



**UNIVERSIDAD MICHOACANA
DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO**



FACULTAD DE INGENIERÍA CIVIL

**PROGRAMA DE MAESTRÍA EN INGENIERÍA DE LOS RECURSOS
HÍDRICOS**

**ANÁLISIS DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN DE UNA PLANTA
DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES PARA DETERMINAR
LA INFLUENCIA EN LA PRODUCCIÓN DE BIOPLÁSTICOS**

TESIS

**PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN INGENIERÍA DE LOS
RECURSOS HÍDRICOS**

PRESENTA

ING. ADRIANA FLORES RAMÍREZ

ASESOR

DR. JULIO CÉSAR ORANTES ÁVALOS

MORELIA, MICHOACÁN; ENERO DE 2021.

Dedico este trabajo a mi familia y amigos quienes han sido parte fundamental para llevar a cabo este trabajo, ellos han sido mis consejeros y guías durante el desarrollo de este trabajo.

Agradecimientos

Gracias a la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo por permitirme formar parte del posgrado en Ingeniería de los Recursos Hídricos y por abrirme las puertas de su seno científico para poder realizar este trabajo.

Gracias a mis padres por ser las primeras personas a impulsarme a seguir trabajando para lograr todas y cada una de las metas que me propongo en la vida, gracias por creer siempre en mí, gracias por acompañarme en las noches de desvelo mientras trabajaba y sobre todo muchas gracias por cada uno de sus consejos de vida.

Gracias a mis hermanos por hacer mis días amenos y memorables, son los que me inspiran a querer ser mejor profesionista y mejor persona cada día, sin ellos no sería lo mismo.

Gracias al Dr. Julio C. Orantes A. por ser mi asesor y profesor durante la maestría, le agradezco todos los conocimientos transmitidos y la oportunidad de llevar a cabo este trabajo.

Gracias a todos y cada uno de mis profesores que fueron parte fundamental en mi formación, gracias por compartir su sabiduría y por ayudarme a llegar al punto en el cual me encuentro, sin ustedes no hubiera sido posible.

Gracias a mis amigos M.C. María del Mar Navarro Farfán, Ing. Israel Alejandro García Ledesma, Ing. Sergio Eduardo Cázares, Ing. Daniel Rodríguez Licea y al Ing. Miguel Ángel Rodríguez Velázquez por compartir sus conocimientos y sobre todo muchos momentos inolvidables.

Gracias a los operadores de la Planta de tratamiento de agua residual por facilitarme la información necesaria para llevar a cabo este trabajo.

Finalmente, pero no menos importante, agradezco al OOAPAS por permitirme realizar mis prácticas profesionales en el área de proyectos del organismo.

Contenido

AGRADECIMIENTOS	II
LISTA DE FIGURAS	IV
LISTA DE TABLAS.....	V
RESUMEN.....	1
ABSTRACT	2
1. MARCO CONCEPTUAL	3
1.1. INTRODUCCIÓN.....	3
1.2. JUSTIFICACIÓN	6
1.3. HIPÓTESIS	7
1.4. OBJETIVOS	7
1.4.1. OBJETIVO GENERAL	7
1.4.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	7
2. ANTECEDENTES	8
3. METODOLOGÍA.....	28
4. RESULTADOS	64
5. CONCLUSIONES.....	76
6. REFERENCIAS	78
A N E X O S.....	81
A. DIAGRAMAS DE LA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA RESIDUAL	82
B. MATRIZ DEL MODELO BIOLÓGICO DE LODOS ACTIVADOS ASM3	87

Lista de Figuras

FIG. 2.1 ETAPAS DE PRODUCCIÓN DE POLIHIDROXIALCANOATOS.	8
FIG. 2.2 GRANULO DE PHA ACUMULADO INTRACELULARMENTE (GARCÍA ET AL., 2013).....	10
FIG. 2.3 RUTA DE SÍNTESIS DE PHA DE CADENA MEDIA EN PSEUDOMONAS (GARCÍA ET AL., 2013)	10
FIG. 2.4 ESTRUCTURA QUÍMICA GENERAL DE LOS POLIHIDROXIALCANOATOS.	11
FIG. 2.5 ESTRUCTURA QUÍMICA DE LOS MONÓMEROS QUE FORMAN PARTE DE LOS POLIHIDROXIALCANOATOS DE CADENA CORTA	12
FIG. 2.6 ESTRUCTURA QUÍMICA DE LOS MONÓMEROS DE LOS POLIHIDROXIALCANOATOS DE CADENA MEDIA.	12
FIG. 3.1 SOFTWARE PARA LA SIMULACIÓN DEL MODELO.	33
FIG. 3.2 INTERFAZ DEL SOFTWARE.....	34
FIG. 3.3 VARIABLES DE ENTRADA PARA LA MODELACIÓN.	35
FIG. 3.4 VISUALIZACIÓN DE RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN.	36
FIG. 3.5 FASES DEL PROTOCOLO STOWA PARA LA MODELACIÓN DE UNA PTAR (HULSBEEK ET AL., 2002)	37
FIG. 3.6 COMPARACIÓN DE LOS PROCESOS QUE SE LLEVAN A CABO EN LOS MODELOS ASM1 Y ASM3	39
FIG. 3.7 MATRIZ SIMPLIFICADA DEL MODELO DE LODOS ACTIVADOS.	42
FIG. 3.8 MODELO DE LODOS ACTIVADOS (ASM3)	43
FIG. 3.9 EXPRESIONES CINÉTICAS DEL MODELO ASM3.....	44
FIG. 3.10 VALORES TÍPICOS DE LOS PARÁMETROS CINÉTICOS DEL MODELO ASM3.....	45
FIG. 3.11 ESQUEMA DEL MODELO DE LA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA RESIDUAL	48
FIG. 3.12 VISTA GENERAL DEL INFLUENT ADVISOR DEL SOFTWARE GPS-X	54
FIG. 3.13 VARIABLES COMPUESTAS Y SU RELACIÓN CON LAS VARIABLES DE ESTADO (MANUAL GPS-X) ...	55
FIG. 3.14 VARIABLES COMPUESTAS Y SU RELACIÓN CON LAS VARIABLES DE ESTADO (MANUAL GPS-X) ...	57
FIG. 4.1 RESULTADOS DE LA MODELACIÓN PARA EL INFLUENTE DEL MODELO.	65
FIG. 4.2 RESULTADOS DE LA MODELACIÓN PARA EL EFLUENTE DEL MODELO.	65
FIG. 4.3 VISTA GENERAL DEL MODELO CON LOS VOLÚMENES DE LOS ELEMENTOS.	66
FIG. 4.4 COMPARATIVA DE PARÁMETROS FÍSICO-QUÍMICOS	69
FIG. 4.5 COMPARATIVA DE RESULTADOS DE LA PRIMERA VALIDACIÓN	70
FIG. 4.6 COMPARATIVA DE RESULTADOS DE LA SEGUNDA VALIDACIÓN	71
FIG. 4.7 BIOACUMULACIÓN EN CONDICIONES DE OPERACIÓN ACTUALES.....	72
FIG. 4.8 VARIACIÓN DE LA RELACIÓN F/M	73
FIG. 4.9 RELACIÓN F/M Y SU BIOACUMULACIÓN.....	75
FIG. A.1 ESQUEMA DE LA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES MUNICIPALES. (1/4)	83
FIG. A.2 ESQUEMA DE LA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES MUNICIPALES. (2/4)	84
FIG. A.3 ESQUEMA DE LA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES MUNICIPALES. (3/4)	85
FIG. A.4 ESQUEMA DE LA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES MUNICIPALES. (4/4)	86

Lista de Tablas

TABLA 2.1 PROPIEDADES FÍSICAS Y TÉRMICAS PARA ALGUNOS POLÍMEROS COMUNES (SHARMA & BAJAJ, 2015).....	13
TABLA 2.2 MODELOS BIOLÓGICOS DE TRATAMIENTO DE AGUA RESIDUAL	18
TABLA 3.1 PARÁMETROS ESTABLECIDOS EN LA NOM-001-SEMARNAT-1996	28
TABLA 3.2 PARÁMETROS DE LA NOM-001-SEMARNAT-1996	30
TABLA 3.3 PARÁMETROS DE LA NOM-001-SEMARNAT-1996	31
TABLA 3.4 SOFTWARES DE MODELACIÓN DE TRATAMIENTOS BIOLÓGICOS	32
TABLA 3.5 ELEMENTOS DEL TREN DE TRATAMIENTO UTILIZADO EN LA PTAR	46
TABLA 3.6 ELEMENTOS UTILIZADOS EN EL MODELO CREADO EN EL SOFTWARE GPS-X.....	47
TABLA 3.7 PRINCIPALES PARÁMETROS CINÉTICOS Y ESTEQUIOMÉTRICOS DEL MODELO. (GAO ET AL., 2018)	51
TABLA 3.8 VARIABLES DE ESTADO CORRESPONDIENTES A LA LIBRERÍA CARBONO-NITRÓGENO	52
TABLA 3.9 DQO, DBO Y SST VARIABLES COMPUESTAS (MANUAL GPS-X)	55
TABLA 3.10 PROTOCOLOS PARA CALIBRACIÓN DE MODELOS BIOLÓGICOS DE LODOS ACTIVADOS.	62
TABLA 4.1 VALORES COMPARATIVOS DEL MODELO.	66
TABLA 4.2 FRACCIONES ORGÁNICAS DE DQO	67
TABLA 4.3 VARIACIONES DE F/M VARIANDO EL Q_R	73
TABLA 4.4 VARIACIÓN DE LA RELACIÓN F/M MODIFICANDO EL Q_R Y EL Q_w	74
TABLA B.1 MATRIZ DEL MODELO BIOLÓGICO DE LODOS ACTIVADOS ASM3.....	88

RESUMEN

Los polihidroxialcanoatos (PHA) son biopolíesteres sintetizados intracelularmente por algunos microorganismos como reserva de carbono y energía. Una vez que estos son extraídos de la célula, presentan propiedades físicas muy similares a los plásticos derivados del petróleo, con la ventaja que son biodegradables. Estos en los últimos años se ha analizado como pueden ser producidos por medio de procesos biotecnológicos, entre ellos los reactores biológicos de las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR), con objeto de sustituir los plásticos sintéticos.

La principal desventaja de los PHA son los altos costos de producción, ya que generalmente estos procesos biotecnológicos se basan en la utilización de cultivos puros, incrementando los costos derivados del costo de la fuente de carbono, y del equipo y costos asociados necesario al control de la operación de dichos procesos.

La utilización de la materia orgánica presente en el agua residual, como materia prima para la producción de bioplásticos puede contribuir a reducir los costos de producción, ya que los microorganismos de los reactores biológicos de las PTAR son capaces de producir PHA. En este trabajo se analizan las condiciones bajo las que se han producido estos bioplásticos, así como el rendimiento de producción, para posteriormente buscar las condiciones óptimas de los parámetros de operación de las PTAR que permitan maximizar la acumulación de PHA en los microorganismos presentes en el reactor biológico de lodos activados.

Este análisis resulta importante ya que al mejorarse la producción de bioplásticos se podrían bajar costos, que permitirían escalar estos procesos y reducir la contaminación por plásticos al mismo tiempo que se remueven los contaminantes de las aguas residuales en las PTAR.

Palabras clave: Polihidroxialcanoatos, Biodegradables, Bioacumulación, Lodos Activados, Sustrato.

ABSTRACT

Polyhydroxyalkanoates (PHAs) are biopolyesters synthesized intracellularly by some microorganisms as carbon and energy reserves. Once these are removed from the cell, they have very similar physical properties to plastics derived from petroleum, with the advantage that they are biodegradable. These in recent years have been analyzed as they can be produced through biotechnological processes, including biological reactors of wastewater treatment plants (WWTP), in order to replace synthetic plastics.

The main disadvantage of PHAs is the high production costs, since generally these biotechnological processes are based on the use of pure cultures, increasing the costs derived from the cost of the carbon source, and the equipment and associated costs necessary to control the operation of these processes.

The use of organic matter present in wastewater as a raw material for the production of bioplastics can help reduce production costs, since the microorganisms in the biological reactors of the WWTP are capable of producing PHA. In this work, the conditions under which these bioplastics have been produced are analyzed, as well as the production yield, to later search for the optimal conditions of the operating parameters of the WWTP that allow maximizing the accumulation of PHA in the microorganisms present in the biological activated sludge reactor.

This analysis is important since by improving the production of bioplastics, costs could be lowered, which would allow these processes to be scaled up and reduce contamination by plastics while removing contaminants from wastewater in WWTP.

Key words: Polyhydroxyalkanoates, Biodegradable, Activated Sludge, Substrate.

1. MARCO CONCEPTUAL

1.1. INTRODUCCIÓN

Actualmente el ámbito ambiental es muy importante debido a los efectos que produce el cambio climático global generado por el hombre. Una de las principales causas de este cambio es la generación de residuos, uno de los residuos sólidos más común son los plásticos los cuales son considerados como no biodegradables por el gran tiempo que toman en degradarse en el medio. Estos plásticos después de ser utilizados generalmente terminan en tiraderos, generando la contaminación de los acuíferos subterráneos por la infiltración de aditivos tóxicos. Por lo cual ha surgido la necesidad de buscar nuevos métodos y materiales biodegradables (proceso biológico mediante el cual un producto o una sustancia es consumido por microorganismos transformándolo en elementos químicos naturales, reintegrándose al ciclo natural de carbono que ha sustentado la vida durante años) cuya materia sea renovable y no tengan impacto en el ambiente.

En años recientes se ha estudiado la producción de plásticos biodegradables producidos mediante cultivos puros (un solo de grupo de microorganismos son los encargados de la bioacumulación), los cultivos puros son aquellos en los cuales solo se encuentra presente un grupo de microorganismos, más recientemente se ha analizado la producción de bioplásticos a partir de cultivos mixtos, en estos hay más de un grupo de microorganismos presentes. Un ejemplo de cultivo mixto son los tratamientos biológicos que se realizan en las plantas de tratamiento de agua residual, estas aguas residuales deben de ser tratadas antes de ser devueltas a los cuerpos de agua naturales. El tratamiento de las aguas residuales produce la generación de biomasa, la cual puede ser utilizada para la generación de los bioplásticos, con estos se podría reducir el uso de plásticos comunes los cuales necesitan del sol, el agua y el viento para degradarse, este proceso lleva cientos de años para completarse, incluso una vez degradado daña a la naturaleza.

Para la degradación de los bio-plásticos se debe de tener un entorno de compostaje, esto quiere decir que existan microbios, agua y aire, esto les permite degradarse

más rápidamente, estos sirven de alimento a organismos vivos, lo cual permite la biodegradación.

Los bio-plásticos son inusuales por su elevado costo. Es necesario optimizar la producción de los bio-plásticos para reducir sus costos de producción. Para lograr esta optimización es necesario llevar a cabo una simulación para mejorar las propiedades. La producción de estos contribuirá a la disminución de la huella ecológica.

Asimismo, debemos considerar que estos son una buena opción para reducir los plásticos derivados del petróleo, un factor importante de estos es que el petróleo es insuficiente y es de costo elevado, ahora la tendencia global es la utilización de materiales amigables y de fuentes renovables y sostenibles.

Los polihidroxiclcanoatos (PHA) son los candidatos ideales para sustituir a los polímeros sintéticos. Estos son poliésteres de reserva producidos por bacterias, las cuales los sintetizan en varias formas químicas entre las cuales el polihidroxibutirato (PHB) es el poliéster de cadena más corta en esa familia. En dependencia de la longitud de la cadena lateral de sus unidades monoméricas (una propiedad que puede ser ajustada modificando la composición del medio de cultivo o manipulando genéticamente a la bacteria productora), se pueden obtener PHA de diferentes puntos de fusión, cristalización, flexibilidad, resistencia a la tracción, biocompatibilidad y velocidad de biodegradación.

El alto costo de producción de los PHA puede ser disminuido mediante el mejoramiento de los procesos de fermentación y separación, mediante el desarrollo de cepas más eficientes y utilizando una fuente de carbono más barata. En general en la producción de estos biopolímeros, alrededor del 40% del costo total de producción corresponde a la materia prima (Choi y Lee, 1997).

El uso de cultivos donde la biomasa es un consorcio de microorganismos, como los lodos activados de plantas de tratamiento, se ha propuesto recientemente. Esto reduce el costo de la materia prima y por lo tanto del proceso en general, y además

representa un valor agregado al poder obtener un producto de alto valor a partir de desechos.

1.2. JUSTIFICACIÓN

Actualmente los estudios ambientales han tomado mucha fuerza por los efectos que ha provocado el cambio climático generado por la contaminación provocada por el hombre. Uno de los principales contaminantes de nuestro planeta son los materiales plásticos, estos materiales juegan un papel importante en nuestra vida cotidiana, se producen miles de toneladas de plásticos de origen petroquímico al año a nivel mundial. Sin embargo, sus características de durabilidad y resistencia a la degradación que explican su éxito comercial y de aplicación hacen que la mayoría de estos polímeros plásticos sintéticos resistan los ecosistemas durante años, y terminan siendo una amenaza ecológica ya que afectan a los organismos. El reemplazo de estos plásticos no biodegradables derivados del petróleo con materiales biológicos alternativos que tienen propiedades similares y que son más fáciles de degradar después de cumplir con su propósito, se ha convertido en una prioridad industrial, social y ambiental.

El uso de los biopolímeros es una alternativa amigable con el medioambiente ya que permite la reducción de los gases del efecto invernadero y reducción de desechos con lo cual se reduce la huella ecológica en el planeta, también contribuyen en la innovación de la biotecnología. La producción de PHA de cultivo mixto puede usar el contenido orgánico en aguas residuales como materia prima; la producción puede entonces integrarse con procesos de tratamiento de aguas residuales. Esto significa que los PHA de cultivo mixto se producen como un subproducto de los servicios en el tratamiento de las aguas residuales.

Análisis recientes han demostrado que los altos porcentajes de PHA en la producción de biomasa aumentan las eficiencias de purificación durante el tratamiento de las aguas.

1.3. HIPÓTESIS

El incremento en la CO permitirá una mayor producción de polihidroxialcanoatos (PHA) en la biomasa de un reactor de lodos activados con limitación de componentes esenciales de crecimiento como el fósforo, nitrógeno, azufre, entre otros, en presencia de un exceso de fuente de carbono en una planta de tratamiento de aguas residuales.

1.4. OBJETIVOS

1.4.1. OBJETIVO GENERAL

Analizar la influencia de la carga orgánica de operación de un reactor de lodos activados en la producción de polihidroxialcanoatos (PHA) en una planta de tratamiento de aguas residuales (PTAR) mediante la simulación.

1.4.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Generar el modelo digital de simulación de la PTAR que permita simular la producción de PHA.
- Calibrar el modelo digital, con base en datos de operación de la PTAR.
- Simular la operación de la PTAR, bajo diferentes condiciones de carga orgánica, en carencia de otros nutrientes, para analizar la producción de PHA.

2. ANTECEDENTES

2.1 Producción de PHA

Los polihidroxicanoatos son producidos generalmente en tres etapas: a) Fermentación, b) Extracción o recuperación y c) Purificación. En el proceso de fermentación se produce el crecimiento de la biomasa y se sintetiza y acumula el polímero, estas etapas se encuentran representadas en la Fig. 2.1 Etapas de producción de polihidroxicanoatos. Posteriormente, se extrae y recupera el polímero de las células, y finalmente se lleva a cabo la purificación del mismo. Existen diversas bacterias capaces de sintetizar y acumular estos biopolímeros, por ello numerosas investigaciones se han centrado en estudiar los procesos y sistemas de cultivo de éstas, y las influencias de diversos factores tales como la temperatura óptima, pH, sustrato y medio de crecimiento (Bugnicourt *et al.*, 2014), con el fin de aumentar los rendimientos en el proceso de fermentación. La estrategia de alimentación es muy importante para obtener una alta densidad celular y una alta producción de PHA.

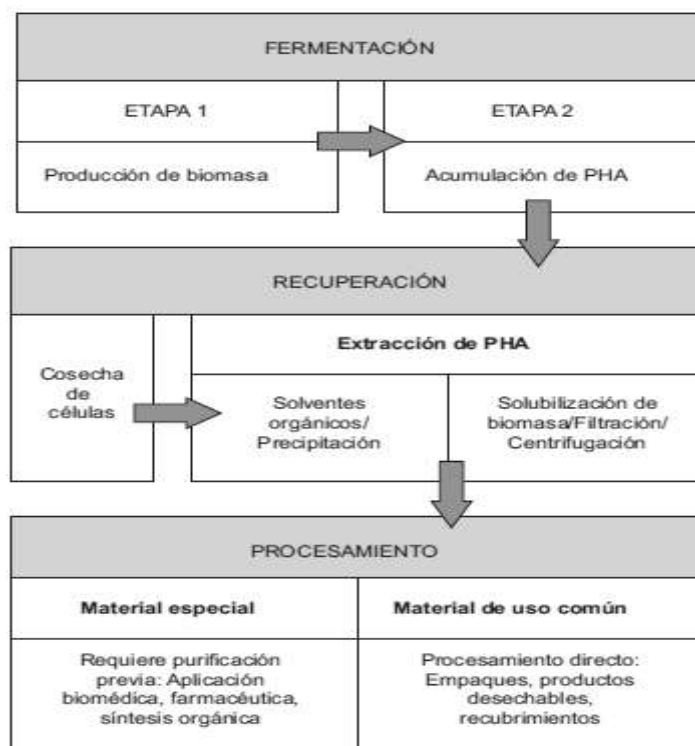


Fig. 2.1 Etapas de producción de polihidroxicanoatos.

El uso de materia prima renovable para la creación de plásticos biodegradables como: polihidroxialcanoatos (PHA) y poli-3-hidroxibutirato bacteriano (PHB), ha generado gran interés de investigación considerando la naturaleza de los plásticos derivados del petróleo, por la disminución de las reservas de combustibles fósiles y las emisiones de los gases de efecto invernadero (Sharma y Bajaj, 2015).

Los polihidroxialcanoatos (PHA) son polímeros biodegradables que pueden ser producidos de materia prima renovable. Los PHA con respecto a otros bioplásticos aún se encuentran limitados en el mercado por su elevado costo comercial. Para desarrollar procesos más efectivos de producción que reduzcan el costo, generalmente se lleva a cabo un enfoque multinivel que combina un cultivo microbiano innovador, más barato y más efectivo con metodologías de extracción y purificación seguras y baratas. (Righi *et al.*, 2017) los grados de extracción y purificación dependerá del uso que se les dará a estos biopolímeros, en el caso de uso industrial se requerirá de un nivel de purificación bajo en cambio si se requieren para la industria medica el nivel de purificación deberá de ser muy alto.

Los polihidroxialcanoatos son poliésteres producidos por microbios procarioticos como materiales de almacenamiento intracelular como se puede visualizar en la Fig. 2.2 Granulo de PHA acumulado intracelularmente (García *et al.*, 2013), que pueden extraerse y luego formularse y procesarse para la producción de plástico. Dependiendo de la longitud de la cadena, los PHA podrían ser poliésteres termoplásticos, elastómeros o incluso resinas adhesivas compuestas por varios ácidos R-hidroxialcanoicos que pueden ser producidos por numerosos microorganismos. Alternativamente, el PHA acumulado en la biomasa podría usarse para mejorar la producción de ácidos grasos volátiles, hidrogeno y/o metano en los procesos de digestión anaeróbica (Rodriguez-Perez *et al.*, 2018).

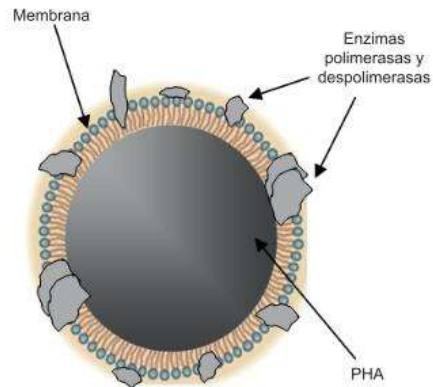


Fig. 2.2 Granulo de PHA acumulado intracelularmente (García et al., 2013)

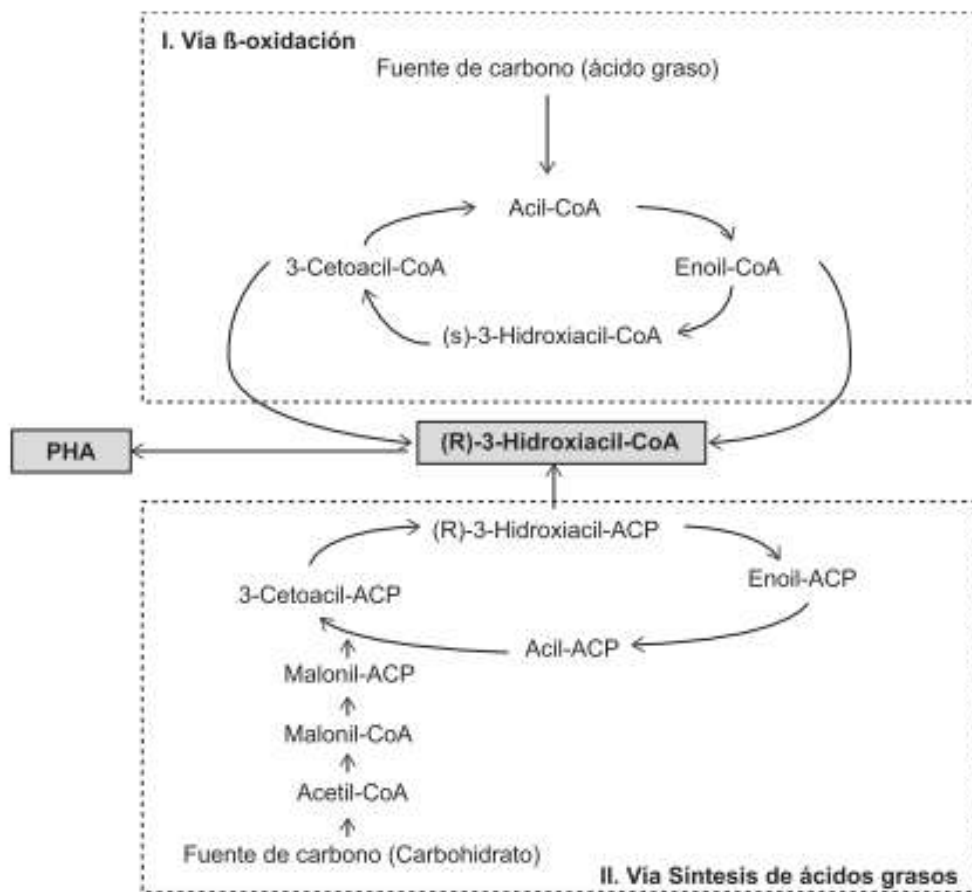


Fig. 2.3 Ruta de síntesis de PHA de cadena media en *Pseudomonas* (García et al., 2013)

En la Fig. 2.3 Ruta de síntesis de PHA de cadena media en *Pseudomonas* (García et al., 2013) Se puede observar la ruta de síntesis de polihidroxialcanoatos, estas

rutas son variadas, dependiendo del método en el cual se estén produciendo estos biopolímeros: aerobia o anaerobiamente.

Se han descrito una gran variedad de diversas composiciones monoméricas de PHA, así como sus perspectivas para aplicaciones futuras en las cuales se requiere de una alta biodegradabilidad o biocompatibilidad. (Chanprateep, 2010). La bioconversión de los PHA en células microbianas se ve afectada tanto por los entornos de crecimiento como por los sistemas de alimentación. La fuente de carbono del sustrato es de suma importancia para la producción de PHA en los diversos entornos de crecimiento. (Cha *et al.*, 2016). Los tipos de PHA se definen por la longitud de la cadena de carbono de repetición monómero unido a la molécula 3-hidroxialcanoato, como corto (C3 – C5), medio (C6 – C14) y largo (C15-más). El tipo de cadena dependerá del microorganismo que esté realizando la acumulación de los PHAs así como del sustrato utilizado (Burniol-figols, Varrone, Balzer, et al., 2018).

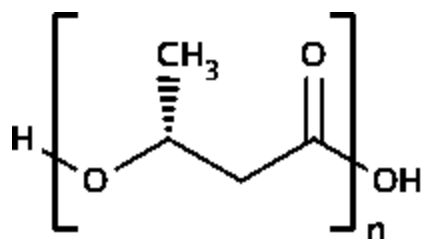


Fig. 2.4 Estructura química general de los polihidroxialcanoatos.

Algunos ejemplos de polihidroxialcanoatos son homopolímeros poli(3-hidroxibutirato) P(3HB), poli (3-hidroxivalerato) P(3HV), y poli (4-hidroxibutirato) P(4-HB)(Bugnicourt *et al.*, 2014), obtenidos mediante la polimerización de los monómeros 3HB, 3HV y 4HV respectivamente, en la Fig. 2.5 Estructura química de los monómeros que forman parte de los polihidroxialcanoatos de cadena corta se muestran claramente las diferentes estructuras químicas.

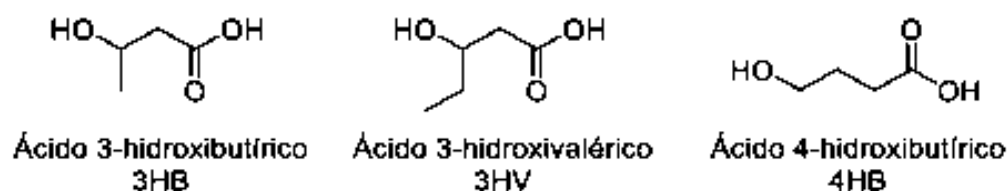


Fig. 2.5 Estructura química de los monómeros que forman parte de los polihidroxicanoatos de cadena corta

Los homopolímeros poli(3-hidroxihexanoato) P(3HHx), y poli(3-hidroxi octanoato) P(3HO), cuyas unidades monoméricas se muestran en la Fig. 2.6 Estructura química de los monómeros de los polihidroxicanoatos de cadena media., son ejemplos de PHAs de cadena media.

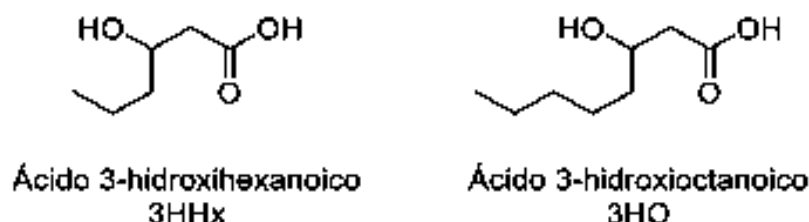


Fig. 2.6 Estructura química de los monómeros de los polihidroxicanoatos de cadena media.

Las propiedades físicas de los bio-plásticos dependerá de su composición monomérica, desde que estos biopolímeros fueron descubiertos por primera vez se refieren a ellos como compuestos lípidos y son poliésteres insolubles en agua, la mayoría de estos polímeros son parcialmente cristalinos y sus propiedades térmicas y mecánicas generalmente se representan en términos de la temperatura de transición (T_g) o de la temperatura de fusión (T_m) (Burniol-figols et al., 2018)

Los polímeros de cada corta son comúnmente polímeros termoplásticos, esto quiere decir que a temperaturas relativamente altas se vuelve elástico o deformable, se derrite cuando se calienta y se pone rígido en un estado de transición vítrea cuando se enfría lo suficiente, sus propiedades van cambiando gradualmente si se funden y molden varias veces ya que sus enlaces se van debilitando. En cuanto a los polímeros de cadena media son llamados elastómeros (Guerra-Blanco et al., 2018), son altamente amorfos con una temperatura de transición de -62^a -26 °C, y una temperatura de fusión de 42 a 58 °C. Los elastómeros suelen ser polímeros

termoestables, pero también pueden ser termoplásticos, su elasticidad proviene de la habilidad de las cadenas para cambiar su posición por sí mismas y así distribuir una tensión aplicada(Valero-Valdivieso et al., 2013).

Tabla 2.1 Propiedades físicas y térmicas para algunos polímeros comunes (Sharma & Bajaj, 2015)

Propiedades	P(3 HB)	Polipropileno	Poli (etileno tereftalato)	Nylon-6,6
Temperatura de fusión (°C)	180	176	267	265
Temperatura de transición a cristal (°C)	4	-10	69	50
Cristalinidad (%)	60-80	50-70	30-50	40-60
Densidad (g/cm ³)	1.250	0.905	1.385	1.14
Módulo de Young (GPa)	3.5	1.7	2.9	2.8
Esfuerzo a tensión (MPa)	40	38	70	83
Extensión necesaria para rompimiento (%)	6	400	100	60

En la Tabla 2.1 Propiedades físicas y térmicas para algunos polímeros comunes (Sharma & Bajaj, 2015), se muestra una comparativa de las propiedades del polihidroxibutirato el cual es un bio-polímero y de plásticos derivados de los hidrocarburos como lo son el propileno, el polietileno y el nylon.

Una de las propiedades más importantes de los bio-polímeros es el peso molecular ya que puede determinar el uso que se le va a dar a los polímeros. La aplicación más conocida para los biopolímeros de cadena corta es la fabricación de botellas desechables de productos de limpieza como el champú, contenedores de productos alimenticios, bolsa y otros productos desechables como pañales, servilletas, rastrillos, etc.

Investigaciones indican que los polímeros de cadena media pueden ser utilizados para la elaboración de adhesivos, para cubiertas de quesos o para la fabricación de hule biodegradable, para pañales, guantes quirúrgicos, moldes, entre otros(García et al., 2013).

Investigaciones recientes se han enfocado en el desarrollo de procesos de producción rentables los cuales utilizan residuos y/o excedentes industriales de bajo

valor como sustrato. Estas tienen como objetivo mejorar la capacidad de acumulación de PHA para la producción de polímeros. (Moita Fidalgo et al., 2014)

Los lodos producidos durante el tratamiento de las aguas residuales pueden ser viables para la extracción de PHA mediante la optimización de varios parámetros como: temperatura y concentración de sólidos, generando una diversidad de PHA extraído de una materia prima que es fácil de obtener y con un costo mínimo. Asimismo, esto proporciona un medio sostenible para la gestión de los residuos. (Kumar et al., 2018)

Sin embargo, no es suficiente con las alternativas de materia prima de bajo costo, es necesario encontrar las condiciones óptimas para llevar a cabo la extracción máxima de PHA. Una de las opciones es la extracción mediante el uso de un solvente, este método no es muy amigable con el medio ambiente pero económicamente es factible. (Kumar et al., 2018)

En el caso de los PHB estos se pueden acumular bajo diferentes condiciones operativas, en un análisis se encontraron tres organismos que permiten su acumulación como: *Thauera*, *Dechloromonas* y *Combeibacter*, estas comunidades bacterianas de los lodos son significativamente diferentes durante el proceso de acumulación. Los lodos que son generados durante el tratamiento de las aguas residuales que contienen patógenos y contaminantes, es un producto que no se puede evitar y su producción va en aumento con el desarrollo de la urbanización, se ha estudiado la posibilidad de manipularlos químicamente para la producción de plásticos biodegradables de valor agregado por su contenido de bacterias endógenas.

El primer PHA identificado fue el polihidroxibutirato (PHB) del *Bacillus magneterium*. Este es considerado como un plástico ecológico y biocompatible con aplicaciones en medicina, farmacia e industria. Hasta hace un par de años la síntesis de PHB se ha basado en el uso de aislamientos microbianos y sustratos puros. Los PHB poseen el beneficio de tener una residencia corta en condiciones anaeróbicas, estudios han demostrado que la inclusión de fibras naturales acelera la degradación.

Ante el problema de la reducción de los costos de producción se incrementado el interés en la investigación de los cultivos mixtos como los lodos activados que han demostrado ser capaces de acumular PHB bajo condiciones de estado inestable que se generan de un régimen intermitente de alimentación. Esto es debido a que la biomasa es sometida a periodos sucesivos de disponibilidad de sustrato externo (periodo de fiesta) y posteriormente se encuentra sin disponibilidad externa de sustrato (periodo de hambre). En condiciones dinámicas, el crecimiento de la biomasa y el almacenamiento del polímero ocurren simultáneamente cuando hay un exceso de sustrato externo. Los últimos estudios se han centrado en el modelado y control de los procesos, los mecanismos de almacenamiento bacteriano y la caracterización de los polímeros.

La tasa de acumulación de reserva es más elevada que la tasa de crecimiento, debido a las condiciones de desbalance, si el sustrato se suministrara constantemente la tasa de crecimiento sería mayor que la de acumulación por la adaptación fisiológica de los microorganismos(Montiel-jarillo *et al.*, 2017).

Existen dos tipos de microorganismos que han demostrado ser capaces de almacenar PHAs en reactores de lodos activados: 1. Los organismos que acumulan polifosfato (PAO) y 2. Los organismos que acumulan glucógeno (GAO). Los que son capaces de acumular polifosfatos son los que han demostrado más capacidad para producir polímeros de almacenamiento (PHA). Los PAO y los GAO proliferan en sistemas en los que el sustrato está presente regularmente (Cech y Hartman, 1993) Los diferentes polímeros se forman para permitir que las células equilibren los equivalentes redox producidos y necesarios en la conversión del sustrato a PHA (Sato *et al.*, 1992).

Las relaciones estequiométricas de la absorción de acetato, el consumo de glucógeno y la producción de PHA son diferentes para PAO y GAO. El coeficiente de rendimiento YP/S depende del proceso y del sustrato utilizado. Para PAO y GAO, el YP/S basado en acetato como fuente de carbono está en un rango de 1.21 – 1.43 y 1.58 – 1.93 respectivamente (Liu *et al.*, 1994) diversos análisis han demostrado

que una variación en el pH puede hacer que se almacenen más PHAs (Smolders *et al.*, 1994).

Según Serafim el uso de los cultivos mixtos puede ayudar a reducir los costos de operación hasta en un 50%, en el caso de los sustratos sin costo alguno se puede reducir este costo hasta un 85%. Rhu estima que cerca del 50% del costo de producción de PHA es por el costo de extracción del polímero.

La producción de PHA en cultivos mixtos se puede reducir si se utilizan fuentes de desecho orgánico como sustrato, pero los residuos de carbohidratos no son un buen sustrato para la producción de PHA ya que son transformados en glucógeno. Sin embargo, pueden ser convertidos si son previamente pre fermentados en ácidos grasos volátiles (Moita Fidalgo *et al.*, 2014).

Los desechos que se han utilizado como fuente de alimento para los microorganismos que acumulan PHA son los de procesos de remolacha de azúcar, los residuos de los alimentos y los residuos domésticos son considerados como los sustratos más adecuados para la acumulación de PHAs (Nor Aini *et al.*, 1999).

La acumulación de PHA en los cultivos mixtos puede llegar a alcanzar más del 60% de su peso celular seco, pero sigue siendo bajo en comparación con los cultivos mixtos los cuales pueden llegar a alcanzar más del 80% de su peso celular seco (Marang *et al.*, 2014).

2.2 Biodegradación de los PHA

Se ha demostrado que la biodegradación de polihidroxialcanoatos en el medio ambiente está determinada por la estructura y las propiedades fisicoquímicas del polímero y por las condiciones climáticas locales, que influyen en el estado del ecosistema acuático. Estos son degradados naturalmente por microorganismos que proporcionan un amortiguamiento para el cambio climático. (Volova *et al.*, 2007)

Sin embargo, aún son escasos los estudios de los procesos de síntesis de PHA en los lodos activados, así como de las identidades filogenéticas de los microorganismos que acumulan los PHA. Por lo cual es de suma importancia establecer un proceso práctico para la producción de estos mediante lodos

activados para mejorar la producción de PHA a través de la optimización del proceso y, asimismo, controlar el rendimiento de los PHA manipulando las rutas metabólicas de los microorganismos. (Rodriguez-Perez et al., 2018).

Se han realizado diversos estudios ecológicos y taxonómicos sobre la diversidad de microorganismos degradadores de biopolímeros, en agua, suelo, composta en el medio ambiente y bajo condiciones controladas en el laboratorio. Las variables que se consideran en la biodegradabilidad son el tiempo, la temperatura y el clima. Hasta hace un par de años se habían aislado e identificado un total de 330 microorganismos de los cuales se clasificaron como sigue (García et al., 2013):

- 154 bacterias
- 77 estreptomicetos
- 99 hongos

La velocidad con la que se degradan los polímeros depende de factores como: el área superficial del polímero, la actividad microbiana, el pH, la temperatura, la humedad y la presencia de otros nutrientes(Huang et al., 2018).

En general los polihidroxialcanoatos pueden ser degradados a una velocidad moderada de 3 a 9 meses por los microorganismos(Volova et al., 2007).

2.3 Aplicaciones de los polihidroxialcanoatos

Los polihidroxialcanoatos poseen diferentes propiedades físicas y mecánicas así como características térmicas y elastómeras por lo cual pueden tener diferentes aplicaciones en la industria de empaques, medicina, farmacia, agricultura y alimentos (Gonzalez et al., 2013) las aplicaciones de estos biopolímeros dependerá del grado de purificación que tengan al momento de la extracción.

Generalmente los polihidroxialcanoatos de cadena corta cuando tienen un bajo nivel de purificación son utilizados en la agricultura (Kumar et al., 2018) para los envases de insecticidas o la elaboración de tuberías para la conducción del agua para la irrigación de los cultivos.

Por otra parte los polihidroxiclcanoatos de cada media son utilizados para la fabricación de hule(González *et al.*, 2013), el cual es utilizado para la elaboración de materiales que son difíciles de reciclar como lo pueden ser pañales, bandejas quirúrgicas entre otros.

2.4 Modelos de procesos biológicos para el tratamiento de aguas residuales

A través de los años se han desarrollado diversos modelos de lodos activados por la Asociación Internacional del agua IWA por sus siglas en inglés. Existen cuatro modelos de la IWA, el ASM1 y ASM3 son capaces de predecir la degradación de la materia orgánica, nitrificación y desnitrificación, el modelo ASM2 y ASM2d (una versión modificada del ASM2) incluyen la remoción biológica de fosforo.

A continuación, se presenta en la Tabla 2.2 Modelos biológicos de tratamiento de agua residual una comparación de las características de cada uno de los diversos modelos existentes.

Tabla 2.2 Modelos biológicos de tratamiento de agua residual

Modelo	ASM1	ASM3	ASM2d	Barker y Dold	ASM3 + P	TUD	UCTPHO+
Características							
Año de publicación.	1986	1998	1995	1997	2001	2004	2007
Tipo	C/N	C/N	C/N/P	C/N/P	C/N/P	C/N/P	C/N/P
Nitrificación	Si	Si	Si	Si	Si	Si	Si
Desnitrificación	Si	No	Si	Si	Si	Si	Si
Fermentación	No	No	Si	Si	No	Si	Si
Bio-P	No	No	Si	Si	Si	Si	Si
Ph limitaciones	Alk w	Alk lim	Alk lim	No	Alk lim	Alk lim	No
Precipitación P con Fe y Al	No	No	Si	No	No	No	No
No. Procesos	8	12	21	36	23	22	35
No. Variables de estado	13	13	19	19	17	18	16
Parámetros	24	42	78	67	78	92	59

2.4.1 Proceso biológico de tratamiento del agua residual

Durante mucho tiempo los procesos biológicos han sido muy importantes para el tratamiento de las aguas residuales urbanas, ya que son capaces de eliminar una gran cantidad de contaminantes orgánicos e inorgánicos, comparados con otros procesos físico-químicos de tratamiento de aguas residuales son más baratos ya que no necesitan valores extremos de temperatura y pH(Yeber, 1999). Al degradar los contaminantes los transforman en sustancias inocuas como el dióxido de carbono, el metano, nitrógeno molecular y agua. Los costos de tratamiento por procesos biológicos son de 3 a 10 veces menores que los tratamientos químicos(Marco *etal.*, 1997).

Los tratamientos biológicos se encontrarán limitados cuando los influentes a tratar contengan moléculas xenobióticos, inhibitorias o tóxicas para el cultivo mixto. El enriquecimiento en los cultivos específicos o aclimatados. Como su nombre lo indica, los tratamientos biológicos se basan en el empleo de microorganismos, principalmente bacterias, para la depuración. Los contaminantes del agua constituyen el sustrato (alimento) de la comunidad de microorganismos, dentro de los reactores biológicos deben de mantenerse ciertas condiciones ambientales para permitir el desarrollo de los microorganismos(Scott & Ollis, 1995).

Es necesario familiarizarse con conceptos básicos relacionados con los procesos biológicos de tratamiento de agua residual: tipos de microorganismos presentes en los sistemas, metabolismo microbiano, cinética, energía y expresiones matemáticas básicas para la descripción de los procesos(Yeber, 1999).

El metabolismo es definido como el conjunto de actividades bioquímicas de las células vivas, este proceso es subdividido en: catabolismo y anabolismo. En la fase catabolismo se llevan a cabo una serie de reacciones donde se transforma la materia orgánica y se libera energía, mientras en la fase de anabolismo las células obtienen nutrientes simples de su entorno y los transforma en componentes celulares. Para que se lleve a cabo la fase de anabolismo o biosíntesis requiere de energía que se obtiene en forma de luz (Pell & Wörman, 2011). Adicionalmente de la energía requerida para la biosíntesis, otras funciones celulares que no se

relacionan con el crecimiento, la regulación de la presión osmótica o el transporte de nutrientes también requieren de energía, la cual es conocida como energía de mantenimiento, por lo tanto, la energía liberada en la fase de catabolismo es utilizada en la fase de anabolismo.

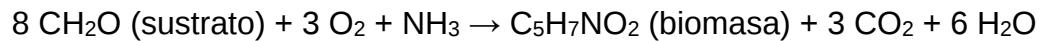
De acuerdo con Orhon el metabolismo microbiano en las aguas residuales se desarrolla en varias etapas.

- 1) La materia orgánica fácilmente biodegradable, es decir, soluble y constituida por moléculas simples, se metaboliza a alta velocidad.
- 2) La materia orgánica en suspensión y coloidal, la cual representa la mayor parte de la materia orgánica lentamente biodegradable, mediante la hidrólisis por acción enzimática para transformarse en un sustrato de fácil asimilación. Esta transformación es relativamente lenta por lo tanto es una limitante de la síntesis celular.
- 3) Una fracción de la materia orgánica metabolizada se transforma en materia del nuevo protoplasma celular (anabolismo), y la fracción que se queda se utiliza para la producción de energía (anabolismo).
- 4) De forma simultánea a la oxidación y a la producción de energía, existe una pérdida de biomasa activa por endogénesis en la que una parte de la materia asimilada queda totalmente oxidada obteniéndose como resultado dióxido de carbono y agua, la parte restante queda como residuo inerte.

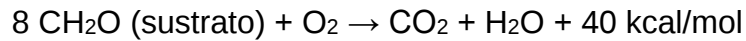
Se puede decir que en presencia de oxígeno disuelto los microorganismos metabolizan la materia orgánica biodegradable. Las reacciones químicas que conllevan esta actividad metabólica se resumen en: reacciones de síntesis de nuevos microorganismos, reacciones de producción de energía y reacciones de degradación de los propios microorganismos (Scott & Ollis, 1995).

Para la representación de la biomasa se utiliza la fórmula $C_5H_7NO_2$, pero si es considerado el fósforo el cual representa un 2% de la biomasa esta fórmula cambia a $C_{66}H_{124}O_{26}N_{13}P$. Con estas fórmulas se pueden representar las reacciones bioquímicas que se llevan a cabo durante el tratamiento biológico de las aguas residuales.

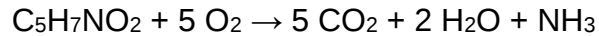
a. Síntesis de biomasa heterótrofa



b. Producción de energía



c. Degradación de la biomasa heterótrofa



La concentración de sustrato disminuye a través del tiempo en función del crecimiento celular, mientras tanto la concentración de biomasa es el resultado del aumento de la biosíntesis y una disminución por el metabolismo endógeno.

Por otra parte, el decaimiento celular la segunda fase de un proceso secuencial, en el primero se utiliza todo el sustrato exógeno para la síntesis del material celular y después una fracción de este se degrada durante el metabolismo endógeno, una vez que se ha consumido todo el sustrato externo e interno disponible, las funciones vitales se paralizan y muere la célula, dejando como residuo sustrato y nutrientes disponibles para las células viables, también se generan productos orgánicos inertes los cuales se eliminan del sistema a través de la purga de lodos residuales(Pell & Wörman, 2011).

En un intento para hacer más simple el proceso de decaimiento celular, Henze realizó una propuesta para modelar el decaimiento heterótrofo, utilizando el concepto de muerte-regeneración en el cual la biomasa heterótrofa activa (X_H) se transforma de forma parcial en materia inerte particulada (X_P) y en materia lentamente biodegradable (X_S). Al considerarse esta aproximación, se considera que la muerte de microorganismos se lleva a cabo sin la necesidad de utilización de aceptores de electrones, ni de consumir oxígeno disuelto y nitrato, pero el consumo del sustrato biodegradable que queda como residuo si requiere de oxígeno por lo cual necesitan de este de forma indirecta.

En lo que se refiere al crecimiento de los microorganismos, la expresión matemática más utilizada que expresa la velocidad de crecimiento es la de primer orden propuesta por Monod en el año de 1942

$$\frac{dX_H}{dt} = \mu_H = \mu_{H,max} * \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right)$$

El modelo describe la interacción entre el crecimiento de microorganismos en un cultivo por lotes y la utilización del sustrato limitante del crecimiento en los sistemas donde el sustrato es transformado en biomasa. Cuando hay una mezcla heterogénea de microorganismos jóvenes y viejos experimenta durante el proceso de crecimiento un cambio continuo mientras se adapta al medio ambiente en el cual las condiciones físicas y químicas siempre estarán variando. Lo cual hace imposible modelar la cinética de crecimiento, por lo cual se tienen que hacer algunas suposiciones con el propósito de obtener modelos simples para la predicción del comportamiento (Duarte Torres, 1996).

En cualquier proceso biológico existen factores ambientales que pueden afectar el crecimiento y el decaimiento microbiano como por ejemplo el pH, la temperatura, la concentración de oxígeno disuelto. En general a mayor temperatura los microorganismos incrementan su actividad, pero tienen un límite de temperatura, una vez que llegan a cierta temperatura se precipita su actividad.

2.4.2 Parámetros considerados en el proceso de tratamiento biológico de las aguas residuales.

Tipo de reactor.

Este depende de las necesidades de tratamiento de las aguas, para seleccionarlo se toman en cuenta diversos factores como:

- Origen de las aguas residuales
- La cinética de las reacciones que gobiernan el proceso
- Las necesidades de transferencia de oxígeno
- Condiciones ambientales locales
- Los costos de construcción, operación y mantenimiento.

Criterios de operación.

Para el control del proceso de los lodos activados, se han propuesto una serie de parámetros de uso común, los cuales son: la carga orgánica, también conocida como: relación alimento/microorganismos (F/M), el tiempo de retención celular (SRT) y la relación C/N.

La relación F/M, es la relación entre la carga orgánica que alimenta al sistema y la cantidad de biomasa heterótrofa activa, cuando esta relación es baja los procesos más desarrollados son diferentes a aquellos que se desarrollan a elevados ratios. (Morgan-Sagastume *et al.*, 2015) Esta diferencia se debe a la limitación del sustrato, a la prioridad de cubrir las necesidades energéticas para el mantenimiento de los microorganismos frente al uso del sustrato para el crecimiento, las bajas relaciones de F/M favorecen a los procesos de almacenamiento.

La relación alimento/microorganismos en su versión simplificada se encuentra definida como:

$$F/M = \frac{S_0}{TX}$$

donde:

F/M = relación alimento/microorganismos, $\text{kg}_{\text{DQO}}/\text{kg}_{\text{SSV}} \cdot \text{d}$

S_0 = concentración de DBO o DQO en el influente, $\text{g}_{\text{DQO}}/\text{m}^3$

T = tiempo de retención hidráulica del reactor, d

X = concentración de SSV en el reactor, $\text{kg}_{\text{SSV}}/\text{m}^3$

La relación entre la tasa de utilización específica U y la relación F/M es la siguiente:

$$U = \frac{\left(\frac{F}{M}\right) E}{100}$$

donde:

E = eficiencia del proceso, %

El tiempo medio de retención celular se puede definir, en función del volumen empleado, con cualquiera de las dos siguientes relaciones:

$$SRT = \frac{VX}{Q_w X_w + Q_e X_e}$$

donde:

SRT = tiempo de retención celular basado en el volumen del reactor, d

V = volumen del reactor, m³

X = concentración de SSV en el reactor, kg_{SSV}/m³

Q_w = caudal del lodo purgado, m³/d

X_w = concentración de SSV en el lodo purgado, kg_{SSV}/m³

Q_e = caudal del efluente tratado, m³/d

X_e = concentración de SSV en el efluente tratado, kg_{SSV}/m³

Definición del tiempo medio de retención celular a partir del volumen total del sistema:

$$SRT_t = \frac{X_t}{Q_w X_w + Q_e X_e}$$

donde:

SRT_t = tiempo de retención celular basado en el volumen total del sistema, d

X_t = masa total de SSV del sistema, incluyendo los sólidos del reactor, del tanque de sedimentación, y los existentes en las instalaciones de retorno del lodo, kg/m³

Q_w = caudal del lodo purgado, m³/d

X_w = concentración de SSV en el lodo purgado, kg_{SSV}/m³

Q_e = caudal del efluente tratado, m³/d

X_e = concentración de SSV en el efluente tratado, kg_{SSV}/m³

Bajo el supuesto de que toda la conversión del sustrato ocurre en el reactor, se recomienda diseñar el reactor a partir del valor de SRT en función del volumen empleado.

El rango de valores de la relación de F/M que se pueden encontrar en la literatura, varían entre 0.004 y 1.0 g sustrato / g biomasa * d.

Producción de lodo.

Es importante conocer la producción diaria de lodo puesto que esto afecta al diseño de las instalaciones de tratamiento y disposición de lodo en exceso (purga). La producción diaria de lodo que se tiene que purgar se puede estimar usando la siguiente ecuación:

$$P_x = Y_{obs} Q_0 (S_0 - S) * \left(10^3 \frac{g}{kg}\right)^{-1}$$

donde:

P_x = producción diaria neta de lodo activado, medida en términos de SSV, kg_{SSV}/d

Y_{obs} = producción observada, kg_{SST}/kg_{DQO}

Q_0 = caudal del influente, m³/d

S_0 = concentración de DBO o DQO en el influente, g_{DQO}/m³

S = concentración de DBO o de DQO en el efluente, g_{DQO}/m³

Necesidad de transferencia de oxígeno.

La necesidad teórica de oxígeno se puede determinar a partir de la DBO del agua residual y de la cantidad de organismos purgados diariamente del sistema.

La demanda teórica de oxígeno para la eliminación de la materia orgánica carbonosa presente en el agua residual de un sistema de lodos activados se puede calcular mediante la ecuación:

$$\frac{kg_{O_2}}{d} = \frac{Q(S_0 - S) * \left(\frac{10^3 g}{kg}\right)^{-1}}{f} - 1.42(P_x)$$

donde:

f = factor de conversión de DBO₅ en DBO_U (0.45-0.68)

si se puede calcular o estimar, la eficiencia de la transferencia de oxígeno del sistema de aireación, se puede determinar las necesidades reales de aire. El aire debe de ser suficiente para satisfacer la DBO del agua residual, la respiración endógena de los organismos presentes en el lodo, proporcionar un mezclado adecuado y mantener una concentración mínima de oxígeno disuelto en todo el tanque de aireación comprendido entre 1 y 2 mg/L.

Cinética del desarrollo de la biomasa.

Las constantes biocinéticas y balances de materia pueden usarse para definir la tasa de degradación del sustrato y crecimiento de biomasa (Metcalf y Eddy, 2013). Los microorganismos degradan la materia orgánica siguiendo una cinética específica. La tasa de utilización de sustrato biodegradable en un sistema biológico puede ser modelada por la siguiente expresión:

$$r_s = \frac{kXS}{K_s + S}$$

donde:

r_s = Tasa de utilización de sustrato por volumen de reactor, g/m³*d

k = Tasa máxima de utilización de sustrato, g/g*d

x = Concentración de biomasa, g/m³

s = Concentración del sustrato limitante, g/m³

ks = Constante de velocidad media, g/m³

La tasa de remoción de sustrato determina la carga orgánica. La ecuación anterior sigue la propuesta por la cinética de Monod para la tasa específica de crecimiento microbiano:

$$r_g = \frac{\mu_m X S}{k_s + S}$$

donde:

r_g = Tasa de crecimiento microbiano por la utilización de sustrato, g/m³*d

μ_m = Tasa máxima específica de crecimiento, g/g*d

La tasa de crecimiento microbiano puede igualarse con la tasa de utilización de sustrato como sigue:

$$r_g = Y r_s$$

Y = Rendimiento de biomasa, g_{SSV}/g_{DQO}

El coeficiente de rendimiento de biomasa (Y), puede ser controlado con la manipulación de factores ambientales, pero tales cambios también van a tener afectaciones en la biodegradación del biorreactor (Metcalf y Eddy, 2013).

Necesidades de nutrientes.

Para que el sistema biológico funcione adecuadamente, es necesario que se encuentren presentes cantidades adecuadas de nitrógeno y fosforo como nutrientes.

Debido a que la demanda de nutrientes depende de la producción celular neta, las necesidades de nutrientes son más reducidas en los procesos que dispongan largos tiempos medios de retención celular.

Control de los organismos.

El crecimiento de los organismos es el problema de funcionamiento más frecuente en los procesos de lodos activados. La proliferación de organismos en la mezcla conduce a la formación de un lodo de pobres características de sedimentabilidad,

normalmente conocido como lodo voluminoso (bulking). Como sistema de prevención y control de organismos se implementa un compartimiento separado, llamado “selector”, como zona de contacto inicial de un reactor biológico, zona en la que se mezclan el efluente primario y el lodo activado recirculado. El factor favorece el crecimiento selectivo de organismos formadores de flóculos en la primera fase del proceso biológico al asegurar un nivel elevado de la relación F/M a concentraciones de oxígeno disuelto controladas.

3. METODOLOGÍA

El proceso de experimentación está conformado por las siguientes etapas:

1. Caracterización del agua residual.
2. Generación del modelo.
3. Alimentación del modelo.
4. Calibración del modelo.
5. Validación del modelo.
6. Simulación del reactor biológico de lodos activados con diferentes cargas orgánicas.

A continuación, se describe cada una de las etapas antes mencionadas.

Caracterización del agua residual.

Para la caracterización de las aguas residuales se utilizarán los parámetros establecidos en la NOM-001-SEMARNAT-1996, la cual establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en aguas y bienes nacionales, con el objeto de proteger su calidad y hacer posible un nuevo uso de esta. Esta norma no es aplicable a las descargas de aguas de drenajes de aguas pluviales. En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** siguiente se mencionan los parámetros y los métodos de prueba.

Tabla 3.1 Parámetros establecidos en la NOM-001-SEMARNAT-1996

Parámetro	Unidades	Método de prueba
Temperatura	°C	NMX-AA-007-SCFI-2001

<i>Grasas y Aceites</i>	mg/L	NMX-AA-005-SCFI-2000
<i>Conductividad</i>	µs/cm	NMX-AA-093-SCFI-2000
<i>Sólidos Sedimentables</i>	ml/L	NMX-AA-004-SCFI-2000
<i>Sólidos Suspendidos Totales</i>	mg/L	NMX-AA-034-SCFI-2001
<i>Demanda Bioquímica de Oxígeno</i>	mg/L	NMX-AA-028-SCFI-2001
<i>Nitrógeno Total</i>	mg/L	NMX-AA-026-SCFI-2001
<i>Fósforo Total</i>	mg/L	NMX-AA-029-SCFI-2001
<i>DQO</i>	mg/L	NMX-AA-030-SCFI-2001
<i>pH</i>	Unidades	NMX-AA-008-SCFI-2000

En la tabla anterior se mencionan los parámetros que se deben de analizar antes de descargar un agua a un cuerpo de agua, es importante mencionar que los métodos de prueba son únicamente recomendaciones, existen laboratorios que se encargan de simplificar los métodos.

La concentración de los contaminantes antes mencionados no debe de exceder el valor establecido en las tablas 2 y 3 de la norma (tablas 3.2 y 3.3 del documento). En el caso del potencial de hidrogeno este tiene un rango de 5 a 10 unidades. Para la determinación de contaminantes por patógenos se utilizarán los coliformes fecales como indicador y para la contaminación por parásitos se utilizará como indicador los huevos de helminto.

Todas las descargas de aguas residuales a un cuerpo de agua bien de la nación deben de cumplir con lo establecido en la NOM-001-SEMARNAT-1996.

Tabla 3.2 Parámetros de la NOM-001-SEMARNAT-1996

LÍMITES MÁXIMOS PERMISIBLES PARA CONTAMINANTES BÁSICOS																				
PARÁMETROS	RÍOS						EMBALSES NATURALES Y ARTIFICIALES				AGUAS COSTERAS						SUELO			
(miligramos por litro, excepto cuando se especifique)	Uso en riego agrícola (A)		Uso Público Urbano (B)		Protección de vida acuática (C)		Uso en riego agrícola (B)		Uso público urbano (C)		Explotación pesquera, navegación y otros usos (A)		Recreación (B)		Estuarios (B)		Uso en riego agrícola (A)		Humedales naturales (B)	
	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.
Temperatura °C (1)	N.A.	N.A.	40	40	40	40	40	40	40	40	40	40	40	40	40	40	N.A.	N.A.	40	40
Grasas y Aceites (2)	15	25	15	25	15	25	15	25	15	25	15	25	15	25	15	25	15	25	15	25
Materia Flotante (3)	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente	ausente
Sólidos Sedimentables (ml/l)	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	N.A.	N.A.	1	2
Sólidos Suspendidos Totales	150	200	75	125	40	60	75	125	40	60	150	200	75	125	75	125	N.A.	N.A.	75	125
Demanda Bioquímica de Oxígeno ₅	150	200	75	150	30	60	75	150	30	60	150	200	75	150	75	150	N.A.	N.A.	75	150
Nitrógeno Total	40	60	40	60	15	25	40	60	15	25	N.A.	N.A.	N.A.	N.A.	15	25	N.A.	N.A.	N.A.	N.A.
Fósforo Total	20	30	20	30	5	10	20	30	5	10	N.A.	N.A.	N.A.	N.A.	5	10	N.A.	N.A.	N.A.	N.A.

(1) Instantáneo

(2) Muestra Simple Promedio Ponderado

(3) Ausente según el Método de Prueba definido en la NMX-AA-006.

P.D.= Promedio Diario; P.M.= Promedio Mensual; N.A.= No es aplicable (A), (B) y (C): Tipo de Cuerpo Receptor según la Ley Federal de Derechos.

Tabla 3.3 Parámetros de la NOM-001-SEMARNAT-1996

LÍMITES MÁXIMOS PERMISIBLES PARA METALES PESADOS Y CIANUROS																				
PARÁMETROS (*)	RÍOS						EMBALSES NATURALES Y ARTIFICIALES				AGUAS COSTERAS						SUELO			
(miligramos por litro)	Uso en riego agrícola (A)		Uso público urbano (B)		Protección de vida acuática (C)		Uso en riego agrícola (B)		Uso público urbano (C)		Explotación pesquera, navegación y otros usos (A)		Recreación (B)		ESTUARIOS (B)		Uso en riego agrícola (A)		HUMEDALES NATURALES (B)	
	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.	P.M.	P.D.
Arsénico	0.2	0.4	0.1	0.2	0.1	0.2	0.2	0.4	0.1	0.2	0.1	0.2	0.2	0.4	0.1	0.2	0.2	0.4	0.1	0.2
Cadmio	0.2	0.4	0.1	0.2	0.1	0.2	0.2	0.4	0.1	0.2	0.1	0.2	0.2	0.4	0.1	0.2	0.05	0.1	0.1	0.2
Cianuro	1.0	3.0	1.0	2.0	1.0	2.0	2.0	3.0	1.0	2.0	1.0	1.0	1.0	3.0	1.0	2.0	2.0	3.0	1.0	2.0
Cobre	40	60	40	60	40	60	40	60	4	60	4	60	40	60	40	60	4	60	40	60
Cromo	1	1.5	0.5	1.0	0.5	1.0	1	1.5	0.5	1.0	0.5	1.0	1	1.5	0.5	1.0	0.5	1.0	0.5	1.0
Mercurio	0.01	0.02	0.005	0.01	0.005	0.01	0.01	0.02	0.005	0.01	0.01	0.02	0.01	0.02	0.01	0.02	0.005	0.01	0.005	0.01
Níquel	2	4	2	4	2	4	2	4	2	4	2	4	2	4	2	4	2	4	2	4
Plomo	0.5	1	0.2	0.4	0.2	0.4	0.5	1	0.2	0.4	0.2	0.4	0.5	1	0.2	0.4	5	10	0.2	0.4
Zinc	10	20	10	20	10	20	10	20	10	20	10	20	10	20	10	20	10	20	10	20

(*) Medidos de manera total.

P.D.= Promedio Diario, P.M.= Promedio Mensual, N.A.= No es aplicable

(A), (B) y (C). Tipo de Cuerpo Receptor según la Ley Federal de Derechos.

Generación del Modelo.

Se creará el modelo del reactor de lodos activados de una planta de tratamiento de aguas residuales, en el cual se definirá que se utilizará el modelo de lodos activados 3 (ASM3), se definirán parámetros generales como son las dimensiones del reactor, tiempo de retención hidráulica, tiempo de retención celular, entre otros.

Softwares con modelos de lodos activados

Existen diversos softwares que nos permiten simular este modelo, entre los más comunes se encuentran los que se mencionan en la Tabla 3.4 Softwares de modelación de tratamientos biológicos.

Tabla 3.4 Softwares de modelación de tratamientos biológicos

Nombre	Académico		Industria		Proveedor
	Analista de programas informáticos.	Investigador	Consultor	Ingeniero operador del proceso	
Aquasim	X	X	-	-	EAWAG
AS40	-	X	X	-	Aquasystem
Asim	X	X	-	-	EAWAG
Biowin	-	X	X	-	EnviroSim Associates Ltd.
Capdetworks	X	X	X	X	Hydromantis
Crispisim	-	-	-	X	CEIT
Daisy	-	X	X	-	CEIT
Efor	-	X	X	-	EFOR Aps
GPS-X	X	X	X	X	Hydromantis
Simba	-	X	X	-	GbR
Simstep	-	-	-	X	?
Simworks	-	X	X	X	Hydromantis
SSSP	-	-	X	-	Prof. Grady
UCT	-	X	X	-	Prof. Ekama

Para los fines de este trabajo se utilizará el software GPS-X para llevar a cabo la modelación de la planta de tratamiento de aguas residuales por su versatilidad, además de utilizar las constantes cinéticas de los modelos ASM1, ASM2d y ASM3 establecidos por la IWA (Guzmán, 2010).

El software GPS-X fue creado por Hydromantis, Inc., este fue diseñado para el modelado y simulación de las plantas de tratamiento de aguas residuales urbanas e industriales.



Fig. 3.1 Software para la simulación del modelo.

Las principales características de este software son:

- ➔ Es un modelo que se adapta (el usuario puede cambiar los modelos).
- ➔ Tiene un modelo automático del análisis de sensibilidad de la fase en estado estacionario, del tiempo dinámico y del proceso dinámico de la fase.
- ➔ Permite la optimización para los modelos de calibración del módulo y procesos óptimos.
- ➔ Tiene un módulo de valoración del proceso dinámico para la valoración de parámetros de tiempo variable usando datos en línea o históricos.

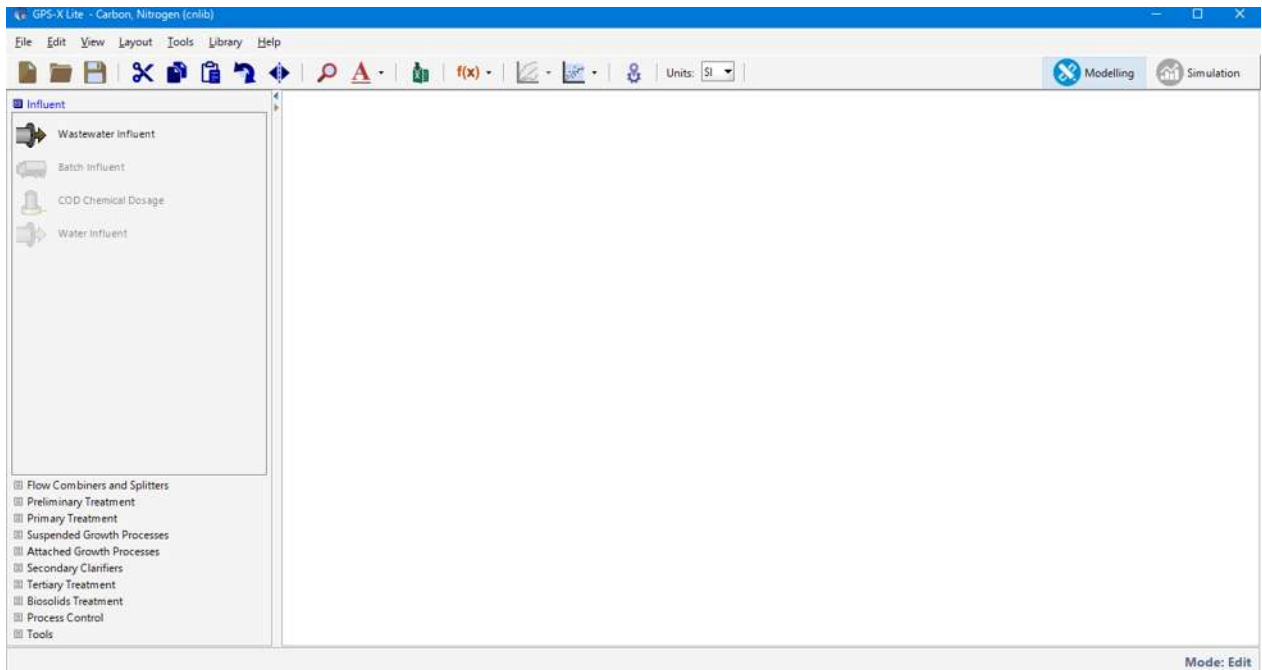


Fig. 3.2 Interfaz del software

El software es una herramienta que se utiliza para el modelado con fines generales.

El uso de este software nos permite:

- Determinar la capacidad máxima de las instalaciones de la planta de tratamiento.
- Minimizar los gastos de capital mediante la evaluación de los proyectos de las plantas de tratamiento.
- Optimizar las plantas de tratamiento ya existentes por diferentes estrategias de control.
- En el diseño de nuevas plantas de tratamiento.
- Evaluar diversos escenarios de manera eficiente.

Existen diversos atributos que se requieren para llevar a cabo la modelación, estos dependen del tipo de objeto, las variables se pueden agrupar en dos:

- 1) Si es parte del influente en composición y flujo.
- 2) Si es otro objeto, parámetros iniciales y/o condiciones iniciales.

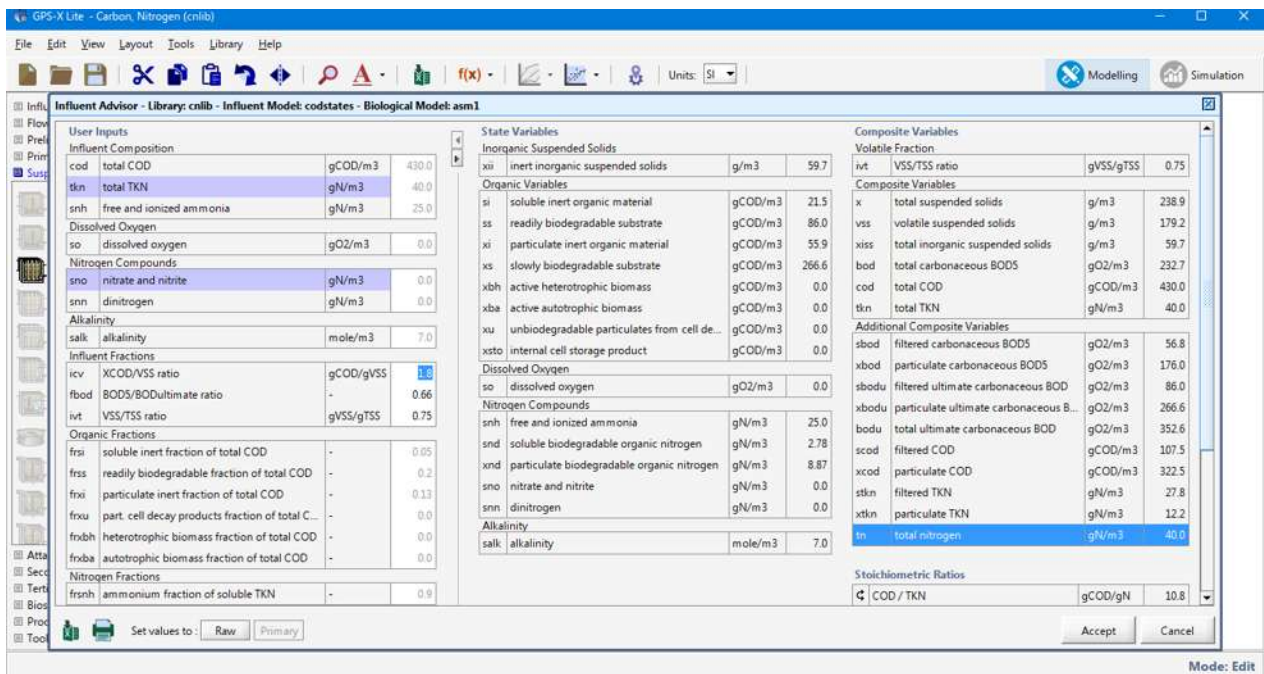


Fig. 3.3 Variables de entrada para la modelación.

En las salidas se pueden graficar todas las variables en el modo de simulación. Los resultados de la simulación se pueden obtener en distintas formas como pueden ser:

- Diagrama de Sankey – son diagramas de flujo que pueden mostrar las cantidades en función del ancho de la flecha.
- Resumen del uso de energía – muestra un resumen del uso de energía basados en las condiciones de operación y costos especificados por el usuario.
- Resumen de los costos de operación – el software genera un resumen de los costos de operación basado en las condiciones de operación y los costos especificados por el usuario.
- Visualización rápida – los paneles de visualización rápida dispones en el modo de simulación fueron diseñados para presentar la información más relevante para el usuario de una forma simple.
- Resultados definidos por el usuario – el usuario puede crear cualquier número de graficas en diferentes hojas de trabajo. Esto permite al usuario

graficar información adicional en formatos que le sean útiles y que le permita manejar la información.

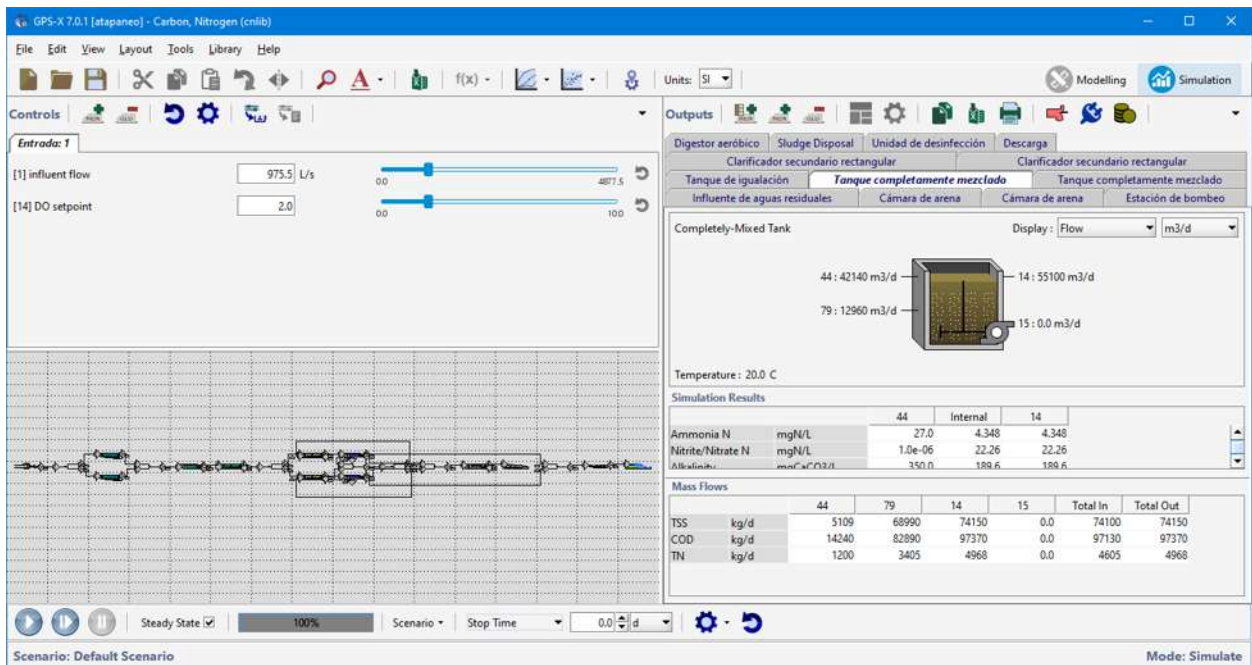


Fig. 3.4 Visualización de resultados de la simulación.

El uso de este programa en la investigación ha proporcionado buenos resultados como auxiliar en la simulación de los procesos de tratamiento de las aguas residuales.

Se consideró el protocolo STOWA de la Fundación Holandesa aplicada al agua para poder simular la planta, en la Fig. 3.5 Fases del protocolo STOWA para la modelación de una PTAR (Hulsbeek et al., 2002) se pueden observar las fases de la simulación de una planta de tratamiento de agua residual.

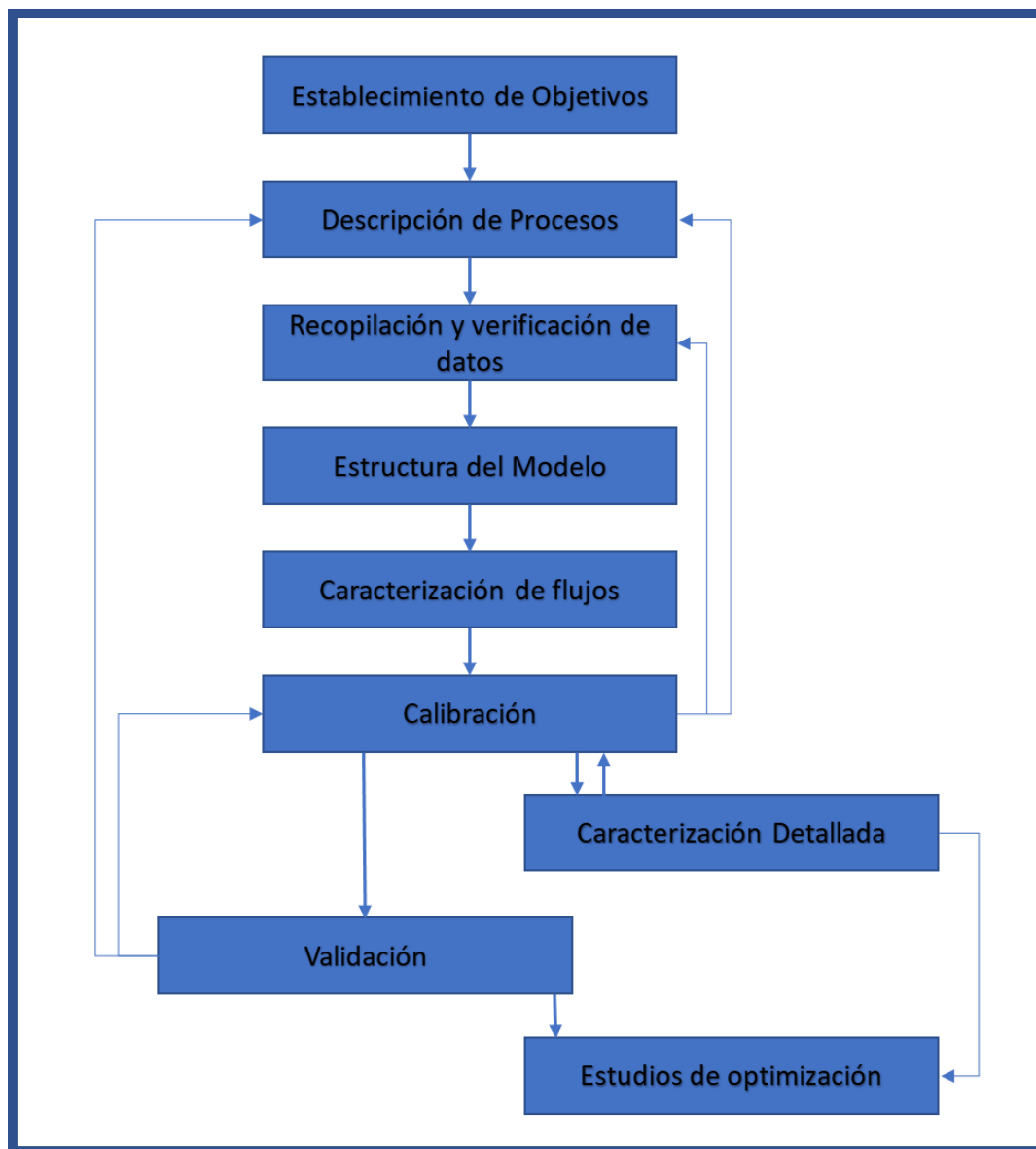


Fig. 3.5 Fases del protocolo STOWA para la modelación de una PTAR (Hulsbeek et al., 2002)

El objetivo de llevar a cabo la modelación de la planta tratamiento es analizar sus condiciones de operación actuales para saber si bajo estas condiciones los microorganismos presentes en el reactor biológico de lodos activados son capaces de acumular polihidroxialcanoatos y variar las concentraciones de sustrato carbonáceo para identificar bajo cuales condiciones se puede obtener una mayor cantidad de producto de almacenamiento interno de los microorganismos teniendo

especial cuidado en que el efluente cumpla con las condiciones de descarga que marca la NOM-001-SEMARNAT-1996.

Para la modelación de la planta se utilizará el modelo de Lodos Activados 3 (Activated Sludge Model 3 – ASM3 por sus siglas en inglés), el cual fue diseñado para ser el núcleo de diferentes modelos, incluye modelos de reserva de energía, la cual es una de las características necesarias para la acumulación de polihidroxialcanoatos (PHA) y Módulos de remoción biológica de fosforo. A continuación, se detalla más el modelo a utilizar (Gujer, n.d.), este modelo nos proporciona la columna vertebral, la cual describe los procesos de menor interés en investigación, de modo que podemos concentrarnos en nuevas fronteras de nuevo. Este modelo fue diseñado para satisfacer esencialmente las necesidades de aplicación del modelo.

El modelo de lodos activados está conformado por una serie de ecuaciones diferenciales ordinarias, estas ecuaciones son las que contienen derivadas de una o más variables dependientes con respecto a una o más variables independientes. Las ecuaciones diferenciales ordinarias son las más simples, las cuales consisten en ecuaciones en función de una sola variable independiente.

La solución de una ecuación diferencial consiste en integrar la ecuación para obtener una solución o en ciertos casos una solución implícita. Las ecuaciones diferenciales sirven para modelar problemas de ciencias e ingeniería que requieren el cambio de una variable respecto a otra. Generalmente la ecuación diferencial que modela el problema resulta ser siempre muy complicada para resolverse con exactitud.

Para el caso del modelo dinámico ASM No. 3, existen una serie de términos en cada ecuación que poseen órdenes de magnitud apreciables diferentes a otros. Lo anterior implica que el sistema de ecuaciones del modelo podría dirigir la solución hacia un problema rígido.

El modelo ASM3 está basado en el modelo ASM1 incluyendo unas mejoras entre las cuales se encuentran:

- Incluye Expresiones cinéticas
- Excluye el nitrógeno orgánico particulado y soluble como componentes del modelo ya que son fáciles de cuantificar.
- Se puede identificar la razón de decaimiento de los nitrificadores en condiciones aerobias y anaerobias.
- Entre otras.

En este modelo los procesos de conversión de los organismos presentes se llevan a cabo por separado. La respiración endógena engloba todas las formas de pérdida de biomasa y las necesidades energéticas, lo cual no se relaciona con el crecimiento celular. En la Comparación de los procesos que se llevan a cabo en los modelos ASM1 y ASM3 se puede observar claramente las diferencias en los procesos de los modelos ASM1 y ASM3.

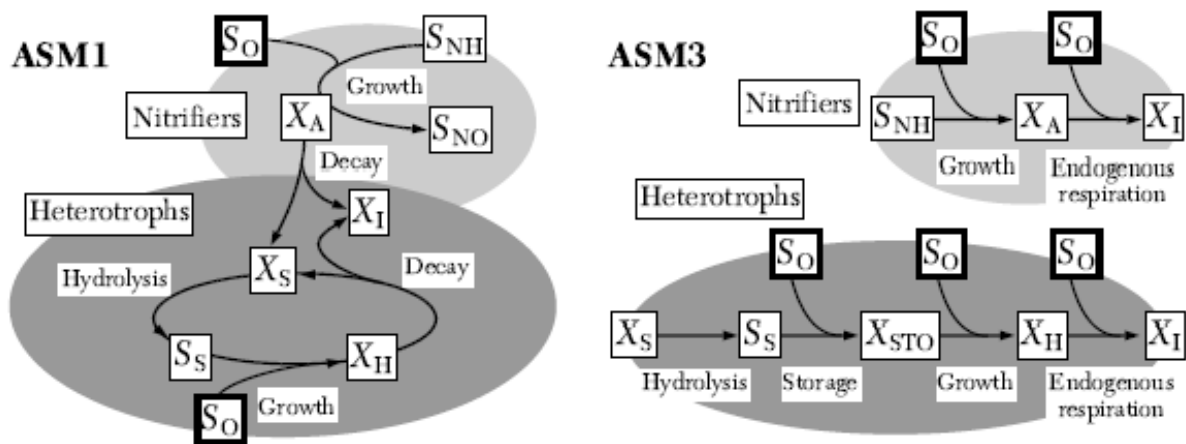


Fig. 3.6 Comparación de los procesos que se llevan a cabo en los modelos ASM1 y ASM3

La complejidad del modelo ASM3 se puede comparar con el ASM1. Se debe de realizar una correcta caracterización de las aguas residuales para poder usar el modelo. Este modelo al igual que el ASM2 incluye componentes de almacenamiento interno celular, lo cual requiere que la biomasa sea modelada con estructura interna celular. Los procesos de decaimiento deben incluir ambas fracciones de la biomasa.

El modelo ASM3 utiliza las siguientes componentes:

- ✓ S – Compuestos solubles
- ✓ X – Compuestos particulado.

Los componentes particulados generalmente son asociados con los sistemas de lodos activados. Estos compuestos se acumulan en los tanques de sedimentación en el caso de los compuestos solubles estos son transportados por el agua.

Compuestos solubles.

Variable	Definición del compuesto
S_{O_2}	Oxígeno Disuelto O_2
S_I	Material Orgánico Inerte Soluble
S_S	Sustratos Orgánicos Fácilmente Biodegradables (COD)
S_{NH_4}	Amonio más Nitrógeno Amoniacal ($NH_4^+ -N + NH_3-N$)
S_{N_2}	Dinitrógeno (N_2)
S_{NOX}	Nitrato más nitrito nitrógeno ($NO_3^{--}N + NO_2^- -N$)
S_{ALK}	Alcalinidad del agua residual.

Compuestos Particulados

Variable	Definición del compuesto
X_I	Material Orgánico Particulado Inerte (COD)
X_S	Sustrato lentamente biodegradable (COD)
X_H	Organismos Heterótrofos (COD)
X_{STO}	Almacenamiento Celular Interno de Organismos Heterótrofos (COD).
X_A	Organismos nitrificantes (COD)
X_{SS}	Sólidos Suspendidos (SS)

Procesos desarrollados en el modelo de lodos activados ASM3.

A continuación, se mencionan los procesos que se llevan a cabo con este modelo y una breve descripción de cada uno de ellos.

1. Hidrolisis. Es la descomposición química de las sustancias por el agua. En este modelo el proceso tiene menor importancia para las tasas de consumo de oxígeno y de desnitrificación.
2. Almacenamiento aeróbico de sustrato fácilmente biodegradable. En este proceso se describe el almacenamiento interno celular de sustrato fácilmente

biodegradable, pero se requiere de energía la cual es proporcionada por la respiración aeróbica. En teoría todos los materiales son almacenados y después asimilados como biomasa.

3. Almacenamiento anóxico de sustrato fácilmente biodegradable. Este proceso es idéntico al almacenamiento aerobio, pero en este caso la desnitrificación proporciona la energía requerida.
4. Crecimiento aerobio de organismos heterótrofos. Para el crecimiento de los organismos heterótrofos se considera que todo el sustrato es almacenado internamente de esta forma se simplifica considerablemente el modelo.
5. Crecimiento anóxico de organismos heterótrofos. El proceso es similar al crecimiento aerobio, la respiración está basada en la desnitrificación.
6. Respiración endógena aerobia. Mediante este proceso se describe los medios de perdida de la biomasa y las necesidades de energía, las cuales no se encuentran asociadas al crecimiento.
7. Respiración endógena anóxica. Este proceso es similar a la respiración endógena aerobia con la diferencia que este se lleva a cabo de forma más lenta.
8. Respiración aerobia de los productos de almacenamiento. Este proceso es análogo a la respiración endógena, lo cual nos asegura que los productos de almacenamiento decaen con la biomasa.
9. Respiración anóxica de los productos de almacenamiento. Este proceso es análogo al proceso aerobio, pero bajo condiciones de desnitrificación.

Arreglo del modelo

El modelo se encuentra de forma matricial en donde se pueden apreciar los procesos en el eje de las ordenadas y las componentes en el eje de las abscisas, en las intersecciones de cada una de las ordenadas con las abscisas se pueden encontrar los valores estequiométricos para cada una de las componentes, estos valores se utilizarán en su correspondiente ecuación diferencial. A continuación, se presenta la matriz simplificada del modelo para su mejor comprensión.

		Continuity			
Mass Balance	Component →	<i>i</i>			
	<i>j</i> Process ↓				
		1 X_B	2 S_S	3 S_O	Process Rate, ρ_j [ML ⁻³ T ⁻¹]
	1 Growth	1	$-\frac{1}{Y}$	$-\frac{1-Y}{Y}$	$\frac{\hat{\mu}S_S}{K_S+S_S} X_B$
	2 Decay	-1		-1	bX_B
Observed Conversion Rates ML ⁻³ T ⁻¹		$r_i = \sum_j r_{ij} = \sum_j v_{ij} \rho_j$			Kinetic Parameters: Maximum specific growth rate: $\hat{\mu}$ Half-velocity constant: K_S Specific decay rate: b
Stoichiometric Parameters: True growth yield: Y		Biomass [M(COD) L ⁻³]	Substrate [M(COD) L ⁻³]	Oxygen (negative COD) [M(-COD) L ⁻³]	

Fig. 3.7 Matriz simplificada del modelo de lodos activados.

Las componentes de la matriz completa del modelo se puede leer como sigue: $i_{2,3}$ es complementado con el símbolo $i_{N,SS}$ e indica que cada g de COD en forma de S_S contiene $i_{N,SS}$ g de N. El índice k=2 se relaciona con el nitrógeno que es el segundo conservador, el índice k=2 se relaciona con los sustratos orgánicos fácilmente biodegradables S_S el cual es el tercer componente. Los elementos vacíos de la matriz indican valores de 0. En seguida se muestra la matriz completa del modelo.

Compound $i \rightarrow$		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
f Process		S_{O_2}	S_1	S_2	S_{NH_4}	S_{N_2}	S_{NOX}	$S_{A.O.K}$	X_1	X_2	X_H	X_{STO}	X_A	X_{SS}
$\downarrow$ Expressed as $\rightarrow$		O_2	COD	COD	N	N	N	Mole	COD	COD	COD	COD	COD	SS
1 Hydrolysis			f_{S_1}	x_1	y_1			z_1		-1				$-i_{x_2}$
<i>Heterotrophic organisms: aerobic and denitrifying activity</i>														
2 Aerobic storage of S_2	x_2			-1	y_2			z_2				$Y_{STO O_2}$		i_2
3 Anoxic storage of S_2				-1	y_3	$-x_3$	x_3	z_3				$Y_{STO NOX}$		i_3
4 Aerobic growth of X_H	x_4				y_4			z_4			1	$-1 / Y_{H O_2}$		i_4
5 Anoxic growth (denitrific.)					y_5	$-x_5$	x_5	z_5			1	$-1 / Y_{H NOX}$		i_5
6 Aerobic endog. respiration	x_6				y_6			z_6	f_1		-1			i_6
7 Anoxic endog. respiration					y_7	$-x_7$	x_7	z_7	f_1		-1			i_7
8 Aerobic respiration of X_{STO}	x_8											-1		i_8
9 Anoxic respiration of X_{STO}						$-x_9$	x_9	z_9				-1		i_9
<i>Autotrophic organisms: nitrifying activity</i>														
10 Aerobic growth of X_A	x_{10}				y_{10}		$1/Y_A$	z_{10}					1	i_{10}
11 Aerobic endog. respiration	x_{11}				y_{11}			z_{11}	f_1				-1	i_{11}
12 Anoxic endog. respiration					y_{12}	$-x_{12}$	x_{12}	z_{12}	f_1				-1	i_{12}
<i>Composition matrix $i_{k,j}$</i>														
<i>k Conservatives</i>														
1 ThOD	g ThOD	-1	1	1		-1.71	-4.57		1	1	1	1	1	
2 Nitrogen	g N		$i_{N S_1}$	$i_{N S_2}$	1	1	1		$i_{N X_1}$	$i_{N X_2}$	$i_{N BM}$		$i_{N BM}$	
3 Ionic charge	Mole +				1/14		-1/14	-1						
<i>Observables</i>														
4 SS	g SS								$i_{SS X_1}$	$i_{SS X_2}$	$i_{SS BM}$	0.60	$i_{SS BM}$	

Fig. 3.8 Modelo de Lodos Activados (ASM3)

Las expresiones cinéticas del modelo están basadas en las funciones traspuestas para las componentes solubles consumidas. Es recomendable interpolar parámetros cinéticos con diferentes temperaturas utilizando la siguiente ecuación.

$$k(T) = k(20^\circ C) * \exp(\theta_T * (T - 20^\circ C))$$

Donde θ_T (en $^\circ C$) puede ser obtenido con la siguiente formula:

$$\theta_T = \frac{\ln(k(T_1)/k(T_2))}{t_1 - T_2}$$

j	Process	Process rate equation r_j , all $r_j \geq 0$.
1	Hydrolysis	$I_{11} \cdot \frac{X_3 / X_{11}}{K_X + X_3 / X_{11}} \cdot X_{11}$
<i>Heterotrophic organisms, aerobic and denitrifying activity</i>		
2	Aerobic storage of S_3	$I_{3TO} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_3}{K_3 + S_3} \cdot X_{11}$
3	Anaerobic storage of S_3	$I_{3TO} \cdot \eta_{NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot \frac{S_3}{K_3 + S_3} \cdot X_{11}$
4	Aerobic growth	$\mu_{11} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{AIX}}{K_{AIX} + S_{AIX}} \cdot \frac{X_{3TO} / X_{11}}{K_{3TO} + X_{3TO} / X_{11}} \cdot X_{11}$
5	Anaerobic growth (denitrification)	$\mu_{11} \cdot \eta_{NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{AIX}}{K_{AIX} + S_{AIX}} \cdot \frac{X_{3TO} / X_{11}}{K_{3TO} + X_{3TO} / X_{11}} \cdot X_{11}$
6	Aerobic endogenous respiration	$b_{11O_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot X_{11}$
7	Anaerobic endogenous respiration	$b_{11NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot X_{11}$
8	Aerobic respiration of X_{3TO}	$b_{3TOO_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot X_{3TO}$
9	Anaerobic respiration of X_{3TO}	$b_{3TONOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot X_{3TO}$
<i>Autotrophic organisms, nitrifying activity</i>		
10	Aerobic growth of X_A , nitrification	$\mu_A \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{AO_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{ANH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{AIX}}{K_{AAIX} + S_{AIX}} \cdot X_A$
11	Aerobic endogenous respiration	$b_{AO_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{AO_2} + S_{O_2}} \cdot X_A$
12	Anaerobic endogenous respiration	$b_{ANOX} \cdot \frac{K_{AO_2}}{K_{AO_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{ANOX} + S_{NOX}} \cdot X_A$

Fig. 3.9 Expresiones cinéticas del modelo ASM3.

En la Fig. 3.10 Valores típicos de los parámetros cinéticos del modelo ASM3 se muestran los valores típicos utilizados, son únicamente ejemplos estos no forman parte del modelo, varían según las características físico – químicas del influente.

Symbol	Characterization	Temperature		Units
		10 °C	20 °C	
k_{II}	Hydrolysis rate constant	2	3	$\text{g COD}_{X_i} (\text{g COD}_{X_{II}})^{-1} \text{d}^{-1}$
K_X	Hydrolysis saturation constant	1	1	$\text{g COD}_{X_i} (\text{g COD}_{X_{II}})^{-1}$
<i>Heterotrophic organisms X_{II}, aerobic and denitrifying activity</i>				
k_{STO}	Storage rate constant	2.5	5	$\text{g COD}_S (\text{g COD}_{X_{II}})^{-1} \text{d}^{-1}$
η_{NOX}	Anoxic reduction factor	0.6	0.6	—
K_{O_2}	Saturation constant for S_{NO_2}	0.2	0.2	$\text{g O}_2 \text{m}^{-3}$
K_{NOX}	Saturation constant for S_{NOX}	0.5	0.5	$\text{g NO}_3\text{-N m}^{-3}$
K_S	Saturation constant for substrate S_S	2	2	$\text{g COD}_S \text{m}^{-3}$
K_{STO}	Saturation constant for X_{STO}	1	1	$\text{g COD}_{X_{STO}} (\text{g COD}_{X_{II}})^{-1}$
μ_{II}	Heterotrophic max. growth rate of X_{II}	1	2	d^{-1}
K_{NH_4}	Saturation constant for ammonium, S_{NH_4}	0.01	0.01	g N m^{-3}
K_{ALK}	Saturation constant for alkalinity for X_{II}	0.1	0.1	$\text{mole HCO}_3^- \text{m}^{-3}$
b_{ILO_2}	Aerobic endogenous respiration rate of X_{II}	0.1	0.2	d^{-1}
b_{ILNOX}	Anoxic endogenous respiration rate of X_{II}	0.05	0.1	d^{-1}
$b_{STO O_2}$	Aerobic respiration rate for X_{STO}	0.1	0.2	d^{-1}
$b_{STO NOX}$	Anoxic respiration rate for X_{STO}	0.05	0.1	d^{-1}
<i>Autotrophic organisms X_A, nitrifying activity</i>				
μ_A	Autotrophic max. growth rate of X_A	0.35	1.0	d^{-1}
$K_{A NH_4}$	Ammonium substrate saturation for X_A	1	1	g N m^{-3}
$K_{A O_2}$	Oxygen saturation for nitrifiers	0.5	0.5	$\text{g O}_2 \text{m}^{-3}$
$K_{A ALK}$	Bicarbonate saturation for nitrifiers	0.5	0.5	$\text{mole HCO}_3^- \text{m}^{-3}$
$b_{A O_2}$	Aerobic endogenous respiration rate of X_A	0.05	0.15	d^{-1}
$b_{A NOX}$	Anoxic endogenous respiration rate of X_A	0.02	0.05	d^{-1}

Fig. 3.10 Valores típicos de los parámetros cinéticos del modelo ASM3

Limitaciones del modelo

- ✦ Fue desarrollado únicamente para la simulación del tratamiento de aguas residuales con un sistema de lodos activados.
- ✦ Fue diseñado basado en la experiencia para un rango de temperatura de 8 a 23 °C.
- ✦ No incluye procesos que describan el comportamiento de la biomasa en un ambiente anaerobio.
- ✦ El modelo fue creado para un pH de 6.5 a 7.5.
- ✦ No está diseñado para trabajar con elevadas concentraciones de nitrito.

Provee la estructura de un modelo, pero no los valores absolutos de los parámetros del modelo.

Para el modelo se consideraron los elementos del proceso de tratamiento de aguas residuales mencionados en la Tabla 3.5 Elementos del tren de tratamiento utilizado en la PTAR, se especifican algunas de sus características.

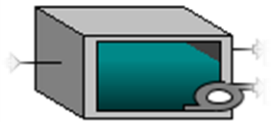
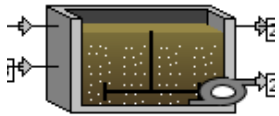
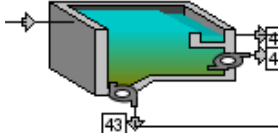
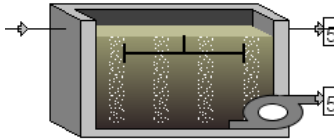
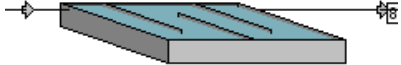
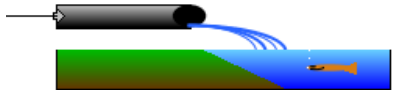
Tabla 3.5 Elementos del tren de tratamiento utilizado en la PTAR

Unidad	Largo	Ancho	Tirante	"Vol. Útil (m3)"
<i>Caja de demasías</i>	7.00	5.00	2.33	82.00
<i>Separador Arena</i>	Tanque irregular			2.00
<i>Trampa de Grasas</i>	10.00	11.00	2.35	259.00
<i>Cárcamo de Bombeo</i>	16.25	11.00	2.35	420.00
<i>Depósito de Grasas</i>	3.00	2.80	3.00	25.00
<i>Selector</i>	28.30	28.30	5.88	2900.00
<i>Reactor de Lodos</i>	72.00	31.75	5.00	8400.00
<i>Cárcamo de Lodos</i>	5.50	3.50	2.45	47.16
<i>Clarificador</i>	71.18	19.46	5.00	4600.00
<i>Tanque Agua Tratada</i>	2.00	2.50	2.00	10.00
<i>Canal de Contacto</i>	3.20	270.00	2.50	2160.00

Así mismo, la planta de tratamiento nos proporcionó datos de un semestre de medición de algunos parámetros físico-químicos, desafortunadamente no se miden todos los parámetros que requiere el software por lo cual se usarán valores establecidos en la literatura.

Por otra parte, el software no cuenta con todos los elementos para realizar la modelación exactamente igual, por lo cual el modelo quedo más simple. En la Tabla 3.6 Elementos utilizados en el modelo creado en el software GPS-X, se ilustran los elementos del modelo.

Tabla 3.6 Elementos utilizados en el modelo creado en el software GPS-X

Símbolo gráfico	Elemento del tratamiento
	Influyente
	Desarenador
	Cárcamo de Bombeo
	Reactor de lodos activados completamente mezclado
	Sedimentador o Clarificador
	Digestor de lodos
	Tanque de contacto de cloro
	Efluente

- Gasto medio (L/s)
- Gasto mínimo (L/s)
- DBO5 (Demanda Bioquímica de Oxígeno mg/L)
- DQO (Demanda Química de Oxígeno mg/L)
- SST (Sólidos Suspendidos Totales mg/L)
- N Total (Nitrógeno Total)
- F Total (Fósforo Total)
- pH (U pH)
- Oxígeno disuelto (ppm)

Protocolo STOWA

Este es un protocolo físico-químico de caracterización propuesto por la Asociación Holandesa de Investigación Aplicada al Agua, el cual es de fácil aplicación relativamente, ya que sustituye las pruebas de respirométricas con una serie de filtración a 0.1 μm , y análisis de DQO (Demanda Química de Oxígeno) y DBO (Demanda Bioquímica de Oxígeno).

Se ha considerado a la DQO como el parámetro de cuantificación de la materia orgánica de las Aguas Residuales, substituyendo a la DBO como parámetro principal de medición. Para la caracterización de la materia orgánica el aspecto más importante es el fraccionamiento de la DQO, en el cual se distingue la fracción inerte de la biodegradable (Gernaey *et al.*, 2004). La fracción inerte a su vez se subdivide en inerte soluble (S_i) e inerte particulada (X_i), la fracción S_i pasa por todo el sistema de tratamiento sin ser afectado mientras la fracción X_i se acumula en los lodos, aportando a los sólidos suspendidos volátiles (Sin *et al.*, 2005). Por otra parte, la DQO biodegradable se encuentra subdividida en una fracción fácilmente biodegradable (S_s) y en una fracción lentamente biodegradable (X_s) (Vázquez-Mejía *et al.*, 2013).

El proceso de fraccionamiento requiere de la medición de la DQO en el influente y en el efluente, así como, la DBO en el influente lo que permite calcular todas las fracciones. Las ecuaciones que se utilizan para el fraccionamiento de la DQO por el protocolo STOWA son las siguientes:

1. Suma de las fracciones de DQO

$$DQO_{Tot.inf} = S_i + S_s + X_s + X_i$$

2. Determinación de la fracción S_i

$$S_i = DQO_{soluble_efluente}$$

3. Determinación de la fracción S_s

$$S_s = DQO_{soluble_influyente} - S_i$$

4. Determinación de la fracción X_s

$$DBO(t) = DBO_u(1 - e^{-k_{DBO} \cdot t})$$

$$DQO_b = \frac{1}{1 - f_{DBO}} DBO_u$$

$$DQO_b = S_s + X_s$$

$$X_s = DQO_b - S_s$$

5. Determinación de la fracción X_i

$$X_i = DQO_{Tot.} - (S_i + S_s + X_s)$$

Nomenclatura:

$DQO_{Tot.inf}$: DQO total del influente

S_i : DQO soluble inerte

S_s : DQO soluble fácilmente biodegradable

X_s : DQO particulada lentamente biodegradable

X_i : DQO particulada inerte

$DBO(t)$: DBO en función del tiempo

DBO_u : DBO última

k_{DBO} : Constante cinética de orden 1

DQO_b : DQO biodegradable total

f_{DBO} : Factor de corrección

Así mismo, se requieren de otros parámetros cinéticos y estequiométricos los cuales no son medidos experimentalmente en la planta por lo cual se tomarán valores sugeridos en la literatura.

Tabla 3.7 Principales parámetros cinéticos y estequiométricos del modelo. (Gao et al., 2018)

PARÁMETRO	DEFINICIÓN	RANGO
$Y_{SMP.H.O.}$	Rendimiento aeróbico de crecimiento X_H en S_{SMP}	0.38 – 0.90
$Y_{SMP.H.NO.}$	Rendimiento anóxico de crecimiento X_H en S_{SMP}	0.38 – 0.50
$R_{SMP.H.O.}$	Fracción de S_{SMP} producido durante crecimiento aeróbico X_H	0.001 – 1.50
$R_{SMP.H.NO.}$	Fracción de S_{SMP} producido durante crecimiento anóxico X_H	0.00 – 1.00
$R_{SMP.A.O.}$	Fracción de S_{SMP} producido durante crecimiento aeróbico X_A	0.01 – 2.00
$R_{SMP.D.}$	Fracción de S_{SMP} producida durante el decaimiento celular	0.05 – 1.60
$U_{SMP.H.O.}$	Máxima tasa de crecimiento de X_H en S_{SMP}	0.45 – 0.60
$K_{SMP.H.O.}$	Coeficiente de saturación media de S_{SMP}	30.00 – 100.00
$K_{SMP.H.O.}$	Tasa constante de crecimiento para X_{EPS}	0.03 – 0.71
$R_{EPS.H.}$	Fracción de X_{EPS} producida durante el crecimiento de X_H	0.03 – 0.18

$R_{EPS.D.}$	Fracción de X_{EPS} producida durante el decaimiento celular	0.05 – 0.17
$R_{EPS.A.}$	Fracción X_{EPS} producida durante el crecimiento X_A	0.03 – 0.18
$Y_{SS.H.O.}$	Rendimiento aeróbico de crecimiento de X_H en S_S	0.38 – 0.75
$U_H.$	Máxima tasa de crecimiento de X_H en S_S	3.00 – 13.20
$B_H.$	Coeficiente de decaimiento para X_H	0.05 – 1.60
$K_S.$	Coeficiente de saturación media S_S para X_H	5.00 – 225.00
$B_A.$	Coeficiente de decaimiento para X_A	0.05 – 0.20
$K_{NH.}$	Coeficiente de saturación media de amonio para X_A	0.40 – 2.00
$K_{NO.}$	Coeficiente de saturación media de nitrato para bacteria denitro	0.10 – 0.50
$K_{O,H.}$	Coeficiente de saturación media de oxígeno para X_H	0.015 – 0.20

Es importante mencionar que el software que se está utilizando para la modelación cuenta con diferentes librerías, para los fines del modelo se seleccionó la librería de Carbono – Nitrógeno la cual tiene 16 variables de estado las cuales se mencionan en la siguiente tabla.

Tabla 3.8 Variables de estado correspondientes a la librería Carbono-Nitrógeno

Variables de estado	Símbolo en el software GPS-X	Unidades
<i>Orgánicos solubles inertes</i>	si	gCOD/m ³

<i>Sustrato fácilmente biodegradable (soluble)</i>	ss	gCOD/m ³
<i>Orgánicos particulados inertes</i>	xi	gCOD/m ³
<i>Sustrato lentamente biodegradable (almacenado, particulado)</i>	xs	gCOD/m ³
<i>Biomasa heterótrofa activa</i>	xbh	gCOD/m ³
<i>Biomasa autótrofa activa</i>	xba	gCOD/m ³
<i>Partículas no biodegradables de decaimiento celular</i>	xu	gCOD/m ³
<i>Producto de almacenamiento celular interno</i>	xsto	gCOD/m ³
<i>Oxígeno disuelto</i>	so	gN/m ³
<i>Nitrato y nitrito N</i>	son	gN/m ³
<i>Amonio libre e ionizado</i>	snh	gN/m ³
<i>Nitrógeno orgánico soluble biodegradable (en ss)</i>	snd	gN/m ³
<i>Nitrógeno orgánico particulado biodegradable (en xs)</i>	xnd	gN/m ³
<i>Di nitrógeno</i>	snn	gN/m ³
<i>Alcalinidad</i>	salk	mole/m ³
<i>Solidos suspendidos inorgánicos inertes</i>	xii	g/m ³

Al momento de alimentar el modelo se realizó mediante el Influent Advisor el cual ayuda al usuario a entender mejor la caracterización del influente, esta herramienta permite visualizar cada uno de los parámetros que se requieren del influente y ayuda al usuario a evitar los errores.

La ventana del Influent Advisor muestra tres columnas de datos: las entradas del usuario, las variables de estado y las variables compuestas. Estas últimas dos columnas son calculadas con los datos de entrada del usuario. Al seleccionar uno de los parámetros del influent advisor este resalta los demás parámetros que se

relacionan con el que seleccionamos y muestra la fórmula de cómo se calcula el valor.

Influent Advisor - Library: cnlbo - Influent Model: codstates - Modelo biológico: asm3

User Inputs

Influent Composition

cod	DOO total	gCOD/m3	430.0
tkn	NTK total	gN/m3	40.0
snh	amoníaco libre e ionizado	gN/m3	29.0

Dissolved Oxygen

so	oxígeno disuelto	gO2/m3	2.0
----	------------------	--------	-----

Nitrogen Compounds

sno	nitrato y nitrito	gN/m3	0.0
snn	dinitrógeno (nitrógeno molecular)	gN/m3	0.0

Alkalinity

salk	alcalinidad	mole/m3	7.0
------	-------------	---------	-----

Influent Fractions

icv	proporción XCOD / SSV	gCOD/gVSS	1.8
fbod	Tasa DBO5 / DBOúltima	-	0.66
ivt	proporción SSV / SST	gVSS/gTSS	0.75

Organic Fractions

frsi	soluble inert fraction of total COD	-	0.05
frss	readily biodegradable fraction of total COD	-	0.2
frxi	particulate inert fraction of total COD	-	0.13
frxbh	heterotrophic biomass fraction of total COD	-	0.0
frxba	autotrophic biomass fraction of total COD	-	0.0
frxsto	stored fraction of total COD	-	0.0

Nitrogen Fractions

franh	fracción del amonio en el NKT soluble	-	1.0
-------	---------------------------------------	---	-----

ASM3 Nutrient Fractions

inbm	Contenido de N de la biomasa activa	gN/gCOD	0.07
inxi	Contenido de N en el material particulado in...	gN/gCOD	0.02
inxs	Contenido de N en el sustrato particulado	gN/gCOD	0.04
insi	Contenido de N en el material inerte soluble	gN/gCOD	0.01
inss	Contenido de N en el sustrato soluble	gN/gCOD	0.03

Variables de Estado

Inorganic Suspended Solids

xii	sólidos suspendidos inorgánicos inertes	g/m3	59.7
-----	---	------	------

Organic Variables

si	material orgánico soluble inerte*	gCOD/m3	21.5
ss	substrato biodegradable disponible	gCOD/m3	86.0
xi	material orgánico inerte particulado	gCOD/m3	55.9
xs	substrato lentamente biodegradable	gCOD/m3	266.6
xbh	biomasa heterotrófica activa	gCOD/m3	0.0
xba	biomasa autotrófica activa	gCOD/m3	0.0
xu	materia particulada no biodegradable de descomposición cel...	gCOD/m3	0.0
xsto	producto almacenado en las células	gCOD/m3	0.0

Dissolved Oxygen

so	oxígeno disuelto	gO2/m3	2.0
----	------------------	--------	-----

Nitrogen Compounds

snh	amoníaco libre e ionizado	gN/m3	29.0
snd	nitrógeno orgánico biodegradable soluble	gN/m3	0.0
xnd	nitrógeno orgánico biodegradable particulado	gN/m3	0.0
sno	nitrato y nitrito	gN/m3	0.0
snn	dinitrógeno (nitrógeno molecular)	gN/m3	0.0

Alkalinity

salk	alcalinidad	mole/m3	7.0
------	-------------	---------	-----

Variables compuestas

Volatile Fraction

ivt	proporción SSV / SST	gVSS/gTSS	0.75
-----	----------------------	-----------	------

Composite Variables

x	sólidos suspendidos totales	g/m3	238.9
vss	sólidos suspendidos volátiles	g/m3	179.2
xiss	sólidos suspendidos inorgánicos tota...	g/m3	59.7
bod	DBO5 carbonosa total	gO2/m3	232.7
cod	DOO total	gCOD/m3	430.0
tkn	NTK total	gN/m3	40.0

Additional Composite Variables

sbod	DBO5 carbonosa filtrada	gO2/m3	56.8
xbod	DBO5 carbonosa particulada	gO2/m3	176.0
sbod	DBO carbonosa última filtrada	gO2/m3	86.0
xbodu	DBO carbonosa última particulada	gO2/m3	266.6
bodu	DBO carbonosa última total	gO2/m3	352.6
sco	DOO filtrada	gCOD/m3	107.5
xco	DOO particulada	gCOD/m3	322.5
stkn	NTK filtrado	gN/m3	29.0
xtkn	NTK particulado	gN/m3	11.0
tn	nitrógeno total	gN/m3	40.0

Stoichiometric Ratios

↕	COD / TKN	gCOD/gN	10.8
↕	CODbiodeg / TKN	gCOD/gN	8.82
↕	NH4 / TKN	-	0.725
↕	VSS / TSS	gVSS/gTSS	0.75
↕	XCOD / VSS	gCOD/gVSS	1.8
↕	BOD / COD	gO2/gCOD	0.541

Equation for : xsto xsto = frxsto * cod Change selection by :
☒ clicking on variable

Set values to : Raw Primary Accept Cancel

Fig. 3.12 Vista general del influent advisor del software GPS-X

En la siguiente figura se muestra la relación de las variables de usuario, las variables de estado y las variables compuestas (TSS, DBO y DQO), la tabla ilustra los mismos cálculos de las variables compuestas de forma tabular.

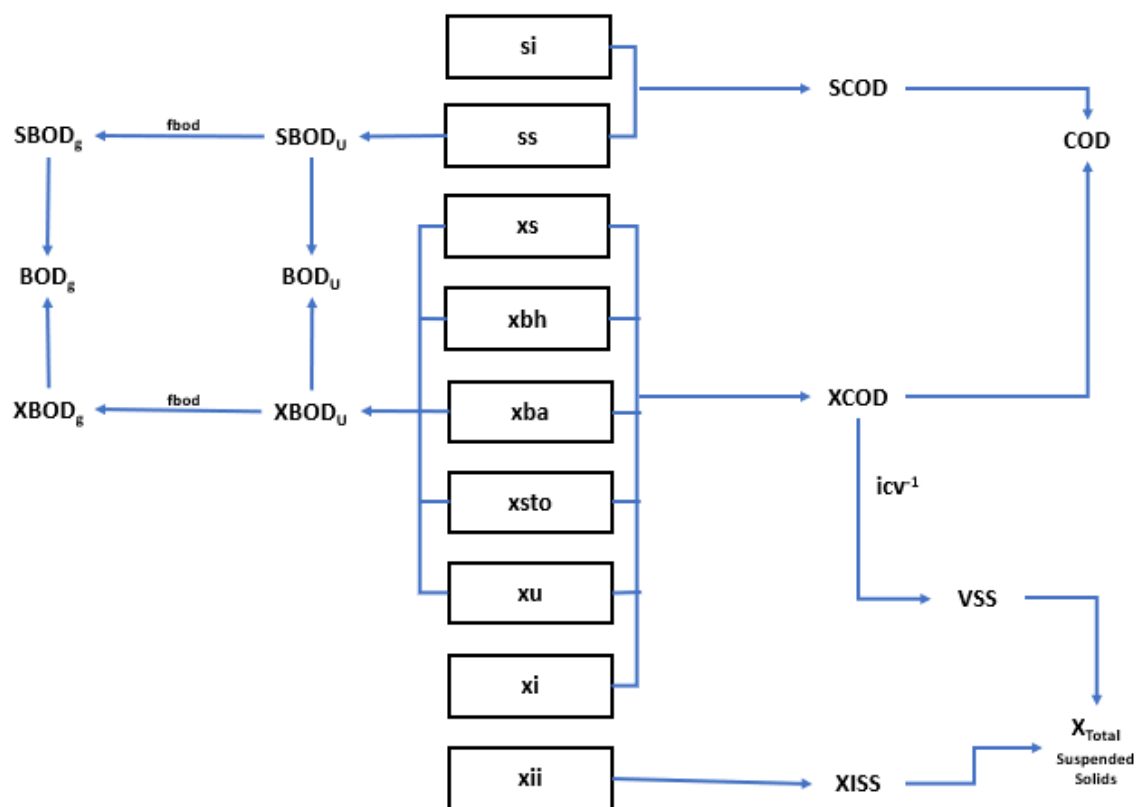


Fig. 3.13 Variables compuestas y su relación con las variables de estado (Manual GPS-X)

Tabla 3.9 DQO, DBO y SST variables compuestas (Manual GPS-X)

	SBODU	XBODU	BODU	SBOD	XBOD	BOD	SCOD	XCOD	COD	VSS	XISS	X
si							1		1			
ss	1		1	fbod		fbod	1		1			
xi								1	1	icv^{-1}		icv^{-1}
xs		1	1		fbod	fbod		1	1	icv^{-1}		icv^{-1}
xbh		1	1		fbod	fbod		1	1	icv^{-1}		icv^{-1}
xba		1	1		fbod	fbod		1	1	icv^{-1}		icv^{-1}
xu								1	1	icv^{-1}		icv^{-1}
xsto		1	1		fbod	fbod		1	1	icv^{-1}		icv^{-1}
xii											1	1

Las variables compuestas de DQO son una suma de variables de estado (donde las unidades son gCOD / m^3). La DQO soluble (SCOD) es la suma de los orgánicos inertes solubles (si) y el sustrato fácilmente biodegradable (ss), mientras que la DQO particulada (XCOD) es la suma del sustrato lentamente biodegradable (xs), biomasa heterotrófica activa (xbh), biomasa activa autótrofa (xba), producto de almacenamiento interno celular (xsto), partículas no biodegradables de la descomposición celular (xu) y partículas orgánicas inertes (xi). La DQO total (DQO) es la suma de DQO soluble y particulada.

La variable compuesta de sólidos en suspensión (X) se calcula a partir de la DQO particulada (XCOD) dividiéndola por la relación XCOD: VSS (icv), que cambia las unidades de XCOD a $(\text{mgVSS} / \text{L})$, lo que da como resultado los sólidos suspendidos volátiles (VSS) variable compuesta. Para calcular la variable compuesta de sólidos en suspensión (X), se agrega VSS al material inorgánico inerte particulado (XII). Por defecto, en la biblioteca CN, las partículas sólidas inertes en suspensión (XIIS) es igual a xii.

Las variables compuestas de la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) se calculan a partir de las variables de estado. En primer lugar, las variables de estado biodegradables (las variables de estado que ejercen DBO, que están en unidades de gO / m^3) se suman para proporcionar una DBO última soluble y particulada (XBODU, SBODU). La suma de estos componentes es la medida de DBO final total (BODU). Para determinar la DBO5, la BODU calculada se multiplica por una fracción estequiométrica, fbod, que es la relación de DBO5: BODU.

En términos de variables que contienen nitrógeno, el cálculo de las variables compuestas implica sumar varias variables de estado y multiplicar otras variables de estado por fracciones, según corresponda como se puede observar en la siguiente figura. El nitrógeno total Kjeldahl soluble (STKN) es la suma del amoníaco libre e ionizado (snh), el nitrógeno orgánico soluble biodegradable (snd) y (solo en el modelo biológico de lodos activados ASM3) los componentes nitrogenados del sustrato soluble (ss) y los inertes solubles (si). El nitrógeno total Kjeldahl particulado (XTKN) es el nitrógeno orgánico biodegradable particulado (xnd), más el

componente de nitrógeno de la biomasa (xbh y xba), productos celulares no biodegradables (xu), sustrato particulado (xs) y partículas inertes (xi). El nitrógeno total Kjeldahl (TKN) es la suma de TKN soluble (STKN) y particulado (XTKN). El nitrógeno total (TN) es la suma del TKN y el nitrógeno nitrato (sno).

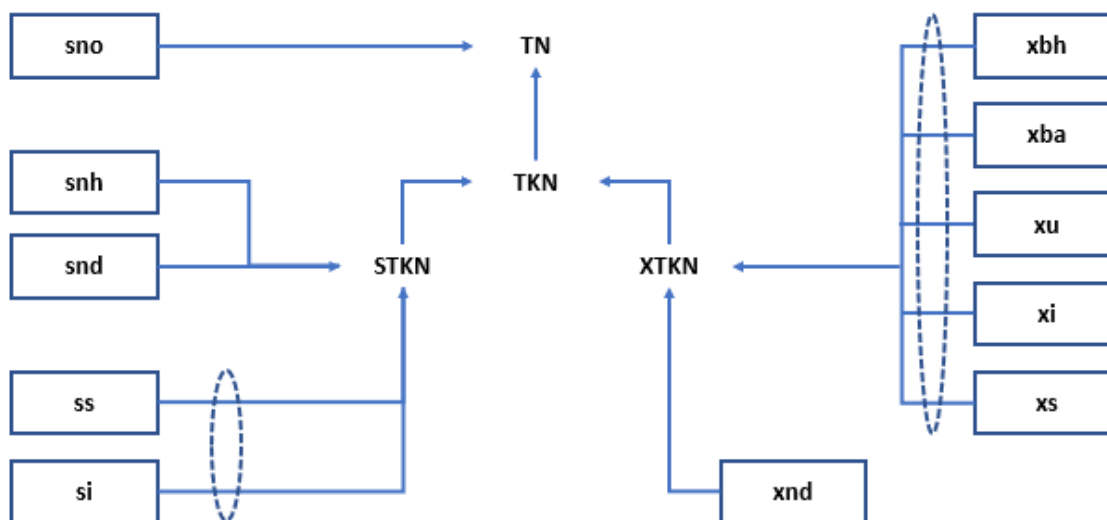


Fig. 3.14 Variables compuestas y su relación con las variables de estado (Manual GPS-X)

Función objetivo del modelo.

Una vez que se tiene el modelo se debe de establecer una función objetivo con la cual debe de cumplir el modelo, en este el objetivo principal del modelo es la mayor acumulación de polihidroxialcanoatos en los microorganismos presentes en el reactor biológico de lodos activados siempre y cuando la planta siga cumpliendo con su objetivo principal que es la remoción de contaminantes.

Nuestro modelo trabaja con el modelo de lodos activados ASM3 el cual es un arreglo matricial con el cual se forman ecuaciones diferenciales para cada uno de los procesos que se llevan a cabo, estas ecuaciones se resuelven de forma simultánea.

Los objetivos de este trabajo son analizar las condiciones de operación actuales de la planta y buscar las condiciones bajo las cuales se pueda tener una mayor bioacumulación.

La bioacumulación se puede determinar mediante la determinación del peso seco celular el cual se estima mediante la siguiente ecuación:

$$PSCAcum = \frac{PHA (mgL^{-1})}{SSV(mgL^{-1})}$$

Mediante este cálculo se obtiene el porcentaje de PHA dentro de la célula; es decir, una parte del peso de la célula es PHA, por esta razón no se expresa en términos de DQO. Los sólidos suspendidos volátiles (SSV) incluyen a la biomasa activa (X) y los PHA acumulados.

Otra manera de calcular el porcentaje de PHA acumulado y expresarlo en unidades de DQO acumulado se utiliza la siguiente expresión:

$$DQOacum = \frac{PHA(mgDQO/L)}{SSV(mgDQO/L)}$$

La expresión anterior da como resultado el índice de PHA presente por unidad de biomasa.

Análisis de Sensibilidad

Cuando se realizan predicciones utilizando cualquier modelo matemático existe incertidumbre debido a las suposiciones y simplificaciones hechas para el desarrollo del modelo. Esta incertidumbre es aún más significativa cuando se trata del modelado de procesos de tratamiento de aguas residuales, en gran medida estos modelos se vuelven más inciertos por las variaciones en los caudales, concentraciones de contaminantes y composición del influente. La duda dificulta la creación de un modelo matemático analítico que proporcione información útil y realista para facilitar la interpretación y toma de decisiones.

Según Brun (2012) existen parámetros de incertidumbre baja como lo son la mayoría de los parámetros estequiométricos, otros de incertidumbre media como los parámetros cinéticos (tasas de crecimiento o constantes de semi-saturación) y otros de incertidumbre alta como los parámetros relacionados con las fracciones del influente y para los cuales no se recomienda utilizar los valores mencionados en la literatura.

El análisis de sensibilidad es de gran importancia y utilidad ya que permite determinar como la variabilidad de las predicciones de una variable de salida del modelo puede ser adjudicada a unas cuantas variables de entrada. Como es muy complicado y costoso obtener todos los parámetros mediante análisis de laboratorio es posible utilizar valores sugeridos en la bibliografía sin que estos afecten los resultados(Wen *et al.*, 2010) Los parámetros que generalmente se utilizan en el análisis de sensibilidad son los parámetros matemáticos del modelo y la composición del influente. En algunas ocasiones también se incluyen variables de operación y parámetros físicos.

Si se modifican las condiciones de operación, la sensibilidad de los parámetros puede cambiar y por lo tanto este análisis se tiene que realizar antes de cada calibración. Por otra parte, las variables de salida en las que se basa este tipo de análisis son seleccionadas en función de los objetivos del modelo o de la disponibilidad y calidad de los datos que se tienen disponibles. Se calculan las funciones de sensibilidad de las variables con respecto a cada uno de los parámetros de entrada para concluir cuales son los más influyentes(Sin *et al.*, 2005).

Para llevar a cabo un análisis de sensibilidad global en el caso de modelos no lineales, suelen utilizarse métodos analíticos más complejos como al análisis de Monte Carlo o métodos basados en la varianza como Fourier, Feast, Morris, etc. Dado que los procesos biológicos de tratamiento son procesos no lineales, las funciones de sensibilidad dependen de la estructura del modelo y del punto de operación.

Uno de los métodos más utilizados es el de Monte Carlo, debe su nombre a que inicialmente fue desarrollado para analizar la aleatoriedad de los juegos de azar, uno de los principales retos al utilizar este método es identificar y caracterizar los parámetros de entrada, asignándoles un rango apropiado y distribución de probabilidad determinada. Posteriormente el análisis de sensibilidad consiste en realizar un determinado número de simulaciones del modelo con diferentes valores de los parámetros y variables de entrada y se comparan los resultados obtenidos con cada una de las simulaciones con los resultados experimentales. Finalmente,

se calcula el valor de una función objetivo como un índice de calidad del efluente que tenga en cuenta varias variables del mismo, la raíz de la suma ponderada de errores cuadráticos, los coeficientes de regresión estandarizados o el error medio absoluto. De esta manera se construye un ranking de sensibilidad de parámetros, de esta forma es posible seleccionar los valores de los parámetros que mejor describen los datos experimentales (Novak *et al.*, 2015).

Con el análisis de sensibilidad del modelo se busca identificar las variables que tienen mayor influencia en los procesos que se llevan a cabo con el modelo de lodos activados seleccionados y una vez identificados los parámetros que tienen mayor influencia se seleccionan los parámetros con los cuales se calibrará el modelo.

Calibración y validación del modelo digital.

La calibración consiste en determinar los valores de los parámetros del modelo que mejor describen el proceso real. Esto implica que algunos de los parámetros cuyos valores por defecto vienen dados en el modelo sean modificados con el propósito de ajustar los resultados de la simulación a un conjunto de datos obtenidos de la instalación a estudiar (Gernaey *et al.*, 2004). Por otra parte, también permite establecer el campo de validez del modelo, ya que se calibra y se verifica, pero puede no ser apropiado para condiciones demasiado alejadas para las cuales ha sido calibrado.

La calibración es uno de los principales pasos cuando se requiere utilizar un determinado modelo para simular una planta de tratamiento real, uno de los principales problemas que se tiene al modelar una planta es la falta de información inicial para poder realizar la simulación. Esta información generalmente no se encuentra disponible o solo puede determinarse mediante largos y costosos experimentos químicos, por lo cual es preferible estimar los parámetros necesarios para la calibración utilizando técnicas indirectas, cuando esto no es posible el uso de análisis de laboratorio, pueden estimarse ajustando su valor a los datos históricos de la planta mediante algoritmos matemáticos o valores de la literatura, pero para el uso de cualquiera se requiere un amplio conocimiento del modelo y del significado

de los parámetros, ya que modificar su valor sin ninguna razón puede llevar a grandes errores en los resultados obtenidos de la simulación (Petersen *et al.*, 2002).

Los criterios utilizados a la hora de calibrar un modelo son muy diversos, pero en general todos coinciden en que la estimación de parámetros finaliza cuando las funciones objetivo alcanzan un mínimo establecido. Las funciones suelen determinar la desviación de los resultados de las simulaciones con respecto a los datos experimentales. La calibración se puede basar en la minimización del valor de una función objetivo que tenga en consideración el valor de una o varias variables de salida, como un índice de calidad del efluente o índice de optimización de costos.

Las variables de salida comúnmente seleccionados para la calibración de modelos suelen coincidir con las variables seleccionadas para llevar a cabo el análisis de sensibilidad. No todos los trabajos de calibración se llevan a cabo de la misma manera y con la misma exigencia. Una de las reglas principales para la calibración es que solo unos pocos parámetros necesitan ser modificados para ajustar los resultados a los datos experimentales. Los parámetros no cambian drásticamente para diferentes sistemas de tratamiento de agua residual, de manera que si algún parámetro ya calibrado varía en gran medida, es indicador de error en el modelo. Si se tienen datos de buena calidad, las variables deben ajustarse entre el 5 y 20% en estado estacionario, se pueden tener desviaciones entre el 10 y 40%.

Una de las principales complicaciones es que se han dado diferentes aplicaciones a los modelos de lodos activados en instalaciones reales siguiendo diferentes protocolos de calibración, porque se utilizan diferentes métodos para la caracterización del agua residual, diversos métodos de estimación de parámetros cinéticos, diferente selección de parámetros a calibrar, etc. No hay un protocolo estandarizado para llevar a cabo un estudio de calibración, lo que hace difícil o casi imposible comparar diversos trabajos de calibración de ASMs entre sí y realizar las comprobaciones internas de la calidad de cada estudio de calibración.

En los últimos años se han propuesto protocolos de calibración sistemáticos que sirvan de guía para el modelado de sistema de lodos activos y para la calibración de modelos a escala real. En la tabla siguiente se realiza una extensa comparativa

entre los cuatro protocolos de calibración más conocidos y que discuten sobre las ventajas e inconvenientes de los protocolos de calibración desarrollados por los siguientes grupos de investigación: BIOMATH, HSG, STOWA y WERF.

Tabla 3.10 Protocolos para calibración de modelos biológicos de lodos activados.

	BIOMATH			STOWA			HSG			WERF											
AÑO	2003			2002			2004			2003											
ORIGEN	Gante (Bélgica)			Delft (Holanda)			Alemania, Austria y Suiza			USA y Canadá											
ETAPAS	1. Definición del objetivo de estudio.	2. Caracterización de la planta, verificación mediante balances y selección del modelo.	3. Calibración en estado estacionario (ajuste de la producción media de lodos y del consumo de oxígeno de la planta).	4. Calibración dinámica a partir de muestreo intensivo y validación con datos recogidos a diferentes condiciones.	1. Definición de objetivos.	2. Descripción de los procesos relevantes.	3. Recolección y verificación de datos utilizando balances, ajustes del SRT y de la recirculación.	4. Definir la estructura del modelo de la planta (hidráulica, aireación, etc.).	5. Cuantificar caudales.	6. Caracterización del influente basada en métodos físico-químicos y DBO.	7. Calibración manual de los parámetros biológicos uno a uno y validación.	1. Definición de objetivos.	2. Recolección de datos y selección del modelo.	3. Control de calidad de los datos de planta utilizando balances.	4. Evaluación de la estructura del modelo y diseño de experimentos tras un análisis de sensibilidad.	5. Recolección de datos dinámicos (10 días con al menos un fin de semana).	6. Calibración dinámica mediante un procedimiento iterativo y validación.	1. Introducir la configuración de la planta en el simulador.	2. Recoger datos adicionales: datos históricos y nuevas medidas a escala real y laboratorio.	3. Calibración según el nivel seleccionado.	4. Validación: cuando la validación es exitosa, el modelo esta listo para su aplicación.
ENFOCADO A	La identificación del submodelo biológico (caracterización del influente y estimación de parámetros de los procesos biológicos: respirometría)			Caracterización biológica y de sedimentación, pero pocos detalles sobre la caracterización hidráulica.			Es el único protocolo que propone realizar informes del estudio global de calibración.			Presenta métodos experimentales detallados para la caracterización del influente y fraccionamiento de la biomasa activa, con											

			pocas explicaciones sobre la caracterización hidráulica y de sedimentación.
OBSERVACIONES	Orientado a emplear métodos científicos mas exactos en vez de métodos mas empíricos. Es el protocolo más sofisticado y difícil para nuevos modeladores.	No se incorporan en su esquema ciclos hacia atrás, por lo que no hay comprobaciones internas de cada paso si fuera necesario.	Al igual que el protocolo de STOWA, es atractivo para modeladores sin experiencia y consultores.

Todos los protocolos tienen cosas en común; comienzan con una definición del objetivo de la calibración y enfatizan la importancia de comprobar y verificar la calidad de los datos, y se requiere de una etapa de validación después de la calibración. También tienen ciertas diferencias, como los métodos experimentales para determinar la caracterización del influente, la estimación de parámetros cinéticos y estequiométricos o el diseño de una campaña dinámica de medidas (Arcos-Hernández *et al.*, 2012).

A pesar de que estos protocolos son un punto de partida para la unificación de un solo protocolo estandarizado de calibración, aun es necesario enfrentarse a varios desafíos. Con el propósito de confirmar la aplicabilidad del modelo ya calibrado, es necesario realizar una validación para comprobar que la predicción del modelo frente a datos diferentes a los utilizados para la calibración de un ajuste de calidad. En caso de que el modelo calibrado falle en las predicciones, es recomendable iterar los pasos de la calibración considerando alternativas como:

- ▲ Modificar la estructura del modelo.
- ▲ Realizar estudios de trazabilidad para tener una buena caracterización hidráulica o implementar un modelo de sedimentación más complejo.
- ▲ Realizar experimentos más específicos de laboratorio para la cuantificación de la actividad de la biomasa en condiciones anóxicas, anaerobias y aerobias.

Simulación del reactor biológico de lodos activados.

Una vez que se tiene el modelo de la planta de tratamiento de agua residual alimentado se deben de realizar diferentes simulaciones del modelo variando los valores de los parámetros para saber cuáles de ellos tienen mayor influencia en el modelo. Una vez que se tienen identificados los parámetros que son más sensibles se ajustan para que los resultados de las simulaciones sean lo más cercanos a los valores reales de la planta de tratamiento de agua residual.

Cuando los valores ajustados proporcionen resultados similares a los valores medidos en la planta nuestro modelo estará calibrado y será capaz de proporcionar resultados fiables de las variables que se están estudiando.

4. RESULTADOS

Se generó el modelo con los elementos que está diseñada la planta de tratamiento de agua residual y se realizaron diferentes simulaciones, de las primeras simulaciones que se realizaron fueron con los valores de default del software, especificando únicamente las dimensiones de cada uno de los elementos y parámetros generales de la planta de tratamiento de agua residual como lo es la temperatura, valores máximos y mínimos de la concentración del licor mezclado entre otros.

Cuando se generó el modelo se tomó la decisión de trabajar con valores medios de caudal ya que son los más representativos de la planta de tratamiento de agua residual.

En las siguientes imagenes se muestran los resultados de las simulaciones con los datos de default del software, se muestran los valores obtenidos para el influente y el efluente del modelo, con los parámetros de default la descarga cumple perfectamente con lo establecido en la NOM-001-SEMANART-1996, por lo cual se espera se mantengan los valores dentro de los rangos permitidos al modificar los parámetros cinéticos y estequiométricos para los fines que se ha desarrollado el modelo.

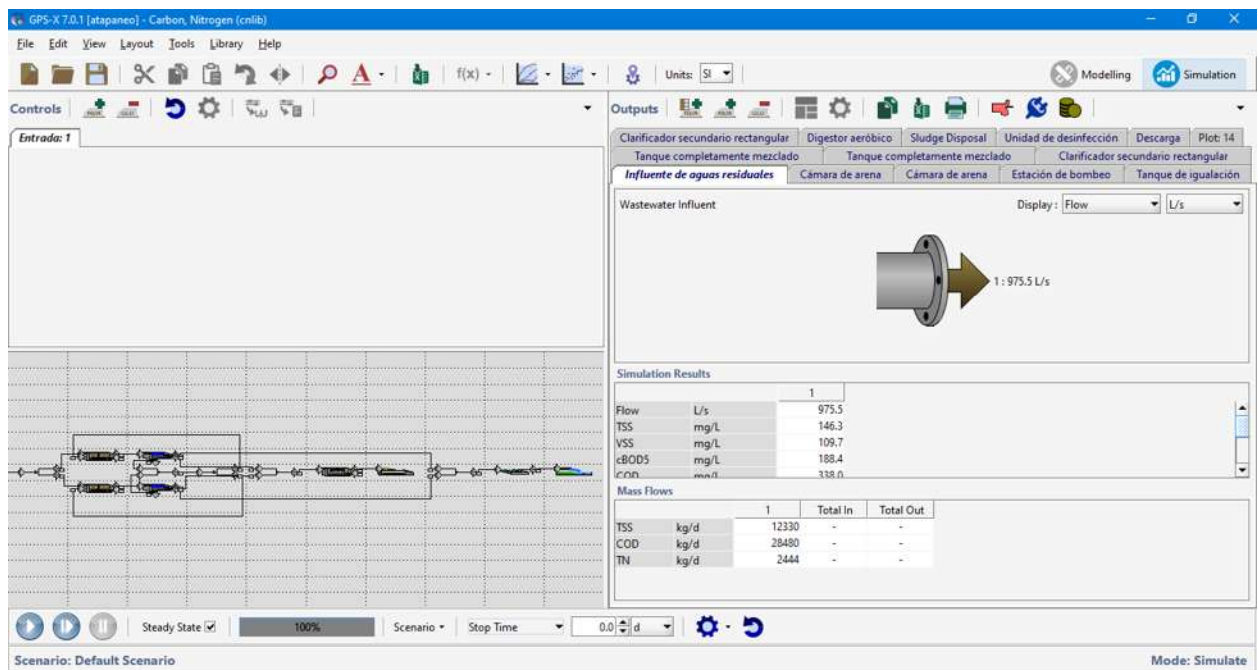


Fig. 4.1 Resultados de la modelación para el influente del modelo.

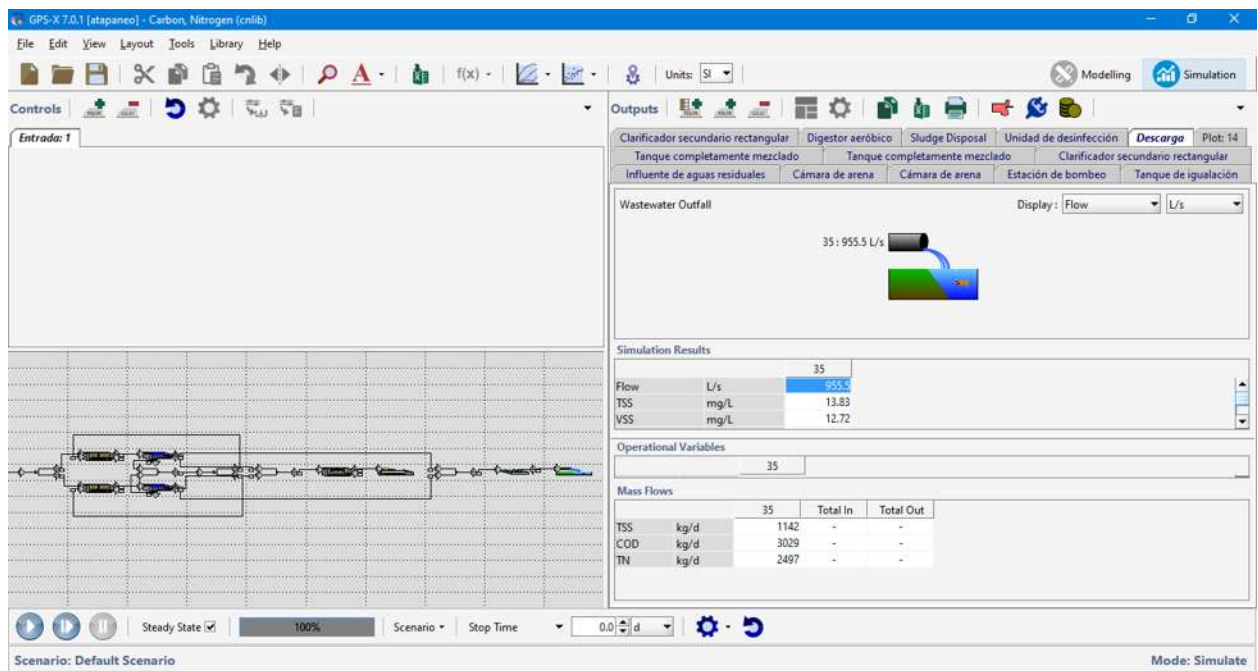


Fig. 4.2 Resultados de la modelación para el efluente del modelo.

El software tiene una herramienta en la cual podemos observar los volúmenes de cada uno de los elementos del modelo y calcula el balance de masa y es fácilmente observable los posibles errores del modelo.

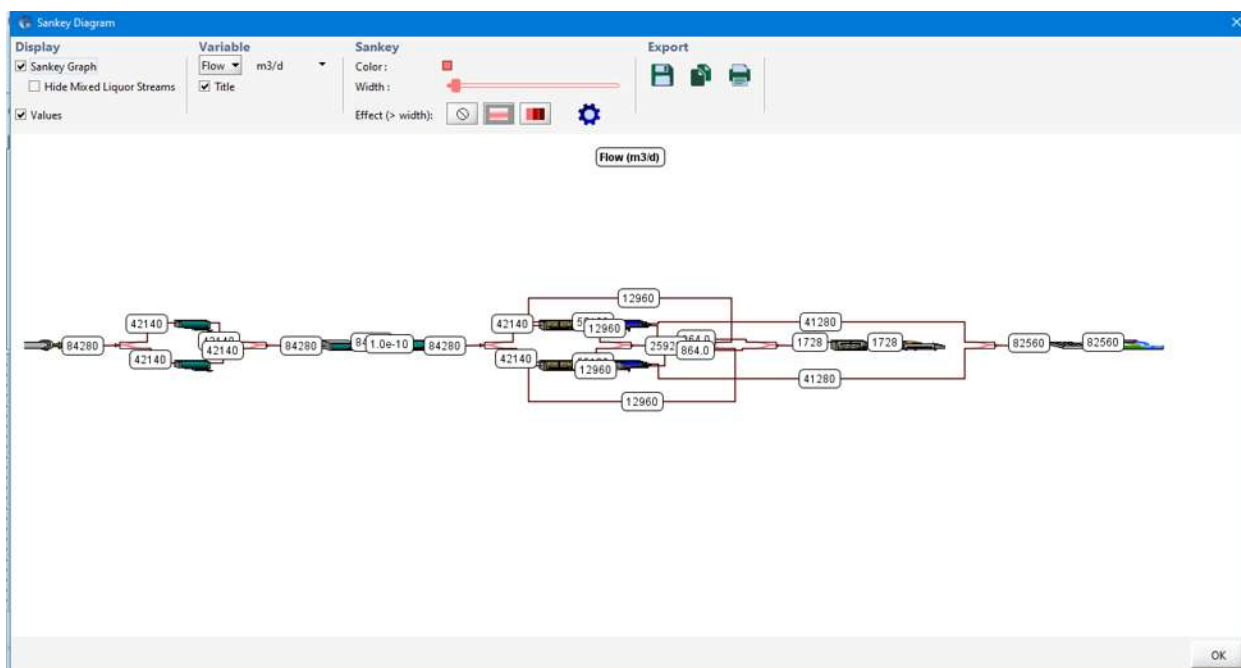


Fig. 4.3 Vista general del modelo con los volúmenes de los elementos.

Al momento de comenzar a variar los valores de los parámetros que se tienen medidos en la planta y los establecidos en la literatura se han tenido algunas complicaciones, los valores que se tienen medidos en la planta al momento de ingresarlos para la caracterización del modelo en el Influent Advisor son muy bajos y los indica como errores por lo cual se han tenido que modificar los valores para que sean aceptados por el modelo. La variación de los valores medidos en la planta con los valores utilizados para la caracterización del influente es de 0.5 con respecto a los medidos el error que genera esta variación del modelo es mínima en esta parte del proceso aún falta variar los parámetros para la calibración del modelo.

El caudal utilizado fue el medio correspondiente a los parámetros utilizados. En la Tabla 4.1 Valores comparativos del modelo. se muestran los datos que se utilizaron para la caracterización del efluente y los resultados obtenidos con los valores de default del software.

Tabla 4.1 Valores comparativos del modelo.

Valores de Efluente				
Parámetro	Unidades	Medido en la Planta	Resultado de la Simulación	Diferencia (%)

DQO	mg/l	63.70	36.70	42.39
SST	mg/l	34.40	13.83	59.80
N Total	mg/l	6.68	6.51	2.60

Las diferencias porcentuales de los valores obtenidos con la simulación son muy grandes por lo cual se tienen que modificar los parámetros hasta lograr un mejor ajuste, los valores obtenidos de la simulación cumplen con los valores establecidos por la NOM-001-SEMARNAT-1996 sin embargo, se requiere que los valores de la simulación sean similares a los valores medidos en la planta para considerar que el modelo esta calibrado y enseguida se valida el modelo con nuevos valores medidos en la planta de esta forma aseguramos que el modelo es confiable.

Después de hacer una primera simulación con los valores de default se modificaron los valores del fraccionamiento de la DQO, se utilizaron valores de la literatura sugeridos ya que no se cuenta con todos los datos necesarios para poder llevar a cabo los cálculos necesarios y establecer los valores correspondientes para las condiciones de operación de la planta de tratamiento con la cual se está trabajando.

El fraccionamiento de la DQO del modelo quedo como se muestra en la Tabla 4.2 Fracciones orgánicas:

Tabla 4.2 Fracciones orgánicas de DQO

Nomenclatura	Definición	Valor
frsi	Fracción soluble inerte de DQO	0.065
frss	Fracción fácilmente biodegradable de DQO	0.435
frxi	Fracción particulada inerte de DQO	0.080

Una vez que se caracterizó el influente completamente se realizó el análisis de sensibilidad para determinar los parámetros que tienen mayor influencia en el modelo biológico de la planta de tratamiento con el que se está trabajando, del análisis de sensibilidad se determinó que los parámetros que se mencionan a continuación son los que nos permitían realizar la calibración del mismo.

Parámetros estequiométricos

- Coeficiente de crecimiento aeróbico en el producto almacenado.
- Coeficiente de crecimiento anóxico en el producto almacenado.

Parámetros cinéticos

- Biomasa heterótrofa activa
 - Coeficiente de saturación media de nitrato
 - Coeficiente de saturación media de sustrato fácilmente biodegradable
 - Coeficiente de saturación media de amonio como nutriente
 - Tasa de respiración aerobia endógena heterótrofa
 - Tasa de respiración anoxica endógena heterótrofa
 - Tasa de respiración del producto de almacenamiento interno aerobio
 - Tasa de respiración del producto de almacenamiento interno anóxico
- Biomasa autótrofa activa
 - Coeficiente de saturación del amonio como sustrato

Una vez que los parámetros que se modificaron para que nuestro modelo se ajustara a las condiciones de operación de la planta de tratamiento comparamos los resultados obtenidos de la simulación con los medidos en la PTAR hasta que obtuvimos la mejor aproximación.



Fig. 4.4 Comparativa de parámetros físico-químicos

En el grafico que se aprecia en la Fig. 4.4 Comparativa de parámetros físico-químicos se puede apreciar la diferencia de cada uno de los parámetros los colores más fuertes son los que representan a los valores medidos en la PTAR y los colores más tenues son los que representan los valores obtenidos en la simulación del modelo en el software GPS-X. El parámetro que tiene mayor discrepancia el de los Sólidos Suspendidos Totales, pero lo consideramos como correcto ya que se encuentra dentro de los límites máximos permisibles por las Normas Mexicanas, así mismo, el valor de la simulación es menor al valor medido en la PTAR.

Como nuestros parámetros ya son muy similares consideramos que el modelo se encuentra calibrado y realizamos otras simulaciones para validar el mismo. Para la validación No.1 utilizamos los datos de la planta correspondientes al periodo de Nov-Dic y para la validación No.2 se tomaron los datos correspondientes al periodo de Feb-Mar.

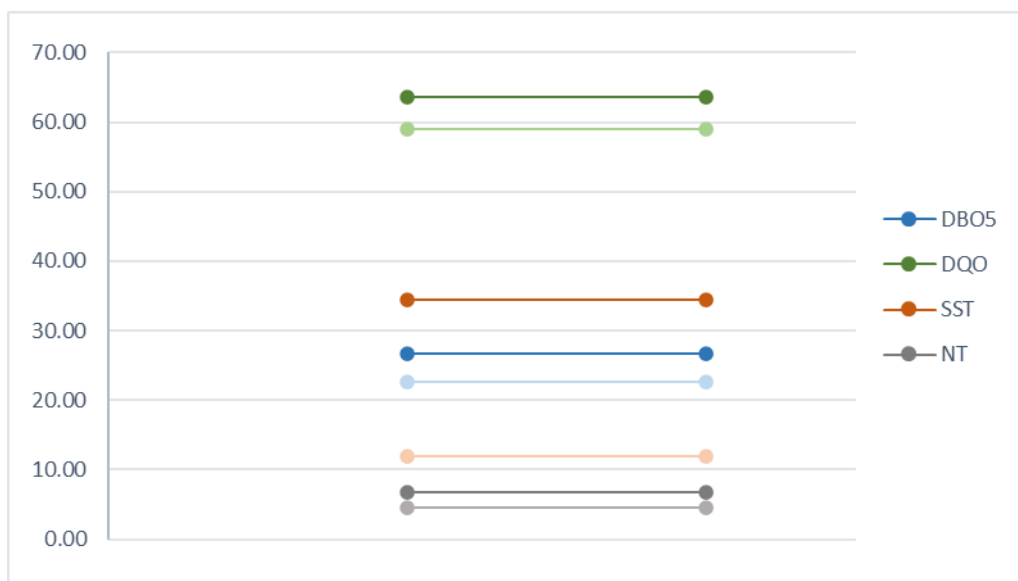


Fig. 4.5 Comparativa de resultados de la primera validación

En el grafico que se observa de la Fig. 4.5 Comparativa de resultados de la primera validación se puede observar que existe un poco más de diferencia entre los parámetros medidos y los resultados de la simulación, esto se debe a que en el periodo de datos que se utilizaron el gasto medio fue mayor y los valores de los parámetros físico químicos utilizados para la caracterización del influente son muy similares a los valores utilizados para calibrar el modelo, por la tanto las variaciones son un poco más grandes pero son aceptables siguen estando dentro de lo permitido.

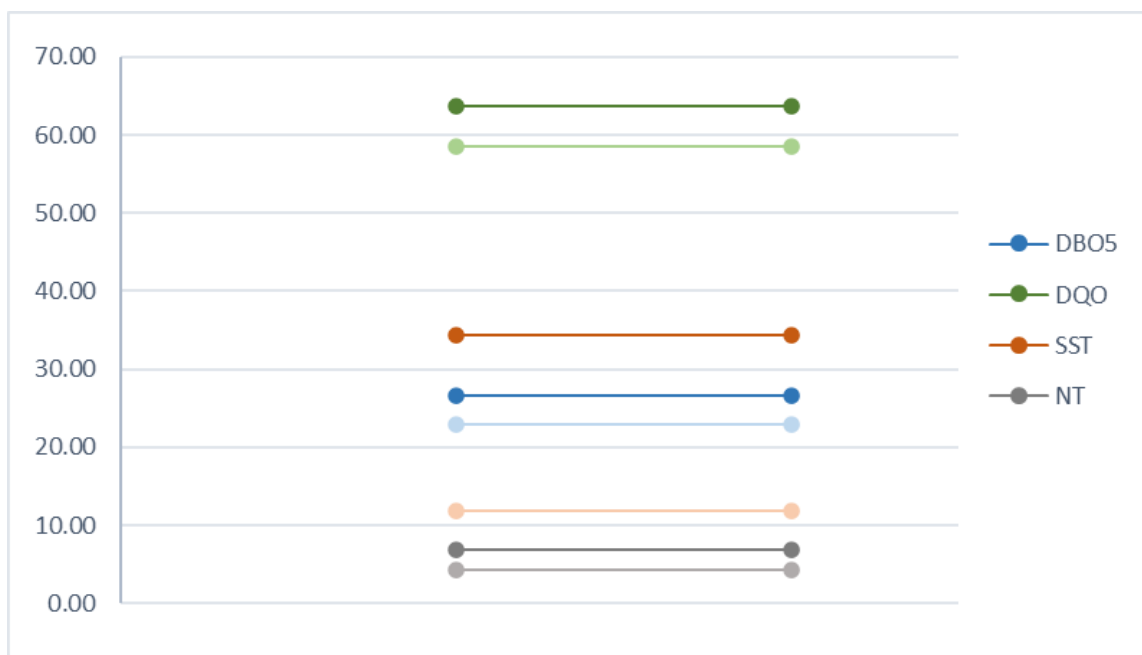


Fig. 4.6 Comparativa de resultados de la segunda validación

En el gráfico de la Fig. 4.6 Comparativa de resultados de la segunda validación se puede observar que las variaciones de los parámetros medidos y los parámetros obtenidos de la simulación en el software son muy similares a los obtenidos de la primera validación. Los valores continúan estando dentro de los valores permitidos y se cumple con lo establecido en la NOM-001-SEMARNAT-1996.

Con estas condiciones de operación la PTAR opera con una carga orgánica de 1.065 kg/DQO/KgMLVSS*d y una recirculación mínima de 150 l/s lo cual permite que los microorganismos presentes en el reactor biológico tengan una bioacumulación del 33% de DQOacum.

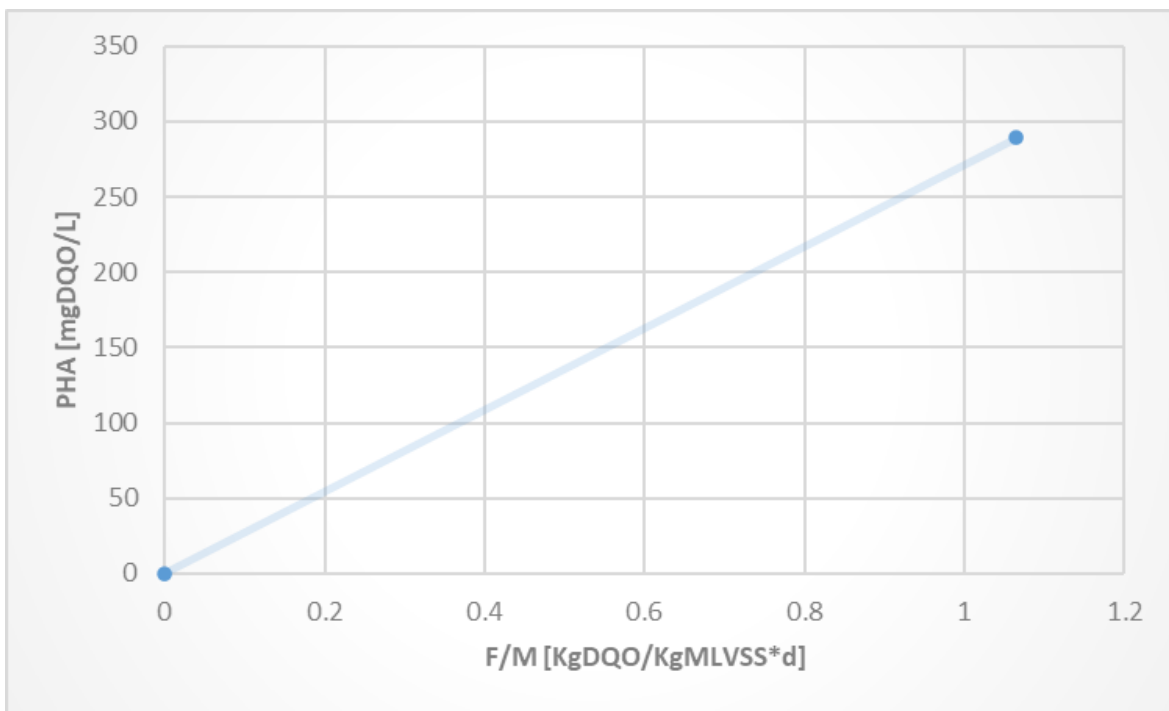


Fig. 4.7 Bioacumulación en condiciones de operación actuales

En el gráfico de la Fig. 4.7 Bioacumulación en condiciones de operación actuales podemos observar la capacidad de acumulación de los microorganismos presentes en el reactor biológico de lodos activados de la planta de tratamiento de agua residual, ya que se tiene este parámetro definido comenzamos a variar la carga orgánica para observar cómo varía la bioacumulación y la remoción de contaminantes.

Para variar la carga orgánica se cambia el gasto de recirculación del sedimentador secundario al reactor biológico de lodos activados, las primeras simulaciones se hacen aumentando el gasto de recirculación 10 L/s en cada simulación.

Los datos que se modificaron en cada simulación y los datos que se obtuvieron se muestran en la Tabla 4.3 Variaciones de F/M variando el Q_R en la cual se puede observar que al aumentar el gasto de recirculación de lodos se incrementa el sustrato en el reactor biológico por lo cual la relación de alimento/microorganismos va disminuyendo (F/M) y el porcentaje de bioacumulación va incrementando, es importante mencionar que al incrementar la bioacumulación aumenta la remoción de contaminantes y mejora la calidad del efluente de la planta de tratamiento.

Tabla 4.3 Variaciones de F/M variando el Q_R

Q_R	F/M	PHA	DQO _{ef}	DQO _{acum} (%)
150.0 l/s	1.065 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	289.1 mgDQO/L	58.63 mg/L	0.3332
160.0 l/s	1.026 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	309 mgDQO/L	57.65 mg/L	0.3431
170.0 l/s	0.991 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	327.6 mgDQO/L	56.79 mg/L	0.3516
180.0 l/s	0.964 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	340.1 mgDQO/L	55.98 mg/L	0.3549
190.0 l/s	0.938 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	354.6 mgDQO/L	55.33 mg/L	0.3600

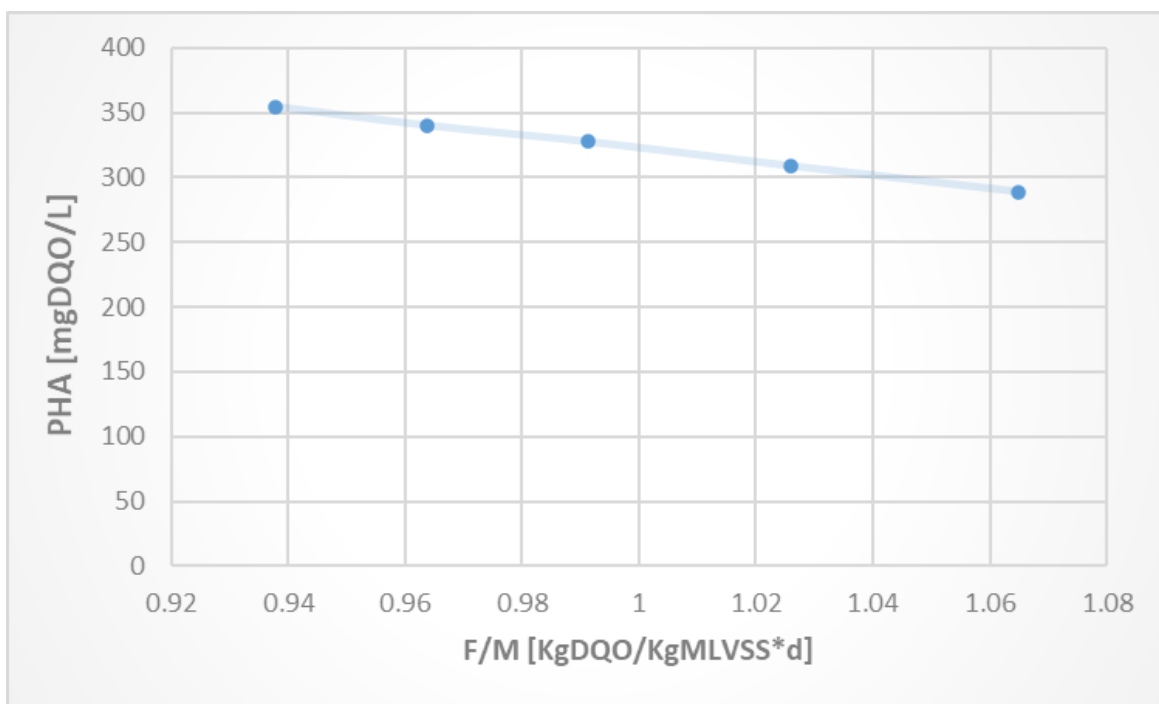


Fig. 4.8 Variación de la relación F/M

En el gráfico de la Fig. 4.8 Variación de la relación F/M se puede observar de forma más clara que si la relación F/M va incrementando el producto de almacenamiento interno (PHA) va disminuyendo, a partir de esta grafica podemos deducir que si se incrementa el sustrato carbonáceo en el reactor biológico mediante el incremento del gasto de recirculación los microorganismos están bajo condiciones de estrés por lo cual incrementa su capacidad de almacenamiento.

Otra forma de variar la relación F/M en el reactor es mediante la purga de lodos activados, para las próximas simulaciones del sistema de operación de la planta de tratamiento se variaron los gastos de recirculación (Q_R) y el gasto de la purga de lodos (Q_w).

En la Tabla 4.4 Variación de la relación F/M modificando el Q_R y el Q_w se puede observar los valores de los gastos que se utilizaron en cada simulación y los resultados que se obtuvieron de cada una de ellas.

Tabla 4.4 Variación de la relación F/M modificando el Q_R y el Q_w

Q_R	Q_w	F/M	PHA	DQO _{ef}	Lodo	SSV	DQO _{acum} (%)
150 l/s	7 l/s	0.811 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	445 mgDQO/L	52.69 mg/L	1210 m3/d	1139 mgDQO/L	0.3906
170 l/s	8 l/s	0.838 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	423.5 mgDQO/L	53.25 mg/L	1382 m3/d	1102 mgDQO/L	0.3843
190 l/s	9 l/s	0.864 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	405.8 mgDQO/L	53.8 mg/L	1555 m3/d	1069 mgDQO/L	0.3796
210 l/s	10 l/s	0.891 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	382.8 mgDQO/L	54.24 mg/L	1728 m3/d	1036 mgDQO/L	0.3694
250 l/s	10 l/s	0.817 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	439.2 mgDQO/L	52.77 mg/L	1728 m3/d	1130 mgDQO/L	0.3886
300 l/s	12 l/s	0.864 KgDBO ₅ /kgMLVSS*d	401.8 mgDQO/L	53.65 mg/L	2074 m3/d	1130 mgDQO/L	0.3555
350 l/s	14 l/s	0.91 Kg DBO ₅ /kgMLVSS*d	372 mgDQO/L	54.62 mg/L	2419 m3/d	1015 mgDQO/L	0.3665

A partir de los resultados obtenidos podemos observar que con el gasto de recirculación (Q_R) y el gasto de purga de lodos (Q_w) mínimos se obtiene la mayor bioacumulación y la mejor calidad del efluente en la planta de tratamiento, el lodo residual disminuye. No es deseable que se recircule una gran cantidad de lodos residuales ya que no mejorarán la eficiencia del sistema; la mayoría de los microorganismos presentes en la biomasa estarán muertos.

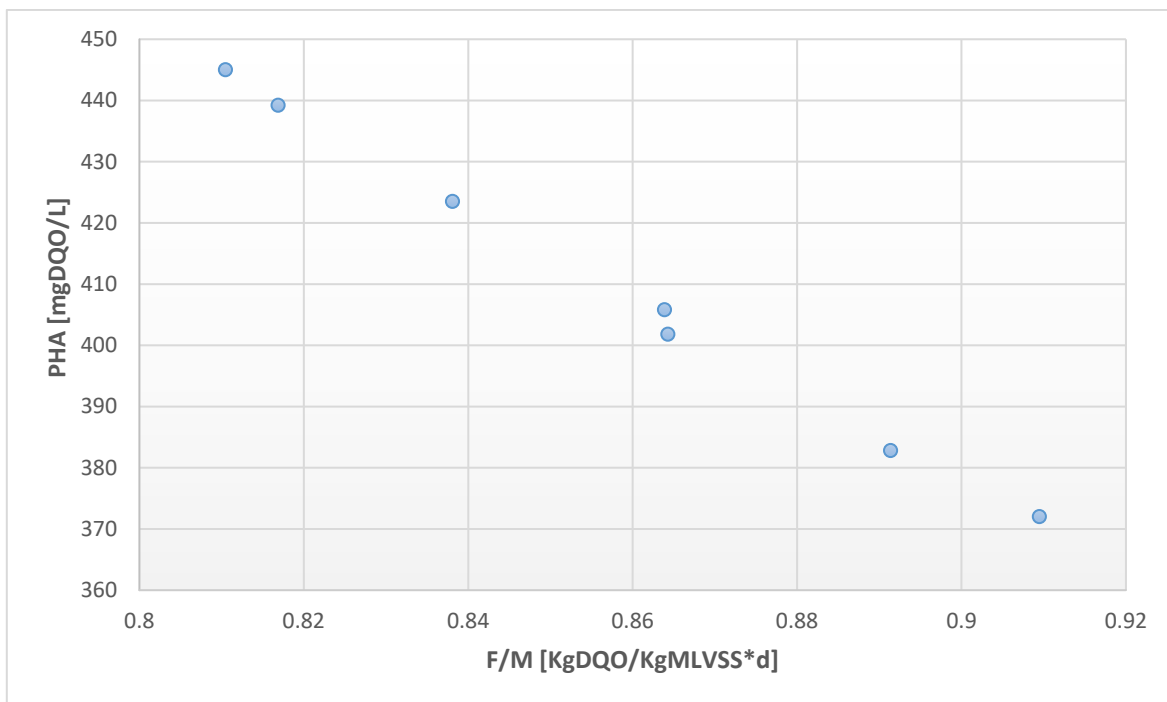


Fig. 4.9 Relación F/M y su bioacumulación

En la gráfica de la Fig. 4.9 Relación F/M y su bioacumulación podemos observar que aun modificando el gasto de recirculación y el gasto de la purga de lodos residuales cuando las relaciones alimento/microorganismos es baja existe una mayor bioacumulación y mejora la calidad del efluente de la planta de tratamiento.

5. CONCLUSIONES

El proceso de simulación de la planta de tratamiento de agua residual con el software GPS-X como herramienta para resolver el modelo matemático de lodos activados ASM3 fue muy fructífero, permitió analizar diferentes condiciones de operación con la finalidad de visualizar el comportamiento del sistema de tratamiento, así como su eficacia en la remoción de los contaminantes, el propósito principal de las simulaciones fue determinar la influencia que tenía la relación alimento/microorganismos en la acumulación de biopolímeros intracelularmente por los microorganismos. Contrario a lo que se tenía en la hipótesis del trabajo se determinó que mientras más baja sea la relación F/M en el reactor biológico de lodos activados mayor será la capacidad de bioacumulación de los microorganismos e incrementar la eficiencia en la remoción de contaminantes, cumpliendo el objetivo principal de la planta de tratamiento y con lo establecido en la normatividad.

Por otra parte pudimos comprobar que se puede utilizar un sustrato de bajo costo como fuente de carbono, los microorganismos de la planta de tratamiento bajo las condiciones actuales de operación son capaces de bioacumular hasta un 33% de su peso seco y la modificar la relación F/M estos son capaces de aumentar la bioacumulación hasta un 39% de su peso seco, tal vez no sea una gran diferencia comparado con lo que se logra bioacumular en cultivos puros bajo estrictas condiciones de operación pero considerando que en los cultivos mixtos no se pueden controlar todos los parámetros físico-químicos y biológicos tan estrictamente es una buena mejora.

Para determinar cuáles condiciones de operación son las mejores para que el sistema de tratamiento funcione adecuadamente y además los microorganismos tengan una mejor bioacumulación se realizaron diversas simulaciones en las cuales se variaron los gastos de recirculación y los gastos de purga de lodos y de esta forma se variaba la relación F/M en el reactor biológico, de los resultados de las simulaciones se puede determinar que con una recirculación del 25% del caudal

una purga de lodos 10l/s se mantienen las condiciones adecuadas para la biomasa en el reactor biológico incrementando la bioacumulación y la calidad del efluente.

Al variar la relación F/M únicamente con las condiciones de operación de la planta de tratamiento evitamos incrementar los gastos de operación de esta dado que existen otros métodos para incrementar o disminuir la relación F/M como, por ejemplo:

La disminución o aumento de la aireación; estos cambios constantes y frecuentes pueden ser perjudiciales para el sistema.

La adición de un sustrato carbonáceo es otra manera de modificar la relación F/M, pero esta resulta ser costosa y en algunos casos peligrosa por utilizarse químicos difíciles de manejar.

6. REFERENCIAS

- Arcos-Hernandez, M. V., Laycock, B., Pratt, S., Donose, B. C., Nikolić, M. A. L., Luckman, P., ... Lant, P. A. (2012). Biodegradation in a soil environment of activated sludge derived polyhydroxyalkanoate (PHBV). *Polymer Degradation and Stability*, 97(11), 2301–2312. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2012.07.035>
- Bugnicourt, E., Cinelli, P., Lazzeri, A., & Alvarez, V. (2014). *Polyhydroxyalkanoate (PHA): Review of synthesis , characteristics , processing and potential applications in packaging*. 8(11), 791–808. <https://doi.org/10.3144/expresspolymlett.2014.82>
- Burniol-figols, A., Varrone, C., Balzer, S., Egede, A., Skiadas, I. V., & Gavala, H. N. (2018). Combined polyhydroxyalkanoates (PHA) and 1 , 3-propanediol production from crude glycerol : Selective conversion of volatile fatty acids into PHA by mixed microbial consortia. *Water Research*, 136, 180–191. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2018.02.029>
- Burniol-figols, A., Varrone, C., Egede, A., Balzer, S., Skiadas, I. V., & Gavala, H. N. (2018). Polyhydroxyalkanoates (PHA) production from fermented crude glycerol: Study on the conversion of 1 , 3-propanediol to PHA in mixed microbial consortia. *Water Research*, 128, 255–266. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.10.046>
- Cha, S. H., Son, J. H., Jamal, Y., Zafar, M., & Park, H. S. (2016). Characterization of polyhydroxyalkanoates extracted from wastewater sludge under different environmental conditions. *Biochemical Engineering Journal*, 112, 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2015.12.021>
- Chanprateep, S. (2010). Current trends in biodegradable polyhydroxyalkanoates. *Journal of Bioscience and Bioengineering*, 110(6), 621–632. <https://doi.org/10.1016/j.jbiosc.2010.07.014>
- Duarte Torres, A. (1996). Evaluación de los parámetros cinéticos de la ecuación de Monod. *Ingeniería e Investigación*, 0(33), 123–138.
- Gao, F., Nan, J., Li, S., & Wang, Y. (2018). Modeling and simulation of a biological process for treating different COD:N ratio wastewater using an extended ASM1 model. *Chemical Engineering Journal*, 332(July 2017), 671–681. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.09.137>
- García, Y. G., Carlos, J., Contreras, M., Reynoso, O. G., & Córdova, A. (2013). Síntesis y Biodegradación de Polihidroxialcanoatos:Plásticos de Origen Microbiano. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 29(1), 77–115.
- Gernaey, K. V., Van Loosdrecht, M. C. M., Henze, M., Lind, M., & Jørgensen, S. B. (2004). Activated sludge wastewater treatment plant modelling and simulation: State of the art. *Environmental Modelling and Software*, 19(9), 763–783. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2003.03.005>
- Gonzalez García, Y., Meza Contreras, J. C., González Reynoso, O., & Córdova López, J. A. (2013). Synthesis and biodegradation of polyhydroxialcanoates: Bacterially produced plastics. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 29(1), 77–115. Retrieved from http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0188-49992013000100007
- Guerra-Blanco, P., Cortes, O., Poznyak, T., Chairez, I., & García-Peña, E. I. (2018). Polyhydroxyalkanoates (PHA) production by photoheterotrophic microbial consortia: Effect of culture conditions over microbial population and biopolymer yield and composition. *European Polymer Journal*, 98(November 2017), 94–104. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2017.11.007>
- Gujer, W. (n.d.). *IWA TASK GROUP ON MATHEMATICAL MODELLING FOR DESIGN AND*.
- Huang, L., Chen, Z., Wen, Q., Zhao, L., Lee, D., Yang, L., & Wang, Y. (2018). Insights into Feast-

- Famine polyhydroxyalkanoate (PHA) -producer selection : Microbial community succession , relationships with system function and underlying driving forces. *Water Research*, 131, 167–176. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.12.033>
- Hulsbeek, J. J. W., Kruit, J., Roeleveld, P. J., & Van Loosdrecht, M. C. M. (2002). A practical protocol for dynamic modelling of activated sludge systems. *Water Science and Technology*.
- Kumar, M., Ghosh, P., Khosla, K., & Thakur, I. S. (2018). Recovery of polyhydroxyalkanoates from municipal secondary wastewater sludge. *Bioresource Technology*, 255(December 2017), 111–115. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2018.01.031>
- Marang, L., Jiang, Y., Loosdrecht, M. C. M. Van, & Kleerebezem, R. (2014). International Journal of Biological Macromolecules Impact of non-storing biomass on PHA production : An enrichment culture on acetate and methanol. *International Journal of Biological Macromolecules*, 71, 74–80. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2014.04.051>
- Marco, A., Esplugas, S., & Saum, G. (1997). How and why combine chemical and biological processes for wastewater treatment. *Water Science and Technology*, 35(4), 321–327. [https://doi.org/10.1016/S0273-1223\(97\)00041-3](https://doi.org/10.1016/S0273-1223(97)00041-3)
- Moita Fidalgo, R., Ortigueira, J., Freches, A., Pelica, J., Gonçalves, M., Mendes, B., & Lemos, P. C. (2014). Bio-oil upgrading strategies to improve PHA production from selected aerobic mixed cultures. *New Biotechnology*, 31(4), 297–307. <https://doi.org/10.1016/j.nbt.2013.10.009>
- Montiel-jarillo, G., Carrera, J., & Suárez-ojeda, M. E. (2017). Science of the Total Environment Enrichment of a mixed microbial culture for polyhydroxyalkanoates production : Effect of pH and N and P concentrations. *Science of the Total Environment*, 583, 300–307. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.01.069>
- Morgan-Sagastume, F., Hjort, M., Cirne, D., Gérardin, F., Lacroix, S., Gaval, G., ... Werker, A. (2015). Integrated production of polyhydroxyalkanoates (PHAs) with municipal wastewater and sludge treatment at pilot scale. *Bioresource Technology*. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2015.01.046>
- Novak, M., Koller, M., Braunegg, G., & Horvat, P. (2015). *Mathematical Modelling as a Tool for Optimized PHA Production*. 29(2), 183–220. <https://doi.org/10.15255/CABEQ.2014.2101>
- Pell, M., & Wörman, A. (2011). Biological Wastewater Treatment Systems. In *Comprehensive Biotechnology, Second Edition*. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-088504-9.00381-0>
- Petersen, B., Vanrolleghem, P. A., Gernaey, K., & Henze, M. (2002). Evaluation of an ASM1 model calibration procedure on a municipal–industrial wastewater treatment plant. *Journal of Hydroinformatics*, 4(1), 15–38. <https://doi.org/10.2166/hydro.2002.0003>
- Righi, S., Baioli, F., Samori, C., Galletti, P., Tagliavini, E., Stramigioli, C., ... Fantke, P. (2017). A life cycle assessment of poly-hydroxybutyrate extraction from microbial biomass using dimethyl carbonate. *Journal of Cleaner Production*, 168, 692–707. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2017.08.227>
- Rodriguez-Perez, S., Serrano, A., Panti6n, A. A., & Alonso-Fari6as, B. (2018). Challenges of scaling-up PHA production from waste streams. A review. *Journal of Environmental Management*, 205, 215–230. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2017.09.083>
- Scott, J. P., & Ollis, D. F. (1995). Integration of chemical and biological oxidation processes for water treatment: Review and recommendations. *Environmental Progress*. <https://doi.org/10.1002/ep.670140212>
- Sharma, P., & Bajaj, B. K. (2015). Production and characterization of poly-3-hydroxybutyrate from *Bacillus cereus* PS 10. *International Journal of Biological Macromolecules*, 81, 241–248. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2015.08.008>
- Sin, G., Van Hulle, S. W. H., De Pauw, D. J. W., Van Griensven, A., & Vanrolleghem, P. A. (2005). A

- critical comparison of systematic calibration protocols for activated sludge models: A SWOT analysis. *Water Research*, 39(12), 2459–2474. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2005.05.006>
- Valero-Valdivieso, M., Ortegon, Y., & Uscategui, Y. (2013). Biopolímeros: Avances Y Perspectivas Biopolymers: Progress and Prospects. *SciELO Colombia*, 171–180. Retrieved from <http://www.revistas.unal.edu.co/index.php/dyna/article/viewFile/20642/42269>
- Vázquez-Mejía, G., Ortega-Aguilar, R. E., Esparza-Soto, M., & Fall, C. (2013). Fraccionamiento de DQO del agua residual de Toluca por el protocolo STOWA. *Tecnología y Ciencias Del Agua*, 4(2), 21–35.
- Volova, T. G., Gladyshev, M. I., Trusova, M. Y., & Zhila, N. O. (2007). Degradation of polyhydroxyalkanoates in eutrophic reservoir. *Polymer Degradation and Stability*, 92(4), 580–586. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2007.01.011>
- Wen, Q., Chen, Z., Tian, T., & Chen, W. (2010). Effects of phosphorus and nitrogen limitation on PHA production in activated sludge. *Journal of Environmental Sciences*, 22(10), 1602–1607. [https://doi.org/10.1016/S1001-0742\(09\)60295-3](https://doi.org/10.1016/S1001-0742(09)60295-3)
- Yeber, M. C. (1999). compounds that come from the lignin degradation . These compounds are responsible for the strong color of the effluent and are very difficult to degrade [3]. We have previously studied the degradation of a pulp mill effluent using photocatalysis [4 , 5. *Chemosphere*, 39(10), 1679–1688.

ANEXOS

A. DIAGRAMAS DE LA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA RESIDUAL

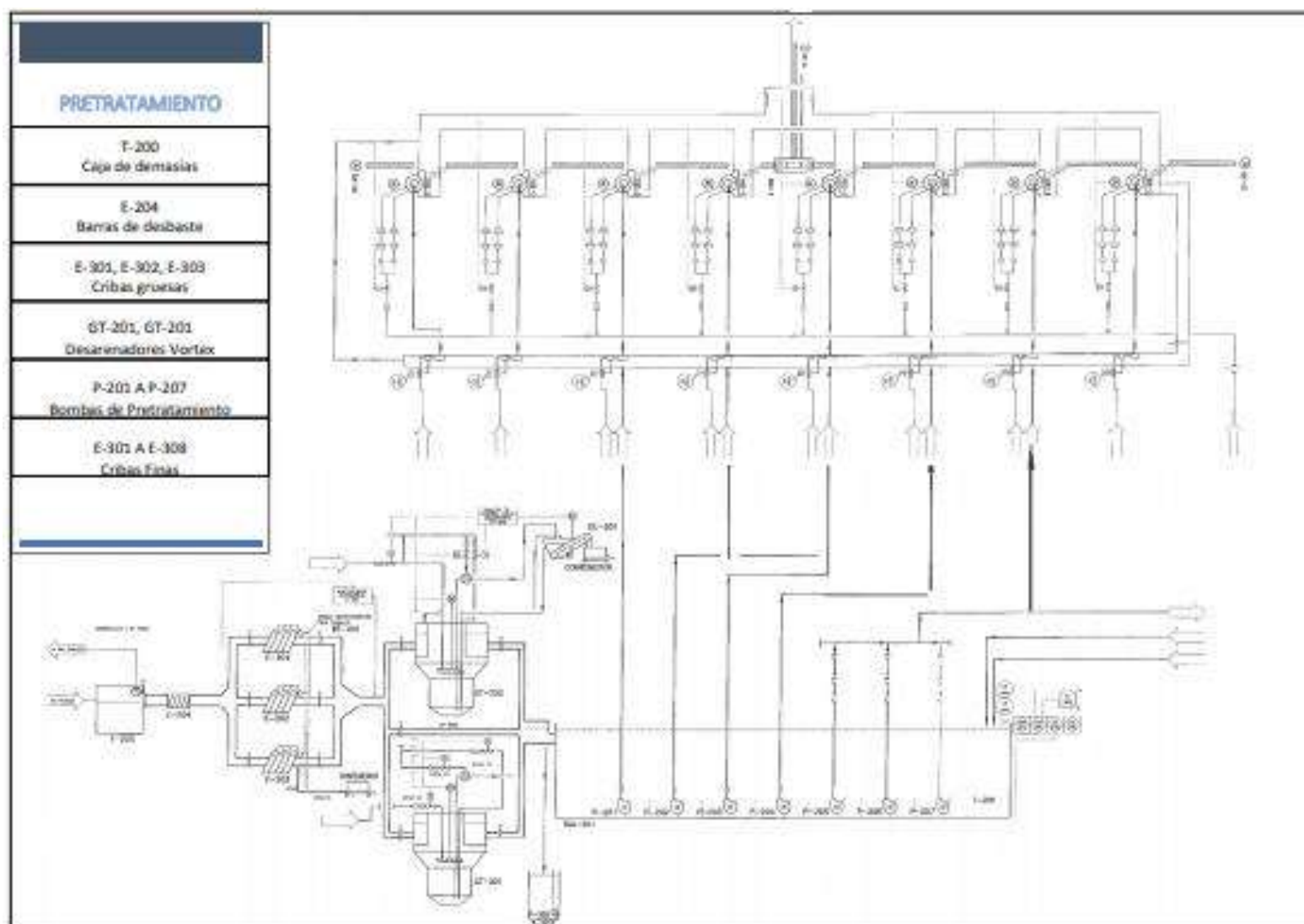


Fig. A.1 Esquema de la planta de tratamiento de aguas residuales municipales. (1/4)

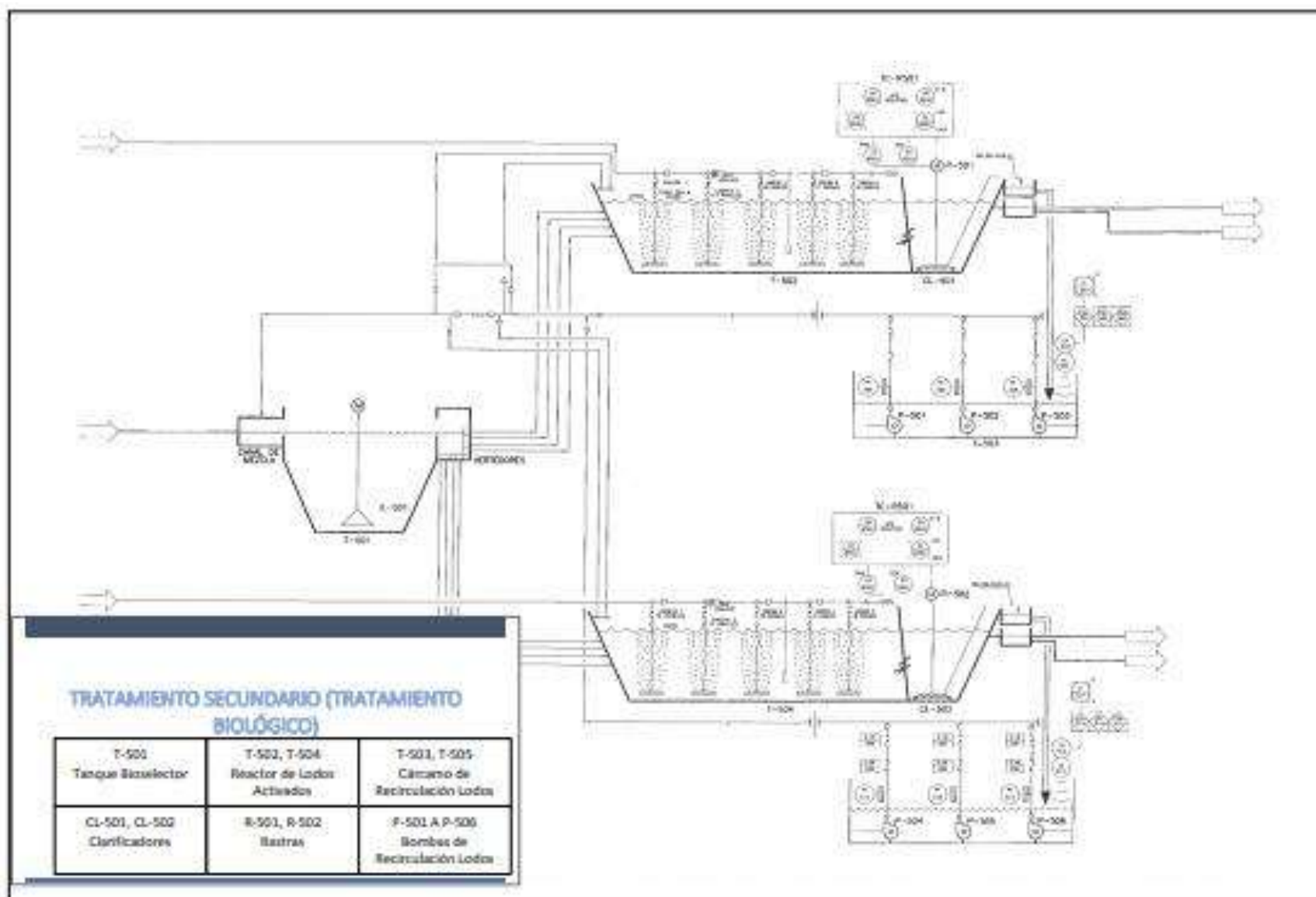


Fig. A.2 Esquema de la planta de tratamiento de aguas residuales municipales. (2/4)

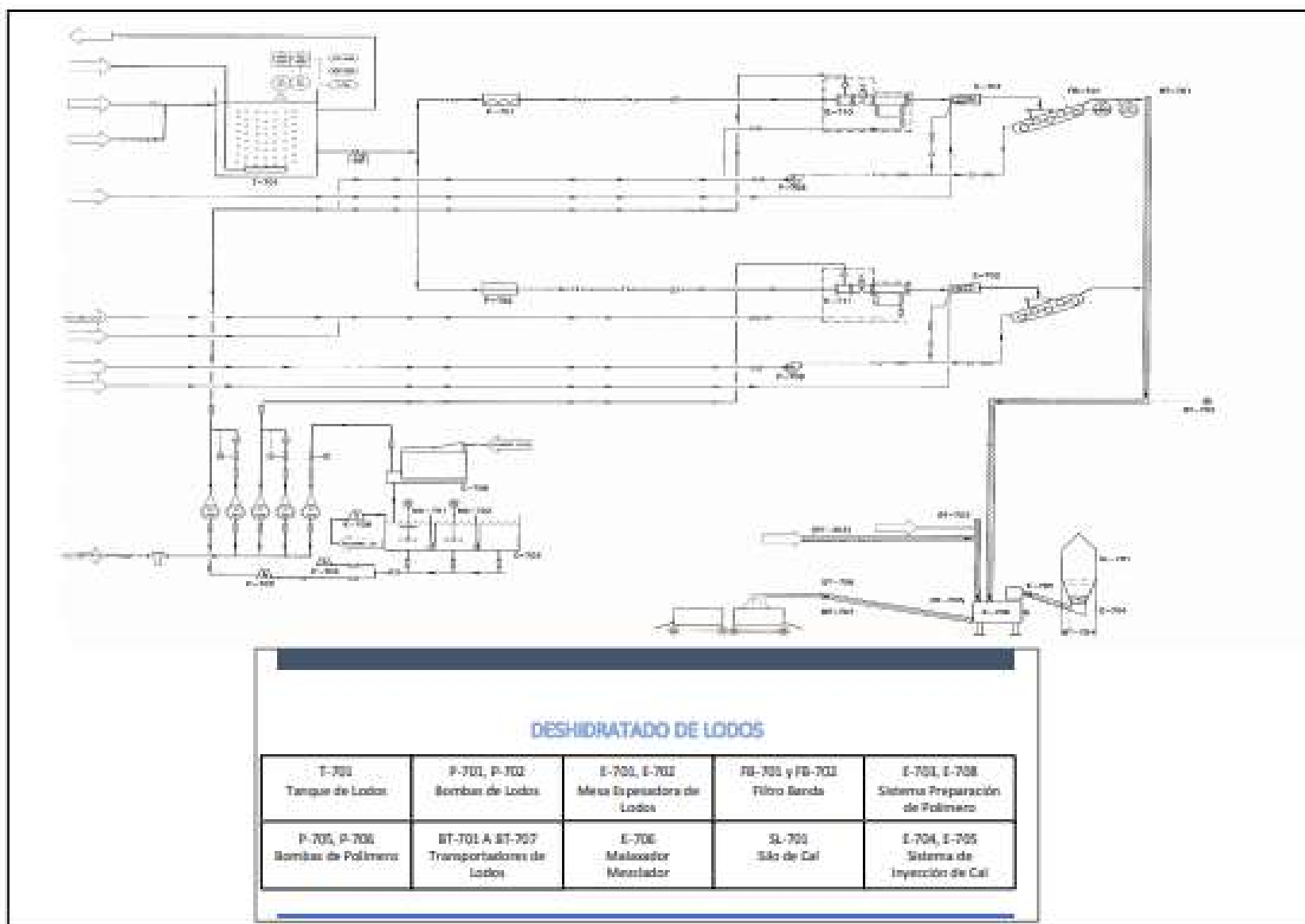


Fig. A.3 Esquema de la planta de tratamiento de aguas residuales municipales. (3/4)

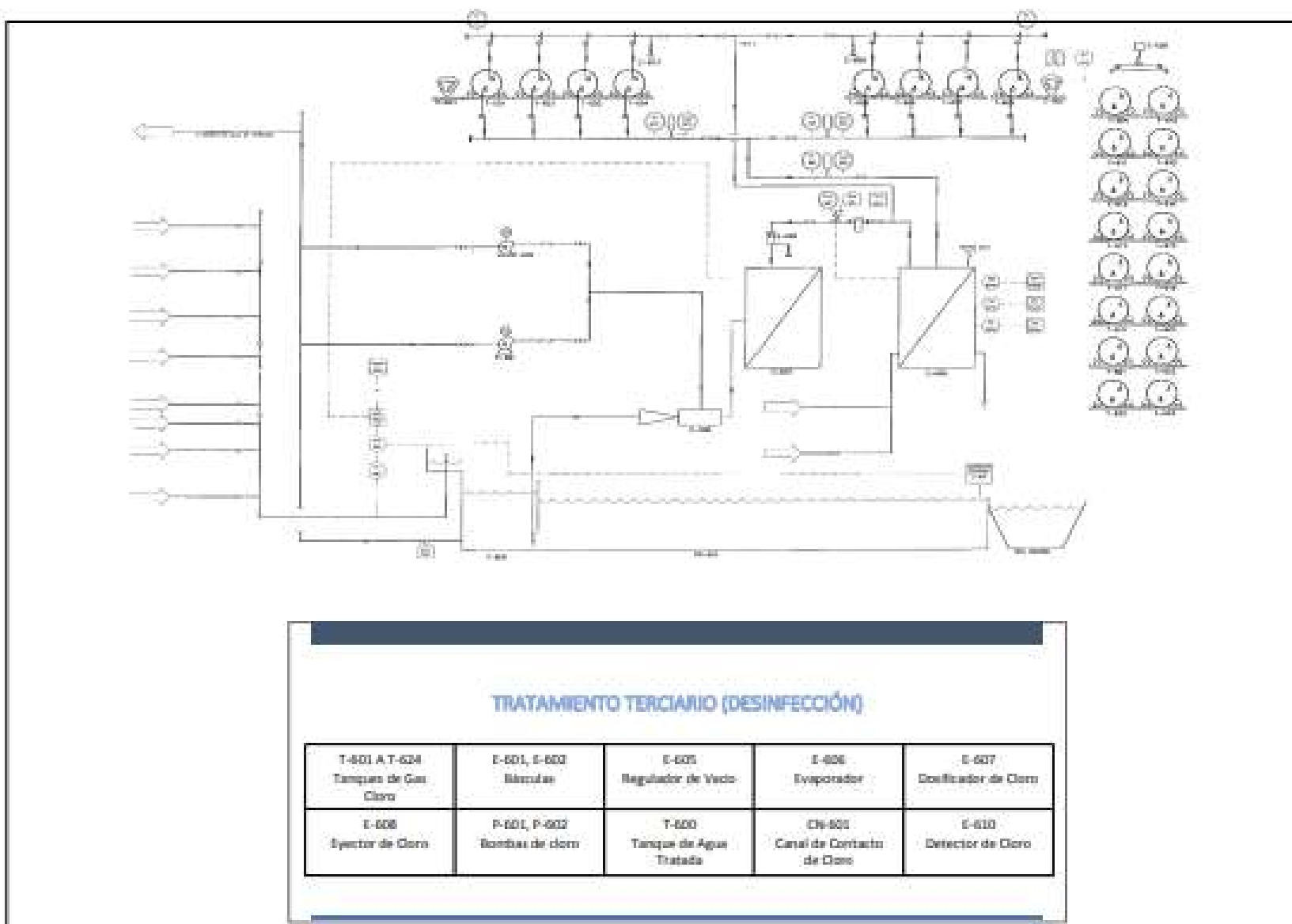


Fig. A.4 Esquema de la planta de tratamiento de aguas residuales municipales. (4/4)

B. MATRIZ DEL MODELO BIOLÓGICO DE LODOS ACTIVADOS ASM3

Tabla B.1 Matriz del modelo biológico de lodos activados ASM3

ASM3															
Component		i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Process rate, π_i
j	Process		S_i	S_s	X_i	X_s	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_{STO}	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{NN}	S_{ALK}	
1	Hydrolysis		f_{si}	$1-f_{si}$		-1						y_1		z_1	$K_H(\frac{X_S/X_{B,H}}{K_X + K_S/X_{B,H}})X_{B,H}$
2	Aerobic storage of ss to xsto			-1					Y_{STO-O2}	x_2		y_2		z_2	$K_{STO}(\frac{S_O}{K_O + S_O})(\frac{S_S}{K_S + S_S})X_{B,H}$
3	Anoxic storage of ss to xsto			-1					Y_{STO-NO}		x_3	y_3	- x_3	z_3	$K_{STO}\eta_{NO}(\frac{K_O}{K_O + S_O})(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}})(\frac{S_S}{K_S + S_S})X_{B,H}$
4	Aerobic growth on xsto						1		-1/ $Y_{H_{O2}}$	x_4		y_4		z_4	$\mu_H(\frac{S_O}{K_O + S_O})(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}})(\frac{S_{ALK}}{K_{HCO} + S_{ALK}})(\frac{X_{STO}/X_{B,H}}{K_{STO} + X_{STO}/X_{B,H}})X_{B,H}$
5	Anoxic growth on xsto (denitrification)						1		-1/ $Y_{H_{NO}}$		x_5	y_5	- x_5	z_5	$\mu_H\eta_{NO}(\frac{K_O}{K_O + S_O})(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}})(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}})(\frac{S_{ALK}}{K_{HCO} + S_{ALK}})(\frac{X_{STO}/X_{B,H}}{K_{STO} + X_{STO}/X_{B,H}})X_{B,H}$
6	Aerobic endogenous respiration				f_i		-1			x_6		y_6		z_6	$b_{H,O2}(\frac{S_O}{K_O + S_O})X_{B,H}$
7	Anoxic endogenous respiration				f_i		-1				x_7	y_7	- x_7	z_7	$b_{H,NO}(\frac{K_O}{K_O + S_O})(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}})X_{B,H}$
8	Aerobic respiration of xsto								-1	-(1- f_i)		y_8			$b_{STO,O2}(\frac{S_O}{K_O + S_O})X_{STO}$
9	Anoxic respiration of xsto								-1		x_9	y_9	- y_9	z_9	$b_{STO,NO}(\frac{K_O}{K_O + S_O})(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}})X_{STO}$
10	Nitrification (aerobic)							1		-1	-1/ Y_A	y_{10}		z_{10}	$\mu_A(\frac{S_O}{K_{A,O} + S_O})(\frac{S_{NH}}{K_{A,NH} + S_{NH}})(\frac{S_{ALK}}{K_{A,HCO} + S_{ALK}})X_{B,A}$
11	Aerobic endogenous respiration				f_i			-1		-(1- f_i)		y_{11}		z_{11}	$b_{A,O2}(\frac{S_O}{K_O + S_O})X_{B,A}$
12	Anoxic endogenous respiration				f_i			-1			x_{12}	y_{12}	- y_{12}	z_{12}	$b_{A,NO}(\frac{K_O}{K_O + S_O})(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}})X_{B,A}$
			Soluble inert organics (g COD m ⁻³)	Readily biodegradable soluble substrate (g COD m ⁻³)	Particulate inert organics (g COD m ⁻³)	Slowly biodegradable particulate substrate (g COD m ⁻³)	Active heterotrophic biomass (g COD m ⁻³)	Active autotrophic biomass (g COD m ⁻³)	Cell internal storage product (g COD m ⁻³)	Oxygen (g (-COD) m ⁻³)	Nitrate and nitrite nitrogen (g N m ⁻³)	Ammonia nitrogen (g N m ⁻³)	Dinitrogen (g N m ⁻³)	Alkalinity (mole m ⁻³)	