text{PP}} (\text{gP m}^{-3})$	0.00

Se adoptó la estrategia de múltiples puntos iniciales para la inicialización del problema de optimización para cada caso de estudio, empleando un conjunto ordenado de valores iniciales diferentes para detectar la ocurrencia de óptimos locales y retener las “mejores” soluciones. Debido a la naturaleza del problema y en base la experiencia ganada de capítulos anteriores, era de esperar encontrar varias soluciones óptimas

locales dependientes del conjunto de valores iniciales en la mayoría de los ejemplos analizados.

Las configuraciones de planta de tratamiento que se obtienen como resultado de la optimización del modelo de superestructura propuesto se representan y muestran en las figuras y las tablas respectivas. En dichas figuras y tablas se muestran también los valores óptimos de concentración de los contaminantes en el líquido tratado, de las variables principales del proceso y costos.

6.5 Resultados y discusiones

Tal como se expresó en el capítulo 5, para el análisis de los resultados se considera que en los compartimentos de reacción prevalecen condiciones anaerobias, anóxicas o aerobias dependiendo de las concentraciones de oxígeno disuelto (S_O) y nitratos y nitritos (S_{NO}), las que son función de la aireación recibida y de las corrientes alimentadas a cada uno de los compartimentos. Sin embargo, no hay un indicador definido a partir del cual se establece claramente que una zona es anaerobia o anóxica. A los fines de esta tesis, se dice que las zonas aerobias son aquellas que resultan aireadas ($k_L a > 0$); en ese sentido, es más apropiado referirse a que un compartimento dado es aireado, aunque aquí se usan indistintamente. Por otro lado, se dice que una zona posee más “carácter” anaerobio o anóxico que otra de la misma configuración según las concentraciones de S_O , S_{NO} , de la diferencia de concentraciones de S_{NH} , S_{NO} y S_{PO} a la entrada y salida de cada reactor, así como de las velocidades de los procesos en cada reactor. Para ello, se consideran las velocidades de los siguientes procesos: -denitrificación o crecimiento anóxico (ρ_3), -nitrificación o crecimiento de autótrofos (ρ_{10}), -almacenamiento (anaerobio) de X_{PHA} o liberación de fosfatos (ρ_{p1}), -almacenamiento (aerobio) de X_{PP} o absorción de fosfatos (ρ_{p2}), y -almacenamiento (anóxico) de X_{PP} o absorción de fosfatos (ρ_{p3}). El análisis de estos indicadores no se muestra aquí.

6.5.1 Escenario I

En el caso de estudio *I.A* el modelo *DNLP* presentado en la Sección 6.3 se resuelve para la síntesis de una planta de tratamiento considerando un agua residual afluyente cuyas especificaciones se muestran en la Tabla 6.1. Según se comentó previamente, un análisis de sensibilidad de la solución óptima local mostró que el parámetro más relevante es el caudal de agua residual afluyente. Para los casos de estudio *I.B* y *I.C* se elige un caudal de agua residual afluyente de 13834.5 y 23057.5 m³ d⁻¹, respectivamente, y se mantienen las especificaciones de concentraciones. Estos caudales corresponden a una variación de ± 25 % del correspondiente al caso *I.A*.

Las configuraciones de planta que presentaron los valores de *VAN* mínimos para los casos *I.A*, *I.B* y *I.C* son representadas en la Figura 6.2.a, b y c, respectivamente, llamando a estas soluciones *I.A*, *I.B* y *I.C* por simplicidad. La Tabla 6.2 muestra las concentraciones de los contaminantes del líquido tratado, los valores óptimos para las variables principales del proceso y costos. Una lista más detallada de los costos para cada solución óptima se muestra en la Tabla 6.3.

Como se muestra en la Figura 6.2.a, la optimización del caso *I.A* resultó en una configuración de planta que presenta seis compartimentos de reacción, cuyos volúmenes son 3941, 1237, 2994, 776, 609 y 5117 m³, respectivamente. Es decir, la configuración óptima incluye seis de los siete compartimentos de reacción. El volumen del último compartimento alcanza la cota inferior, fijada en un valor suficientemente pequeño; por lo tanto, se “elimina” de la superestructura en la configuración final y no se representa en la figura. El segundo, cuarto y quinto compartimentos son aireados, y como resultado de las condiciones que se desarrollan en cada compartimento, la configuración final consiste en una secuencia de reactores con las características siguientes: *Ana-Ae-Anox-Ae-Ae-Anox*. La solución óptima considera la distribución del reciclo externo: alrededor del 61 % (8867 m³ d⁻¹) se alimenta al primer compartimento y el resto al segundo. No se distribuye el agua residual afluyente y no se necesita la alimentación de una fuente externa de carbono. Como muestra la Tabla 6.2, sólo la concentración de fósforo total $P_{TOT,ef}$ alcanza el valor límite permitido en el líquido tratado.

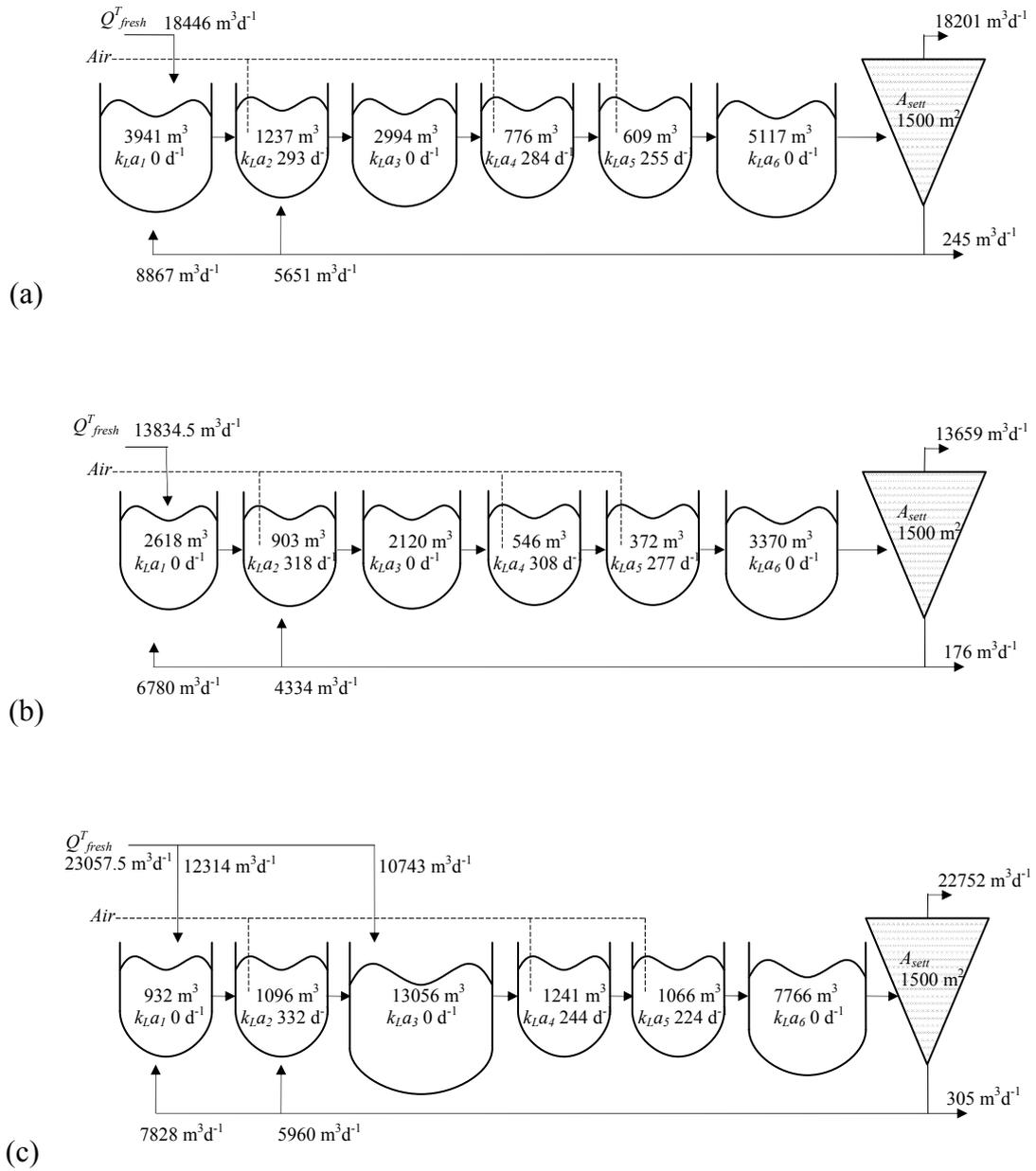


Figura 6.2. Configuración óptima y valores de las variables principales para (a) caso I.A (solución I.A); (b) caso I.B (solución I.B); y (c) caso I.C (solución I.C).

Tabla 6.2. Valores óptimos de las variables principales para (a) caso I.A (solución I.A); (b) caso I.B (solución I.B); y (c) caso I.C (solución I.C).

<i>Contaminantes en el efluente</i>	<i>Solución I.A</i>	<i>Solución I.B</i>	<i>Solución I.C</i>
$S_{NH,ef}$ g N m ⁻³	3.34	3.09	3.94
$N_{TOT,ef}$ g N m ⁻³	5.37	5.07	5.93
$P_{TOT,ef}$ g P m ⁻³	1.50	1.50	1.50
BOD_{ef} g m ⁻³	1.67	1.55	1.75
COD_{ef} g CODm ⁻³	45.00	43.91	45.62
$X_{SS,ef}$ g SS m ⁻³	15.05	13.90	15.68
Costos (Euros)			
$OC^{T,Annual}$	561979.79	409576.55	718557.09
IC^T	3311404.11	2853878.80	3836174.12
VAN	10313672.27	7957202.57	12789395.41

Tabla 6.3. Detalle de los costos para las soluciones óptimas para cada caso de estudio del escenario I (en Euros)

	<i>Solución I.A</i>	<i>Solución I.B</i>	<i>Solución I.C</i>
OC^T_{EQ}	2447112	1754083	3247593
OC^T_p	183942	140673	175603
OC^T_a	1955715	1382413	2491568
OC^T_{SLDG}	2415500	1826155	3038457
OC^T_{ECSD}	0	0	0
OC^T	7002268	5103324	8953221
IC_t	2382674	1990801	2850991
IC_a	181764	159838	201830
IC_{sett}	442671	442671	442671
IC_{ips}	268985	228013	305922
IC_{sr}	35310	32555	34760
IC^T	3311404	2853879	3836174
VAN	10313672	7957203	12789395

En el Capítulo 4, la síntesis y diseño de una planta para el tratamiento de un agua residual “equivalente” (mismas especificaciones de concentración y caudal afluente pero sin considerar los compuestos de fósforo) optimizando una superestructura de sólo 5 compartimentos de reacción, resultó en una configuración con tres compartimentos de

reacción con volúmenes de 1083 m³ (moderadamente aireado, k_{La} : 218 d⁻¹), 9096 m³ (ligeramente aireado, k_{La} : 36 d⁻¹) y 6099 m³ (ligeramente aireado, k_{La} : 27 d⁻¹), respectivamente. Aquella solución presentó un patrón de distribución del agua residual afluyente dirigiendo alrededor del 56 % del caudal (10360 m³ d⁻¹) al primer compartimento y el resto al segundo; y un reciclaje externo de barros de 11841 m³ d⁻¹ que se alimenta al primer compartimento (ver capítulo 4, solución I.A). El volumen de reacción total (suma de los volúmenes de los compartimentos de reacción) computado para aquel caso es similar al que se obtiene en este capítulo, pero como no se consideraron los compuestos de fósforo y los organismos para su remoción (X_{PAO}), sólo tres compartimentos de reacción fueron necesarios para desarrollar las condiciones ambientales para la remoción de nitrógeno. Al considerar la remoción simultánea de fósforo, se requiere la incorporación de un compartimento anaerobio para desarrollar las condiciones para el almacenamiento de X_{PHA} (proceso ρ_{PI}), acoplado a la liberación de fósforo, que es un paso esencial para la remoción de este nutriente. En el presente caso de estudio, la materia orgánica contenida en el afluyente se emplea también para la remoción de fósforo, además de la necesaria para nitrógeno; esto es, la materia orgánica es necesaria tanto para los procesos de liberación y absorción de fosfatos, como para los procesos de nitrificación/desnitrificación. Así, se evidencia un mayor consumo de materia orgánica que se revela en la calidad alcanzada en el líquido tratado. En este caso, la concentración de amonio en el efluente ($S_{NH,ef}$) es más alta, y al considerar además los compuestos de fósforo (comparar ecuación 2.96 y 5.84 para el cálculo de EQ_{ef}), los costos debido a multas resultan más altos. Por otro lado, la producción de barros es mayor, por lo que aumenta el costo del tratamiento de los barros en exceso y, consecuentemente, el valor actual neto (desde 7473917 Euros para la planta sin remoción de fósforo hasta 10313672 Euros para este caso).

Análisis de sensibilidad de la solución I.A

A continuación se muestran los resultados de un análisis de sensibilidad de la solución óptima obtenida para el caso I.A respecto a algunos parámetros del modelo relacionados a las funciones de costo, concentraciones y caudal del agua residual afluyente, y límites de descarga permitidos para el líquido tratado. Nótese que, y solamente a fin del presente análisis, se incluyen bajo la denominación *parámetros* a ciertos “elementos” que, en rigor, no son tales en los submodelos en que intervienen;

por ejemplo, la concentración de un contaminante en el afluente es, estrictamente, una variable de valor conocido en el submodelo de reactor. Aquí, interesa la sensibilidad de la solución obtenida frente a su variación, y como tal, es considerada un *parámetro*.

El análisis de sensibilidad está basado en un método de sensibilidad local que computa los gradientes locales de la función objetivo frente a variaciones infinitesimales del parámetro en cuestión. Específicamente, el análisis se basa en la inspección del *valor marginal relativo VMR* para cada parámetro analizado φ , expresado por la siguiente relación:

$$\text{VMR} = \frac{\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi}}{\Phi} \quad (6.3)$$

siendo $\Phi = \text{VAN}$.

El valor marginal VM ($= \partial\Phi/\partial\varphi$) representa la variación del valor actual neto VAN para un incremento unitario del valor del parámetro φ . Por su parte, el valor marginal relativo VMR representa la variación porcentual del VAN para un incremento porcentual del valor parámetro φ . El signo de VMR indica la dirección de cambio del VAN ; esto es, un valor de VMR positivo indica que el VAN aumenta con un aumento del valor del parámetro. A los fines del presente análisis, interesan solamente los $VMRs$, ya que están referidos a la misma base de comparación.

La Tabla 6.4 lista el valor de cada parámetro estudiado φ y su valor relativo marginal VMR , ordenados en forma descendente según el valor *absoluto* de VMR , reflejando, de esta manera, su impacto relativo sobre la solución óptima obtenida.

Se seleccionaron parámetros críticos del modelo, como parámetros de las funciones de costo, límites de concentración permitidos para el efluente, y concentraciones de los componentes y caudal del afluente.

La Tabla 6.4 muestra que el caudal de agua residual afluente Q_{fresh}^T es el parámetro más sensible para la solución óptima local estudiada.

Tabla 6.4. Análisis de sensibilidad de la Solución I.A

<i>Parámetro</i>	<i>valor</i>	<i>VRM_i</i>
Q^l_{fresh}	18446	0.9392449
$S_{\text{NH,fresh}}$	40.601	0.6015154
$X_{\text{S,fresh}}$	202.32	-0.5276795
$X_{\text{SS,fresh}}$	215	0.3781485
$S_{\text{PO,fresh}}$	9.01	0.3570394
α_{EQ}	50	0.2372579
α_{PSLDG}	75	0.2342279
b_t	10304	0.2310211
α_E	25	0.2074673
$S_{\text{S,fresh}}$	69.5	-0.1173181
$S_{\text{HCO,fresh}}$	7	-0.0714886
$P_{\text{tot,lim}}$	1.5	-0.0677916
$S_{\text{I,fresh}}$	30	0.0395882
b_{sett1}	2630	0.0363022
b_a	8590	0.0176236
b_{ips1}	2334	0.0155910
$X_{\text{I,fresh}}$	51.2	0.0131774
$X_{\text{H,fresh}}$	28.17	0.0093392
b_{ips2}	2123	0.0074441
b_{sett2}	6338	0.0066184
b_{sr}	5038	0.0034237
b_{ips3}	3090	0.0030455
$X_{\text{A,fresh}}$	0	0.0000000
$X_{\text{PHA,fresh}}$	0	0.0000000
$X_{\text{PAO,fresh}}$	0	0.0000000
$X_{\text{STO,fresh}}$	0	0.0000000
$S_{\text{O,fresh}}$	0	0.0000000
$S_{\text{NO,fresh}}$	0	0.0000000
$X_{\text{PP,fresh}}$	0	0.0000000
$\alpha_{ECS D}$	109.5	0.0000000
$S_{\text{NH,ef,lim}}$	4	0.0000000
$\text{DBO}_{\text{ef,lim}}$	10	0.0000000
$\text{DQO}_{\text{ef,lim}}$	100	0.0000000
$S_{\text{N2,fresh}}$	0	0.0000000
$N_{\text{tot,lim}}$	18	0.0000000
$\text{TSS}_{\text{ef,lim}}$	30	0.0000000

Se observa que un incremento en la concentración de amonio S_{NH} o fósforo S_{PO} en el afluente aumenta el VAN (VMR positivo). Ciertamente, este es un resultado esperado ya que se debe remover más cantidad de nitrógeno o fósforo, que son los contaminantes de interés, requiriéndose, consiguientemente, más recursos (de capital y/o servicios).

Ahora bien, un incremento en la concentración de la materia orgánica lentamente degradable X_S o rápidamente degradable S_S en el afluente disminuye el VAN (VMR negativo). Si bien estos componentes son contaminantes que también se desean eliminar, aumentan la disponibilidad de materia carbonosa necesaria para los procesos de eliminación de nitrógeno y fósforo. En otras palabras, si bien se deteriora la calidad del líquido *a tratar*, se mejora la calidad del líquido *tratado*, lo que se refleja cuantitativamente a través de las unidades de contaminación descargadas y, consecuentemente, en la disminución de la multa incurrida, afectando favorablemente el costo operativo. El VMR de la biomasa autótrofa X_A , de la biomasa acumuladora de fósforo X_{PAO} , y de los compuestos de almacenamiento celular interno X_{PHA} y X_{STO} en el afluente arrojan un resultado nulo debido a que los valores de estos parámetros son cero; sin embargo el signo del VM de estos parámetros (VM negativo, resultados no mostrados) indica que un incremento en estas concentraciones disminuye el VAN. Por otro lado, el incremento de las concentraciones de oxígeno disuelto S_O , nitratos S_{NO} y de polifosfatos X_{PP} en el afluente aumentan el VAN (VM positivo, resultados no mostrados). Estos resultados son esperados ya que el afluente se alimenta al primer reactor donde se desarrollan condiciones anaeróbicas.

La Tabla 6.4 muestra, además, que los parámetros de las funciones de costos operativos más críticos son aquellos relacionados a la multa incurrida debido a la calidad del efluente descargado α_{EQ} , al tratamiento de los barros para disposición α_{PSLDG} y a la energía para bombeo y la aireación α_E , en ese orden de importancia relativa. Mientras que el *VMR* correspondiente al parámetro de costo relacionado con la adición de carbono externo α_{ECS} es cero para esta solución local. Esto se explica por el hecho que la solución óptima obtenida no requiere la alimentación de una fuente externa de carbono, tal como se comentó anteriormente. En otras palabras, la función objetivo es insensible al cambio del valor de ese parámetro porque no se requiere la utilización de ese recurso en la solución obtenida.

Con respecto a los parámetros de las funciones de costos de inversión, el parámetro más relevante es el parámetro b_i relacionado al costo de los compartimentos de reacción, seguido del relacionado al costo del decantador b_{settl} .

En lo referente al conjunto de especificaciones de calidad para el líquido tratado, la inspección de los *VMRs* indica que el valor límite permitido más relevante es el impuesto al fósforo total $P_{TOT,lim}$, parámetro que muestra un *VMR* negativo, significando que un aumento de ese parámetro (situación menos exigente) determina una disminución del VAN. Nótese que en la solución óptima (Tabla 6.2), la concentración de fósforo total $P_{TOT,ef}$ alcanza justamente el valor límite permitido $P_{TOT,lim} = 1,5 \text{ g P m}^{-3}$ (restricción de igualdad activa en el modelo), constituyéndose así en el parámetro crítico de la solución obtenida. Esto está en línea con el hecho que los *VMRs* asociados a los demás valores límite de concentración permitidos ($S_{NH,ef,lim}$, $DBO_{ef,lim}$, $DQO_{ef,lim}$, $N_{tot,lim}$ y $TSS_{ef,lim}$) son cero; esto es, la función objetivo es insensible a sus variaciones en un entorno de la misma. En forma análoga se pueden examinar el resto de los parámetros del modelo.

De esta manera, si bien algunos parámetros críticos del modelo que condicionan la solución óptima obtenida se pueden determinar a partir de los valores mismos de las variables (si alcanzan o no las cotas fijadas), otros parámetros críticos y sus impactos relativos pueden obtenerse a partir del análisis de sensibilidad basado en los *VMRs*.

Los casos de estudio *I.B* y *I.C* surgen de perturbar el caudal afluente (parámetro más sensible según el análisis anterior), disminuyéndolo y aumentándolo 25 % con respecto al caso *I.A*, respectivamente.

La optimización del caso *I.B* resulta en la configuración de planta representada en la Figura 6.2.b. La Tabla 6.2 muestra los valores óptimos para las variables principales. El Q_{fresh}^T disminuye de $18446 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$ correspondiente al caso de estudio *I.A* a $13834.5 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$ para el caso *I.B*. Esta solución resulta en seis compartimentos de reacción con volúmenes de 2618, 903, 2120, 546, 372 y 3370 m^3 , respectivamente. La totalidad del caudal de agua residual afluente y alrededor del 61 % del reciclo externo de barros son alimentados al primer compartimento. La fracción del reciclo externo restante es alimentado al segundo compartimento. En esta configuración, el segundo, cuarto y quinto compartimentos resultan aireados, y la secuencia completa de los compartimientos según las condiciones que prevalecen en ellos es: *Ana-Ae-Anox-Ae-Ae-*

Anox. No se dosifica carbono externo al proceso. Al igual que en el caso anterior, y como se muestra en la Tabla 6.2, la concentración de fósforo total en el líquido tratado $P_{tot,ef}$ está en su valor límite permitido.

El VAN disminuye en este caso un 23 % con respecto al caso anterior, mientras que los costos de operación lo hacen en un 27 % y los costos de inversión en un 14 %.

Sin embargo, la solución obtenida comparte algunas características con la solución *I.A*, como la dimensión relativa de las diferentes regiones ambientales y su secuenciamiento espacial; más específicamente, los compartimentos aireados poseen los volúmenes más pequeños y están ubicados en el segundo, cuarto y quinto lugar; los compartimentos anóxicos en el tercer y último lugar, y el anaerobio es el primero compartimento de la secuencia. El reciclaje externo de barros (que es la principal fuente de microorganismos pero que también recircula algo de nitratos) se distribuye al primer y segundo compartimentos; el caudal de agua residual afluyente se alimenta completamente al primer compartimento, determinando que prevalezcan condiciones anaerobias de manera que los organismos acumuladores de fósforo X_{PAO} aprovechen la materia orgánica fácilmente biodegradable S_S del afluyente más eficientemente para el almacenamiento de compuestos celulares X_{PHA} (proceso ρ_{PI}) y, consecuentemente, aumenten la eficiencia de la remoción del mismo del sistema.

La Figura 6.2.c y Tabla 6.2 muestran la configuración de planta y condiciones de operación que minimizan el VAN para el caso *I.C*, en el cual el caudal del afluyente se incrementa un 25% respecto al caso *I.A*. La solución *I.C* consiste en seis compartimentos de reacción con volúmenes de 932, 1096, 13056, 1241, 1066 y 7766 m³, respectivamente. El 53% del caudal de agua residual afluyente se alimenta al primer compartimento y el resto al tercero. Alrededor del 57% del caudal de la corriente de reciclaje externo (de barros) se alimenta al primer compartimento y el 43% restante al segundo compartimento. En esta configuración óptima obtenida, el segundo, cuarto y quinto compartimentos constituyen las regiones aireadas, y la secuencia completa de compartimentos que resulta según las condiciones ambientales que se establecen es: *Ana-Ae-Anox/Ana-Ae-Ae-Anox*. Por su parte, no se requiere la dosificación de carbono externo al proceso, y sólo la concentración de fósforo total ($P_{TOT,ef}$) alcanza su valor límite permitido para el efluente. Como es de esperar, el VAN aumenta aproximadamente un 24 % con respecto al caso *I.A*, mientras que los costos de

operación y de inversión lo hacen en un 28 % y 16 %, respectivamente, respecto a aquél.

Puede advertirse que esta solución presenta algunas similitudes con las soluciones *I.A* y *I.B.*, ya que el reciclaje externo de barros se distribuye al primer y segundo compartimento, los compartimentos aireados son los más pequeños ubicándose en segundo, cuarto y quinto lugar, y el compartimento anaerobio es el primer de la secuencia. Entre las diferencias se observa que las condiciones anóxicas bien establecidas prevalecen sólo en el último compartimento, ya que el tercer compartimento consiste en una región de dimensiones comparativamente más grandes que el resto, con características anaerobias/anóxicas intermedias (no claramente establecidas). En este caso, el caudal de agua residual afluente se distribuye al primer y tercer compartimento.

En el contexto de este análisis, y para las especificaciones de composición del afluente, se observa que en los tres casos analizados (*I.A*, *I.B* y *I.C*) la optimización de la superestructura resulta en configuraciones de planta que facilitan el establecimiento de las condiciones ambientales más convenientes para la remoción de fósforo, constituyéndose en el contaminante más difícil de remover del sistema, según el conjunto de límites permitidos dado.

6.5.2 Escenario II

A diferencia del escenario anterior, aquí se fijan la configuración de la planta y el tamaño de sus equipos para optimizar las condiciones de operación que minimizan los costos operativos para *diferentes composiciones* del agua residual afluente (los costos de inversión quedan fijos).

El análisis se centra en aquellos componentes que resultaron más relevantes en el análisis de sensibilidad presentado anteriormente para el caso *I.A* (Tabla 6.4); es decir, se considera variaciones de la concentración de amonio $S_{NH_4, fresh}$, materia orgánica lentamente degradable $X_{S, fresh}$ y fosfato $S_{PO_4, fresh}$ en el agua residual afluente. Tales variaciones oscilan en el rango de ± 5 a ± 25 % respecto al valor considerado en los casos del escenario *I*. El caudal afluente se fija en $18446 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$, como en el caso *I.A*.

Para ello se selecciona la configuración de planta obtenida como solución óptima para el caso de estudio *I.A* (solución *I.A*). De esta manera, se consideran seis

compartimentos cuyos volúmenes se fijan en 3941, 1237, 2994, 776, 609 y 5117 m³, al igual que en aquel caso. Esto resulta en un costo de inversión de los tanques CI_t de 2382709 Euros. Se suponen tres sistemas de aireación para los compartimentos 2, 4 y 5, con una capacidad de aireación individual máxima correspondiente a $k_La = 360 \text{ d}^{-1}$, determinando un costo para los sistemas de aireación CI_a de 191042 Euros (notar que este costo es mayor que aquel computado para la solución *I.A.*, $-CI_a = 181764$ Euros- porque las capacidades de aireación eran de $k_La_2 = 293 \text{ d}^{-1}$, $k_La_4 = 285 \text{ d}^{-1}$ y $k_La_5 = 255 \text{ d}^{-1}$). La bomba de recirculación de barros se adopta para una capacidad de reciclo máxima de $Q_{r,ext}^T = 2 Q_{fresh}^T$, fijando un costo de inversión para esta bomba CI_{sr} de 46884 Euros, siendo mayor que el computado para la solución *I.A.* ($CI_{sr} = 35310$ Euros), ya que se allí se calculó para el valor óptimo de la relación de recirculación ($Q_{r,ext}^T = 0.787 Q_{fresh}^T$). Finalmente, como el área transversal del decantador secundario también se supone fija en 1500 m² y el caudal de agua residual afluyente en 18446 m³d⁻¹, el costo de inversión del decantador CI_{sett} y de la estación de bombeo del afluyente CI_{ips} quedan fijos en 442671 y 268985 Euros, respectivamente. Por lo tanto, el costo total de la inversión CI^T es de 3332291 Euros.

Respecto al aspecto específicamente operativo, es posible dosificar una fuente externa de carbono a cualquier compartimento, y se permiten todas las distribuciones de corrientes posibles como, por ejemplo, los caudales Q_{fresh}^T , $Q_{r,ext}^T$ y $Q_{trans,i}^T$ ya que se modela la interconexión entre todas las unidades del proceso. Notar que no se calcula el costo de bombas para reciclos internos, *bypasses*, barros destinados a tratamiento, pero sí se computa sus costos operativos (ecuación 5.89.b).

La Tabla 6.5 muestra las especificaciones de concentración de los componentes $S_{NH,fresh}$, $S_{PO,fresh}$ y $X_{S,fresh}$ en el afluyente seleccionadas: ± 5 , ± 10 , ± 15 , ± 20 y $\pm 25\%$ respecto al escenario *I.* Estos componentes resultaron los más sensibles para la función objetivo, según el análisis de sensibilidad anterior. De esta manera, se tienen 30 casos, más el caso del afluyente *I.A.* de referencia, en los que se minimiza el costo de operación total para la planta supuesta. La tabla lista los valores de CO^T y $CO^{T,Annual}$ ($CO^T = \Gamma \cdot CO^{T,Annual}$).

La Figura 6.3 grafica los valores óptimos obtenidos para variaciones en la concentración de $S_{NH,fresh}$. Particularmente, la Figura 6.3.a. grafica los costos operativos anuales; la Figura 6.3.b muestra los caudales de las corrientes distintos a cero, e indirectamente, sus perfiles de distribución; y la Figura 6.3.c incluye las

concentraciones de los contaminantes en el efluente. Por su parte, las Figuras 6.4 y 6.5 grafican los mismos resultados para variaciones en la concentración de $S_{PO, \text{fresh}}$ y $X_{S, \text{fresh}}$, respectivamente.

Tabla 6.5. Especificaciones de concentraciones y costos operativos para el escenario II.

<i>Caso II</i>	S_{NH} (gNm^{-3})	S_{PO} (gPm^{-3})	X_S ($gCODm^{-3}$)	CO^f (Euros)	CO^f, annual (Euros año ⁻¹)
Afluente caso I.A	40,60	9,01	202,32	7002152,8	561970,53
(-25% S_{NH})	30,45	9,01	202,32	6193806,2	497095,20
(-20% S_{NH})	32,48	9,01	202,32	6272261,8	503391,80
(-15% S_{NH})	34,51	9,01	202,32	6375198,0	511653,13
(-10% S_{NH})	36,54	9,01	202,32	6515694,7	522928,95
(-5% S_{NH})	38,57	9,01	202,32	6724321,0	539672,63
(+5% S_{NH})	42,63	9,01	202,32	7347113,1	589655,95
(+10% S_{NH})	44,66	9,01	202,32	7725935,8	620059,05
(+15% S_{NH})	46,69	9,01	202,32	8119834,5	651672,11
(+20% S_{NH})	48,72	9,01	202,32	8525116,7	684198,77
(+25% S_{NH})	50,75	9,01	202,32	8957978,7	718938,90
(-25% S_{PO})	40,60	6,76	202,32	6475913,8	519736,26
(-20% S_{PO})	40,60	7,21	202,32	6533715,1	524375,21
(-15% S_{PO})	40,60	7,66	202,32	6604519,8	530057,77
(-10% S_{PO})	40,60	8,11	202,32	6706195,9	538217,97
(-5% S_{PO})	40,60	8,56	202,32	6834624,2	548525,22
(+5% S_{PO})	40,60	9,46	202,32	7208454,0	578527,61
(+10% S_{PO})	40,60	9,91	202,32	7439445,2	597066,23
(+15% S_{PO})	40,60	10,36	202,32	7675037,3	615974,10
(+20% S_{PO})	40,60	10,81	202,32	7912854,2	635060,53
(+25% S_{PO})	40,60	11,26	202,32	8155522,4	654536,31
(-25% X_S)	40,60	9,01	151,74	8000138,6	642065,70
(-20% X_S)	40,60	9,01	161,86	7793828,4	625507,90
(-15% X_S)	40,60	9,01	171,97	7587450,0	608944,62
(-10% X_S)	40,60	9,01	182,09	7383401,8	592568,36
(-5% X_S)	40,60	9,01	192,20	7181271,8	576346,05
(+5% X_S)	40,60	9,01	212,44	6906115,5	554262,88
(+10% X_S)	40,60	9,01	222,55	6897850,3	553599,54
(+15% X_S)	40,60	9,01	232,67	6962325,7	558774,13
(+20% X_S)	40,60	9,01	242,78	7058855,6	566521,32

(+25% X_S)	40,60	9,01	252,90	7171429,4	575556,13
---------------	-------	------	--------	-----------	-----------

El primer caso presentado en la Tabla 6.5 corresponde a la optimización según las especificaciones de agua residual afluyente correspondientes al caso *I.A.* Como se explicó previamente, el costo de inversión de la planta seleccionada para este escenario *II* está ligeramente sobreestimado, ya que para su cómputo se fijó la capacidad de los sistemas de aireación y bombas en sus valores máximos recomendados en la práctica. Así, como los costos operativos se calculan de acuerdo a los resultados de la optimización (en este caso se minimiza el CO^T en vez del VAN) se observa una leve disminución en el $CO^{T,Annual}$ para el afluyente del caso *I.A.* en este escenario, respecto al escenario anterior (561970.53 Euros año⁻¹ en este escenario frente a 561979.79 Euros año⁻¹ (Tabla 6.2) en el escenario anterior).

6.5.2.1 Variaciones de la concentración de amonio en el afluyente ($S_{NH,fresh}$)

La Figura 6.3.a. muestra que el costo de operación total anual ($CO^{T,Annual}$) aumenta con el aumento de la concentración de amonio en el afluyente, $S_{NH,fresh}$. La variación de costo más relevante corresponde a las multas debido a la calidad del efluente (OC_{EQ}), seguido del costo de la fuente de carbono externo dosificado al proceso (OC_{ECSD}) y del costo de energía para aireación (OC_a).

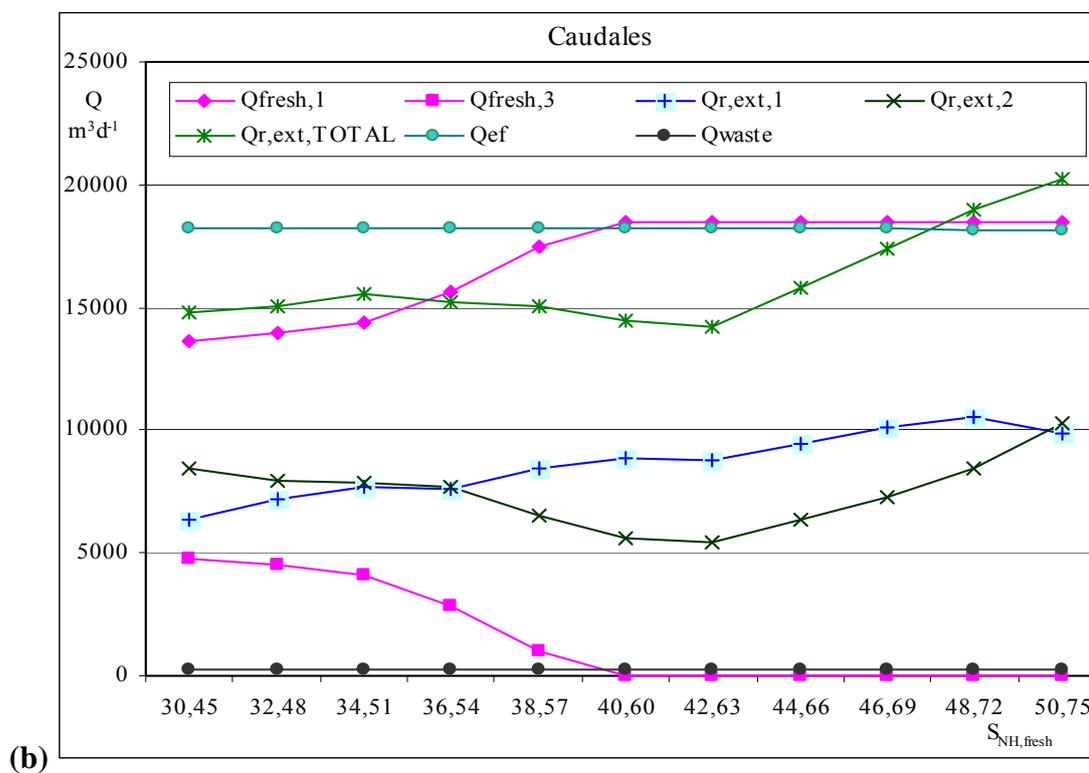
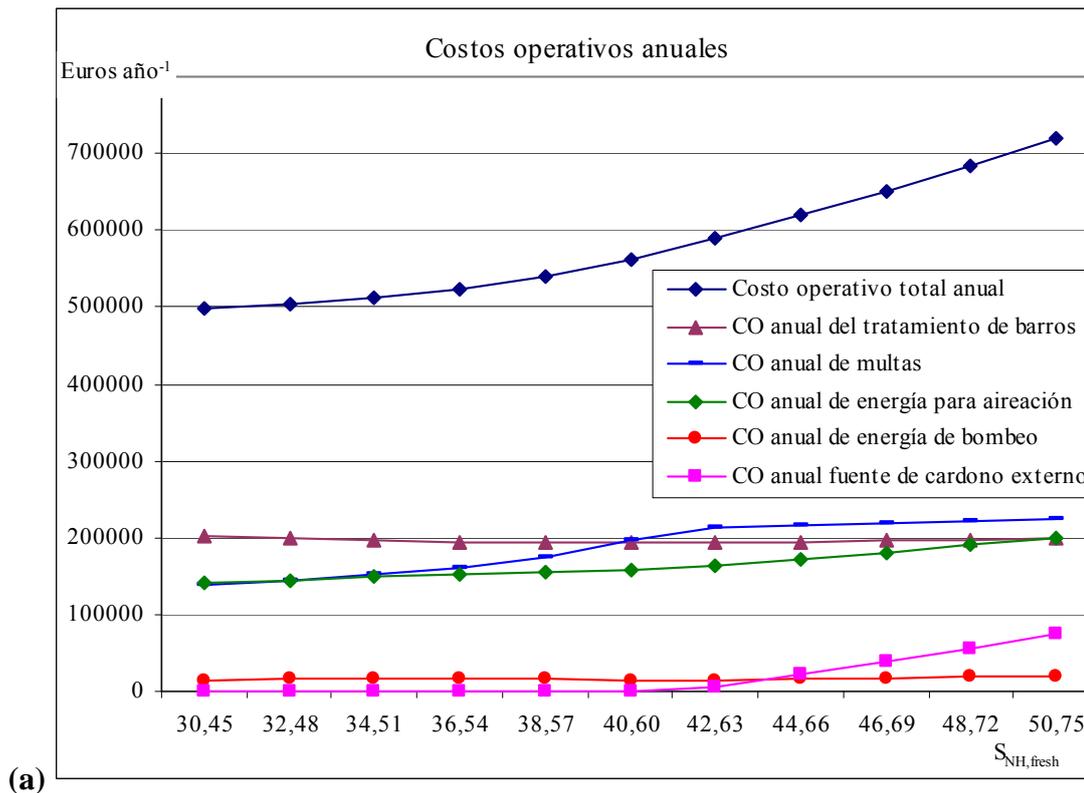
Para un incremento del 5 % en la concentración de amonio en el afluyente con respecto al valor de referencia del caso *I.A.* ($S_{NH,fresh} = 40.60 \text{ g N m}^{-3}$), la Figura 6.3.c. muestra que la concentración de amonio en el líquido tratado alcanza su valor límite permitido ($S_{NH,ef} = 4 \text{ g N m}^{-3}$), y la Figura 6.3.a. muestra que el costo de las multas aumenta marcadamente. Sin embargo, para incrementos mayores en $S_{NH,fresh}$, el costo de las multas aumenta más ligeramente debido a que el deterioro de la calidad del efluente se debe a otros contaminantes presente y no al amonio, ya que éste debe cumplir la restricción de límite permitido. Los factores de peso de los otros contaminantes que deterioran la calidad del líquido tratado son comparativamente menores al del amonio, determinando consecuentemente una variación de EQ más “suave”. Evidentemente, el tratamiento de un afluyente progresivamente más contaminado con amonio determina un aumento progresivo del costo de otros ítems que conforman el costo total.

Ciertamente, si se aumenta progresivamente $S_{NH,fresh}$ respecto a su valor para el caso *I.A.*, el sistema demanda la adición creciente de carbono externo al proceso y mayor aireación para satisfacer los límites impuestos, lo que determina un aumento de sus costos respectivos (Figura 6.3.a.).

Para un incremento del 5 % en $S_{NH,fresh}$ respecto al caso de referencia, se puede observar en la Figura 6.3.b. una disminución en el caudal de la corriente de reciclo externo, lo que determina un incremento en el tiempo de retención en los compartimentos. Sin embargo, para incrementos mayores al 5 %, la tendencia se revierte, resultando valores óptimos crecientes para el caudal de reciclo externo.

Por su parte, si $S_{NH,fresh}$ disminuye progresivamente respecto al caso *I.A.* de referencia, no se requiere la adición de carbono externo al proceso y la aireación disminuye, lo que queda reflejado por sus respectivos costos en la Figura 6.3.a. Se observa, como es de esperar, una disminución progresiva en las multas incurridas, ya que se parte de un líquido con menos contenido de un contaminante principal. La Figura 6.3.b muestra, además, que si disminuye $S_{NH,fresh}$ disminuyen la fracción del caudal de la corriente afluyente $Q_{fresh,1}$ y del de la corriente de barros $Q_{r,ext,1}$ que se alimentan al primer compartimento, lo que determina un aumento del tiempo de retención anaerobio, mejorando paralelamente la eficiencia de la remoción de fósforo, tal como se observa en la Figura 6.3.c. Por su parte, la Figura 6.3.b muestra que aumenta el caudal de reciclo externo (fuente de biomasa y de nitratos S_{NO}) que se alimenta al segundo compartimento ($Q_{r,ext,2}$), mejorando la eficiencia del proceso de nitrificación. La Figura 6.3.b muestra también que aumenta la fracción de caudal afluyente (fuente de materia carbonosa) al tercer compartimento ($Q_{fresh,3}$), mejorando el proceso de denitrificación, ya hay disponible más contenido de carbono, necesario para ese proceso.

Finalmente, para las más pequeñas reducciones en $S_{NH,fresh}$ (5 y 10 %) se observa una disminución en la concentración de amonio en el líquido tratado; mientras que para reducciones más importantes (15 y 20 %) se reduce paralelamente el contenido de fósforo total $P_{TOT,ef}$. Esto último se explica porque los procesos de eliminación de nitrógeno demandan una menor cantidad de carbono, dejando mayor disponibilidad para los procesos involucrados en la eliminación de fósforo (Figura 6.3.c).



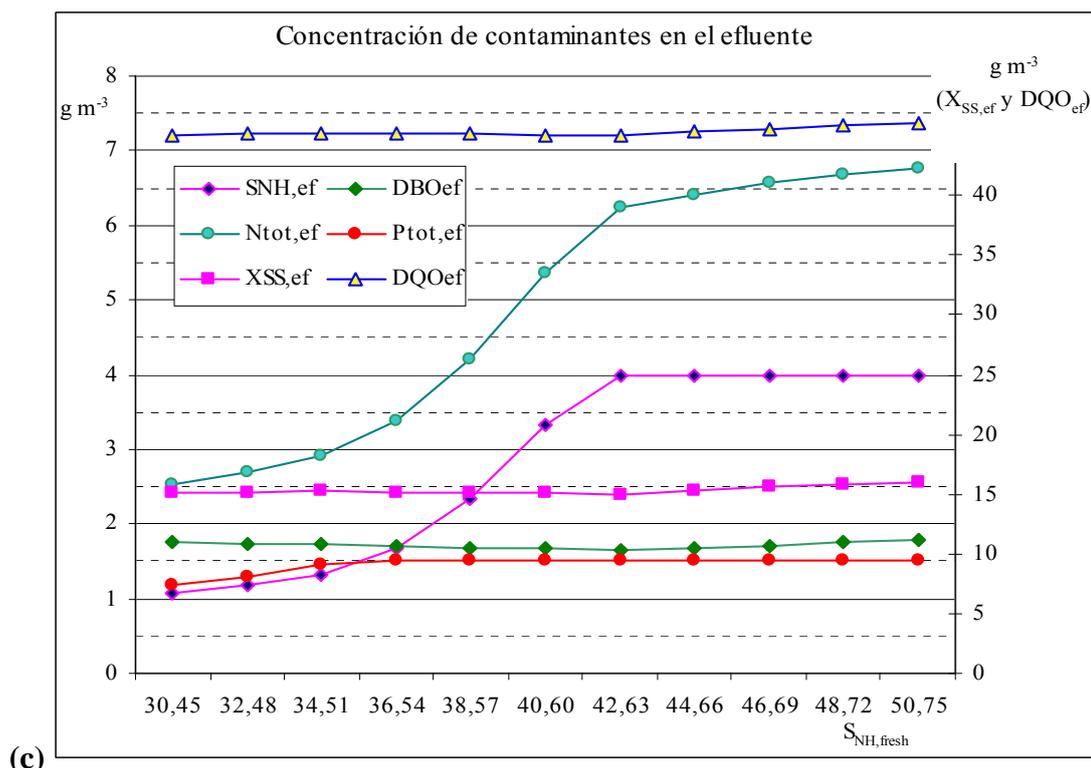


Figura 6.3. Valores óptimos para las variables para el escenario II con variaciones de $S_{NH,fresh}$. (a) Costos operativos anuales. (b) Caudales de las corrientes distintas de cero. (c) Concentraciones de los contaminantes en el efluente.

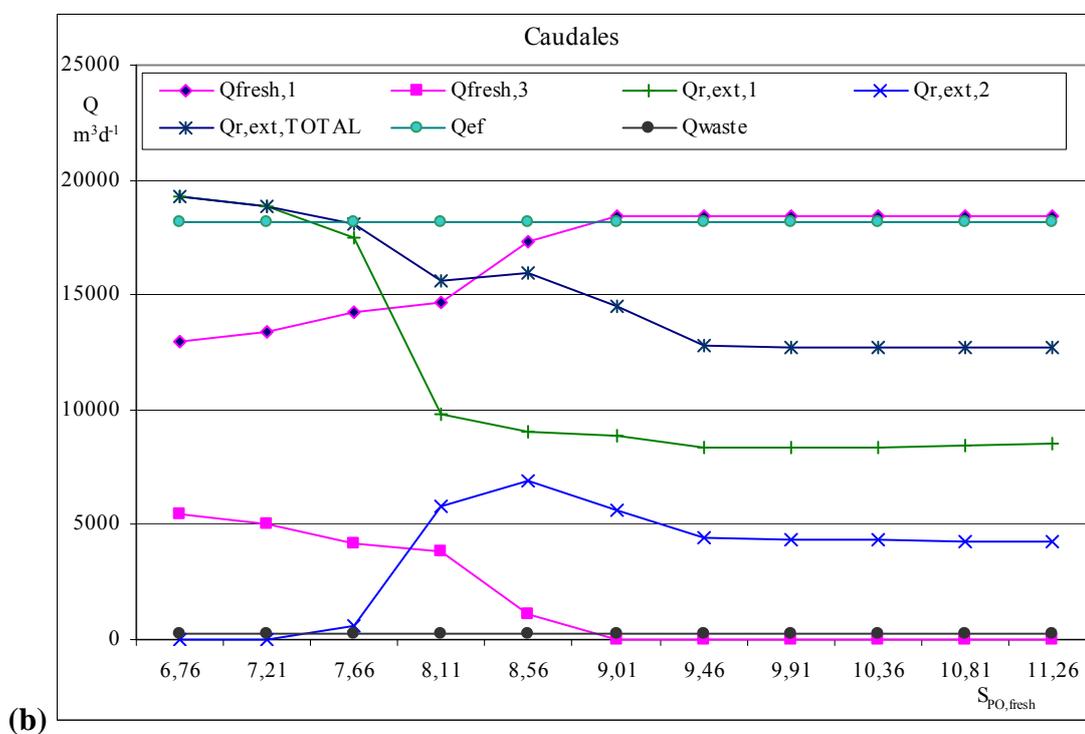
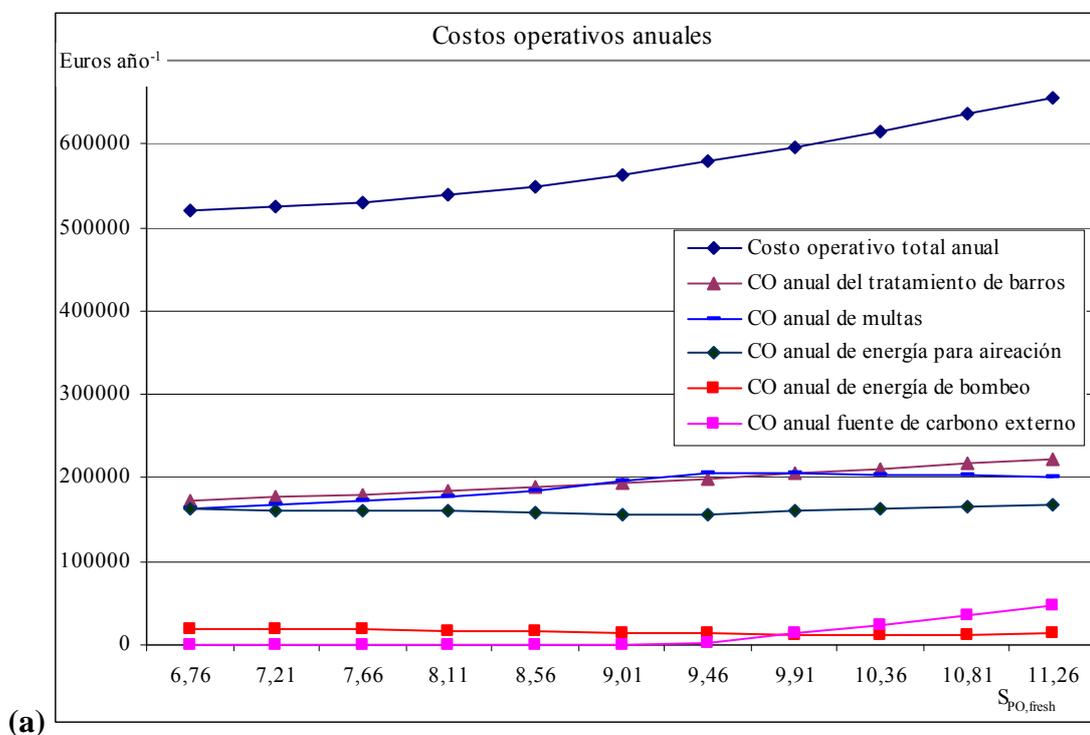
6.5.2.2 Variaciones de la concentración de fósforo en el afluente ($S_{PO,fresh}$)

El costo operativo total anual ($OC^{T,Annual}$) aumenta con la concentración de fósforo en el afluente ($S_{PO,fresh}$). Sin embargo, una variación dada en $S_{PO,fresh}$ no produce un impacto tan relevante en los costos operativos como ocurre ante la misma variación en $S_{NH,fresh}$. Esto concuerda con los resultados del análisis de sensibilidad local presentado anteriormente.

La concentración de fósforo $S_{PO,fresh}$ que se toma como valor de referencia (y que corresponde al caso *I.A*) sobre la cual se aplican las variaciones porcentuales es $9,01 \text{ g P m}^{-3}$ (Tabla 6.5). Si aumenta $S_{PO,fresh}$, aumenta el requerimiento de carbono externo dosificado al proceso, la cantidad de barros en exceso para disposición final y, en menor medida, la demanda de energía de aireación, tal como lo reflejan los respectivos costos operativos OC_{ECSD} , OC_{SLDGD} y OC_a en la Figura 6.4.a.

Para un incremento del 5 % ($S_{PO,fresh} = 9.46 \text{ g P m}^{-3}$), el caudal de reciclaje externo total $Q_{r,ext}^T$ disminuye (Figura 6.4.b), y las multas incurridas OC_{EQ} aumentan

considerablemente (Figura 6.4.a). Sin embargo, para incrementos porcentuales mayores al 5%, se observa que el caudal de reciclo externo y las multas incurridas permanecen esencialmente constantes.



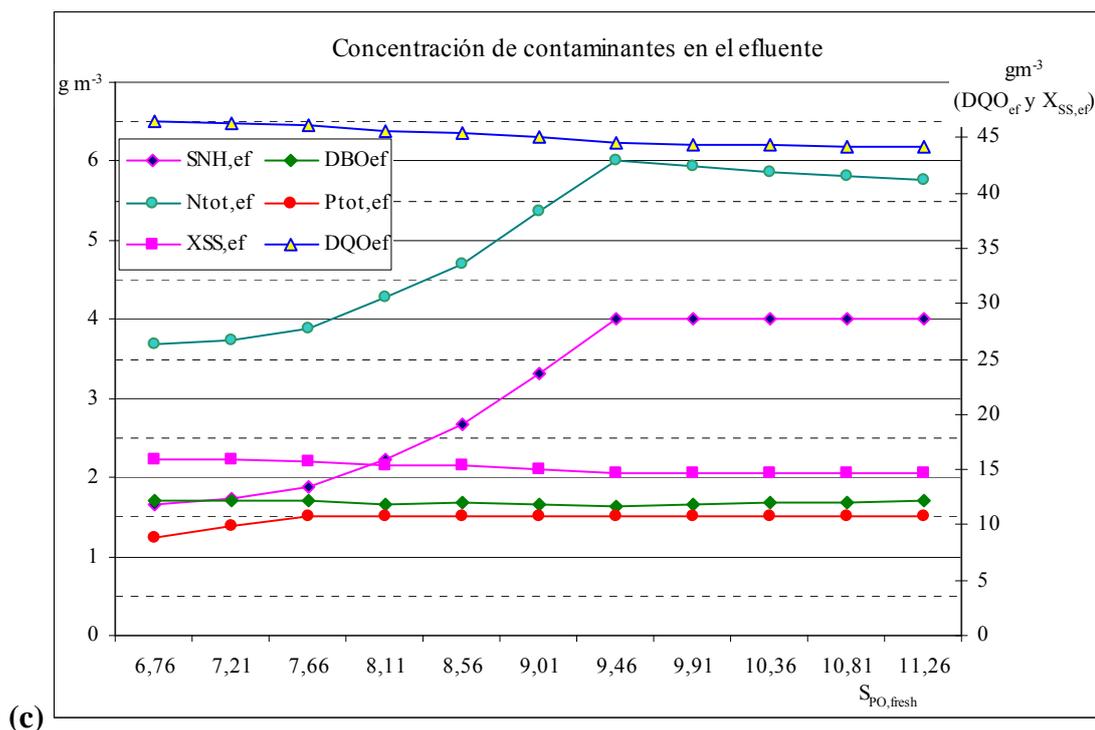


Figura 6.4. Valores óptimos para las variables para el escenario II con variaciones de $S_{PO,fresh}$. **(a)** Costos operativos anuales. **(b)** Caudales de las corrientes distintas de cero. **(c)** Concentraciones de los contaminantes en el efluente.

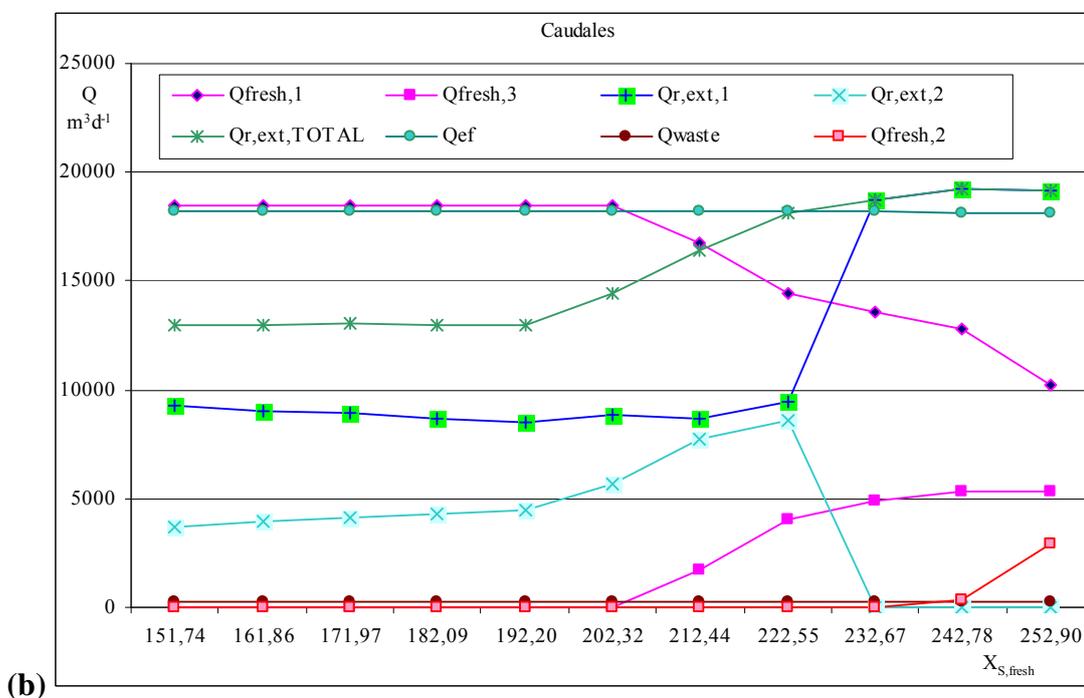
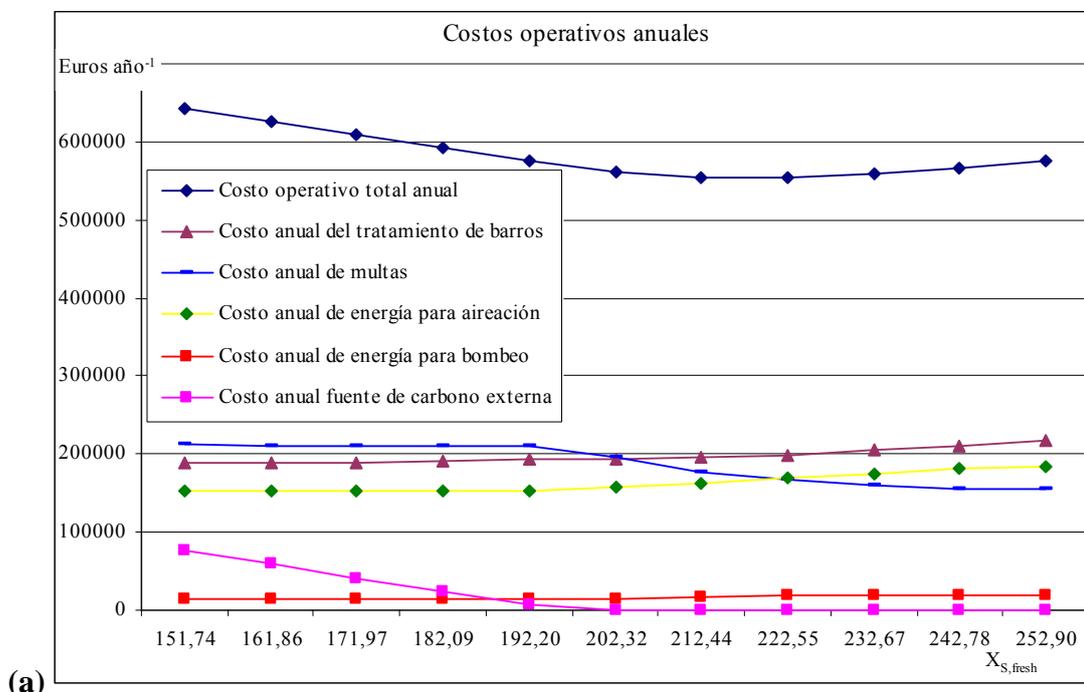
Por su parte, una reducción de $S_{PO,fresh}$ respecto a su valor de referencia produce un aumento en el caudal de reciclo externo de barros (Figura 6.4.b), disminuyendo los tiempos de retención en los compartimentos y la producción de barros para disposición; esta última se refleja por su respectivo costo en la Figura 6.4.a. Por otra parte, si se reduce progresivamente $S_{PO,fresh}$ se mejora el proceso de nitrificación incrementando la aireación, y el proceso de desnitrificación distribuyendo progresivamente una mayor fracción del caudal afluente al tercer compartimento; así, las concentraciones de amonio $S_{NH,ef}$ y nitrógeno total $N_{TOT,ef}$ en el líquido tratado disminuyen (Figura 6.4.c), y con ello las multas correspondientes (Figura 6.4.a). Los costos de aireación y de energía de bombeo aumentan en una proporción menor que la reducción de las multas y del costo de tratamiento de barros, mejorando así el costo operativo total.

6.5.2.3 Variaciones de sustrato lentamente biodegradable en el afluente ($X_{S,fresh}$)

Como muestra la Figura 6.5.a los incrementos de la concentración de sustrato lentamente biodegradable del afluente $X_{S,fresh}$ producen un incremento de la aireación, y en consecuencia producen un incremento en la producción de barros destinados a tratamiento; aumentando los costos de energía de aireación y del tratamiento de los barros, pero consiguiendo mejoras en la calidad del efluente, que se evidencian en la disminución del costo correspondiente a multas. Así, se observa que los incrementos de 5, 10 y 15 % en la concentración de X_S del afluente reduce el costo operativo total pero incrementos mas importantes, de 20 o 25 %, lo aumentan.

Los incrementos de 5 y 10 % en $X_{S,fresh}$ producen una disminución de la alimentación de afluente al primer compartimento $Q_{fresh,1}$, aumentando la alimentación al tercero $Q_{fresh,3}$; esto en conjunción con un incremento en la aireación produce una mejora en el proceso de nitrificación/denitrificación, lo que se evidencia con valores de amonio $S_{NH,ef}$ y nitrógeno total $N_{TOT,ef}$ inferiores en el efluente. Los valores de demanda química y biológica de oxígeno y de sólidos suspendidos del efluente (DQO_{ef} , DBO_{ef} y $X_{SS,ef}$) aumentan, sin embargo el costo total debido a multas mejora. Con esto, a pesar de los incrementos en el costo de aireación y tratamiento de barros, el costo de operación total mejora. Los incrementos del 15 % en la concentración de $X_{S,fresh}$ también producen una disminución del caudal de afluente alimentado al primer compartimento $Q_{fresh,1}$, y un aumento de este caudal al tercero $Q_{fresh,3}$, y por último un incremento en la aireación que mejora el proceso de nitrificación/denitrificación. Esto provoca una mejora en los valores de amonio $S_{NH,ef}$ y nitrógeno total en el efluente $N_{TOT,ef}$. Los valores de demanda química y biológica de oxígeno y de sólidos suspendidos del efluente también aumentan, pero en este caso la corriente de reciclaje externo de barros es completamente alimentada al primer compartimento, y la alimentación de barros al segundo compartimento desaparece, mejorando la eficacia de la remoción de fósforo, lo que se hace evidente con la concentración del fósforo total del efluente $P_{TOT,ef}$ por debajo de su valor umbral de 1.5 gP m^{-3} mejorando el costo de las multas. A pesar de los incrementos en los costos para la aireación y el tratamiento de los barros, el costo de operación total mejora con respecto al caso I.A. Sin embargo, para incrementos de 20 y 25 % en el $X_{S,fresh}$ el incremento de los costos de aireación y

tratamiento de barros excede el decremento en el costo de las multas y por consiguiente el costo de operación total aumenta.



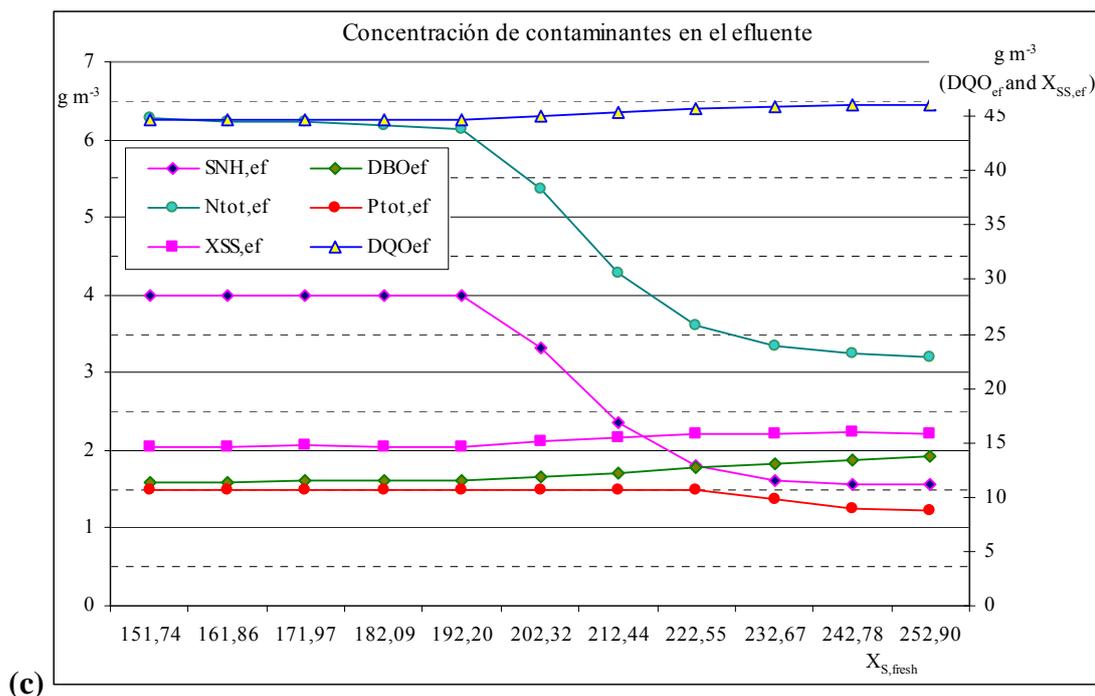


Figura 6.5. Valores óptimos para las variables para el escenario II con variaciones de $X_{S,fresh}$. **(a)** Costos operativos anuales. **(b)** Caudales de las corrientes distintas de cero. **(c)** Concentraciones de los contaminantes en el efluente.

Por otro lado, si la concentración de sustrato lentamente biodegradable disminuye, los costos correspondientes a las multas y la dosificación de carbono externo aumentan y el costo de tratamiento de barros y de aireación disminuyen, lo que resulta en un incremento del costo de operación total.

Con un incremento en la concentración de sustrato lentamente biodegradable del 5 %, disminuye la eficacia de la remoción de nitrógeno, lo que se evidencia con un S_{NH} del efluente en su límite de $4 \text{ g N m}^{-3} \text{ y}$, a pesar del hecho de que se reducen las concentraciones de DQO , DBO y X_{SS} del efluente, el costo de las multas aumenta. El reciclo externo disminuye, produciendo un aumento en los tiempos de retención en los reactores y así cumpliendo con los límites impuestos para el efluente.

Otros resultados

A fines comparativos, se plantea la resolución del problema completo de síntesis y diseño para los afluentes de los casos II.(-25% SPO) y II.(+25% SPO), en las cuales la concentración de S_{PO} del afluente se reduce y aumenta en un 25 % respecto al afluente

del caso I.A, respectivamente. Las soluciones que se obtienen en estos casos se muestran en la Figura 6.6 y la Tabla 6.6.

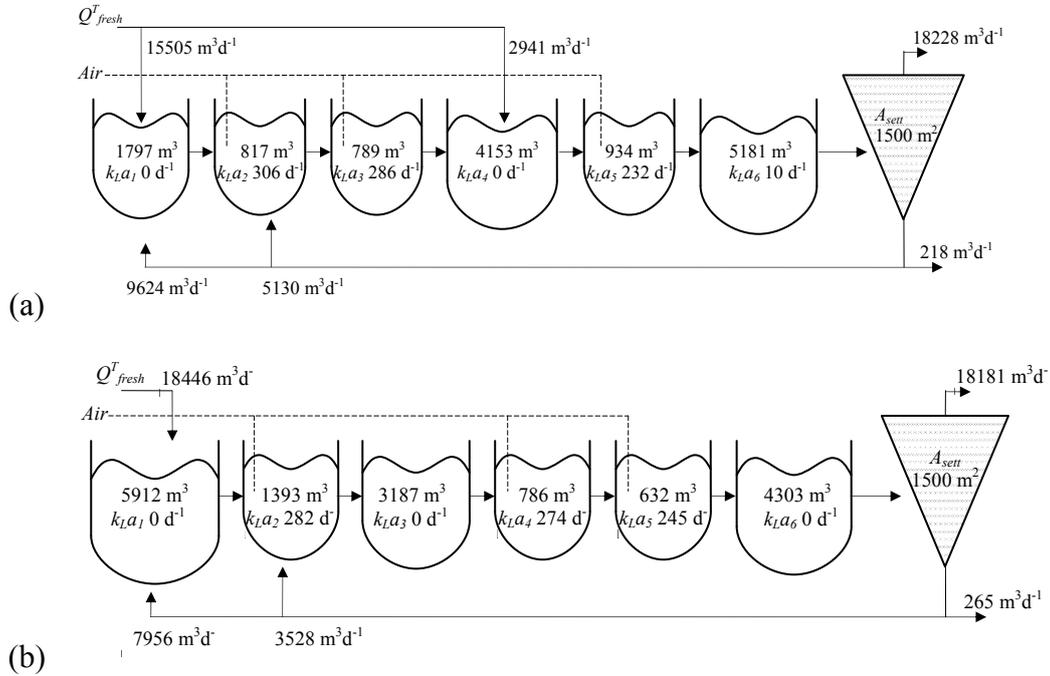


Figura 6.6. Configuración óptima y valores de las variables principales del proceso para la síntesis y diseño de los afluentes del (a) Caso II.(-25% S_{PO}); (b) Caso II.(+25% S_{PO})

Tabla 6.6. Valores óptimos de las variables principales para la síntesis y diseño de los afluentes del (a) Caso II.(-25% S_{PO}); (b) Caso II.(+25% S_{PO})

Contaminantes en el efluente	Caso II.(-25% S_{PO})	Caso II.(+25% S_{PO})
$S_{NH,ef}$, g N m^{-3}	2.00	4.00
$N_{tot,ef}$, g N m^{-3}	3.83	6.29
$P_{tot,ef}$, g P m^{-3}	1.50	1.50
DBO_{ef} , g m^{-3}	1.61	1.63
DQO_{ef} , g COD m^{-3}	45.78	43.76
$X_{SS,ef}$, g SST m^{-3}	15.09	14.27
Costos		
CO^t_{Annual}	504403.97	641889.81
CI^t	3257125.00	3425273.38
VAN	9541998	11423220

Como se mostró en el estudio del escenario II, suponiendo que la planta es dada y asumiendo un costo de inversión IC^T de 3332291 Euros, los costos operativos totales resultaron: $CO^{T,Annual}(II.-25\% S_{PO}) = 519736.26$ Euros anuales y $CO^{T,Annual}(II.+25\% S_{PO}) = 654536.31$ Euros anuales (Tabla 6.5), respectivamente, lo que arrojaría valores de $VAN(II.-25\% S_{PO})$ de 9808204.8 Euros y $VAN(+25\% S_{PO})$ de 11487813.4 Euros), respectivamente. En ambos casos, las soluciones encontradas con la resolución del problema completo de síntesis y diseño para estos afluentes mejoran, como era de esperar.

También se pueden comparar estas soluciones con las correspondientes a la síntesis y diseño del caso I.A. El afluente del caso I.A es el mismo que el del caso II.(-25% S_{PO}), pero la concentración de fósforo ($S_{PO, fresh}$) disminuye de 9.01 a 6.76 $gP\ m^{-3}$ y el VAN mejora de 10313672 a 9541998 Euros (Tabla 6.2 y Tabla 6.6). Las condiciones que se desarrollan en los compartimentos resultan levemente diferentes. En el caso II.(+25% S_{PO}), como la concentración de fósforo del afluente $S_{PO, fresh}$ aumenta respecto al caso I.A., el VAN aumenta de 10313672 a 11423220 Euros (Tabla 6.2 y Tabla 6.6). En éste último caso las concentraciones de $S_{NH,ef}$ y $P_{tot,ef}$ alcanzan los valores umbral permitidos para el efluente.

Como se mostró en el escenario II, el modelo resulta flexible y robusto y capaz de ser usado para optimización de procesos (fijando las variables estructurales) para encontrar las mejores variables operativas para el tratamiento de un efluente en una planta dada. En este segundo escenario, se pudo observar que el comportamiento del sistema frente a variaciones en las concentraciones de los componentes relevantes del afluente, se deben a complejas interacciones debidas a los procesos biológicos y los *trade off* involucrados en el modelo planteado. En ningún caso de los estudiados se observó alguna corriente de *bypass* activa, las mismas resultaron nulas en todas las soluciones halladas.

6.6 Estrategia de solución y aspectos computacionales

Para todos los casos se utilizó la estrategia de múltiples puntos iniciales para inicializar los modelos. El modelo fue desarrollado en GAMS y resuelto con el código

CONOPT. El modelo resulta en 963 variables y 874 ecuaciones. La superestructura es mayor y más compleja que la del caso presentado en el capítulo 4, ya que considera más equipos y corrientes potenciales en la superestructura, y se contemplan aquí más componentes y procesos biológicos para computar la remoción de fósforo. El modelo proporciona soluciones para una variedad de casos de estudio, mostrando flexibilidad y robustez. El tiempo de CPU total promedio para solucionar los distintos casos de estudio resultó de 80 segundos aproximadamente. Se utilizó una PC Intel Pentium IV 2.40GHz CPU con 248 MB de memoria RAM.

6.7 Conclusiones

En este capítulo se abordó la optimización simultánea de la estructura del sistema (la configuración del proceso), diseño (dimensionamiento de los equipos, esto es, los volúmenes de los compartimentos de reacción) y de las condiciones de operación (caudales de aireación, de reciclos, *bypasses* y distribución de alimentación de agua residual afluyente y dosificación de la fuente externa de carbono a cada compartimento de reacción, caudales de efluente clarificado y barros destinados a tratamiento) de plantas de tratamiento de aguas residuales por barros activados para la remoción biológica combinada de nitrógeno y fósforo y la oxidación de la materia orgánica, con el objetivo de minimizar el Valor Actual Neto (VAN), dados las especificaciones del agua residual afluyente, los valores límite para concentraciones de contaminantes en el efluente, un modelo de superestructura del proceso con un máximo de siete compartimentos de reacción y un decantador secundario y un modelo de costos determinado que computa los costos de inversión y de operación. Se propuso un problema DNLP y se resolvió para diferentes escenarios y casos de estudio.

El modelo resulta flexible y robusto y además capaz de ser usado para optimización de procesos (fijando los equipos) para encontrar las mejores condiciones operativas para un efluente dado.

Cabe aclarar que los valores de los parámetros del modelo pueden ser ajustados a una situación local particular. El modelo de superestructura se muestra lo suficientemente flexible y robusto para encontrar soluciones para una variedad de casos de estudio con diferentes valores para los parámetros.

De igual modo, la síntesis del proceso resulta factible para distintas variantes o especificaciones del afluente. Se encontró que en los tres casos del escenario I (*I.A*, *I.B* y *I.C*) la optimización de la superestructura resulta en configuraciones de planta que facilitan el establecimiento de las condiciones ambientales más convenientes para la remoción de fósforo, constituyéndose en el contaminante más difícil de remover del sistema, según el conjunto de límites permitidos dado.

Como se mostró en el escenario II, el modelo resulta flexible y robusto, y capaz de ser usado para optimización de las condiciones operativas (fijando la configuración de la planta y el tamaño de sus equipos) para diferentes composiciones del agua residual afluente con el fin de minimizar los costos operativos. En este segundo escenario estudiado, se pudo observar que el comportamiento del sistema frente a variaciones en las concentraciones de los componentes relevantes del afluente, se puede justificar por medio del entendimiento de los procesos biológicos y los trade off involucrados en el modelo planteado. En ningún caso de estudio se observó alguna corriente de bypass activa, las mismas resultaron nulas en todos los casos estudiados.

CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES GENERALES Y TRABAJOS FUTUROS

CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES GENERALES Y TRABAJOS FUTUROS	247
7.1 Resultados encontrados.....	249
7.2 Trabajos futuros	252

A lo largo de esta tesis se desarrollaron modelos para optimización, síntesis y diseño de sistemas de tratamiento de aguas residuales por barros activados para eliminación biológica de nutrientes basados en modelos, aplicando técnicas de programación matemática y empleando modelos detallados para la descripción de las unidades de equipamiento.

Debido a la naturaleza del problema (fuertemente no lineal, existencia de óptimos locales, existencia de diferentes soluciones con el valor de la función objetivo similar, procesos biológicos estrechamente acoplados), la estrategia de solución consistió en resolver modelos crecientes en complejidad y tamaño, a los fines de analizar, por un lado, su performance y, por otro, verificar los resultados obtenidos desde el punto de vista de la eficiencia de tratamiento.

Los modelos fueron implementados y resueltos empleando *General Algebraic Modelling System GAMS* y empleando resolvidores de tipo local. Para los modelos DNLP se empleó el resolvidor CONOPT y para los MINLP se utilizó DICOPT (con CONOPT como resolvidor de los de DNLP y el algoritmo BDMLP como resolvidor de los MIP). Para todos los modelos resueltos, las soluciones óptimas reportadas fueron obtenidas siguiendo la estrategia de puntos iniciales múltiples; esto es, empleando un conjunto ordenado de puntos iniciales diferentes para detectar la ocurrencia de óptimos locales y retener las “mejores” soluciones. No obstante, la solución óptima global no puede ser garantizada debido a la no convexidad de los modelos matemáticos resultantes y a que el resolvidor utilizado es de tipo local.

En los primeros capítulos se muestran modelos para remoción biológica de nitrógeno y reducción del contenido de materia orgánica del afluente. Se comenzó con la implementación de modelos para la optimización de las condiciones operativas para configuraciones convencionales y se exploraron alternativas con diferentes posibilidades de distribución de corrientes. Los primeros modelos se plantearon en forma de problemas del tipo DNLP, y también se formularon modelos para la síntesis del proceso del tipo MINLP, con el fin de evaluar la performance de los mismos. Para los modelos DNLP se obtuvieron soluciones para un alto porcentaje de puntos iniciales propuestos, a diferencia de los modelos con variables enteras (MINLP), en los que el porcentaje de puntos iniciales que arriban a una solución disminuyó marcadamente

(muchos puntos iniciales derivan en infactibilidad). Por este motivo, se avanzó en el desarrollo de modelos de síntesis del proceso para remoción biológica de nitrógeno con programación del tipo DNLP, empleando cotas inferiores numéricamente pequeñas (despreciables desde el punto de vista práctico) a los fines de evitar inconvenientes numéricos en la resolución de los mismos. Con esta metodología se obtuvieron buenos resultados.

En los últimos capítulos se extendieron los modelos desarrollados para la eliminación de nitrógeno a fin de considerar simultáneamente la remoción biológica de nitrógeno y fósforo.

El desarrollo secuencial de modelos cada vez más detallados permitió ganar progresivamente entendimiento de los procesos biológicos involucrados y los *trade off* o compromisos existentes. Esta metodología secuencial para la resolución de modelos más complejos permitió disponer de “buenos” valores iniciales para las variables más críticas y relevantes del proceso, proporcionados por la previa resolución de modelos más simplificados. Con esta metodología de trabajo se logró avanzar en forma segura, corroborando los resultados obtenidos y consiguiendo modelos detallados, flexibles y robustos del proceso.

7.1 Resultados encontrados

Como era de esperar, de acuerdo a la naturaleza del problema, el costo de operación total anual mejoró en cada caso, en mayor o menor medida, cuando se permitió la distribución de las corrientes del proceso a lo largo de los compartimentos de reacción, ya que se aumenta la flexibilidad del proceso, ésta última entendida como la posibilidad de evaluar un número mayor de configuraciones candidatas para eliminación biológica de nitrógeno. La mejora relativa dependió fuertemente de las características (composición y caudal) del líquido a tratar, sobre todo cuando el agua residual afluyente es deficitaria en la relación del contenido de materia orgánica al de nitrógeno. Esta relación determina la eficiencia de eliminación de nitrógeno del medio que se puede alcanzar.

Se observó que el proceso de tratamiento continuo por barros activados para la remoción de nitrógeno también se beneficia mediante el uso de diferentes estrategias

operacionales, como el empleo de aireación secuencial (esto es, alternancia espacial de zonas aeróbicas y anóxicas) y el uso de patrones de distribución de corrientes, existiendo un paralelismo con los sistemas de tratamiento alternantes (esto es, alternancia temporal de zonas aeróbicas y anóxicas), como se observa en los sistemas de reactores batch secuenciados (*Sequencing Batch Reactor SBR*). Mediante el empleo de patrones de aireación, alimentación y recirculación convenientes se puede mejorar notoriamente la performance del sistema ante una variación de composición del afluente. Esto también evidencia la importancia de la optimización de los modos de operación del proceso para condiciones de afluente variables.

Dada la flexibilidad y robustez demostradas por el modelo desarrollado para síntesis del proceso para remoción de nitrógeno y el método de resolución propuesto, se concluyó que resultan un instrumento útil de ayuda al ingeniero de diseño. Después de encontrar diferentes “buenas” soluciones al problema de optimización que se plantea, se puede realizar una selección entre éstas considerando otros aspectos del diseño como la flexibilidad, confiabilidad y controlabilidad, aspectos que son difíciles de incorporar en el modelo de diseño. A pesar de la existencia de funciones no suaves, el resolvidor CONOPT permitió resolver los modelos aceptablemente, proporcionando soluciones para un alto porcentaje de puntos iniciales empleados. La existencia y el tipo de compartimentos de reacción y corrientes de proceso fueron manejados satisfactoriamente con el empleo de cotas inferiores muy pequeñas (despreciables desde el punto de vista práctico) que introducen sólo un error muy pequeño en el cálculo de la función objetivo si el equipo asociado es “eliminado” de la superestructura para alcanzar el *flowsheet* óptimo “real”. Sin embargo, es interesante notar que, en algunos casos, se hallaron soluciones con pequeños valores de k_La (pero no el valor de cota inferior), que pueden resultar inadecuadas desde un punto de vista ingenieril. Esta limitación podría ser subsanada mediante la implementación de modelos de tipo MINLP o GDP.

Se abordó la derivación e implementación de modelos de optimización, síntesis y diseño de plantas para remoción combinada de nutrientes (nitrógeno y fósforo) mediante el modelo ASM3+Bio-P, recurriendo a modelos de programación matemática. Los modelos de optimización de las condiciones operativas de las configuraciones de planta convencionales resultan robustos y convergen con relativa facilidad. Al igual que en los modelos para remoción de nitrógeno, pueden obtenerse más de una solución,

según la inicialización del problema, por la naturaleza altamente no lineal del modelo y las características del resolutor utilizado (resolutor local).

De los modelos para optimización de las condiciones operativas para minimización de costos para una configuración de planta dada se encontró que, según las especificaciones del afluente, los sistemas lograban optimizar las condiciones para la remoción del nutriente más difícil de eliminar y así cumplir con las especificaciones de calidad impuestas para el efluente.

De acuerdo al ejemplo de afluente empleado en los modelos para optimización de las condiciones operativas de plantas para remoción combinada de nutrientes se evidenciaron mejoras en los costos operativos anuales de hasta el 8 % respecto a simulaciones (liberando las especificaciones de valores límites permitidos para el efluente) con empleo de condiciones operativas estándares para las configuraciones de planta convencionales, y en las optimizaciones realizadas se cumplen las condiciones de calidad de efluente establecidas en el modelo, mientras que en las simulaciones (empleando las condiciones de operación estándar) los límites de concentración de los contaminantes en el efluente son excedidas. Estas mejoras dependen de las especificaciones del afluente y condiciones impuestas para el efluente, así como del modelo de costos empleado. Es necesario aclarar que el modelo de costos que se emplea en la simulación es sólo válido mientras se cumplan los límites permitidos para el efluente (límites que en realidad se exceden), con lo que podemos concluir que la mejora en los costos debería ser mayor empleando un modelo que considere el hecho del no cumplimiento de los límites.

También se desarrolló un modelo de superestructura para plantas de remoción combinada de nutrientes para optimización de las condiciones operativas para minimizar costos operativos, logrando mejorar aún más los resultados, como se esperaba, ya que el espacio de búsqueda de soluciones se amplía con este modelo. A la vez, el modelo de superestructura permite encontrar nuevas configuraciones de proceso diferentes a las convencionales.

Este modelo de superestructura se amplió para considerar la síntesis del proceso, añadiendo a la función objetivo los costos de inversión. La superestructura, se modeló de la misma forma que aquella desarrollada para remoción de nitrógeno, mediante el empleo de cotas inferiores pequeñas. El modelo resultó también flexible y robusto y resolvió satisfactoriamente una variedad de casos de estudio con diferentes caudales y

composiciones de afluente, logrando convergencia para un alto porcentaje de puntos iniciales.

Se concluye que el modelo y estrategia de resolución se perfilan como una herramienta útil para diseñar estos procesos, ya que, dadas las características del proceso, permite encontrar diferentes soluciones que difieren en mayor o menor medida en sus costos para cada caso y escenario planteado, por lo que se puede realizar una selección posterior entre estas soluciones, considerando aspectos (como la flexibilidad, confiabilidad y controlabilidad del proceso) que son difíciles de incorporar en el modelo.

Cabe aclarar que todos los valores de los parámetros del modelo pueden ser ajustados a la situación local particular. El modelo de superestructura se muestra lo suficientemente flexible y robusto para encontrar soluciones para una variedad de casos de estudio con diferentes valores para los parámetros.

7.2 Trabajos futuros

En los modelos presentados se trabajó en síntesis, diseño y optimización de plantas de tratamiento que operan en estado estacionario para un efluente de especificaciones conocidas. Toda la experiencia adquirida mediante los resultados obtenidos del modelo aquí propuesto puede ser usada como punto de partida para el desarrollo de nuevos y mejores modelos.

En futuros trabajos, se propone abordar nuevos modelos matemáticos basados en programación matemática del tipo MINLP o GDP. Esto permitirá la incorporación de nuevas variables de optimización como la profundidad del decantador y la ubicación de su punto de alimentación, y permitirá el empleo de funciones de costos más rigurosas que consideren el término de costo fijo en los casos que corresponda.

Se plantea también como futuros trabajos el diseño bajo incertidumbre o el diseño flexible para optimización de los modos de operación del proceso para condiciones de afluente variable, un hecho de importancia en este tipo de procesos.

NOTACIÓN

<i>A</i>	área (m ²)
ASM3	Modelo de barros activados nº 3
<i>b</i>	parámetro de costo
<i>B</i>	constante (3000 ⁻¹ kgO ₂ d (h m ³) ⁻¹)
<i>BOD</i>	DBO
<i>C</i>	concentración del componente (<i>C = S o X</i>)
<i>C</i>	Carbono
<i>c</i>	cantidad de conservación: ThOD, N o la carga iónica
<i>CaOx</i>	capacidad de oxigenación
CI	costo de inversión(Euro)
CO	costo operativo (Euros)
<i>COD</i>	DQO
<i>cont</i>	contaminantes del efluente
DBO	Demanda Bioquímica de Oxígeno (g O ₂ m ⁻³)
DQO	Demanda Química de Oxígeno (g O ₂ m ⁻³)
<i>E</i>	<i>Energía</i>
<i>E</i>	energía (kWh d ⁻¹)
<i>EQ</i>	Índice de calidad del efluente (kg unidades contaminantes d ⁻¹)
<i>g</i>	mezcladores
<i>h</i>	altura (m)
<i>I</i>	conjunto de reactores/conjunto de mezcladores
<i>id</i>	tasa de interés (tasa de descuento)
<i>J</i>	flujo de sedimentación de sólidos debido a la gravedad
<i>J</i>	J conjunto de reactores aeróbicos
<i>K</i>	conjunto de procesos
<i>K</i>	conjunto de reactores anóxicos
<i>k_La</i>	coeficiente de transferencia de oxígeno(d ⁻¹)
<i>N</i>	nitrógeno

<i>n</i>	ciclo de vida de la planta (años)
<i>NTK</i>	Nitrógeno Total Kjendal
<i>O</i>	conjunto de quipos
<i>p</i>	procesos
<i>P</i>	Fósforo
<i>PAOs</i>	organismos acumuladores de fósforo
<i>PostDN</i>	esquema de postdenitrificación
<i>PreDN</i>	esquema de predenitrificación
<i>PrePostDN</i>	esquema de pre-postdenitrificación
<i>Q</i>	caudal volumétrico($\text{m}^3 \text{d}^{-1}$)
<i>q</i>	configuraciones de proceso
<i>Q_i</i>	caudal volumétrico en el compartimento de reacción <i>i</i>
<i>r</i>	velocidad de reacción (g m^{-3})
<i>RPI</i>	índice de performance de reacción
<i>RPI_p*</i>	indicador de performance de reacción global
<i>S</i>	concentración de un componente soluble (g m^{-3})
<i>SST</i>	sólidos suspendidos totales
<i>ThOD</i>	demanda teórica de oxígeno
<i>u</i>	caudal másico (g d^{-1})
<i>V</i>	volumen (m^3)
<i>VAN</i>	Valor Actual Neto (VAN)(Euros)
<i>V_i</i>	volumen del compartimento de reacción <i>i</i> ,
<i>VO</i>	variable de operación
<i>X</i>	concentración de un componente particulado(g m^{-3})
<i>y</i>	variable binaria para seleccionar la configuración del proceso
<i>Z</i>	dimensión característica

Subíndice

<i>a</i>	sistema de aireación
<i>BOD</i>	Demanda Bioquímica de Oxígeno
<i>bottom</i>	corriente inferior del decantador
<i>c</i>	componente
<i>clar</i>	zona de clarificación

<i>COD</i>	Demanda Química de Oxígeno
<i>ECSD</i>	Dosificación de fuente de carbono externo
<i>ef</i>	efluente clarificado
<i>EQ</i>	Índice de calidad del efluente
<i>ext</i>	externo
<i>fresh</i>	afluente
<i>g</i>	mezclador previo al reactor
<i>i</i>	reactor
<i>in</i>	entrada
<i>int</i>	interno
<i>ips</i>	estación de bombeo del afluente
<i>k</i>	proceso
<i>l</i>	variable de operación
<i>lim</i>	límite
<i>m</i>	capa de sedimentación
<i>max</i>	máximo
<i>min</i>	concentración mínima
<i>o</i>	unidad de proceso/operación
<i>p</i>	bomba
<i>r</i>	reciclo
<i>sat</i>	saturación
<i>sed</i>	zona de sedimentación
<i>sett</i>	decantador
<i>SLDG</i>	barros
<i>sr</i>	bomba de recirculación de barros
<i>SS</i>	sólidos suspendidos
<i>t</i>	tanque de reacción
<i>TKN</i>	Nitrógeno Total Kjendal
<i>TOT</i>	total
<i>tresh</i>	concentración umbral
<i>waste</i>	barros en exceso
<i>x</i>	componente
ρ	proceso

cont contaminante

Supraíndice

Annual anual

T total

initial inicial

Letras griegas

α costo de operación unitario anual (Euro day (año)⁻¹)

β factor de peso para contaminantes (g cont. unit g⁻¹)

δ parámetro de costo

v_{dn} velocidad global del líquido en la zona inferior de la capa de alimentación (m d⁻¹)

v_s velocidad de sedimentación (m día⁻¹)

v_{up} velocidad global del líquido en la zona superior de la capa de alimentación (m d⁻¹)

ρ velocidad de proceso/reacción (g (d m³)⁻¹)

$v_{p,x}$ coeficiente estequiométrico para cada proceso ρ y componente x

τ_i tiempo de retención en el compartimento de reacción i

Γ término de actualización (año)

REFERENCIAS Y BIBLIOGRAFÍA CONSULTADA

A

- Abadie, J. y Carpentier, J. Generalization of the Wolfe Reduced Gradient Method to the case of Nonlinear Constraints, in Optimization, R. Fletcher (ed.), Academic Press, New York, **1969**, 37-47.
- Adjiman, C. A., Schweiger, C. A., Floudas, C. A. Mixed-Integer Nonlinear Optimization in Process Synthesis. Handbook of Combinatorial Optimization. *Kluwer Academic Publishers*. **1998**.
- Alasino, N. Mussati, M. C. Scenna N. Wastewater Treatment Plant Synthesis and Design. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2007**, 46(23): 7497-7512.
- Alasino, N., Mussati M., Scenna N. Synthesis of Activated Sludge Wastewater Treatment Plants for Nitrogen Removal. *XXII Interamerican Chemical Engineering Congress (V CAIQ)*. Buenos Aires, Argentina, 1 - 4 October. **2006**, 06C(505).
- Alasino, N., Musatti M., Scenna N. Optimization of the Operation Conditions for Denitrifying Wastewater Treatment Plants. *International Mediterranean Modeling Multiconference (EMSS06)* Barcelona, Spain, 4 to 6 October. **2006**, pp 427-434.
- Alasino N., Mussati M., Scenna N., Aguirre P. Combined Nitrogen and Phosphorus Removal: Model Based Process Optimization. *18TH European Symposium On Computer Aided Process Engineering (ESCAPE-18)*, Lyon, France, 1-4 June 2008. *Computer Aided Chemical Engineering*, Vol. 25, **2008**, Pag. 163-168.
- Alasino N., Mussati M., Scenna N., Aguirre P. Synthesis and Design of Combined Biological Nitrogen and Phosphorus Removal WWT Plants. *10th International Symposium on Process Systems Engineering (PSE2009)*.
- Alex, J., Beteau, J.F., Copp, J.B., Hellinga, C., Jeppsson, U., Marsili-Libelli, S., Pons, M.N., Spanjers, H. and Vanhooren, H. Benchmark for evaluating control strategies in wastewater treatment plants. *Presentation, European Conference Control (ECC'99)*, Karlsruhe, Germany, August 31-September 3, **1999**.
- Aravinthan, V., Mino, T., Takizawa, S., Satoh, H. y Matsuo, T. Sludge hydrolysate as a carbon source for denitrification. *Water Science & Technology*. Vol 43,N 1, pp 191-199. IWA Publishing, **2000**.

Artan Nazik and Orhon Derin. Mechanism and Design of Sequencing Batch Reactors for Nutrient Removal. *Scientific and Technical Report No. 19*. Iwa Publishing (UK), **2005**.

Artan N., P. Wilderer, D. Orhon, R. Tasli and E. Morgenroth 2002. "Model evaluation and optimisation of nutrient removal potential for sequencing batch reactors". *Water SA*. 28(4):423-432.

B

Balkema A, Preisig H, Otterpohl R, Lambert F. Indicators for sustainability assessment of WWT systems, *Urban Water*, **2002**, 4, 153.

Barajas, M.G. Tesis Doctoral: Eliminación Biológica de nutrientes en un reactor biológico secuencial. Caracterización y estimulación de las fuentes de carbono del agua residual urbana. **2002**.

Barker, P.S. and Dold, P.L. "General model for biological nutrient removal activated sludge systems: model presentation". *Water Environ. Res.* **1997**, 69, pp. 969–984.

Batstone D., Keller J., Angelidaki I., Kalyuzhnyi S., Pavlostathis S., Rozzi A., Sanders W., Siegrist H., Vavilin V. The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). *Water Science and Technology* , **2002**, 45, 10 pp 65–73.

Biegler, L.T., Grossman, I.E., Westerberg, A.W. Systematic Methods of Chemical Process Design. Prentice Hall Intl. Series in the Phys. and Chem. Eng. Sci., **1997**.

Biegler, L.T. and Ignacio E. Grossmann, Retrospective on Optimization. *Computers and Chemical Engineering*, **2004**, 28, 1169-1192.

Bjorklund J.; Geber, U.; Rydberg, T. Emergy analysis of municipal wastewater treatment and generation of electricity by digestion of sewage sludge. *Resources, Conservation and Recycling*, **2001**, 31, 4, 293–316.

Bradley, B. R., Daigger, G.T., Rubin, R., Tchobanoglous, G. Evaluation of on site wastewater treatment technologies using sustainable development criteria. *Clean Techn. Environ Policy*, **2002**, 4, 79-86.

Brdjanovic, D., van Loosdrecht, M.C.M., Versteeg, P., Hooijmans, C.M., Alaerts, G.J. and Heijnen, J.J. Modelling COD, N and P removal in a full-scale WWTP Haarlem Waarderpolder. *Water Res.*, **2000**, 34, pp. 846–858.

Brooke A.; Kendrick D.; Meeraus A.. *GAMS- A User's Guide (Release 2.25)*. The Scientific Press. San Francisco, CA, **1992**.

C

Carstensen J., Vanrolleghem P.A., Ayesa E., Jeppsson U., Urrutikoetxea A. and Vanderhaegen B. Objective functions for wastewater treatment design and

operation. Report COST-682 Working Group Meeting on Identification and Control of Wastewater Treatment Processes. San Sebastian, Spain, September 20-23 1994. pp. 5. **1994**.

Cooper, P. F. Historical aspects of wastewater treatment. Decentralised Sanitation and Reuse: Concepts, Systems and Implementation. Edited by P. Lens, G. Zeeman and G. Lettinga. IWA Publishing. London, 11-38. **2001**.

Copp J. *The COST Simulation Benchmark: Description and Simulator Manual*. Office for Official Publications of the European Community, Luxembourg, **2002**.

D

Dantzig, G. B. *Linear Programming and Extensions*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, **1963**.

Demey D, Vanderhaegen B, Vanhooren H, Liessens J, Van Eyck L., Hopkins L, Vanrolleghem, P.A. Validation and implementation of model based control strategies at an industrial wastewater treatment plant. *Wat Sci Tech*. **2001**, 44 (2) 145.

Drud A.S. *CONOPT: A system for large scale non-linear optimization, reference manual for CONOPT subroutine library*. ARKI Consulting and Development A/S, Bagsvaerd, Denmark, **1996**.

Duran, M.A.; Grossmann, I.E. An outer-approximation Algorithm for a Class of Mixed-Integer Nonlinear Program, *Math Programming*, 36, 307-359. **1986**.

E

Ekama, G. A., Barnard, J. L., Günthert, F. W., Krebs, P., McCrquodale, J. A., Parker, D. S. e Wahlberg, E. J. Secondary settling tanks: Theory, modelling, design and operation. Technical Report 6, IAWQ - International Association on Water Quality, 1997.

Espírito Santo, I. A. C. P.; Fernandes, E. M. G. P.; Araújo, M. M. and Ferreira, E. C. NEOS Server Usage in Wastewater Treatment Cost Minimization. *Lecture Notes in Computer Science- Computational Science and Its Applications*, Springer-Verlag, **2005a**, Vol. 3483, 632.

Espírito Santo, I. A. C. P.; Fernandes, E. M. G. P.; Araújo, M. M. and Ferreira, E. C. Biological Process Optimal Design in a Wastewater Treatment Plant. *Proceedings of the 6th. World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization. Rio de Janeiro, Brasil, 30 May – 3 June, 2005b*.

F

Floudas, C.A.; *Nonlinear and Mixed-Integer Optimization. Fundamentals and Applications*. New York, Oxford, Oxford University Press, **1995**.

G

- Gernaey, Krist V., van Loosdrecht, Mark C. M., Henze, Mogens, Lind, Morten and Jørgensen, Sten B. Activated sludge wastewater treatment plant modelling and simulation: state of the art. *Environmental Modelling & Software*, **2004**, 19, 9, 763-783.
- Gernaey, K.V. and Jørgensen, S.B. Benchmarking combined biological phosphorus and nitrogen removal wastewater treatment processes. *Control Eng. Pract.*, **2004**, 12, 357-373.
- Gernaey K, Mussati M, Yuan Z, Nielsen M, Jørgensen S.B. Control strategy evaluation for combined N and P removal using a benchmark wastewater treatment plant. 15th Triennial World Congress of International Federation of Automatic Control-IFAC, Barcelona. . **2002**.
- Gill, P. E., Murray, W. y Saunders, M. A. MINOS 5.5 User's Guide, Report SOL 83-20R, Department of Operations Research, Stanford University, Stanford, CA, Revised **1998**.
- Gill, P. E., Murray, W. y Saunders, M. A. SNOPT: An SQP algorithm for large-scale constrained optimization, *SIAM J. Optim.*, 12. **2002**, pp. 979-1006.
- Gill, P. E., Murray, W. y Saunders, M. A. SNOPT: An SQP algorithm for large-scale constrained optimization, *SIAM Rev.*, 47, **2005**, pp. 99-131.
- Gillot, S.; De Clercq, B.; Defour, D.; Simoens, F.; Gernaey, K. and Vanrolleghem, P.A. Optimization of wastewater treatment plant design and operation using simulation and cost analysis. *72nd Annual WEF Conference and Exposition*. New Orleans, USA, **1999a**
- Gillot, S.; Vermeire, P.; Jacquet, P.; Grootaerd, H.; Derycke, D.; Simoens, F. and Vanrolleghem, P.A. Integration of wastewater treatment plant investment and operating costs for scenario analysis using simulation. *In Proceedings 13th Forum Applied Biotechnology. Med. Fac. Landbouww. Univ. Gent, Gent, Belgium. 22-23 September, 1999b*. 64/5a, 13.
- Grijpspeerdt, K.; Vanrollegham, P. and Verstraete, W. Selection of one-dimensional sedimentation: Models for on-line use. *Water Science and Technology* **1995**, 31(2), 193.
- Grossmann, IE; Caballero, JA; Yeomans, H. Mathematical Programming Approaches to the Synthesis of Chemical Process Systems. *Korean Journal of Chemical Engineering*, **1999**, 16,4, 407-426.
- Grossmann, IE; Caballero, JA; Yeomans, H. Advances in mathematical programming for the synthesis of process systems. *Latin American Applied Research*, **2000**, 30(4), pp. 263 - 284

Grossmann, I.E. and L.T. Biegler. Future Perspective on Optimization. *Computers and Chemical Engineering*, **2004**, 28, 1193-1218.

Gujer, W.; Henze, M.; Mino, T. and van Loosdrecht, M. Activated Sludge Model No. 3. *Water Science and Technology* **1999**, 39, 183.

Gutierrez, G., Vega, P. (2002). Process Synthesis applied to Activated Sludge Processes: A framework with MINLP optimisation models. *15th IFAC World Congress*. Barcelona, Spain.

Grijpspeerdt, K.; Vanrollegham, P. and Verstraete, W. Selection of one-dimensional sedimentation: Models for on-line use. *Water Science and Technology* 1995, 31(2), 193.

H

Harremös P. Integrated urban drainage, status and perspectives. *Wat. Sci. and Tech*, **2002**, 45, 3, 1-10.

Hellström, D., Jeppsson, U. and Kärrman, E. A framework for systems analysis of sustainable urban water management. *Environmental Impact Assessment Review*, 2000, 20, 3, pp. 311-322.

Henze, M., Grady, C. Jr, Gujer, W., Marais, G., Matsuo, T. (1987) Activated Sludge Model No. 1. *IAWQ Scientific and Technical Report No. 1*. **1987**. London.

Henze M, Gujer W, Mino T, Matsuo T, Wentzel M, Marais G. Activated sludge model No 2. IWA Scientific and Technical Report No 3, London. **1995**.

Henze, M., W. Gujer, T. Mino, T. Matsuo, M. C. Wentzel, G. V. R. Marais, and M. C. M. Van Loosdrecht. Activated Sludge Model No.2d, ASM2d. *Water Sci. Technol.* **1999**, 39 (1), 165-182.

Hernandez Muñoz, A. Depuración de Aguas Residuales. Servicio de Publicaciones de la Escuela de Ingenieros de Caminos de Madrid. Colegio de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos. 3ª ed., **1996**.

I

Ingildsen, P. and G. Olsson. Get more out of your wastewater treatment plant : complexity made simple. Danfoss Analytical A/S. **2001**.

K

Kabouris, J. Modeling, Instrumentation, Automation and Optimization of WWT Facilities. *Wat Env Res* **1999**, 71(5) 729-736.

Knobelsdorf, M. Juliana. Eliminación biológica de nutrientes en un ARU de baja carga orgánica mediante el proceso VIP. Tesis doctoral. Universidad Politécnica de Cataluña, España. **2005**.

Koch, G., Kuhni, M., Gujer, W. and Siegrist, H.. Calibration and validation of activated sludge model no. 3 for Swiss municipal wastewater. *Water Res.* **34**, 2000, pp. 3580–3590.

L

Ladiges G; Bertram N; Otterpohl R. Concept development for the optimisation of the Hamburg WWT plants; *Wat Sci Tech.* **2000**, 41 89-96.

Lata K.; Kansal A.; Balakrishnan M.; Rajeshwari K; Kishore, V. Assessment of biomethanation potential of selected industrial organic effluents in India. *Resources, Conservation and Recycling*, **2002**, 35, 3, 147-161.

Linke, P., Kokossis, A. Advanced Process Systems Design Technology for Pollution Prevention and Waste Treatment. *Advances in Environmental Research* **2004**, 8 (2), 229.

Lübken, M. Wichern, M. . Rosenwinkel, K. – H Wilderer, P. A. Efficiency of different mathematical models for simulating enhanced biological phosphorus removal in activated sludge systems. *Environmental Informatics Archives*, **2003**, Volume 1, 339-347.

Lukasse, L. J. S.; Keesman, K. J.; Klapwijk, A.; Van Straten G. Optimal control of N-removal in ASPs, *Wat. Sci. Tech.*, **1998**, 38, 3, pp. 255-262.

Lundin, M.; Molander, S.; Morrison, G.M. A set of indicators for the assesmet of temporal variations in sustainability of sanitary systems, *Wat. Sci. Tech.*, **1999**, 39, 5, pp. 235-242.

Lundin, M. and Morrison, G.M. A life cycle based procedure for development of environmental sustainability indicators for urban water systems. *Urban Water*, **2002**, 4, 145-152.

M

Magbanua, B.S. Jr.; Dey, A.; Monwuba, C.K.; Hillabrand, J.L.; Barnes, O. Simulation of Simultaneous Nitrification-Denitrification using Activated Sludge Model No. 1. *Environmental Modelling and Simulation*. **2007**, Proceeding (579-020).

Mels, A R, Nieuwenhuijzen, A F, Graaf, J H J M van der, Klapwijk B, Koning, J de and Rulkens, W H Sustainability Criteria as a Tool in the Development of New SewageTreatment Methods, *Wat. Sci. & Tech.*, **1999**, 39, 5, 243-250.

Metcalf and Eddy. Wastewater Engineering: Collection, Treatment, Disposal. Mc Graw-Hill, Inc. **1972**.

Metcalf and Eddy, Inc. Ingeniería de Aguas Residuales: Tratamiento, vertido y reutilización. McGraw-Hill. **1995**.

- Murnleitner, E., Kuba, T., van Loosdrecht, M.C.M. and Heijnen, J.J. An integrated metabolic model for the aerobic and denitrifying biological phosphorus removal process, *Biotechnol. Bioeng.* **1997**,54(5):434-50.
- Murtagh, B. A. y Saunders, M. A. Large-scale linearly constrained optimization, *Mathematical Programming*, 14. **1978**, pp. 41-72.
- Murtagh, B. A. y Saunders, M. A. A projected Lagrangian algorithm and its implementation for sparse nonlinear constraints, *Mathematic Programming Study*, 16. **1982**, Algorithms for Constrained Minimization of Smooth Nonlinear Function, pp. 84-117.
- Mussati M. Modelado de reactores anaeróbicos de biofilm. Su aplicación a sistemas de tratamiento de efluentes líquidos. Tesis doctoral. Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe. **2000**.
- Mussati M., Aguirre P., Fuentes M. and Scenna N. Model parameter estimation for anaerobic biofilm reactors. Submitted to *Biotechnology & Bioengineering*. John Wiley & Sons, N.Y. **2003**.
- Mussati M, Aguirre P, Scenna N. Modelado del proceso de digestión anaeróbica en reactores simples; Modelado, simulación y optimización de procesos químicos, Cap. 18; Edición UTN (2da). **1999**. www.modeloingenieria.edu.ar.
- Mussati, M, Aguirre, P, Scenna, N; Modelling of Real Biological Reactors for the Treatment of Complex Substrates. Dynamic Simulation. *Computers and Chemical Engineering*, **1998**, 22, Suppl., pp. S723-726.
- Mussati M., Aguirre P., Sotto O., Zanuttini M. Desarrollo de procesos anaeróbicos para el tratamiento de efluentes papeleros. Iberoamerican Congress on Pulp and Paper Research (CIADICYP 2000), Misiones, Argentina. **2000**.
- Mussati M., Fuentes M., Scenna N., Aguirre P. Optimizing load policy in anaerobic biofilm reactors for wastewater treatment. *Latin American Applied Research*; 2003, 33, 211-215 (in press).
- Mussati, M; Gernaey, K; Gani, R. and Bay Jørgensen, S. Performance analysis of a denitrifying wastewater treatment plant. *Clean Technologies & Environmental Policies*, **2002**, 4 171-182.
- Mussati, M, Gernaey, K, Gani, R, and Bay Jørgensen, S.(2002). Computer Aided Model Analysis and Dynamic Simulation of Wastewater Treatment Plant. *Clean Technologies & Environmental Policies*, 4 100-114.
- Mussati, M; Gernaey, K; Gani, R. and Bay Jørgensen, S. Performance analysis of a denitrifying wastewater treatment plant. *Clean Technologies & Environmental Policies*, **2002**, 4, 171.

Mussati, M. Martorina, L. Aguirre, P.Scenna, N; Dynamic Modelling of Anarobic Biofilm Reactors for the Treatment of Variable Food Industry Effluents; 2do Congreso de Ingeniería de Procesos del Mercosur ENPROMER 99; Brasil; **1999**.

Mussati, M.C., Mussati, S.F., Alasino, N., Aguirre, P. and Scenna, N. Optimal Synthesis of Activated Sludge Wastewater Treatment Plants for Nitrogen Removal. 2nd Mercosur Congress on Chemical Engineering and 4th Mercosur Congress on Process Systems Engineering - *ENPROMER 2005, Río de Janeiro, Brasil, Agosto 2005*, pp 14-18.

N

Nicolella, C., van Loosdrecht, M.C.M., Heijnen J.J. Wastewater treatment with particulate biofilm reactors. *Journal of Biotechnology*, 2000, 80, 1, pp. 1-33(33).

O

Otterpohl R. Management practices of urban basins and sustainability of wastewater systems.-Options for alternative types of sewerage and treatment systems directed to improvement of the overall performance; *Wat. Sci. & Tech*; **2002**, 45 (3) 149.

Otterpohl R, Grottker M, Lange J. Sustainable water and waste management in urban area. *Wat Sci Tech*. **1997**, 35 (9) 121.

Olsson, G.; Aspegren, H.; Nielsen, M.K. Operation and control of wastewater treatment-a Scandinavian perspective over 20 years: *Wat. Sci. & Tech.*; **1998**, 37, 12, pp. 1-13.

Olsson, G., Nielsen, M., Yuan, Z., Lynggaard-Jensen,A., Steyer, J-P. Instrumentation, Control and Automation in Wastewater Systems. IWA Publishing. **2005**. ISBN: 9781900222839.

P

Peng, Z.; Qi, Z. Simultaneous nitrification and denitrification in activated sludge system under low oxygen concentration. *Frontiers of Environmental Science & Engineering in China*, **2007**, 1, 1 : 49–52.

R

Rieger L, Koch G, Kuhni M, Gujer W, Siegrist H. The EAWAG Bio-P module for activated sludge model No. 3. *Water Res*. **2001**, 35(16):3887-903.

Rigopoulos, S., Linke, P. Systematic Development of Optimal Activated Sludge Process Designs. *Computers & Chemical Engineering* **2002**, 26 (4-5), 585.

Robinson, S. M. A quadratically convergent algorithm for general nonlinear programming problems, *Mathematical Programming* 3. **1972**, pp. 145-156.

S

Sarioglu M, Insel G, Artan N, Orhon D. Modelling of long-term simultaneous nitrification and denitrification (SNDN) performance of a pilot scale membrane bioreactor. *Water Sci Technol.* **2008**; 57(11):1825-33.

T

Takács, I.; Patry, G. and Nolasco, D. A Dynamic Model of the Clarification-Thickening Process. *Water Research* **1991**, 25, 1263.

V

Van Haandel, A.C.; Ekama, G.A.; Marais, G.V.R. The Activated Sludge Process--3. Single Sludge Denitrification. *Water Research* **1981**, 15 (10), 1135.

Vanrolleghem, P.A. and Gillot, S. Robustness and economic measures as control benchmark performance criteria. *Water Science and Technology* **2002**, 45(4-5), 117.

Vanrolleghem, P.A.; Jeppsson, U.; Carstensen, J.; Carlsson, B. and Olsson G. Integration of WWT plant design and operation - A systematic approach using cost functions. *Water Science and Technology* **1996**, 34(3-4), 159.

W

Westerberg, A.W. A Retrospective on Design and Process Synthesis. *Comp. Chem. Engin*, **2004**, 28, 447-458.

Wichern, M.; Obenaus, F.; Wulf P.; Rosenwinkel, K.-H. Modelling of full-scale wastewater treatment plants with different treatment processes using the Activated Sludge Model N° 3. *Water Sci. Technol.*, **2001**, 44, 1, pp 49–56.

Wichern, M.; Obenaus, F.; Wulf P.; Rosenwinkel, K.-H. Efficiency of the Activated Sludge Model N° 3 for German wastewater on six different WWTPs. *Water Sci. Technol.*, **2003**, 47, 11, pp 211-218.

Wolfe, P. The reduced-gradient method, unpublished manuscript, RAND Corporation, **1962**.

Y

Yeomans, H. and I.E. Grossmann. A Systematic Modeling Framework for Superstructure Optimization in Process Synthesis. *Computers and Chemical Engineering*, **1999**, 23, 709-731.

Z

Zakkour P; Gaterell M; Griffin P; Gochin R; Lester J. Anaerobic treatment of domestic wastewater in temperate climates: treatment plant modelling with economic considerations. *Wat. Res.*, **2001**, 35, 17, 4137-4149.