

**U N I V E R S I D A D I B E R O A M E R I C A N A**

Estudios con Reconocimiento de Validez Oficial por Decreto Presidencial  
del 3 de abril de 1981.



**"POLÍTICAS ÓPTIMAS DE OPERACIÓN DE UNA PLANTA  
DE TRATAMIENTO BIOLÓGICO DE AGUAS RESIDUALES  
POR DESNITRIFICACIÓN"**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:  
MAESTRA EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA**

**PRESENTA**

**R I B I A G A R C Í A A R R A Z O L A**

**DIRECTOR DE TESIS: DR. ANTONIO FLORES TLACUAHUAC  
CODIRECTOR DE TESIS: M. EN C. MARGARITA L. HERNÁNDEZ ESPARZA  
LECTOR: M. EN I. MARTIN RIVERA TOLEDO**

1 de Agosto de 2007 .

Por medio de la presente se hace constar que se revisó y aprobó la tesis:

" Políticas Optimas de Operación de una Planta de Tratamiento Biológico de Aguas

Residuales por Desnitrificación"

que presenta el (la) alumno(a) RIBIA GARCIA ARRAZOLA

con número de cuenta 156532-4, para obtener el título de Maestro en Ciencias en Ingeniería Química.

Institución en donde fue realizado Universidad Iberoamericana

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser presentado en el examen profesional, se le han otorgado los votos aprobatorios por parte de la planta de sinodales asignada para tal efecto.

Director del Trabajo

Dr. Antonio Flores Tlacuahuac

Co-Director:

M. C. Margarita Hernández Esparza

Lector

M. I. Martín Rivera Toledo

Atentamente  
"LA VERDAD NOS HARA LIBRES"

**DR. CIRO HUMBERTO ORTIZ ESTRADA**  
COORDINADOR DEL POSGRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

Deseo expresar mi reconocimiento al Consejo Nacional de Ciencia y  
Tecnología y a la Universidad Iberoamericana por las facilidades  
brindadas para la obtención del grado de  
Maestra en Ciencias en Ingeniería Química

Este trabajo se lo dedico a cada uno de esos seres  
que han tocado e iluminado Mi Vida y Mi Andar

A Dios,  
A mis padres Rubén y Flor,  
A mi hermano Roeb,  
A Mi Angelito y Knabe Amorado Miguel Ángel,  
A Mi Pequeño Angelito Negro, Melek,  
A mi Familia,  
A mis amigos, Thete y  
A mis maestros, Maestra Margarita, Carmen y Dr. Iruegas



***“El ignorante afirma y el sabio duda y cuestiona”***

***Aristóteles***

# R e s u m e n

El proceso Ludzack–Ettinger Modificado es uno de los procesos de tratamiento biológicos de aguas residuales más complejos. Este proceso se ejemplificó con el “*Simulation Benchmark*”, que es una planta prototipo de la que se tienen datos por el *COST* [Copp, J.B., 2000] bajo diferentes condiciones climáticas, y a la cual se le aplicaron diversas técnicas de optimización, a saber: Diseño de Experimentos (*DoE*) y Optimización Dinámica Simultánea.

Para poder realizar lo anterior, se seleccionó un modelo confiable para predecir la nitrificación y desnitrificación, ya que se debe permitir estimaciones de la masa de los microorganismos nitrificadores-desnitrificadores, los sólidos volátiles totales presentes en el licor mezclado y la concentración de amoníaco en el efluente. El Modelo *ASM1* y el de Takács facilitan estos cálculos, además de que son inherentes al “*Benchmark*”. También se realizó un estudio con base en la teoría de transferencia de masa para obtener el modelo de transferencia del oxígeno, seleccionándose el Modelo Lineal.

Considerando dichos modelos dinámicos, se diseñó, analizó y ejecutó la simulación dinámica de la planta en el lenguaje de MATLAB® para reproducir, bajo diferentes condiciones climáticas (Sequía, Normal, Lluvia y Tormenta), su comportamiento durante un tiempo de proceso determinado. Asimismo se validó el programa desarrollado en MATLAB®, tanto con un simulador académico conocido como *JASS* [Uppsala University, 2006] como con los resultados reportados por Copp, J.B. (2000).

Con la simulación dinámica se estudiaron las variables que afectan e influyen en el bioproceso y se ayudó al análisis de la optimización dinámica. Además, permitió estudiar a la planta bajo diversas circunstancias y a cada uno de los seis equipos que la in-

tegran. Dichos estudios dieron la oportunidad de comprender el fenómeno biológico tanto de cada equipo como en conjunto.

El estudio de las variables que definen el bioproceso se realizó a través de la aplicación del *DoE*. Se seleccionaron ocho factores. Cuatro fueron no controlables: gasto de alimentación del agua residual ( $Q_{in}$ ), sustrato sólido lentamente biodegradable ( $X_s$ ), nitrógeno orgánico biodegradable soluble ( $S_{ND}$ ) y nitrógeno amoniacal soluble ( $S_{NH}$ ); y cuatro controlables: gasto externo de la fuente de carbono ( $Q_{ext}$ ), gasto de recirculación interna del bioreactor ( $Q_{int}$ ), gasto de recirculación de lodos ( $Q_{sl}$ ) y gasto del aire del tercer y último reactor aeróbico ( $Q_{air\_3}$ ). En general, el orden de importancia para toda la planta resultó ser:  $Q_{in}$ ,  $Q_{sl}$ ,  $Q_{air\_3}$  y  $Q_{int}$ , principalmente.

Una vez definidas estas variables, se establecieron cinco políticas óptimas de operación bajo diferentes escenarios en donde se consideró pasar de una condición climática a otra, como: Sequía a Lluvia; o bien, simplemente optimizar la condición como es el caso de Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia. Esto con el objetivo de ilustrar qué variables deben manipularse para controlar la calidad de la descarga del efluente a los cuerpos hídricos para cumplir con la norma y para que la planta opere mejor. Asimismo este estudio busca la robustez de estas políticas para poder disminuir la variación que se pudiera presentar en la planta, ya que en una planta de tratamiento biológico de aguas residuales se presentan cambios constantemente.

La determinación de las políticas óptimas, por medio de las técnicas de optimización dinámica, es actualmente de gran importancia para la operación de los procesos. Además, la complejidad de estos problemas está relacionada con la presencia de grandes conjuntos de ecuaciones álgebra-diferenciales altamente no lineales [Zavala, V.M., *et al.*, 2005]; pero actualmente existen técnicas que simplifican esto, como es el caso de la función hiperbólica para el manejo de la función "max" o "min", que representan una discontinuidad en el sistema y que es aplicado en este estudio a la velocidad de sedimentación y flux de sólidos por gravedad en el Modelo de Takács.

Posteriormente a la definición de las políticas óptimas de operación, se realizó la optimización dinámica simultánea, cuyo objetivo fue minimizar la contaminación de nitrógeno ( $N_{tot_e}$ ,  $Snh_e$ ,  $TKN_e$  y  $NO_e$ ), sólidos suspendidos totales ( $TSS_e$ ) y, demanda química y bioquímica de oxígeno ( $COD_e$  y  $BOD_e$ , respectivamente) en el efluente para cumplir con las especificaciones de descarga dentro de un tiempo de 40 horas. Se manipularon  $Q_{air\_3}$ ,  $Q_{sl}$  y  $Q_{int}$  para mantener la calidad del agua del efluente dentro de las especificaciones. Como resultado, se obtuvo un comportamiento tipo escalón que, si se compara con la simulación dinámica, se obtiene un tiempo menor y un valor de la variable menor o igual al simulado que implica una optimización.

La presente investigación contribuye, a través de técnicas robustas estadísticas (Diseño de Experimentos), de simulación y de optimización (Optimización Dinámica Simultánea), al análisis y evaluación de procesos de tratamiento biológico de desnitrificación (tipo *MLE*), y específicamente a la planta "*Simulation Benchmark*", que no se habían aplicado en su conjunto.

# C o n t e n i d o

LISTA DE NOMENCALTURA

LISTA DE TABLAS

LISTA DE FIGURAS

## **INTRODUCCIÓN**

### **CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES.**

- 1.1. Tratamiento Biológico de Aguas Residuales.
- 1.2. Simulación de Procesos.
- 1.3. Métodos de Optimización para un Diseño Robusto.
  - 1.3.1. Diseño de Experimentos.
  - 1.3.2. Optimización Dinámica.

### **CAPÍTULO 2. CASO DE ESTUDIO: "SIMULATION BENCHMARK".**

- 2.1. Descripción de la Planta.
- 2.2. Datos y Especificaciones de la Planta.
- 2.3. Modelos Dinámicos del Bioproceso.
  - 2.3.1. Proceso Biológico.
  - 2.3.2. Sedimentación-Clarificación.
  - 2.3.3. Velocidad de Transferencia del Oxígeno.

### **CAPÍTULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.**

- 3.1. Simulación y Validación del Caso de Estudio.
- 3.2. Análisis y Optimización del Bioproceso por medio del Diseño de Experimentos.
- 3.3. Definición de las Políticas Óptimas de Operación de la Planta.
  - 3.3.1. Política I: Sequía-Lluvia.
  - 3.3.2. Política II: Tormenta.
  - 3.3.3. Política III: Sequía.
  - 3.3.4. Política IV: Normal.
  - 3.3.5. Política V: Lluvia.
- 3.4. Optimización Dinámica Simultánea del Bioproceso.

**CONCLUSIONES.**

**REFERENCIAS**

# Lista de Nomenclatura

- $a$  = Área a la transferencia de masa por unidad de volumen del sistema [=]  $\text{m}^2/\text{m}^3$ , tiempo inicial fijo
- $a \in A$  = Variables de decisión que pueden ser controlables
- $A$  = Área del sedimentador secundario [=]  $\text{m}^2$
- $A_{kj}$  = Matriz de colocación
- $AC^m$  = Espacio  $m$ -dimensional de funciones completamente continuas
- $b$  = Tiempo final fijo
- $b \in B$  = Incertidumbre que no puede ser controlable
- $b_A$  = Coeficiente de velocidad de decaimiento para la biomasa autotrófica [=]  $\text{h}^{-1}$
- $b_H$  = Coeficiente de velocidad de decaimiento para la biomasa heterotrófica [=]  $\text{h}^{-1}$
- $C_{A,G}$  = Densidad molar total en la fase gaseosa [=]  $\text{kgmol}/\text{m}^3$
- $C_{A,L}$  = Densidad molar total en la fase líquida [=]  $\text{kgmol}/\text{m}^3$
- $C_i^0$  = Concentraciones al inicio de cada elemento finito
- $C_{ij}$  = Puntos discretizados
- $\dot{C}_{ij}$  = Primeras derivadas de las concentraciones
- $C_{in}$  = Concentración de la alimentación [=]  $\text{mg}/\text{L}$
- $C_{init}$  = Valor del estado estacionario del que se parte para realizar la transición deseada
- $C_{ext}$  = Concentración de la fuente de carbono externa [=]  $\text{mg}/\text{L}$
- $C_{int}$  = Concentración de la recirculación interna [=]  $\text{mg}/\text{L}$
- $C_{sl}$  = Concentración de la recirculación de lodos [=]  $\text{mg}/\text{L}$
- $C_1$  = Concentración del segundo reactor anóxico al segundo reactor aeróbico

- [=] mg/L
- $dz/dt_{i,q}$  = Valor de la primera derivada en el elemento  $i$  del punto de colocación  $q$
- $f(a,b)$  = pérdidas que se acumulan del diseño  $a$  cuando las condiciones  $b$  se obtienen
- $f_1$  = Factor de conversión de sólidos suspendidos a  $COD$  de  $X_{IP}$  y  $X_S$
- $f_2$  = Factor de conversión de sólidos suspendidos a biomasa
- $f_{ns}$  = Fracción no sedimentable de los sólidos suspendidos en la alimentación
- $f_p$  = Fracción del rendimiento de biomasa de productos particulados
- $F$  = Restricciones como ecuaciones diferenciales
- $G$  = Restricciones como ecuaciones algebraicas
- $h$  = Altura del sedimentador secundario [=] m
- $h_f$  = Altura de alimentación del sedimentador secundario [=] m
- $h_i$  = Longitud del elemento  $i$
- $H$  = Función Hamiltoniana
- $i_{XB}$  = Masa de nitrógeno por masa de  $COD$  en la biomasa [=] g N/ g  $COD$  en biomasa
- $H_S$  = Condiciones internas adicionales en tiempos fijos  $t_S$
- $i_{XP}$  = Masa de nitrógeno por masa de  $COD$  en los productos de la biomasa en la masa endógena [=] g N/ g  $COD$  en masa endógena
- $J$  = Función costo
- $J_{dn}$  = Flux de sólidos correspondiente al movimiento hacia abajo del seno del líquido en las capas del sedimentador secundario [=] mg  $SS/m^2$  h
- $J_S$  = Flux de sólidos correspondiente a la sedimentación por gravedad en las capas del sedimentador secundario [=] mg  $SS/m^2$  h
- $J_{up}$  = Flux de sólidos correspondiente al movimiento hacia arriba del seno del líquido en las capas del sedimentador secundario [=] mg  $SS/m^2$  h
- $k_1, k_2, k_3$  = Parámetros de los modelos de transferencia del oxígeno [=]  $m^{-3}$
- $k_a$  = Velocidad de amonificación [=]  $m^3/ g COD$  h
- $(k_C \cdot a)$  = Coeficiente de transferencia de masa volumétrico individual de la fase gaseosa en unidades de gradiente en densidad molar para difusión de  $A$  a través de  $B$  o  $S$  estacionario [=]  $kgmol/m^2 s \Delta(atm)$  ó  $kgmol/m^2 s \Delta(bar)$
- $k_h$  = Velocidad máxima específica de hidrólisis [=] g  $sbCOD/ g$  célula  $COD$  h

$(k_L \cdot a)$  = Coeficiente de transferencia de masa volumétrico individual de la fase líquida en unidades de gradiente en densidad molar para difusión de  $A$  a través de  $B$  o  $S$  estacionario [=]  $\text{kgmol/m}^2 \text{ s } \Delta(\text{kgmol/m}^3)$  [=]  $\text{m/s}$

$(K_L \cdot a)$  = Coeficiente de transferencia de masa volumétrico global en unidades de fase líquida en densidad molar para difusión de  $A$  a través de  $B$  o  $S$  estacionario [=]  $\text{h}^{-1}$

$K_{NH}$  = Coeficiente de saturación media del amoníaco para la biomasa autotrófica [=]  $\text{g NH}_3\text{-N/m}^3$

$K_{NO}$  = Coeficiente de saturación media del nitrato para la desnitrificación de la biomasa heterotrófica [=]  $\text{g NO}_3\text{-N/m}^3$

$K_{OA}$  = Coeficiente de saturación media del oxígeno para la biomasa autotrófica [=]  $\text{g O}_2/\text{m}^3$

$K_{OH}$  = Coeficiente de saturación media del oxígeno para la biomasa heterotrófica [=]  $\text{g O}_2/\text{m}^3$

$K_s$  = Coeficiente de saturación media para la biomasa heterotrófica [=]  $\text{g COD/m}^3$

$K_X$  = Coeficiente de saturación medio para la hidrólisis de substrato lentamente biodegradable [=]  $\text{g sbCOD/ g célula COD}$

$L$  = Forma de Lagrange

$m$  = Número de capa de la alimentación del sedimentador secundario

max = Función máximo

min = Función mínimo

$n$  = Número de capas del sedimentador secundario, número de respuestas cada combinación de los niveles de los factores de control

$n_h$  = Factor de corrección para la hidrólisis bajo condiciones anóxicas

$n_g$  = Factor de corrección para  $\mu_H$  bajo condiciones anóxicas

$ne$  = Número de elementos finitos

$ncol$  = Número de puntos de cuadratura en cada elemento

$N$  = Nitrógeno

$N_A$  = Velocidad de transferencia de masa de  $A$  respecto a un eje fijo [=]  $\text{kgmol de } A/\text{s m}^2$

$N_{tot}$  = Nitrógeno total [=]  $\text{mg N/L}$

$p$  = Requisitos particulares, vector del parámetro dependiente del tiempo



- $P$  = Fósforo  
 $q$  = Punto de colocación  
 $Q_{air}$  = Gasto volumétrico del aire [=] m<sup>3</sup>/h  
 $Q_{in}$  = Gasto volumétrico de la alimentación [=] m<sup>3</sup>/h  
 $Q_{ext}$  = Gasto volumétrico de la fuente de carbono externa [=] m<sup>3</sup>/h  
 $Q_{int}$  = Gasto volumétrico de la recirculación interna [=] m<sup>3</sup>/h  
 $Q_{sl}$  = Gasto volumétrico de la recirculación de lodos [=] m<sup>3</sup>/h  
 $Q_1$  = Gasto volumétrico de la salida del primer reactor anóxico [=] m<sup>3</sup>/h  
 $Q_f$  = Gasto volumétrico de alimentación del sedimentador secundario [=] m<sup>3</sup>/h  
 $Q_u$  = Gasto volumétrico en la base del sedimentador secundario [=] m<sup>3</sup>/h  
 $Q_w$  = Gasto volumétrico de la purga de lodos del sedimentador secundario [=] m<sup>3</sup>/h  
 $Q_e$  = Gasto volumétrico del efluente [=] m<sup>3</sup>/h  
 $r$  = Velocidad de consumo de oxígeno o respiración  
 $R^2$  = R cuadrada o coeficiente de determinación  
 $r_{C_k}$  = Velocidad de reacción de acuerdo a la concentración,  $C_k$ , correspondiente [=] mg/L h  
 $r_h$  = Parámetro de sedimentación asociado con el componente de sedimentación retardada de la ecuación de velocidad de sedimentación [=] L/mg  
 $r_p$  = Parámetro de sedimentación asociado con la concentración baja y el componente lentamente sedimentable en la suspensión [=] L/mg  
 $S$  = Concentración de solubles [=] mg/L  
 $S_{ALK}$  = Alcalinidad [=] mmol/L  
 $S_e$  = Concentración de solubles en el efluente [=] mg/L  
 $S_I$  = Materia orgánica inerte soluble [=] mg COD/L  
 $S_{in}$  = Concentración de solubles en la alimentación [=] mg/L  
 $S_{ND}$  = Nitrógeno orgánico soluble biodegradable [=] mg N/L  
 $S_{NH}$  = Nitrógeno amoniacal soluble (NH<sub>4</sub><sup>+</sup> + NH<sub>3</sub>) [=] mg N/L  
 $S_{NO}$  = Nitrógeno como nitrato y nitrito soluble [=] mg N/L  
 $S_O$  = Concentración de oxígeno disuelto [=] mg COD/L  
 $S_S$  = Substrato soluble rápidamente biodegradable [=] mg COD/L  
 $S_{sl}$  = Concentración de solubles en la recirculación de lodos [=] mg/L  
 $S_u$  = Concentración de solubles en la base del sedimentador secundario [=]

- mg/L
- $S_w$  = Concentración de solubles en la purga de lodos del sedimentador secundario [=] mg/L
- $t$  = Tiempo
- $t_f$  = Tiempo de transición deseado o tiempo final
- $t_S$  = Tiempos fijos
- $T$  = Temperatura promedio [=] °C
- $u$  = Vectores de los perfiles de control, velocidad de flujo del aire
- $u_i^0$  = Valor inicial de cada una de las variables manipuladas
- $u(\cdot)$  = Trayectoria de control
- $u(t) \in \Omega$  = Restricción
- $u_{des}$  = Valor de la variable manipulada en la transición final o deseada
- $u_{i,q}$  = Valores de las variables de control en el elemento  $i$  en un punto de colocación  $q$
- $v_{s,i}$  = Velocidad de sedimentación en la capa  $i$  [=] m/h
- $V$  = Volumen [=] m<sup>3</sup>
- $V_k$  = Volumen constante [=] m<sup>3</sup>
- $W$  = Sistema finito de discontinuidades de  $u(t)$
- $W_j$  = Pesos de la cuadratura de Radau.
- $x(\cdot)$  =  $m$ -vector de funciones completamente continuas
- $\dot{x}(t)$  = Trayectoria de estado
- $X_{BA}$  = Biomasa autotrófica activa [=] mg COD/L
- $X_{BH}$  = Biomasa heterotrófica activa [=] mg COD/L
- $X_C$  = Concentración particulada [=] mg/L
- $x_i$  = Factores no controlables
- $X_I$  = Materia orgánica inerte particulada [=] mg COD/L
- $X_{IP}$  = Materia orgánica inerte particulada y productos particulados presentes por el decaimiento de la biomasa [=] mg COD/L
- $X_P$  = Productos particulados presentes del decaimiento de la biomasa
- $X_{min}$  = Concentración mínima de sólidos suspendidos alcanzable en el efluente [=] mg/L
- $X_{ND}$  = Nitrógeno orgánico biodegradable particulado [=] mg N/L
- $X_S$  = Sustrato particulado lentamente biodegradable [=] mg COD/L

- $X_{SS}$  = Sólidos suspendidos en cada capa del sedimentador secundario [=] mg SS/L  
 $X_{SS,f}$  = Concentración de los sólidos suspendidos en el gasto de alimentación del sedimentador secundario [=] mg TSS/L  
 $X_t$  = Límite para la concentración de sólidos suspendidos en el sedimentador secundario [=] mg/L  
 $y$  = Vectores de los perfiles del estado algebraico  
 $y_i$  = Respuestas del sistema por cada combinación de los niveles de los factores de control  
 $y_{i,q}$  = Valores de las variables algebraicas en el elemento  $i$  en un punto de colocación  $q$   
 $Y_A$  = Rendimiento para la biomasa autotrófica [=] g célula COD formada /g N oxidado  
 $Y_H$  = Rendimiento para la biomasa heterotrófica [=] g célula COD formada/g COD oxidado  
 $z$  = Vector de los perfiles del estado diferencial  
 $\hat{z}$  = Vector de las variables deseadas o *set-point*  
 $z^0$  = Valores iniciales de  $z$   
 $z_{des}$  = Valor de la variable de estado de la transición final o deseada  
 $z_i$  = Factores controlables en el diseño de experimentos  
 $z_{i-1}$  = Valor de la variable diferenciada al inicio del elemento  $i$   
 $Z$  = Cualesquier función

### Subíndices designados

- 1 = Zona anóxica ó aeróbica número 1, primer capa del sedimentador secundario  
 2 = Zona anóxica ó aeróbica número 2  
 3 = Zona aeróbica número 3  
 $A$  = componente  $A$   
 $ar$  = Zona aeróbica  
 $axr$  = Zona anóxica  
 $C$  = Concentración del tipo de sólido ó soluble presente en cada equipo de la

- planta de tratamiento de aguas residuales
- $D$  = Sequía
- $des$  = Deseado o final
- $e$  = Efluente
- $ext$  = Externa
- $f$  = Alimentación del sedimentador secundario, final
- $G$  = Gas o vapor
- $i$  = Interfase gas-líquido, contador de la sumatoria, cada factor del diseño de experimentos, cada elemento finito, cada una de las capas del sedimentador secundario
- $init$  = Inicial
- $j$  = Cada punto de colocación ortogonal
- $k$  = Número de zona ó compartimento del bioreactor del "*Simulation Benchmark*"
- $L$  = Líquido
- $loc$  = Local
- $MAX$  = Valor máximo
- $N$  = Normal
- $Ph$  = Interfase
- $R$  = Lluvia
- $S$  = Tormenta
- $sat$  = Saturada
- $sl$  = Recirculación de lodos
- $sttlr$  = Sedimentador secundario
- $t$  = Total
- $u$  = Base del sedimentador secundario
- $w$  = Purga del sedimentador secundario

### Letras griegas

- $\alpha_i, \alpha_{i+1}$  = Factores peso
- $\varepsilon$  = Error
- $\delta$  = Término o punto final de la trayectoria de difusión

$\delta_G$	=	Trayectoria de difusión en el gas
$\delta_L$	=	Trayectoria de difusión en el líquido
$\Phi, \varphi$	=	Función objetivo escalar
$\mu_A$	=	Velocidad de crecimiento específico máximo para la biomasa autotrófica [=] h <sup>-1</sup>
$\mu_H$	=	Velocidad de crecimiento específico máximo para la biomasa heterotrófica [=] h <sup>-1</sup>
$v_0$	=	Velocidad máxima teórica de sedimentación [=] m/h
$v'_0$	=	Velocidad máxima práctica de sedimentación [=] m/h
$\tau$	=	Tiempos de residencia [=] h
$\Omega_q$	=	Polinomio de orden <i>ncol</i>
$\psi(\cdot)$	=	<i>n</i> -vector de funciones completamente continuas con dominio $[a,b]$
$\psi_0 \leq 0$	=	Constante
$\Psi_q$	=	Polinomio de Lagrange de orden <i>ncol</i>

## Exponente

*	=	Equilibrio
0	=	Valor inicial en un intervalo

## Acrónimo

<i>AI</i>	Inteligencia Artificial ( <i>Artificial Intelligence</i> )
<i>AR</i>	Métodos de región geométrica delimitada ( <i>Geometric Attainable Region Method</i> )
<i>AMMO</i>	<i>Approximation and Model Management Optimization</i>
<i>AMPL</i>	<i>A Mathematical Programming Language</i>
<i>ANA</i>	Anaeróbico
<i>ANOVA</i>	Análisis de varianza ( <i>Analysis of Variance</i> )
<i>ANX</i>	Anóxico
<i>AER</i>	Aeróbico
<i>AOP</i>	Procesos de Oxidación Avanzada ( <i>Advanced Oxidation Processes</i> )

<i>ASM1</i>	Modelo de lodos activados número 1 ( <i>Activated Sludge Model Number 1</i> )
<i>ASM2</i>	Modelo de lodos activados número 2 ( <i>Activated Sludge Model Number 2</i> )
<i>ASM3</i>	Modelo de lodos activados número 3 ( <i>Activated Sludge Model Number 3</i> )
<i>ASP</i>	Planta de lodos activados ( <i>Activated Sludge Plant</i> )
<i>BNR</i>	Proceso de remoción biológica de nutrientes ( <i>Biological Nutrient Removal</i> ), Proceso de remoción de nitrógeno ( <i>Biological Nitrogen Removal</i> )
<i>BOD</i>	Demanda bioquímica de oxígeno ( <i>Biochemical Oxygen Demand</i> )
<i>BOD<sub>5</sub></i>	Demanda bioquímica de oxígeno ejercida en 5 días de incubación ( <i>Five-day Biochemical Oxygen Demand</i> )
<i>CBOD</i>	Demanda bioquímica de oxígeno del material carbonáceo ( <i>Carbonaceous Biochemical Oxygen Demand</i> )
<i>COD</i>	Demanda química de oxígeno ( <i>Chemical Oxygen Demand</i> )
<i>COST</i>	<i>European Co-operation in the field of Scientific and Technical Research</i>
<i>CSTR</i>	Reactores con agitación continua ( <i>Continuous Stirred Tank Reactor</i> ).
<i>DAE</i>	Ecuaciones álgebra-diferenciables ( <i>Differential-Algebraic Equation</i> )
<i>DoE</i>	Diseño de Experimentos ( <i>Design of Experiments</i> )
<i>DO</i>	Oxígeno disuelto ( <i>Dissolved Oxygen</i> )
<i>eMLE</i>	Proceso Ludzack–Ettinger Modificado Mejorado ( <i>enhanced Modified Ludzack-Ettinger</i> )
<i>FDP</i>	Modelo de Planeación y Desarrollo de Alternativas ( <i>Facilities Development and Planning Model</i> )
<i>GA</i>	Algoritmo Genético ( <i>Genetic Algorithm</i> )
<i>GIWA</i>	Evaluador Internacional de Aguas ( <i>The Global International Waters Assessment</i> )
<i>GLM</i>	= <i>Modelo Lineal General</i> (General Lineal Model)
<i>HRT</i>	Tiempo de residencia hidráulico ( <i>Hydraulic Residence Time</i> )
<i>IR</i>	Recirculación interna ( <i>Internal Recycle</i> )
<i>IRK</i>	Métodos implícitos de Runge-Kutta ( <i>Implicit Runge-Kutta</i> )
<i>IAWQ</i>	<i>International Association on Water Quality</i>
<i>IPOPT</i>	<i>Interior Point Optimizer</i>
<i>JASS</i>	<i>Java based Activated Sludge process Simulator</i>
m.o.	Microorganismos ( <i>microorganisms</i> )
<i>MINLP</i>	Técnicas de programación mixta entera no lineal ( <i>Mixed-Integer Non-Linear Programming</i> )

<i>MLE</i>	Proceso Ludzack–Ettinger Modificado ( <i>Modified Ludzack-Ettinger</i> )
<i>MLR</i>	Recirculación de licor de mezcla ( <i>Mixed-Liquor Recycle</i> )
<i>MLSS</i>	Sólidos suspendidos en el licor mezclado o biomasa ( <i>Mixed-Liquor Suspended Solids</i> )
<i>MLVSS</i>	Licor mezclado de sólidos suspendidos volátiles ( <i>Mixed-Liquor Volatile Suspended Solids</i> )
<i>MPEC</i>	<i>Mathematical Programs with Equilibrium Constraints</i>
<i>NCP</i>	Puntos internos de colocación ortogonal ( <i>Number of Collocation Points</i> )
<i>NFE</i>	Regiones o elementos finitos equidistantes ( <i>Number of Finite Elements</i> )
<i>NLP</i>	Programación No Lineal ( <i>Non-linear Programming</i> )
<i>NO</i>	Óxido nítrico ( <i>Nitric Oxide</i> )
<i>OA</i>	Arreglos ortogonales ( <i>Orthogonal Arrays</i> )
<i>RAS</i>	Recirculación de lodos activados ( <i>Return Activated Sludge</i> )
<i>RTD</i>	Distribución del tiempo de residencia ( <i>Residence Time Distribution</i> )
<i>rbCOD</i>	Material orgánico fácilmente biodegradable y soluble ( <i>readily biodegradable soluble Chemical Oxygen Demand</i> )
<i>RDO</i>	Optimización del diseño robusto ( <i>Robust Design Optimisation</i> )
<i>S/N</i>	Relación señal a ruido ( <i>Signal to noise ratio</i> )
<i>SMF</i>	<i>Surrogate Management Framework</i>
<i>SNdN</i>	Nitrificación y desnitrificación simultánea ( <i>Simultaneous Nitrification and Denitrification</i> )
<i>SQP</i>	Método de programación cuadrática sucesiva ó secuencial ( <i>Successive Quadratic Programming</i> )
<i>SS</i>	Sólidos suspendidos ( <i>Suspended Solids</i> )
<i>SST</i>	Tanques de sedimentación secundaria ( <i>Secondary Settling Tanks</i> )
<i>SRT</i>	Tiempo de residencia de sólidos ( <i>Sludge Residence Time</i> )
<i>TKN</i>	Nitrógeno total Kjeldahl ( <i>Total Kjeldahl Nitrogen</i> )
<i>TOC</i>	Carbono orgánico total ( <i>Total Organic Carbon</i> )
<i>TSS<sub>e</sub></i>	Sólidos suspendidos totales ( <i>Total Suspended Solids</i> )
<i>TVOC</i>	Compuestos orgánicos volátiles totales ( <i>Total Volatile Organic Compounds</i> )
<i>UN</i>	Organización de las Naciones Unidas ( <i>United Nations</i> )
<i>UNEP</i>	Programa Ambiental de la Organización de las Naciones Unidas ( <i>United Nations Environmental Programme</i> )

<i>VCM</i>	<i>Variable Complexity Modeling</i>
<i>VSS</i>	Sólidos suspendidos volátiles ( <i>Volatile Suspended Solids</i> )
<i>WAS</i>	Purga de lodos activados ( <i>Waste Activated Sludge</i> )
<i>WPCF</i>	Federación para el Control de la Contaminación en el Agua ( <i>Water Pollution Control Federation</i> )



# Lista de Tablas

- Tabla 1.1. Clasificación de las variables respuesta del Modelo Taguchi [Minitab, 2003].
- Tabla 2.1. Concentraciones promedio de entrada a la planta del "*Simulation Benchmark*" [Copp, J.B., 2000].
- Tabla 2.2. Parámetros hidráulicos del bioreactor del "*Simulation Benchmark*" [Jeppsson, U., 1997; Lindberg, C.F., 1997; Copp, J.B., 2000; Samuelsson, P., 2005].
- Tabla 2.3. Parámetros hidráulicos del sedimentador secundario del "*Simulation Benchmark*" [Takács, I., *et al.*, 1991; Sotomayor, O.A.Z., *et al.*, 2001].
- Tabla 2.4. Tiempos de residencia en la planta de tratamiento de aguas del "*Simulation Benchmark*".
- Tabla 2.5. Coeficientes de transferencia de masa oxígeno-aire-agua del "*Benchmark*" [Copp, J.B., 2000].
- Tabla 2.6. Especificaciones de la calidad del efluente del "*Simulation Benchmark*" [Copp, J.B., 2000; Sotomayor, O.A.Z., *et al.*, 2001].
- Tabla 2.7. Comparación de las especificaciones de la calidad del efluente de la planta del "*Simulation Benchmark*", con la Norma Oficial Mexicana (NOM-001-SEMARNAT 1996), la Norma Alemana (ARA-VwV 1991), la Norma China, la Comunidad Económica Europea (*Directive 91/271/EEC*) y la Organización de las Naciones Unidas (UN).
- Tabla 2.8. Componentes del modelo *ASM1* [Henze, M., *et al.*, 1987].
- Tabla 2.9. Procesos Dinámicos en el Modelo *ASM1* [Henze, M., *et al.*, 1987; Jeppsson, U., 1996].
- Tabla 2.10. Valores de los parámetros para el *ASM1* a 20 °C.

- Tabla 2.11. Velocidades de reacción para los componentes particulados [Henze, M., *et al.*, 1987].
- Tabla 2.12. Velocidades de reacción para los componentes solubles [Henze, M., *et al.*, 1987].
- Tabla 2.13. Parámetros de operación del sedimentador [Takács, I., *et al.*, 1991; Sotomayor, O.A.Z., *et al.*, 2001].
- Tabla 2.14. Modelos para la función de transferencia del oxígeno [Sotomayor, O.Z.A., *et al.*, 2002].
- 
- Tabla 3.1. Resultados de los Modelos para la función de transferencia del oxígeno obtenidos por MATHCAD<sup>®</sup>.
- Tabla 3.2. Comparación de las soluciones para el estado estacionario de la condición Normal de operación obtenidas con el programa en MATLAB<sup>®</sup>, el simulador *JASS* y el "*Simulation Benchmark*" reportado por el *COST* para el efluente.
- Tabla 3.3. Comparación de los porcentajes de diferencia al aplicar los Modelos Lineal y Lineal Ajustado al "*Simulation Benchmark*", con respecto a los estimados por el simulador *JASS* y lo reportado por el *COST*.
- Tabla 3.4. Datos de la condición Normal de operación para la validación del programa en MATLAB<sup>®</sup> para la planta de tratamiento biológico de aguas residuales por desnitrificación.
- Tabla 3.5. Comparación de las soluciones para el estado estacionario de la condición Normal de operación obtenidas con el programa en MATLAB<sup>®</sup>, el simulador *JASS* y el "*Simulation Benchmark*" de *COST* para los reactores anóxicos de la planta de tratamiento biológico de aguas residuales por desnitrificación.
- Tabla 3.6. Comparación de las soluciones para el estado estacionario de la condición Normal de operación obtenidas con el programa en MATLAB<sup>®</sup>, el simulador *JASS* y el "*Simulation Benchmark*" de *COST* para los reactores aeróbicos de la planta de tratamiento biológico de aguas residuales por desnitrificación.
- Tabla 3.7. Comparación de las soluciones para el estado estacionario de la condición Normal de operación obtenidas con el programa en MATLAB<sup>®</sup>, el simula-

dor *JASS* y el "*Simulation Benchmark*" de *COST* para el sedimentador secundario de la planta de tratamiento biológico de aguas residuales por desnitrificación.

- Tabla 3.8. Niveles de los factores para el *DoE*.
- Tabla 3.9. Arreglo cruzado  $L_8 \times L_8$  del Método Taguchi.
- Tabla 3.10. Relaciones *S/N* y medias predichas del arreglo interno-externo  $L_8 \times L_8$  para un tiempo de proceso de 39h para los parámetros de calidad del agua.
- Tabla 3.11. Arreglo  $L_{16}$  del Método Taguchi.
- Tabla 3.12. Relaciones *S/N* y medias predichas del Arreglo  $L_{16}$  para un tiempo de proceso de 39h para los parámetros de calidad del agua.
- Tabla 3.13. Valores de los niveles de la combinación óptima de factores obtenidos mediante el Método Taguchi para el intervalo de operación de Sequía a Lluvia.
- Tabla 3.14. Simulación de la combinación óptima de factores ( $Q_{in,1}$   $Q_{sl,2}$   $Q_{int,2}$   $Q_{air,3,1}$   $X_{S,2}$   $S_{NH,1}$   $S_{ND,1}$   $Q_{ext,1}$ ) mediante el simulador *JASS* para diferentes tiempos de proceso para la condición Normal de operación.
- Tabla 3.15. Efectos significativos y no significativos de la planta del "*Simulation Benchmark*" a través del Modelo Factorial Parcial Fraccional, considerando ocho factores.
- Tabla 3.16. Coeficientes usando datos en unidades sin codificar de una ecuación de regresión múltiple para cada una de las variables respuesta estimados por medio el Modelo Factorial Fraccional para el intervalo de operación en estudio.
- Tabla 3.17. Comparación entre las variables respuestas del "*Benchmark*" de las condiciones de operación (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia) y la metodología del *DoE* a un tiempo de proceso de 9sem 3d 15h para cuando se consideren ocho factores (cuatro controlables y cuatro de ruido).
- Tabla 3.18. Valores de los niveles de la combinación óptima de factores obtenidos mediante el Método Taguchi con cuatro factores para cada condición climática (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia).
- Tabla 3.19. Comparación de las variables respuesta del "*Benchmark*" de las condiciones de operación (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia) con la metodología

del *DoE*, a un tiempo de proceso de 9sem 3d 15h, para cuando se consideraron cuatro factores controlables.

Tabla 3.20. Comparación de las variables respuesta del "*Benchmark*" de las condiciones de Sequía y Normal con la metodología del *DoE*, a un tiempo de proceso de 9sem 3d 15h para cuando se aumentó un 20 por ciento las recirculaciones y el flujo del aire del reactor aeróbico óptimos.

Tabla 3.21. Comparación de las variables respuestas del "*Benchmark*" de las condiciones de operación (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia) con la metodología del *DoE*, a un tiempo de proceso de 9sem 3d 15h para cuando se incrementó un 20 por ciento los niveles óptimos de las recirculaciones y se mantuvo el flujo del aire de operación.

Tabla 3.22. Condiciones operativas del "*Benchmark*" para Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia a un tiempo de proceso de 9sem 3d 15h.

Tabla 3.23. Funcionamiento de la planta de la condición de Sequía a la de Lluvia.

Tabla 3.24. Datos de la Política Óptima de Operación I para el caso del funcionamiento de la planta de la condición de Sequía a la condición de Lluvia.

Tabla 3.25. Datos de la Política Óptima de Operación II para el caso del funcionamiento de la planta en la condición de Tormenta.

Tabla 3.26. Datos de la Política Óptima de Operación III para el caso del funcionamiento de la planta en la condición de Sequía.

Tabla 3.27. Datos de la Política Óptima de Operación IV para el caso del funcionamiento de la planta en la condición Normal de operación.

Tabla 3.28. Datos de la Política Óptima de Operación V para el caso del funcionamiento de la planta en la condición de Lluvia.

Tabla 3.29. Desarrollo del término  $\alpha_{i+1}(u(t) - u_{des}(t))^2$  para cada una de las políticas óptimas de operación definidas para la planta "*Simulation Benchmark*".

Tabla C.1. Resumen de las condiciones óptimas para las cinco políticas de operación de la planta del "*Simulation Benchmark*" <sup>(1)</sup>.

# Lista de Figuras

- Fig. 1.1. Etapas del tratamiento de aguas residuales.
- Fig. 1.2. Proceso de Lodos Activados típico [Grady, C.P.L., Jr., *et al.*, 1999].
- Fig. 1.3. Un tipo de proceso de Remoción Biológica de Nutrientes [Grady, C.P.L., Jr., *et al.*, 1999].
- Fig. 1.4. Principales reacciones en la remoción del carbono orgánico [Olsson, G., *et al.*, 2001].
- Fig. 1.5. Principales reacciones en la remoción del nitrógeno. Basado en Olsson, G., *et al.* (2001).
- Fig. 1.6. Mecanismos primarios en clarificadores [Olsson, G., *et al.*, 2001].
- Fig. 1.7. Arreglos de equipos para la remoción biológica de nitrógeno: (a) Preanóxico, (b) Postanóxico, (c) Nitrificación-desnitrificación simultánea y (d) Nitrificación-desnitrificación biológica (Dos lodos) [Metcalf, *et al.*, 2003].
- Fig. 1.8. Proceso de remoción biológica de nitrógeno tipo (a) Ludzack-Ettinger, (b) Ludzack-Ettinger Modificado (*MLE*) y (c) Ludzack-Ettinger Modificado Mejorado (*eMLE*) [Metcalf, *et al.*, 2003; Copithorn, R., *et al.* 2005].
- Fig. 1.9. Correlación de las etapas de un proceso de simulación. Basada en Fishwick, 1995 [García-Arrazola, R., 2003].
- Fig. 1.10. Diagrama de las etapas de un proceso de simulación. Basado en Shannon, R.E. (1988) y Fishwick, P.A. (1995) [García-Arrazola, R., 2003].
- Fig. 1.11. Modelo general de un proceso o sistema [Montgomery, D.C., 2001].
- Fig. 1.12. Estrategia típica experimental para un diseño robusto utilizando el Método Taguchi con dos niveles [Lim, J.M., *et al.*, 1996].
- Fig. 1.13. Colocación en elementos finitos [Lang, Y.D., *et al.*, 2007].
- Fig. 2.1. Representación esquemática del "*Simulation Benchmark*".

- Fig. 2.2. Concentración media de nitrógeno disuelto en aguas superficiales detectada por regiones. Gráfica reportada por *G/WA* (2004/5).
- Fig. 2.3. Concentración media de demanda bioquímica de oxígeno en aguas superficiales detectada por regiones. Gráfica reportada por *G/WA* (2004/5).
- Fig. 2.4. Balance de sólidos a través de las capas del sedimentador [Takács, I., *et al.*, 1991].
- Fig. 2.5. Función no diferenciable:  $\max(0, Z)$  [Balakrishna, S. *et al.*, 1992].
- Fig. 2.6. Perfiles de concentraciones de las capas del sedimentador a través de una interfase para absorción. Basado en García-Arrazola, R. (2003).
- Fig. 2.7. Absorción de oxígeno de una burbuja de aire al medio acuoso. Basado en Lindberg, C.F. (1997); Bird, R.B., *et al.* (2002); Dunn, I.J., *et al.* (2003) y Metcalf, *et al.* (2003).
- Fig. 3.1. Modelos de transferencia de oxígeno ( $K_L \cdot a$ ) como una función de la velocidad de gasto del aire ( $Q_{air}$ ): (a) Potencia y (b) Exponencial.
- Fig. 3.2. Modelos de transferencia de oxígeno ( $K_L \cdot a$ ) como una función de la velocidad de gasto del aire ( $Q_{air}$ ).
- Fig. 3.3. Diferencia entre el Modelo Lineal y el Modelo Lineal Ajustado para el modelo de transferencia de oxígeno ( $K_L \cdot a$ ) como una función de la velocidad de gasto del aire ( $Q_{air}$ ).
- Fig. 3.4. Simulación dinámica de las concentraciones particuladas ( $X_S$  y  $X_{ND}$ ) presentes en el bioreactor del "*Simulation Benchmark*" para la condición Normal de operación.
- Fig. 3.5. Simulación dinámica de las concentraciones solubles presentes en la planta del "*Simulation Benchmark*" para la condición Normal de operación.
- Fig. 3.6. Simulación dinámica a diferentes tiempos de las concentraciones de sólidos suspendidos en la capa de alimentación y capas posteriores del sedimentador secundario de la planta del "*Simulation Benchmark*" para la condición Normal de operación a 500 horas.
- Fig. 3.7. Simulación dinámica de las concentraciones de la calidad del agua tratada de la planta del "*Simulation Benchmark*" para la condición Normal de ope-

- ración.
- Fig. 3.8. Modelo general del *DoE* para la planta del "*Simulation Benchmark*".
- Fig. 3.9. Comportamiento de  $N_{tot_e}$  para diez tiempos de proceso (5h a 1599h) y cuatro tiempos de proceso (15h a 135h).
- Fig. 3.10. Diagramas completos de interacciones: (a)  $N_{tot_e}$  y (b)  $BOD_e$ .
- Fig. 3.11.  $N_{tot_e}$ . Comparación de los diferentes *DoE*'s con las condiciones de operación de la planta del "*Simulation Benchmark*" (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia).
- Fig. 3.12.  $Snh_e$ . Comparación de los diferentes *DoE*'s con las condiciones de operación de la planta del "*Simulation Benchmark*" (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia).
- Fig. 3.13.  $TSS_e$ . Comparación de los diferentes *DoE*'s con las condiciones de operación de la planta del "*Simulation Benchmark*" (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia).
- Fig. 3.14.  $COD_e$ . Comparación de los diferentes *DoE*'s con las condiciones de operación de la planta del "*Simulation Benchmark*" (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia).
- Fig. 3.15. Definición del espacio de solución de acuerdo al método de discretización de colocación ortogonal y al método de integración de cuadratura de Radau.
- Fig. 3.16. Estructura de solución y *software* empleado para la optimización dinámica simultánea de la planta de tratamiento de aguas residuales por desnitrificación ("*Simulation Benchmark*"). Basado en Lang, Y.D., *et al.* (2007).
- Fig. 3.17. Comparación de la simulación dinámica con la optimización dinámica simultánea de la Política I: Sequía-Lluvia.
- Fig. 3.18. Comparación de la simulación dinámica con la optimización dinámica simultánea de la Política II: Tormenta.
- Fig. 3.19. Comparación de la simulación dinámica con la optimización dinámica simultánea de la Política III: Sequía.
- Fig. 3.20. Comparación de la simulación dinámica con la optimización dinámica simultánea de la Política IV: Normal.
- Fig. 3.21. Comparación de la simulación dinámica con la optimización dinámica simultánea de la Política V: Lluvia.

- Fig. 3.22. Principales parámetros de la calidad del agua. Pruebas ejecutadas para la obtención de la condición Normal de operación óptima.
- Fig. 3.23. Variable manipulable  $Q_{in}$ . Pruebas ejecutadas para la obtención de la condición Normal de operación óptima.



# I n t r o d u c c i ó n

A mediados del siglo XX y principios del siglo XXI, diversas organizaciones como la Organización de las Naciones Unidas y la Comunidad Económica Europea, se han enfocado en controlar y regular el impacto que el hombre tiene sobre el medio ambiente. Una de las mayores preocupaciones es la descarga de aguas residuales en los cuerpos hídricos por lo que las legislaciones se han tornado más estrictas.

Para cumplir con la más exigente calidad del efluente, se han desarrollado nuevos sistemas de tratamiento de aguas residuales y los ya conocidos se han mejorado. Por ejemplo, los sistemas de lodos activados (*ASP*) con remoción de carbono se han extendido a la remoción de nitrógeno por nitrificación y desnitrificación, y a la remoción de exceso de fósforo biológico. Debido a que en estos sistemas se requiere producir un agua clarificada de calidad específica y un lodo biológico bien sedimentado, tanto el arreglo de equipos como la operación de los mismos han incrementado en complejidad, tratando de encontrar una mayor eficiencia y una mejor economía.

El proceso Modificado de Ludzack-Ettinger (*MLE*) es aquél en el que, además de utilizar lodos activados en un proceso para oxidar la materia orgánica, se involucra la nitrificación y la desnitrificación para remover el nitrógeno presente en una planta de tratamiento biológico. Este arreglo ha sido objeto de este estudio; por lo que a través de los modelos *ASM1* y Takács así como del Modelo Lineal, que representa la transferencia de masa del oxígeno al agua, se investigaron los efectos de las variables en el sistema a través del uso de la técnica estadística de Diseño de Experimentos (*DoE*).

Las variables estudiadas fueron ocho, cuatro no controlables y cuatro controlables. Las no controlables fueron: flujo de alimentación del agua residual ( $Q_{in}$ ), sustrato sólido lentamente biodegradable ( $X_s$ ), nitrógeno orgánico biodegradable soluble ( $S_{ND}$ ) y nitró-

geno amoniacal soluble ( $S_{NH}$ ) en la alimentación; y las controlables: flujo externo de la fuente de carbono ( $Q_{ext}$ ), flujo de recirculación interna del bioreactor ( $Q_{int}$ ), flujo de lodos ( $Q_{sl}$ ) y flujo del aire ( $Q_{air\_3}$   $R R$ ) del tercer y último reactor aeróbico.

Los diseños aplicados para el *DoE* fueron el Método Taguchi y el Método Factorial Parcial Fraccional, para definir cinco políticas óptimas de operación bajo condiciones de Sequía, Normal, Lluvia y Tormenta. Posteriormente, se utilizaron técnicas de optimización dinámica simultánea para cada una de las políticas planteadas, con el objetivo de minimizar la contaminación de nitrógeno ( $N_{tot_e}$ ,  $Snh_e$ ,  $TKN_e$  y  $NO_e$ ), sólidos suspendidos totales ( $TSS_e$ ) y, demanda química y bioquímica de oxígeno ( $COD_e$  y  $BOD_e$ , respectivamente) en el efluente para cumplir con el nivel de calidad de descarga que establece la norma.

Con base en lo anterior, esta investigación contribuye al análisis y evaluación de procesos de tratamiento biológico de desnitrificación (tipo *MLE*) a través de técnicas robustas estadísticas, de simulación y de optimización que no se habían aplicado en su conjunto.

# CAPÍTULO

# 1

# Antecedentes

## 1. TRATAMIENTO BIOLÓGICO DE AGUAS RESIDUALES.

Las aguas residuales, también conocidas como aguas servidas o negras, son materiales derivados de residuos domésticos, comerciales o procesos industriales, los cuales por razones de salud pública y por consideraciones ambientales, no pueden desecharse vertiéndolas sin tratamiento en las aguas continentales.

Su alto contenido en materia orgánica e inorgánica, así como de patógenos como bacterias, virus y huevos de parásitos, entre otros, dan origen a una seria contaminación de las aguas; por ello, la importancia de su tratamiento y el proceso para llevarlo a cabo.

### ***Tratamiento de Aguas.***

El tratamiento de las aguas residuales lo constituyen cinco etapas principales: (i) *pretratamiento*, donde se eliminan objetos de gran tamaño y partículas flotantes o suspendidas utilizando la línea convencional de desbaste, desarenado y desengrasado, o bien, incluyendo un desarenador, un tanque de igualación y un medidor de caudal, para controlar la cantidad de agua que entra en la planta, (ii) *tratamiento primario o físico*, el cual consiste en separar mecánicamente las partículas en suspensión no retenidas en el pretratamiento, por medio de filtración, sedimentación o flotación, (iii) *tratamiento secundario o biológico*, en el que los microorganismos degradan la materia orgánica y que, de acuerdo al arreglo del proceso, pueden remover nutrientes como nitrógeno y fósforo, a través del proceso de lodos activados, aireación u oxidación total, ó por tratamiento anaeróbico, (iv) *tratamiento terciario o tratamiento avanzado* en el que se busca eliminar los contaminantes orgánicos e inorgánicos disueltos o coloidales (no removidos por

otros tratamientos) mediante procesos como: adsorción por carbón activado, intercambio iónico, o cloración, entre otros y (v) *tratamiento de los lodos*, en el que los restos sedimentados del tratamiento primario o los lodos provenientes del tratamiento biológico son concentrados, estabilizados, secados y transformados en abonos orgánicos, o bien, son incinerados o llevados a un relleno sanitario como desechos sólidos.

Con las etapas anteriores y los procesos unitarios utilizados en cada una de ellas, se busca un arreglo de equipos tal, que el agua procesada sea lo más pura posible antes de ser descargada al medio ambiente para cumplir con las reglamentaciones vigentes de la región. En la Fig. 1.1 se ilustran dichas etapas.



**Fig. 1.1.** Etapas del tratamiento de aguas residuales.

Las etapas que se requieran en el proceso dependerán de los contaminantes, sus concentraciones y las regulaciones de descarga del efluente [Janice K., W.C., *et al.*, 1997]. Las agencias protectoras del medio ambiente han impuesto límites cada vez más estrictos para las descargas de efluentes a cuerpos hídricos; por lo tanto, el mejoramiento del proceso de tratamiento del efluente industrial y doméstico es objeto de estudio en muchas investigaciones [Ericsson, B., 1994; Wang, Y.P., *et al.*, 1994; Funamizu, N., *et al.*, 1997; Coen, F., *et al.*, 1998; Cheng, C.Y., *et al.*, 1999; Tomita, R.K., *et al.*, 2002; Carrera, J., *et al.*, 2003; Ciudad, G., *et al.*, 2005].

## **Tratamiento Biológico.**

Es el tratamiento secundario de las aguas residuales y su objetivo principal es transformar la materia orgánica disuelta mediante la acción de microorganismos en compuestos sencillos, tales como: dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$  (g)), agua y metano ( $\text{CH}_4$  (g)); este último sólo en el caso de procesos anaeróbicos (sin presencia de oxígeno), y en sólidos sedimentables (lodos biológicos o nueva biomasa) que puedan retirarse del proceso.

La mayoría de los tratamientos biológicos disminuyen la demanda bioquímica de oxígeno del material carbonáceo (*Carbonaceous Biochemical Oxygen Demand, CBOD*); pero solamente se puede eliminar el nitrógeno y el fósforo en exceso, si el proceso se diseña para ello.

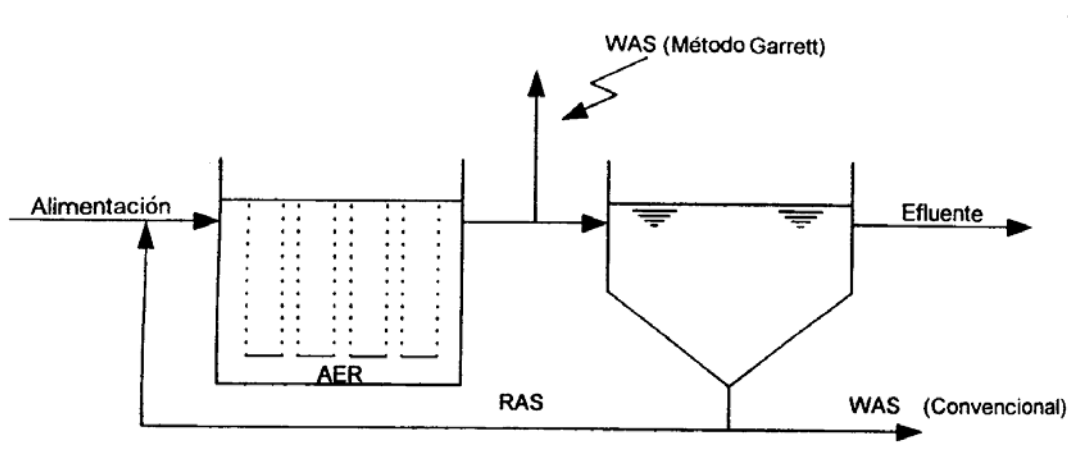
Existen diferentes tipos de sistemas de tratamiento biológico [Metcalf, *et al.*, 2003]: (i) de biomasa suspendida, (ii) de biomasa fija, (iii) sistema combinado y (iv) lagunas. El primero se caracteriza por mantener a los microorganismos responsables de la conversión de la materia orgánica en suspensión dentro del medio líquido y es el de interés en este trabajo. Además, estos sistemas pueden ser aeróbicos (en presencia de oxígeno) o anaeróbicos. El proceso típico aeróbico es el proceso de lodos activados.

**Proceso de Lodos activados (Activated Sludge Process, ASP).** Es el proceso biológico más ampliamente utilizado para la depuración de aguas negras [Gernaey, K.V., *et al.*, 2004; Nuhoglua, A., *et al.*, 2005]. Consiste en un tratamiento aerobio del agua residual mediante un consorcio en suspensión de microorganismos o biomasa, conocido como *lodo activado* donde, tras el aporte de oxígeno por medios mecánicos (mezclado turbulento) o por difusión, se llevan a cabo una serie de procesos de biodegradación (oxidación de la materia orgánica disuelta en el agua) y biosíntesis (producción de nueva biomasa celular) en un tanque de aireación o en un reactor aerobio. Posteriormente, el producto pasa a un sedimentador o decantador donde se separa el agua tratada de la biomasa.

Su finalidad es la producción de un efluente clarificado bajo en *BOD*, sólidos suspendidos (*SS*) y turbiedad, decantado del lodo activado que se sedimenta y compacta, para

ser parcialmente recirculado al tanque de aireación y cuyo exceso es purgado o extraído para su posterior tratamiento y disposición.

Un esquema típico de un sistema de lodos activados es el que se ilustra en la Fig. 1.2 donde se muestran los cuatro factores que distinguen un *ASP*: (i) bioreactor aeróbico donde se encuentran presentes los microorganismos que degradan la materia orgánica, (ii) sedimentador de donde se obtiene un efluente bajo en sólidos suspendidos debido a la sedimentación de los lodos activados, (iii) recirculación de lodos activados (*Return Activated Sludge, RAS*) y (iv) purga de lodos activados (*Waste Activated Sludge, WAS*).



**Fig. 1.2.** Proceso de Lodos Activados típico [Grady, C.P.L., Jr., *et al.*, 1999].

La eficiencia del proceso de lodos activados depende tanto del sustrato removido en el tanque de aireación como de la capacidad de la materia particulada o biomasa para flocular y decantar en el sedimentador secundario [Coen, F., *et al.*, 1998].

La clarificación, el espesamiento y el almacenamiento del lodo son funciones básicas del sedimentador. Si alguna de estas fallan en el *ASP*, el desempeño de la planta se deteriora y puede no cumplir con las especificaciones del efluente; por ello, tanto el bioreactor como el sedimentador son equipos críticos en el sistema de tratamiento [Takács, I., *et al.*, 1991; Cakici, A., *et al.*, 1991; Nuhoglua, A., *et al.*, 2005].

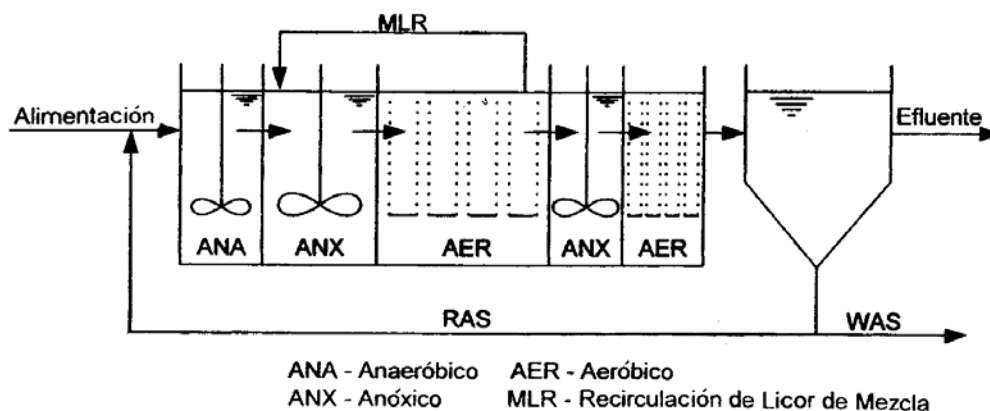
Existe una gran variedad de arreglos para los sistemas con lodos activados; entre ellos se encuentran: *CAS* (*Conventional Activated Sludge*), *SFAS* (*Step-Feed Activated*

*Sludge*), *CSAS* (*Contact Stabilization Activated Sludge*), *CMAS* (*Completely Mixed Activated Sludge*) y *SAS* (*Selector Activated Sludge*), entre otros.

A partir de los 1960's estos sistemas sufrieron modificaciones debido al incremento de las demandas en la calidad del agua en las descargas; por ello, el interés se enfocó no sólo en la remoción orgánica de carbono, sino también en la remoción de nutrientes como nitrógeno (*N*) y fósforo (*P*) y el de sus distintas formas como *N*-amoniacal, *N*-nitritos, *N*-nitratos y *P*-fosfatos que son productos de la misma degradación y tratamiento biológico de la materia orgánica contenida en las aguas residuales [Zhao, H., *et al.*, 1994; Gernaey, K.V., *et al.*, 2004; Hale, C., *et al.*, 2005; Pala, A., *et al.*, 2006]. A estos procesos se les conoce como remoción biológica de nutrientes.

**Procesos de Remoción Biológica de Nutrientes (Biological Nutrient Removal, BNR).** Grady, C.P.L., Jr., *et al.* (1999) clasifica los sistemas de remoción de nutrientes de acuerdo al nutriente que se desee remover en: (i) procesos de remoción biológica de nitrógeno, (ii) procesos de remoción biológica de fósforo y (iii) sistemas que remueven ambos (nitrógeno y fósforo).

Con base en lo antes mencionado, un proceso *BNR* es una modificación del proceso de lodos activados en el que se incorporan zonas anaeróbicas (*ANA*), anóxicas (*ANX*), y/o aeróbicas (*AER*) en el bioreactor para promover la remoción de material carbonáceo y/o nitrógeno y/o fósforo. Asimismo, se puede adicionar una recirculación de licor mezclado (*MLR*) de la zona aeróbica a la anóxica, como se ilustra en la Fig. 1.3.



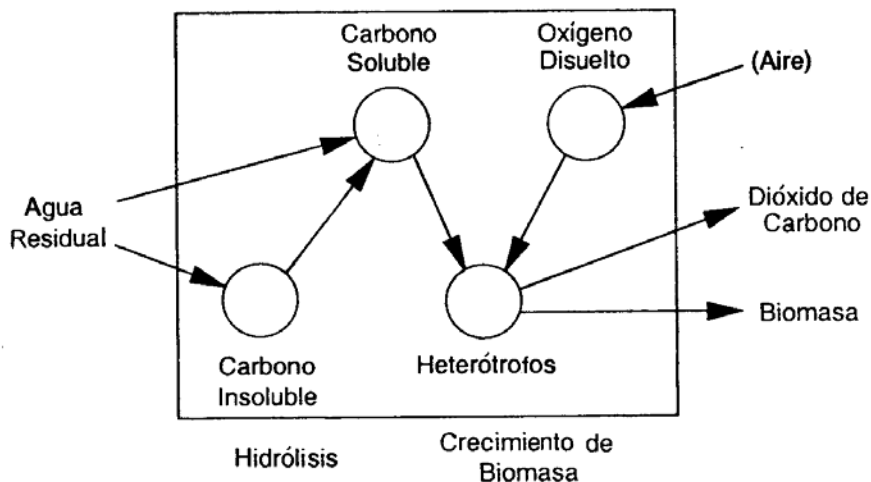
**Fig. 1.3.** Un tipo de proceso de Remoción Biológica de Nutrientes [Grady, C.P.L., Jr., *et al.*, 1999].

Cabe señalar que la distinción de las zonas en el bioreactor es para identificar las diferentes alternativas en los sistemas *BNR*. La zona aeróbica es necesaria en todo sistema *BNR* para la remoción del material carbonáceo, mientras que la zona anaeróbica es necesaria para completar la remoción de fósforo y la anóxica para la remoción del nitrógeno [Grady, C.P.L., Jr., *et al.*, 1999].

Existen principalmente tres diferentes mecanismos de interés en este tipo de procesos, a saber: (i) las reacciones biológicas de los nutrientes combinadas con las reacciones biológicas de degradación del material carbonáceo, (ii) el crecimiento de la biomasa y (iii) la sedimentación de partículas.

**(i) Reacciones Biológicas de los Nutrientes.** Las reacciones biológicas involucradas en la remoción de nutrientes del agua residual se clasifican en base a la remoción del carbono orgánico, del nitrógeno y del fósforo; de las cuales, las dos primeros son las importantes en este estudio, por lo que a continuación se describen.

La remoción del carbono orgánico soluble ocurre primordialmente mediante el metabolismo aeróbico y anóxico de los microorganismos heterótrofos. El carbono orgánico, obtenido por hidrólisis del carbono orgánico insoluble, se convierte ya sea en biomasa adicional o bióxido de carbono soluble y gaseoso, como se ilustra en la Fig. 1.4.



**Fig. 1.4.** Principales reacciones en la remoción del carbono orgánico [Olsson, G., *et al.*, 2001].

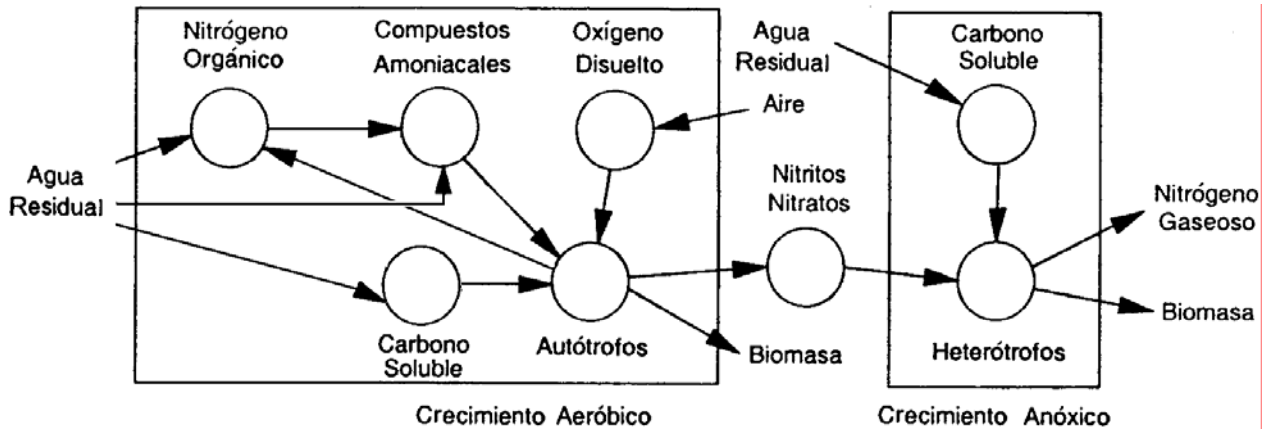


La remoción de nitrógeno es muy importante debido a que este elemento químico existe en muy diversas formas por su gran número de estados de oxidación y a que puede ser asimilado biológicamente por los microorganismos. Además, puede encontrarse en las aguas residuales en sus formas orgánicas, amoniacales y en nitritos ó nitratos, los cuales requieren tratamiento para su remoción. Dichos compuestos no son deseables en las descargas por diversas razones: el *amoniaco* es tóxico para organismos acuáticos; el *ion amonio* es un compuesto consumidor de oxígeno por lo que agota el oxígeno disuelto en las aguas receptoras; *en todas sus formas*, el nitrógeno puede ser utilizado como nutriente para plantas acuáticas y ocasionar eutrofización; y como *ion nitrito* es un peligro en la salud de los infantes [Sedlak, R., 1991; Lindberg, C.F., 1997; Samuelsson, P., 2005].

Muchos países se esfuerzan en reducir las emisiones de los compuestos nitrogenados (amoniaco, nitratos y nitritos) a los cuerpos hídricos y de fuentes de  $\text{NO}_x$  a la atmósfera, como el amoniaco ( $\text{NH}_3$ ). Desde que los sistemas de tratamiento de aguas residuales domésticas se han saturado de amoniaco, se ha buscado la remoción del nitrógeno de las aguas residuales secundarias e industriales, resultando a menudo más rentable la disposición de los residuos nitrogenados que un tratamiento de aguas [Schmidt, I., *et al.*, 2003].

En el caso del nitrógeno de entrada de un agua residual, éste se presenta principalmente en forma de compuestos amoniacales aunque también puede estar en forma de nitrógeno orgánico. Los *N*-orgánicos pasan a *N*-amoniacales para posteriormente ser removidos por dos procesos: nitrificación y desnitrificación, los cuales se ilustran en la Fig. 1.5.

La nitrificación ocurre por el metabolismo aeróbico de los autótrofos quienes convierten los compuestos amoniacales a nitritos y nitratos y son muy sensibles a las condiciones ambientales. En cuanto a la desnitrificación, ésta se realiza por el metabolismo anóxico de los heterótrofos que convierten los nitritos/nitratos a nitrógeno gaseoso, aunado al consumo de carbono.



**Fig. 1.5.** Principales reacciones en la remoción del nitrógeno. Basado en Olsson, G., *et al.* (2001).

Es importante destacar que las reacciones biológicas, al igual que las químicas, pueden llegar a afectar por la carencia de los reactivos o por el exceso de los productos, ocasionando una velocidad de reacción menor y, en consecuencia, afectando el crecimiento de la biomasa.

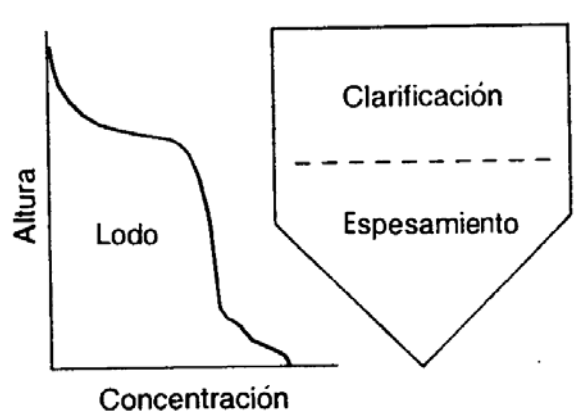
**(ii) Crecimiento de la Biomasa.** En un sistema *BNR* es de suma importancia el mantenimiento de un lodo activo con las correctas proporciones de especies de organismos para la remoción del nutriente y la buena formación de flóculos sedimentables.

Los diferentes organismos presentes en el lodo activado deben ser controlados mediante el ajuste de las condiciones de operación del sistema que requieren para su buen funcionamiento. Esto se realiza en base al conocimiento de las velocidades de crecimiento y de las condiciones ambientales; su ignorancia favorecerá la sobrepoblación o desbalance del consorcio de microorganismos, lo que implicaría un desbordamiento de lodos en el sedimentador u otros problemas, tales como: generación de espuma y flotación del lodo, teniendo como consecuencia la mala calidad del efluente.

**(iii) Sedimentación.** Este proceso se realiza para retirar la materia sólida, orgánica o no, de las aguas residuales. En el proceso de lodos activados es necesario separar el agua residual tratada de la masa del lodo biológico, para finalmente producir un efluente claro. Esta separación sólido-líquido es lograda por sedimentación por gravedad en

tanques de sedimentación secundaria (*Secondary Settling Tanks, SST*) [Ekama, G.A., *et al.*, 1997].

El agua pasa a través de un dispositivo de sedimentación llamado sedimentador secundario, en el que se distinguen dos mecanismos primarios: (i) *clarificación*, donde las partículas pequeñas o de muy baja densidad están presentes en el efluente y cuya concentración es mucho más baja que en el lecho del lodo, y (ii) *espesamiento*, que involucra concentraciones altas en el lecho del lodo y que implican, evidentemente, mayor presencia de sólidos. Lo anterior se ilustra en la Fig. 1.6.



**Fig. 1.6.** Mecanismos primarios en clarificadores [Olsson, G., *et al.*, 2001].

Este equipo, si no funciona adecuadamente, puede no cumplir con los estándares de calidad del efluente en demanda química de oxígeno (*Chemical Oxygen Demand, COD*), demanda bioquímica de oxígeno ejercida en 5 días de incubación (*Biochemical Oxygen Demand, BOD<sub>5</sub>*), nitrógeno total y fósforo total. Para cumplir estas concentraciones deben disminuirse los sólidos suspendidos.

El proceso de sedimentación puede reducir en un 80 a 99% los sólidos en suspensión en el efluente. Esto está directamente relacionado con la velocidad de sedimentación que sólo sufrirá cambios importantes, principalmente de dos fuentes: las características de los sólidos en la alimentación y la purga de lodos [Ekama, G.A., *et al.*, 1997; Olsson, G., *et al.*, 2001].

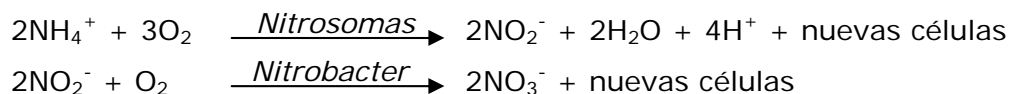
El exceso de sólidos en el efluente se debe principalmente a cinco factores: (i) *hidráulica*, al resuspenderse sólidos en la superficie por altas velocidades del flujo horizontal, (ii) *sobrecarga de la zona de espesamiento*, al alcanzar el lodo, la boquilla del efluente, (iii) *desnitrificación* en el sedimentador, que causa la flotación de sólidos en la superficie, (iv) *problemas de floculación* como resultado de la ruptura del flóculo o por una baja formación de flóculos antes de la etapa de sedimentación y (v) *capacidad insuficiente de recolección de lodos* por el diseño o geometría y la operación del sistema [Ekama, G.A., et al., 1997].

En conclusión, los tres mecanismos antes descritos son muy importantes en el ASP. Éstos deben funcionar perfectamente para obtener la calidad del efluente deseada, que en este caso es baja en concentraciones del nitrógeno.

**Remoción Biológica de Nitrógeno (Biological Nitrogen Removal, BNR).** Este es uno de los principales procesos de remoción de nutrientes. Es frecuentemente requerido antes de la descarga del agua residual tratada a los cuerpos de agua para evitar la eutrofización, o para recarga del agua subterránea u otras aplicaciones de reutilización [Metcalf, et al., 2003; Ochieng, A., et al., 2003]. Puede integrarse a un sistema de tratamiento biológico de agua; o bien, incorporarse como un proceso adicional a una planta de tratamiento ya existente [Metcalf, et al., 2003], como es el caso de Collivignarelli, C., et al. (1999), quienes se enfocaron en el desarrollo de tecnologías para actualizar plantas de tratamiento de aguas residuales ya existentes de este tipo, buscando altas eficiencias en los procesos y bajos costos.

Para la remoción de nitrógeno ocurren dos procesos: (i) nitrificación y (ii) desnitrificación [Grady, C.P.L., Jr., et al., 1999].

**(i) Nitrificación.** Es la oxidación biológica del amoníaco a nitrato con formación de nitrato como compuesto intermedio. Los microorganismos involucrados son especies autótrofas como *Nitrosomas* y *Nitrobacter*, las cuales llevan la reacción en dos etapas:



Este es un proceso aeróbico y por consiguiente, sólo ocurrirá en zonas aeróbicas. Además, puede ser inhibido por diversos compuestos orgánicos, generalmente cíclicos como anilina, benzocaína y benzilamina, entre otros.

Uno de los parámetros más críticos en el proceso de nitrificación es la relación entre la demanda química de oxígeno y el nitrógeno en la alimentación ( $COD/N$ ), debido a que el contenido de carbono/nitrógeno del agua residual determina la competencia en el crecimiento que se establece entre las poblaciones de microorganismos autótrofos y heterótrofos que llevan a cabo el proceso [Carrera-Muyo, J., 2001].

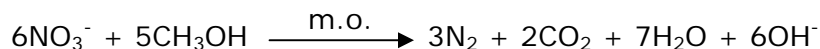
Carrera, J., *et al.* (2004) realizaron un estudio del efecto de la relación  $COD/N$  de la alimentación en la remoción de nitrógeno de aguas industriales con alto contenido de amonio en una planta piloto con el arreglo de Ludzack–Ettinger modificado, observándose que la velocidad de nitrificación decrece cuando el  $COD/N$  de la alimentación se incrementa.

Para un sistema pre-nitrificador, se sabe que si se controla la concentración de  $N$ -nitratos al final de la zona anóxica a un "*set-point*" de 1 mg/L, se minimiza la cantidad de carbono externo requerido; mientras se mantenga a largo plazo una concentración de  $N$ -nitratos pre-especificado [Yong, M., *et al.*, 2006].

En aguas residuales con baja alcalinidad y/o alto contenido de amoníaco, la alcalinidad debe adicionarse en forma de cal o bicarbonato para mantener el pH a un nivel óptimo (6 a 8) para la nitrificación [Sedlak, R., 1991; Henze, M., *et al.*, 19997; Grady, C.P.L., Jr., *et al.*, 1999]. Otro factor que afecta a la nitrificación es la temperatura del agua residual de entrada [Wanner, O., *et al.*, 2005].

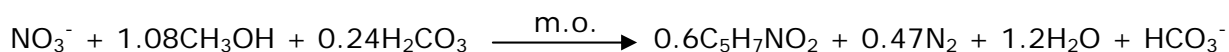
**(ii) Desnitrificación.** Es la conversión biológica del  $N$ -nitratos a formas más reducidas como nitrógeno gaseoso ( $N_2$ ), monóxido de dinitrógeno ( $N_2O$ ) y monóxido de nitrógeno ( $NO$ ). Este proceso lo lleva a cabo una variedad de las bacterias facultativas heterotróficas que utilizan el  $N$ -nitratos como aceptor de electrones, al oxidar la materia orgánica en ausencia del oxígeno disuelto y, por lo tanto, ocurre en condiciones anóxicas. Aunque se ha observado que bajo condiciones de pH ácido, la desnitrificación se realiza en presencia de oxígeno [Sedlak, R., 1991].

La estequiometría de la reacción depende de la materia carbonácea involucrada. Para el metanol, que ha sido evaluado como la mejor fuente de carbono externa (cuando ya no hay disponible fuente de carbono natural en la corriente a tratar) con la más baja producción biológica de lodo y con poca influencia en las características de éste [Ericsson, B., 1994], la reacción es:



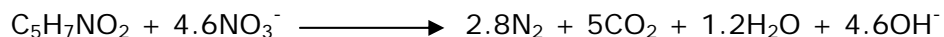
donde m.o. representa a los microorganismos.

Incluyendo la síntesis celular, la reacción empírica es:



donde  $\text{C}_5\text{H}_7\text{NO}_2$  es la fórmula empírica de la biomasa.

El nitrato remplazará el oxígeno en la reacción de la respiración endógena y la ecuación propuesta por Sedlak, R. (1991) para representar este fenómeno es:



La velocidad de desnitrificación depende principalmente en la naturaleza y concentración de la materia carbonácea sujeta a degradación y la limita el nitrato.

La remoción biológica de nitrógeno en los procesos de lodos activados se logra por una secuencia de procesos aeróbicos y anóxicos. En la zona aeróbica ocurre la nitrificación biológica por oxidación de nitrógeno amoniacal. La zona anóxica debe ser incluida para proveer la desnitrificación biológica y para completar la remoción del nitrógeno total mediante la reducción de nitrógeno, como nitratos y nitritos, a nitrógeno gaseoso.

La reducción de nitratos requiere de un donador de electrones que pueda ser proporcionado en la forma de *BOD* en el agua residual de entrada por respiración endógena o por una fuente de carbono externa, como sería el metanol.

Es importante mencionar que la fuente adicional de carbono y la concentración inicial de nitrato en la zona anóxica tienen un efecto sobre la velocidad de desnitrificación, tiempo y eficiencia del proceso [Komorowska-Kaufman, M., *et al.*, 2006]. Esto se debe a que el proceso de desnitrificación está determinado por la relación estequiométrica entre el compuesto orgánico utilizado y el nitrato; por ello, dependiendo de la fuente de carbono seleccionada y la cantidad de nitrato, se podrá obtener una mayor velocidad de desnitrificación.

Algunos ejemplos de fuentes de carbono externas son: metanol, etanol, acetato, glucosa, sacarosa, ácido láctico, lodo primario y varios productos de desechos industriales [Lindberg, C.F., 1997; Carrera-Muyo, J., 2001]. Su gasto de alimentación debe ser calculado y controlado en base a las necesidades específicas del proceso de desnitrificación. En algunos casos, al adicionarlo, los microorganismos pueden tomar hasta semanas en adaptarse a la nueva fuente de carbono; por ello, es recomendable nunca dejar de suministrarlo para que los microorganismos vayan metabolizándolo y nunca automatizarlo de forma intermitente.

Lo anterior sólo aplica cuando existen variaciones de la relación carbono/nitrógeno en la alimentación, que tienden a ser pequeñas; siempre y cuando el proceso de desnitrificación esté limitado de éste, originalmente.

La dosificación de la fuente de carbono no siempre es constante, en algunas ocasiones se deben adicionar grandes cantidades (cuidar que no exista un exceso de carbono e incremente la producción de lodos que afecte la nitrificación, ó que inhiba a los microorganismos para usar, de forma natural, las fuentes de carbono), y en otras, sólo pequeñas adiciones (limita el carbono del proceso de desnitrificación y la remoción completa de nitrógeno). Una estrategia de control para la adición de la fuente de carbono externa es mantener la concentración promedio del nitrato en la zona anóxica para cuando haya variaciones importantes en la relación carbono/nitrógeno [Lindberg, C.F., 1997].

## Tipos de Procesos *BNR*.

Los procesos pueden ser por crecimiento suspendido o por crecimiento por contacto o de biopelícula. El primer tipo de proceso es, en este caso, el de interés y puede clasificarse en: (i) "*single-sludge*" ó de una sola mezcla de lodos y (ii) "*two-sludge*" ó con dos corrientes de recirculación de biomasa diferentes.

(i) "*Single-sludge*", donde se utiliza únicamente un equipo de separación de sólidos (normalmente un sedimentador secundario), el tanque de lodos activados se divide en diferentes zonas (anóxicas y aeróbicas) y, el licor mezclado (mezcla de biomasa y medio de reacción) puede ser bombeados de una zona a otra mediante una recirculación interna. La separación líquido-sólido sólo ocurre una vez.

Los procesos "*single-sludge*" son los más comúnmente utilizados y están agrupados de acuerdo con la localización de la zona anóxica. Existen cuatro posibilidades: preanóxico, postanóxico, nitrificación-desnitrificación simultánea y combinación pre- y post-desnitrificación.

*Preanóxico*, donde el contacto inicial del agua residual y la recirculación del lodo activado es en la zona anóxica, y donde la producción de nitrato en la zona aeróbica es recirculada al compartimiento preanóxico. En este caso, la velocidad de desnitrificación es afectada por: la concentración de la demanda química de oxígeno fácilmente biodegradable y soluble (*readily biodegradable soluble Chemical Oxygen Demand, rbCOD*) o por la demanda bioquímica de oxígeno (*BOD*) en la alimentación del agua residual que es el donador de electrones, la concentración de los sólidos suspendidos en el licor mezclado o biomasa (*Mixed-Liquor Suspended Solids, MLSS*) y la temperatura.

*Postanóxico*, donde la zona anóxica es posterior a la zona aeróbica. Este sistema puede operar con o sin fuente de carbono exógena; sin ésta, el proceso postanóxico depende de la respiración endógena de los lodos activados para proveer el donador de electrones necesario para el consumo del nitrato siendo, en este caso, el nitrito el aceptor de electrones. La velocidad de desnitrificación para esta condición es mucho más lenta comparada con los sis-



temas preanóxicos, y se requerirá mayor tiempo de retención para alcanzar una mayor eficiencia.

*Nitrificación-desnitrificación simultánea (Simultaneous Nitrification and Denitrification, SNdN)* donde la nitrificación y la desnitrificación ocurren en el mismo tanque. Requiere del control del oxígeno disuelto (*Dissolved Oxygen, DO*) o de otros métodos de control que aseguren que ocurra la nitrificación y desnitrificación en un solo tanque. Cuenta con un sistema de agitación que hace circular el agua de una zona a la otra.

*Combinación pre- y post-desnitrificación* que es probablemente el proceso alternativo con mayor flexibilidad en la operación y mejores posibilidades a una alta remoción de nitrógeno [Ericsson, B., 1994; Metcalf, *et al.*, 2003].

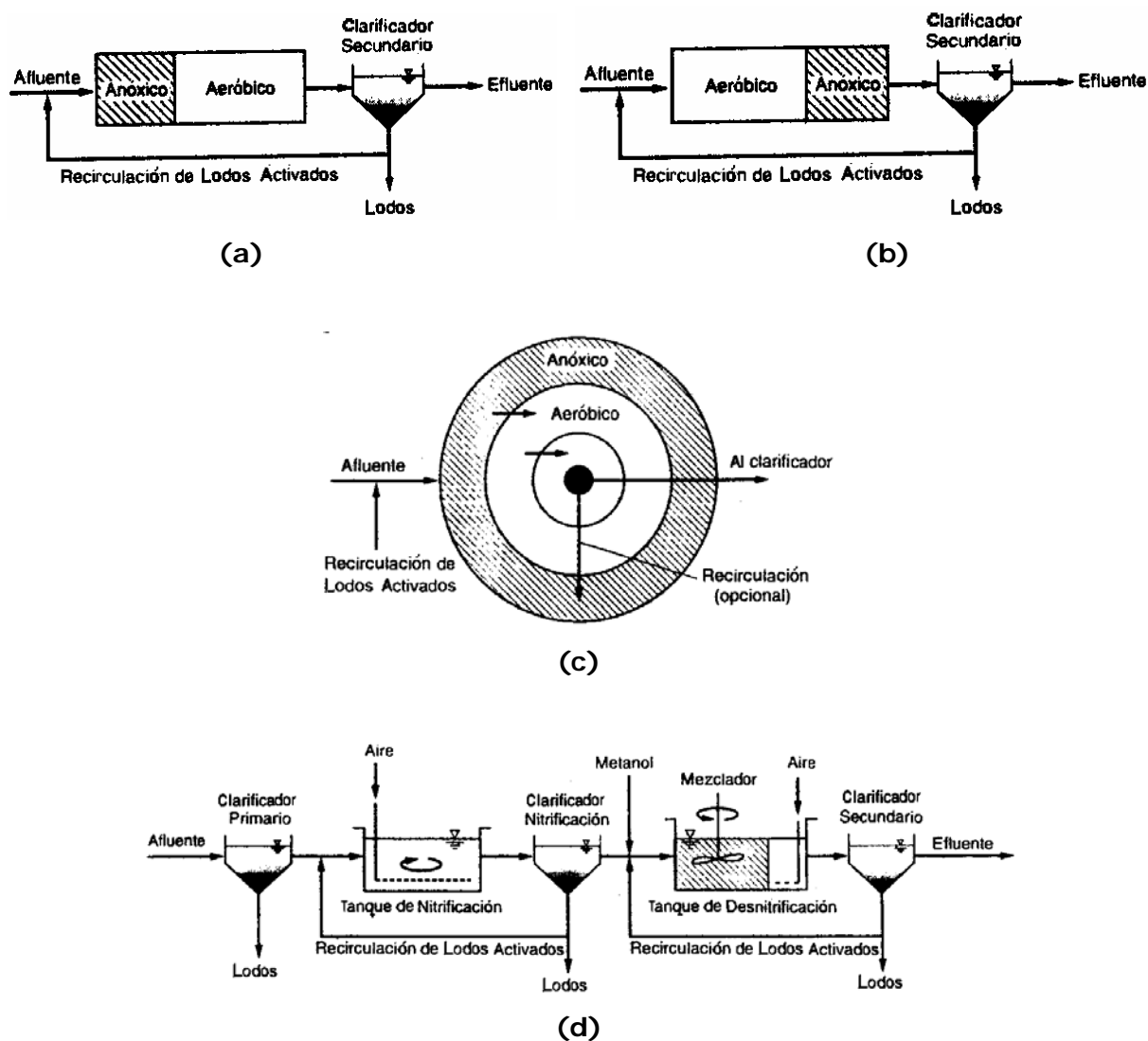
Algunos esquemas de estos procesos se encuentran en las Fig. 1.7 a, b y c.

(ii) *"Two-sludge"*, es el sistema más común y consiste en un proceso aeróbico (para la nitrificación) separado, pero seguido, de un proceso anóxico (para la desnitrificación); cada uno con su propio clarificador; por ello, la producción y separación de dos tipos de lodos. Para el caso de una desnitrificación postanóxica, un substrato orgánico, generalmente metanol, debe ser adicionado como una fuente de carbono para los microorganismos encargados de ejercer la demanda biológica para el nitrato.

Para el tipo *"two-sludge"* el proceso más común para la remoción de nitrógeno amoniacal en aguas residuales es el de *nitrificación-desnitrificación biológica*, el cual se ilustra en la Fig. 1.7d. Este proceso es útil para bajas cargas de amonio, no así para altas cargas, puesto que presenta problemas en su funcionamiento [Carrera, J., *et al.*, 2003].

Cuando hay altas cargas de nitrógeno amoniacal ( $> 200 \text{ mg NH}_4/\text{L}$ ), éstas son muy difíciles de remover en los tratamientos biológicos convencionales. Este aspecto ha obligado a la aplicación de otro tipo de tecnologías, como la remoción biológica de nitrógeno vía nitrito, que representa ahorros de un 25% en aireación en la nitrificación, y de un 40 a 60% en materia orgánica para la desnitrificación, siempre y cuando la acumulación de nitrito sea posible en la etapa de nitrificación. Además, el desarrollo de reactores de

biomasa inmovilizada ha permitido potenciar estos procesos, debido a que logran mantener una alta concentración de bacterias en un espacio reducido, evitando la pérdida de bacterias de lento crecimiento, como las que realizan la nitrificación [Ciudad, G, *et al.*, 2006]. En un estudio realizado por Ruiz, G., *et al.* (2006), se logró el 93.5% del retiro total del nitrógeno en la nitrificación-desnitrificación vía este proceso.



**Fig. 1.7.** Arreglos de equipos para la remoción biológica de nitrógeno: (a) Preanóxico, (b) Postanóxico, (c) Nitrificación-desnitrificación simultánea y (d) Nitrificación-desnitrificación biológica (Dos lodos) [Metcalf, *et al.*, 2003].

## Selección del Proceso.

La selección de procesos específicos para la remoción biológica de nitrógeno dependerá de las condiciones específicas del sitio, los procesos y equipos existentes, así como de las necesidades del tratamiento. Por ejemplo, Balmér, P., *et al.* (1998) plantea soluciones para cumplir con las especificaciones del efluente, para cuando una planta para remoción de nitrógeno, ubicada en Göteborg, Suecia, se encuentra limitada en espacio y equipos.

Existen diferentes arreglos de equipos para lograr la desnitrificación, entre ellos se encuentran: Ludzack–Ettinger Modificado (*Modified Ludzack–Ettinger, MLE*), "step-feed", secuencia de reactores batch, Bio-denitro™, Nitrox™ y la zanja de oxidación con control de oxígeno disuelto [Metcalf, *et al.*, 2003]. El primer arreglo es el relevante para este estudio.

**Proceso Ludzack–Ettinger Modificado (*Modified Ludzack–Ettinger, MLE*).** El primer concepto de remoción biológica de nitrógeno preanóxico fue una secuencia de operación anóxico-aeróbica propuesta por Ludzack y Ettinger en 1962, al cual llamaron *Proceso Ludzack–Ettinger*. Este proceso se basa en que el nitrato formado en la zona aeróbica es regresado vía la recirculación de lodos (*RAS*) a la zona anóxica. Debido a que la única o principal alimentación de nitrato en la zona anóxica es aquella del *RAS*, la desnitrificación se ve limitada enormemente por la relación de recirculación. Sin embargo, este proceso ha sido utilizado para incrementar la relación de recirculación del *RAS* y prevenir el aumento del lodo en los sedimentadores secundarios debido a la desnitrificación.

En 1973 Barnard mejora el diseño original de Ludzack-Ettinger al proporcionar una recirculación interna para alimentar mas nitrato a la zona anóxica directamente de la zona aeróbica, y al cual se le conoce como *Proceso Ludzack–Ettinger Modificado*. Tanto la velocidad de desnitrificación como la eficiencia global de remoción de nitrógeno aumentan debido a que se modifican, tanto el tiempo de retención de la zona anóxica como los efectos de las recirculaciones interna y de lodos, principalmente.

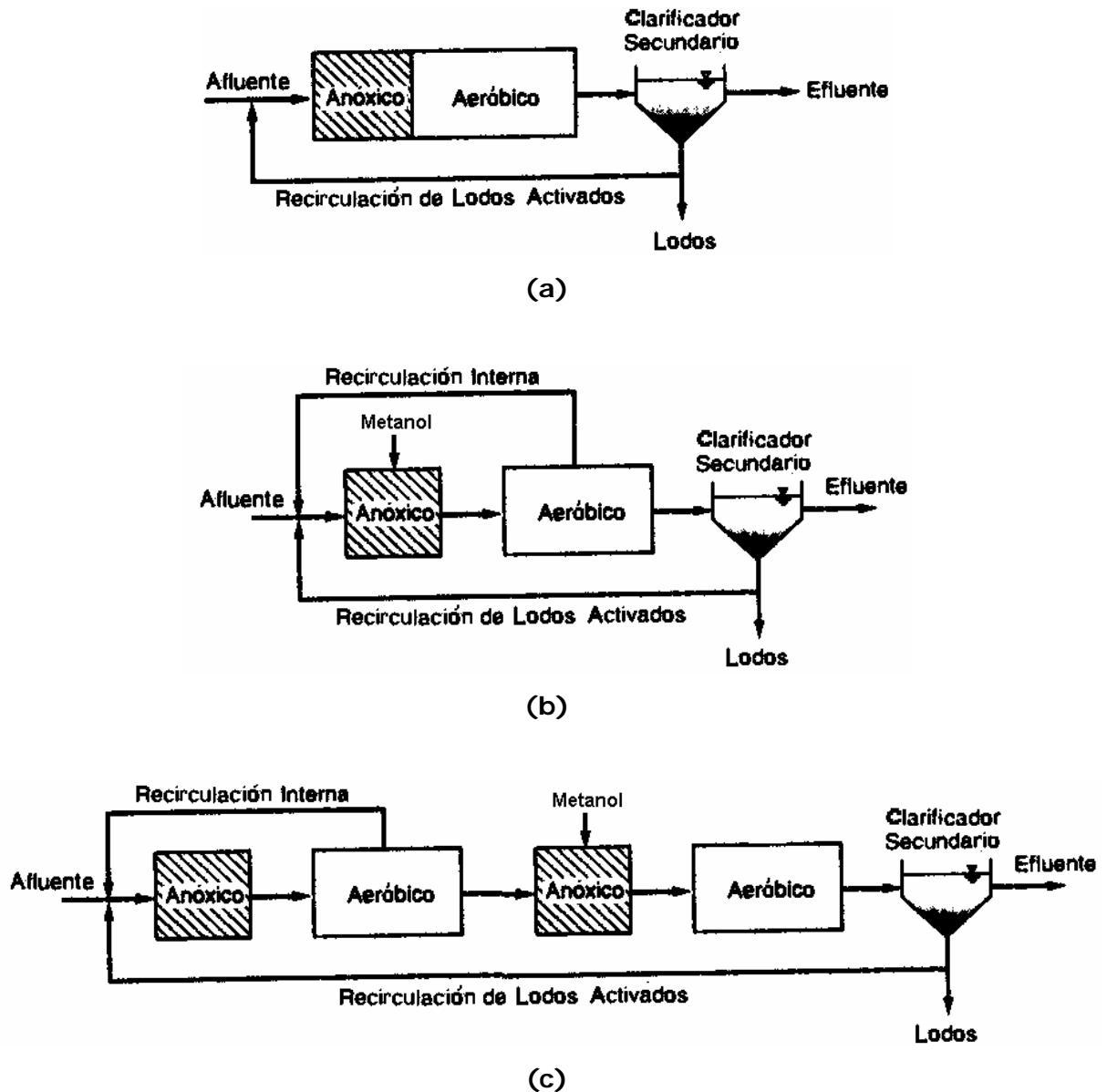
La relación de la recirculación interna (*Internal Recycle Ratio, IR*) ó velocidad característica del gasto de recirculación del licor mezclado se define como el gasto de recirculación dividido entre el gasto del agua residual de entrada ( $Q_{int}/Q_{in}$ ). Típicamente se encuentra en el intervalo de 3 a 4 veces el gasto de alimentación. Con suficiente *BOD* de entrada y tiempo de contacto anóxico, estas relaciones de recirculación resultan en un concentración promedio del efluente de *N*-nitratos de 4 a 7 mg/L, cuando se trata de agua residual doméstica.

Las relaciones de *IR* entre 2 y 3 son aplicadas para aguas residuales con concentraciones bajas de nitrógeno total Kjeldahl (*TKN*) de entrada. Las relaciones de recirculación arriba de 4, generalmente no garantizan el buen funcionamiento, ya que en la remoción resultante de *N*-nitratos es baja y el *DO* es recirculado en mayores proporciones, de la zona aeróbica a la anóxica [Metcalf, *et al.*, 2003]. Con altas relaciones de *IR*, el *rbCOD* de entrada es diluido en el reactor anóxico por el licor mezclado del reactor aeróbico, resultando en una baja velocidad de desnitrificación.

El proceso *MLE* es uno de los métodos más comunes para la remoción biológica de nitrógeno y puede ser adaptado fácilmente a instalaciones de lodos activados ya existentes [Bortone, G., *et al.*, 1994]. La cantidad de nitrógeno removido está limitado por los niveles prácticos de la recirculación interna a la zona preanóxica, y el proceso es utilizado generalmente para alcanzar concentraciones de nitrógeno total en el efluente entre 5 y 10 mg/L. El control del oxígeno disuelto (*DO*) debe ser utilizado en la zona aeróbica de donde la corriente de recirculación sea tomada, para limitar la cantidad de *DO* alimentado a la zona anóxica [Metcalf, *et al.*, 2003].

Existe una modificación al *MLE* conocida como *eMLE* (*enhanced Modified Ludzack-Ettinger*), la cual utiliza un arreglo adicional del sistema anóxico-aeróbico para alcanzar una mayor remoción de nutrientes.

Algunos de los diagramas de flujo de los arreglos de equipo antes mencionados, se muestran en la Fig. 1.8.



**Fig. 1.8.** Proceso de remoción biológica de nitrógeno tipo (a) Ludzack-Ettinger, (b) Ludzack-Ettinger Modificado (*MLE*) y (c) Ludzack-Ettinger Modificado Mejorado (*eMLE*) [Metcalf, *et al.*, 2003; Copithorn, R., *et al.* 2005].

En los sistemas ilustrados en la Fig. 1.8, el tiempo de residencia de los sólidos biológicos (*Sludge Residence Time, SRT*) del reactor anóxico es de 1 a 4 días o mayor, cuando el agua residual contiene pequeñas cantidades de sustrato rápidamente biodegradable (*Soluble biodegradable Substrate, S<sub>s</sub>*) y cuando se requieren menores concentraciones de *N*-nitratos en el efluente. En cuanto al *SRT* aeróbico, éste está controlado por la

necesidad de mantener a la nitrificación estable por lo que los valores están entre 4 y 12 días, dependiendo de la temperatura [Grady, C.P.L., Jr., *et al.*, 1999].

En los sistemas de remoción de nitrógeno, el volumen de los reactores y por lo tanto el tiempo de residencia hidráulica (*Hydraulic Residence Time, HRT*), dependen de la concentración de los sólidos suspendidos del licor mezclado (*MLSS*) debido a que la masa de la biomasa en el sistema está fija, una vez que el *SRT* está determinado. En la zona anóxica, el *HRT* es de 1 a 4 h; mientras que en la aeróbica es de 4 a 12 h.

### Ventajas y Desventajas

El sistema preanóxico *MLE* es un proceso que en general: (i) ahorra energía principalmente en la aireación, ya que al utilizar nitrato para oxidar el *BOD* de la alimentación, se requiere menor cantidad de oxígeno para la aireación, (ii) remueve *BOD* antes de la zona aeróbica, (iii) produce alcalinidad antes de la nitrificación; o bien, puede ser proporcionada por la nitrificación y ahorrar costos, ya que ésta se utiliza en grandes cantidades para mantener un pH aceptable para el proceso de nitrificación, (iv) produce lodos con buenas características de sedimentación, (v) es muy adaptable al proceso de lodos activados preexistentes y (vi) alcanza niveles de 5 a 8 mg/L de nitrógeno total en el efluente.

Además, este sistema es el más utilizado por: (i) los beneficios en la selección de operaciones para el control del abultamiento del lodo y (ii) principalmente a la habilidad de convertir un sistema biológico de tratamiento de aguas normal, a uno de remoción de nitrógeno, con tiempos de retención relativamente cortos a moderados.

Tiene limitaciones en lo que corresponde a: (i) la capacidad de remoción de nitrógeno, ya que está en función de la recirculación interna, (ii) el potencial de crecimiento de microorganismos nocivos, principalmente de la especie *Norcadia* y, (iii) el control del oxígeno en la fase aerobia, ya que se requiere reducir antes de la recirculación interna para no afectar la desnitrificación.

## 1.2. SIMULACIÓN DE PROCESOS.

Se puede definir *simulación* como un proceso de imitación de un fenómeno real llamado sistema, a través de expresiones matemáticas (modelos) que pueden traducirse a un lenguaje de programación. El estudio de un sistema o sus partes se puede realizar mediante el manejo de ecuaciones, o bien por su modelo físico [García A., R., 2003].

Las dos características principales para una simulación son: la *precisión* de los resultados que depende, en gran parte, de la *exactitud* con que se estimen o determinen los parámetros de un sistema y, la confiabilidad y representatividad de los datos de entrada.

Por lo general, el estudio de sistemas para la simulación es de tres tipos [Gordon, 1991]:

- a). *Diseño de sistemas*, cuyo propósito es producir un modelo que satisfaga las especificaciones establecidas.
- b). *Análisis de sistemas*, con el cual se puede comprender la forma en que opera un sistema existente o propuesto. Los resultados obtenidos se interpretan en términos del comportamiento del mismo.
- c). *Postulación del sistema*, que es proponer el comportamiento de un sistema real a través de un modelo.

La combinación de estos tres es lo que lleva a definir el motivo y la justificación de una simulación. En caso de justificarse su uso, para que la simulación pueda ser una técnica eficiente de análisis para un estudio en particular [Schmidt *et al.*, 1979], se debe incluir la construcción del modelo, el análisis de un problema y su ejecución.

Según Fishwick, P.A. (1995), un proceso de simulación tiene tres etapas: (i) diseño del modelo, (ii) ejecución del modelo y (iii) análisis de la ejecución del modelo. En la Fig. 1.9 se presenta la interrelación que existe entre las tres etapas antes mencionadas y en la Fig. 1.10 se muestran los diferentes pasos que conforman cada una de dichas etapas.



**Fig. 1.9.** Correlación de las etapas de un proceso de simulación. Basada en Fishwick, 1995 [García-Arrazola, R., 2003].

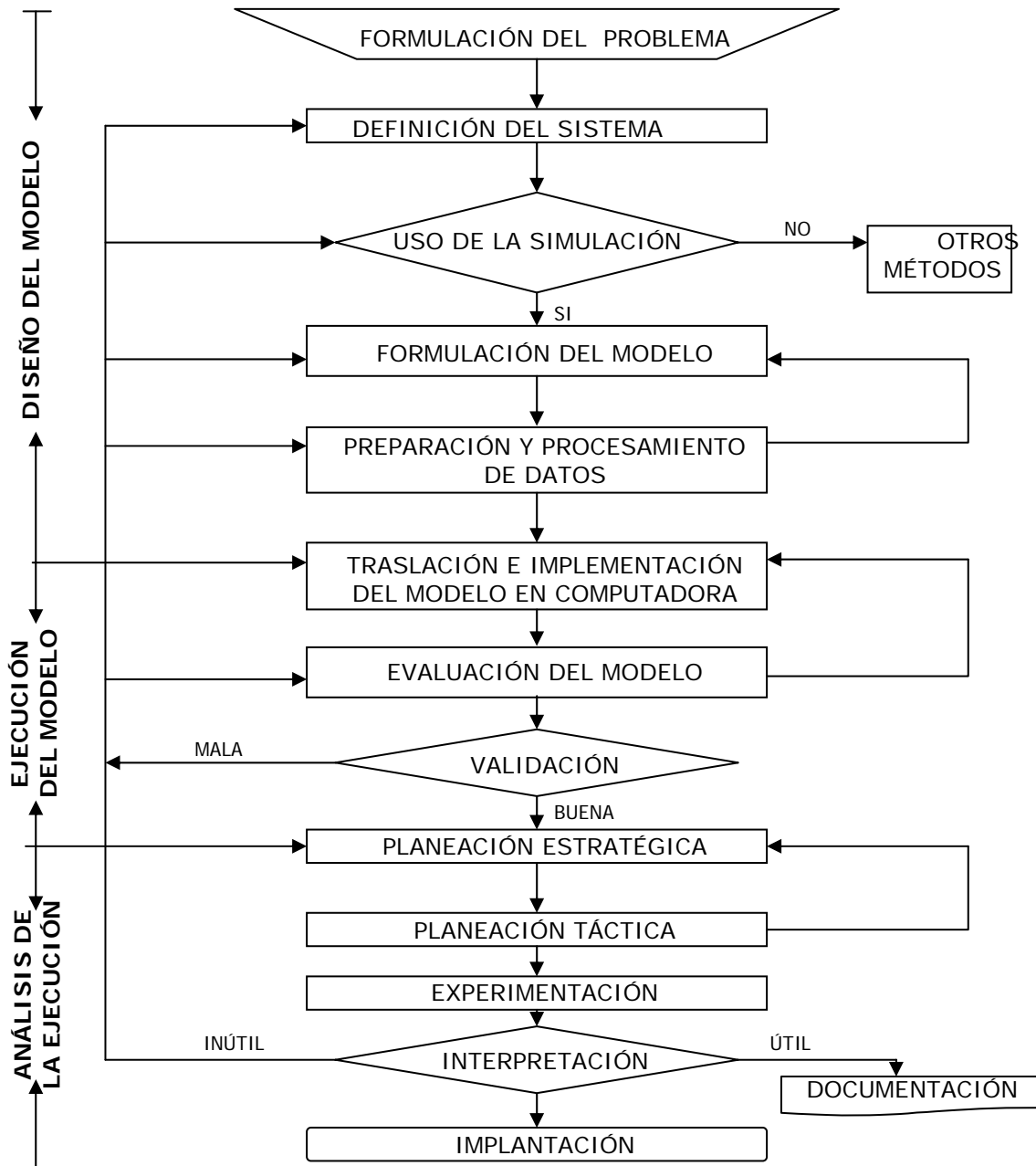
En cuanto a la categorización de un proceso de simulación, Sinnott (2001), los clasifica en dos tipos básicos:

- a). Simulación *modular-secuencial*, en donde las ecuaciones que describen cada unidad del proceso (módulo) son resueltas módulo por módulo de una manera gradual y son empleadas técnicas iterativas para resolver los problemas que emanan de la recirculación de la información.
- b). Simulación *simultánea ó basada en ecuaciones*, en donde el proceso entero es descrito por una serie de ecuaciones diferenciales que se resuelven simultáneamente.

En un programa modular secuencial, el programa principal determina la secuencia del diagrama de flujo y controla los cálculos. También contendrá procedimientos para la secuencia óptima de cálculos y rutinas para promover la convergencia. Se caracteriza porque es sencillo de desarrollar y requiere simulaciones o programas basados en ecuaciones. En cuanto a éstos últimos, su programa ejecutivo principal determina el diagrama de flujo y fija las ecuaciones que describen el proceso para posteriormente resolverlas.

La simulación basada en ecuaciones dinámicas requiere mayor tiempo para su convergencia. Esto ha dado lugar al desarrollo de programas híbridos en donde el simulador a régimen permanente es usado para generar condiciones iniciales para la simulación dinámica.





**Fig. 1.10.** Diagrama de las etapas de un proceso de simulación. Basado en Shannon, R.E. (1988) y Fishwick, P.A. (1995) [García-Arrazola, R., 2003].

Aunque la técnica de simulación generalmente se veía como un método de último recurso, recientemente los avances en las metodologías de simulación y la gran disponibilidad de *softwares* que existen en el mercado, la han convertido en una de las herramientas más ampliamente usadas en el análisis de sistemas y en una poderosa aplicación educativa y de entrenamiento [García-Arrazola, R., 2003].

Actualmente, la simulación se ha incorporado a distintas disciplinas científicas, con el objeto de describir o imitar un fenómeno real a través de los medios tecnológicos con los que hoy día se cuenta. De hecho, ésta ha sido una de las herramientas más importantes y útiles para diseñar y operar procesos o sistemas complejos, mediante un modelo que sirva como "teoría" o "hipótesis" del comportamiento real del sistema en función del tiempo, basada principalmente en la teoría de la probabilidad y estadística, en las matemáticas y en las ciencias computacionales.

La Ingeniería Ambiental y de Procesos no es la excepción en el uso de la simulación. Existen *softwares* comerciales, ó mejor conocidos como simuladores para el tratamiento de aguas residuales, tales como JASS [Uppsala University, 2006], AQUASIM y BioSys [Zeidan A., *et al.*, 2003], entre otros, que son producidos por compañías como Hydro-mantics Inc. [Barnett, M. W., *et al.*, 1995] y Aspen Technology, entre muchas otras. Dichas herramientas pueden modelar y optimizar procesos intermitentes o continuos y algunos de ellos realizar cálculos de costos y de diseño [Wild, D., *et al.*, 1995; Zeidan, A., *et al.*, 2003].

En cuanto a plantas de tratamiento de aguas residuales (*WWTPs*), la simulación dinámica es generalmente utilizada como una herramienta muy poderosa para incrementar el conocimiento detallado del proceso y en el comportamiento del sistema para estudios de optimización (por ejemplo: evaluación del desempeño de la planta, optimización de la operación, diseño de controladores y diseño del proceso), capacitación y enseñanza, y control de procesos basados en el modelo; con el objetivo de predecir los resultados de una futura operación de acuerdo a diferentes escenarios de situaciones difíciles que se pudieran presentar en las plantas [Coen, F., *et al.*, 1996; Sintic, A., *et al.*, 1998; Langergraber, G., *et al.*, 2004].

En una planta de tratamiento de aguas residuales, la simulación del reactor biológico y del sedimentador es de gran interés, debido a que éstos son los procesos que controlan las concentraciones de los componentes, la distribución del tamaño de partículas sólidas y, la biomasa viva y muerta presente en el sistema.

Asimismo, las condiciones de alimentación a las plantas de tratamiento de agua (*WWTPs*) cambian continuamente durante el día y de un día a otro [Zeidan, A., *et al.*,

2003], y además son afectadas por cambios climáticos que ocasionan que éstas sean impredecibles. Por ello, es muy importante entender y conocer la dinámica de la planta de tratamiento de aguas y esto se puede lograr mediante la simulación dinámica.

Durante la pasada década, la simulación dinámica de plantas de lodos activados ha incrementado su uso y alcance [Coen, F., *et al.*, 1996; Bury, S.J., *et al.*, 2002] tanto por científicos y técnicos en el manejo de las plantas tratadoras como Pons, M.N., *et al.* (1993), Ducato, R., *et al.* (1995), Koehne, M., *et al.* (1995) e Isaacs, S.H., *et al.* (1995), entre otros, que desarrollan modelos dinámicos; o bien, "*softwares*" que predicen la respuesta de las plantas bajo diversas condiciones (perturbaciones y diferentes gastos de entrada) para ayudar al diseño del nuevo control de la planta. También para asegurar el grado de purificación del agua para cumplir con los límites de descarga y al mismo tiempo, llevar tanto los costos ambientales como financieros al mínimo.

### **1.3. MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN PARA UN DISEÑO ROBUSTO.**

En un diseño robusto, el principal objetivo es encontrar un arreglo de factores tal que minimicen la variación de la respuesta, mientras se ajusta o conserva el proceso en el objetivo planteado. Después de determinar cuáles son los factores que afectan la variación, se pueden encontrar arreglos para los factores controlables que reduzcan a ésta y hagan al producto insensible a los factores de ruido o no controlables para optimizar un proceso, así como para evaluar la influencia de diferentes factores en éste [Venkata Mohan, S., *et al.*, 2005; Madaeni, S.S., *et al.*, 2006]. Con lo anterior, se pretende obtener una respuesta consistente, con el objetivo de alcanzar una alta calidad del producto o proceso y reducir los costos o pérdidas [Torng, C.C., *et al.*, 1998].

Actualmente, los ingenieros se apoyan cada vez más en la simulación por computadora para desarrollar nuevos productos y para comprender tecnologías emergentes, al presentarse diversas incertidumbres [Trosset, M.W., *et al.*, 2003], tales como: la variedad en cada lote de la materia prima y las diferentes condiciones climáticas y/o de operación que pueden afectar al producto o proceso, entre otras.

La aplicación de la *teoría de decisión estadística* (que provee el marco conceptual para cuantificar la incertidumbre) a un diseño robusto, no ha sido frecuentemente utilizada

en la ingeniería práctica; pero tanto Taguchi, G., *et al.* (1989) como Welch, W.J., *et al.* (1991) fueron los pioneros en aplicarla, mediante el diseño y análisis de experimentos por computadora. Existen algunos métodos para obtener un diseño robusto, tales como: el Método Taguchi (modelo del diseño de experimentos) y los Métodos basados en la sustitución (métodos de integración y de optimización), entre otros [Trosset, M.W., *et al.*, 2003; Kugele, S.C., *et al.*, 2007].

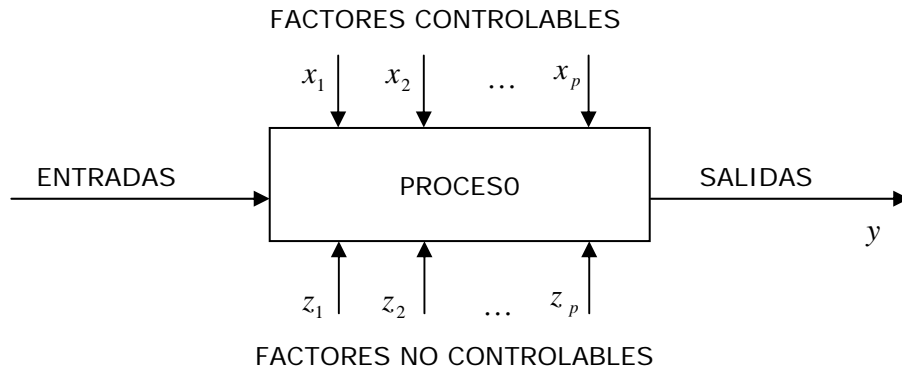
Adicionalmente a estos métodos, actualmente diversas herramientas comerciales (*ASPEN Custom Modeler* y *gProms*) se han desarrollado para dar robustez a los cálculos ingenieriles que simulan dinámicamente un proceso; por lo que, como una extensión a estas herramientas, se han aplicado métodos de optimización robustos a problemas de optimización dinámica [Bertsimas, D., 2002]; por lo tanto, ésta es considerada como un método que da robustez ya que la integran estrategias numéricas robustas que obtienen uno o varios óptimos. Este es el caso de Banga, J.R., *et al.* (2005) quienes realizan un estudio de diferentes bioprocesos en los que se aplican algunos métodos robustos de optimización dinámica.

A continuación se describen los métodos de diseño de experimentos y de optimización dinámica que son los que competen a esta investigación.

### **1.3.1. Diseño de Experimentos (DoE).**

El diseño de experimentos es un conjunto de técnicas matemáticas que permiten, de una forma metódica, determinar la relación que existe entre los factores controlables ( $x_i$ ) y los no controlables ( $z_i$ ) que afectan a un proceso, con su(s) variable(s) de salida(s) ( $y_i$ ). El modelo general de un proceso o sistema en estudio se ilustra en la Fig. 1.11.

Este método fue desarrollado por el reconocido biólogo, matemático y genetista inglés Sir Roland A. Fisher en 1920's y 1930 [Camo, 2006]. Su aportación ha contribuido a distintas disciplinas, áreas de investigación e industrias. En cuanto a la industria química, se puede referir al desarrollo de nuevos productos y mejoras de procesos, principalmente.



**Fig. 1.11.** Modelo general de un proceso o sistema [Montgomery, D.C., 2001].

El *DoE* consiste en realizar  $n$  número de experimentaciones en donde los factores más relevantes son variados sistemáticamente para analizar sus efectos, interacciones y sinergias en el sistema; y por consiguiente, identificar las condiciones óptimas. Esto, en consecuencia, resulta en un mayor conocimiento del fenómeno en estudio, permitiendo una disminución en el error experimental y en el tamaño del experimento; y por lo tanto, en costos.

Para construir un buen diseño, se debe elegir cuidadosamente el menor número de experimentos a realizar bajo condiciones controladas. Existen cuatro pasos para construir un diseño:

1. Reconocimiento y planteamiento del proceso en estudio.
2. Elección de los factores que van a ser controlados durante el experimento (variables de diseño) y los niveles o intervalos de variación.
3. Selección de las variables que serán medidas para describir la experimentación (variable respuesta).
4. Elección del diseño experimental de acuerdo con el objetivo, número de variables de diseño, precisión de las variables respuesta y costos.

La mayoría de los *DoE* se realizan para determinar las condiciones óptimas que producirán el mejor valor de las variables respuesta. Dependiendo del tipo de diseño (factorial, superficie de respuesta o mezcla), las condiciones de operación que se pueden

controlar pueden incluir una o varias de las siguientes variables de diseño: factores, componentes, variables de proceso o variables de peso [Minitab, 2003].

En cuanto a los modelos para el *DoE*, éstos pueden clasificarse según [García A., R., *et al.*, 2000]: (i) el número de factores y niveles, (ii) la presencia de bloques, (iii) por el tamaño de muestras que se emplea, (iv) si es no balanceado; es decir, si el número de observaciones es el mismo o no en cada nivel, (v) por el tipo de conclusiones que se pueden obtener (particulares o generales), (vi) por el tipo de estudio: preliminar, de comparación o completo y (vii) por su complejidad.

Los hay de un solo factor como el Diseño por Comparación, que puede ser con dos niveles (Modelo de Comparación Simple), o con tres o más niveles (Modelo de Comparación Múltiple de Efectos Aleatorios) y el Diseño con Formación de bloques. También los hay de dos o más factores como los Diseños con Formación de Bloques Completos (Modelo del Cuadrado Grecolatino), de Bloques Incompletos (Modelo de Cuadrado de Youden) y, los Diseños Factoriales Completos y Parciales (Modelo Taguchi, Modelo Factorial Parcial Fraccional), entre otros [Montgomery, D.C., 2001].

En este estudio se aplicó, de acuerdo a una investigación realizada de forma paralela a éste, el Modelo Taguchi o también conocido como Método Taguchi y el Modelo Factorial Parcial Fraccional que a continuación se describen.

### ***Método ó Modelo Taguchi.***

El diseño de parámetros de Taguchi es una importante herramienta para un diseño robusto que ofrece una aproximación sencilla y sistemática para optimizar el funcionamiento, calidad y/o costo de un proceso. Está basado en el diseño estadístico de experimentos, y su uso disminuye significativamente el tiempo de la investigación experimental, resultando en la identificación de los factores más y menos importantes para el producto o proceso a partir de un estudio multifactorial. Es muy importante mencionar que la selección y definición de los factores controlables y no controlables es clave para una buena comprensión y representación del problema [Madaeni, S.S., *et al.*, 2006].

## Características

Se distinguen tres etapas para diseñar un producto o proceso que sea robusto a pesar de los cambios ambientales no controlables [Barrado, E., 1996; Torng, C.C., *et al.*, 1998; Trosset, M.W., *et al.*, 2003]: (i) diseño del sistema, (ii) diseño de parámetros y (iii) diseño de la tolerancia.

**(i) Diseño del sistema**, donde se determina la región específica de interés para una optimización.

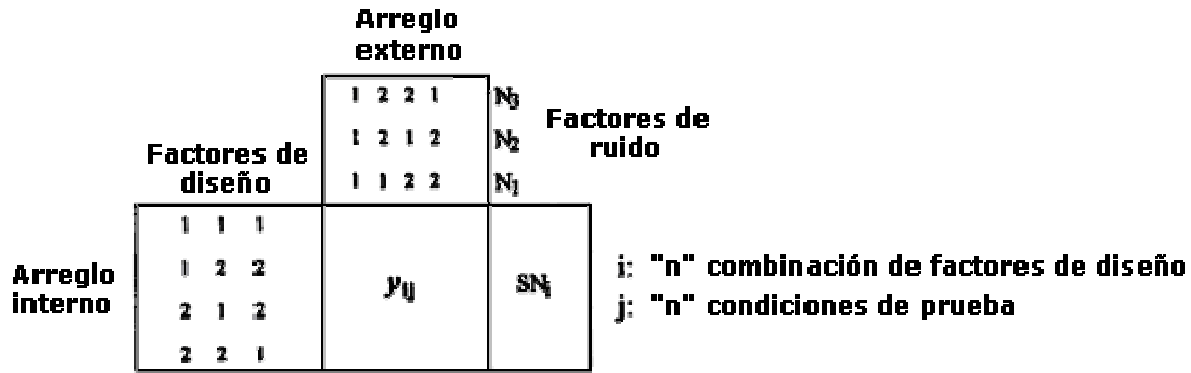
**(ii) Diseño de parámetros**, donde se seleccionan los parámetros de diseño o factores controlables (aquellas variables fácilmente controlables o manipuladas por el diseñador), las variables ruido (aquellas variables que son difíciles de controlar y que generalmente son ambientales) para minimizar algún efecto no deseado, las interacciones entre factores que afecten las variables respuestas, los niveles de los factores a ser probados y las variables respuestas.

Es en esta etapa donde se busca tanto minimizar la variación, como robustecer el producto o proceso de forma consistente bajo condiciones ambientales adversas, a través de seleccionar el arreglo ortogonal (*Orthogonal Arrays, OA*) adecuado para reducir los errores experimentales y aumentar la eficiencia y reproducción del experimento. La importancia de estos arreglos es que permiten a los diseñadores o experimentadores estudiar varios factores de diseño simultáneamente y obtener información suficiente con un mínimo de tiempo y recursos [Torng, C.C., *et al.*, 1998].

Para un diseño robusto, Taguchi sugiere emplear los *OA's* para tener un diseño, tal que los factores sean asignados en un arreglo interno y los factores de ruido en uno externo. Esto provoca que los factores de ruido no estén mezclados con los factores de diseño en un *OA* simple, sino que sean asignados separadamente para formar diferentes condiciones de prueba con la finalidad de medir apropiadamente un valor de *S/N* que muestre una sensibilidad característica del comportamiento de los factores de ruido.

Lo anterior hace que el proceso sea robusto y minimice los efectos de ruido mediante la sintonización de los factores controlables importantes; por ello, la importancia de la

selección de los factores ruido. En el caso de fallar en la identificación de los factores controlables y de ruido, sus niveles pueden ocasionar conclusiones erróneas y por lo tanto, incrementar los costos experimentales y operativos [Torng, C.C., *et al.*, 1998]. En la Fig. 1.12 se ilustra una estrategia típica experimental para un diseño robusto.



**Fig. 1.12.** Estrategia típica experimental para un diseño robusto utilizando el Método Taguchi con dos niveles [Lim, J.M., *et al.*, 1996].

Posteriormente a la selección del OA, se ejecutan los tratamientos, se realiza un análisis de los datos y de la relación señal a ruido (*Signal to Noise Ratio, S/N*) que es un indicador de la calidad con el cual se evalúa el efecto de cambio de un parámetro de diseño en particular en el funcionamiento del producto o proceso, y se determinan los niveles óptimos de los factores por medio de un análisis de los datos experimentales utilizando ANOVA (*Analysis of Variance*) y también de los efectos de los factores, para finalmente conducir un experimento comprobatorio.

Es importante mencionar que los resultados obtenidos en el DoE son válidos solamente en la región experimental estudiada y que está limitada por los niveles de los factores involucrados [Venkata Mohan, S., *et al.*, 2005].

**(iii) Diseño de la tolerancia**, que sólo se aplica cuando la reducción en la variación de las características funcionales alcanzadas por los parámetros de diseño son insuficientes.

Por otra parte, el Método Taguchi clasifica a las variables respuestas en: (i) el mayor es el mejor, (ii) el nominal es el mejor y (iii) el menor es el mejor. En la Tabla 1.1 se



muestran las principales características de cada una de estas alternativas para el cálculo de  $S/N$ . En esta tabla  $y_i$  representa a las respuestas obtenidas por la combinación de niveles de los factores,  $\bar{y}_i$  a la media de la muestra,  $n$  al número de respuestas en el nivel de combinación del factor y  $\sigma$  a la desviación estándar de la muestra.

**Tabla 1.1.**  
Clasificación de las variables respuesta del Modelo Taguchi [Minitab, 2003].

ALTERNATIVAS	FÓRMULAS DE RELACIÓN $S/N$	OBJETIVO DE APLICACIÓN	TIPO DE DATOS
1. El mayor es el mejor	$S/N = -10 \cdot \log \left( \frac{\sum_{i=1}^n \left( \frac{1}{y_i^2} \right)}{n} \right)$	Maximizar la respuesta	Positivos
2. El nominal es el mejor	$S/N = -10 \cdot \log(\sigma^2)$	Especificar la respuesta y que la relación $S/N$ se base en desviaciones estándar únicamente	Positivos, cero, o negativos
El nominal es el mejor (modificado)**	$S/N = 10 \cdot \log \left( \frac{\bar{y}_i^2}{\sigma^2} \right)$ <p>La fórmula ajustada es:</p> $S/N = 10 \cdot \log \left( \frac{\bar{y}_i^2 - \sigma^2/n}{\sigma^2} \right)$	Especificar la respuesta y que la relación $S/N$ se base en medias y desviaciones estándar	No negativo, con un "cero absoluto" en donde la desviación estándar es cero cuando la media es cero
3. El menor es el mejor	$S/N = -10 \cdot \log \left( \frac{\sum_{i=1}^n (y_i^2)}{n} \right)$	Minimizar la respuesta	No negativo, con un valor objetivo de cero

\*\*Es útil para analizar o identificar factores de escalamiento, cuyas medias y desviaciones estándar varían proporcionalmente. Estos pueden utilizarse para ajustar las medias específicas son afectar las relaciones  $S/N$ .

Por lo tanto, el objetivo de un diseño robusto es encontrar los factores de diseño del proceso que minimicen una función de mínimos cuadrados y que sea equivalente a maximizar la relación  $S/N$  [Lim, J.M., *et al.*, 1996], ya que esta última siempre se maximizará sin importar qué tipo de indicador de calidad o factor se trate [Torng, C.C., *et al.*, 1998].

**Importancia.**

El Modelo Taguchi es internacionalmente reconocido y utilizado por diversos autores en diferentes áreas, tales como manufactura de automóviles y microelectrónica, proce-

tos químicos, ambientales y metalúrgicos, modernización ó "*revamping*" de diversos procesos, investigación y desarrollo, y desarrollo de nuevos productos, entre otros [Chen, J., *et al.*, 2002]. Su aplicación ha provocado cambios significativos a organizaciones industriales del Japón y a procesos manufactureros y de control de calidad total en Estados Unidos. Recientemente ha tomado importancia en ingeniería ambiental y en la optimización de procesos bioquímicos [Venkata Mohan, S., *et al.*, 2005].

En cuanto al área ambiental, en 1996 Barrado, E., *et al.* utilizaron el método de Taguchi para optimizar el procedimiento de purificación de una agua residual contaminada con metales para bajar costos y experimentaciones. Años más tarde, en 1998, optimizaron los factores controlables utilizando un Taguchi para alcanzar la máxima eficiencia de la purificación del proceso y un residuo sólido que maximice la permeabilidad magnética y permita su uso en diferentes aplicaciones.

En 2002, Tomita, R.K., *et al.* realizaron un trabajo de análisis de un ASP donde el uso de dicho modelo facilitó el monitoreo y diagnóstico del sistema. También Chen, J., *et al.* utilizaron Taguchi para el diseño y análisis del efecto de cada variable para alcanzar la función objetivo óptima. En años más recientes, en 2005, Chidambara Raj, C.B., *et al.* utilizaron el Taguchi para la integración de los procesos avanzados de oxidación (*Advanced Oxidation Processes, AOP*) en tratamientos biológicos de agua residuales. En este mismo año, Venkata Mohan, S., *et al.* evaluaron y optimizaron con Taguchi un proceso anaeróbico y en 2006, Madaeni, S.S., *et al.* emplearon el método para optimizar el flux de un agua industrial contaminada con concentraciones excesivas y químicos peligrosos.

### ***Modelo Factorial Parcial Fraccional.***

El Modelo Factorial involucra el estudio de los efectos de uno o más factores. En cada tratamiento o corrida, todas las combinaciones de los niveles de los factores son investigados ya que se encuentran en un arreglo cruzado.

La relación entre factores puede producir efectos. El efecto de un factor está definido como el cambio en la respuesta producida por un cambio en el nivel del factor. Esto es frecuentemente llamado *efecto principal* porque se refiere a los factores más importan-

tes del experimento. Además, pueden existir diferencias de las respuestas entre los niveles de cada factor, por lo que se presenta una *interacción* entre ellos.

Para el caso de un diseño factorial completo, éste mide las respuestas de todas las combinaciones posibles de los niveles de los factores; por el contrario, el fraccional excluye una o más combinaciones por lo que se reducen los tratamientos; y por consiguiente, el tiempo empleado para obtener las respuestas.

Asimismo, el Modelo Factorial Parcial Fraccional puede establecerse con y sin formación de bloques. Por un lado, *sin formación de bloques* permite el estudio simultáneo de los efectos de diversos factores en un proceso, variando paralelamente los niveles de los factores para encontrar los efectos de los factores y sus interacciones. La combinación de los niveles de los factores representan las condiciones a las cuales las respuestas serán medidas. Cada condición experimental es conocida como *tratamiento*, la respuesta medida como *observación* y el conjunto de tratamientos *diseño*.

Un modelo sin formación de bloques se emplea cuando se tienen varios factores y se desconoce el orden de su importancia. En vez de variar los factores uno por uno, se manejan todos a la vez con el mínimo de experimentos necesarios. El caso más usual es un diseño de dos niveles con  $k$  factores; es decir,  $2^k$  con  $k = 2, 3, 4... n$  y es el que se emplea en este estudio.

Por otro lado, un Modelo Factorial Parcial Fraccional con Formación de Bloques Completos es un diseño con mediciones repetidas, las cuales están generadas sobre la misma variable respuesta. Para un experimento con mediciones repetidas, las variables del bloque son el conjunto de variables respuestas y el tiempo.

Al igual que el Modelo de Taguchi, el Modelo Factorial se ha empleado en diferentes áreas de aplicación como es el ambiental. En 1995, Wik, T., *et al.* estudiaron, mediante un diseño factorial  $2^2$ , la influencia del gasto de entrada a la planta y las concentraciones de amonio de la alimentación en la velocidad de nitrificación. Un año más tarde, Barlindhaug, J., *et al.* realizaron un estudio a través de un diseño factorial fraccional  $2^{5-1}$  para encontrar las condiciones de hidrólisis óptimas en una planta post-desnitrificadora en Noruega.

De acuerdo a las experiencias que se han tenido internacionalmente en el uso del Taguchi y del Factorial en aplicaciones ambientales, se decidió considerar el estudio paralelo a este proyecto, al estimar que se daría robustez a la optimización y a los resultados.

### 1.3.2. Optimización Dinámica.

En un problema continuo de optimización dinámica, existen tres aproximaciones para determinar la magnitud óptima de las variables escogidas en cada tiempo de un intervalo dado, las cuales son: (i) programación dinámica, (ii) cálculo de variaciones y (iii) control óptimo [Torres, D.F.M., 2002]. El *control óptimo* es el de mayor interés, ya que ha permitido optimizar problemas de ingeniería, debido a la capacidad que tiene de establecer restricciones en las variables y en las funciones no suavizadas ("*nonsmooth*").

Como fundamento de la teoría del control óptimo está el *Principio Máximo de Pontryagin* [Pontryagin, L.S., *et al.*, 1962; Dunn, J.C., 1967; Warga, J., 1978; Sarychev, A.V., *et al.*, 1992; Ledzewicz, U., *et al.*, 1997], el cual asume que los controles involucrados son funciones medibles y limitadas por el tiempo [Little, G., *et al.*, 1996] y cuyas soluciones son conocidas como "*Pontryagin extremals*", que son obtenidas mediante una función Hamiltoniana ( $H$ ) relacionada con la función Lagrangeana empleada en el cálculo de problemas de optimización ordinarios.

Un problema de control óptimo en la forma de Lagrange ( $L$ ), con tiempo inicial fijo ( $a$ ) y un tiempo final fijo ( $b$ ) donde  $a < b$  y, cuyo objetivo es minimizar la función costo ( $J$ ), es llamado índice de funcionamiento y se expresa como [Sarychev, A.V., *et al.*, 1992; Dmitruk, A.V., 1997; Torres, D.F.M., 2002]:

$$J[x(\cdot), u(\cdot)] = \int_a^b L(t, x(t), u(t)) dt \quad (1-1)$$

bajo las restricciones:

$$\dot{x}(t) = \varphi(t, x(t), u(t)) \quad (1-2)$$

$$x(a) = x_0 \tag{1-3}$$

$$x(b) = x_1 \tag{1-4}$$

donde  $x \in AC^m[a, b]$  es la variable de estado ( $AC^m$  es el espacio  $m$ -dimensional de funciones completamente continuas) y  $u \in L_\infty^r[a, b]$  es la variable de control (con dimensiones  $m$  y  $r$ , respectivamente).

De entre todas las soluciones del vector de la ecuación diferencial ( $x(t)$ ), la trayectoria de estado ( $x(\cdot)$ ) es un  $m$ -vector de funciones completamente continuas:

$$x(\cdot) \in W_{1,1}([a, b]; \mathbb{R}^m) \tag{1-5}$$

y la trayectoria de control ( $u(\cdot)$ ) es un  $r$ -vector de funciones medibles y limitadas para satisfacer la restricción  $u(t) \in \Omega$ , por lo que:

$$u(\cdot) \in L_\infty([a, b]; \Omega \subseteq \mathbb{R}^r) \tag{1-6}$$

siendo ésta una función de control llamada *control admisible*.

**Teorema 1 (Principio Máximo de Pontryagin).** Sea  $(x(\cdot), u(\cdot))$  un minimizador del problema de control óptimo. Luego entonces, existe un par distinto a cero  $(\psi_0, \psi(\cdot))$ , donde  $\psi_0 \leq 0$  es una constante y  $\psi(\cdot)$  es un  $n$ -vector de funciones completamente continuas con dominio  $[a, b]$ , tal que se mantiene para casi todo  $t$  en el intervalo  $[a, b]$ :

(i). Sistema Hamiltoniano:

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \frac{\partial H(t, x(t), u(t), \psi_0, \psi(t))}{\partial \psi} \\ \dot{\psi}(t) = -\frac{\partial H(t, x(t), u(t), \psi_0, \psi(t))}{\partial x} \end{cases} \tag{1-7}$$

(ii). Condición máxima:

$$H(t, x(t), u(t), \psi_0, \psi(t)) = \max_{v \in \Omega} H(t, x(t), v, \psi_0, \psi(t)) \quad (1-8)$$

Con el Hamiltoniano:

$$H(t, x(t), u(t), \psi_0, \psi(t)) = \psi_0 L(t, x, u) + \psi \cdot \varphi(t, x, u) \quad (1-9)$$

la condición máxima es un problema de optimización estático.

El cuádruplo  $(x(\cdot), u(\cdot), \psi_0, \psi(\cdot))$  que satisface la (Ec. 1-7) y la (Ec. 1-8) es llamado "*Pontryagin extremals*". Los "*extremals*" se clasifican en tres tipos: (i) no singulares, (ii) no singulares por secciones y (iii) singulares ó conocidos como "*bang-bang*" [Dunn, J.C., 1967; Corrigan, G., *et al.*, 1988; Sarychev, A.V., *et al.*, 1992].

La metodología de solución del problema óptimo, (Ec. 1-1) a (Ec. 1-4) vía el *Principio Máximo*, consiste en encontrar las soluciones del sistema Hamiltoniano mediante la eliminación del control, con la ayuda de la condición máxima. Las soluciones óptimas requeridas se encuentran entre estos "*extremals*".

Para problemas autónomos de control óptimo, es decir cuando  $H$  no depende explícitamente del tiempo ( $t$ ), los "*Pontryagin extremals*" tienen la propiedad de hacer que el Hamiltoniano correspondiente sea constante:

$$H(t, x(t), u(t), \psi_0, \psi(t)) \equiv \text{constante} \quad , \quad t \in [a, b] \quad (1-10)$$

en todos los valores del tiempo donde coincida con  $H$  para  $t \notin W$ , donde  $W$  es un sistema finito de discontinuidades de  $u(t)$ ; aunque esto, según diversos autores, es por tramos ya que sólo se toma un valor fijo entre las discontinuidades del control óptimo. Esto lo resuelven Little, G., *et al.* (1996) al establecer un argumento de continuidad para eliminar esta dificultad.

Por otro lado se encuentran los problemas no autónomos de control óptimo que se caracterizan por depender explícitamente del tiempo, por lo que la derivada total con respecto al tiempo del Hamiltoniano correspondiente, equivale a la derivada parcial del Hamiltoniano con respecto al tiempo:

$$\frac{dH}{dt}(t, x(t), u(t), \psi_0, \psi(t)) = \frac{\partial H}{\partial t}(t, x(t), u(t), \psi_0, \psi(t)) \quad (1-11)$$

Si  $(x(\cdot), u(\cdot), \psi_0, \psi(\cdot))$  es un "Pontryagin extremal", entonces la función  $H(t, x(t), u(t), \psi_0, \psi(t))$  es una función completamente continua de  $t$  y satisface la igualdad de la (Ec. 1-11).

Un problema de optimización dinámica general se puede establecer como [Cervantes, A.M., *et al.*, 2000; Biegler, L.T., *et al.*, 2004; Flores-Tlacuahuac, A., *et al.*, 2006]:

$$\min_{z(t), y(t), u(t), t_f, p} = \varphi(z(t_f), y(t_f), u(t_f), t_f, p) \quad (1-12)$$

sujeto a,

Modelo DAE:

$$F\left(\frac{dz(t)}{dt}, z(t), y(t), u(t), t, p\right) = 0 \quad (1-13)$$

$$G(z(t), y(t), u(t), t, p) = 0 \quad (1-14)$$

Condiciones iniciales:

$$z(0) = z^0 \quad (1-15)$$

Condiciones internas:

$$H_s(z(t_s), y(t_s), u(t_s), t_s, p) = 0 \quad (1-16)$$

Condiciones límite:

$$\begin{aligned}
 z^L &\leq z(t) \leq z^U \\
 y^L &\leq y(t) \leq y^U \\
 u^L &\leq u(t) \leq u^U \\
 p^L &\leq p \leq p^U \\
 t_f^L &\leq t_f \leq t_f^U
 \end{aligned}
 \tag{1-17}$$

donde,  $\varphi$  es una función objetivo escalar,  $F$  las restricciones como ecuaciones diferenciales,  $G$  las restricciones como ecuaciones algebraicas,  $H_s$  las condiciones internas adicionales en tiempos fijos  $t_s$ ,  $z$  el vector de los perfiles del estado diferencial,  $z^0$  los valores iniciales de  $z$ ,  $y$  los vectores de los perfiles del estado algebraico,  $u$  los vectores de los perfiles de control y  $p$  un vector del parámetro dependiente del tiempo.

La formulación del Modelo *DAE* consiste en ecuaciones álgebra-diferenciales (*Differential-Algebraic Equation, DAE*) en las que, las ecuaciones diferenciales describen el comportamiento dinámico del sistema (proceso químico) como balances de masa y energía y, las ecuaciones algebraicas, pueden mostrar las relaciones fisicoquímicas y termodinámicas del sistema [Biegler, L.T., 2004]. Esta formulación tiene limitantes como es el uso de valores iniciales, ya que puede causar muchas veces inestabilidad. Por ello, se han buscado técnicas de optimización que haga más confiable su uso. [Cervantes, A.M., *et al.*, 2000; Lang, Y.D., *et al.*, 2007].

Para la búsqueda de la solución del problema de optimización dinámica, descrito en (Ec 1-12) a (Ec. 1-17), se asume que el índice del sistema de *DAE* es uno y que las condiciones iniciales son consistentes y están disponibles [Biegler, L.T., *et al.*, 2004]. Éste puede ser resuelto ya sea por una aproximación variable, que trabaja bien en problemas sin límites; o bien, aplicando un “*solver*” de programación no lineal (*Nonlinear Programming Problem, NLP*) al modelo *DAE*. Este último se divide en dos estrategias: (i) *secuencial* o *parametrización de variables de control* y (ii) *simultánea*. Existen otros métodos como los de discretización parcial y los de discretización completa, pero este último es el de mayor aplicación [Cervantes, A.M., *et al.*, 2000; Biegler, L.T., *et al.*, 2002; Biegler, L.T., *et al.*, 2004].



Cabe señalar que en el presente estudio, la optimización dinámica simultánea es la de interés, así como el método de discretización completa que se describen enseguida.

### ***Optimización Dinámica Simultánea.***

El método de optimización dinámica simultánea es también conocida como *método de transcripción directa* [Biegler, L.T., *et al.*, 2002; Kameswaran, S., *et al.*, 2006]. Esta aproximación relaciona la solución del sistema *DAE* con el problema de optimización. Esta técnica discretiza las variables de estado y de control, ya que el problema de programación no lineal (*Non-linear Programming, NLP*) de gran escala empleado, puede requerir estrategias de solución especiales.

Tiene ventajas para los problemas con restricciones y para sistemas donde las inestabilidades ocurren en un intervalo de entradas. Además resuelve una sola vez el sistema *DAE* en el punto óptimo y por ende, evita soluciones intermedias que puedan interferir en la solución final [Cervantes, A.M., *et al.*, 2000].

La principal ventaja de la optimización simultánea es que las restricciones con igualdades y desigualdades son manejadas de una manera directa. La principal desventaja es que el número de restricciones algebraicas y de decisión tienden a incrementar drásticamente el tamaño del sistema *DAE*.

La complejidad de estos problemas está relacionados con la presencia de grandes sistemas de ecuaciones álgebra-diferenciales altamente no lineales; pero actualmente existen "*solvers*" de *NLP* que manejan  $10^5$  a  $10^6$  variables y restricciones. También pueden presentarse problemas numéricos en la optimización debido a múltiples estados estacionarios y comportamientos oscilatorios, entre otros; por lo que la solución eficiente de un problema de optimización no lineal de gran escala es todo un reto [Zavala, V.M., *et al.*, 2005].

Para resolver problemas de optimización simultánea por el método de discretización completa, es frecuentemente utilizado el método de programación cuadrática sucesiva (*Successive Quadratic Programming, SQP*), ya sea en espacio completo o reducido. Los métodos de espacio completo toman ventaja en la estructura del problema de optimiza-

ción *DAE* y en la región total del modelo. También cuando hay muchos grados de libertad, las condiciones óptimas pueden ser almacenadas y factorizadas eficientemente [Cervantes, A.M., *et al.*, 2000; Biegler, L.T., *et al.*, 2004].

En el método de discretización completa hay dos formas de aproximación para discretizar explícitamente las variables de estado: (i) tiro múltiple y (ii) colocación en elementos finitos [Biegler, L.T., *et al.*, 2004]. En años recientes, se ha desarrollado significativamente la formulación de problemas de optimización dinámica simultánea usando colocación en elementos finitos y cuya solución es mediante “*solvers*” de gran alcance de *NLP*, como *IPOPT* y *IPOPT-C*, que resuelven sistemas continuos de optimización no lineal a gran escala [Lang, Y.D., *et al.*, 2007; Wikipaedia, 2007].

A continuación se muestra la formulación y solución de un problema de optimización *DAE*.

**Optimización *DAE*.** [Cervantes, A.M., *et al.*, 2000; Biegler, L.T., 2002; Lang, Y.D., *et al.*, 2007]

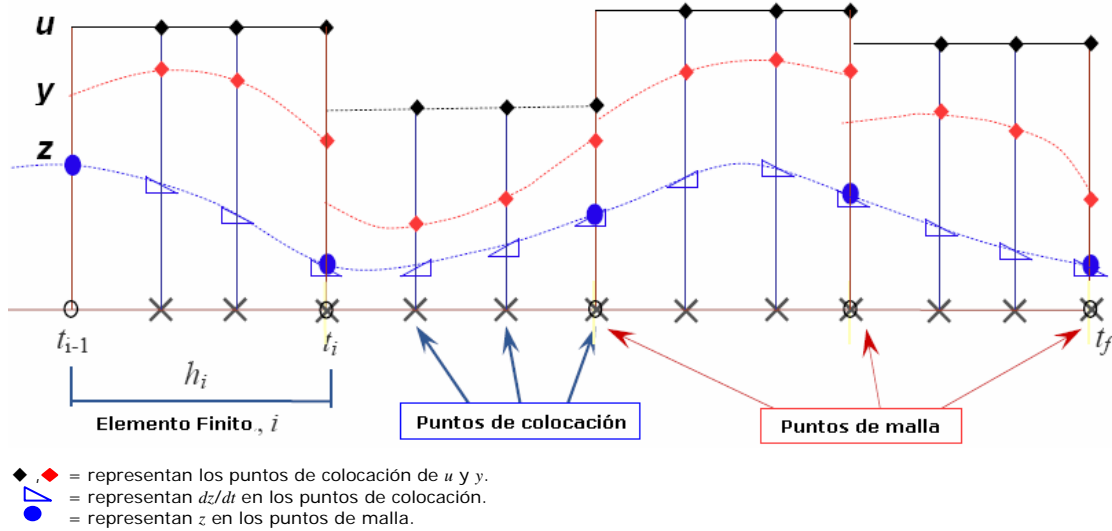
El problema de optimización *DAE* se convierte en un *NLP*, aproximando los perfiles de control y de estado, en una familia de polinomios en los elementos finitos. Los perfiles de las diferenciales se expresan en representación base monomial, como sigue:

$$z(t) = z_{i-1} + h_i \sum_{q=1}^{ncol} \Omega_q \left( \frac{t - t_{i-1}}{h_i} \right) \frac{dz}{dt_{i,q}} \quad (1-18)$$

donde  $z_{i-1}$  es el valor de la variable diferenciada al inicio del elemento  $i$ ,  $h_i$  es la longitud del elemento  $i$ ,  $dz/dt_{i,q}$  es el valor de la primera derivada en el elemento  $i$  del punto de colocación  $q$ , y  $\Omega_q$  es un polinomio de orden  $ncol$ .

Los puntos de colocación de Radau son utilizados en esta formulación, ya que permiten fijar fácilmente las restricciones al final de cada uno de los elementos y estabilizan el sistema más eficientemente. También es utilizada para discretizar las ecuaciones álgebra-diferenciales en un conjunto de ecuaciones algebraicas.

En la Fig. 1.13 se ilustra la colocación en elementos finitos, donde la discontinuidad de  $u$  y  $y$  es permitida en los puntos de malla, mientras que la continuidad de  $z$  es mantenida siempre.



**Fig. 1.13.** Colocación en elementos finitos [Lang, Y.D., *et al.*, 2007].

Los perfiles algebraicos y de control son aproximados usando la misma representación en base monomial que la (Ec. 1-18), la cual, en la ausencia de continuidad a través de los elementos, toma la forma de:

$$y(t) = \sum_{q=1}^{ncol} \Psi_q \left( \frac{t - t_{i-1}}{h_i} \right) y_{i,q} \tag{1-19}$$

$$u(t) = \sum_{q=1}^{ncol} \Psi_q \left( \frac{t - t_{i-1}}{h_i} \right) u_{i,q} \tag{1-20}$$

donde  $y_{i,q}$  y  $u_{i,q}$  representan los valores de las variables algebraicas y de control, respectivamente, en el elemento  $i$  en un punto de colocación  $q$ , y  $\Psi_q$  es un polinomio de Lagrange de orden  $ncol$ .

Las variables diferenciadas se requieren continuas a través del tiempo, mientras que las variables algebraicas y de control pueden ser discontinuas en los límites de los elementos.

Asumiendo que el número de elementos finitos  $ne$  y su longitud están predeterminados, se sustituyen las (Ec. 1-18) a Ec. (1-20) en la (Ec. 1-1) para obtener el siguiente *NLP*:

$$\min_{x \in \mathfrak{R}^n} f(x) \quad (1-21)$$

sujeto a,

$$c(x) = 0 \quad (1-22)$$

$$x^L \leq x \leq x^U \quad (1-23)$$

donde,

$$f : \mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}$$

$$c : \mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}$$

$$x = \left( \frac{dz}{dt_{i,q}}, z_i, y_{i,q}, u_{i,q}, t, p \right)^T$$

En el caso que se desee minimizar el tiempo de una perturbación, el problema de optimización se formula de la siguiente forma:

$$\min \Phi = \int_0^{t_f} \|z(t) - \hat{z}(t)\|^2 dt \quad (1-24)$$

sujeto a,

Modelo *DAE* semi-explicito:

$$\frac{dz(t)}{dt} = F(z(t), y(t), u(t), t, p) \quad (1-25)$$

$$0 = G(z(t), y(t), u(t), t, p) \quad (1-26)$$

Condiciones iniciales:

$$z(0) = z^0 \quad (1-27)$$

Condiciones límite:

$$\begin{aligned} z^L &\leq z(t) \leq z^U \\ y^L &\leq y(t) \leq y^U \\ u^L &\leq u(t) \leq u^U \\ p^L &\leq p \leq p^U \\ 0 &\leq t \leq t_f \end{aligned} \quad (1-28)$$

donde,  $\Phi$  es una función objetivo escalar,  $F$  las restricciones como ecuaciones diferenciales,  $G$  las restricciones como ecuaciones algebraicas,  $H_s$  las condiciones internas adicionales en tiempos fijos  $t_s$ ,  $z$  el vector de los perfiles del estado diferencial,  $z^0$  es el vector de las variables deseadas ("set-point"),  $z^0$  los valores iniciales de  $z$ , y los vectores de los perfiles del estado algebraico,  $u$  los vectores de los perfiles de control y  $p$  un vector del parámetro dependiente del tiempo.

Por lo tanto, la función objetivo es aproximada por la cuadratura de Radau con  $ne$  elementos finitos y  $ncol$  puntos de cuadratura en cada elemento a través de una aproximación de optimización dinámica simultánea como se planteó anteriormente. Esto ocasiona que la función objetivo (Ec. 1-24) se exprese de la forma:

$$\min \Phi = \sum_{i=1}^{ne} h_i \sum_{j=1}^{ncol} \omega_j \left\| z / t_{i,j} - \hat{z} \right\|^2 \quad (1-29)$$

Para problemas con muchas variables de estado y elementos finitos, es fácil que las (Ec. 1-21 y 1-24) puedan convertirse en problemas de gran escala; por ello, se necesita de una estrategia de solución eficiente y ésta la ofrece, hoy día, el *software* DynoPC que tiene algoritmos para la integración de *DAE's*, diferenciación y programación no lineal automática junto con aplicaciones en Visual Basic GUI para Windows 2000/XP [Lang, Y.D., *et al.*, 2007], por lo que facilita la solución del problema de optimización *DAE*.

### Aplicaciones.

El uso de la optimización dinámica está llegando a ser muy importante tanto en la industria como en la academia. En particular, las aproximaciones simultáneas se han considerado en sistemas más grandes y complejos, tanto dentro como fuera de línea del proceso. Para fuera de línea ("*off-line*") se incluyen: (i) diseño para evitar transiciones no deseadas de procesos químicos durante los arranques y paradas, manejo de perturbaciones severas y transiciones a diversos puntos de operación, (ii) optimización de la trayectoria de los procesos químicos para transiciones entre condiciones de operación para el manejo de cambios de cargas, (iii) estrategias sistemáticas para lidiar con las interacciones del proceso y el diseño del equipo y (iv) sintonización de los controladores, entre otros [Kameswaran, S., *et al.*, 2006].

En cuanto a los que están dentro de línea ("*on-line*") se encuentran: (i) caracterización del sistema con modelos de procesos no lineales para identificar los estados y las entradas no medibles del proceso, las entradas medidas ya especificadas y las salidas, y (ii) solución de problemas de optimización para el control e identificación, particularmente en sistemas multivariables que son no lineales y con salidas restringidas, especialmente en el control predictivo y en la optimización en tiempo real de sistemas dinámicos, entre otros [Biegler, L.T., *et al.*, 2007].

La implementación del moderno y eficiente sistema de control óptimo en los bioprocesos es altamente dependiente de la disponibilidad de información que se tenga "*on-line*" [Nejjari, F., *et al.*, 1999]. En consecuencia, las estrategias para la optimización

dinámica necesitan resolver, con cierto nivel de aproximación, el control óptimo en un tiempo límite si se trata de aplicaciones "on-line"; por ello, es necesario hacer más eficiente la formulación y los "solvers" para su solución; particularmente en sistemas de gran escala.

Lo anterior ha tomado importancia en las últimas dos décadas por lo que diversos autores han desarrollado algoritmos de solución para *NLP's* como Albuquerque, J.S., *et al.* (1997) que presentan una estrategia en donde los métodos implícitos de Runge-Kutta (*Implicit Runge-Kutta, IRK*) son utilizados para integrar y resolver modelos *DAE* sin importar si el índice es mayor o igual a dos. En ese mismo año, Tanartki, *et al.* proponen una aproximación anidada en la solución de problemas de optimización dinámica mediante la solución simultánea de dos problemas de optimización: uno interno y otro externo. En años más recientes, Kameswaran, S., *et al.* (2006) muestran los nuevos avances de las estrategias para la optimización simultánea y las propiedades de convergencia para tipos de problemas de control óptimo. Además, presentan un análisis de la colocación de Gauss y la de Radau donde la primera produce perfiles oscilatorios mientras que la segunda, conduce a perfiles más suaves.

En consecuencia, los métodos de optimización dinámica consisten en determinar los mejores perfiles transitorios del funcionamiento de un proceso bajo ciertas restricciones. Dichos métodos se han aplicado a procesos químicos, electroquímicos y bioquímicos. En cuanto a éste último, se encuentran los tratamientos de aguas residuales en el que la mayoría de los estudios reducen la concentración de los contaminantes de descarga del agua [Zhao, *et al.*, 1994; Chachuat, B, *et al.*, 2001].

En los últimos años, el mejoramiento de diversas estrategias de operación para el proceso de remoción de nitrógeno en aguas residuales ha tomado importancia debido a las estrictas legislaciones de los gobiernos para proteger el medio ambiente. Esto a ocasionado que diversos investigadores, tales como Lukasse, L.J.S., *et al.* (1999), Alex, J., *et al.* (2002), Guo, H.Y., *et al.* (2005), y Habermeyer, P., *et al.*, (2005), entre otros, se interesen en buscar la eficiente remoción del nitrógeno para llegar a las condiciones óptimas y han encontrado que esto se logra a través del control del aire.

Por ejemplo, Chachuat, B., *et al.* (2001) se basaron en un estudio de optimización dinámica para minimizar el consumo de energía de una planta de tratamiento biológico de aguas residuales por desnitrificación mediante una política de operación del gasto del aire que satisfaga los requisitos de descarga bajo restricciones específicas, tanto de proceso como físicas. Otro caso es la investigación realizada por Fikar, M., *et al.*, (2005), quienes también se basaron en la optimización dinámica para determinar las estrategias óptimas de aireación en plantas pequeñas de lodos activados para establecer la relación entre la operación actual y óptima que dieran la oportunidad de mejorar el funcionamiento.



# CAPÍTULO 2

## Caso de Estudio: "Simulation Benchmark"

La planta seleccionada para este estudio es aquella conocida como "Simulation Benchmark", que es un ejemplo de una planta prototipo de tratamiento biológico de aguas residuales por desnitrificación que ha sido objeto de estudio en más de 100 publicaciones, no sólo en Europa sino en el mundo [Jeppsson, U., *et al.*, 2006].

Entre los estudios que destacan donde emplean esta planta, los datos ó como punto de partida para otros estudios, se encuentran los siguientes: Jeppsson, U., *et al.* (1996), Copp, J.B. (2000), Vrečko, D., *et al.* (2001), Carlsson, B., *et al.* (2002), Cho, J.H., *et al.* (2002), Ko, J., *et al.* (2002), Vanhooren, H., *et al.* (2002), Rieger, L., *et al.* (2003), Vrečko, D., *et al.* (2003), Yuan, Z., *et al.* (2003), Sotomayor, O.A.Z., *et al.* (2003), Abusam, A., *et al.* (2004), Copp, J.B., *et al.* (2004), Queinnec, I., *et al.* (2005), Le Bonté, *et al.* (2005), Ekman, M., *et al.* (2006), Gernaey, K.V., *et al.* (2006), Gerksič, S., *et al.* (2006), Jeppsson, U., *et al.* (2006), Sorour, M.T., *et al.* (2006), Traoré, A., *et al.* (2006), Vrečko, D., *et al.* (2006), y Yong, M., *et al.* (2006), entre otros.

En general, los temas que se han tratado son los siguientes:

- Aireación: uso de un método "on-line" para la estimación de la respiración a través de los valores de la concentración del oxígeno disuelto (*DO*) y del gasto del aire [Ekman, M., *et al.*, 2006; Gerksič, S., *et al.*, 2006].
- Análisis y evaluación de: (i) plantas piloto o escala [Gernaey, K.V., *et al.*, 2006; Vrečko, D., *et al.*, 2006], (ii) estrategias de control para minimizar el impacto de una carga tóxica de la alimentación en el funcionamiento de la planta [Copp, J.B., *et al.*, 2004], (iii) la variación de las características del agua residual debido a los cambios de las condiciones climáticas [Le Bonté, *et al.*, 2005], (iv) una estrategia

de optimización para estimar la concentración de nitrógeno en el agua residual, la velocidad de nitrificación y desnitrificación, y la demanda química de oxígeno (*COD*) disponible para la desnitrificación en un proceso de lodos activados (*ASP*) sometido a una aireación intermitente [Queinnec, I., *et al.*, 2005], (v) diferentes estrategias que incluyen el almacenamiento y reintroducción de la alimentación, "step-feeding", recirculación rápida de lodos y almacenamiento de la purga de lodos de la planta [Ko, J., *et al.*, 2002], y (vi) el efecto de las variables controlables ( $K_{La-3}$ ,  $Q_{int}$ ,  $Q_{sl}$  y  $Q_w$ ) sobre el efluente ( $N_{tot_e}$ ,  $Snh_e$ ,  $TSS_e$ ,  $COD_e$  y  $NO_e$ ) para el buen funcionamiento de la planta bajo diferentes condiciones de operación, mediante el uso de la técnica de optimización de Programación Cuadrática Secuencial (*Sequential Quadratic Programming, SQP*) [Vrečko, D., *et al.*, 2001].

- Control: (i) de la recirculación del nitrato y de la adición del carbono externo [Yuan, Z., *et al.*, 2003; Yong, M., *et al.*, 2006], (ii) del "set-point" del oxígeno disuelto y del gasto del carbono externo [Vrečko, D., *et al.*, 2003], (iii) de la concentración de nitrato para regularla en el proceso de predenitrificación al manipular la dosificación del carbono externo mediante un control de cascada, compuesto por dos controladores proporcional-integral [Cho, J.H., *et al.*, 2002], (iv) de la altura del lodo del sedimentador secundario [Traoré, A., *et al.*, 2006], y (v) de la altura del lecho del lodo (*Sludge Blanket Height, SBH*) o del tiempo de retención del lodo (*SRT*) o edad del lodo, y de los sólidos del licor mezclado (*MLSS*) en el reactor mediante el ajuste de la purga y la recirculación de lodos, respectivamente [Yong, M., *et al.*, 2006]. También hay estudios sobre la verificación de que los sistemas de control estén funcionando correctamente [Carlsson, B., *et al.*, 2002; Rieger, L., *et al.*, 2003; Abusam, A., *et al.*, 2004; Gernaey, K.V., *et al.*, 2006]
- Extensión y análisis del modelo no. 1 del "Benchmark" [Seco, A., *et al.*, 2004; Jeppsson, U., *et al.*, 2006; Sorour, M.T., *et al.*, 2006].

La planta del "Simulation Benchmark" fue primero desarrollada por el *IAWQ Task Group on Respirometry-Based Control of the Activated Sludge Process* (Spanjers, *et al.*, 1998) y modificada más tarde por el *European Co-operation in the field of Scientific and Technical Research (COST)* en conjunto con el grupo de trabajo de *IAWQ* [Copp, J.B., 2000]. Ha sido simulada tanto estática como dinámicamente, y controlada por diferen-

tes paquetes de aplicación y simuladores comerciales, tales como: BioWin™, EFOR™, FORTRAN, GPS-X™, MATLAB™ & SIMULINK™, SIMBA®, STOAT™ y WEST™, entre otros.

Actualmente dicha planta se encuentra construida en la Universidad de Uppsala en Estocolmo, Suecia. La planta fue iniciada en 1993 y puesta en operación en 1994. Alumnos de doctorado de esta universidad desarrollaron el simulador *JASS* (*Java based Activated Sludge process Simulator*), que la simula [Lindberg, C.F. (1997); Samuelsson, P., 2005].

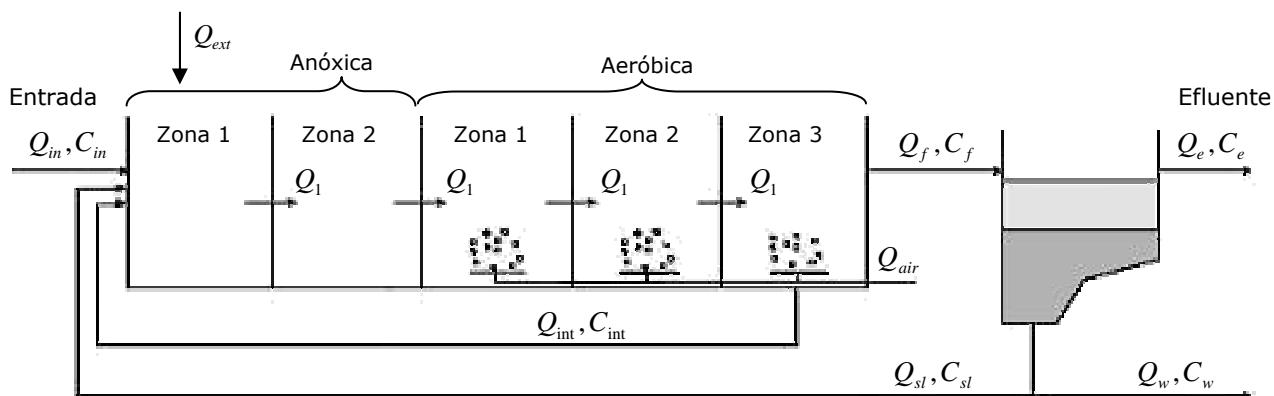
## 2.1. DESCRIPCIÓN DE LA PLANTA.

El "Benchmark" representa una planta de lodos activados pre-desnitrificador, tipo Ludzack-Ettinger Modificado (*MLE*), con gasto continuo, que es un sistema frecuentemente aplicado para la remoción de materia orgánica y nitrógeno de los efluentes municipales predominantemente domésticos, que opera a una temperatura constante de 20°C y un pH neutral. Se basa en un modelo dinámico, integrado por el Modelo *ASM1* (1987) para el bioreactor y el Modelo de Takács (1991) para el sedimentador, desarrollado para simular los procesos que ocurren en una planta de tratamiento biológico de aguas residuales.

El arreglo de equipos, según la Fig. 2.1, lo conforman un bioreactor compuesto por dos zonas anóxicas (Zona 1 y Zona 2 con 1000 m<sup>3</sup>, respectivamente), tres zonas aeróbicas (Zona 1, 2 y 3 con 1333 m<sup>3</sup>, respectivamente) y un sedimentador secundario no reactivo con un volumen de 6000 m<sup>3</sup> (área de 1500 m<sup>3</sup> y una altura de 4 m) subdividido en 10 capas, resultando un volumen biológico total de 5999 m<sup>3</sup>. Las Zonas Anóxicas 1 y 2 no están aireadas pero están perfectamente mezcladas y las Zonas Aeróbicas 1, 2 y 3 están aireadas y mezcladas, asumiendo un máximo del coeficiente de transferencia de masa volumétrico global en unidades de fase líquida ( $K_L \cdot a$ ) de 10 h<sup>-1</sup> para las Zonas Aeróbicas 1 y 2, y de 3.5 h<sup>-1</sup> para la Zona Aeróbica 3.

En la Zona Anóxica 1, la velocidad de desnitrificación es relativamente rápida porque las bacterias utilizan sustrato rápidamente biodegradable agregado por el agua residual

entrante. La desnitrificación en la Zona Anóxica 2 es mucho más lenta porque las concentraciones de sustrato son bajas por su consumo en la zona anterior.



**Fig. 2.1.** Representación esquemática del "Simulation Benchmark".

En las Zonas Aeróbicas 1 y 2, el gasto del oxígeno disuelto ( $DO$ ) está controlada en  $2 \text{ m}^3/\text{h}$  y en la 3 está en  $0.7 \text{ m}^3/\text{h}$ , siendo el nivel de  $DO$  de saturación de  $8 \text{ mg O}_2/\text{L}$ , correspondiente a la temperatura considerada en ese sitio.

La principal función de la Zona Aeróbica 3 es desorber del agua residual, el nitrógeno gaseoso generado en la zona anóxica mediante la adición del aire a bajo nivel justo antes de pasar al clarificador [Grady, C.P.L., Jr., *et al.*, 1999] para proporcionar, a través de la recirculación interna, los niveles adecuados de nitrato que se requieren en el proceso anóxico.

Es importante mencionar que la cantidad de  $DO$  alimentado a la zona anóxica, debido al gasto de recirculación interna de la zona aeróbica, debe ser minimizado para evitar que el oxígeno oxide al material orgánico fácilmente biodegradable y soluble ( $rbCOD$ ), ya que esto ocasionaría que hubiera menor disponibilidad de esta fuente de carbono para reducir el nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ) a nitrógeno gaseoso por los microorganismos desnitrificadores que lo utilizan como un aceptor de electrones; y, por lo tanto, la velocidad de desnitrificación disminuiría, lo que es indeseable [Metcalf, *et al.*, 2003].

En consecuencia, en la zona anóxica se busca que la concentración de  $DO$  sea prácticamente cero y que haya suficiente fuente de nitratos mediante el control de la recircu-

lación interna y el gasto de la fuente de carbono externa. También el oxígeno debe controlarse, porque los mecanismos cinéticos que afectan su equilibrio, pueden accionar la producción de compuestos orgánicos volátiles totales (*Total Volatile Organic Compounds, TVOC*) y óxidos nítricos (*Nitric Oxide, NO*) bajo condiciones anóxicas y anaeróbicas, que son indeseables en el proceso [Fuerhacker, M., *et al.*, 2000].

## 2.2. DATOS Y ESPECIFICACIONES DE LA PLANTA.

La planta cuenta con datos de operación en diferentes climas: (i) Sequía, (ii) Tormenta y (iii) Lluvia, además de la condición (iv) Normal antes mencionada. Las tres primeras condiciones se obtuvieron de la planta de tratamiento biológico de aguas por desnitrificación de Uppsala, Suecia y la última del simulador *JASS*.

En condición Normal de operación, el gasto volumétrico de la alimentación es de  $Q_{in} = 768.583 \text{ m}^3/\text{h}$ , con una proporción promedio de 351.19 mg *COD*/L de materia orgánica biodegradable y 54.4256 mg N/L de nitrógeno total Kjeldahl (*TKN*). Presenta una retención hidráulica de 18.5 h, basado en el volumen total de la planta (bioreactor + sedimentador secundario).

El gasto volumétrico de la recirculación interna es  $Q_{int} = 3Q_{in}$  (2305.749  $\text{m}^3/\text{h}$ ), el de la recirculación de lodos activados es  $Q_{sl} = Q_{in}$  (768.583  $\text{m}^3/\text{h}$ ), el de la purga de lodos es  $Q_w = 16.017 \text{ m}^3/\text{h}$  y del carbono externo es  $Q_{ext} = 0.01 \text{ L/h}$ . En este caso, la fuente de carbono externa está disponible, constituida por metanol puro por ser evaluada como la mejor [Ericsson, B., 1994], con una concentración de 1,200,000 mg *COD*/L; pero solamente se adiciona éste si es necesario.

Los datos para cada una de las condiciones climáticas como concentraciones de entrada, características hidráulicas y coeficientes de transferencia de masa del oxígeno de la planta, así como las especificaciones de la calidad del efluente de acuerdo a las legislaciones ambientales de la ubicación de la planta (Uppsala, Suecia), se muestran enseguida.

### Concentraciones de Entrada

Las concentraciones promedio del agua residual de entrada, que se han observado bajo diferentes condiciones climáticas (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia), tales como biomasa heterotrófica ( $X_{BH}$ ) y autotrófica ( $X_{BA}$ ), sustratos lentamente y rápidamente biodegradables ( $X_S$  y  $S_S$ , respectivamente), nitrógeno orgánico biodegradable particulado ( $X_{ND}$ ) y soluble ( $S_{ND}$ ), materia orgánica inerte particulada y productos particulados presentes por el decaimiento de la biomasa ( $X_{IP}$ ), nitrógeno amoniacal soluble ( $S_{NH}$ ), nitrógeno como nitrato y nitrito soluble ( $S_{NO}$ ), concentración de oxígeno disuelto ( $S_0$ ) y alcalinidad ( $S_{ALK}$ ), se presentan en la Tabla 2.1.

**Tabla 2.1.**

Concentraciones promedio de entrada a la planta del "Simulation Benchmark" [Copp, J.B., 2000].

VARIABLES	VALORES			
	SEQUÍA	NORMAL <sup>(1)</sup>	TORMENTA	LLUVIA
$X_{BH}$ , mg COD/L	28.1700	28.1700	27.2500	24.3700
$X_{BA}$ , mg COD/L	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
$X_S$ , mg COD/L	202.3200	202.3200	193.3200	175.0500
$X_{ND}$ , mg N/L	10.5900	10.5900	10.2400	9.1600
$X_{IP}$ , mg COD/L	51.2000	51.2000	51.9200	44.3000
$S_0$ , mg COD/L	0.0000 <sup>(2)</sup>	0.0000	0.0000 <sup>(2)</sup>	0.0000 <sup>(2)</sup>
$S_{NH}$ , mg N/L	31.5600	31.5600	29.4800	27.3000
$S_{ND}$ , mg N/L	6.9500	6.9500	6.4900	6.0100
$S_{NO}$ , mg N/L	0.0000 <sup>(2)</sup>	0.0000	0.0000 <sup>(2)</sup>	0.0000 <sup>(2)</sup>
$S_S$ , mg COD /L	69.500	69.500	64.9300	60.1300
$S_{ALK}$ , mol/L	7.000 <sup>(2)</sup>	7.000	7.000 <sup>(2)</sup>	7.000 <sup>(2)</sup>
$S_i$ , mg COD/L	30.000	30.000	28.0300	25.9600

(1) Valores tomados del **JASS** (*Java based Activated Sludge process Simulator*), un simulador desarrollado por estudiantes de doctorado del grupo de Sistemas y Control de la Universidad de Uppsala en Suecia (2004) que está basado en Henze, M., *et al.* (1987).

(2) Valores especificados en Henze, M., *et al.* (2000) y Grusell, G. (2004).

## Hidráulica de la Planta

Los valores de los parámetros hidráulicos del bioreactor, tales como gastos de la alimentación ( $Q_{in}$ ), de la fuente de carbono externa ( $Q_{ext}$ ), de recirculación interna ( $Q_{int}$ ), de recirculación de lodos ( $Q_{sl}$ ), del segundo reactor anóxico al segundo reactor aeróbico ( $Q_1$ ), de aire ( $Q_{air}$ ), de alimentación del sedimentador secundario ( $Q_f$ ), de la corriente de la base del sedimentador secundario ( $Q_u$ ), de purga de lodos ( $Q_w$ ) y del efluente ( $Q_e$ ), se presentan en la Tabla 2.2.

**Tabla 2.2.**

Parámetros hidráulicos del bioreactor del "Simulation Benchmark" [Jeppsson, U., 1997; Lindberg, C.F., 1997; Copp, J.B., 2000; Samuelsson, P., 2005].

VARIABLES	VALORES			
	SEQUÍA	NORMAL <sup>(1)</sup>	TORMENTA	LLUVIA
$Q_{in}$ , m <sup>3</sup> /h	752.5554	768.5830	860.7542	992.0075
$Q_{int}$ , m <sup>3</sup> /h	2257.6663	2305.7490	2582.2625	2976.0225
$Q_{sl}$ , m <sup>3</sup> /h	752.5554	768.5830	860.7542	992.0075
$Q_{ext}$ , L/h	0.0100 <sup>(2)</sup>	0.0100 <sup>(2)</sup>	0.0100 <sup>(2)</sup>	0.0100 <sup>(2)</sup>
$Q_1$ , m <sup>3</sup> /h	3762.7771	3842.9150	4304.7708	4961.0375
$Q_{air\_1}$ , m <sup>3</sup> /h	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000
$Q_{air\_2}$ , m <sup>3</sup> /h	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000
$Q_{air\_3}$ , m <sup>3</sup> /h	0.7000	0.7000	0.7000	0.7000
$Q_f$ , m <sup>3</sup> /h	1505.1108	1537.1660	1722.5083	1985.0150
$Q_u$ , m <sup>3</sup> /h	768.5971	784.6247	876.7959	1008.0492
$Q_w$ , m <sup>3</sup> /h	16.0417	16.0417	16.0417	16.0417
$Q_e$ , m <sup>3</sup> /h	736.5137	752.5413	845.7125	976.9658

(1) Valores tomados del **JASS** (*Java based Activated Sludge process Simulator*), un simulador desarrollado por estudiantes de doctorado del grupo de Sistemas y Control de la Universidad de Uppsala en Suecia (2004) que está basado en Henze, M., *et al.* (1987).

(2) Valores especificado en Sotomayor, O.A.Z., *et al.* (2003).

Los reactores que constituyen el bioreactor tienen un volumen específico. Para cada uno de los dos reactores anóxicos, el volumen es de 1000 m<sup>3</sup> ( $V_{axr,i}$ ) y para cada uno de los tres reactores aeróbicos, el volumen es de 1333 m<sup>3</sup> ( $V_{ar,i}$ ).

En cuanto al sedimentador secundario, los valores de las dimensiones como volumen ( $V_{stlr}$ ), área ( $A$ ), altura del equipo ( $h$ ) y altura de alimentación ( $h_f$ ), así como número de capas ( $n$ ) y número de capa de la alimentación ( $m$ ), se presentan en la Tabla 2.3.

**Tabla 2.3.**

Parámetros hidráulicos del sedimentador secundario del "Simulation Benchmark" [Takács, I., et al., 1991; Sotomayor, O.A.Z., et al., 2001].

VARIABLES	VALORES
$V_{stlr}$ , m <sup>3</sup>	6000.0000
$A$ , m <sup>2</sup>	1500.0000
$h$ , m	4.0000
$h_f$ , m	2.2000
$n$	10.0000
$m$	5.0000

### Tiempo de Residencia.

Como parte de la hidráulica del proceso, se encuentra el tiempo de residencia hidráulico (*Hydraulic Residence Time, HRT*) que es la media de los tiempos de residencia ( $\tau$ ) de los elementos fluidos en un reactor, aunque no es el tiempo de residencia real de todos los elementos [Grady, C.P.L., Jr., et al., 1999].

El comportamiento de diferentes procesos bioquímicos, específicamente el tratamiento de aguas residuales por lodos activados, es no ideal. El tamaño de los reactores en este tipo de procesos es tal que resulta muy difícil alcanzar las condiciones ideales.

En consecuencia, se utiliza un método de medición de la distribución del tiempo de residencia (*Residence Time Distribution, RTD*) que puede identificar y representar sus características. Esto se realiza a través de introducir una sustancia soluble e inerte conocida como trazador, que determina las características de la mezcla del bioreactor mediante el cálculo de su concentración a la salida del bioproceso. El tiempo de residencia promedio  $\bar{\tau}$  es la desviación estándar de la distribución de los tiempos de residencia de esta sustancia.



Grady, C.P.L., Jr., *et al.* (1999) son quienes hacen referencia a este método y es el que se empleó para la estimación del tiempo de residencia del bioreactor. Para ello, se asumió que los cinco reactores (anóxicos y aeróbicos) fueran una serie de reactores con agitación continua (*Continuous Stirred Tank Reactor, CSTR*).

De acuerdo con Murphy, K.L., *et al* (1970), para sistemas *ASP* convencionales, el *RTD* es equivalente de tres a cinco *CSTR's* en serie y como en este estudio se trata de una planta biológica con un arreglo de equipos y de corrientes de proceso muy complejos, se consideró para el cálculo del *RTD* para el bioreactor de cinco *CSTR's* en serie.

Por otra parte, el tiempo de retención del sedimentador secundario ( $\tau$ ) se calcula con el volumen del sedimentador ( $V_{stlr}$ ) entre el gasto de entrada del mismo ( $Q_f$ ), resultando:

$$\tau = V_{stlr} / Q_f \quad (2-1)$$

La (Ec. 2-1) debe ajustarse de acuerdo a la temperatura, ya que en climas fríos (abajo de 20 °C) la viscosidad del agua incrementa, provocando el retraso de la sedimentación de los sólidos presentes en el equipo. El ajuste se realiza a través de una curva presentada por la Federación para el Control de la Contaminación en el Agua (*Water Pollution Control Federation, WPCF*) en 1985 [Metcalf, *et al.*, 2003], que representa el fenómeno mencionado y cuya expresión matemática es una función exponencial de la forma:

$$\text{Factor de Corrección} = 1.82 \cdot e^{-0.03T} \quad (2-2)$$

La (Ec. 2-2) sólo afecta el  $\tau$  calculado por la (Ec. 2-1) para temperaturas menores a 20°C, con el objetivo de ajustar el tiempo real necesario para que el funcionamiento del sedimentador sea equivalente a 20°C.

Como la temperatura promedio  $T$  más baja de la ubicación de la planta (Uppsala, Suecia) es de -4.5 °C, se realizó el cálculo del factor de corrección; y en consecuencia, del tiempo de retención en el sedimentador que fuera equivalente a esa temperatura.

Todo lo anterior se aplica para obtener los tiempos de residencia, tanto del bioreactor como del sedimentador secundario en cada condición climática considerada, y cuyos valores se presentan en la Tabla 2.4. Además se considera un sobrediseño del 15 por ciento para estimar el tiempo de residencia operativo del "Benchmark".

**Tabla 2.4.**  
Tiempos de residencia en la planta del "Simulation Benchmark".

EQUIPO	$\tau$ , h			
	SEQUÍA	NORMAL	TORMENTA	LLUVIA
Anóxico No. 1	0.2658	0.2602	0.2323	0.2016
Anóxico No. 2	0.2658	0.2602	0.2323	0.2016
<b>Anóxico Total</b>	0.5315	0.5204	0.4646	0.4031
Aeróbico No. 1	0.3543	0.3469	0.3097	0.2687
Aeróbico No. 2	0.3543	0.3469	0.3097	0.2687
Aeróbico No. 3	0.3543	0.3469	0.3097	0.2687
<b>Aeróbico Total</b>	1.0628	1.0406	0.9290	0.8061
<b>Bioreactor Total</b>	1.5943	1.5611	1.3936	1.2092
<b>RTD del Bioreactor<sup>(1)</sup></b>	7.9715	7.8053	6.9679	6.0461
<b>Sedimentador</b>	3.9864	3.9033	3.4833	3.0226
<b>WPCF del Sedimentador<sup>(2)</sup></b>	8.4408	8.2648	7.3755	6.4001
<b>Planta completa</b>				
Sin sobrediseño	16.4123	16.0701	14.3433	12.4462
<b>Con sobrediseño (15%)</b>	18.8742	18.4806	16.4949	14.3132

(1) Cálculo considerando cinco CSTR's en serie para sistemas ASP convencionales [Murphy, K.L., et al, 1970].

(2) Cálculo considerando el factor de corrección por la temperatura menor a 20°C (Ec. 2-2).

### **Transferencia de Masa del Oxígeno**

Los valores de los coeficientes de transferencia de masa volumétricos globales en unidades de fase líquida en densidad molar para difusión de  $A$  a través de  $B$  o  $S$  estacionario del oxígeno, se establecieron de acuerdo a lo previsto en la literatura que corresponden a las zonas aeróbicas del bioreactor [Copp, J.B., 2000]. Sus valores se presentan en la Tabla 2.5.

**Tabla 2.5.**

Coefficientes de transferencia de masa volumétricos globales en unidades de fase líquida en densidad molar para difusión de  $A$  a través de  $B$  o  $S$  estacionario del oxígeno del "Simulation Benchmark" [Copp, J.B., 2000].

ZONAS	VARIABLES	VALORES
Aeróbicas	$K_L a_{-1}, h^{-1}$	10.0000
	$K_L a_{-2}, h^{-1}$	10.0000
	$K_L a_{-3}, h^{-1}$	3.5000

### Calidad del Efluente

Para la medición de la calidad del efluente, particularmente para una planta con remoción de nitrógeno, se hace a través de diversos parámetros que son universalmente conocidos, tales como: nitrógeno amoniacal soluble ( $S_{NH_e}$ ), nitrógeno total ( $N_{tot_e}$ ), demanda bioquímica de oxígeno ejercida en 5 días de incubación (medida de las concentraciones de los orgánicos biodegradables,  $BOD_{5,e}$ ), demanda química de oxígeno total ( $COD_{t,e}$ ) y sólidos suspendidos totales (medida indirecta de la concentración de los microorganismos, más no indica la actividad del lodo biológico con respecto al metabolismo de los orgánicos,  $TSS_e$ ). Sus valores se presentan en la Tabla 2.6.

**Tabla 2.6.**

Especificaciones de los parámetros de la calidad del agua del efluente del "Simulation Benchmark" [Copp, J.B., 2000; Sotomayor, O.A.Z., et al., 2001].

VARIABLES	VALORES
$N_{tot_e}, mg N/L$	< 18
$S_{NH_e}, mg N/L$	< 4
$TSS_e, mg SS/L$	< 30
$COD_{t,e}, mg COD/L$	< 100
$BOD_{5,e}, mg COD/L$	< 10

Las especificaciones de la calidad del efluente son establecidas por cada país. Éstas son limitaciones que tiene el tratamiento de aguas residuales, y que se deben cumplir por norma.

En la Tabla 2.7 se comparan las especificaciones de la calidad del efluente requeridas en el "Benchmark", con las Normas Oficiales Mexicanas para las descargas a ríos cuyos límites máximos permisibles se encuentran en la NOM-001-SEMARNAT 1996. Asimismo, se realiza una comparación con la Norma ARA-VwV 1991 de Alemania, con la Norma de China [Yong, M., *et al.*, 2006] y con lo establecido por la Comunidad Económica Europea (*Directive 91/271/EEC*) y por la Organización de las Naciones Unidas (UN) para la región de Europa.

**Tabla 2.7.**

Comparación de las especificaciones de la calidad del efluente de la planta del "Simulation Benchmark", con la Norma Oficial Mexicana (NOM-001-SEMARNAT 1996), la Norma Alemana (ARA-VwV 1991), la Norma China, la Comunidad Económica Europea (*Directive 91/271/EEC*) y la Organización de las Naciones Unidas (UN).

VARIABLES	EFLUENTE					
	Suecia (Uppsala)	México	Alemania <sup>(1)</sup>	China <sup>(2)</sup>	EEC <sup>(3)</sup>	UN (Europa)
$N_{tot,e}$ , mg N/L	< 18.00	< 60.00	< 18.00	< 18.00	< 10.00	< 3.25
$S_{NH_e}$ , mg N/L	< 4.00	-----	< 10.00	< 8.00	-----	-----
$TSS_e$ , mg SS/L	< 30.00	< 125.00	< -----	< -----	< 35.00	-----
$COD_{t,e}$ , mg COD/L	< 100.00	-----	< 75.00	< -----	< 125.00	-----
$BOD_{5,e}$ , mg COD/L	< 10.00	< 150.00	< 15.00	< -----	< 25.00	< 4.00

(1) Requisitos de la remoción de nitrógeno referida a una temperatura del agua de 12 °C ó mayor para una población equivalente a  $\geq 100,000$  [Sintic, A., *et al.*, 1998].

(2) Yong, M., *et al.*, 2006.

(3) Requisitos anuales de la remoción de nitrógeno, previstos por *Directive 91/271/EEC* (European Economic Community, EEC) referida a una temperatura del agua de 12 °C ó mayor para una población equivalente a  $\geq 100,000$

En la Tabla 2.7, se puede observar que en México,  $N_{tot,e}$  es 33.3 veces mayor que la de Suecia, y,  $TSS_e$  y  $BOD_{5,e}$ , 3.57 y 15 veces mayor, respectivamente. En consecuencia, esto indica que las normas establecidas en territorio nacional son muy condescendientes con las descargas urbanas a cuerpos de agua como son los ríos.

Durante los 90's, una directiva más estricta de la Comunidad Económica Europea (91/271/EEC de Aguas Residuales Urbanas) modificó las concentraciones máximas permisibles de contaminantes en el efluente de las plantas de tratamiento de aguas resi-

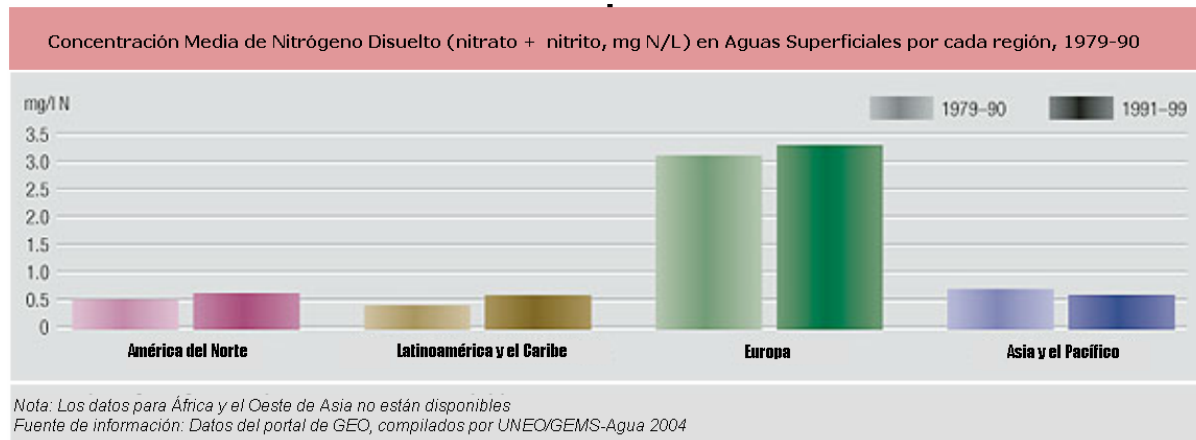
duales. Por ejemplo, para el componente más restrictivo que es el nitrógeno total ( $N_{tot_e}$ ), la concentración máxima es de 10 mg/L [Fikar, M., *et al.*, 2005]. Esto, comparativamente a la planta ubicada en Uppsala, Suecia, ésta cumple con la normatividad de la *EEC* excepto para  $N_{tot_e}$ , como se muestra en la Tabla 2.7.

Por otra parte, países como Alemania y China (Tabla 2.7) conservan una legislación de descarga más estricta en comparación con México pero semejante a Suecia en cuanto a  $N_{tot_e}$ . Sin embargo, para  $S_{NH_e}$  son más flexibles, siendo China la reglamentación más estricta. No es lo mismo para  $COD_{t,e}$  y  $BOD_{5,e}$  ya que el primero, Alemania es más estricto que Suecia; pero más condescendiente en el segundo.

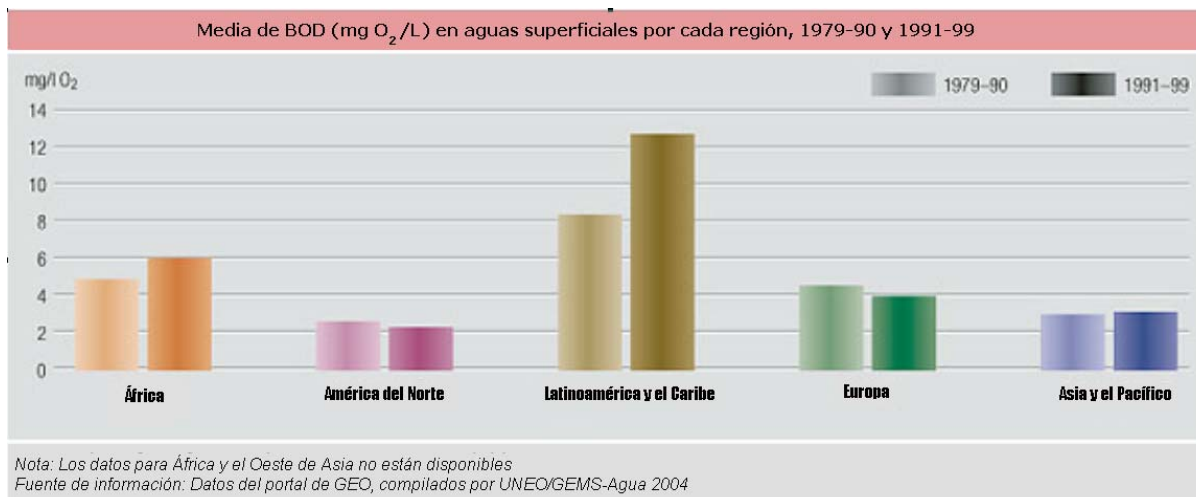
La gran mayoría, si no es que todos los países, tienen problemas ambientales y sobretodo en cuestiones de descargas de aguas residuales. Las Organización de las Naciones Unidas (*United Nations, UN*) con su programa ambiental (*United Nations Environmental Programme, UNEP*) junto con el Evaluador Internacional de Aguas (*The Global International Waters Assessment, GIWA*), realizaron un reporte anual 2004/5 en el que se hace una comparación por continentes de las concentraciones de nitrógeno disuelto (mg N/L) en aguas superficiales.

Lo anterior se ilustra en la Fig. 2.2, en donde se observa que el crecimiento en concentración de nitritos y nitratos en Europa, a donde pertenece Suecia, es de 4.84% más alto que en los años 1970's a 90's. En cuanto a la región del Caribe y América Latina, a donde México pertenece, éste se ha incrementado aproximadamente un 50%.

Adicionalmente se reportó otro parámetro que fue medido por continentes para aguas superficiales: el *BOD* (mg  $O_2$ /L). En la Fig. 2.3 se muestra la gráfica de éste, la cual indica que las regiones del Caribe y Latinoamérica han incrementado un 47.06% en su concentración relativa a la obtenida en el periodo 1979 a 1990 y por lo tanto, es la región que aporta mayor *BOD* al planeta.



**Fig. 2.2.** Concentración media de nitrógeno disuelto en aguas superficiales detectada por regiones. Gráfica reportada por *G/WA* (2004/5).



**Fig. 2.3.** Concentración media de demanda bioquímica de oxígeno en aguas superficiales detectada por regiones. Gráfica reportada por *G/WA* (2004/5).

En la Tabla 2.7, también se muestran los parámetros  $N_{tot,e}$  y  $BOD_{5,e}$  reportados por la Organización de las Naciones Unidas (UN) para la región de Europa en 2004/05 por *G/WA*. En este caso, se observa que las especificaciones de la calidad del efluente en Suecia, está más cercano al intervalo reportado de Naciones Unidas en cuanto a la  $BOD_5$  y México está muy lejos de esa especificación. Lo mismo se presenta para  $N_{tot,e}$ .

## 2.3. MODELOS DINÁMICOS DEL BIOPROCESO.

Los sistemas de tratamiento biológico comprenden una variedad de procesos que ocurren a velocidades sumamente diferentes. El crecimiento biológico, la transferencia de masa, la hidráulica y las reacciones bioquímicas ocurren simultáneamente y todas son interdependientes [Steffens, M.A., *et al.*, 1997]. Por ello, el uso de modelos dinámicos en procesos de lodos activados se ha convertido cada vez más en uno de los de mayor interés [Vanrolleghem, P.A., *et al.*, 1999].

Como ya se mencionó, los dos modelos dinámicos utilizados en el "Benchmark" son: (i) el modelo No. 1 de lodos activados ó *ASM1 (Activated Sludge Model Num. 1)* del *International Association on Water Quality (IAWQ)* para el modelamiento de los procesos biológicos [Henze, M., *et al.*, 1987] y (ii) el modelo de la función de doble exponencial de la velocidad de sedimentación para el modelamiento del proceso de sedimentación [Takács, I., *et al.*, 1991]. Es importante destacar que dichos modelos son internacionalmente empleados para describir los procesos que ocurren en tratamientos biológicos de aguas residuales domésticas [Coen *et al.* (1998)], como es el tipo de agua que se considera en esta investigación.

En cuanto al modelo de la velocidad de transferencia de masa del oxígeno, se presentan diferentes ecuaciones propuestas por investigadores que han estudiado el fenómeno de transporte, ya que el "Benchmark" no cuenta explícitamente con una ecuación.

A continuación se describen los modelos para el proceso biológico, el sedimentador secundario y se plantean las ecuaciones de la velocidad de transferencia de masa del oxígeno publicadas en la literatura.

### 2.3.1. Proceso Biológico.

El Modelo *ASM1*, presentado por el grupo de trabajo de Modelamiento Matemático para el Diseño y Operación de Procesos Biológicos de Tratamientos de Agua de la *IAWQ* [Henze *et al.*, 1987], es aceptado ampliamente y se emplea para la simulación de plantas de tratamiento de aguas residuales de tipo municipal, y sólo como una guía para

aguas industriales [Brands, E., *et al.*, 1994; Koehne, M., *et al.*, 1995; Jeppsson, U., 1996; Lindberg, C.F., 1997; Coen, F., *et al.*, 1998; Sintic, A., *et al.*, 1998; Sintic, A., *et al.*, 1998; Vanrolleghem, P.A., *et al.*, 1999; Sotomayor, O.A.Z., *et al.*, 2001; Tomita, R.K., *et al.*, 2002; Vanhooren, H., *et al.*, 2002; Smets, I.Y., *et al.*, 2003]. Considera 13 componentes diferentes, involucra 8 procesos e incorpora 19 parámetros.

Los componentes son clasificados en componentes particulados ( $X$ ) y solubles ( $S$ ), los cuales se encuentran listados en la Tabla 2.8. Los diferentes procesos involucrados se encuentran brevemente descritos en la Tabla 2.9 y los parámetros del modelo se presentan en la Tabla 2.10.

**Tabla 2.8.**

Componentes del modelo *ASM1* [Henze, M., *et al.*, 1987].

	DESCRIPCIÓN DE LA VARIABLE	SÍMBOLO	UNIDADES
1.	Biomasa heterotrófica activa.	$X_{BH}$	mg COD/L
2.	Biomasa autotrófica activa.	$X_{BA}$	mg COD/L
3.	Substrato particulado lentamente biodegradable.	$X_S$	mg COD/L
4.	Materia orgánica inerte particulada.	$X_I$	mg COD/L
5.	Productos particulados presentes del decaimiento de la biomasa.	$X_P$	mg COD/L
6.	Concentración del oxígeno disuelto.	$S_0$	mg COD/L
7.	Materia orgánica inerte soluble.	$S_I$	mg COD/L
8.	Nitrógeno amoniacal soluble ( $\text{NH}_4^+ + \text{NH}_3$ ).	$S_{NH}$	mg N/L
9.	Nitrógeno orgánico soluble biodegradable.	$S_{ND}$	mg N/L
10.	Nitrógeno como nitrato y nitrito soluble.	$S_{NO}$	mg N/L
11.	Substrato rápidamente soluble y biodegradable.	$S_S$	mg N/L
12.	Nitrógeno orgánico biodegradable particulado.	$X_{ND}$	mg N/L
13.	Alcalinidad.	$S_{ALK}$	mmol/L

En la Tabla 2.9, el Modelo *ASM1* considera en lo general, básicamente cuatro procesos: (i) crecimiento de la biomasa (Procesos 1, 2 y 3), (ii) decaimiento de la biomasa (Procesos 4 y 5), (iii) amonificación del nitrógeno orgánico (Proceso 6) y (iv) hidrólisis de los orgánicos y del nitrógeno que están atrapados en el bioflóculo (Procesos 7 y 8). Éstos están originalmente representados por una matriz que identifica los términos in-



volucrados en cada proceso, descrita por Henze, M., *et al.* (1987), pero en este trabajo cada ecuación se explicita para demostrar la complejidad del proceso.

En la Tabla 2.10, los parámetros del Modelo *ASM1* son de gran importancia, ya que la precisión del modelo matemático se reflejará en la exactitud de los parámetros en el que esté basado. El modelo será más sensible a algunos parámetros que a otros, porque no todos contribuyen de igual forma a la precisión de las respuestas. Lo anterior se ejemplifica con el estudio de Kim, J.R., *et al.* (2006) para el "Benchmark" bajo diferentes técnicas de sensibilidad paramétrica, resultando  $\mu_A$ ,  $K_{OA}$  y  $b_A$  como los parámetros más sensibles del modelo.

La fórmula general del balance de materia para cada concentración, en cada  $n$  zona o compartimento en el que esté dividido el bioreactor (Fig. 2.1), asumiendo un volumen constante ( $V_k$ ) y un mezclado perfecto, está dado por las siguientes ecuaciones:

Para  $k = 1$  (Primer compartimento en la entrada de gasto de alimentación):

$$\frac{dC_1}{dt} = \frac{Q_{in}C_{in} + Q_{sl}C_{sl} + Q_{int}C_{int} + Q_{ext}C_{ext} - Q_1C_1}{V_1} + r_{C_1} \quad (2-3)$$

$$\text{donde,} \quad Q_1 = Q_{in} + Q_{sl} + Q_{int} + Q_{ext} \quad (2-4)$$

Para  $k = 2$  a  $n$  (compartimentos subsiguientes):

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{Q_{k-1}C_{k-1} - Q_kC_k}{V_k} + r_{C_k} \quad (2-5)$$

$$\text{donde,} \quad Q_k = Q_{k-1} = Q_1 \quad (2-6)$$

siendo  $k$  el número de compartimento;  $C_k$  la concentración ya sea particulada o soluble;  $V_k$  el volumen y  $Q_k$  el gasto volumétrico. Los subíndices *in*, *sl*, *int* y *ext*, corresponden a la alimentación, recirculación de lodos, recirculación interna y fuente externa de carbono, respectivamente.

**Tabla 2.9.**Procesos Dinámicos en el Modelo *ASM1* [Henze, M., *et al.*, 1987; Jeppsson, U., 1996].

PROCESO	DESCRIPCION
1. Crecimiento aeróbico de los heterótrofos.	Este proceso es generalmente la mayor contribución a la producción de nueva biomasa y remoción de <i>COD</i> . También está asociado con los cambios de alcalinidad y con el oxígeno ya que su demanda es debida a la oxidación que se realiza. El amoniaco es utilizado como fuente de nitrógeno para la masa celular. $S_S$ y $S_O$ pueden ser parámetros limitantes. Una fracción de $S_S$ es utilizado para el crecimiento de la biomasa, el cual es modelado mediante la cinética de Monod.
2. Crecimiento anóxico de los heterótrofos.	En la ausencia de oxígeno, los organismos heterótrofos son capaces de utilizar el nitrato como aceptor de electrones, con $S_S$ como sustrato. El proceso llevará a la producción de biomasa heterótrofica y nitrógeno gaseoso (desnitrificación), asociado con un cambio de alcalinidad, y una reducción en la concentración de $S_{NO}$ y $S_{NH}$ .
3. Crecimiento aeróbico de los autótrofos.	La oxidación del amoniaco a nitrato (nitrificación) produce biomasa autótrofica. Ésta incrementa y afecta tanto la alcalinidad como la demanda total de oxígeno y la concentración de $X_{ND}$ , $S_{ND}$ , $S_{NO}$ y $S_{NH}$ .
4. Decaimiento de los heterótrofos.	Los organismos mueren a una cierta velocidad y una porción del material es considerado como no biodegradable y se adiciona a una fracción de $X_p$ . El remanente se adiciona a $X_S$ . El nitrógeno orgánico asociado con $X_S$ se vuelve disponible como $X_{ND}$ . No hay pérdidas de <i>COD</i> involucrada en esta separación y el aceptor de electrones no es utilizado.
5. Decaimiento de los autótrofos.	Resulta de la transformación de biomasa activa en productos inertes particulados y en sustrato lentamente biodegradable $X_S$ , el cual reinicia el ciclo de hidrólisis y crecimiento, entre otros. Este proceso es modelado igual que el de los heterótrofos.
6. Amonificación del nitrógeno orgánico soluble.	El $S_{ND}$ es convertido en amoniaco libre con amonio por los heterótrofos activos. El uso de iones hidrógeno en el proceso resulta en un cambio en la alcalinidad.
7. Hidrólisis de compuestos orgánicos atrapados.	$X_S$ en la masa del lodo es hidrolizado para producir $S_S$ que está disponible para el crecimiento de los organismos. Este proceso está modelado con base en la cinética superficial de la reacción. La velocidad de hidrólisis es reducida bajo condiciones anóxicas en comparación con las aeróbicas.
8. Hidrólisis del nitrógeno orgánico atrapado.	$X_{ND}$ es degradado a $S_{ND}$ a una velocidad definida por la reacción de hidrólisis.

**Tabla 2.10.**  
Valores de los parámetros para el *ASM1* a 20 °C.

	DESCRIPCIÓN DEL PARÁMETERO	SÍMBOLO	VALOR <sup>(1)</sup>	UNIDADES
PARAMETEROS ESTEQUIOMÉ- TRICOS	1. Rendimiento para la biomasa heterotrófica.	$Y_H$	0.6700	g célula <i>COD</i> formada/g <i>COD</i> oxidado
	2. Rendimiento para la biomasa autotrófica.	$Y_A$	0.2400	g célula <i>COD</i> formada /g N oxidado
	3. Fracción del rendimiento de biomasa de productos particulados	$f_p$	0.0800	
	4. Masa de nitrógeno por masa de <i>COD</i> en la biomasa.	$i_{XB}$	0.0800	g N/ g <i>COD</i> en biomasa
	5. Masa de nitrógeno por masa de <i>COD</i> en los productos particulados de la biomasa en la masa endógena.	$i_{XP}$	0.0600	g N/ g <i>COD</i> en masa endógena
PARÁMETEROS CINÉTICOS	6. Velocidad máxima de crecimiento específico para la biomasa heterotrófica.	$\mu_H$	0.1667	$h^{-1}$
	7. Coeficiente de velocidad de decaimiento para la biomasa heterotrófica.	$b_H$	0.0125	$h^{-1}$
	8. Coeficiente de saturación media para la biomasa heterotrófica.	$K_s$	10.0000	g <i>COD</i> /m <sup>3</sup>
	9. Coeficiente de saturación media del oxígeno para la biomasa heterotrófica.	$K_{OH}$	0.2000	g O <sub>2</sub> /m <sup>3</sup>
	10. Coeficiente de saturación media del nitrato para la desnitrificación de la biomasa heterotrófica.	$K_{NO}$	0.5000	g NO <sub>3</sub> -N/m <sup>3</sup>
	11. Velocidad máxima de crecimiento específico para la biomasa autotrófica.	$\mu_A$	$2.0833 \times 10^{-3}$	$h^{-1}$
	12. Coeficiente de velocidad de decaimiento para la biomasa autotrófica	$b_A$	$20.8333 \times 10^{-3}$	$h^{-1}$
	13. Coeficiente de saturación media del oxígeno para la biomasa autotrófica	$K_{OA}$	0.4000	g O <sub>2</sub> /m <sup>3</sup>
	14. Coeficiente de saturación media del amoníaco para la biomasa autotrófica.	$K_{NH}$	1.0000	g NH <sub>3</sub> -N/m <sup>3</sup>
	15. Factor de corrección para $\mu_H$ bajo condiciones anóxicas.	$n_g$	0.8000	
	16. Velocidad de amonificación.	$k_a$	$2.0833 \times 10^{-3}$	m <sup>3</sup> / g <i>COD</i> h
	17. Velocidad máxima específica de hidrólisis.	$k_h$	0.1250	g <i>sbCOD</i> / g <i>COD</i> de biomasa
	18. Coeficiente de saturación medio para la hidrólisis de sustrato lentamente biodegradable.	$K_X$	0.1000	g <i>sbCOD</i> / g <i>COD</i> de biomasa
	19. Factor de corrección para la hidrólisis bajo condiciones anóxicas.	$n_h$	0.8000	

(1) Valores tomados del *JASS (Java based Activated Sludge process Simulator)*, un simulador desarrollado por estudiantes de doctorado del grupo de Sistemas y Control de la Universidad de Uppsala en Suecia (2004) que está basado en Henze, M., et al. (1987).

Las velocidades de reacción ( $r_{C_k}$ ) para cada ecuación diferencial de cada uno de los componentes, se encuentran en la Tabla 2.11 para los particulados y, en la Tabla 2.12 para los solubles. El significado de cada una de las variables involucradas en las ecuaciones se puede consultar en la *Lista de Nomenclatura*.

El Modelo *ASM1* describe la remoción de la materia orgánica, la nitrificación y la desnitrificación; por lo que en cada zona del bioreactor esto se implementa. Las siguientes suposiciones y modificaciones fueron consideradas para el presente estudio [Jeppsson, U., 1996; Olsson, G., *et al.*, 1999; Sotomayor, O.A.Z., *et al.*, 2001]:

- (i). La temperatura (20 °C) es constante en la planta de tratamiento de aguas residuales.
- (ii).  $S_I$  no está incluida debido a su irrelevancia en este estudio.
- (iii).  $X_I$  y  $X_P$  son combinadas en una sola variable,  $X_{IP}$ , ya que sus fracciones no son componentes de interés para este estudio. Por lo tanto,

$$X_{IP} = X_I + X_P \quad (2-7)$$

- (iv). Se describe el coeficiente de transferencia de masa volumétrico global en unidades de fase líquida del oxígeno ( $K_L \cdot a$ ) mediante una ecuación lineal, cuyo método de selección se presenta en el *Capítulo 3*. La ecuación resultante se utiliza como un término de la ecuación de  $S_o$  de la Tabla 2.12.

Es importante destacar que el Modelo *ASM1* es uno de los modelos más utilizados para modelar el proceso biológico, pero existen otros modelos que representan a éste con diferentes consideraciones, como son los modelos "white-box", "step-wise", "black-box", "stochastic grey-box" e híbridos que describen las plantas de lodos activados (*ASP's*) con remoción biológica de nutrientes (nitrógeno y fósforo). También está la inteligencia artificial (*Artificial Intelligence, AI*), sistemas de control de supervisión y "modular agent-based systems", entre otros, que pueden interactuar con otros modelos [Ger-naey, K.V., *et al.*, 2004].

**Tabla 2.11.**

Velocidades de reacción para los componentes particulados [Henze, M., *et al.*, 1987].

VARIABLE	ECUACIÓN DE LA VELOCIDAD DE REACCIÓN DEL COMPONENTE PARTICULADO
$X_{BH}$	$r_{X_{BH}} = \left\{ \mu_H \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left[ \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_s \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] - b_H \right\} \cdot X_{BH}$
$X_{BA}$	$r_{X_{BA}} = \left\{ \mu_A \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{OA} + S_O} \right) - b_A \right\} \cdot X_{BA}$
$X_S$	$r_{X_S} = (1 - f_P) \cdot (b_H X_{BH} + b_A X_{BA}) - k_h \cdot \left( \frac{X_S / X_{BH}}{K_X + (X_S / X_{BH})} \right) \cdot \left[ \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_h \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] \cdot X_{BH}$
$X_{ND}$	$r_{X_{ND}} = (i_{XB} - f_P \cdot i_{XP}) \cdot (b_H X_{BH} + b_A X_{BA}) - k_h \cdot \left( \frac{X_{ND} / X_{BH}}{K_X + (X_S / X_{BH})} \right) \cdot \left[ \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_h \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] \cdot X_{BH}$
$X_P$	$r_{X_P} = f_P \cdot (b_H X_{BH} + b_A X_{BA})$
$X_I$	$r_{X_I} = 0$

**Tabla 2.12.**Velocidades de reacción para los componentes solubles [Henze, M., *et al.*, 1987].

VARIABLE	ECUACIÓN DE LA VELOCIDAD DE REACCIÓN DEL COMPONENTE SOLUBLE
$S_O$	$r_{S_O} = -\mu_H \left( \frac{1-Y_H}{Y_H} \right) \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) \cdot X_{BH}$ $-\mu_A \left( \frac{4.57-Y_A}{Y_A} \right) \cdot \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{OA} + S_O} \right) \cdot X_{BA} + K_L a \cdot (S_{O,SAT} - S_O)$
$S_{NH}$	$r_{S_{NH}} = \left\{ -i_{XB} \cdot \mu_H \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left[ \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_g \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] + k_a S_{ND} \right\}$ $\cdot X_{BH} - \mu_A \left( i_{XB} + \frac{1}{Y_A} \right) \cdot \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{OA} + S_O} \right) \cdot X_{BA}$
$S_{ND}$	$r_{S_{ND}} = \left\{ -k_a S_{ND} + k_h \cdot \left( \frac{X_{ND}/X_{BH}}{K_X + (X_S/X_{BH})} \right) \left[ \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_h \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] \right\} \cdot X_{BH}$
$S_{NO}$	$r_{S_{NO}} = -\mu_H \cdot \eta_g \left( \frac{1-Y_H}{2.86 \cdot Y_H} \right) \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \cdot X_{BH}$ $+ \frac{\mu_A}{Y_A} \cdot \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{OA} + S_O} \right) \cdot X_{BA}$
$S_S$	$r_{S_S} = \left\{ -\frac{\mu_H}{Y_H} \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left[ \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_g \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] \right\}$ $- k_h \cdot \left( \frac{X_S/X_{BH}}{K_X + (X_S/X_{BH})} \right) \left[ \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_h \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] \right\} \cdot X_{BH}$
$S_I$	$r_{S_I} = 0$
$S_{ALK}$	$r_{S_{ALK}} = \left\{ \frac{1}{14} k_a S_{ND} + \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left[ -\frac{i_{XB}}{14} \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_h \left( \frac{1-Y_H}{40.04 Y_H} - \frac{i_{XB}}{14} \right) \right] \right\}$ $\cdot \left[ \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right]$ $- \mu_A \left( \frac{i_{XB}}{14} + \frac{1}{7 Y_A} \right) \cdot \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{OA} + S_O} \right) \cdot X_{BA}$

### 2.3.2. Sedimentación-Clarificación.

El modelo de la función de doble exponencial de la velocidad de sedimentación es presentado por Takács, I., *et al.* en 1991. Es considerado como la mejor representación del proceso sedimentación-clarificación por Grijspeerdt, K., *et al.* (1995) y Koehne, M., *et al.* (1995). Está basado en el concepto del flux de sólidos, y es aplicable a las condiciones de sedimentación retardada por la atracción entre las partículas ("hindered settling") y a la sedimentación floculante ("flocculent particle settling"); contrario al modelo estándar de Vesilind, A.P. (1968), el cual es aplicable únicamente a las condiciones de sedimentación retardada [Copp, J.B., 2000].

En la Fig. 2.4 se muestra el esquema del sedimentador considerado por Takács, I., *et al.* (1991) y el balance de sólidos a través de las capas de este equipo.

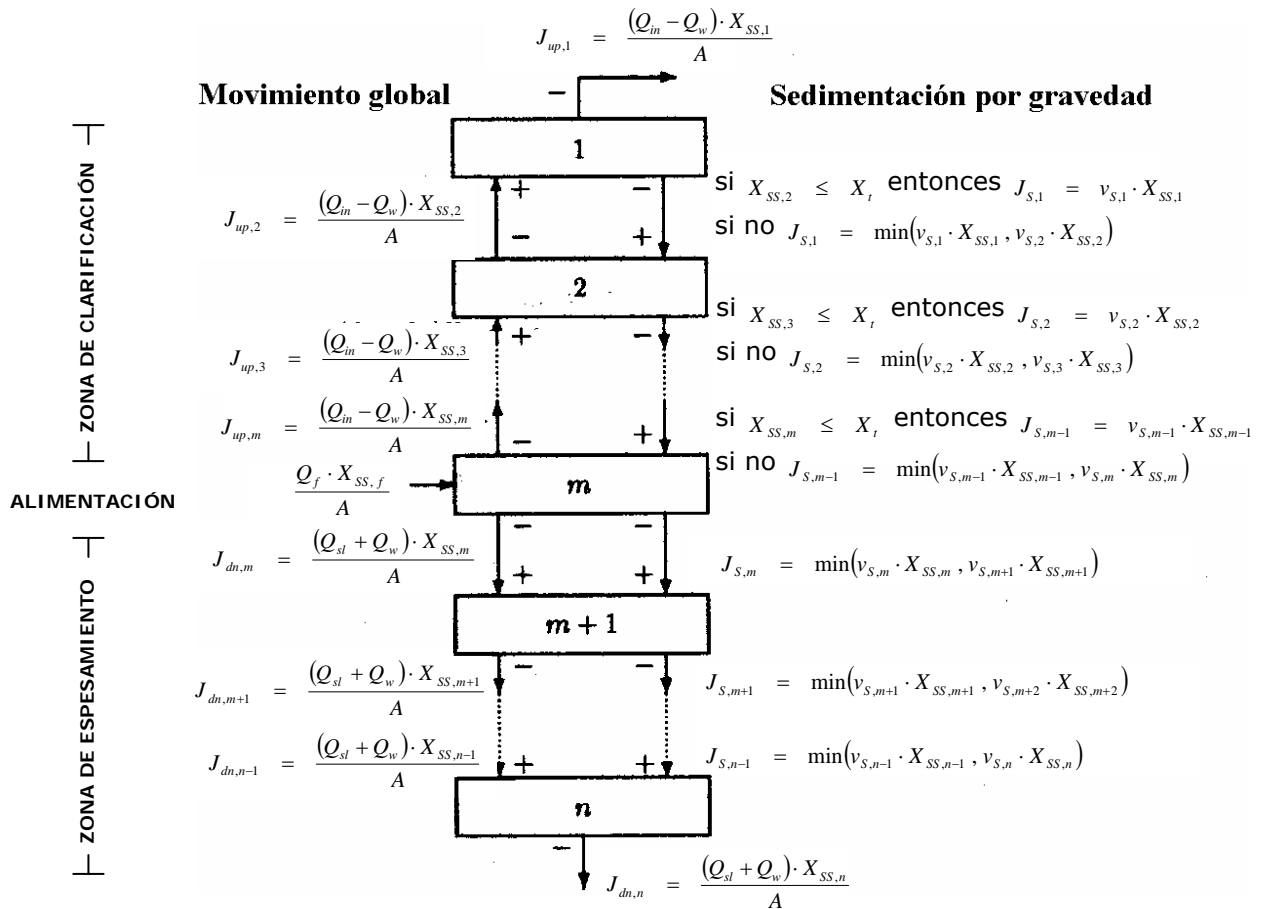


Fig. 2.4. Balance de sólidos a través de las capas del sedimentador [Takács, I., *et al.*, 1991].

El sedimentador está modelado como un tanque dividido en varias capas horizontales (Fig. 2.4), donde se asume que: (i) no ocurre reacción biológica, (ii) los sólidos a la entrada se distribuyen instantánea y uniformemente a lo largo de la sección transversal del área de la capa del clarificador y (iii) únicamente los gastos que ascienden y descienden son considerados en el modelo.

En la modelación del sedimentador secundario es necesario considerar el incremento o acumulación del lodo sedimentado ya que éste puede llenar el equipo; o bien, puede dirigirse a la superficie y romperse en pequeñas porciones. Una parte de este lodo puede sedimentarse nuevamente y la otra irse con el desbordamiento del efluente. En el supuesto de que se presentara este problema, el efluente contendría mayor cantidad de sólidos suspendidos y reduciría su calidad (específicamente con respecto a  $BOD_e$ ,  $COD_e$  y  $N_{tot_e}$ ). Además, se caracterizaría por presentar burbujas de nitrógeno y dióxido de carbono en la superficie.

El Modelo de Takács está basado en el balance de sólidos en cada capa, por lo que las ecuaciones diferenciales que describen este fenómeno están dadas a continuación [Lindberg, C.F., 1997; Sotomayor, O.A.Z., *et al.*, 2001]:

Para el domo:

$$\frac{dX_{SS,1}}{dt} = \frac{1}{h} \cdot (J_{up,2} - J_{up,1} - J_{s,1}) \quad (2-8)$$

Para las capas superiores a la alimentación:

$$\frac{dX_{SS,i}}{dt} = \frac{1}{h} \cdot (J_{up,i+1} - J_{up,i} + J_{s,i-1} - J_{s,i}) \quad (2-9)$$

donde,  $2 \leq i < m$



Para la capa de alimentación:

$$\frac{dX_{SS,m}}{dt} = \frac{1}{h} \cdot \left[ \frac{(Q_{in} + Q_{sl}) \cdot X_{SS,f}}{A} - J_{up,m} - J_{dn,m} + J_{s,m-1} - J_{s,m} \right] \quad (2-10)$$

Para las capas posteriores a la alimentación:

$$\frac{dX_{SS,j}}{dt} = \frac{1}{h} \cdot (J_{dn,j-1} - J_{dn,j} + J_{s,j-1} - J_{s,j}) \quad (2-11)$$

donde,  $2 \leq i < m$

Para la base:

$$\frac{dX_{SS,n}}{dt} = \frac{1}{h} \cdot (J_{dn,n-1} - J_{dn,n} + J_{s,n-1}) \quad (2-12)$$

donde  $X_{SS}$  son los sólidos suspendidos en cada capa del sedimentador secundario;  $h$  y  $A$  son la altura y el área, respectivamente;  $n$  es el número de capas;  $m$  es el número de capa de la alimentación;  $X_t$  es el límite para la concentración de sólidos suspendidos;  $J_s$  es el flux de sólidos correspondiente a la sedimentación por gravedad;  $J_{up}$  es el flux de sólidos correspondiente al movimiento hacia arriba del seno del líquido en las capas y  $J_{dn}$  es el flux de sólidos correspondiente al movimiento hacia abajo del seno del líquido en las capas. Las ecuaciones de los fluxes se expresan en la Fig. 2.4.

Al igual que en el modelo biológico, el Modelo de Takács utilizada un número de parámetros de operación (nueve), cuyos valores se presentan en la Tabla 2.13.

**Tabla 2.13.**Parámetros de operación del sedimentador [Takács, I., *et al.*, 1991].

DESCRIPCIÓN DEL PARÁMETRO	SÍMBOLO	VALOR	UNIDADES
1. Velocidad máxima teórica de sedimentación.	$v_0$	19.7500	m/h
2. Velocidad máxima práctica de sedimentación.	$v'_0$	10.4167	m/h
3. Parámetro de sedimentación asociado con el componente de la sedimentación retardada de la ecuación de velocidad de sedimentación.	$r_h$	5.76E-04	L/mg
4. Parámetro de sedimentación asociado con la concentración baja y el componente lentamente sedimentable en la suspensión.	$r_p$	2.86E-03	L/mg
5. Fracción no sedimentable de sólidos suspendidos en la alimentación.	$f_{ns}$	2.28E-03	
6. Concentración de sólidos suspendidos mínima alcanzable en el efluente.	$X_{\min}$	$f_{ns} \cdot X_{SS,f}$	mg/L
7. Límite para la concentración de sólidos suspendidos en el sedimentador secundario.	$X_t$	3000.0000	mg/L
8. Factor de conversión de sólidos suspendidos a COD de $X_{IP}$ y $X_S$ .	$f_1^{(1)}$	0.7500	mg SS/ COD
9. Factor de conversión de sólidos suspendidos a biomasa.	$f_2^{(1)}$	0.7500	mg SS/ COD

<sup>(1)</sup> Valores obtenidos de Sotomayor, O.A.Z., *et al.* (2001).

Para aplicar el modelo se consideraron tres suposiciones [Jeppsson, U., 1997; Lindberg, C.F., 1997; Sotomayor, O.A.Z., *et al.*, 2001] y tres modificaciones adicionales al modelo original.

Las tres suposiciones son:

- (i). Los efectos tales como la hidrodinámica, la actividad biológica (por ejemplo, la desnitrificación) y la compresión en el sedimentador secundario no se consideran en este estudio.
- (ii). El sedimentador es modelado como un tanque de varias capas horizontales donde cada capa se asume que se encuentra en mezcla perfecta.
- (iii). Las materias solubles son incluidas, y descritas por el siguiente modelo:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{Q_f}{V_{stlr}} \cdot (S_f - S) \quad (2-13)$$

$$\text{donde,} \quad Q_f = Q_1 - Q_{\text{int}} \quad (2-14)$$

siendo  $S$  la concentración soluble,  $Q$  el gasto volumétrico y  $V$  el volumen del sedimentador secundario. Los subíndices  $f$ ,  $1$  e  $\text{int}$  corresponden a la alimentación del sedimentador, alimentación del reactor aeróbico no. 3 y a la recirculación interna, respectivamente.

Las concentraciones solubles ( $S_{NH}$ ,  $S_{ND}$ ,  $S_{NO}$ ,  $S_S$  y  $S_{ALK}$ ) son consideradas homogéneas para todas las capas del sedimentador, por eso:

$$S_{sl} = S_w = S_u = S_e \quad (2-15)$$

donde los subíndices  $sl$ ,  $w$ ,  $u$  y  $e$  corresponden a la recirculación de lodos, purga de lodos, lodos de la base y efluente del sedimentador secundario, respectivamente.

Pero para la concentración de oxígeno disuelto ( $S_0$ ), se considera que éste es consumido dentro del sedimentador y por lo tanto, el oxígeno del agua en las salidas es cero [Diehl, S., *et al.*, 1998]. Esto quiere decir que:

$$S_{O,sl} = S_{O,w} = S_{O,u} = S_{O,e} = 0 \quad (2-16)$$

Como el gasto de la base del sedimentador secundario se divide en la recirculación de lodos que se dirige al primer reactor anóxico y en la purga de lodos, las concentraciones de ambas corrientes son equivalentes, por lo que:

$$S_u = S_{sl} = S_w \quad (2-17)$$

En consecuencia, lo mismo sucede para las concentraciones particuladas; por lo que:

$$X_u = X_{sl} = X_w \quad (2-18)$$

Es importante destacar, que la materia particulada en la base del sedimentador secundario contiene los microorganismos o biomasa necesaria para las reacciones biológicas para que el lodo que se recircule al bioreactor ( $Q_{sl}$ ), mantenga el nivel de sólidos deseados en los reactores biológicos [Lindberg, C.F., 1997].

Las modificaciones adicionales al modelo original, necesarias para su aplicación, son las siguientes:

- (i). La concentración total de lodos en la corriente de alimentación del sedimentador ( $X_{SS,f}$ ) está dado por:

$$X_{SS,f} = f_1 \cdot (X_{IP,f} + X_{S,f}) + f_2 \cdot (X_{BH,f} + X_{BA,f}) \quad (2-19)$$

Por el contrario, Sotomayor, O.A.Z., *et al.* (2001) propone la (Ec. 2-19a) para este mismo cálculo, pero no es consistente en las unidades ya que  $X_{ND,f}$  se expresa en mg N/L, mientras que  $X_{BH,f}$  y  $X_{BA,f}$  en mg COD/L.

$$X_{SS,f} = f_1 \cdot (X_{IP,f} + X_{S,f}) + f_2 \cdot (X_{BH,f} + X_{BA,f} + X_{ND,f}) \quad (2-19a)$$

Por lo tanto, la ecuación que se utiliza en el modelo es la (Ec. 2-19).

- (ii). Las concentraciones particuladas en el efluente del agua tratada ( $X_{C,e}$ ) son calculadas como sigue:

$$X_{C,e} = \left( \frac{X_{C,f}}{X_{SS,f}} \right) \cdot X_{SS,1} \quad (2-20)$$

donde  $X_{SS}$  son los sólidos suspendidos en la capa de alimentación (subíndice  $f$ ) ó en la primera capa del sedimentador (subíndice 1) que corresponde a la zona de clarificación (Fig. 2.4). Los subíndices  $C$ ,  $f$  y  $e$  corresponden al tipo de sólido ya sea  $X_{BH}$ ,  $X_{BA}$ ,  $X_S$  y/o  $X_{ND}$ , a la alimentación y al efluente del sedimentador secundario, respectivamente.

La (Ec. 2-20) se contrapone con la ecuación propuesta por Sotomayor, O.A.Z., *et al.* (2001):

$$X_{C,e} = f_1 \cdot \left( \frac{X_{C,f}}{X_{SS,f}} \right) \cdot X_{SS,1} \quad (2-20a)$$

ya que la (Ec. 2-20a) multiplica por el factor de conversión  $f_1$  (mg SS/mg COD) que no es necesario, porque las unidades son consistentes. Por lo tanto, la (Ec. 2-20) es la que se emplea en este estudio.

- (iii). Las concentraciones particuladas en la recirculación de lodos ( $X_{BH,sl}$ ,  $X_{BA,sl}$ ,  $X_{S,sl}$  y  $X_{ND,sl}$ ) y en la purga de lodos ( $X_{BH,w}$ ,  $X_{BA,w}$ ,  $X_{S,w}$  y  $X_{ND,w}$ ), y considerando la (Ec. 2-18), las concentraciones particuladas de la base del sedimentador son calculadas por la (Ec. 2-21):

$$X_{C,sl \text{ ó } w} = \left( \frac{X_{C,f}}{X_{SS,f}} \right) \cdot X_{SS,n} \quad (2-21)$$

donde  $X_{SS}$  son los sólidos suspendidos en la capa de alimentación (subíndice  $f$ ) ó en la última capa del sedimentador (subíndice  $n$ ) que corresponde a la zona de espesamiento (Fig. 2.4). Los subíndices  $C$ ,  $f$ ,  $sl$  y  $w$  corresponden

al tipo de sólido ya sea  $X_{BH}$ ,  $X_{BA}$ ,  $X_S$  y/o  $X_{ND}$ , a la alimentación, a la recirculación del lodos y a la purga de lodos del sedimentador secundario, respectivamente.

Por el contrario, Sotomayor, O.A.Z., *et al.* (2001) propone una ecuación diferente a la (Ec. 2-21), que es:

$$X_{C,sl \text{ ó } w} = f_2 \cdot \left( \frac{X_{C,f}}{X_{SS,f}} \right) \cdot X_{SS,n} \quad (2-21a)$$

La diferencia de la (Ec. 2-21a) con respecto a la (Ec. 2.21) es el factor de conversión  $f_2$  (mg SS/mg COD) que no es necesario porque las unidades son consistentes.

Existe otra diferencia para el cálculo de las concentraciones en la base del sedimentador. Lindberg, C.F. (1997) difiere de Sotomayor, O.A.Z., *et al.* (2001) con la ecuación:

$$\frac{dX_{C,n}}{dt} = \frac{1}{h} \cdot \left[ \frac{(Q_{sl} + Q_w)}{A} \cdot (X_{C,n-1} - X_{C,n}) + \min(v_{s,n-1} \cdot X_{C,n-1}, v_{s,n} \cdot X_{C,n}) \right] \quad (2-21b)$$

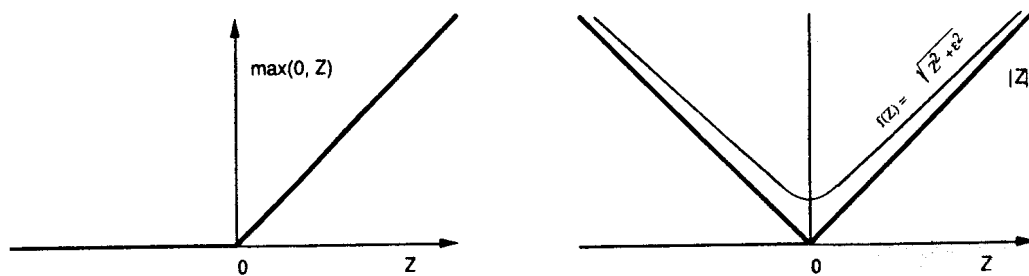
donde los subíndices  $C$  y  $n$  corresponden al tipo de sólido ya sea  $X_{BH}$ ,  $X_{BA}$ ,  $X_S$  y/o  $X_{ND}$  y al número total de capas del sedimentador secundario, respectivamente.

La (Ec. 2-21b) considera que las composiciones del material suspendido no son tratadas como un licor mezclado de sólidos suspendidos volátiles (MLVSS); por ello, éstas son calculadas en cada capa, considerando su variación con respecto al tiempo.

Sin embargo, la (Ec. 2-21) es la que se emplea en el modelo de este estudio ya que se trató de ser consistente con el cálculo de las concentraciones particuladas del efluente (Ec. 2-20) que no se calculan dinámicamente.

Adicionalmente, al Modelo de Takács, se le realizan dos ajustes matemáticos que corresponden a: (i) la función de la doble exponencial de la velocidad de sedimentación en la capa  $i$  ( $v_{s,i}$ ) y (ii) los fluxes de sólidos de la sedimentación por gravedad en las capas del sedimentador secundario ( $J_{s,i}$ ).

Este ajuste se debe a que dichas funciones incluyen funciones de máximo (max) y/o mínimo (min) que son funciones no lineales y no diferenciables en el origen como se muestra en la Fig. 2.5 para una función de "max".



**Fig. 2.5.** Función no diferenciable:  $\max(0, Z)$  [Balakrishna, S. *et al.*, 1992].

En 1992, Balakrishna, S. y Biegler, L.T propusieron una técnica de suavizamiento simple basándose en una aproximación hiperbólica para convertir las funciones "max" y "min" en funciones continuas no lineales. La estimación de estas funciones está dada por la (Ec. 2-22):

$$\begin{aligned} f(Z) = \max(0, Z) &= \frac{|Z|}{2} + \frac{Z}{2} & (2-22) \\ &= \frac{\sqrt{Z^2 + \varepsilon^2}}{2} + \frac{Z}{2} \end{aligned}$$

donde  $Z$  = cualesquier función  
 $\varepsilon$  = error

La Ec. (2-22) proporciona una representación simple de la función sobre el dominio completo ( $-\infty < Z < \infty$ ), distinto a aproximaciones cuadráticas o exponenciales.

Aplicando lo anterior a la función de la doble exponencial de la velocidad de sedimentación en cada una de las capas  $i$  del sedimentador secundario de la planta de tratamiento de aguas, expresada como:

$$v_{S,i} = \max \left\{ 0, \min \left[ v'_0, v_0 \cdot \left( e^{-r_h \cdot (X_{SS,i} - X_{\min})} - e^{-r_p \cdot (X_{SS,i} - X_{\min})} \right) \right] \right\} \quad (2-23)$$

$$\text{donde,} \quad \begin{aligned} 0 &\leq v_{S,i} \leq v'_0 \\ 1 &\leq i \leq n \end{aligned}$$

siendo los parámetros de la (Ec. 2-23) identificados en la Tabla 2.13, resulta la (Ec. 2-24):

$$v_{S,i} = \frac{\sqrt{Z_i^2 + \varepsilon^2}}{2} + \frac{Z_i}{2} \quad (2-24)$$

donde,

$$Z_i = v'_0 - \frac{\sqrt{\left( v'_0 - v_0 \cdot \left( e^{-r_h \cdot (X_{SS,i} - X_{\min})} - e^{-r_p \cdot (X_{SS,i} - X_{\min})} \right) \right)^2 + \varepsilon^2}}{2} - \frac{v'_0 - v_0 \cdot \left( e^{-r_h \cdot (X_{SS,i} - X_{\min})} - e^{-r_p \cdot (X_{SS,i} - X_{\min})} \right)}{2}$$

Asimismo, si se aplica la (Ec. 2-22) a la función del flux de sólidos correspondiente a la sedimentación por gravedad en las capas del sedimentador secundario, a saber:

$$J_{S,i} = \min(v_{S,i} \cdot x_{SS,i}, v_{S,i+1} \cdot x_{SS,i+1}) \quad (2-25)$$

resulta la Ec. (2-26):

$$J_{S,i} = v_{S,i} \cdot x_{SS,i} - \frac{\sqrt{Z_i^2 + \varepsilon^2}}{2} + \frac{Z_i}{2} \quad (2-26)$$



donde, 
$$Z_i = v_{S,i} \cdot x_{SS,i} - v_{S,i+1} \cdot x_{SS,i+1}$$

En la (Ec. 2-24) y (Ec.2-26),  $\varepsilon$  debe calcularse de acuerdo con la aproximación de la función  $Z$ . El valor recomendado para este parámetro por Balakrishna, S., *et al.* (1992) es de 0.01, y el cual, se considera aplicable en este estudio.

Adicionalmente al Modelo de Takács, existen otros modelos para el proceso dinámico de separación sólido-líquido para el sedimentador secundario, como el de Vesilind, A.P. (1968), Bryant, J.O. (1972), Busby, J.B. (1973), Stenstrom, M.K. (1976), Hill, R.D. (1985), Vitasovic, Z.Z. (1986 y 1989), Härtel, L., *et al.* (1992), Otterpohl, R., *et al.* (1992) [Takács, I., *et al.*, 1991; Härtel, L., *et al.*, 1992], Koehne, M., *et al.* (1995) y Chancelier, J.Ph., *et al.* (1997) [Chancelier, J.Ph., *et al.*, 1997; Jeppsson, U., 1997], Argaman, Y., *et al.* (1999), Queinnec, I., *et al.* (2001), entre otros.

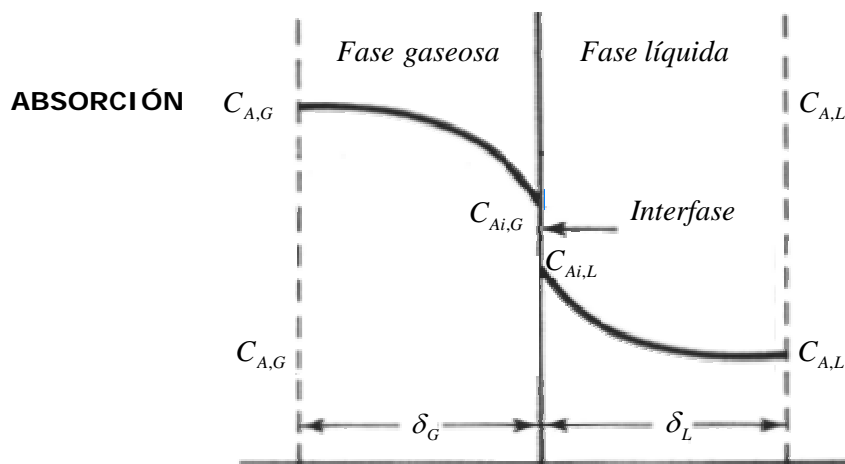
Son pocas las investigaciones que se han dedicado a integrar el modelo del proceso biológico con el de sedimentación-clarificación [Dupont, R., *et al.*, 1992; Jeppsson, U., *et al.*, 1996; Diehl, S., *et al.*, 1998; Vrečko, D., *et al.*, 2001; Vanhooren, H., *et al.*, 2002; Yong, M., *et al.*, 2006]. La importancia de implementar ambos modelos en uno sólo es: (i) predecir una planta de tratamiento de aguas residuales en su totalidad, (ii) incorporar las variables biológicas del *ASM1* con las variables solubles y particuladas del Modelo de Takács para cada uno de los equipos que integran la planta de tratamiento de aguas con remoción de nutrientes [Jeppsson, U., 1997] y (iii) cumplir con los criterios del efluente, que en caso que el modelo propuesto no predijera adecuadamente, se deterioraría el funcionamiento de la *ASP* y no cumpliría con dichos criterios [Nuhoglua, A., *et al.*, 2005].

### 2.3.3. Velocidad de Transferencia del Oxígeno.

Los microorganismos aeróbicos necesitan del oxígeno disuelto, además del sustrato para vivir. El consumo del oxígeno en los tanques de lodos activados aireados es un notable ejemplo de transferencia de masa, porque el oxígeno del aire se transfiere al agua para que pueda ser utilizado por la biomasa [Olsson, G., *et al.*, 2001].

La solubilidad del oxígeno en el medio acuoso es baja, por lo que la reserva de oxígeno en la solución es rápidamente agotada si su suministro no es mantenido.

El aire es la principal fuente de oxígeno. Éste se dispersa en el medio y el oxígeno es tomado por absorción [Schügerl, K., 1991]. Esto quiere decir que el oxígeno debe transferirse del seno de la fase gaseosa (aire) a la superficie del agua, disolverse en el agua, y luego transferirse de la superficie al seno de la fase líquida (agua), como lo indica la *teoría de la doble película o de la doble resistencia*, la cual se ilustra en la Fig. 2.6.



**Fig. 2.6.** Perfiles de concentraciones de las capas del sedimentador a través de una interfase para absorción. Basado en García-Arrazola, R. (2003).

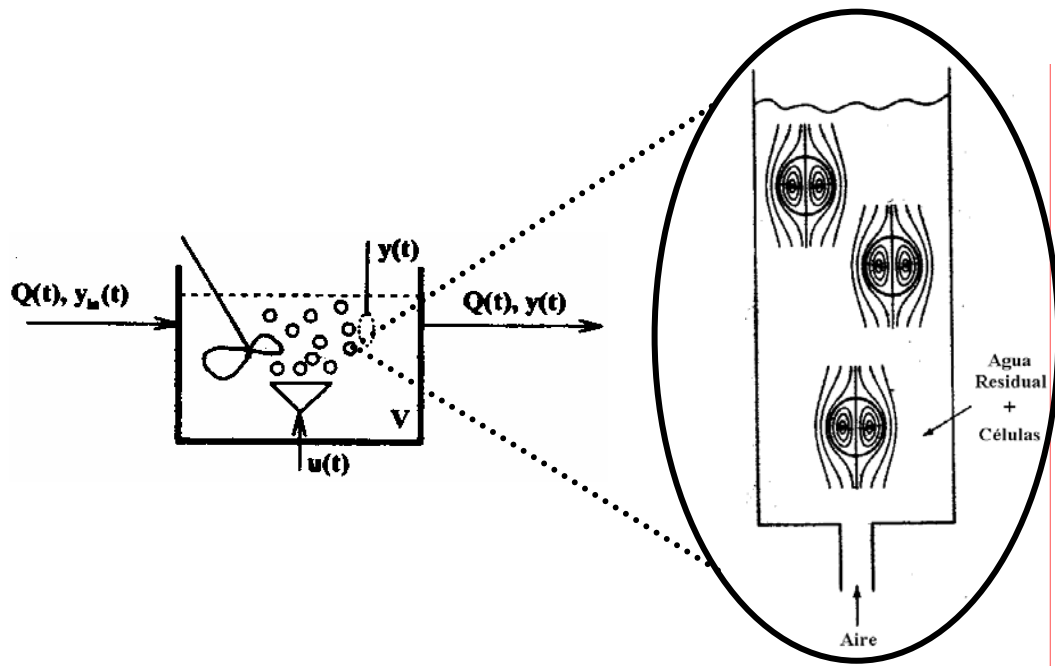
Con base en lo anterior, para absorción y considerando que no hay acumulación ni reacción química por razones de continuidad, todo lo que pasa por la fase gaseosa pasará por la fase líquida, es decir,

$$(N_A \cdot a) = (k_L \cdot a) \cdot (C_{Ai,L} - C_{A,L}) = (k_G \cdot a) \cdot (C_{A,G} - C_{Ai,G}) \quad (2-27)$$

La velocidad de transferencia de masa ( $N_A \cdot a$ ) también puede expresarse considerando el gradiente que se establece entre las concentraciones de ambas fases ( $C_{A,L}$  y  $C_{A,G}$ ), teniéndose en este caso, dos formas de expresar la ecuación: una en unidades de fase líquida y otra en unidades de fase gaseosa, a saber:

$$(N_A \cdot a) = (K_L \cdot a) \cdot (C_{A,L}^* - C_{A,L}) = (K_C \cdot a) \cdot (C_{A,G} - C_{A,G}^*) \quad (2-28)$$

En la Fig. 2.7 se ilustra el suministro de oxígeno a las células presentes en un bioreactor, como consecuencia de la transferencia del oxígeno del aire al agua residual en la que se disuelve.



**Fig. 2.7.** Absorción de oxígeno de una burbuja de aire al medio acuoso. Basado en Lindberg, C.F. (1997); Bird, R.B., *et al.* (2002); Dunn, I.J., *et al.* (2003) y Metcalf, *et al.* (2003).

En los bioreactores, donde el oxígeno puede ser inyectado vía compresión de aire, los microorganismos reaccionan con la materia orgánica del agua residual y con el oxígeno disuelto (*DO*) en el agua para producir más masa celular, dióxido de carbono y agua [Ko., K.Y.J., *et al.*, 1982].

La respiración en el bioreactor o la velocidad de consumo de oxígeno (*r*) es una variable esencial en los sistemas de lodos activados debido a que es el verdadero indicador del crecimiento continuo de los microorganismos, de la degradación biológica y del mantenimiento energético de la planta. Depende de la concentración de la biomasa y describe el consumo de oxígeno de los microorganismos en el lodo activado. Varía con

el tiempo y su perturbación es diaria. Además, es uno de los valores más utilizados para caracterizar las aguas residuales domésticas [Sollfrank, U., *et al.*, 1990] ya que refleja la operación del proceso.

Por ejemplo,  $r$  muestra la presencia de sustancias tóxicas en la planta, lo que es indicativo para cuando hay que realizar un "bypass" para mantener a los microorganismos vivos (esta situación se refleja en un cambio abrupto, generalmente un decremento en la velocidad de consumo) [Holmberg, U., *et al.*, 1989; Bocken, S.M., *et al.*, 1989; Carlsson, B., *et al.*, 1994; Lindberg, C.F., 1997].

$r$  se puede calcular empleando el coeficiente de transferencia de masa global volumétrico en unidades de fase líquida en densidad molar ( $K_L \cdot a$ ) y el gradiente de concentraciones de oxígeno, considerando que la superficie de las burbujas estén saturadas de oxígeno ( $S_{O,SAT}$ ). La expresión que cuantifica lo anterior es [Olsson, G., *et al.*, 1978]:

$$r = (K_L \cdot a) \cdot (S_{O,SAT} - S_O) \quad (2-29)$$

El valor de ( $K_L \cdot a$ ) cuando existe aireación depende del tamaño de las burbujas, de la velocidad de gasto del aire ( $u$ ), tipo de aireación, tipo de difusores, composición del agua residual, temperatura, diseño del reactor aeróbico, altura del reactor, y localización de los difusores, entre otros. De los factores antes mencionados el más importante es  $u$  [Holmberg, U., *et al.*, 1989; Bocken, S.M., *et al.*, 1989; Carlsson, B., 1993; Lindberg, C.F., 1997], mismo que se puede constatar en la Tabla 2.14 donde se plantean diferentes modelos de ( $K_L \cdot a$ ) en función de este parámetro y en donde  $k_1$ ,  $k_2$  y  $k_3$  son parámetros de los modelos.

La demanda o consumo de oxígeno en la entrada de un reactor aerobio debe ser alta y muy baja a la salida; por lo tanto, esto resulta en una variación de la concentración del  $DO$  a lo largo del bioreactor [Olsson, G., *et al.*, 1978]. Esta variación en un  $ASP$  se ha convertido en objeto de estudio debido a que impacta en el diagnóstico y control del proceso [Carlsson, B., 1993].

**Tabla 2.14.**

Modelos para la función de transferencia del oxígeno [Sotomayor, O.Z.A., *et al.*, 2002].

MODELO	ECUACIÓN
"Step"	$(K_L \cdot a) = [0, k_1]$
Lineal A	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot u$
Lineal B	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot u + k_2$
Arcotangente	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot \tan^{-1}(k_2 \cdot u)$
Raíz cuadrada	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot \sqrt{u}$
Potencia	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot u^{k_2}$
Exponencial	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot (1 - \exp(k_2 \cdot u))$
Polinomial	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot u + k_2 \cdot \sqrt{u} + k_3$
"Piecewise lineal"	$(K_L \cdot a) = (k_1 + k_2 \cdot t) \cdot u$
Spline cúbica	$(K_L \cdot a) = f(u)$

El objetivo del control del oxígeno es evitar la aireación excesiva y maximizar los índices de conversión de los procesos biológicos. Lo anterior es de gran importancia puesto que la disminución del período total de la aireación reduce perceptiblemente los costos de la operación y esto se puede lograr mediante la manipulación de la secuencias de tiempos de aireación/no aireación del bioreactor de la planta.

En el caso de los procesos biológicos de remoción de materia orgánica y de nitrógeno, la demanda del *DO* es considerada como el parámetro de control más importante. El exceso de los niveles del *DO* provocará un consumo de energía innecesario debido al exceso de aireación que podría afectar los procesos anóxicos, en los cuales se busca eliminar todas las formas de oxígeno (incluyendo nitratos) para alcanzar más fácilmente el control de la masa del lodo ó "*bulking*". Por el contrario, los bajos niveles de *DO* inhibirían el crecimiento de las bacterias nitrificadoras [Albertson, O.E., *et al.*, 1995; Yong, M., *et al.*, 2006] y la baja degradación del carbono orgánico.

# CAPÍTULO 3

## Resultados y Discusión

Los resultados obtenidos para la planta del “*Simulation Benchmark*” se dividieron en cuatro secciones: (i) simulación y validación del caso de estudio, donde se obtuvo un programa confiable en lenguaje MATLAB® para el estudio de la planta bajo diversas condiciones, ya sean climáticas o de operación, (ii) análisis y optimización del bioproceso por medio del diseño de experimentos (*DoE*), con el objetivo de obtener la combinación óptima de factores controlables y no controlables que minimizaran los contaminantes en el efluente, principalmente los relacionados con el nitrógeno, (iii) definición de las políticas óptimas de operación de la planta, a través de plantear las condiciones operativas promedio reportadas en la literatura para mejorarlas de acuerdo a los resultados encontrados en el estudio del *DoE* y (iv) optimización dinámica simultánea del bioproceso, donde se minimiza la contaminación del efluente para cumplir con las normas de descarga en el menor tiempo posible.

### 3.1. SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DEL CASO DE ESTUDIO.

Para realizar la simulación dinámica es necesario contar con todas las ecuaciones del modelo. El modelo de la planta lo conforman el Modelo *ASM1* y el Modelo de Takács, así como las suposiciones y adecuaciones que se realizaron al modelo y que se encuentran descritos en el *Capítulo 2*.

La única ecuación que falta por definirse es para la estimación del coeficiente de transferencia de masa volumétrico global en unidades de fase líquida ( $K_L \cdot a$ ) involucrado en las ecuaciones del bioreactor (cálculo de la variación de la concentración de oxígeno disuelto ( $S_o$ ) con respecto al tiempo); por ello, se optó por llevar a cabo un análisis

sis para definir una ecuación que permitiera calcular dicho valor en función del gasto del aire, en lugar de tomarlo como una constante.

A continuación se presenta la discusión para definir dicha ecuación y enseguida la simulación dinámica.

**Ecuación del Coeficiente de Transferencia de Masa Global Volumétrico del Oxígeno.** De acuerdo con Sotomayor, O.A.Z., *et al.* (2001):

$$(K_L \cdot a) = 12.5 \cdot [1 - e^{(-10.08 \cdot Q_{air})}] \quad (3-1)$$

obteniéndose como valores de  $(K_L \cdot a)$  de  $12.4999 \text{ h}^{-1}$  para las Zonas Aeróbicas 1 y 2, y de  $12.4892 \text{ h}^{-1}$  en la Zona Aeróbica 3, para gastos del aire ( $Q_{air}$ ) de 2, 2 y  $0.7 \text{ m}^3/\text{h}$ , respectivamente. Lo anterior difiere de lo reportado en el "Benchmark", que es:  $(K_L \cdot a)$  de  $10 \text{ h}^{-1}$ ,  $10 \text{ h}^{-1}$  y  $3.5 \text{ h}^{-1}$  para cada una de las zonas aeróbicas.

Por lo tanto, se descartó la ecuación de Sotomayor, O.A.Z., *et al.* (2001) y en su lugar, se procedió al análisis de las 10 ecuaciones presentadas en la Tabla 2.14 del *Capítulo 2* con el objetivo de elegir alguna que representara el fenómeno. De ellas se descartaron las ecuaciones:

- "Step" por insuficiencia en la información.
- "Spline" cúbica por ser demasiado general.
- Polinomial porque requiere determinar tres constantes y únicamente se conocen dos datos del "Benchmark".
- "Piecewise" lineal por carecer datos de  $t$ .
- Arcotangente por estar incierta la ecuación, ya que Lindberg, C.F. (1997) coincide con Sotomayor, O.A.Z., *et al.* (2001) en la expresión de la Tabla 2.14, pero Ols-son, G., *et al.* (2001) difiere en que sólo depende de un parámetro; es decir,  $(K_L \cdot a) = \tan^{-1}(k_1 \cdot u)$ .

De las ecuaciones restantes, a saber: (i) Lineal A, (ii) Lineal B, (iii) Raíz Cuadrada, (iv) Potencia y (v) Exponencial, en la Tabla 3.1 se presenta el resumen de los valores encontrados de los parámetros  $k_1$  ó  $k_1$  y  $k_2$ , según el caso.

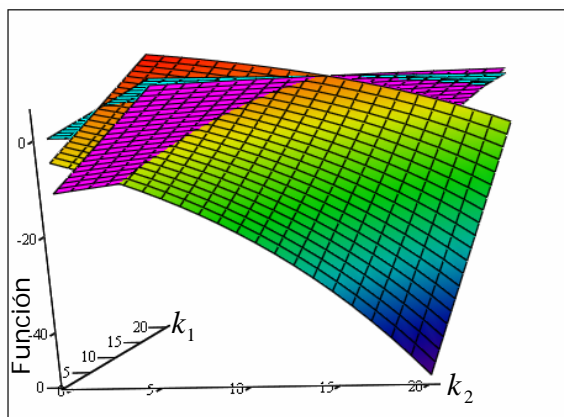
**Tabla 3.1.**

Resultados de los Modelos para la función de transferencia del oxígeno obtenidos por MATHCAD®.

MODELO	ECUACIÓN	PARÁMETROS <sup>(1)</sup>	
		$k_1, m^{-3}$	$k_2, m^{-3}$
Lineal A	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot u$	5.0000	-----
Lineal B	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot u + k_2$	5.0000	$-1.913 \times 10^{-15}$
Raíz cuadrada	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot \sqrt{u}$	5.6272 <sup>(2)</sup>	-----
Potencia	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot u^{k_2}$	5.0000	1.00000
Exponencial	$(K_L \cdot a) = k_1 \cdot (1 - \exp(-k_2 \cdot u))$	124989.12135	-0.00004

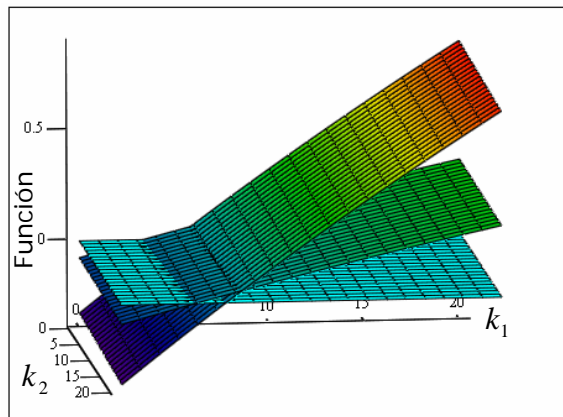
(1) Los parámetros  $k_1$  y  $k_2$  se obtuvieron aplicando el programa MATHCAD® a cada una de las ecuaciones, considerando que  $(K_L \cdot a)$  vale  $10 h^{-1}$  para las Zonas Aeróbicas 1 y 2, y  $3.5 h^{-1}$  para la Zona Aeróbica 3, y el gasto de aire correspondiente es de  $2 m^3/h$  para las dos primeras Zonas Aeróbicas y de  $0.7 m^3/h$  para la última Zona Aeróbica, de acuerdo con los datos proporcionados por el "Benchmark".  
 (2) El parámetro se obtuvo a partir del promedio aritmético de los dos valores generados (7.0710 y 4.1833) con cada uno de los dos datos experimentales.

En la Fig. 3.1 se ilustran las soluciones de las funciones de (iv) y (v) cuando varían  $k_1$  y  $k_2$ .



z, w, plano

(a)



z, w, plano

(b)

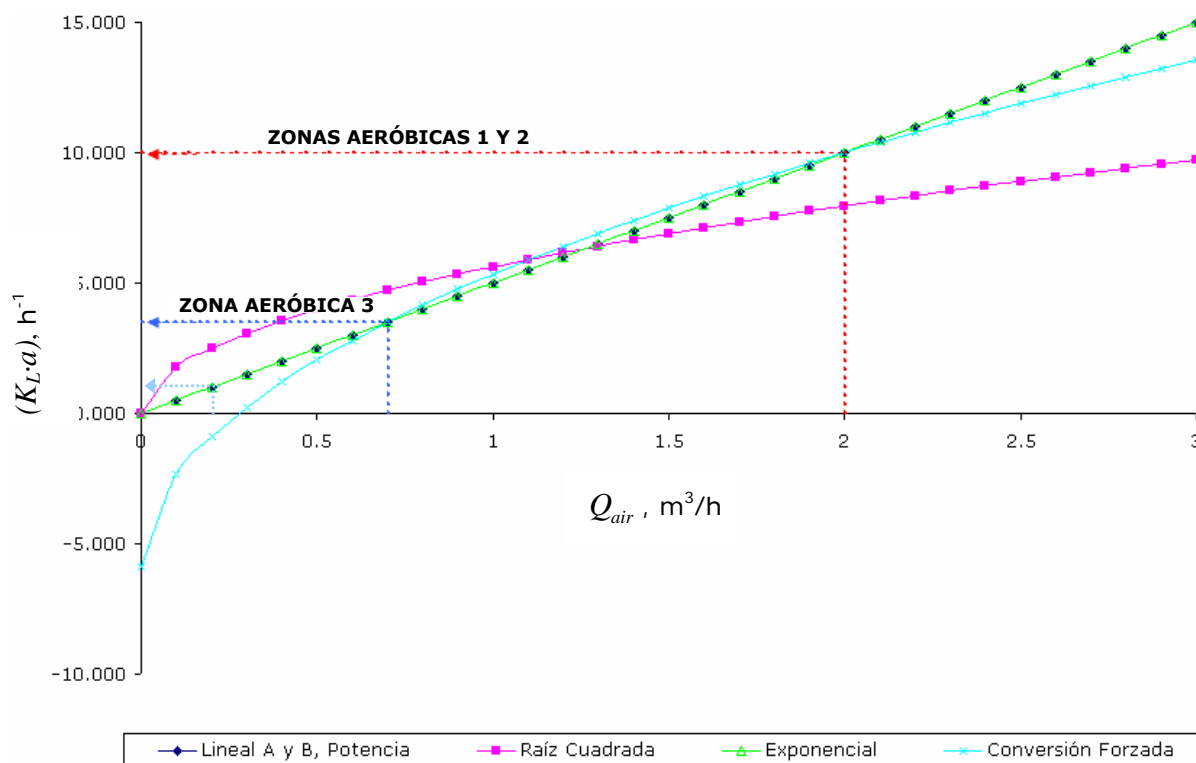
**Fig. 3.1.** Modelos de transferencia de oxígeno  $(K_L \cdot a)$  como una función de la velocidad de gasto del aire  $(Q_{air})$ : (a) Potencia y (b) Exponencial.



Con base en lo anterior, la mejor ecuación sería la Lineal A, a la que también se reduce la Lineal B y la de Potencia.

Por otra parte, de acuerdo con la teoría de la transferencia de masa y tomando en cuenta que para el sistema que se discute  $(K_L \cdot a) = (k_L \cdot a)$  [Bailey, J.E., *et al.*, 1986] la funcionalidad del coeficiente deberá de corresponder a la conversión forzada alrededor de esferas, deduciéndose que  $(K_L \cdot a) = k_1 + k_2 \cdot u^{0.5}$  [Bird, R.B., *et al.*, 2002]. Sin embargo, esta solución tiene la inconsistencia de que cuando el gasto del aire sea nulo, el valor de  $(K_L \cdot a)$  resultaría ser de  $-5.9161 \text{ h}^{-1}$  lo que es un absurdo; siendo el valor de  $(K_L \cdot a)$  de cero hasta que el gasto del aire fuese mayor a  $0.2 \text{ m}^3/\text{h}$ .

En la Fig. 3.2 se ilustra la variación de  $(K_L \cdot a)$  con respecto al gasto del aire ( $Q_{air}$ ) para cada una de las ecuaciones discutidas, observándose que sus soluciones se aproximan a una línea recta en el intervalo de estudio del aire.



**Fig. 3.2.** Modelos de transferencia de oxígeno ( $K_L \cdot a$ ) como una función de la velocidad de gasto del aire ( $Q_{air}$ ).

En conclusión, la ecuación que se incorpora al modelo es:

$$(K_L \cdot a) = 5 \cdot Q_{air} \quad (3-2)$$

la cual se comprueba simulando la condición Normal de operación.

En la Tabla 3.2 se muestran los resultados del estado estacionario obtenido en la corriente de descarga de la planta de la condición Normal de operación para cuando se utiliza el Modelo Lineal (Ec. 3-2) donde, al comparar con los resultados del simulador académico *JASS* y con lo reportado por el *COST*, se observa que las concentraciones del nitrógeno ( $N_{tot_e}$ ,  $Snh_e$ ,  $TKN_e$  y  $NO_e$ ) presentan mayores diferencias que la de sólidos suspendidos totales ( $TSS_e$ ) y la demanda química y bioquímica de oxígeno ( $COD_e$  y  $BOD_e$ , respectivamente). En la Tabla 3.4 se reportan los porcentajes de estas diferencias que llegan a ser de hasta el 32 por ciento menor al valor esperado para el nitrógeno amoniacal soluble ( $Snh_e$ ) y 15 por ciento mayor para el nitrógeno como nitrato-nitrito ( $NO_e$ ).

Por consiguiente, los valores obtenidos utilizando la (Ec. 3-2) no coinciden con lo reportado por *JASS* y *COST* mostrado en la Tabla 3.4, ya que se obtiene una diferencia del 30 por ciento que se estima es una desviación muy alta para una simulación. Por ello, se realizó un ajuste al Modelo Lineal mediante prueba y error hasta estimar una nueva ecuación que alcanzara un nivel de confianza mayor o igual al 95 por ciento, con respecto a lo reportado.

La nueva ecuación o modelo lineal ajustado es:

$$(K_L \cdot a) = 4.5582 \cdot Q_{air} \quad (3-2a)$$

en la que se buscó obtener valores de  $(K_L \cdot a)$  de  $9.09 \text{ h}^{-1}$  para las Zonas Aeróbicas 1 y 2, y de  $3.2 \text{ h}^{-1}$  para la Zona Aeróbica 3. El valor de  $k_1$  de 4.5582 se estimó a partir del promedio aritmético de los dos valores generados (4.5450 y 4.5714) con cada uno de los dos datos ajustados por prueba y error. El nivel de confianza es del 98.77, al observarse en la Tabla 3.3 una diferencia máxima de 1.23 por ciento.

**Tabla 3.2.**

Comparación de las soluciones para el estado estacionario de la condición Normal de operación obtenidas con el programa en MATLAB<sup>®</sup>, el simulador JASS y el "Simulation Benchmark" reportado por el COST para el efluente.

EFLUENTE	MATLAB <sup>®</sup>		JASS	COST	
	Lineal	Lineal Ajustado			
CONCENTRACIONES	$X_{BH}$ , mg COD /L	9.7876	9.7848	9.7800	9.7820
	$X_{BA}$ , mg COD /L	0.5739	0.5729	0.5700	0.5730
	$X_S$ , mg COD /L	0.1845	0.1883	0.1900	0.1880
	$X_{ND}$ , mg N/L	0.0132	0.0135	0.0100	0.0130
	$X_{IP}$ , mg COD /L	6.1156	6.1153	6.1200	6.1200
	$S_0$ , mg COD /L	0.8011	0.4905	0.0000	0.4910
	$S_{NH}$ , mg N/L	1.1874	1.7116	1.7200	1.7330
	$S_{ND}$ , mg N/L	0.6888	0.6879	0.6900	0.6880
	$S_{NO}$ , mg N/L	11.8688	10.4639	10.5000	10.4150
	$S_S$ , mg N/L	0.8719	0.8888	0.8900	0.8890
	$S_{ALK}$ , m mol/L	4.1185	4.2902	4.1200	4.1260
PARÁMETROS DE LA CALIDAD DEL AGUA	$N_{tot_e}$ , mg N/L	14.9540	14.0725	14.1152	14.0446
	$Snh_e$ , mg N/L	1.1874	1.7116	1.7200	1.7330
	$TSS_e$ , mg SS/L	12.4962	12.4961	12.4950	12.4973
	$COD_e$ , mg COD/L	17.5335	17.5502	17.5500	17.5520
	$BOD_e$ , mg COD/L	2.6472	2.6516	2.6505	2.6509
	$TKN_e$ , mg N/L	3.0852	3.6086	3.6152	3.6296
	$NO_e$ , mg N/L	11.8688	10.4639	10.5000	10.4150

**Tabla 3.3.**

Comparación de los porcentajes de diferencia al aplicar los Modelos Lineal y Lineal Ajustado al "Simulation Benchmark", con respecto a los estimados por el simulador JASS y lo reportado por el COST.

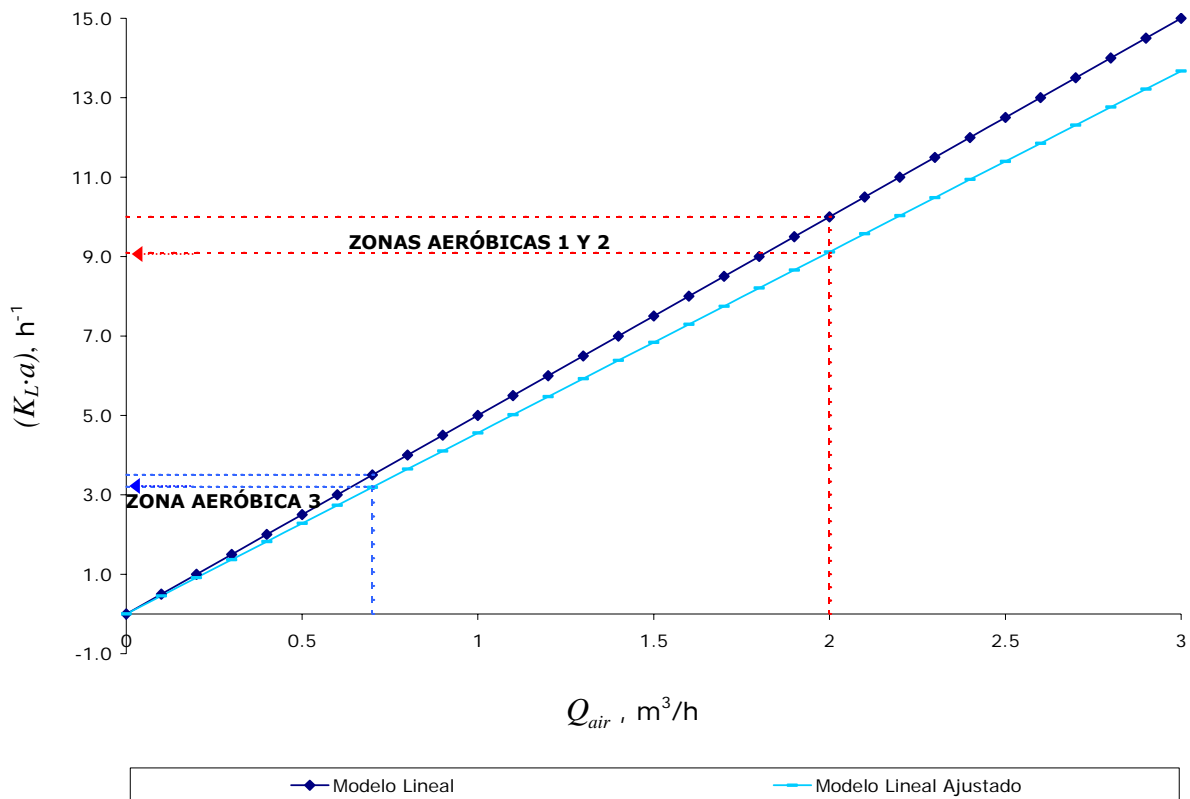
VARIABLES	MODELO LINEAL		MODELO LINEAL AJUSTADO	
	JASS	COST	JASS	COST
$N_{tot_e}$ , mg N/L	5.94%	6.48%	-0.30%	0.20%
$Snh_e$ , mg N/L	-30.97%	-31.48%	-0.49%	-1.23%
$TSS_e$ , mg SS/L	0.01%	-0.01%	0.01%	-0.01%
$COD_e$ , mg COD/L	-0.09%	-0.11%	0.00%	-0.01%
$BOD_e$ , mg COD/L	-0.12%	-0.14%	0.04%	0.03%
$TKN_e$ , mg N/L	-14.66%	-15.00%	-0.18%	-0.58%

---

$NO_e$ , mg N/L	13.04%	13.96%	-0.34%	0.47%
-----------------	--------	--------	--------	-------

---

En la Fig. 3.3 se visualiza la diferencia entre el Modelo Lineal y el Modelo Lineal Ajustado que es del 0.3 por ciento.



**Fig. 3.3.** Diferencia entre el Modelo Lineal y el Modelo Lineal Ajustado para el modelo de transferencia de oxígeno ( $K_L \cdot a$ ) como una función de la velocidad de gasto del aire ( $Q_{air}$ ).

Con base en los antes expuesto, se concluyó incluir la (Ec. 3-2a) para la simulación dinámica. A continuación se procede a la descripción de la simulación dinámica de la planta y su validación.

**Simulación Dinámica de la Planta y su validación.** Se tradujeron los modelos *ASM1* y de Takács, la (Ec. 3-2a) para la transferencia de masa del oxígeno, las suposiciones y las modificaciones al lenguaje de MATLAB®, para luego ejecutarlos y más tarde validarlos con el simulador *JASS*. Esto con el objeto de estudiar las concentraciones con respecto al tiempo (principalmente las de descarga) bajo diferentes condiciones de operación.

En la Tabla 3.4 se muestran los valores de la condición Normal de operación de la planta a las que se evaluaron y validaron los modelos; siendo el caso base para la simulación. Una vez establecidas las condiciones a evaluar, se ejecutó el programa.

En la Tabla 3.5 se muestran los resultados obtenidos con el programa de simulación dinámica en MATLAB<sup>®</sup> y se comparan con los obtenidos con el *JASS* y reportados por el *COST* (bajo las mismas condiciones) para los reactores anóxicos; en la Tabla 3.6 para los reactores aeróbicos y en la Tabla 3.7 para el sedimentador secundario; todos a un tiempo infinito para simular el estado estacionario de la planta.

Al analizar los valores presentados en las Tablas 3.5, 3.6 y 3.7 se encontró una diferencia entre ellos de 0.3 por ciento, que se encuentra dentro del nivel de confianza deseado (95 por ciento).

Por lo tanto, el algoritmo codificado en lenguaje MATLAB<sup>®</sup> realiza cálculos veraces y reales al ser comparativo con un simulador académico (*JASS*) y con los cálculos reportados por el *COST*. En consecuencia, este programa es válido para cualquier condición climática y tiempo establecido para el proceso.

**Tabla 3.4.**

Datos de la condición Normal de operación para la validación del programa en MATLAB<sup>®</sup> para la planta de tratamiento biológico de aguas residuales por desnitrificación.

PRINCIPALES VARIABLES			VALORES	
CONCENTRACIONES PROMEDIO DE ALIMENTACIÓN	PARTICULA- DOS	$X_{BH}$ , mg COD/L	28.1700	
		$X_{BA}$ , mg COD/L	0.0000	
		$X_S$ , mg COD/L	202.3200	
		$X_{ND}$ , mg N/L	10.5900	
		$X_{IP}$ , mg COD/L	51.2000	
	SOLUBLES	$S_0$ , mg COD/L	0.0000	
		$S_{NH}$ , mg N/L	31.5600	
		$S_{ND}$ , mg N/L	6.9500	
		$S_{NO}$ , mg N/L	0.0000	
		$S_S$ , mg N/L	69.5000	
		$S_{ALK}$ , m mol/L	7.0000	
		$S_I$ , mg COD/L	30.0000	
	GASTOS VOLUMÉTRICOS	AGUA RESIUI- DAL	$Q_{in}$ , m <sup>3</sup> /h	768.5830
			$Q_{int}$ , m <sup>3</sup> /h	2305.7500
$Q_{sl}$ , m <sup>3</sup> /h			768.5830	
$Q_w$ , m <sup>3</sup> /h			16.0417	
$Q_{ext}$ , L/h			0.0000	
AIRE		$Q_{air\_1}$ , m <sup>3</sup> /h	0.0000	
		$Q_{air\_2}$ , m <sup>3</sup> /h	0.0000	
		$Q_{air\_3}$ , m <sup>3</sup> /h	2.0000	
		$Q_{air\_4}$ , m <sup>3</sup> /h	2.0000	
		$Q_{air\_5}$ , m <sup>3</sup> /h	0.7000	
DIMENSIONES DE LOS EQUIPOS	BIOREACTOR	$V_{axr\_1}$ , m <sup>3</sup>	1000.0000	
		$V_{axr\_2}$ , m <sup>3</sup>	1000.0000	
		$V_{ar\_1}$ , m <sup>3</sup>	1333.0000	
		$V_{ar\_2}$ , m <sup>3</sup>	1333.0000	
		$V_{ar\_3}$ , m <sup>3</sup>	1333.0000	
	SEDIMENTADOR	$V_{stlr}$ , m <sup>3</sup>	6000.0000	
		$A$ , m <sup>2</sup>	1500.0000	
		$h$ , m	4.0000	
		$h_f$ , m	2.2000	
		$n$	10.0000	
	$m$	5.0000		

**Tabla 3.5.** Comparación de las soluciones para el estado estacionario de la condición Normal de operación obtenidas con el programa en MATLAB®, el simulador JASS y el "Simulation Benchmark" de COST para los reactores anóxicos de la planta de tratamiento biológico de aguas residuales por desnitrificación.

VARIABLE	REACTOR ANÓXICO NO. 1			REACTOR ANÓXICO NO. 2		
	MATLAB®	JASS	COST	MATLAB®	JASS	COST
$X_{BH}$ , mg COD/L	2553.1872	2550.0000	2551.7660	2554.81152	2550.0000	2553.3850
$X_{BA}$ , mg COD/L	148.5251	148.0000	148.3890	148.44475	148.0000	148.3090
$X_S$ , mg COD/L	82.1335	82.1000	82.1350	76.37612	76.3000	76.3860
$X_{ND}$ , mg N/L	5.2839	5.2800	5.2850	5.02777	5.0200	5.0290
$X_{IP}$ , mg COD/L	1596.9227	1600.0000	1597.9770	1597.59403	1600.0000	1598.6410
$S_0$ , mg COD/L	0.0032	0.0000	0.0040	0.00004	0.0000	0.0000
$S_{NH}$ , mg N/L	7.9120	7.9000	7.9180	8.33790	8.3300	8.3440
$S_{ND}$ , mg N/L	1.2154	1.2200	1.2170	0.88157	0.8800	0.8820
$S_{NO}$ , mg N/L	5.4018	5.4300	5.3700	3.69187	3.7200	3.6620
$S_S$ , mg N/L	2.8085	2.8000	2.8080	1.45789	1.46000	1.4590
$S_{ALK}$ , m mol/L	4.9259	4.9200	4.9280	5.07848	5.0800	5.0800
$S_I$ , mg COD/L	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000



**Tabla 3.6.** Comparación de las soluciones para el estado estacionario de la condición Normal de operación obtenidas con el programa en MATLAB®, el simulador JASS y el “Simulation Benchmark” de COST para los reactores aeróbicos de la planta de tratamiento biológico de aguas residuales por desnitrificación.

VARIABLE	REACTOR AEROBICO NO. 1			REACTOR AEROBICO NO. 2			REACTOR AEROBICO NO. 3		
	MATLAB®	JASS	COST	MATLAB®	JASS	COST	MATLAB®	JASS	COST
$X_{BH}$ , mg COD /L	2558.5549	2560.0000	2557.1310	2560.6051	2560.0000	2559.1860	2560.7586	2560.0000	2559.3440
$X_{BA}$ , mg COD /L	149.0781	149.0000	148.9410	149.6658	150.0000	149.5270	149.9343	150.0000	149.7970
$X_g$ , mg COD /L	64.8456	64.8000	64.8550	55.6826	55.6000	55.6940	49.3018	49.3000	49.3060
$X_{ND}$ , mg N/L	4.3913	4.3900	4.3920	3.8779	3.8800	3.8790	3.5267	3.5200	3.5270
$X_p$ , mg COD /L	1598.4901	1600.0000	1599.5430	1599.3870	1600.0000	1600.4400	1600.2839	1600.0000	1601.3360
$S_0$ , mg COD /L	1.7322	1.7200	1.7180	2.4948	2.4300	2.4290	0.4892	0.4900	0.4910
$S_{BH}$ , mg N/L	5.5352	5.5300	5.5480	2.9465	2.9600	2.9670	1.7188	1.7200	1.7330
$S_{ND}$ , mg N/L	0.8284	0.8300	0.8290	0.7665	0.7700	0.7670	0.6878	0.6900	0.6880
$S_{ND}$ , mg N/L	6.5781	6.6000	6.5410	9.3473	9.3500	9.2990	10.4561	10.5000	10.4150
$S_g$ , mg N/L	1.1488	1.1500	1.1500	0.9946	0.9900	0.9950	0.8889	0.8900	0.8890
$S_{ALK}$ , m mol/L	4.6721	4.6700	4.675	4.2894	4.2900	4.2940	4.1225	4.1200	4.1260
$S_I$ , mg COD /L	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000

**Tabla 3.7.**

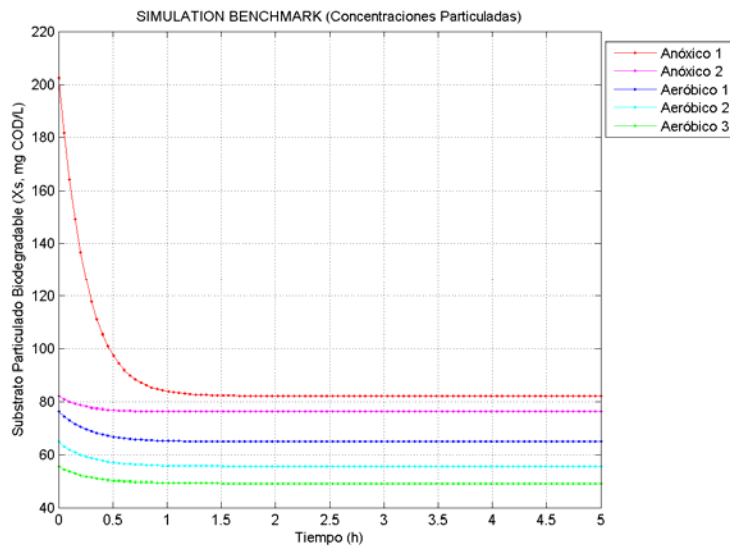
Comparación de las soluciones para el estado estacionario de la condición Normal de operación obtenidas con el programa en MATLAB®, el simulador JASS y el "Simulation Benchmark" de COST para el sedimentador secundario de la planta de tratamiento biológico de aguas residuales por desnitrificación.

<b>SEDIMENTADOR SECUNDARIO</b>					
<b>VARIABLES</b>		<b>MATLAB®</b>	<b>JASS</b>	<b>COST</b>	
CAPAS	$X_{SS\_1}$ , mg COD/L	12.4964	12.5000	12.5000	
	$X_{SS\_2}$ , mg COD/L	18.1136	-----	18.1100	
	$X_{SS\_3}$ , mg COD/L	29.5412	-----	29.5400	
	$X_{SS\_4}$ , mg N/L	68.9812	-----	68.9800	
	$X_{SS\_5}$ , mg COD/L	356.1034	-----	356.0700	
	$X_{SS\_6}$ , mg COD/L	356.1037	-----	356.0700	
	$X_{SS\_1}$ , mg N/L	356.1037	-----	356.0700	
	$X_{SS\_1}$ , mg N/L	356.1037	-----	356.0700	
	$X_{SS\_1}$ , mg N/L	356.1037	-----	356.0700	
	$X_{SS\_1}$ , mg N/L	6394.7191	-----	6393.9800	
CONCENTRACIONES	RECIRCULACIÓN DE LODOS	$X_{BH}$ , mg COD /L	5007.4268	5010.0000	-----
		$X_{BA}$ , mg COD /L	293.1885	293.0000	-----
		$X_S$ , mg COD /L	96.4071	96.3000	-----
		$X_{ND}$ , mg N/L	6.8964	6.8900	-----
		$X_{IP}$ , mg COD /L	3129.2697	3130.0000	-----
		$S_0$ , mg COD /L	0.4892	0.4900	-----
		$S_{NH}$ , mg N/L	1.7188	1.7200	-----
		$S_{ND}$ , mg N/L	0.6878	0.6900	-----
		$S_{NO}$ , mg N/L	10.4561	10.5000	-----
		$S_S$ , mg N/L	0.8889	0.8900	-----
		$S_{ALK}$ , m mol/L	4.1225	4.1200	-----

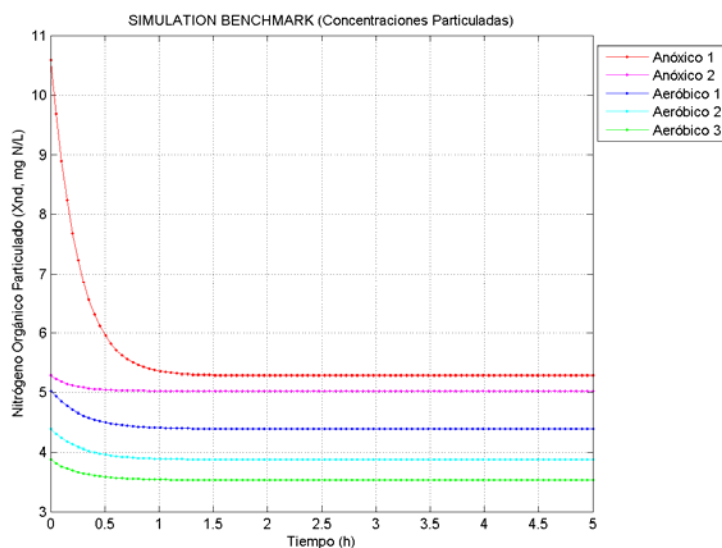
Continuación **Tabla 3.7**

<b>SEDIMENTADOR SECUNDARIO</b>					
<b>VARIABLES</b>			<b>MATLAB<sup>®</sup></b>	<b>JASS</b>	<b>COST</b>
CONCENTRACIONES	EFLUENTE	$X_{BH}$ , mg COD /L	9.7854	9.7800	9.7820
		$X_{BA}$ , mg COD /L	0.5729	0.5700	0.5730
		$X_S$ , mg COD /L	0.1884	0.1900	0.1880
		$X_{ND}$ , mg N/L	0.0135	0.0100	0.0130
		$X_{IP}$ , mg COD /L	6.1152	6.1200	6.1200
		$S_0$ , mg COD /L	0.0000	0.0000	0.4910
		$S_{NH}$ , mg N/L	1.7188	1.7200	1.7330
		$S_{ND}$ , mg N/L	0.6879	0.6900	0.6880
		$S_{NO}$ , mg N/L	10.4562	10.5000	10.4150
		$S_S$ , mg N/L	0.8889	0.8900	0.8890
		$S_{ALK}$ , m mol/L	4.1225	4.1200	4.1260
PARÁMETROS DE LA CALIDAD DEL AGUA	EFLUENTE	$N_{tot_e}$ , mg N/L	14.0719	14.1152	14.0446
		$Sn_{h_e}$ , mg N/L	1.71881	1.7200	1.7330
		$TSS_e$ , mg SS/L	12.4964	12.4950	12.4973
		$COD_e$ , mg COD/L	17.5509	17.5500	17.5520
		$BOD_e$ , mg COD/L	2.6518	2.6505	2.6509
		$TKN_e$ , mg N/L	3.6158	3.6152	3.6296
		$NO_e$ , mg N/L	10.4562	10.5000	10.4150

En la Fig. 3.4 se muestran los comportamientos con respecto al tiempo de las concentraciones particuladas para la condición Normal de operación.



$$X_s$$

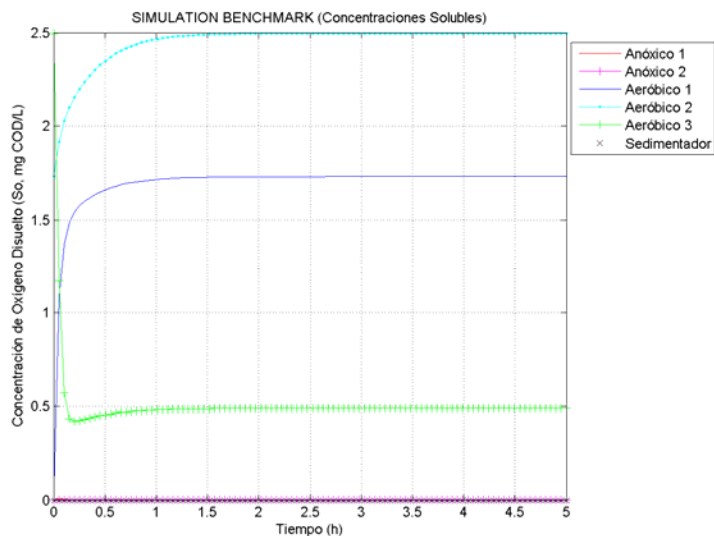


$$X_{ND}$$

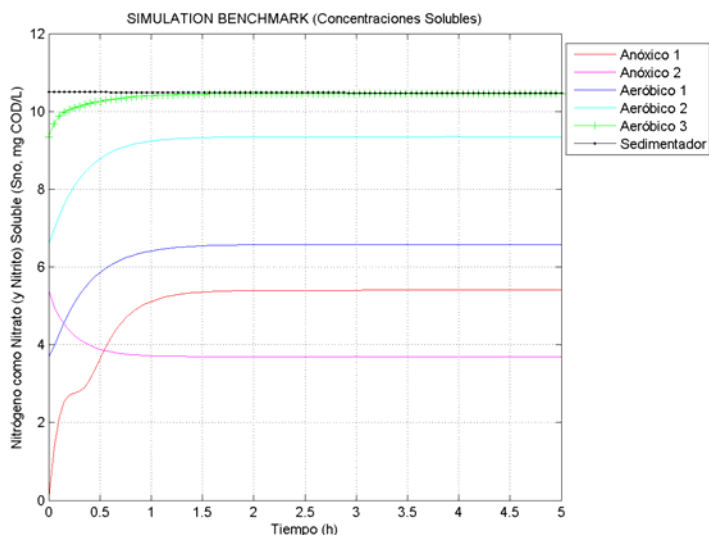
**Fig. 3.4.** Simulación dinámica de las concentraciones particuladas ( $X_s$  y  $X_{ND}$ ) presentes en el bioreactor del "Simulation Benchmark" para la condición Normal de operación.

En la figura anterior se puede observar que el sustrato particulado lentamente biodegradable ( $X_s$ ) y el nitrógeno orgánico biodegradable particulado ( $X_{ND}$ ) decrecen ya que son fuentes de energía para el proceso de nitrificación-desnitrificación.

En la Fig. 3.5, la concentración del oxígeno disuelto ( $S_o$ ) se observa nula tanto en los reactores anóxicos como en el sedimentador secundario ya que el oxígeno no está presente. Sin embargo, en los dos primeros reactores aeróbicos hay un incremento de  $S_o$  debido a que se está suministrando oxígeno a través de un gasto de aire y disminuye en el tercero, ya que el nivel del aire debe ser menor por la recirculación interna y porque la contaminación es menor en este equipo.



$$S_o$$

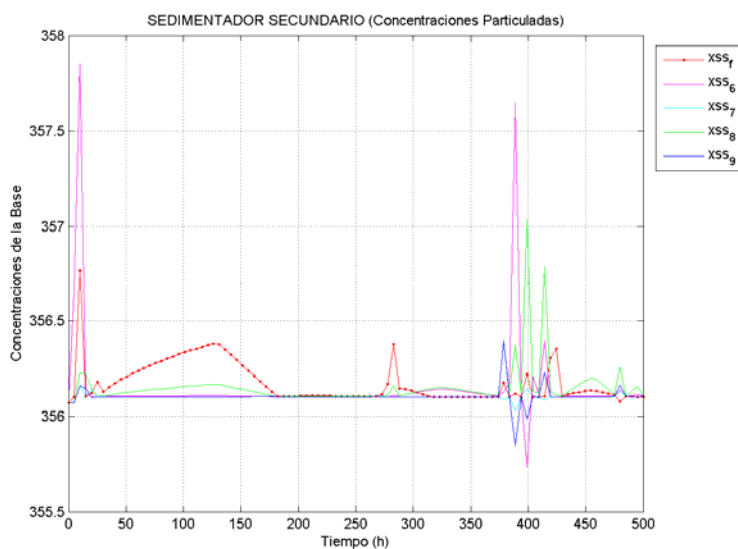


$$S_{NO}$$

**Fig. 3.5.** Simulación dinámica de las concentraciones solubles presentes en la planta del "Simulation Benchmark" para la condición Normal de operación.

El nitrógeno como nitrato y nitrito soluble ( $S_{NO}$ ), que se observa en la Fig. 3.5, aumenta en los reactores aeróbicos por el proceso de nitrificación que se lleva a cabo en ellos. A pesar de que se consumen los  $N$ -nitratos en los reactores anóxicos, en el primero se observa una alta concentración debido a la recirculación interna presente en el sistema; por el contrario, en el segundo ya se muestra un consumo de esta concentración por la desnitrificación.

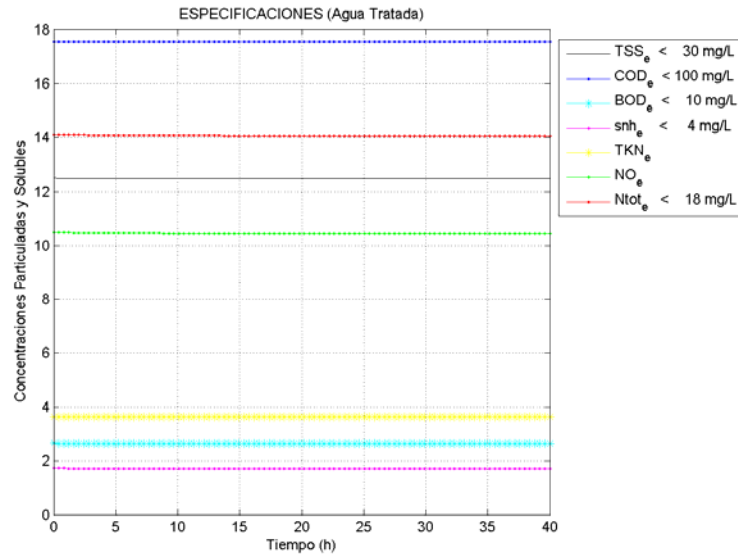
La concentración de los sólidos suspendidos en la capa de la base del sedimentador secundario (capa 10) es muy superior a las demás ( $> 6000$  mg SS/L) por la acumulación de lodo. Esto ocasiona que se genere la Fig. 3.6 que incluye solamente la capa de alimentación y las capas 6 a 9, en la que se observa una oscilación de  $\pm 0.2$  mg SS/L hasta 500 horas de operación de la planta.



**Fig. 3.6.** Simulación dinámica a diferentes tiempos de las concentraciones de sólidos suspendidos en la capa de alimentación y capas posteriores del sedimentador secundario de la planta del "Simulation Benchmark" para la condición Normal de operación a 500 horas.

En la Fig. 3.6 se puede observar que la mayor variación que se presenta en el sedimentador secundario es en la capa de alimentación (capa 5); sin embargo, en las capas subsecuentes (capas 6 a 9) esta variación disminuye hasta llegar a la capa del fondo (capa 10) que es totalmente estable y muy concentrada.

La calidad del agua tratada en el efluente se mide con parámetros, tales como:  $TSS_e$ ,  $COD_e$ ,  $BOD_e$ ,  $TKN_e$ ,  $NO_e$ ,  $Ntot_e$  y  $Snh_e$ , los cuales cumplen con las normas especificadas en la Tabla 2.6. En la Fig. 3.7 se muestra el cumplimiento de estas normas así como la estabilización de estos valores en un tiempo de operación de 40 horas.



**Fig. 3.7.** Simulación dinámica de las concentraciones de la calidad del agua tratada de la planta del "Simulation Benchmark" para la condición Normal de operación.

Cada una de las concentraciones de la planta del "Benchmark" se estudió de acuerdo a un tiempo que se estimó fuera el doble del tiempo de residencia de la planta (Tabla 2.4) como una primera aproximación. No obstante, en un tiempo menor a 5 horas, ya existe un régimen permanente en concentraciones como son las particuladas y solubles en el bioreactor; sin embargo, en el sedimentador secundario no, ya que su función evita encontrar un estado estacionario debido a que siempre está separando los sólidos del agua clarificada ante una entrada de agua residual constante. Lo anterior se ilustra en las Fig. 3.4 a Fig. 3.7.





## 3.2. ANÁLISIS Y OPTIMIZACIÓN DEL BIOPROCESO POR MEDIO DEL DISEÑO DE EXPERIMENTOS.

Debido a la complejidad del comportamiento de la planta del "*Simulation Benchmark*" se decidió, mediante una investigación paralela a este proyecto, realizar un estudio empleando la metodología del *DoE*.

Es importante mencionar que este estudio se fundamentó en la simulación dinámica de la planta por medio del simulador académico *JASS*, el cual utiliza los modelos *ASM1* [Henze, M., *et al.*, 1987] y Takács [Takács, I., *et al.*, 1991] para el bioreactor y el sedimentador, respectivamente. Así también, los datos que se emplearon en la simulación dinámica tienen un error experimental inherente que estuvo implícito en el *DoE* ya que se tomaron de la literatura, más no directamente de la planta, debido a que no se cuenta físicamente con ella. Esto hace que la simulación sea una herramienta muy útil para realizar numerosas pruebas bajo diferentes condiciones para el análisis del *DoE*, que si se ejecutaran experimentalmente sería muy costoso, además de difícil de llevar a cabo ya que las características de entrada a la planta no pueden controlarse a voluntad.

Por lo tanto, este método de aplicar y obtener respuestas para un *DoE* mediante simuladores es precisamente para aquellos sistemas grandes y complejos cuyas condiciones de entrada no pueden ajustarse fácilmente de forma controlada.

A continuación se comparten parte de los resultados obtenidos que contribuyeron al presente trabajo.

**Metodología.** Cumpliendo con los lineamientos que se establecen para el uso del *DoE*, como se plantea en el *Capítulo 1*, se definió lo siguiente:

### 1. Reconocimiento y Planteamiento del Problema.

En la planta del "*Simulation Benchmark*" existen diferentes elementos tanto internos (gasto externo de la fuente de carbono, gasto de aire y gastos de recirculación interno y de lodos) como externos (variaciones en el gasto de alimentación por las condiciones climáticas y en la contaminación presente en el agua residual) que afectan su funcionamiento.

El objetivo de la aplicación del *DoE* fue identificar las principales variables (controlables y no controlables) que tuvieran efectos significativos sobre el comportamiento de la planta en un determinado intervalo de condiciones de operación; o bien, en condiciones particulares. Asimismo, obtener una definición de operación óptima que cumpliera con las especificaciones de descarga y norma, principalmente del nitrógeno total.

## 2. Identificación y selección de factores y niveles.

Ocho *factores* fueron identificados: cuatro no controlables y cuatro controlables.

*Factores no controlables o de ruido.* Son las perturbaciones o variaciones que pueden presentarse en la planta, a saber: gasto de alimentación del agua residual ( $Q_{in}$ ) que depende de la condición climática; sustrato sólido lentamente biodegradable ( $X_s$ ) al ser un factor que determina el grado de contaminación del agua; nitrógeno orgánico biodegradable soluble ( $S_{ND}$ ) y nitrógeno amoniacal soluble ( $S_{NH}$ ) que son las concentraciones típicas que pueden fluctuar dependiendo de la contaminación presente en el ecosistema y que son dos de las formas del nitrógeno más nocivas para los seres vivos, y que se busca reducir.

*Factores controlables o de diseño.* Son factores que pueden ser manipulados en la operación, como: gasto externo de la fuente de carbono ( $Q_{ext}$ ), sólo si la fuente de carbono, como nutriente indispensable para el crecimiento y funcionamiento de los microorganismos, es escaso; gasto de recirculación interna ( $Q_{int}$ ) que lleva nitratos de la zona aeróbica a la anóxica para la desnitrificación; gasto de recirculación de lodos ( $Q_{sl}$ ) como una corriente de sólidos concentrados proveniente del sedimentador que mantiene un nivel de microorganismos adecuado para el tratamiento, y gasto del aire del tercer y último reactor aeróbico ( $Q_{air\_3}$ ) que proporciona oxígeno para el metabolismo de los microorganismos [Koehne, M., *et al.*, 1995] y para la nitrificación.

*Niveles.* Se escogieron dos: bajo y alto. Éstos se establecieron a partir de conocer datos de la planta que estuvieran publicados [Copp, J.B., 2000] y a las proporciones

que guardan las relaciones que estuvieran sustentadas en la literatura [Grady, C.P.L., Jr., *et al.*, 1999].

Los niveles de los factores antes mencionados se muestran en la Tabla 3.8. Los niveles bajos de  $Q_{int}$ ,  $Q_{sl}$  y  $Q_{air\_3}$  son iguales a  $2 \cdot Q_{in}$ ,  $0.5 \cdot Q_{in}$  y  $0.3 \cdot Q_{air\_3,MAX}$ , respectivamente, y para los altos son  $3 \cdot Q_{in}$ ,  $Q_{in}$  y  $Q_{air\_3,MAX}$ .

Los niveles bajos correspondieron a la condición de Sequía y los altos al de Lluvia.

**Tabla 3.8.**  
Niveles de los factores para el *DoE*.

FACTORES		NIVELES*	
		BAJO (1)	ALTO (2)
NO CONTROLADAS	$Q_{in}$ , m <sup>3</sup> /h	752.5554	992.0075
	$X_S$ , mg COD/L	175.0500	202.3200
	$S_{NH}$ , mg N/L	27.3000	31.5600
	$S_{ND}$ , mg N/L	6.0100	6.9500
CONTROLADAS	$Q_{ext}$ , L/h	0.0000	0.0100
	$Q_{int}$ , m <sup>3</sup> /h	1505.1108	2976.0225
	$Q_{sl}$ , m <sup>3</sup> /h	376.2777	992.0075
	$Q_{air\_3}$ , m <sup>3</sup> /h	0.2100	0.7000

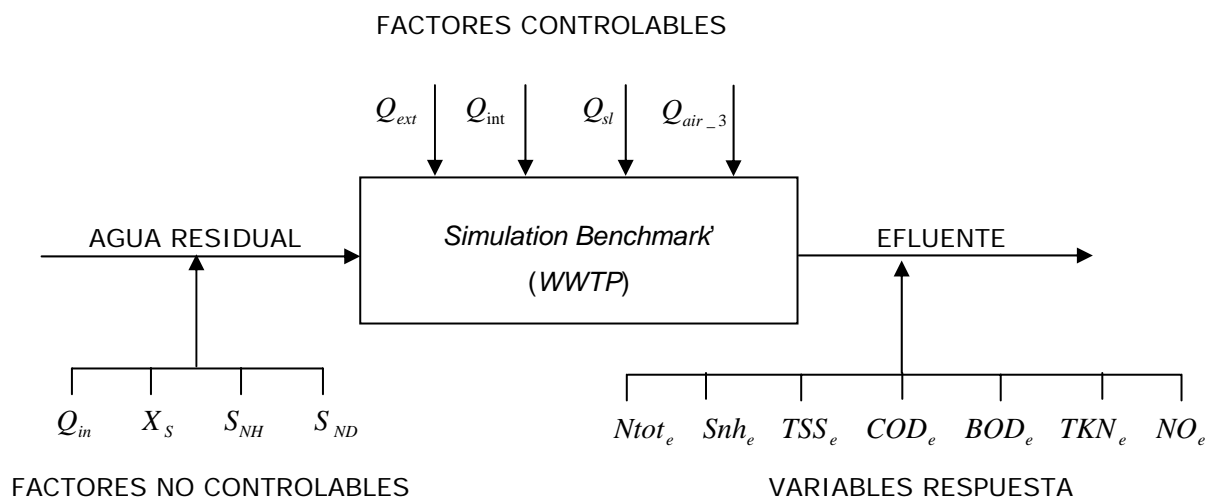
\* Los niveles bajos corresponden a las condiciones de Sequía y los altos al de Lluvia.

### 3. Identificación y selección de variables respuesta.

El objetivo de la planta del “*Simulation Benchmark*” es obtener cierta calidad del agua tratada para cumplir con las normas de descarga, por lo que se eligieron variables que cuantificaran los contaminantes más críticos presentes en el efluente del sistema. Por orden de importancia fueron: nitrógeno total ( $N_{tot_e} < 18 \text{ g N/m}^3$ ), nitrógeno amoniacal soluble ( $S_{nh_e} < 4 \text{ g N/m}^3$ ), sólidos suspendidos totales ( $TSS_e < 30 \text{ g TSS/m}^3$ ), demanda química de oxígeno ( $COD_e < 100 \text{ g COD/m}^3$ ), demanda bioquí-

mica de oxígeno ( $BOD_e < 10 \text{ g BOD}/m^3$ ), nitrógeno Kjeldahl total ( $TKN_e, \text{ g N}/m^3$ ) y nitrógeno como nitrato-nitrito soluble ( $NO_e, \text{ g N}/m^3$ ). La suma de las dos últimas concentraciones debe ser menor a  $N_{tot_e}$ .

El modelo general del *DoE* se ilustra en la Fig. 3.12 para la identificación de los factores y variables respuesta seleccionados para el caso en estudio.



**Fig. 3.8.** Modelo general del *DoE* para la planta del "Simulation Benchmark".

#### 4. Selección de los Modelos para el Diseño de Experimentos.

Se aplicaron dos modelos: el Modelo Factorial Parcial Tipo Taguchi y el Modelo Factorial Parcial Fraccional.

El *Tipo Taguchi* tuvo como propósito la búsqueda de un diseño robusto que redujera los efectos de los factores externos en la variación del agua residual para minimizar, principalmente, las descargas del nitrógeno.

El *Fraccional* fue repetido en bloques a diferentes tiempos para: (i) identificar el tiempo de proceso mínimo estable en un intervalo corto de operación que cumpliera con las especificaciones de descarga y (ii) obtener los coeficientes de la ecuación de regresión múltiple para predecir las concentraciones del efluente en cualquier tiempo.

## 5. Modelos para el Análisis de Resultados.

En lo general se identificaron dos modelos: Análisis de Varianza (*ANOVA*) y Análisis de Regresión, que son equivalentes, y los supuestos de normalidad se verificaron con el Análisis de Residuales.

## 6. Software disponible.

Se empleó MINTAB<sup>®</sup> Release 14 para el análisis de los resultados y optimización del *DoE*, y el simulador JASS para la simulación de los diseños experimentales.

**Resultados.** A continuación se describen los resultados de cada uno de los modelos aplicados.

**Modelo Factorial Parcial Tipo Taguchi.** La metodología de Taguchi para un diseño robusto hace uso de un arreglo ortogonal que involucra factores controlables y no controlables. Un arreglo cruzado o arreglo ortogonal interno-externo consiste en el producto de dos arreglos ortogonales (*Orthogonal Array, OA*); es decir, cruza los factores controlables con los de ruido.

Se aplicó un arreglo  $L_8$  en cada una de las partes del arreglo cruzado. La razón de la selección del  $L_8$  es debido a que es el arreglo de menor orden que facilita la mayor cantidad de información con un mínimo de tratamientos [Barrado, E., *et al.*, 1996]. Por lo tanto, el arreglo ortogonal interno-externo fue un  $L_8 \times L_8$  con 64 tratamientos. El arreglo se muestra en la Tabla 3.9.

En el arreglo externo de la matriz  $L_8 \times L_8$ , las interacciones fueron eliminadas porque no tenían sentido físico su consideración; pero en el arreglo interno, tres interacciones de dos factores fueron estudiadas:  $Q_{ext} \times Q_{int}$ ,  $Q_{int} \times Q_{sl}$  y  $Q_{int} \times Q_{air\_3}$  para establecer su influencia en el bioproceso.

El arreglo cruzado  $L_8 \times L_8$  se aplicó para cada una de las variables respuesta y se realizó el análisis de las medias y de la de relación señal a ruido (*Signal to Noise ratio, S/N*) de cada una de ellas.

**Tabla 3.9.**  
Arreglo cruzado  $L_8 \times L_8$  del Método Taguchi.

									<b>ARREGLO EXTERNO</b>								
									$Q_{in}$	1	1	1	1	2	2	2	2
									$X_S$	1	1	2	2	1	1	2	2
									$S_{NH}$	1	2	1	2	1	2	1	2
									$S_{ND}$	1	2	2	1	2	1	1	2
<b>ARREGLO INTERNO</b>																	
No.	$Q_{ext}$	$Q_{int}$	$Q_{ext} \times Q_{int}$	$Q_{sl}$	$Q_{air\_3}$	$Q_{int} \times Q_{sl}$	$Q_{int} \times Q_{air\_3}$	<b>R1</b>	<b>R2</b>	<b>R3</b>	<b>R4</b>	<b>R5</b>	<b>R6</b>	<b>R7</b>	<b>R8</b>		
1	1	1	1	1	1	1	1	1	9	17	25	33	41	49	57		
2	1	1	1	2	2	2	2	2	10	18	26	34	42	50	58		
3	1	2	2	1	1	2	2	3	11	19	27	35	43	51	59		
4	1	2	2	2	2	1	1	4	12	20	28	36	44	52	60		
5	2	1	2	1	2	1	2	5	13	21	29	37	45	53	61		
6	2	1	2	2	1	2	1	6	14	22	30	38	46	54	62		
7	2	2	1	1	2	2	1	7	15	23	31	39	47	55	63		
8	2	2	1	2	1	1	2	8	16	24	32	40	48	56	64		

1 = Nivel bajo; 2 = Nivel alto

La relación  $S/N$  es un indicador de calidad o desempeño, que puede evaluar el efecto de un factor en particular en el funcionamiento del proceso. Para minimizar las concentraciones del efluente, se buscó que la relación  $S/N$  fuera tan grande como fuera posible para disminuir el efecto del ruido o variación en el estudio, así como que cumpliera con el criterio “el menor es el mejor” para minimizar dichas concentraciones; por lo que la relación se expresó de la siguiente forma:

$$S/N = -10 \cdot \log \left( \frac{\sum_{i=1}^n (y_i^2)}{n} \right) \tag{3-3}$$

donde  $y$  son las respuestas del sistema por cada combinación de los niveles de los factores de control y  $n$  es el número de respuestas en cada combinación de los niveles de los factores de control.

Los resultados del arreglo cruzado se basaron en los efectos de  $N_{tot_e}$  por ser la principal variable respuesta que cumpliera con el límite especificado, lo cual resultó en que, la combinación óptima de factores en el arreglo interno fue:  $Q_{sl,2} Q_{air\_3,2} Q_{int,2} Q_{ext,2}$  (donde la notación  $Q_{ext,2}$  representa el nivel  $i$  del factor  $Q_{ext}$ ) con una relación  $S/N$  y una

media para  $Ntot_e$  de -22.9342 y 13.7732, respectivamente, y para el arreglo externo fue:  $Q_{in,1}$   $X_{S,2}$   $S_{ND,1}$   $S_{NH,1}$  con una relación  $S/N$  y una media para  $Ntot_e$  de -20.9560 y 10.6334, respectivamente. La única interacción que influyó en el bioproceso fue  $Q_{int} \times Q_{air\_3}$ .

Las relaciones  $S/N$  y las medias para cada una de las variables respuesta, tanto para el arreglo interno como externo, se encuentran en la Tabla 3.10. Éstas se calcularon para un tiempo de proceso de 39 horas que es aproximadamente el doble del tiempo de residencia de la planta (Tabla 2.4).

**Tabla 3.10.**

Relaciones  $S/N$  y medias predichas del arreglo interno-externo  $L_8 \times L_8$  para un tiempo de proceso de 39h para los parámetros de calidad del agua.

VARIABLE RESPUESTA	ARREGLO				LÍMITE
	Interno		Externo		
	Relación $S/N$	Media	Relación $S/N$	Media	
$Ntot_e$ , mg N/L	-22.9341	13.7732	-20.9560	10.6334	< 18
$Sh_e$ , mg N/L	-13.7176	3.5986	-7.4666	1.1948	< 4
$TSS_e$ , mg SS/L	-21.8170	12.2899	-21.5279	11.9065	< 30
$COD_e$ , mg COD/L	-24.8734	17.4644	-24.4918	16.7442	< 100
$BOD_e$ , mg COD/L	-8.6870	2.7039	-8.0103	2.5083	< 10
$TKN_e$ , mg N/L	-16.4565	5.6599	-12.4566	3.4602	-----
$NO_e$ , mg N/L	-13.9864	4.7391	-13.6637	4.2684	-----

Adicionalmente, un Taguchi  $L_{16}$  se empleó para encontrar la combinación óptima de niveles considerando todos los factores controlables y de ruido. Las interacciones que se consideraron en este diseño fueron:  $Q_{ext} \times Q_{int}$ ,  $Q_{int} \times Q_{sl}$ ,  $X_S \times S_{ND}$ ,  $Q_{int} \times S_{NH}$ ,  $Q_{ext} \times S_{NH}$ ,  $X_S \times S_{NH}$ ,  $Q_{int} \times S_{ND}$  y  $Q_{in} \times S_{NH}$ . Este arreglo se encuentra en la Tabla 3.11.

Se predijeron las relaciones  $S/N$  y las medias de las variables respuesta bajo diferentes combinaciones de niveles de los factores controlables y de ruido, resultando que con la combinación:  $Q_{in,1}$   $Q_{sl,2}$   $Q_{int,2}$   $Q_{air\_3,1}$   $X_{S,2}$   $S_{NH,1}$   $S_{ND,1}$   $Q_{ext,1}$ , se obtuvo el menor va-

lor de  $N_{tot_e}$  posible de 8.4613 mg N/L, con una relación  $S/N$  de -19.5124; por lo que resultó la combinación óptima de factores. La única interacción significativa en el Taguchi  $L_{16}$  fue  $Q_{ext} \times Q_{int}$ .

**Tabla 3.11.**  
Arreglo  $L_{16}$  del Método Taguchi.

No.	$Q_{ext}$	$Q_{int}$	$Q_{ext} \times Q_{int}$	$Q_d$	$Q_{in}$	$Q_{air_{-3}}$	$X_S$	$X_S \times S_{ND}$	$Q_{int} \times S_{NH}$	$Q_{ext} \times S_{NH}$	$S_{NH}$	$X_S \times S_{NH}$	$Q_{int} \times S_{ND}$	$Q_{int} \times S_{NH}$	$S_{ND}$
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2
3	1	1	1	2	2	2	2	1	1	1	1	2	2	2	2
4	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1
5	1	2	2	1	1	2	2	1	1	2	2	1	1	2	2
6	1	2	2	1	1	2	2	2	2	1	1	2	2	1	1
7	1	2	2	2	2	1	1	1	1	1	2	2	2	1	1
8	1	2	2	2	2	1	1	2	2	1	1	1	1	2	2
9	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
10	2	1	2	1	2	1	2	2	1	2	1	2	1	2	1
11	2	1	2	2	1	2	1	1	2	1	2	2	1	2	1
12	2	1	2	2	1	2	1	2	1	2	1	1	2	1	2
13	2	2	1	1	2	2	1	1	2	2	1	1	2	2	1
14	2	2	1	1	2	2	1	2	1	1	2	2	1	1	2
15	2	2	1	2	1	1	2	1	2	2	1	2	1	1	2
16	2	2	1	2	1	1	2	2	1	1	2	1	2	2	1

1 = Nivel Bajo; 2 = Nivel alto

Las demás relaciones  $S/N$  y medias de las otras variables respuesta para el Arreglo  $L_{16}$ , se encuentran en la Tabla 3.12. Éstas se calcularon para un tiempo de proceso de 39 horas y todas cumplieron con el límite establecido.

**Tabla 3.12.**  
Relaciones  $S/N$  y medias predichas del Arreglo  $L_{16}$  por MINITAB® para un tiempo de proceso de 39h para los parámetros de calidad del agua.

VARIABLE RESPUESTA	ARREGLO $L_{16}$		LÍMITE
	Relación $S/N$	Media	
$N_{tot_e}$ , mg N/L	-19.5124	8.4613	< 18
$S_{nh_e}$ , mg N/L	-7.21557	1.3281	< 4
$TSS_e$ , mg SS/L	-22.0388	12.7561	< 30
$COD_e$ , mg COD/L	-25.0422	18.0219	< 100
$BOD_e$ , mg COD/L	-8.61254	2.71694	< 10
$TKN_e$ , mg N/L	-12.2599	3.25439	-----
$NO_e$ , mg N/L	-14.0253	5.20688	-----



Al comparar las medias obtenidas por el Arreglo cruzado  $L_8 \times L_8$  (Tabla 3.10) vs. el Arreglo  $L_{16}$  (Tabla 3.12), se obtuvo el menor valor de  $N_{tot_e}$  con el segundo arreglo; por lo que los niveles de la combinación óptima de los factores quedaron como sigue:  $Q_{in,1}$   $X_{S,2}$   $S_{NH,1}$   $S_{ND,1}$  para los factores no controlables o de ruido, y para los controlables  $Q_{sl,2}$   $Q_{int,2}$   $Q_{air\_3,1}$   $Q_{ext,1}$  y cuyos valores corresponden a los que se presentan en la Tabla 3.13.

**Tabla 3.13.**

Valores de los niveles de la combinación óptima de factores obtenidos mediante el Método Taguchi para el intervalo de operación de Sequía a Lluvia.

	FACTORES	VALORES
CONTROLABLES	$Q_{in,1}$ , m <sup>3</sup> /h	752.5554
	$X_{S,2}$ , mg COD/L	202.3200
	$S_{NH,1}$ , mg N/L	27.3000
	$S_{ND,1}$ , mg N/L	6.0100
CONTROLABLES	$Q_{ext,1}$ , L/h	0.0000
	$Q_{int,2}$ , m <sup>3</sup> /h	2976.0225
	$Q_{sl,2}$ , m <sup>3</sup> /h	992.0075
	$Q_{air\_3,1}$ , m <sup>3</sup> /h	0.2100

Lo anterior se comprobó al utilizar *JASS* para simular la combinación óptima de factores ( $Q_{in,1}$   $Q_{sl,2}$   $Q_{int,2}$   $Q_{air\_3,1}$   $X_{S,2}$   $S_{NH,1}$   $S_{ND,1}$   $Q_{ext,1}$ ) a diferentes tiempos. Los resultados se muestran en la Tabla 3.14 donde se observa que los valores de las variables respuestas a 39 horas (en estilo Negrita), comparados con los valores predichos por MINITAB® (Tabla 3.12) a través de aplicar la combinación óptima de los niveles de los factores, es de  $\pm 3$  por ciento, excepto para  $TKN_e$  y  $NO_e$  que es del +22 y -10 por ciento, respectivamente.

En la Tabla 3.14 se comprobó que a 39h fue el tiempo mínimo estable para obtener el menor valor de  $N_{tot_e}$  y que cumple con la norma de descarga, al estar todas las con-

centraciones del efluente por debajo del límite especificado. Lo anterior se vio modificado con el tiempo. Algunas concentraciones incrementaron, mientras que otras disminuyeron ( $NO_e$ ) pero esto dependió de las proporciones de los factores controlables; por ello, se realizó un estudio del tiempo de proceso mediante un Factorial Parcial Fraccional con dos niveles.

**Tabla 3.14.**

Simulación de la combinación óptima de factores ( $Q_{in,1}$   $Q_{sl,2}$   $Q_{int,2}$   $Q_{air,3,1}$   $X_{S,2}$   $S_{NH,1}$   $S_{ND,1}$   $Q_{ext,1}$ ) mediante el simulador JASS para diferentes tiempos de proceso para la condición Normal de operación.

TIEMPO	$N_{tot}_e$	$S_{nh}_e$	$TSS_e$	$COD_e$	$BOD_e$	$TKN_e$	$NO_e$
00sem 00d 05h	14.3652	0.8800	12.4950	17.7900	2.7105	4.5852	9.7800
00sem 00d 15h	11.4186	2.2200	12.5475	17.6800	2.6751	4.1186	7.3000
<b>00sem 01d 15h</b>	<b>8.7294</b>	<b>2.2400</b>	<b>12.5775</b>	<b>17.8100</b>	<b>2.6980</b>	<b>4.1794</b>	<b>4.5500</b>
00sem 03d 15h	8.9136	2.5400	12.6300	17.8900	2.7005	4.4836	4.4300
00sem 05d 15h	9.0664	2.7700	12.6675	17.9500	2.7007	4.7164	4.3500
01sem 00d 15h	9.1886	2.9500	12.6975	17.9900	2.6984	4.8986	4.2900
01sem 03d 15h	9.3514	3.1700	12.7350	18.0400	2.6961	5.1214	4.2300
03sem 03d 15h	9.7046	3.6300	12.7875	18.1200	2.6871	5.5946	4.1100
06sem 03d 15h	9.7862	3.7300	12.8100	18.1500	2.6848	5.6962	4.0900
09sem 03d 15h	9.7862	3.7400	12.8100	18.1500	2.6848	5.7062	4.0800

Es importante destacar que los arreglos seleccionados en el diseño Taguchi ( $L_8 \times L_8$  y  $L_{16}$ ) fueron ortogonales, lo que hizo posible que se resolviera el efecto de cada factor en la respuesta y en las interacciones factor controlable-factor ruido, permitiendo la optimización de la variable respuesta. Del mismo modo, la relación  $S/N$  permitió la reducción de la variabilidad del proceso haciendo el diseño más robusto contra las variaciones del medio ambiente [Barrado, E. *et al.*, 1996].

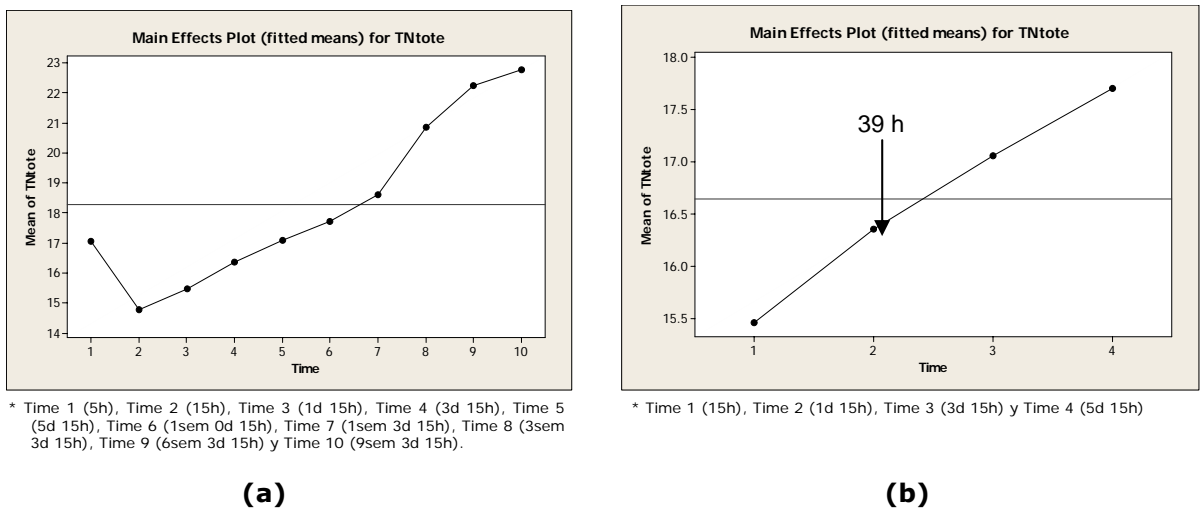
**Modelo Factorial Parcial Fraccional.** La contribución individual de los factores y sus interacciones fue la clave para comprender la operatividad de la planta y lograr definir las condiciones óptimas de operación. Este modelo se repitió en bloques a diferentes tiempos de proceso para identificar el tiempo de proceso mínimo que estableciera una variación estadística inapreciable de las respuestas para todas las combinaciones del modelo en un intervalo corto de operación, además de que cumpliera con las especificaciones de descarga.

Se realizó un diseño factorial parcial fraccional ( $2^8$ ) para cada variable respuesta, con bloques de 10 diferentes tiempos de proceso y 16 tratamientos que consideraron diferentes combinaciones de los dos niveles. Esto resultó en 160 valores por cada variable respuesta; mismos que fueron analizados a través de un ANOVA unidireccional.

Para el análisis, se estableció un nivel de confianza del 95 por ciento y un error del 5 por ciento para las comparaciones de las diferencias entre medias por el método de Tukey's. También, se buscó un valor de probabilidad ( $P$ ) mayor a 0.05 para que las variables respuesta (principalmente  $Ntot_e$ ) fueran no significativas en un intervalo de operación; esto con el interés de elegir un tiempo (dentro de ese intervalo) para satisfacer las especificaciones del efluente.

Del ANOVA resultó que en el intervalo de 15h a 135h (Tiempo 2 a 5), todas las variables respuestas obtuvieron un valor de  $P$  mayor a 0.05 (entre 0.499 y 1). Por consiguiente, se eligió 39h (Tiempo 3) como el tiempo de proceso mínimo estable en un intervalo corto de operación del "Benchmark", al obtenerse la menor media de  $Ntot_e$  en ese tiempo.

En la Fig. 3.9 se presenta el comportamiento de  $Ntot_e$  para diez tiempos de proceso (5h a 1599h) y cuatro tiempos de proceso (15h a 135h)



**Fig. 3.9.** Comportamiento de  $Ntot_e$  para diez tiempos de proceso (5h a 1599h) y cuatro tiempos de proceso (15h a 135h).

Como consecuencia de este *DoE*, se comprobó que el tiempo de proceso mínimo estable para obtener la menor concentración de  $N_{tot_e}$  fue de 39h en un intervalo corto de operación y que anteriormente fue predicho con el Modelo Taguchi y la simulación en *JASS*; por ende, éste será el tiempo de estudio si se deseara optimizar el proceso.

Por otra parte, se realizó un diseño factorial parcial fraccional sin repeticiones ni bloques, considerando ocho factores sin interacciones y un nivel de confianza del 95 por ciento. Con este diseño se determinaron los efectos que son significativos y no significativos sobre las variables respuesta.

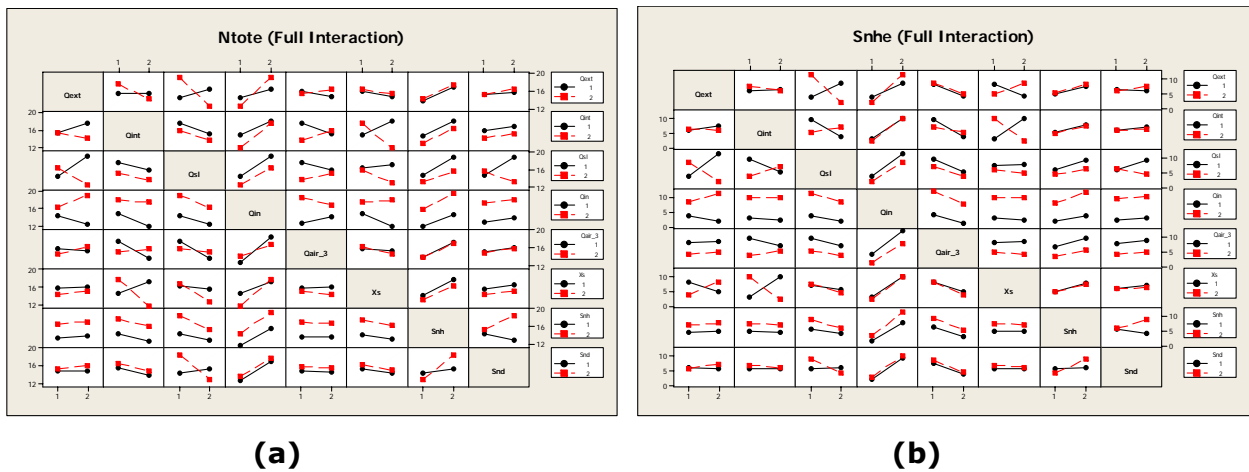
Los efectos se obtuvieron por medio del diagrama de Pareto que permite visualizar tanto la magnitud como la importancia del efecto. Éstos se encuentran resumidos en la Tabla 3.15, donde se puede identificar que  $Q_{in}$  es el factor más importante ya que en todas las variables respuesta tuvo efecto, le sigue  $Q_{sl}$  y posteriormente  $Q_{air\_3}$ . El único factor que no fue significativo en todas las variables respuesta fue  $S_{ND}$ ; esto implicó que si se disminuía o incrementaba esta concentración, no tenía efecto alguno sobre las concentraciones del efluente de la planta del "*Simulation Benchmark*".

**Tabla 3.15.** Efectos significativos y no significativos de la planta del "*Simulation Benchmark*" a través del Modelo Factorial Parcial Fraccional, considerando ocho factores.

VARIABLES RESPUESTA	FACTORES							
	$Q_{ext}$	$Q_{int}$	$Q_{sl}$	$Q_{air\_3}$	$Q_{in}$	$X_S$	$S_{ND}$	$S_{NH}$
$TSS_e$	•	X	•	X	•	•	X	X
$COD_e$	•	X	•	•	•	•	X	X
$BOD_e$	X	•	•	•	•	•	X	X
$TKN_e$	X	X	•	•	•	X	X	•
$NO_e$	X	•	X	•	•	X	X	X
$N_{tot_e}$	X	•	•	X	•	X	X	•
$Snh_e$	X	X	•	•	•	X	X	•

Punto = Significativo; Cruz = No significativo

También se analizaron las interacciones para cada variable respuesta. En la Fig. 3.10 se presentan, para  $Ntot_e$  y  $Snh_e$ , los diagramas completos de interacciones, en los cuales se grafican las medias de cada nivel de un factor con el nivel de uno segundo que permanece constante. Estos diagramas se emplean para estimar los efectos que se tendrían si se aumentara o disminuyera alguno de los factores en el que se tuviera un particular interés; siempre y cuando se encuentre dentro del intervalo de estudio. Esto es equivalente a un análisis de sensibilidad paramétrica.



**Fig. 3.10.** Diagramas completos de interacciones para: (a)  $Ntot_e$  y (b)  $Snh_e$ .

Una interacción existe cuando las dos líneas del cambio de niveles de los factores se intersectan y es más significativa conforme la pendiente tiende a infinito. En el caso de que se presentaran líneas paralelas o líneas alejadas una de la otra, significa que no existe efecto alguno entre los factores para la variable respuesta estimada.

Por ejemplo, en el diagrama de  $Ntot_e$  (Fig. 3.10a, segundo renglón-sexta columna), esta variable respuesta es afectada cuando  $X_s$  cambia del nivel bajo al alto, dependiendo del nivel de  $Q_{int}$ , ya que puede aumentarla o disminuirla. Para disminuir  $Ntot_e$ ,  $X_s$  y  $Q_{int}$  deberán estar en el nivel 2 para el caso en donde sólo estos dos factores se involucraran en el diseño y cuando en el sistema estén considerados los ocho factores.

Otro ejemplo es  $Snh_e$  (Fig. 3.10b, sexto renglón-cuarta columna). En esta variable las líneas se encuentran encimadas; esto significa que existe un comportamiento similar en los niveles de la variables; es decir, si  $Q_{in}$  y  $X_S$  cambian del nivel bajo al alto, el efecto sobre de  $Snh_e$  es el mismo (aumenta). Por el contrario, si  $Q_{in}$  y  $X_S$  cambian del nivel alto al bajo,  $Snh_e$  disminuye.

A través del diseño factorial se obtuvieron los coeficientes de una ecuación de regresión múltiple para predecir las concentraciones del efluente en cualquier tiempo. En la Tabla 3.16 se resumen los coeficientes estimados para cada una de las variables respuesta con respecto a cada uno de los factores involucrados para el intervalo de operación de Sequía a Lluvia. En esta tabla se puede observar que para todas las variables respuesta ( $Ntot_e$ ,  $Snh_e$ ,  $TSS_e$ ,  $COD_e$ ,  $BOD_e$ ,  $TKN_e$  y  $NO_e$ ) excepto  $NO_e$ , el gasto de alimentación a la planta ( $Q_{in}$ ) fue la variable más importante ya que tuvo el valor más alto de los coeficientes de los factores.

**Tabla 3.16.**

Coefficientes usando datos en unidades sin codificar de una ecuación de regresión múltiple para cada una de las variables respuesta estimados por medio el Modelo Factorial Fraccional para el intervalo de operación en estudio.

VARIABLES RESPUESTA	COEFICIENTES DE LOS FACTORES								
	Constante	$Q_{ext}$	$Q_{int}$	$Q_{sl}$	$Q_{air\_3}$	$Q_{in}$	$X_S$	$S_{ND}$	$S_{NH}$
$Ntot_e$	10.1369	----	-1.6670	-2.3553	----	4.3196	----	----	3.2516
$Snh_e$	-0.1776	0.5824	-0.4349	-2.1926	-3.7701	7.2126	-0.2949	0.7851	2.5449
$TSS_e$	7.9795	-0.1809	0.0028	1.3809	-0.0066	2.0784	0.0609	----	0.0009
$COD_e$	11.3888	-0.1888	----	1.7288	-0.2338	3.1563	0.2338	----	----
$BOD_e$	1.6760	----	-0.0238	0.2058	-0.0598	0.5695	0.0798	----	----
$TKN_e$	1.2155	0.5948	-0.4432	-2.1315	-3.8160	7.5983	-0.2548	0.7873	2.5379
$NO_e$	8.2013	----	-1.2238	----	3.6588	-3.2788	----	----	----

La jerarquización de la importancia de las variables dependió de cada una de las variables respuesta. Por ejemplo, en la Tabla 3.16 para el caso de  $Ntot_e$ ,  $Q_{in}$  fue el factor más importante, mientras que  $Q_{ext}$ ,  $Q_{air\_3}$ ,  $X_S$  y  $S_{ND}$  no, al no tener ningún coeficiente.

Con base en lo antes descrito, se seleccionó el Taguchi  $L_{16}$  con ocho factores como el *DoE Óptimo* para las diferentes condiciones climáticas de la planta del "Simulation Benchmark" porque resulta en el valor de  $N_{tot_e}$ ,  $Q_{ext}$  y  $Q_{air\_3}$  mínimos, que implican un ahorro en la operación de la planta y en una buena eficiencia.

Se realizaron diferentes pruebas del *DoE Óptimo* para las condiciones climáticas de la planta. A través del simulador *JASS*, se simularon dinámicamente las respuestas de las condiciones operativas y las del *DoE* seleccionado. Se compararon sus valores y se presentan en la Tabla 3.17 para un tiempo de proceso de 1599h.

**Tabla 3.17.**

Comparación entre las variables respuestas del "Benchmark" de las condiciones de operación (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia) y la metodología del *DoE* a un tiempo de proceso de 9sem 3d 15h para cuando se consideren ocho factores (cuatro controlables y cuatro de ruido).

VARIABLES RESPUESTA	DISEÑO TAGUCHI IDEAL/ $L_{16}$							
	SEQUÍA		NORMAL		TORMENTA		LLUVIA	
	Operativo	DoE	Operativo	DoE	Operativo	DoE	Operativo	DoE
$N_{tot_e}$ , mg N/L	14.2904	9.7862	14.1152	9.7862	12.3198	9.6810	12.9816	9.4090
$Snh_e$ , mg N/L	1.5200	3.7400	1.7200	3.7400	2.5800	3.4600	3.8600	3.1100
$TSS_e$ , mg SS/L	12.2325	12.8100	12.4950	12.8100	13.8375	14.8200	15.1800	12.3600
$COD_e$ , mg COD/L	17.1900	18.1500	17.5500	18.1500	19.3800	20.8100	21.2200	17.5300
$BOD_e$ , mg COD/L	2.5949	2.6848	2.6505	2.6848	2.8865	3.3470	3.2172	2.6566
$TKN_e$ , mg N/L	3.3904	5.7062	3.6152	5.7062	4.6198	5.3610	6.0516	5.0090
$NO_e$ , mg N/L	10.9000	4.0800	10.5000	4.0800	7.7000	4.3200	6.9300	4.4000

En la Tabla 3.17, se puede observar que existió una disminución considerable de aproximadamente el 62.5 por ciento, principalmente de  $NO_e$  para la condición de Sequía al emplear el *DoE*. En cuanto a  $N_{tot_e}$ , esta variable respuesta llegó a disminuir hasta un 31.5 por ciento y  $Snh_e$  llegó a incrementar hasta un 146 por ciento pero siguió estando dentro de las especificaciones establecidas (< 4 mg N/L). Esto implicó que algunas de las variables aumentarán si se deseaba disminuir  $N_{tot_e}$ .

En la tabla anterior, la condición de Lluvia fue la mejor en la aplicación del *DoE* ya que disminuyó todas las variables respuestas, contrario a las demás condiciones ya que mientras las variables correspondientes al nitrógeno tendieron a disminuir, las restantes se incrementaron, pero dentro de las normas de descarga. Por lo tanto, el objetivo de la aplicación del *DoE* se cumplió, al disminuir  $N_{tot_e}$ .

Por otra parte, se realizó un estudio semejante al anterior. La diferencia fue que se realizó un Taguchi  $L_{16}$  con cuatro factores controlables ( $Q_{ext}$ ,  $Q_{int}$ ,  $Q_{sl}$  y  $Q_{air\_3}$ ), excluyendo los factores de ruido porque no son factibles de ser manipulados selectivamente en la realidad. Este estudio resultó en la siguiente combinación óptima de factores:  $Q_{air\_3,2}$ ,  $Q_{sl,2}$ ,  $Q_{int,2}$ ,  $Q_{ext,1}$  para cada una de las condiciones climáticas, cuyos valores de los niveles se muestran en la Tabla 3.18.

**Tabla 3.18.**

Valores de los niveles de la combinación óptima de factores obtenidos mediante el Método Taguchi con cuatro factores para cada condición climática (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia).

FACTORES		VALORES
CONTROLABLES	$Q_{ext,1}$ , L/h	0.0000
	$Q_{int,2}$ , m <sup>3</sup> /h	2976.0225
	$Q_{sl,2}$ , m <sup>3</sup> /h	992.0075
	$Q_{air\_3,2}$ , m <sup>3</sup> /h	0.7000

Los resultados de la aplicación de los niveles de la Tabla 3.18 al "*Benchmark*", se presentan en la Tabla 3.19, en donde se puede observar que con la aplicación del *Diseño Taguchi Particular* a la planta del "*Simulation Benchmark*", se disminuyó aproximadamente un 62 por ciento, principalmente de  $NO_e$  para la condición de Sequía. En cuanto a  $N_{tot_e}$ , esta variable respuesta disminuyó hasta un 3 por ciento y  $Snh_e$  se incrementó hasta un 146 por ciento pero cumplió con las normas de descarga. En cuanto a la condición de Lluvia, no hubo diferencia alguna entre la operación y el *DoE*; por lo que se concluyó que opera en óptimas condiciones.



**Tabla 3.19.**

Comparación de las variables respuesta del "Benchmark" de las condiciones de operación (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia) con la metodología del DoE, a un tiempo de proceso de 9sem 3d 15h, para cuando se consideraron cuatro factores controlables.

DISEÑO TAGUCHI PARTICULAR								
VARIABLES RESPUESTA	SEQUÍA		NORMAL		TORMENTA		LLUVIA	
	Operativo	DoE	Operativo	DoE	Operativo	DoE	Operativo	DoE
$Ntot_e$ , mg N/L	14.2904	13.9652	14.1152	13.7474	12.3198	11.9498	12.9816	12.9816
$Snh_e$ , mg N/L	1.5200	1.0500	1.7200	1.2100	2.5800	2.1200	3.8600	3.8600
$TSS_e$ , mg SS/L	12.2325	12.8550	12.4950	13.0875	13.8375	14.1825	15.1800	15.1800
$COD_e$ , mg COD/L	17.1900	18.0100	17.5500	18.3200	19.3800	19.8300	21.2200	21.2200
$BOD_e$ , mg COD/L	2.5949	2.6499	2.6505	2.7007	2.8865	2.9116	3.2172	3.2172
$TKN_e$ , mg N/L	3.3904	2.9652	3.6152	3.1474	4.6198	4.1898	6.0516	6.0516
$NO_e$ , mg N/L	10.9000	11.0000	10.5000	10.6000	7.7000	7.7600	6.9300	6.9300

Adicionalmente a estos DoE's, se realizó un evaluación del diseño óptimo encontrado (Tabla 3.13), considerando sólo los factores controlables, mediante la aplicación de un 20 por ciento mayor y un 20 por ciento menor a todas las variables [Torng, C.C., et al., 1999]. En esta prueba se encontró que el incremento de un 20 por ciento mayor al nivel óptimo encontrado en las recirculaciones ( $Q_{int}$ , 3571.2270 m<sup>3</sup>/h y 1190.4090 m<sup>3</sup>/h para  $Q_{sl}$ ) y en el flujo del aire ( $Q_{air\_3}$ , 0.252 m<sup>3</sup>/h) disminuyó  $Ntot_e$ . Este DoE benefició principalmente a las condiciones de Sequía y Normal, ya que dicho cambio implicó un aumento en  $Snh_e$  para las demás condiciones; es decir, se salieron de las especificaciones de descarga. Estos resultados se presentan en la Tabla 3.20.

De acuerdo con la Tabla 3.20 se logró disminuir un 22 por ciento el  $Ntot_e$ , y un 50 por ciento el  $NO_e$  para las condiciones de Sequía y Normal. Esto benefició a la descarga, ya que el objetivo principal de esta investigación fue disminuir los contaminantes de nitrógeno a la salida de la planta. Por el contrario, para las condiciones de Tormenta y Lluvia,  $Snh_e$  aumentó 111 y 75 por ciento respectivamente; ambos se salieron de especificación y por lo tanto de la norma de descarga por lo que se descartaron.

**Tabla 3.20.**

Comparación de las variables respuesta del "Benchmark" de las condiciones de operación (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia) con la metodología del DoE, a un tiempo de proceso de 9sem 3d 15h para cuando se aumentó un 20 por ciento las recirculaciones y el flujo del aire del reactor aeróbico óptimos.

DISEÑO ÓPTIMO								
VARIABLES RESPUESTA	SEQUÍA		NORMAL		TORMENTA		LLUVIA	
	Operativo	DoE	Operativo	DoE	Operativo	DoE	Operativo	DoE
$Ntot_e$ , mg N/L	14.2904	11.0960	14.1152	11.2588	12.3198	12.6302	12.9816	15.7170
$Snh_e$ , mg N/L	1.5200	3.4200	1.7200	3.9600	2.5800	<b>6.5400<sup>(1)</sup></b>	3.8600	<b>10.5000<sup>(1)</sup></b>
$TSS_e$ , mg SS/L	12.2325	13.2375	12.4950	13.4775	13.8375	14.5800	15.1800	15.6600
$COD_e$ , mg COD/L	17.1900	18.6200	17.5500	18.9600	19.3800	20.5300	21.2200	22.1200
$BOD_e$ , mg COD/L	2.5949	2.7054	2.6505	2.7612	2.8865	2.9756	3.2172	3.3229
$TKN_e$ , mg N/L	3.3904	5.3760	3.6152	5.9488	4.6198	8.6702	6.0516	12.7970
$NO_e$ , mg N/L	10.9000	5.7200	10.5000	5.3100	7.7000	3.9600	6.9300	2.9200

(1) Los valores en estilo Negrita están fuera de especificación; es decir, son concentraciones mayores a 4 mg N/L.

Se realizó otra prueba en la que se incrementó un 20 por ciento en las recirculaciones ( $3571.2270 \text{ m}^3/\text{h}$  para  $Q_{int}$  y  $1190.4090 \text{ m}^3/\text{h}$  para  $Q_{sl}$ ) y se mantuvo el flujo máximo óptimo del aire ( $Q_{air\_3}$ ,  $0.7 \text{ m}^3/\text{h}$ ) en las mismas condiciones que en la de operación (Tabla 3.18). Con este cambio se mejoró aún más la respuesta de  $Snh_e$  y  $Ntot_e$ , al disminuirlas hasta un 33 por ciento y 4.5 por ciento, respectivamente; con excepción de la condición de Tormenta que tendió a incrementar  $Ntot_e$  en un 3.7 por ciento. Estos resultados se muestran en la Tabla 3.21.

**Tabla 3.21.**

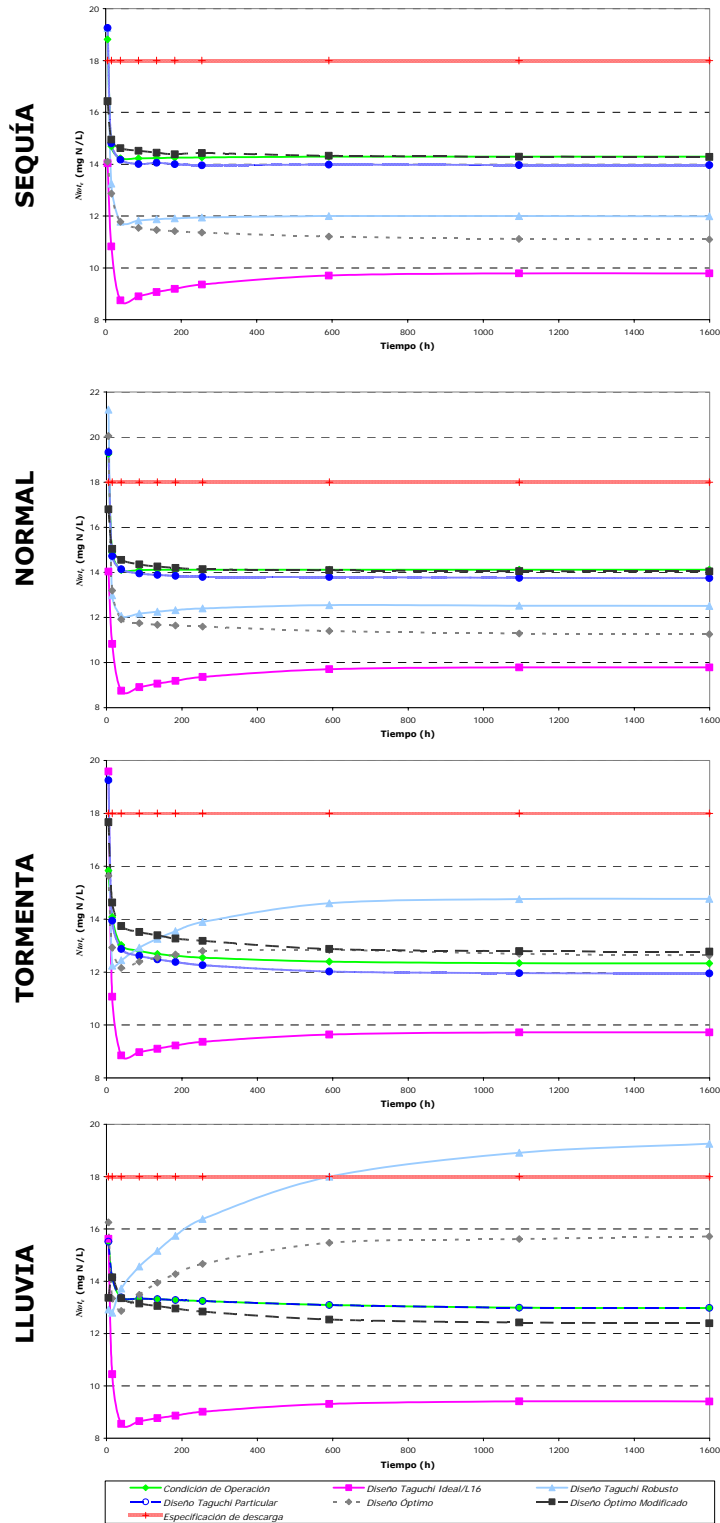
Comparación de las variables respuestas del "Benchmark" de las condiciones de operación (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia) con la metodología del DoE, a un tiempo de proceso de 9sem 3d 15h para cuando se incrementó un 20 por ciento los niveles óptimos de las recirculaciones y se mantuvo el flujo del aire de operación.

DISEÑO ÓPTIMO MODIFICADO								
VARIABLES RESPUESTA	SEQUÍA		NORMAL		TORMENTA		LLUVIA	
	Operativo	DoE	Operativo	DoE	Operativo	DoE	Operativo	DoE
$Ntot_e$ , mg N/L	14.2904	14.2792	14.1152	14.0420	12.3198	12.7760	12.9816	12.3978
$Snh_e$ , mg N/L	1.5200	1.0200	1.7200	1.1600	2.5800	1.8300	3.8600	3.1100
$TSS_e$ , mg SS/L	12.2325	13.2525	12.4950	13.4925	13.8375	14.6025	15.1800	15.6975
$COD_e$ , mg COD/L	17.1900	18.5600	17.5500	18.8900	19.3800	20.4000	21.2200	21.9000
$BOD_e$ , mg COD/L	2.5949	2.6896	2.6505	2.7429	2.8865	2.9440	3.2172	3.2699
$TKN_e$ , mg N/L	3.3904	2.9792	3.6152	3.1420	4.6198	3.9360	6.0516	5.3478
$NO_e$ , mg N/L	10.9000	11.3000	10.5000	10.9000	7.7000	8.8400	6.9300	7.0500

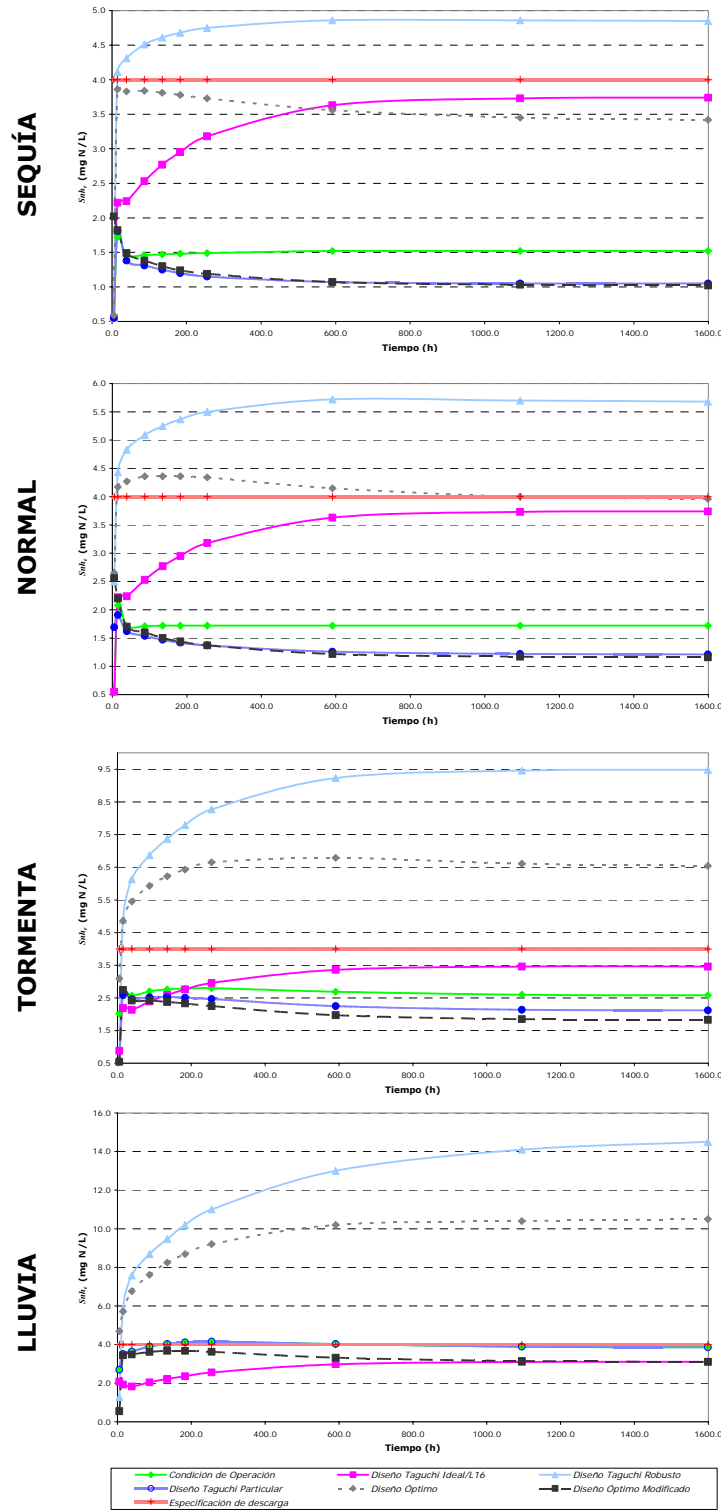
Para demostrar el beneficio del DoE a la planta del "Simulation Benchmark" se obtuvieron los valores de las variables respuesta mediante el simulador JASS para las condiciones de operación de Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia, y para los diferentes DoE's antes planteados bajo un tiempo de operación de 5h a 1599h (9sem 3d 15h). La simulación dinámica de  $Ntot_e$ ,  $Snh_e$ ,  $TSS_e$  y  $COD_e$  se presentan en las Fig. 3.11, Fig. 3.12, Fig. 3.13 y Fig. 3.14, respectivamente.

En la Fig. 3.11 es evidente que en todas las condiciones climáticas, el Diseño Taguchi Ideal/ $L_{16}$  disminuye  $Ntot_e$ ; el problema de su aplicación en el "Benchmark" es que los factores ruido no se pueden manipular (composiciones de entrada); por ello, la segunda mejor opción es el Diseño Óptimo para las condiciones de Sequía y Normal, ya que disminuyeron la composición en un 22 y 20 por ciento, respectivamente y, por lo tanto, se consideraron eran unas políticas de operación óptimas posibles de implementar.

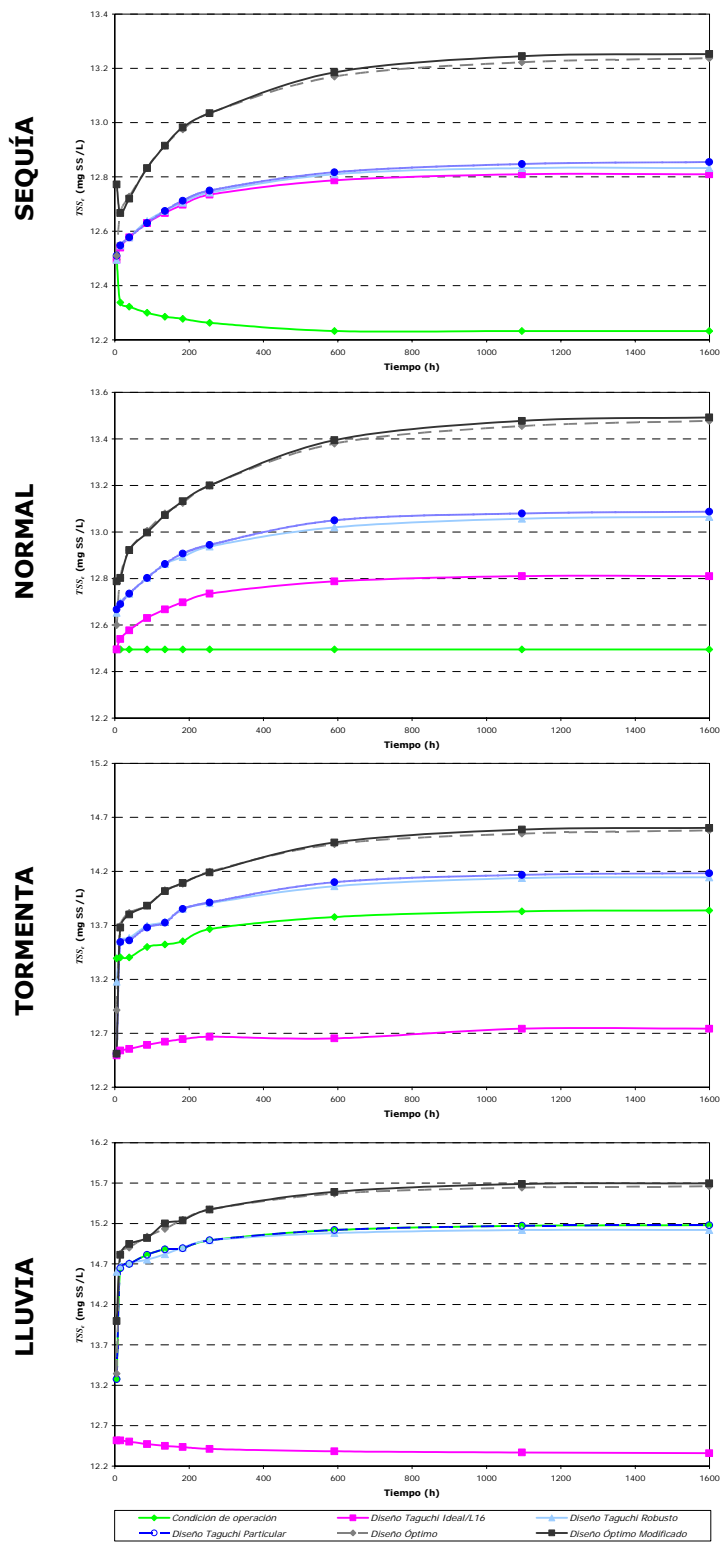
En cuanto a la condición de Tormenta, en la Fig. 3.11, el Diseño Particular es el que favorece la disminución de  $Ntot_e$  en un 3 por ciento con respecto a los demás diseños, y para Lluvia, el Diseño Óptimo Modificado lo decremента en un 4.5 por ciento.



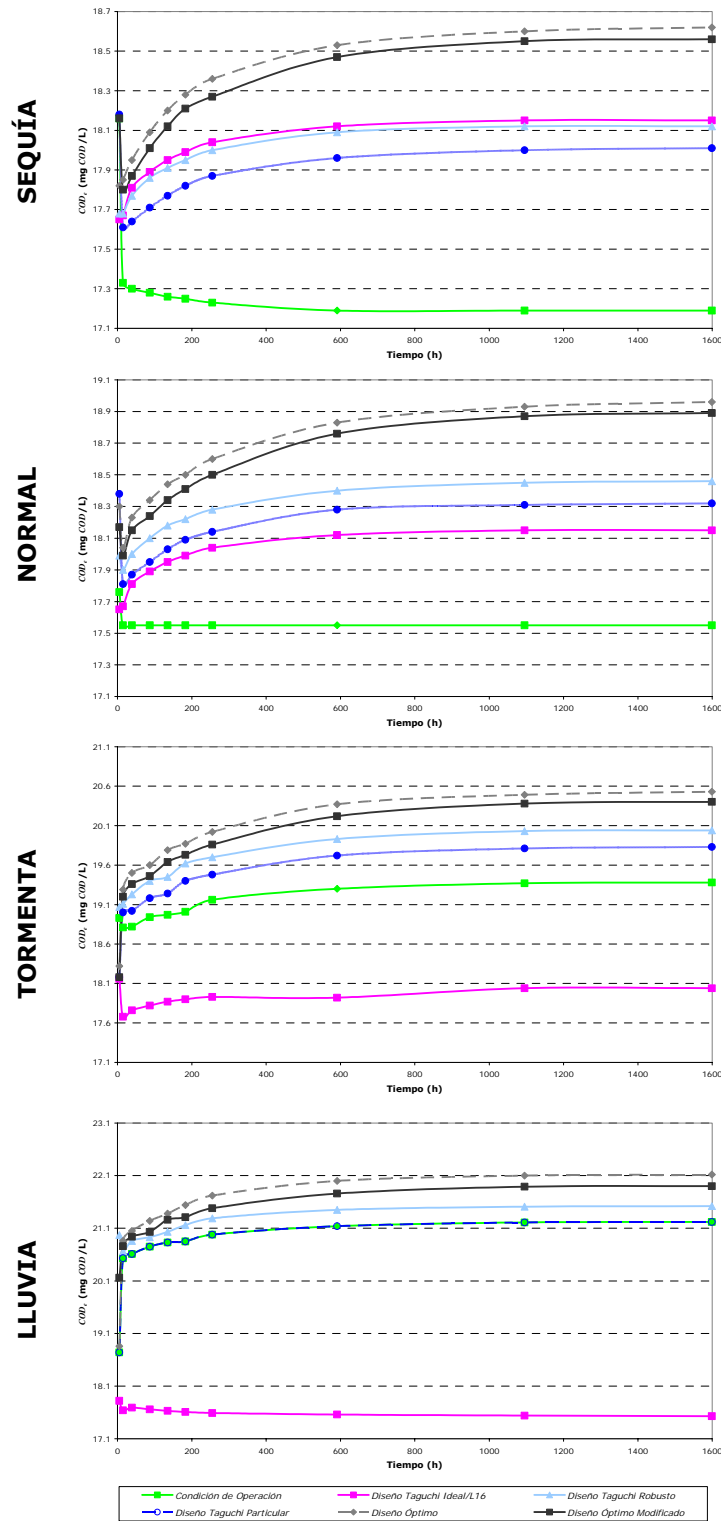
**Fig. 3.11.**  $N_{tot_e}$ . Comparación de los diferentes *DoE*'s con las condiciones de operación de la planta del "Simulation Benchmark" (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia).



**Fig. 3.12.**  $S_{nh_e}$ . Comparación de los diferentes *DoE*'s con las condiciones de operación de la planta del "Simulation Benchmark" (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia).



**Fig. 3.13.**  $TSS_e$ . Comparación de los diferentes *DoE*'s con las condiciones de operación de la planta del "Simulation Benchmark" (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia).



**Fig. 3.14.**  $COD_e$ . Comparación de los diferentes *DoE*'s con las condiciones de operación de la planta del "Simulation Benchmark" (Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia).

En el caso de  $Snh_e$  se aplicaron los mismos diseños que se mencionaron anteriormente para cada condición climática, ya que esta concentración es inherente a  $Ntot_e$  en el efluente. A pesar de esto, se consideró que  $Snh_e$  era muy susceptible a salirse de la norma al querer disminuir  $Ntot_e$ . En consecuencia, se eligieron aquellos diseños que cumplieran con las especificaciones de salida de la planta y por ende, las normas de descarga, como se observa en la Fig. 3.12.

En la Fig. 3.13, correspondiente a  $TSS_e$ , se puede observar que el *Diseño Taguchi Ideal/L<sub>16</sub>* favorece solamente a las condiciones de Tormenta y Lluvia en un 21 y 28 por ciento, respectivamente. Para la condición de Sequía y Normal, la concentración aumenta hasta un 10 por ciento con respecto a las condiciones de operación y, el *Diseño Taguchi Robusto*, que corresponde al arreglo cruzado, es el único diseño que disminuye un 0.4 por ciento esta concentración.

El comportamiento de  $COD_e$  es similar a  $TSS_e$ . En la Fig. 3.14 se observa que para el *Diseño Taguchi Ideal/L<sub>16</sub>* en las condiciones de Tormenta y Lluvia,  $COD_e$  disminuye un 7 y un 17 por ciento, respectivamente. Tanto para la condición de Sequía como la Normal,  $COD_e$  aumenta hasta un 8 por ciento. Para la condición de Lluvia, el *Diseño Taguchi Particular* es aquél que ni mejora ni empeora la condición de operación.

El análisis de los *DoE's* que se realizó hasta este momento fue por cada variable respuesta, pero fue en conjunto como se seleccionó el diseño que favoreció la disminución de  $Ntot_e$ , principalmente, como es el *Diseño Óptimo* para Sequía, el *Diseño Particular* para Tormenta, y el *Diseño Óptimo Modificado* para Normal y Lluvia.

Es importante mencionar que el encontrar un valor de la concentración del efluente, ya sea  $Ntot_e$ ,  $Snh_e$  o cualquier otra concentración por debajo de los valores de las condiciones de operación en los diseños antes mencionados, indica que se optimizó, al determinarse una menor concentración en un tiempo menor.



En conclusión, la metodología del Diseño de Experimentos permitió: (i) identificar los factores controlables y de ruido que afectan el bioproceso, (ii) estimar los niveles de los factores para alcanzar la respuesta óptima y (iii) el más importante, decrecer la variabilidad del proceso, sin controlar o eliminar las causas de la variación.

Con base en lo anterior, se obtuvo la combinación óptima de factores bajo diferentes propuestas de diseño de experimentos que se emplearon para plantear las políticas óptimas de operación necesarias para minimizar principalmente el contenido de nitrógeno total en el efluente; y por ende, el riesgo en la salud de los seres vivos y, cumplir con las especificaciones de descarga y las normas.

### **3.3. DEFINICIÓN DE LAS POLÍTICAS ÓPTIMAS DE OPERACIÓN DE LA PLANTA.**

La constante preocupación de mantener la calidad del efluente ha ocasionado la búsqueda de políticas óptimas de operación que manejen el máximo aprovechamiento de las *WWTP*'s. Las variaciones climáticas representan un factor de variación de alta frecuencia y de amplitud en las perturbaciones en el agua receptora que recibe una planta de tratamiento [Beck, M.B., *et al.*, 1991]; por lo que es importante analizar y aplicar las medidas necesarias para realizar las modificaciones pertinentes para su funcionamiento óptimo.

Para cumplir con la protección al medio ambiente, así como con las normas de descarga de aguas residuales, el efluente debe tener una alta calidad, inclusive frente a una alimentación que frecuentemente cambie, ya sea en compuestos orgánicos ó del nitrógeno, alcalinidad, pH, temperatura y/o sales disueltas, entre otros [Bury, S.J., *et al.*, 2002]. Además, debe ser capaz de adaptarse rápidamente a la variabilidad inherente que puede manifestarse en cambios de gastos o caudales, composiciones ó ambos.

Con base en los resultados obtenidos en el *DoE* para cada una de las condiciones climáticas de Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia de la planta del "*Simulation Benchmark*", se definen las siguientes políticas óptimas de operación, con el objetivo de mejorar la calidad del efluente tanto en la operación de la planta bajo diversas condiciones, como

en el caso de que se presentaran perturbaciones climáticas; es decir, mayor o menor precipitación pluvial.

A continuación se describen las cinco políticas óptimas de operación planteadas.

### 3.3.1. Política I: Sequía-Lluvia.

El funcionamiento de la planta en estudio, de acuerdo a los datos de la literatura, está operando adecuadamente en cualquiera de las condiciones climáticas ya que el efluente cumple con la norma, como se muestra en la Tabla 3.22.

**Tabla 3.22.**

Condiciones operativas del "Benchmark" para Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia a un tiempo de proceso de 9sem 3d 15h.

PARÁMETROS DE LA CALIDAD DEL AGUA	CONDICIONES OPERATIVAS				LÍMITE DE DESCARGA	
	Sequía	Normal	Tormenta	Lluvia		
$N_{tot_e}$ , mg N/L	14.2904	14.1152	12.3198	12.9816	<	18
$Sn_{h_e}$ , mg N/L	1.5200	1.7200	2.5800	3.8600	<	4
$TSS_e$ , mg SS/L	12.2325	12.4950	13.8375	15.1800	<	30
$COD_e$ , mg COD/L	17.1900	17.5500	19.3800	21.2200	<	100
$BOD_e$ , mg COD/L	2.5949	2.6505	2.8865	3.2172	<	10
$TKN_e$ , mg N/L	3.3904	3.6152	4.6198	6.0516		
$NO_e$ , mg N/L	10.9000	10.5000	7.7000	6.9300		

En caso que la planta estuviera operando y se presentara una precipitación pluvial, la operación y el efluente se modificarían. Ejemplificando este caso, se consideraron las dos condiciones extremas: Sequía y Lluvia.

En esta primera política se consideró que la planta estuviera operando en Sequía durante un tiempo de aproximadamente 10 semanas y que, por cuestiones climáticas, se presentara una precipitación pluvial fuerte que sería la de Lluvia. Las composiciones y el flujo de entrada cambian pero la operación de la planta no; es decir, no se cambia ninguna recirculación ( $Q_{int}$  y  $Q_{sl}$ ) ni el flujo del aire ( $Q_{air\_3}$ ). Los resultados de este comportamiento se encuentran en la Tabla 3.23.

**Tabla 3.23.**

Funcionamiento de la planta de la condición de Sequía a la de Lluvia (sin optimizar).

VARIABLES		OPERACIÓN ("Benchmark")		
		SEQUÍA	LLUVIA	%
Concentraciones de entrada	$X_{BH}$ , mg COD/L	28.1700	<b>24.3700</b>	
	$X_{BA}$ , mg COD/L	0.0000	<b>0.0000</b>	
	$X_S$ , mg COD/L	202.3200	<b>175.0500</b>	
	$X_{ND}$ , mg N/L	10.5900	<b>9.1600</b>	
	$X_{IP}$ , mg COD/L	51.2000	<b>44.3000</b>	
	$S_O$ , mg COD/L	0.0000	<b>0.0000</b>	
	$S_{NH}$ , mg N/L	31.5600	<b>27.3000</b>	
	$S_{ND}$ , mg N/L	6.9500	<b>6.0100</b>	
	$S_{NO}$ , mg N/L	0.0000	<b>0.0000</b>	
	$S_S$ , mg N/L	69.5000	<b>60.1300</b>	
	$S_{ALK}$ , m mol/L	7.0000	<b>7.0000</b>	
	$S_i$ , mg COD/L	30.000	<b>25.9600</b>	
Flujos	$Q_{in}$ , m <sup>3</sup> /h	752.5554	<b>992.0075</b>	
	$Q_{ext}$ , L/h	0.0000	0.0000	
	$Q_{int}$ , m <sup>3</sup> /h	2257.6662	2257.6662	(2.28 $Q_{in,R}$ )*
	$Q_{sl}$ , m <sup>3</sup> /h	752.5554	752.5554	(0.76 $Q_{in,R}$ )*
	$Q_{air-3}$ , m <sup>3</sup> /h	0.7000	0.7000	
	$Q_w$ , m <sup>3</sup> /h	16.0417	16.0417	
Parámetros de la Calidad del Agua	$N_{tot_e}$ , mg N/L	12.3198	14.9090	4.33
	$Snh_e$ , mg N/L	2.5800	<b>6.2100</b>	308.55
	$TSS_e$ , mg SS/L	13.8375	14.4750	18.33
	$COD_e$ , mg COD/L	19.3800	20.3300	18.27
	$BOD_e$ , mg COD/L	2.8865	3.1678	22.08
	$TKN_e$ , mg N/L	4.6198	8.3790	147.14
	$NO_e$ , mg N/L	7.7000	6.5300	-40.09

\* R = referido a la condición de operación de Lluvia.

En dicha tabla se observa que disminuyó  $NO_e$  en un 40.5 por ciento, pero las demás variables respuesta aumentaron, como  $Snh_e$  que se salió de la norma ( $< 4$  mg N/L). Esto ocasiona que se plantee la política de operación que se muestra en la Tabla 3.24.

**Tabla 3.24.**

Datos de la Política Óptima de Operación I para el caso del funcionamiento de la planta de la condición de Sequía a la condición de Lluvia.

VARIABLES	SEQUÍA-LLUVIA			
	SEQUÍA OPERACIÓN ("Benchmark")	LLUVIA ÓPTIMO MODIFICADO (DoE)	%	
<b>Concentraciones de entrada</b>	$X_{BH}$ , mg COD/L	28.1700	<b>24.3700</b>	
	$X_{BA}$ , mg COD/L	0.0000	<b>0.0000</b>	
	$X_S$ , mg COD/L	202.3200	<b>175.0500</b>	
	$X_{ND}$ , mg N/L	10.5900	<b>9.1600</b>	
	$X_{IP}$ , mg COD/L	51.2000	<b>44.3000</b>	
	$S_O$ , mg COD/L	0.0000	<b>0.0000</b>	
	$S_{NH}$ , mg N/L	31.5600	<b>27.3000</b>	
	$S_{ND}$ , mg N/L	6.9500	<b>6.0100</b>	
	$S_{NO}$ , mg N/L	0.0000	<b>0.0000</b>	
	$S_S$ , mg N/L	69.5000	<b>60.1300</b>	
	$S_{ALK}$ , m mol/L	7.0000	<b>7.0000</b>	
	$S_i$ , mg COD/L	30.000	<b>25.9600</b>	
<b>Flujos</b>	$Q_{in}$ , m <sup>3</sup> /h	752.5554	<b>992.0075</b>	
	$Q_{ext}$ , L/h	0.0000	0.0000	
	$Q_{int}$ , m <sup>3</sup> /h	2257.6662	<b>3571.2270</b>	(3.60 $Q_{in,R}$ )*
	$Q_{sl}$ , m <sup>3</sup> /h	752.5554	<b>1190.4090</b>	(1.20 $Q_{in,R}$ )*
	$Q_{air-3}$ , m <sup>3</sup> /h	0.7000	0.7000	
	$Q_w$ , m <sup>3</sup> /h	16.0417	16.0417	
<b>Parámetros de la Calidad del Agua</b>	$N_{tot_e}$ , mg N/L	12.3198	12.3258	-13.75
	$Snh_e$ , mg N/L	2.5800	3.2100	111.18
	$TSS_e$ , mg SS/L	13.8375	15.7725	28.94
	$COD_e$ , mg COD/L	19.3800	22.0000	27.98
	$BOD_e$ , mg COD/L	2.8865	3.2929	26.90
	$TKN_e$ , mg N/L	4.6198	5.4458	60.62
	$NO_e$ , mg N/L	7.7000	6.8800	-36.88

\* R = referido a la condición de Lluvia Óptimo Modificado.

Como se muestra en la Tabla 3.24 las recirculaciones aumentaron, 3.6 veces para  $Q_{int}$  y 1.2 veces para  $Q_{sl}$  con respecto a  $Q_{in}$ , que cumple con lo recomendado, y se

mantuvo el mismo flujo del aire. En consecuencia, se disminuyeron tanto  $N_{tot_e}$  como  $NO_e$  en un 14 y 37 por ciento, respectivamente.

La disminución de  $N_{tot_e}$ , que es el principal objetivo, ocasiona que  $Snh_e$  incremente un 11 por ciento en exceso; sin embargo, se encuentra dentro de la norma.

### 3.3.2. Política II: Tormenta.

El funcionamiento de la planta bajo la condición de Tormenta es bueno (Tabla 3.22) pero puede mejorarse al aplicar el *Diseño Taguchi Particular*, cuyo beneficio se muestra en la Tabla 3.19, al disminuir  $N_{tot_e}$ ,  $Snh_e$  y  $TKN_e$  un 3, 18 y 9 por ciento, respectivamente.

En la Tabla 3.25 se muestra, que para mejorar esta condición climática, se requiere únicamente aumentar la recirculación de lodos ( $Q_{sl}$ ) 1.1 veces el flujo de entrada y conservar tanto composiciones y flujo de entrada, como recirculación interna y flujo del aire.

### 3.3.3. Política III: Sequía.

El funcionamiento de la planta bajo la condición de Sequía también es bueno (Tabla 3.22) pero la mejora se llevó a cabo mediante la aplicación del *Diseño Óptimo* (Tabla 3.20) mediante el aumento de las recirculaciones y la disminución del flujo del aire; es decir, la recirculación interna aumentó 4.8 veces y la de lodos 1.6 veces con respecto al flujo de entrada, y el flujo de aire disminuyó un 36 por ciento con respecto al operativo.

Los resultados de la aplicación de esta política a la condición de Sequía se presentan en la Tabla 3.26, donde se puede observar que beneficia principalmente a  $N_{tot_e}$  y  $NO_e$  al disminuirlas en un 22 y 48 por ciento, respectivamente. Esto en consecuencia aumenta las demás variables respuesta pero permanecen dentro de las especificaciones y norma de descarga.

**Tabla 3.25.**

Datos de la Política Óptima de Operación II para el caso del funcionamiento de la planta en la condición de Tormenta.

VARIABLES	TORMENTA			
	OPERACIÓN ("Benchmark")	TAGUCHI PARTICULAR (DoE)	%	
<b>Concentraciones de Entrada</b>	$X_{BH}$ , mg COD/L	27.2500	27.2500	
	$X_{BA}$ , mg COD/L	0.0000	0.0000	
	$X_S$ , mg COD/L	193.3200	193.3200	
	$X_{ND}$ , mg N/L	10.2400	10.2400	
	$X_{IP}$ , mg COD/L	51.9200	51.9200	
	$S_O$ , mg COD/L	0.0000	0.0000	
	$S_{NH}$ , mg N/L	29.4800	29.4800	
	$S_{ND}$ , mg N/L	6.4900	6.4900	
	$S_{NO}$ , mg N/L	0.0000	0.0000	
	$S_S$ , mg N/L	64.9300	64.9300	
	$S_{ALK}$ , m mol/L	7.0000	7.0000	
	$S_i$ , mg COD/L	28.0300	28.0300	
<b>Flujos</b>	$Q_{in}$ , m <sup>3</sup> /h	860.7542	860.7542	
	$Q_{ext}$ , L/h	0.0000	0.0000	
	$Q_{int}$ , m <sup>3</sup> /h	2582.2625	2582.2625	(3.00 $Q_{in,S}$ )*
	$Q_{sl}$ , m <sup>3</sup> /h	860.7542	<b>992.0075</b>	(1.15 $Q_{in,S}$ )*
	$Q_{air_3}$ , m <sup>3</sup> /h	0.7000	0.7000	
	$Q_w$ , m <sup>3</sup> /h	860.7542	860.7542	
<b>Parámetros de la Calidad del Agua</b>	$N_{tot_e}$ , mg N/L	12.3198	11.9498	-3.00
	$Sn_{h_e}$ , mg N/L	2.5800	2.1200	-17.83
	$TSS_e$ , mg SS/L	13.8375	14.1825	2.49
	$COD_e$ , mg COD/L	19.3800	19.8300	2.32
	$BOD_e$ , mg COD/L	2.8865	2.9116	0.87
	$TKN_e$ , mg N/L	4.6198	4.1898	-9.31
	$NO_e$ , mg N/L	7.7000	7.7600	0.78

\* S = referido a la condición de Tormenta Taguchi Particular.

**Tabla 3.26.**

Datos de la Política Óptima de Operación III para el caso del funcionamiento de la planta en la condición de Sequía.

VARIABLES	SEQUÍA		
	OPERACIÓN ("Benchmark")	DISEÑO ÓPTIMO (DoE)	%
<b>Concentraciones de Entrada</b>	$X_{BH}$ , mg COD/L	28.1700	28.1700
	$X_{BA}$ , mg COD/L	0.0000	0.0000
	$X_S$ , mg COD/L	202.3200	202.3200
	$X_{ND}$ , mg N/L	10.5900	10.5900
	$X_{IP}$ , mg COD/L	51.2000	51.2000
	$S_O$ , mg COD/L	0.0000	0.0000
	$S_{NH}$ , mg N/L	31.5600	31.5600
	$S_{ND}$ , mg N/L	6.9500	6.9500
	$S_{NO}$ , mg N/L	0.0000	0.0000
	$S_S$ , mg N/L	69.5000	69.5000
	$S_{ALK}$ , m mol/L	7.0000	7.0000
	$S_i$ , mg COD/L	30.0000	30.0000
	<b>Flujos</b>	$Q_{in}$ , m <sup>3</sup> /h	752.5554
$Q_{ext}$ , L/h		0.0000	0.0000
$Q_{int}$ , m <sup>3</sup> /h		2257.6662	<b>3571.2270</b> (4.75 $Q_{in,D}$ )*
$Q_{sl}$ , m <sup>3</sup> /h		752.5554	<b>1190.4090</b> (1.58 $Q_{in,D}$ )*
$Q_{air\_3}$ , m <sup>3</sup> /h		0.7000	<b>0.2520</b> -64.00
$Q_w$ , m <sup>3</sup> /h		16.0417	16.0417
<b>Parámetros de la Calidad del Agua</b>	$N_{tot_e}$ , mg N/L	14.2290	11.0960 -22.35
	$Sn_{h_e}$ , mg N/L	1.4600	3.4200 125.00
	$TSS_e$ , mg SS/L	12.3225	13.2375 8.22
	$COD_e$ , mg COD/L	17.3000	18.6200 8.32
	$BOD_e$ , mg COD/L	2.6085	2.7054 4.26
	$TKN_e$ , mg N/L	3.3290	5.3760 58.57
	$NO_e$ , mg N/L	10.9000	5.7200 -47.52

D = referido a la condición de Sequía Diseño Óptimo.

### 3.3.4. Política IV: Normal.

El funcionamiento de la planta bajo la condición Normal de operación es bueno (Tabla 3.22) pero se mejoró mediante la aplicación del *Diseño Óptimo* (Tabla 3.20), al igual que la política anterior. Esto implicó aumentar las recirculaciones 4.7 veces para  $Q_{int}$  y 1.6 veces para  $Q_{sl}$  con respecto a  $Q_{in}$ , además de disminuir  $Q_{air\_3}$  un 64 por ciento.

Los resultados de esta política se presentan en la Tabla 3.27 en donde se identifica una disminución para  $Ntot_e$  y  $NO_e$  del 20 y 49 por ciento, respectivamente, y un aumento de las demás variables respuesta, principalmente de  $Snh_e$ , la cual incrementó un 130 por ciento pero, aún cuando estuvo cercano al límite de descarga, cumplió con las especificaciones y la norma.

### 3.3.5. Política V: Lluvia.

La planta bajo la condición de Lluvia opera en condiciones óptimas de acuerdo al *Taguchi Particular*, al cumplir con la norma (Tabla 3.22) pero se mejoró al aplicar el *Diseño Óptimo Modificado* (Tabla 3.21) que implicó aumentar únicamente las recirculaciones en 3.6 veces para  $Q_{int}$  y 1.2 veces para  $Q_{sl}$  con respecto a  $Q_{in}$ .

El beneficio de esta política se muestra en la Tabla 3.28, al disminuir  $Ntot_e$  un 5 por ciento,  $Snh_e$  un 19 por ciento y  $TKN_e$  un 12 por ciento.

Una vez definidas las cinco políticas óptimas de operación, se procedió a la optimización dinámica simultánea de éstas para la planta del "*Simulation Benchmark*" y que a continuación se describe.



**Tabla 3.27.**

Datos de la Política Óptima de Operación IV para el caso del funcionamiento de la planta en la condición Normal de operación.

VARIABLES	NORMAL			
	OPERACIÓN ("Benchmark")	DISEÑO ÓPTIMO (DoE)	%	
<b>Concentraciones de Entrada</b>	$X_{BH}$ , mg COD/L	28.1700	28.1700	
	$X_{BA}$ , mg COD/L	0.0000	0.0000	
	$X_S$ , mg COD/L	202.3200	202.3200	
	$X_{ND}$ , mg N/L	51.2000	51.2000	
	$X_{IP}$ , mg COD/L	10.5900	10.5900	
	$S_O$ , mg COD/L	31.5600	31.5600	
	$S_{NH}$ , mg N/L	6.9500	6.9500	
	$S_{ND}$ , mg N/L	0.0000	0.0000	
	$S_{NO}$ , mg N/L	7.0000	7.0000	
	$S_S$ , mg N/L	30.0000	30.0000	
	$S_{ALK}$ , m mol/L	0.0000	0.0000	
	$S_i$ , mg COD/L	69.5000	69.5000	
	<b>Flujos</b>	$Q_{in}$ , m <sup>3</sup> /h	768.5830	768.5830
$Q_{ext}$ , L/h		0.0000	0.0000	
$Q_{int}$ , m <sup>3</sup> /h		2305.7490	<b>3571.2270</b>	(4.65 $Q_{in,N}$ )*
$Q_{sl}$ , m <sup>3</sup> /h		768.5830	<b>1190.4090</b>	(1.55 $Q_{in,N}$ )*
$Q_{air_3}$ , m <sup>3</sup> /h		0.7000	<b>0.2520</b>	-64.00
$Q_w$ , m <sup>3</sup> /h		768.5830	768.5830	
<b>Parámetros de la Calidad del Agua</b>	$N_{tot_e}$ , mg N/L	14.1152	11.2588	-20.24
	$S_{nh_e}$ , mg N/L	1.7200	3.9600	130.23
	$TSS_e$ , mg SS/L	12.4950	13.4775	7.86
	$COD_e$ , mg COD/L	17.5500	18.9600	8.03
	$BOD_e$ , mg COD/L	2.6505	2.7612	4.18
	$TKN_e$ , mg N/L	3.6152	5.9488	64.55
	$NO_e$ , mg N/L	10.5000	5.3100	-49.43

\* N = referido a la condición de Normal Diseño Óptimo.

**Tabla 3.28.**

Datos de la Política Óptima de Operación V para el caso del funcionamiento de la planta en la condición de Lluvia.

VARIABLES	LLUVIA			
	OPERACIÓN ("Benchmark")	ÓPTIMO MODIFICADO (DoE)	%	
<b>Concentraciones de Entrada</b>	$X_{BH}$ , mg COD/L	24.3700	24.3700	
	$X_{BA}$ , mg COD/L	0.0000	0.0000	
	$X_S$ , mg COD/L	175.0500	175.0500	
	$X_{ND}$ , mg N/L	44.3000	44.3000	
	$X_{IP}$ , mg COD/L	9.1600	9.1600	
	$S_O$ , mg COD/L	27.3000	27.3000	
	$S_{NH}$ , mg N/L	6.0100	6.0100	
	$S_{ND}$ , mg N/L	0.0000	0.0000	
	$S_{NO}$ , mg N/L	7.0000	7.0000	
	$S_S$ , mg N/L	25.9600	25.9600	
	$S_{ALK}$ , m mol/L	0.0000	0.0000	
	$S_i$ , mg COD/L	60.1300	60.1300	
<b>Flujos</b>	$Q_{in}$ , m <sup>3</sup> /h	992.0075	992.0075	
	$Q_{ext}$ , L/h	0.0000	0.0000	
	$Q_{int}$ , m <sup>3</sup> /h	2976.0225	<b>3571.2270</b> (3.60 $Q_{in,R}$ )*	
	$Q_{sl}$ , m <sup>3</sup> /h	992.0075	<b>1190.4090</b> (1.20 $Q_{in,R}$ )*	
	$Q_{air_3}$ , m <sup>3</sup> /h	0.7000	0.7000	
	$Q_w$ , m <sup>3</sup> /h	992.0075	992.0075	
<b>Parámetros de la Calidad del Agua</b>	$N_{tot_e}$ , mg N/L	12.9816	12.3978	-4.50
	$Snh_e$ , mg N/L	3.8600	3.1100	-19.43
	$TSS_e$ , mg SS/L	15.1800	15.6975	3.41
	$COD_e$ , mg COD/L	21.2200	21.9000	3.20
	$BOD_e$ , mg COD/L	3.2172	3.2699	1.64
	$TKN_e$ , mg N/L	6.0516	5.3478	-11.63
	$NO_e$ , mg N/L	6.9300	7.0500	1.73

\* R = referido a la condición de Lluvia Óptimo Modificado.

### 3.4. OPTIMIZACIÓN DINÁMICA SIMULTÁNEA DEL BIOPROCESO.

Las plantas de tratamientos de aguas (*WWTP's*) son una combinación de procesos biológicos, químicos y físicos que se caracterizan por presentar no linealidades, parámetros que varían con el tiempo, recirculaciones y una amplia variación en el gasto y composición de entrada del agua residual [Yong, M., *et al.*, 2006].

Para estudios de sistemas no lineales como las *WWTP's*, se han realizado diversos esfuerzos para superar la complejidad y las dificultades de su análisis [Ekman, M., 2005]. Entre ellos se encuentra la optimización dinámica simultánea cuya formulación se describe a continuación.

#### **Formulación del Problema de Optimización.**

##### **1. Función Objetivo.**

El objetivo de este estudio fue minimizar la contaminación en el efluente, principalmente de nitrógeno ( $N_{tot_e}$ ,  $Snh_e$ ,  $TKN_e$  y  $NO_e$ ); pero también de sólidos suspendidos totales ( $TSS_e$ ) y, demanda química y bioquímica de oxígeno ( $COD_e$  y  $BOD_e$ , respectivamente) para cumplir con las especificaciones de descarga dentro de un tiempo ( $t$ ) de 40 horas (tiempo mínimo estable de acuerdo al Modelo Factorial Parcial Fraccional), mediante la manipulación de la recirculación interna ( $Q_{int}$ ), recirculación de lodos ( $Q_{sl}$ ), gasto del aire del tercer y último reactor aeróbico ( $Q_{air-3}$ ) y gasto de alimentación a la planta ( $Q_{in}$ ) como funciones del tiempo, para siempre mantener la descarga de la planta dentro de la norma (Tabla 2.6).

En general, la ecuación de la función objetivo se define de acuerdo a la (Ec. 3-4):

$$\min \Phi = \int_0^{t_f} \left\{ \alpha_i (z(t) - z_{des}(t))^2 + \alpha_{i+1} (u(t) - u_{des}(t))^2 \right\} dt \quad (3-4)$$

siendo  $t_f$  el tiempo final del proceso que corresponde aproximadamente al doble del tiempo de residencia de la planta (40 horas),  $\alpha_i$  y  $\alpha_{i+1}$  son los factores peso utiliza-

dos para preponderar la importancia de cada una de las variables de estado y manipuladas involucradas en la función  $\Phi$ , respectivamente,  $z_{des}$  es el valor de la variable de estado de la transición final o deseada y  $u_{des}$  es el valor de la variable manipulada de la transición final o deseada.

En particular, como se mencionó anteriormente, se desea minimizar la contaminación en el efluente en un tiempo determinado  $t$  para cada una de las políticas óptimas de operación (Sección 3.3). Por consiguiente, se establece una función objetivo para cada una de ellas. El término común a éstas es el que se define en la (Ec. 3-5):

$$\begin{aligned} \alpha_i (z(t) - z_{des}(t))^2 = & \alpha_1 (TSS_e(t) - TSS_{e,des}(t))^2 + \alpha_2 (COD_e(t) - COD_{e,des}(t))^2 \\ & + \alpha_3 (BOD_e(t) - BOD_{e,des}(t))^2 + \alpha_4 (TKN_e(t) - TKN_{e,des}(t))^2 \\ & + \alpha_5 (NO_e(t) - NO_{e,des}(t))^2 + \alpha_6 (Ntot_e(t) - Ntot_{e,des}(t))^2 \\ & + \alpha_7 (Snh_e(t) - Snh_{e,des}(t))^2 \end{aligned} \quad (3-5)$$

donde están involucradas todas las variables de medición de las concentraciones de descarga de la planta (variables de estado) y cuyos valores deben cumplir con las normas.

Por otra parte, en la Tabla 3.29 se desarrolla el segundo término de la (Ec. 3-4) para cada una de las políticas de operación definidas donde se involucraron a las variables manipuladas.

La (Ec. 3-5) junto con la Tabla 3.29, conforman la ecuación de la función objetivo correspondiente a cada una de las políticas óptimas de operación de acuerdo con la forma de la (Ec. 3-4). Los valores de  $\alpha_i$  y  $\alpha_{i+1}$  son la unidad para cada una de las políticas óptimas de operación establecidas.

### Solución numérica de la Función Objetivo.

Las ecuaciones diferenciales planteadas en el Modelo *ASM1* y el de Takács pueden transformarse en ecuaciones algebraicas no lineales mediante un método de discretización como colocación ortogonal y diferencias finitas, entre otras [Chen, J., *et al.*, 2002].

**Tabla 3.29.** Desarrollo del término  $\alpha_{i+1} (u(t) - u_{des}(t))^2$  para cada una de las políticas óptimas de operación definidas para la planta "Simulation Benchmark".

POLÍTICA ÓPTIMA DE OPERACIÓN	VARIABLES MANIPULADAS	DESARROLLO DEL TÉRMINO
I	$Q_{in}, Q_{int} \text{ y } Q_{sl}$	$\alpha_8 (Q_{in}(t) - Q_{in,des}(t))^2 + \alpha_9 (Q_{int}(t) - Q_{int,des}(t))^2 + \alpha_{10} (Q_{sl}(t) - Q_{sl,des}(t))^2$
II	$Q_{sl}$	$\alpha_8 (Q_{sl}(t) - Q_{sl,des}(t))^2$
III	$Q_{int}, Q_{sl} \text{ y } Q_{air\_3}$	$\alpha_8 (Q_{int}(t) - Q_{int,des}(t))^2 + \alpha_9 (Q_{sl}(t) - Q_{sl,des}(t))^2 + \alpha_{10} (Q_{air\_3}(t) - Q_{air\_3,des}(t))^2$
IV	$Q_{int}, Q_{sl} \text{ y } Q_{air\_3}$	$\alpha_8 (Q_{int}(t) - Q_{int,des}(t))^2 + \alpha_9 (Q_{sl}(t) - Q_{sl,des}(t))^2 + \alpha_{10} (Q_{air\_3}(t) - Q_{air\_3,des}(t))^2$
V	$Q_{int} \text{ y } Q_{sl}$	$\alpha_8 (Q_{int}(t) - Q_{int,des}(t))^2 + \alpha_9 (Q_{sl}(t) - Q_{sl,des}(t))^2$

En cuanto a los métodos de integración aproximados más usuales, éstos están basados en las llamadas Fórmulas de Cuadratura, cuya construcción está íntimamente relacionada con la interpolación y la ortogonalidad como lo son las cuadraturas Gaussianas, de Gauss-Lobatto y de Gauss-Radau [Daruis-Luis, M. L., 2001].

El método de discretización empleado en este estudio para la solución del modelo de optimización de cada una de las políticas óptimas de operación fue la *Colocación Ortogonal sobre Elementos Finitos* y para aproximar la integral se utilizó la *Cuadratura de Radau*.

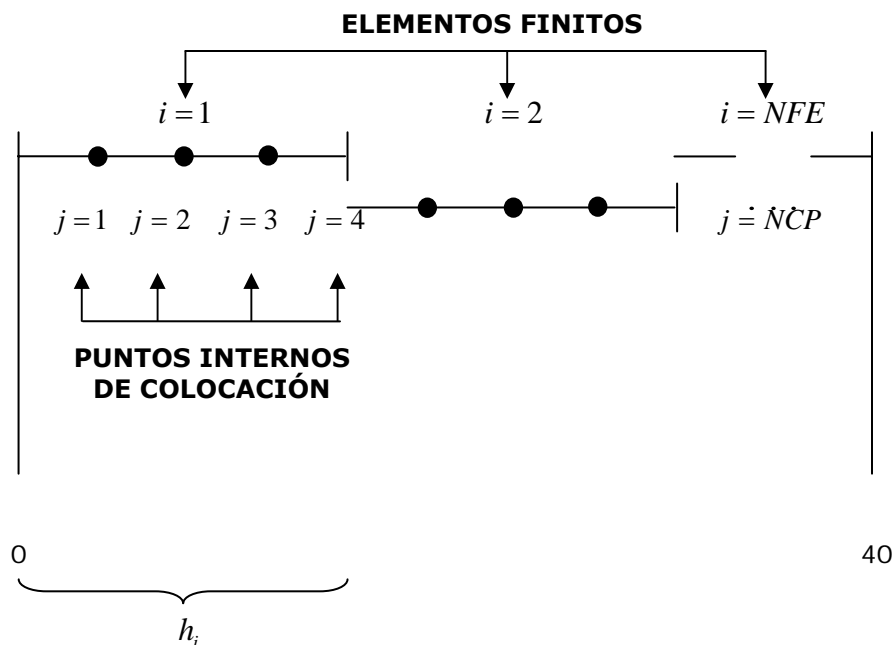
Cabe mencionar que el método de colocación ortogonal tiene, principalmente, las siguientes dos ventajas: (i) la función de aproximación a la solución involucra el empleo de polinomios ortogonales y que son continuos sobre todo el espacio de solución y (ii) los puntos de colocación son simplemente las raíces de uno de estos polinomios ortogonales para evitar una elección pobre de los puntos de colocación. Lo anterior ha provocado que esta técnica se haya utilizado en otras investigaciones tales como las de Cervantes, A.M., *et al.* (2000) y Lee, T.T., *et al.* (2005) que desarrollaron algoritmos basados en esta aproximación para modelar ya sea comportamientos en estado estacionario o dinámico de un proceso de lodos activados (ASP).

Para el presente estudio, solamente tres puntos internos de colocación ortogonal (*Number of Collocation Points, NCP*) en el interior de cada elemento y 40 regiones o elementos finitos equidistantes (*Number of Finite Elements, NFE*) fueron requeridos para obtener un perfil exacto de las variables de estado en el espacio de solución definido en un tiempo máximo de 40 horas. Esto se ilustra en la Fig. 3.15.

La (Ec. 3-4), de acuerdo a los métodos empleados se transforma en:

$$\min \Phi \approx \sum_{i=1}^{NFE} h_i \sum_{j=1}^{NCP} W_j \left[ \alpha_i (z(t) - z_{des}(t))^2 + \alpha_{i+1} (u(t) - u_{des}(t))^2 \right] \quad (3-6)$$

donde  $h_i$  es la longitud del elemento finito y  $W_j$  son los pesos de la cuadratura de Radau. Esta ecuación es la que se emplea como función objetivo para la optimización dinámica y está sujeta a ciertas restricciones que a continuación se describen.



**Fig. 3.15.** Definición del espacio de solución de acuerdo al método de discretización de colocación ortogonal y al método de integración de cuadratura de Radau.

## 2. Restricciones del Problema.

Existen restricciones para: (i) balance de materia, (ii) continuidad entre elementos finitos, (iii) primeras derivadas de las concentraciones y (iv) valores iniciales.

### (i) Balance de Materia.

Los valores de las concentraciones en cada uno de los puntos discretizados ( $C_{ij}$ ) es aproximada en su representación en base monomial de acuerdo a la (Ec. 3-7):

$$C_{ij} = C_i^0 + h_i \cdot t_f \cdot \sum_{k=1}^{NCP} A_{kj} \dot{C}_{ik} \quad (3-7)$$

donde  $C_{ij}$  representa a cada una de las 11 concentraciones disponibles en cada una de las zonas del bioreactor de la planta del "Simulation Benchmark" ( $X_{BH}$ ,  $X_{BA}$ ,  $X_S$ ,  $X_{ND}$ ,  $X_{IP}$ ,  $S_0$ ,  $S_I$ ,  $S_{NH}$ ,  $S_{ND}$ ,  $S_{NO}$ ,  $S_S$  y  $S_{ALK}$ ) y de las 16 concentraciones del sedimentador secundario ( $X_{SS,i}$  donde  $i = 1$  hasta 10,  $S_0$ ,  $S_I$ ,  $S_{NH}$ ,  $S_{ND}$ ,  $S_{NO}$ ,

$S_S$  y  $S_{ALK}$ ),  $C_i^0$  son las concentraciones al inicio de cada elemento,  $A_{kj}$  es la matriz de colocación y  $\dot{C}_{ij}$  son las primeras derivadas de las concentraciones.

Es importante aclarar que en el primer elemento  $C_1^0$ , representa la concentración inicial especificada. Además en esta formulación  $t_f$  establece el tiempo de transición deseado y  $h_i$  la longitud de cada elemento finito que equivale a:

$$h_i = t_f \cdot \left( \frac{1}{NFE} \right) \quad (3-8)$$

### (ii) Continuidad entre Elementos Finitos de las Concentraciones.

Únicamente las variables de estado deben ser continuas cuando se pasa de un elemento al siguiente. Las variables algebraicas y manipuladas pueden tener un comportamiento discontinuo entre los elementos finitos adyacentes; por ello, en estas variables no se requieren restricciones de continuidad.

Para obligar que los perfiles de las concentraciones sean continuos, todos los elementos en su inicio se aproxima, en su representación en base monomial, de acuerdo a la (Ec. 3-9):

$$C_i^0 = C_{i-1}^0 + h_{i-1} \cdot t_f \cdot \sum_{k=1}^{NCP} A_{k,NCP} \dot{C}_{i-1,k} \quad (3-9)$$

donde  $i = 2, \dots, NFE$  y  $C_i^0$  es para cada una de las 11 concentraciones en cada una de las zonas del bioreactor y para las 16 concentraciones del sedimentador secundario, como ya se especificó anteriormente.

### (iii) Primeras Derivadas de las Concentraciones.

Las primeras derivadas de las concentraciones discretas ( $\dot{C}_{ij}$ ), tanto de cada una de las cinco zonas del bioreactor como del sedimentador secundario, son obtenidas de acuerdo con el Modelo *ASM1* (Ec. 2-3 a Ec. 2-9, junto con las Tablas 2.11 y 2.12) y Takács (Ec. 2-8 a Ec. 2-21) definidos en el *Capítulo 2*.



**(iv) Valores iniciales.**

La especificación de los valores iniciales tanto de las variables de estado y las manipuladas son requeridas, por lo que:

$$C_i^0 = C_{init} \tag{3-10}$$

$$u_i^0 = u_{init} \tag{3-11}$$

donde  $C_i^0$  representa el valor inicial de cada una de las 11 concentraciones de cada una de las zonas del bioreactor, así como de las 16 concentraciones del sedimentador secundario,  $C_{init}$  es el valor del estado estacionario del que se parte para realizar la transición deseada,  $u_i^0$  representa el valor inicial de cada una de las variables manipuladas ( $Q_{in}$ ,  $Q_{int}$ ,  $Q_{sl}$ , y  $Q_{air\_3}$ ) y que varían de acuerdo a la política óptima de operación en estudio, como se observó en la Tabla 3.29.

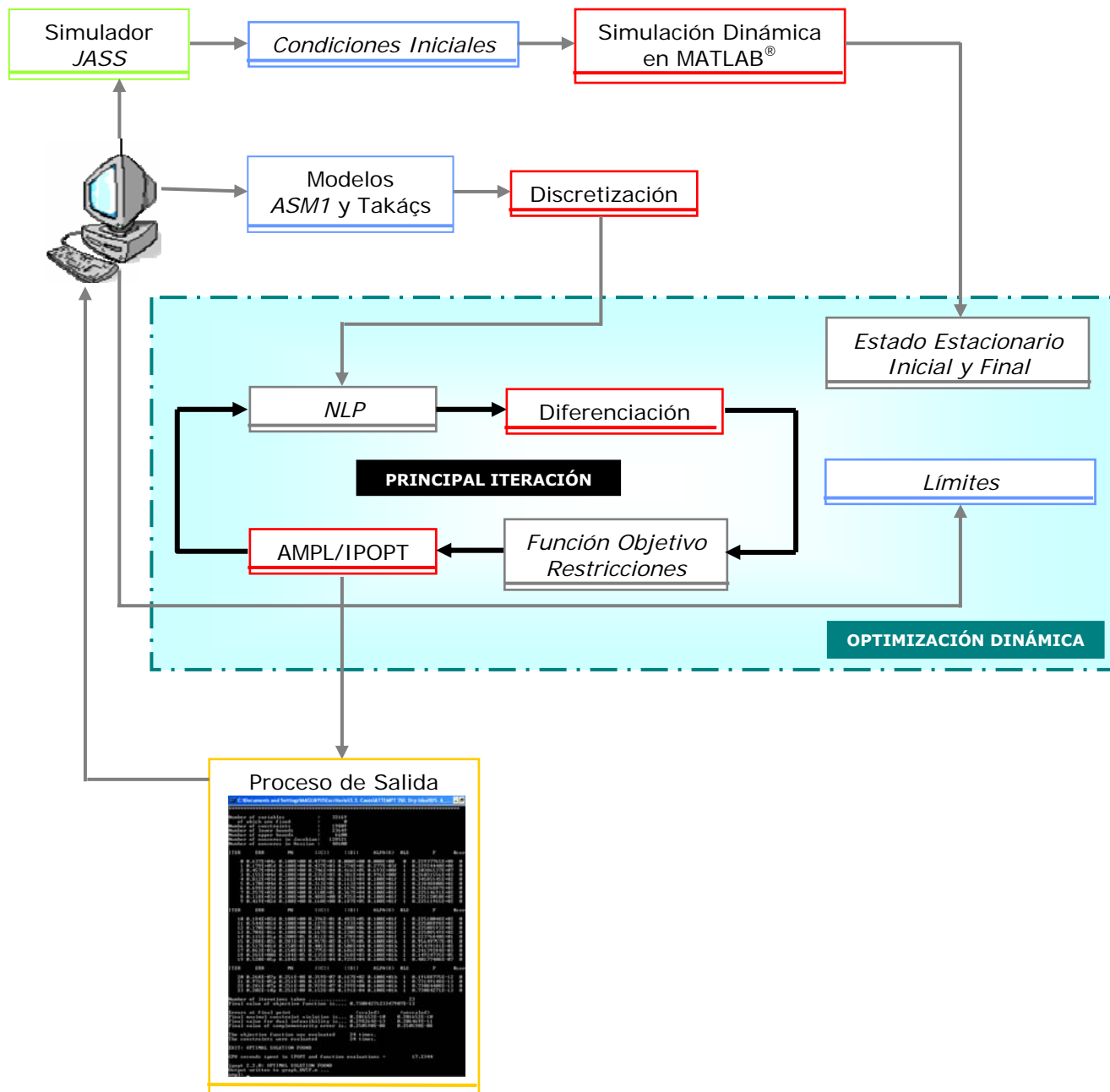
**3. Límites del Problema.**

El límite inferior para todas las variables de gasto, concentraciones y velocidades de sedimentación, con excepción de las velocidades de reacción, fue que cumplieran con que fueran valores mayores a cero. En cuanto al límite superior, éste se estableció dependiendo de la política óptima de operación, del 30 al 50 por ciento en exceso del valor de la condición del estado estacionario inicial.

En cuanto a las variables de la calidad del agua del efluente se limitaron de acuerdo a lo establecido en las normas de descarga; por ello,  $N_{tot_e} < 18 \text{ g N/m}^3$ ,  $Snh_e < 4 \text{ g N/m}^3$ ,  $TSS_e < 30 \text{ g TSS/m}^3$ ,  $COD_e < 100 \text{ g COD/m}^3$  y  $BOD_e < 10 \text{ g BOD/m}^3$ .

**4. Estructura de solución y software empleado.**

El diagrama de flujo de la estructura de solución para la optimización dinámica simultánea de la planta de tratamiento de aguas residuales por desnitrificación ("*Simulation Benchmark*") se encuentra ilustrado en la Fig. 3.16.



**Fig. 3.16.** Estructura de solución y *software* empleado para la optimización dinámica simultánea de la planta de tratamiento de aguas residuales por desnitrificación ("Simulation Benchmark"). Basado en Lang, Y.D., *et al.* (2007).

En la Fig. 3.16 se muestra que se parte del simulador *JASS* para obtener las condiciones iniciales con las que se dará comienzo la simulación dinámica, realizada con el programa desarrollado en esta investigación en *MATLAB*®, con los Modelos *ASM1* y *Takács*, para poder establecer los valores de las concentraciones de la planta en los

estados estacionarios. La simulación dinámica determina el estado estacionario inicial y final de acuerdo con las políticas óptimas de operación planteadas para la transición deseada, al establecer un tiempo muy prolongado.

Lo anterior junto con los límites y la discretización, dan lugar a la optimización dinámica mediante la iteración cíclica del problema de programación no lineal (*NLP*), que se diferencia a través del establecimiento de una función objetivo sujeta a restricciones específicas para resolverse mediante el "solver" llamado *IPOPT* (*Interior Point Optimizer*), empleando la interfase *AMPL* (*A Mathematical Programming Language*) [Richards, A., *et al.*, 2005]. Si el programa encuentra una solución óptima, lo manifiesta en la pantalla.

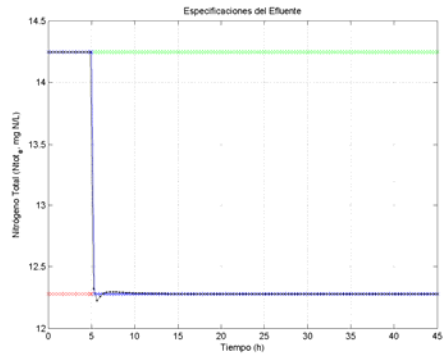
### 5. Aplicación a la planta del "Simulation Benchmark".

Con base en lo antes planteado, se ejecutó el método de optimización dinámica simultáneo para las políticas óptimas I a V definidas en la *Sección 3.3* para la planta del "Simulation Benchmark".

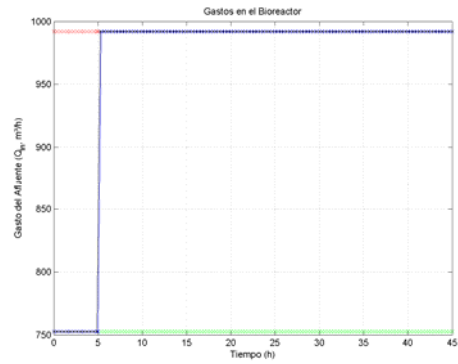
En las Fig. 3.17 a 3.21 se encuentran los comportamientos a través del tiempo, tanto de las principales variables que definen la calidad del efluente ( $N_{tot_e}$ ,  $Snh_e$ ,  $TSS_e$  y  $COD_e$ ) como de las variables manipuladas ( $Q_{in}$ ,  $Q_{int}$ ,  $Q_{sl}$  y  $Q_{air_3}$ ) de cada una de las políticas óptimas de operación de la planta del "Simulation Benchmark".

En cada una de las gráficas que contienen las Fig. 3.17 a Fig. 3.21, se parte de un estado estacionario inicial (línea verde) que se mantiene por 5 horas, para luego presentarse una perturbación (ya sea por un cambio de condición climática o simplemente por la operación de la planta) con la finalidad de llegar a un estado estacionario final (línea roja) y así visualizar el comportamiento de las variables durante un tiempo de 40 horas mediante la simulación dinámica (línea negra) y compararla con la optimización dinámica obtenida (línea azul) con el comportamiento tipo escalón, mismo que se presentó aún invirtiendo las condiciones; es decir, tomando el estado final como inicial y viceversa.

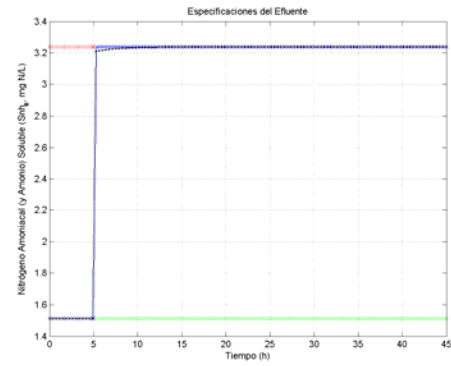
$N_{tot_e}$



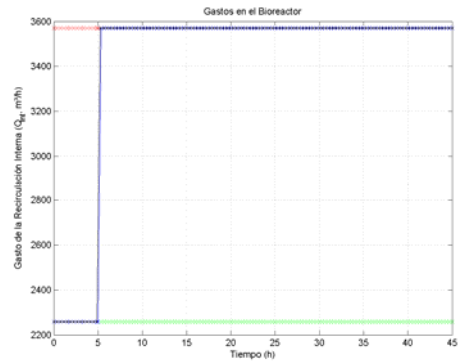
$Q_m$



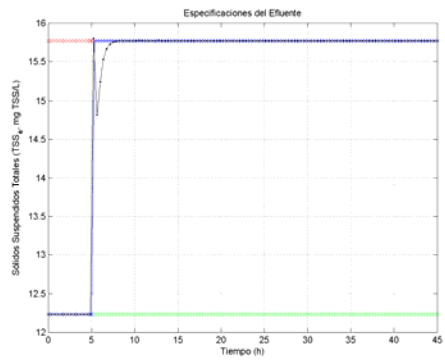
$Snh_e$



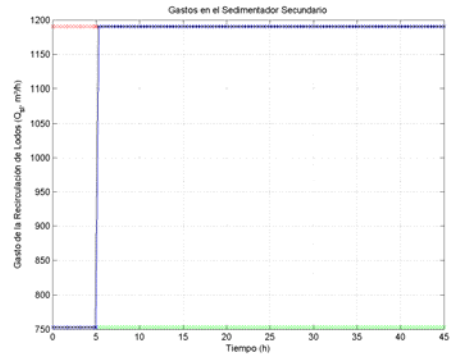
$Q_{int}$



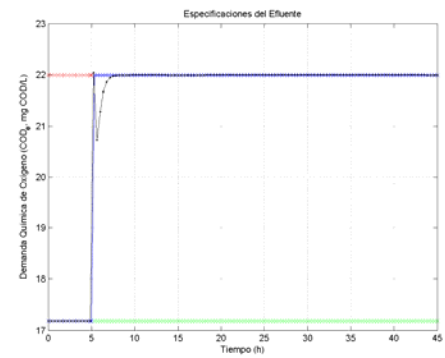
$TSS_e$



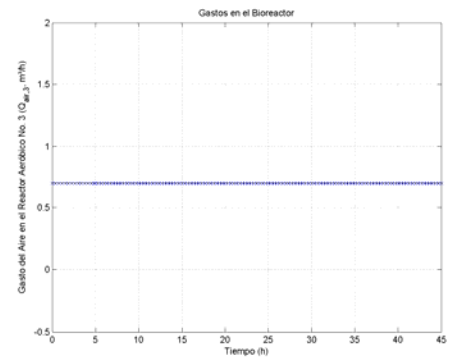
$Q_d$



$COD_e$

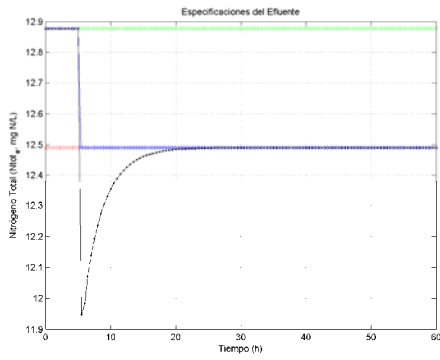


$Q_{air\_3}$

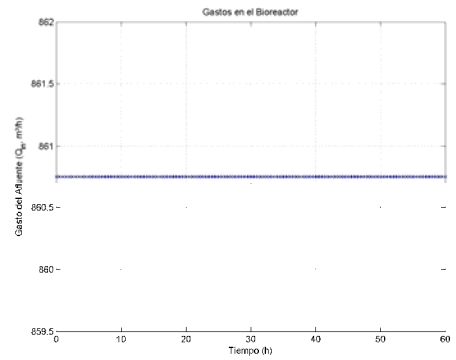


**Fig. 3.17.** Comparación de la simulación dinámica con la optimización dinámica simultánea de la Política I: Sequía-Lluvia.

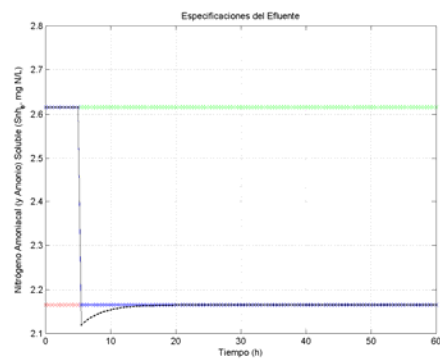
$N_{tot}_e$



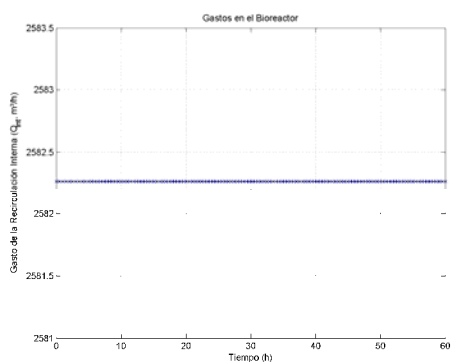
$Q_{in}$



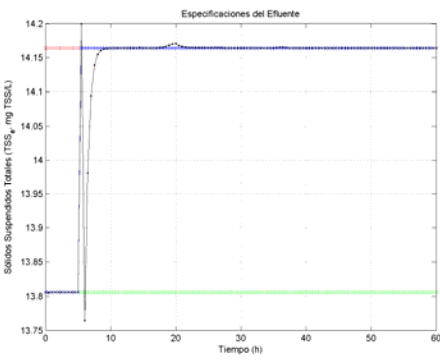
$Snh_e$



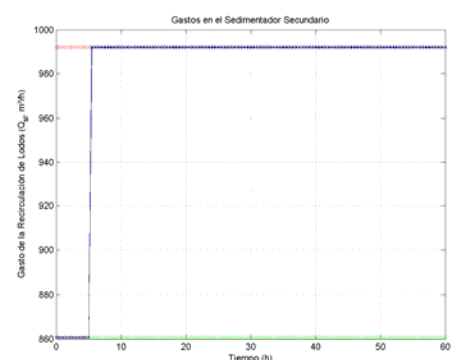
$Q_{int}$



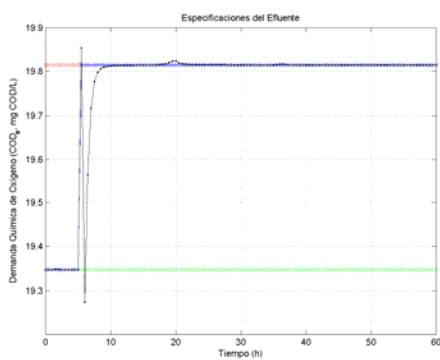
$TSS_e$



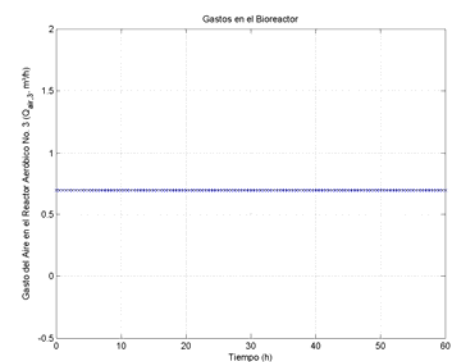
$Q_{sl}$



$COD_e$

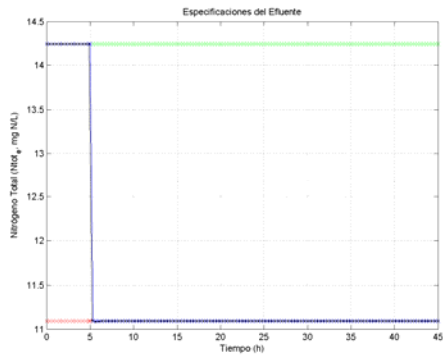


$Q_{atr\_3}$

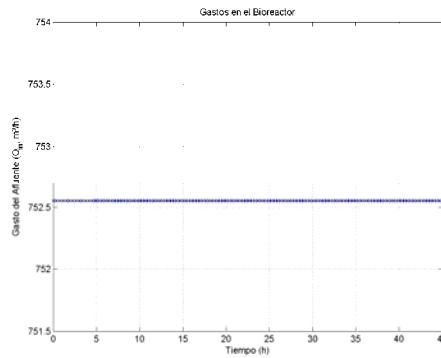


**Fig. 3.18.** Comparación de la simulación dinámica con la optimización dinámica simultánea de la Política II: Tormenta.

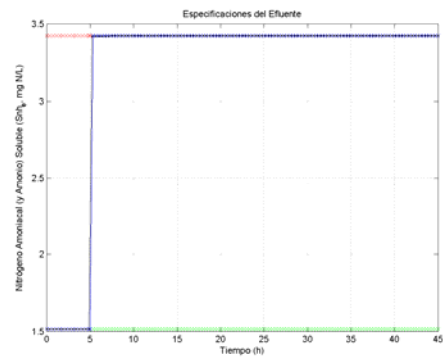
$N_{tot_e}$



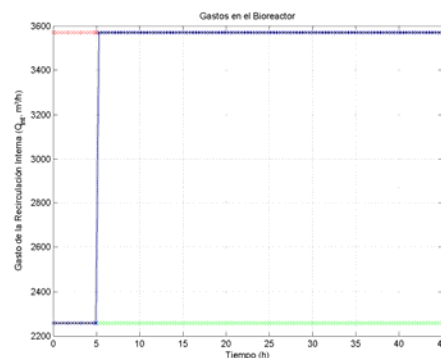
$Q_m$



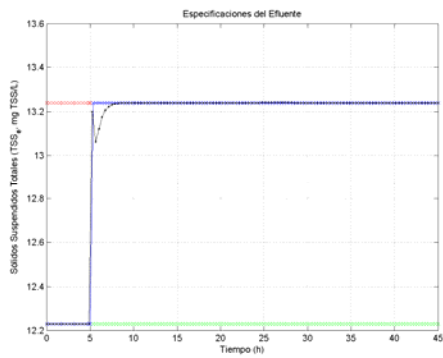
$Snh_e$



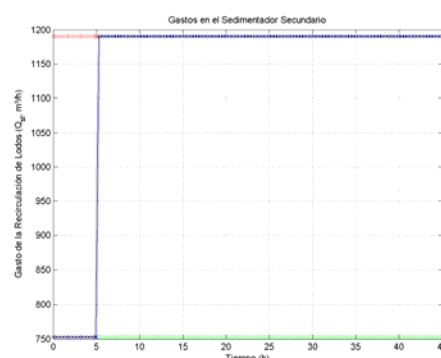
$Q_{int}$



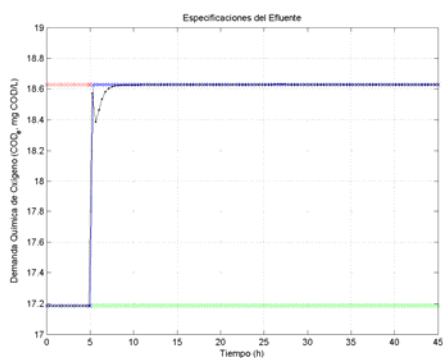
$TSS_e$



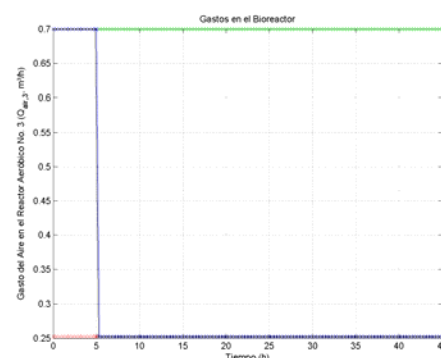
$Q_{sl}$



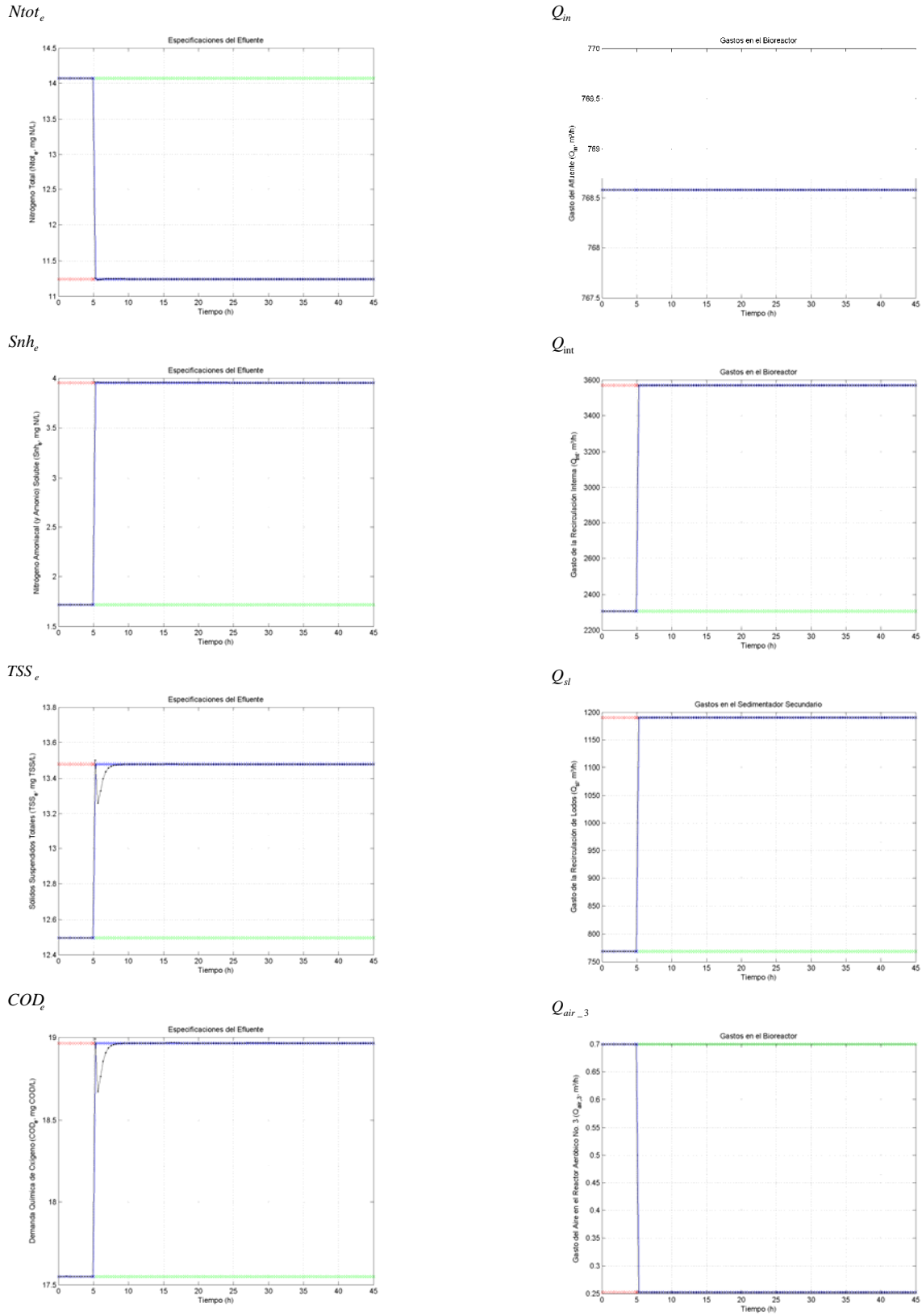
$COD_e$



$Q_{air_3}$

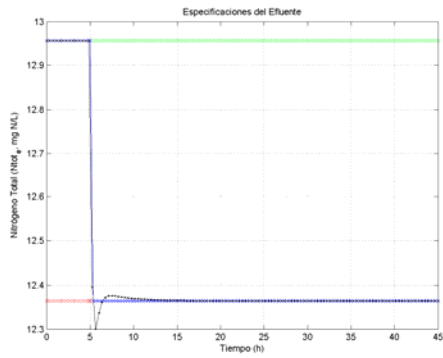


**Fig. 3.19.** Comparación de la simulación dinámica con la optimización dinámica simultánea de la Política III: Sequía.

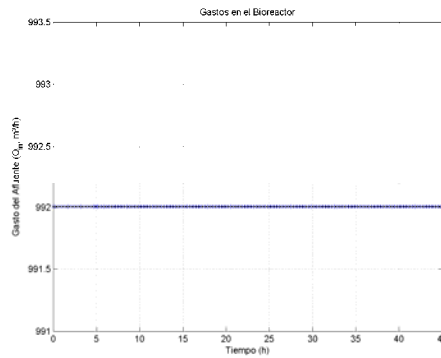


**Fig. 3.20.** Comparación de la simulación dinámica con la optimización dinámica simultánea de la Política IV: Normal.

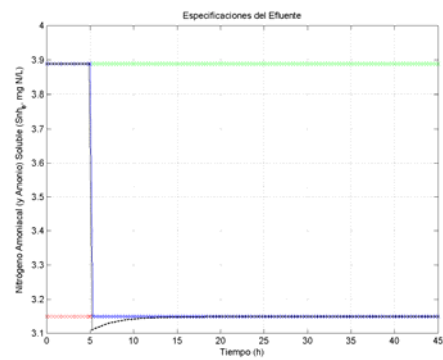
$N_{tot_e}$



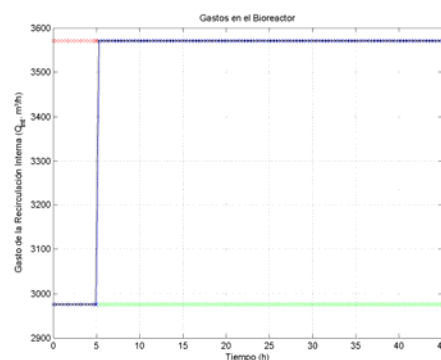
$Q_m$



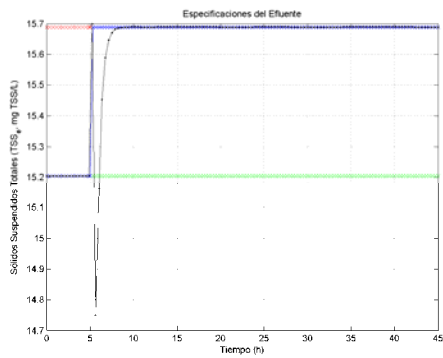
$Snh_e$



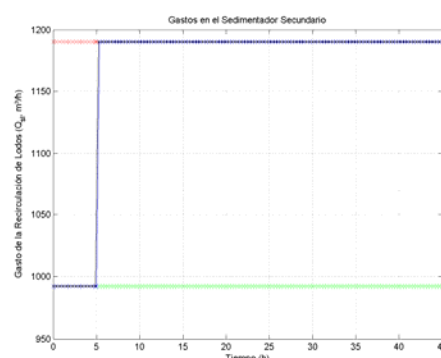
$Q_{int}$



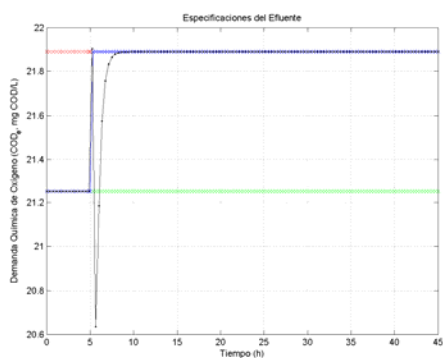
$TSS_e$



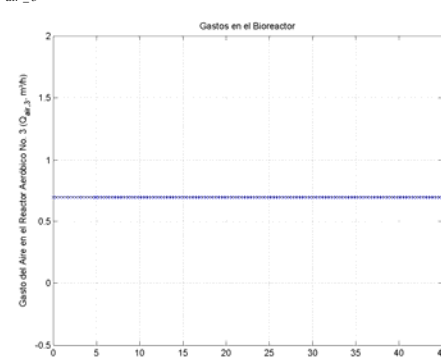
$Q_{sl}$



$COD_e$



$Q_{air_3}$



**Fig. 3.21.** Comparación de la simulación dinámica con la optimización dinámica simultánea de la Política V: Lluvia.



En las gráficas de las Fig. 3.17 a Fig. 3.21 puede observarse que las principales variables de la calidad del agua del efluente ( $N_{tot_e}$ ,  $Snh_e$ ,  $TSS_e$  y  $COD_e$ ), cumplen con las especificaciones límite (Tabla 2.6). En el caso de la política óptima de operación Normal,  $Snh_e$  se encuentra muy cercana al valor límite de  $4 \text{ g N/m}^3$ ; por ello, se considera que esta concentración es de suma importancia en cualquier cambio que se realice a la planta por su cercanía a los valores límites de descarga.

Para la *simulación dinámica* de las cinco políticas óptimas de operación, todas coincidieron en que alcanzaron el estado estacionario final o deseado, después de manifestar el cambio mediante una baja de la concentración para nuevamente estabilizarse. Esta estabilización se da a las 15 horas para las políticas de Sequía-Lluvia, Sequía y Normal, a las 20 horas para Lluvia y a las 50 horas para Tormenta.

En cuanto a las variables manipuladas,  $Q_{in}$  se mantuvo constante excepto para Sequía-Lluvia, mientras que  $Q_{int}$ ,  $Q_{sl}$  y  $Q_{air\_3}$  cambiaron de un estado estacionario a otro dependiendo de la política que se trataba; pero en todas se observó un cambio súbito o tipo escalón que conseguía el estado deseado. Por lo tanto, el comportamiento dinámico de la planta estuvo de acuerdo al deseado.

Para la *optimización dinámica*, en cada una de las gráficas de las Fig. 3.17 a Fig. 3.21 se observó un comportamiento tipo escalón de las variables de la calidad del agua, a excepción de aquellas variables manipuladas que se consideraron constantes en cada una de las políticas óptimas de operación, que son una línea recta con pendiente igual a cero.

El comportamiento dinámico de las variables manipuladas junto con la optimización dinámica de éstas fue idéntico, por lo que se traslaparon las gráficas. Esto se debió a que el ajuste de los gastos manipulados aparentemente es instantáneo, lo cual es físicamente difícil de obtener; pero debido a que el cambio que se realizó de los gastos no es considerable, se estimó que se pueden alcanzar rápidamente.

Si se compara la optimización dinámica con respecto a la simulación dinámica, se puede visualizar que a un tiempo menor se puede obtener un valor de la variable

menor o igual al simulado; por lo que se cumple con el objetivo de minimizar la contaminación del efluente en un tiempo menor al de estabilización.

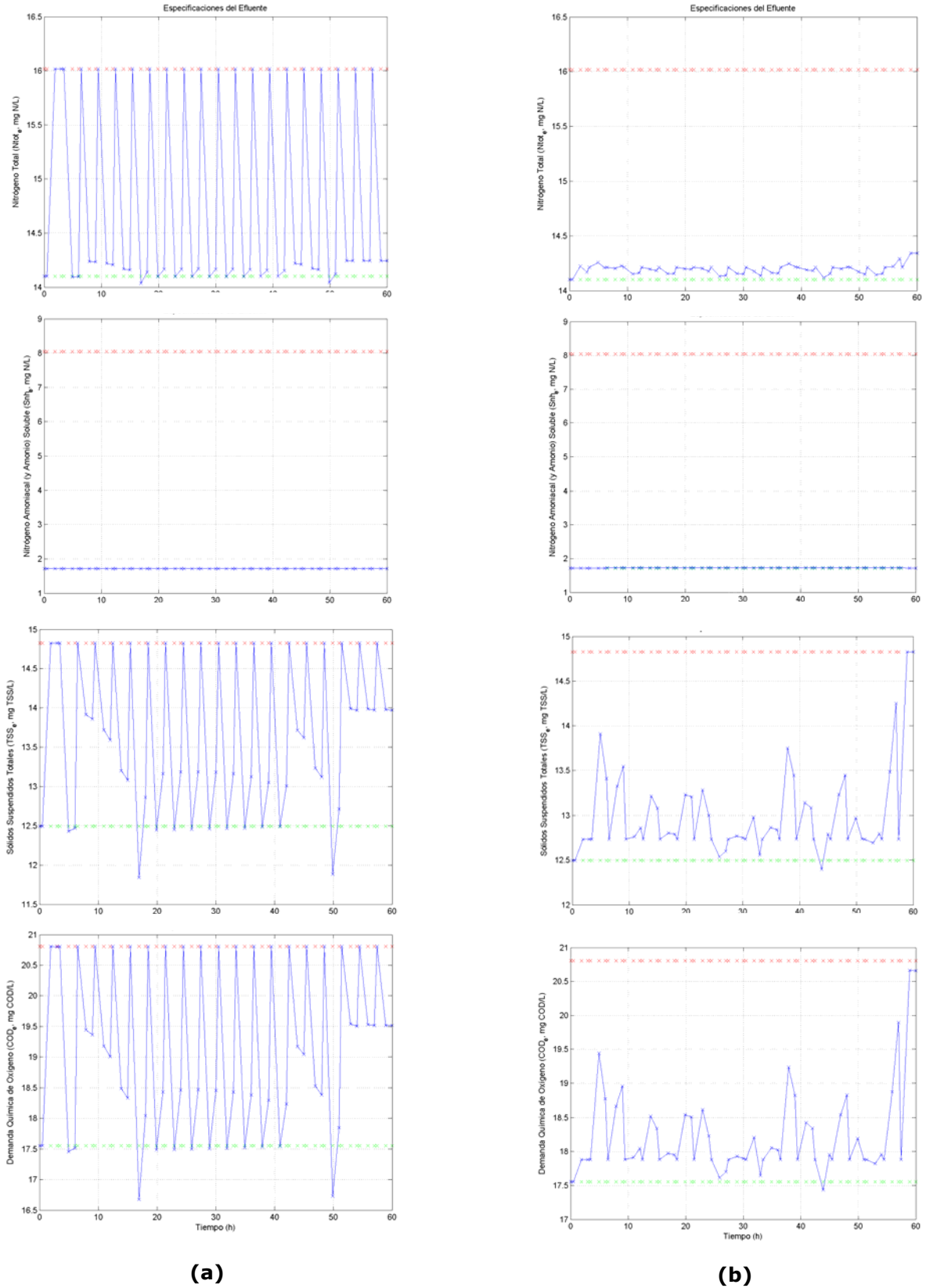
Es importante destacar que el comportamiento tipo escalón de la optimización dinámica se estima, sea debido al establecimiento de la mejor combinación de variables que se obtuvo y aplicó, mediante la investigación paralela donde se empleó el diseño de experimentos (*DoE*), ya que con él se determinó una menor concentración en la descarga, principalmente de nitrógeno. Esto se realizó previamente a la aplicación de la técnica de optimización dinámica; por lo que se está optimizando lo que primeramente se había optimizado y por ende, el cambio súbito o tipo escalón.

Otra estimación es que la planta se encuentra operando en un intervalo óptimo; pero esto sólo se podría verificar mediante un diagrama de bifurcación de la planta.

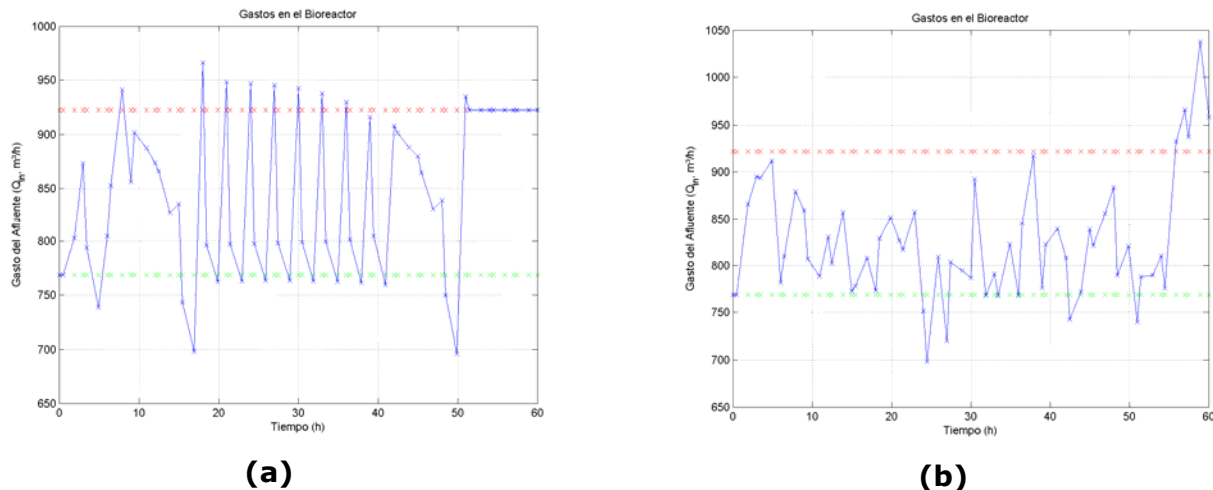
Los resultados obtenidos, que se describieron anteriormente, son favorables para la operación de la planta pero esto se logró sólo por la aplicación del *DoE*, que permitió obtener una solución óptima, principalmente para  $N_{tot_e}$  y  $Snh_e$ .

Por el contrario, sin la aplicación del *DoE* se presentaron dificultades. En la Fig. 3.22 se muestran dos de las múltiples pruebas que se ejecutaron para obtener una solución óptima.

En la Fig. 3.22a, se consideró que la variable manipulada  $Q_{in}$  tenía una  $\alpha_i$  de  $10^4$ ; las variables a controlar como  $N_{tot_e}$ ,  $Snh_e$ ,  $TSS_e$ ,  $COD_e$ ,  $BOD_e$ ,  $TKN_e$  y  $NO_e$ , tenían valores de  $10^0$ ,  $10^0$ ,  $10^0$ ,  $10^0$ ,  $10^0$ ,  $10^6$  y  $10^8$ , respectivamente. Ninguna variable de control llegó a su valor deseado; por ejemplo  $TSS_e$  tuvo una diferencia de 15 por ciento; sin embargo,  $Q_{in}$  llegó a su valor deseado en un tiempo de 52 horas como se ilustra en la Fig. 3.23a. El comportamiento fue oscilatorio en forma de "dientes de sierra" y el número de elementos finitos (*NFE*) utilizado fue de 20 y el tiempo de 60 horas.



**Fig. 3.22.** Principales parámetros de la calidad del agua. Pruebas ejecutadas para la obtención de la condición Normal de operación óptima.



**Fig. 3.23.** Variable manipulable  $Q_{in}$ . Pruebas ejecutadas para la obtención de la condición Normal de operación óptima.

En el caso de la Fig. 3.22b se consideró que la variable manipulada  $Q_{in}$  tuviera una  $\alpha_i$  de  $10^4$ ; las variables a controlar como  $N_{tot_e}$ ,  $Snh_e$ ,  $TSS_e$ ,  $COD_e$ ,  $BOD_e$ ,  $TKN_e$  y  $NO_e$ , tenían valores de  $10^4$ ,  $10^0$ ,  $10^8$ ,  $10^7$ ,  $10^6$ ,  $10^6$  y  $10^5$ , respectivamente. Con esta combinación de pesos se alcanzó el valor deseado para  $TSS_e$  y prácticamente para  $COD_e$ ; pero tanto  $N_{tot_e}$  como  $Snh_e$ , que son variables muy importantes en este estudio, quedan un 10 y un 72 por ciento alejadas del deseado para un  $NFE$  de 20 y un tiempo de 60 horas.  $Q_{in}$  queda alejado del deseado un 9 por ciento, como se muestra en la Fig. 3.20b.

Con lo anterior se demuestra que, a pesar de haber realizado diferentes pruebas, no se logró obtener una respuesta suave que alcanzara el valor deseado, sino hasta el momento de emplear los resultados de la investigación paralela del Diseño de Experimentos aplicado a la planta del "Simulation Benchmark".

# C o n c l u s i o n e s

Se seleccionó una planta prototipo de tratamiento de aguas que considerara la remoción de nitrógeno tipo Ludzack–Ettinger Modificado, la cual es conocida como "*Simulation Benchmark*" y que ha sido mundialmente estudiada.

Los modelos, internacionalmente reconocidos, que representan el proceso de remoción de nutrientes (*BNR*) y que utiliza el "*Benchmark*" son: el Modelo *ASM1* para el bio-reactor y el Modelo de Takács para el sedimentador secundario.

Para el Modelo de Takács se realizó un ajuste en las ecuaciones de velocidad de sólidos sedimentables y flux de sólidos por gravedad, ya que originalmente presentan una discontinuidad a través de la función "max" y "min", respectivamente, con las que están definidas; por lo que se transformaron en funciones hiperbólicas, las cuales muestran continuidad.

Se realizó un estudio de acuerdo a la teoría de transferencia de masa y a diferentes representaciones matemáticas que pudieran reproducir el fenómeno de transferencia de masa del oxígeno al agua para el caso de estudio. La ecuación resultante fue el Modelo Lineal.

La planta del "*Benchmark*" se codificó en lenguaje MATLAB<sup>®</sup> para reproducir las condiciones climáticas de Sequía, Normal, Tormenta y Lluvia para analizar su comportamiento durante un tiempo de proceso determinado. Este programa se validó con los reportado con el simulador *JASS* y con el *COST* [Copp, J.B., 2000]. La diferencia entre ellos fue del 0.3 por ciento.

En la aplicación del diseño de experimentos (*DoE*) en el "*Benchmark*", las variables seleccionadas fueron ocho, cuatro no controlables: gasto de alimentación del agua residual ( $Q_{in}$ ), sustrato sólido lentamente biodegradable ( $X_s$ ), nitrógeno orgánico biodegradable soluble ( $S_{ND}$ ) y nitrógeno amoniacal soluble ( $S_{NH}$ ); y cuatro controlables: gasto externo de la fuente de carbono ( $Q_{ext}$ ), gasto de recirculación interna del bioreactor ( $Q_{int}$ ), gasto de recirculación de lodos ( $Q_{sl}$ ) y gasto del aire del tercer y último reactor aeróbico ( $Q_{air\_3}$ ).

El seguimiento de las respuestas para el *DoE* se realizó a través de la simulación de la calidad del agua del efluente mediante la determinación de: nitrógeno total ( $N_{tot_e} < 18 \text{ g N/m}^3$ ), nitrógeno amoniacal soluble ( $Snh_e < 4 \text{ g N/m}^3$ ), sólidos suspendidos totales ( $TSS_e < 30 \text{ g TSS/m}^3$ ), demanda química de oxígeno ( $COD_e < 100 \text{ g COD/m}^3$ ), demanda bioquímica de oxígeno ( $BOD_e < 10 \text{ g BOD/m}^3$ ), nitrógeno Kjeldahl total  $TKN_e$  ( $\text{g N/m}^3$ ) y nitrógeno como nitrato-nitrito soluble  $NO_e$  ( $\text{g N/m}^3$ ). La suma de las últimas dos variables debía ser menor a  $N_{tot_e}$ .

Con el propósito de encontrar el mejor ajuste de factores que minimizaran las variables respuesta (principalmente  $N_{tot_e}$ ) y para obtener la respuesta óptima de una manera robusta, se utilizó el Modelo Taguchi, resultando diversos diseños que se estudiaron y evaluaron para finalmente definir las cinco políticas óptimas de operación que se propusieron para el "*Benchmark*". En la Tabla C.1 se resumen los valores finales de las variables controlables con las que se obtuvieron las condiciones óptimas.

El Modelo Factorial Parcial Fraccional con repeticiones, se utilizó para obtener el tiempo mínimo estable en el proceso para alcanzar el menor valor de las variables respuesta (principalmente  $N_{tot_e}$ ) en un intervalo corto de operación, a través de un modelo que predijera con un nivel de confianza del 95 por ciento. Este resultó en 39 horas y se estableció como el tiempo de estudio para optimizar el "*Benchmark*".

**Tabla C.1.**

Resumen de las condiciones óptimas para las cinco políticas de operación de la planta del "Simulation Benchmark" <sup>(1)</sup>.

VARIABLES CONTROLABLES	CONDICIONES ÓPTIMAS				
	Sequía	Normal	Tormenta	Lluvia	Sequía-Lluvia
$Q_{ext}$ , L/h	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
$Q_{int}$ , m <sup>3</sup> /h	3571.2270	3571.2270	2582.2625	3571.2270	3571.2270
$Q_{sl}$ , m <sup>3</sup> /h	1190.4090	1190.4090	992.0075	1190.4090	1190.4090
$Q_{air\_3}$ , m <sup>3</sup> /h	0.2520	0.2520	0.7000	0.7000	0.7000

(1) Los valores en estilo cursiva son aquellos cambios que se realizaron a las condiciones de operación para obtener las condiciones óptimas.

El Modelo Factorial Parcial Fraccional sin repeticiones ni bloques, con un nivel de confianza del 95 por ciento, determinó los efectos que son significativos y no significativos sobre las variables respuesta. Además, se obtuvieron los diagramas de interacciones con los que se estimaron los efectos que se tenían si se aumentaba o disminuía alguno de los factores en el que se tenía un particular interés, principalmente para disminuir  $N_{tot_e}$ . Esto ayudó en la implementación de la optimización dinámica simultánea en la planta del "Simulation Benchmark".

El cumplimiento de las variables respuestas bajo las normas establecidas para las descargas del efluente resultó en que:

- (i) El orden de importancia de las variables controlables fue:  $Q_{in}$ ,  $Q_{sl}$ ,  $Q_{air\_3}$  y  $Q_{int}$ , principalmente,
- (ii) La fuente de carbono ( $Q_{ext}$ ) como metanol fuera cero en vez de 0.01 L/h como lo establece el "Benchmark", ya que la diferencia entre añadirlo y no hacerlo fue menor del 0.2% en la respuesta del nitrógeno total del efluente y por consiguiente, impacta en la disminución de costos y,
- (iii) El tiempo mínimo estable para obtener la calidad del agua en el efluente en un intervalo corto de operación fue de 39 horas, al cabo de las cuales se manifiesta una baja en el nitrógeno total ( $N_{tot_e}$ ); pero al seguir operando la planta, el

efluente puede encontrar a tiempos mayores (1599 horas) concentraciones mayores de diferentes parámetros de la calidad del agua como  $Snh_e$ ,  $TKN_e$  y  $NO_e$ , entre otros, por lo que se deberán monitorear para que no se salgan de la norma. Lo anterior depende de la condición climática en que esté operando la planta.

Las políticas óptimas de operación que se lograron diseñar con base en el  $DoE$ , fueron:

**Sequía a Lluvia.** Se consideró una condición extrema de la planta. Prácticamente todas las composiciones de entrada cambiaron (menor o igual), al igual que el gasto de entrada  $Q_{in}$  y se manipularon dos gastos, se aumentaron ( $Q_{int}$  y  $Q_{sl}$ , igual a  $3.6Q_{in,R}$  y  $1.2Q_{in,R}$ , respectivamente), mientras que  $Q_{air\_3}$  se mantuvo en la proporción de Sequía (Tabla C1). Esto resultó en una disminución de  $Ntot_e$  del 14 por ciento y de  $NO_e$  del 37 por ciento.

**Tormenta.** Para esta política resultó una disminución del 3 por ciento para  $Ntot_e$ , 18 por ciento para  $Snh_e$  y 9 por ciento para  $TKN_e$ . Todas las composiciones de entrada y el gasto de entrada fueron iguales, así como la recirculación de lodos (igual a  $3Q_{in,S}$ ). Se manipuló exclusivamente  $Q_{sl}$  (igual a  $1.15Q_{in,S}$ ), al aumentarlo (Tabla C1).

**Sequía.** Con esta política se propuso disminuir  $Ntot_e$  a pesar de que  $Snh_e$  aumentar considerablemente. Todas las composiciones y el gasto de entrada fueron iguales. Se manipularon tres gastos, dos se aumentaron ( $Q_{int}$  y  $Q_{sl}$ , igual a  $4.75Q_{in,D}$  y  $1.58Q_{in,D}$ , respectivamente) y uno se disminuyó ( $Q_{air\_3}$ , un 64 por ciento). Los valores de estas variables se encuentran en la Tabla C1.

Como resultados se obtuvo una disminución del 22 por ciento para  $Ntot_e$  y 47 por ciento para  $NO_e$ ; y un aumento para  $Snh_e$  del 125 por ciento pero que cumple con las especificaciones y las normas de descarga.



**Normal.** Condición semejante a la de Sequía donde hubo una disminución de  $Ntot_e$  y un aumento de  $Snh_e$ . Todas las composiciones y el gasto de entrada fueron iguales. Se manipularon tres gastos, dos se aumentaron ( $Q_{int}$  y  $Q_{sl}$ , igual a  $4.65 Q_{in,N}$  y  $1.55 Q_{in,N}$ , respectivamente) y uno se disminuyó ( $Q_{air\_3}$ , un 64 por ciento), como se muestra en la Tabla C1.

Con esta política se obtuvo una disminución del 20 por ciento para  $Ntot_e$  y 49 por ciento para  $NO_e$ ; y un aumento para  $Snh_e$  del 130 por ciento pero que cumple con las especificaciones y las normas de descarga.

**Lluvia.** El objetivo de esta política fue destacar la influencia que tienen el flujo del aire sobre la disminución de  $Ntot_e$ ,  $Snh_e$  y  $TKN_e$ , en un 5, 19 y 12 por ciento respectivamente. Esto se logró al manipular dos gastos,  $Q_{int}$  y  $Q_{sl}$  que se aumentaron (igual a  $3.6 Q_{in,R}$  y  $1.2 Q_{in,R}$ , respectivamente) y  $Q_{air\_3}$  que se mantuvo en un nivel de flujo alto (Tabla C1).

Se evaluaron cada una de estas políticas óptimas de operación a través de la simulación dinámica y la optimización dinámica de las variables de la calidad del agua del efluente.

Se recomienda realizar diagramas de bifurcación de la planta para poder determinar la estabilidad de las condiciones definidas para una mayor confiabilidad en la operación.

La optimización dinámica de modelos complejos, como es este caso, pueden tener un seguimiento confiable con una formulación de programación no lineal simultánea, donde las variables de estado y de control están discretizadas.

La solución del problema de optimización planteado para minimizar la contaminación de nitrógeno ( $Ntot_e$ ,  $Snh_e$ ,  $TKN_e$  y  $NO_e$ ), sólidos suspendidos totales ( $TSS_e$ ) y, demanda química y bioquímica de oxígeno ( $COD_e$  y  $BOD_e$ , respectivamente) en el efluente para cumplir con las especificaciones de descarga dentro de un tiempo ( $t$ ) de 40 horas, se realizó a través del "solver" IPOPT y la interfase AMPL, resultando

un comportamiento tipo escalón que, si se compara con la simulación dinámica, se obtiene un tiempo menor y un valor de la variable menor o igual al simulado que implica una optimización.

Lo anterior se logró al emplear los resultados de la investigación paralela del Diseño de Experimentos aplicado a la planta "*Simulation Benchmark*", al proponer las cinco diferentes políticas óptimas de operación. De lo contrario, sin la aplicación de estos resultados y tras haber realizado múltiples pruebas, no se optimizaban las principales variables contaminantes de nitrógeno:  $N_{tot_e}$  y  $Sn_{h_e}$ , principalmente, ya que presentaban un comportamiento oscilatorio tipo "dientes de sierra".

La presente investigación contribuye al análisis y evaluación de procesos de tratamiento biológico de desnitrificación (tipo *MLE*), y específicamente a la planta "*Simulation Benchmark*", a través de técnicas robustas estadísticas (Diseño de Experimentos), de simulación y de optimización (Optimización Dinámica Simultánea) que no se habían aplicado en su conjunto.

Aunque existen estudios semejantes a éste por el uso de la misma configuración de equipos, no existe estudio alguno con las técnicas adicionales aplicadas en esta investigación y con las que se colabora al conocimiento de este proceso.

# R e f e r e n c i a s

1. Abusam, A., Keesman, K.J., Spanjers, H., van Straten, G. (2004), *Benchmarking Procedure for Full-Scale Activated Sludge Plants*, Control Engineering Practice, 12(3): 315-322.
2. Ahn, Y.H., *Sustainable Nitrogen Elimination Biotechnologies: A Review* (2006), Process Biochemistry, 41(8): 1709-1721.
3. Albertson, O.E., Coughenour, J. (1995), *Aerated Anoxic Oxidation-Denitrification Process*, Journal of Environmental Engineering-ASCE, 121(10): 720-726.
4. Albuquerque, J.A., Biegler, L.T. (1997), *Decomposition Algorithms for On-line Estimation with Nonlinear DAE Models*, Computers and Chemical Engineering, 21(3): 283-299.
5. Alex, J., To, T.B., Hartwig, P. (2002), *Improved Design and Optimization of Aeration Control for WWTPS by Dynamic Simulation*, Water Science and Technology, 45(4-5): 365-372.
6. AMPL, <http://en.wikipedia.org/wiki/AMPL> , online, google, julio 2007.
7. AQUASIM, <http://www.aquasim.eawag.ch>, online, google, agosto 2007.
8. Argaman, Y., Papkov, G., Ostfeld, A., Rubin, D. (1999), *Single-Sludge Nitrogen Removal Model: Calibration and Verification*, Journal of Environmental Engineering-ASCE, 125(7): 608- 617.
9. Aspentech, [www.aspentech.com](http://www.aspentech.com), online, google, agosto 2007.
10. Bailey, J.E., Ollis, D.F. (1986), *Biochemical Engineering Fundamentals*, 2<sup>nd</sup>. Ed., McGraw-Hill, USA.
11. Balakrishna, S., Biegler, L.T. (1992), *Targeting Strategies for the Synthesis and Energy Integration of Nonisothermal Reactor Networks*, Industrial & Engineering Chemistry Research, 31(9): 2152-2164.

12. Balmér, P., Ekfjorden, L., Lumley, D., Mattsson, A. (1998), *Upgrading for Nitrogen Removal under Severe Site Restrictions*, *Water Science and Technology*, 37(9): 185-192.
13. Banga, J. R., Balsa-Canto, E., Moles, C.G., Alonso, A.A. (2005), *Dynamic optimization of bioprocesses: Efficient and robust numerical strategies*, *Journal of Biotechnology*, 117(4): 407-419.
14. Bansal, V., Perkins, J.D., Pistikopoulos, E.N. (2002), *A Case Study in Simultaneous Design and Control Using Rigorous, Mixed-Integer Dynamic Optimization Models*, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 41(4): 760-778.
15. Barlindhaug, J., Ødegaard, H. (1996), *Thermal Hydrolysis for the Production of Carbon Source for Denitrification*, *Water Science and Technology*, 34(1-2): 371-378.
16. Barnett, M. W., Takács, I., Stephenson, J., Gall, B., Perdeus, M. (1995), *Dynamic Modeling: New Simulation Tools Provide Insight into Waste-Water Treatment Plant Design and Operations*, *Water Environment & Technology*, 7(12): 41-44.
17. Barrado, E., Prieto, F., Vega, M., Fernández-Polanco, F. (1998), *Optimisation of the Operational Variables of a Medium Scale Reactor for Metal-Containing Wastewater Purification by Ferrite Formation*, *Water Research*, 32(10): 3055-3061.
18. Barrado, E., Vega, M., Pardo, R., Grande, P., del Valle, J.L. (1996), *Optimisation of Purification Method for Metal-Containing Wastewater by Use of A Taguchi Experimental Design*, *Water Research*, 30(10): 2309-2314.
19. Beck, M.B., Adeloye, A.J., Finney, B.A., Lessard, P. (1991), *Operational Water-Quality Management - Transient Events and Seasonal Variability*, *Water Science and Technology*, 24(6): 257-265.
20. Benitez, J. (2002), *Principles and Modern Applications of Mass Transfer Operations*, John Wiley & Sons, Inc., USA.
21. Biegler, L.T. (2007), *An Overview of Simultaneous Strategies for Dynamic Optimization*, *Chemical Engineering and Processing*, *In Press*.
22. Biegler, L.T., Cervantes, A.M., Wächter, A. (2002), *Advances in Simultaneous Strategies for Dynamic Process Optimization*, *Chemical Engineering Science*, 57(4): 575-593.
23. Biegler, L.T., Grossmann, I.E. (2004), *Retrospective on optimization*, *Computers & Chemical Engineering*, 28(8): 1169-1192.

24. Billet, R. (1995), *Packed Towers in Processing and Environmental Technology*, Translator: James W. Fullarton, VCH, UK.
25. Bird, R.B., Stewart, W.E. and Lightfoot, E.N. (2002), *Transport Phenomena*, 2<sup>nd</sup> Edition, John Wiley & Sons, Inc., USA.
26. Bocken, S.M., Braae, M., Dold, P.L. (1989), *Dissolved Oxygen Control and Oxygen Utilization Rate Estimation: Extension of the Holmberg/Olsson Method*, *Water Science & Technology*, 21(11-12): 1197-1208.
27. Bortone, G., Cech, J.S., Germirli, F., Bianchi, R., Tilche, A. (1994), *Experimental Approaches for the Characterization of a Nitrification Denitrification Process on Industrial Waste-Water*, *Water Science and Technology*, 29(7): 129-136.
28. Bury, S.J., Groot, C.K., Huth, C., Hardt, N. (2002), *Dynamic Simulation of Chemical Industry Wastewater Treatment Plants*, *Water Science and Technology*, 45(4-5): 355-363.
29. Cakici, A., Bayramoglu M. (1995), *An Approach to Controlling Sludge Age in the Activated Sludge Process*, *Water Research*, 29(4): 1093-1097.
30. Calderón, C., *Etapas del Tratamiento de Aguas Servidas*, Hanna Instruments Chile, <http://www.hannachile.com/articulos/24/etapas-tratamiento-aguas-servidas.htm>, 2004, online, google, noviembre 2006.
31. Cao, O., Patterson, J.W., Bai, X. (2005), *Reexamination of Processing Time Uncertainty*, *European Journal of Operational Research*, 164(1): 185-194.
32. Carlsson, B. (1993), *On-line Estimation of the Respiration Rate in An Activated Sludge Process*, *Water Science & Technology*, 28(11-12): 427-434.
33. Carlsson, B., Lindberg, C.-F., Hasselblad, S., Xu, S. (1994), *On-line Estimation of the Respiration Rate and the Oxygen Transfer Rate at Kungsängen Wastewater Treatment Plant in Uppsala*, *Water Science & Technology*, 30(4): 255-263.
34. Carlsson, B., Rehnstrom, A. (2002), *Control of an Activated Sludge Process with Nitrogen Removal – A Benchmark Study*, *Water Science and Technology*, 45(4-5): 135-142.
35. Carrera, J., Baeza, J. A., Vicent, T., Lafuente, J. (2003), *Biological Nitrogen Removal of High-Strength Ammonium Industrial Wastewater with Two-Sludge System*, *Water Research*, 37(17): 4211-4221.
36. Carrera-Muyo, J. (2001), *Eliminación Biológica de Nitrógeno en un Efluente con Alta Carga. Estudio de los Parámetros del Proceso y Diseño de una Depuradora In-*

- dustrial*, Tesis Doctoral, Departamento de Ingeniería Química, Universitat Autònoma de Barcelona, España.
37. Cervantes, A.M., Wächter, A., Tütüncü, R.H., Biegler, L.T. (2000), *A Reduced Space Interior Point Strategy for Optimization of Differential Algebraic Systems*, Computers & Chemical Engineering, 24(1): 39-51.
  38. Ciudad, G., Rubilar, O., Muñoz, P., Ruiz, G., Chamy, R., Vergara, C., Jeison, D. (2005), *Partial Nitrification of High Ammonia Concentration Wastewater As A Part Of A Shortcut Biological Nitrogen Removal Process*, Process Biochemistry, 40(5): 1715-1719.
  39. Coen, F., Petersen, B., Vanrolleghem, P.A., Vanderhaegen, B., Henze (1998), M., *Model-Based Characterisation of Hydraulic, Kinetic and Influent Properties of an Industrial WWTP*, Water Science and Technology, 37(12): 317-326.
  40. Coen, F., Vanderhaegen, B., Boonen, I., Vanrolleghem, P.A., VanEyck, L., VanMeenen, P. (1996), *Nitrogen Removal Upgrade of a Wastewater Treatment Plant within Existing Reactor Volumes: A Simulation Supported Scenario Analysis*, Water Science and Technology, 34(3-4): 339-346.
  41. Collivignarelli, C., Bertanza, G. (1999), *Simultaneous Nitrification-Denitrification Processes in Activated Sludge Plants: Performance and Applicability*, Water Science and Technology, 40(4-5): 187-194.
  42. Copithorn, R., Johnson, W. (2005), *Technical Solutions for Nutrient Reductions in Wastewater*, Environment Virginia Symposium, US.
  43. Copp, J.B. (2000), *The COST Simulation Benchmark: Description and Simulation Manual (a product of COST Action 624 & COST Action 682)*, p.p. 154.
  44. Copp, J.B., Murphy, K.L. (1995), *Estimation of the Active Nitrifying Biomass in Activated Sludge*, Water Research, 29(8): 1855-1862.
  45. Copp, J.B., Spanjers, H. (2004), *Simulation of Respirometry-Based Detection and Mitigation of Activated Sludge Toxicity*, Control Engineering Practice, 12(3): 305-313.
  46. Corrigan, G., Salimbeni, D., Sanna, S., Usai, G. (1988), *An Optimal Control Problem In Forest Management*, Applied Mathematical Modelling, 12(3): 328-332.
  47. COST 624 (2003), *Optimal Management of Wastewater Systems, Working Group No. 1 "Plant Operation"*, The European Cooperation in the Field of Scientific and Technical Research, Lund, Sweden.

48. Chachuat, B., Roche, N., Latifi, M.A. (2001), *Dynamic Optimization of Small Size Wastewater Treatment Plants including Nitrification and Denitrification Processes*, Computers and Chemical Engineering, 25(4-6): 585-593.
49. Chakraborty, A., Linninger, A.A. (1999), *Plant-Wide Optimal Waste Management*, Computers & Chemical Engineering, 23(Suppl. S): S67-S70.
50. Chancelier, J.Ph., Cohen de Lara, M., Joannis, C., Pacard, F. (1997), *New Insights in Dynamic Modeling of A Secondary Settler – I. Flux Theory and Steady-States Analysis*, Water Research, 31(8): 1847-1856.
51. Chancelier, J.Ph., Cohen de Lara, M., Joannis, C., Pacard, F. (1997), *New Insights in Dynamic Modeling of A Secondary Settler – II. Dynamical Analysis*, Water Research, 31(8): 1857-1866.
52. Chancelier, J.Ph., Chebbo, G., Lucas-Aiguier, E. (1998), *Estimation of Settling Velocities*, Water Research, 32(11): 3461-3471.
53. Chen, J., Sheui, R.G. (2002), *Using Taguchi's Method and Orthogonal Function Approximation to Design Optimal Manipulated Trajectory in Batch Processes*, Industrial & Engineering Chemistry Research, 41(9): 2226-2237.
54. Chen, M.Y., Syu, M.J. (2003), *Film Analysis of Activated Sludge Microbial Discs By The Taguchi Method and Grey Relational Analysis*, Bioprocess and Biosystems Engineering, 26(2): 83-92.
55. Chen, V.C.P., Tsui, K.L., Barton, R.R. Allen, J.K. (2003), *A Review of Design and Modeling in Computer Experiments*, Handbook of Statistics, 22: 231-261.
56. Cheng, C.Y., Ribarova, I. (1999), *Activated Sludge System Modelling and Simulations for Improving the Effluent Water Quality*, Water Science and Technology, 39(8): 93-98.
57. Chidambara Raj, C.B., Quen, H.L. (2005), *Advanced Oxidation Processes for Wastewater Treatment: Optimization of UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Process through A Statistical Technique*, Chemical Engineering Science 60(19): 5305 – 5311.
58. Cho, J.H., Sung, S.W., Lee, I.B. (2002), *Cascade Control Strategy for External Carbon Dosage in Predenitrifying Process*, Water Science and Technology, 45(4-5): 53-60.
59. Dalton, H., Brand-Hardy, R. (2003), *Nitrogen: The Essential Public Enemy*, Journal of Applied Ecology, 40(5): 771-781.

60. Daruis-Luis, M. L. (2001), *Sobre Polinomios de Szegő y Fórmulas de Cuadratura en la Circunferencia Unidad*, Tesis Doctoral, Departamento de Análisis Matemático, Universidad de La Laguna, España.
61. de Jonge, L. (1998), *Policies and Instruments for Reducing Nitrogen Oxide Emissions from Stationary Sources in the Netherlands*, *Environmental Pollution*, 102(Suppl. 1): 671-675.
62. de Vries, W., Kros, J., Oenema, O., de Klein, J. (2003), *Uncertainties in the Fate of Nitrogen II: A Quantitative Assessment of the Uncertainties in Major Nitrogen Fluxes in the Netherlands*, *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, 66(1): 71-102.
63. Definición de  $DBO_5$ , <http://www.ecoportel.net/content/view/full/169/offset/3>, online, google, noviembre 2006.
64. Díaz Delgado, C., *Modelación Matemática de Plantas de Tratamiento de Lodos Activados*, HidroRed, RIPDA-México CYRA-UAEM, 2003, [http://tierra.rediris.es/hidrored/ebooks/ripda/pdfs/Capitulo\\_22.pdf](http://tierra.rediris.es/hidrored/ebooks/ripda/pdfs/Capitulo_22.pdf), online, google, noviembre 2006.
65. Diehl, S., Jeppsson, U. (1998), *A Model of the Settler Coupled to the Biological Reactor*, *Water Research*, 32(2): 331-342.
66. Directive 91/271/EEC "Urban wastewater", <http://ec.europa.eu/environment/water/water-urbanwaste/directiv.html>, online, google, julio 2007.
67. Dmitruk, A.V. (1997), *Quadratic Order Conditions of A Local Minimum for Abnormal Extremals*, *Nonlinear Analysis*, 30(4): 2439-2448.
68. Dohmann, M. (1994), *Parameters For Dynamic Simulation of Waste-Water Treatment Plants with High-Rate and Low-Rate Activated-Sludge Tanks*, *Water Science and Technology*, 30(4): 211-214.
69. Domínguez S., F.C., *Modelos de Coeficientes de Transferencia de Masa Oxígeno-Aire en Mathcad*, Comunicación personal, agosto 2006.
70. Ducato, R., Galluzzo, M. (1995), *Dynamic Simulation of a NDBEPR Activated-Sludge Process*, *Computers & Chemical Engineering*, 19(Suppl. S): S441-S446.
71. Dunn, J.C. (1967), *On the Classification of Singular and Nonsingular Extremals for the Pontryagin Maximum Principle*, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 17(1): 1-36.



72. Dunn, I.J., Heinzle, E., Ingham, J., Přenosil, J.E. (2003), *Biological Reaction Engineering. Dynamic Modelling Fundamentals with Simulation Examples*, 2<sup>nd</sup> Edition, Wiley-VCH, Germany.
73. Dupont, R., Henze, M. (1992), *Modelling of the Secondary Clarifier Combined with the Activated Sludge Model No. 1*, Water Science and Technology, 25(6): 285-300.
74. Ekama, G.A., Barnard, J.L., Günthert, F.W., Krebs, P., McCorquodale, J.A., Parker, D.S. (1997), Wahlberg, E.J., *Secondary Settling Tanks: Theory, Modelling, Design and Operation*, Scientific and Technical Report No. 6, IAWQ Publishing, p.p. 216.
75. Ekama, G.A., Wentzel, M.C. (1999), *Difficulties and Developments in Biological Nutrient Removal Technology and Modeling*, Water Science and Technology, 39(6): 1-11.
76. Ekman, M. (2005), *Modeling and Control of Bilinear Systems. Applications to the Activated Sludge Process*, PhD thesis, Department of Industrial Electrical Engineering Automation, Lund Institute of Technology, Sweden.
77. Ekman, M., Bjorlenius, B., Andersson, M. (2006), *Control of the Aeration Volume in An Activated Sludge Process Using Supervisory Control Strategies*, Water Research, 40(8): 1668-1676.
78. Ericsson, B. (1994), *Process Options for Nitrogen and Phosphorus Removal in Domestic Wastewater*, Desalination, 98(1-3): 105-118.
79. Fikar, M., Chachuat, B., Latifi, M.A. (2005), *Optimal Operation of Alternating Activated Sludge Processes*, Control Engineering Practice, 13(7): 853-861.
80. Fiswick, P.A., *Simulation Model Design and Execution. Building Digital Worlds*, Prentice Hall, USA, 1995.
81. Flores-Tlacuahuac, A., Biegler, L.T. (2007), *Simultaneous Mixed-Integer Dynamic Optimization for Integrated Design and Control*, Computers & Chemical Engineering, 31(5-6): 588-600.
82. Fraquelli, G., Giandrone, R. (2003), *Reforming the Wastewater Treatment Sector in Italy: Implications of Plant Size, Structure, and Scale Economies*, Water Resources Research, 39(10): 1293.
83. Fuerhacker, M., Bauer, H., Ellinger, R., Sree, U., Schmid, H., Zibuschka F., Puxbaum, H. (2000), *Approach for a Novel Control Strategy for Simultaneous Nitrification/Denitrification in Activated Sludge Reactors*, Water Research, 34(9): 2499-2506.

84. Funamizu, N., Yamamoto, S., Kitagawa, Y, Takakuwa, T. (1997), *Simulation of the Operational Conditions of the Full-Scale Municipal Wastewater Treatment Plant to Improve the Performance of Nutrient Removal*, *Water Science and Technology*, 36(12): 9-18.
85. Galan, B., Grossmann, I.E. (1998), *Design of Distributed Wastewater Treatment Network*, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 37(10): 4036-4048.
86. García-Arrazola, R. (2003), *ADACUP: Programa para el Diseño y Análisis de Columnas de Absorción y Desorción con Empaques al Azar y Estructurados*, Tesis Ingeniería Química, Escuela de Ciencias Químicas, Universidad La Salle, México.
87. García-Arrazola, R., García B., R.J. (1999), *Análisis y Aplicación de Modelos para el Diseño de Experimentos*, ESIQIE-IPN.
88. Gerškšič, S., Vrečko, D., Hvala, N. (2006), *Improving Oxygen Concentration Control in Activated Sludge Process with Estimation of Respiration and Scheduling Control*, *Water Science and Technology*, 53(4-5): 283-291.
89. Gernaey, K.V., Rosen, C., Jeppsson, U. (2006), *WWTP Dynamic Disturbance Modelling - An Essential Module for Long-Term Benchmarking Development*, *Water Science and Technology*, 53(4-5): 225- 234.
90. Gernaey, K.V., van Loosdrecht, M.C.M., Henze, M., Lind, M., Jørgensen, S.B. (2004), *Activated Sludge Water Treatment Plant Modelling and Simulation: State of the Art*, *Environmental Modelling and Software*, 19(9): 763-783.
91. Gouveia, R., Pinto, J.M. (2000), *Optimal Policies for Activated Sludge Treatment Systems with Multi Effluent Stream Generation*, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 17(4-7): 979-990.
92. Grady, C.P.L., Jr., Daigger, G.T., Lim, H.C. (1999), *Biological Wastewater Treatment*, 2<sup>nd</sup> Ed., Marcel Dekker, Inc., USA.
93. Grijspeerdt, K., Vanrolleghem, P., Verstraete, W., (1995), *Selection of One-Dimensional Sedimentation: Models for On-line Use*, *Water Science & Technology*, 31(2): 193-204.
94. Grusell, G. (2004), *JASSeng: A Simulator for Activated Sludge Processes with Nitrogen Removal*, [http://www.it.uu.se/research/project/jass/newJASS/jass4/jass\\_3.1\\_en.html](http://www.it.uu.se/research/project/jass/newJASS/jass4/jass_3.1_en.html), Department of Systems and Control, Uppsala University, Sweden.

95. Goodchild, R.G. (1998), *EU Policies for the Reduction of Nitrogen in Water: The Example of the Nitrates Directive*, Environmental Pollution, 102(Suppl. 1): 737-740.
96. Gujer W., Henze M. (1991), *Activated Sludge Modelling and Simulation*, Water Science and Technology, 23(4-6): 1011-1023.
97. Gunaratnam, M., Alva-Argáez, A., Kokossis, A., Kim, J.K., Smith, R. (2005), *Automated Design of Total Water Systems*, Industrial and Engineering Chemistry Research, 44(3): 588-599.
98. Guo, H.Y., Zhou, J.T., Su, J., Zhang, Z.Y. (2005), *Integration of Nitrification and Denitrification in Airlift Bioreactor*, Biochemical Engineering Journal, 23(1): 57-62.
99. Habermeyer, P., Sanchez, A. (2005), *Optimization of the Intermittent Aeration in a Full-Scale Wastewater Treatment Plant Biological Reactor for Nitrogen Removal*, Water Environment Research, 77(3): 229-233.
100. Hale, C., Kaur, K., Jones, N., Oliver, B. (2005), *Validation of BNR (Biological Nutrient Removal) Plant*, WEJ Journal of the Chartered Institution of Water and Environmental Management, 19(4): 376-383.
101. Hamilton, J., Jain, R., Antoniou, P., Svoronos, S.A., Koopman, B., Lyberatos, G. (1992), *Modelling and Pilot-Scale Experimental Verification for Predenitrification Process*, Journal of Environmental Engineering, 118(1): 38-55.
102. Härtel, L., Pöpel, H.J. (1992), *A Dynamic Secondary Clarifier Model including Processes of Sludge Thickening*, Water Science and Technology, 25(6): 267-284.
103. Henze, M., Dupont, R., Grau, P., de la Sota, A. (1993), *Rising Sludge in Secondary Settlers due to Denitrification*, Water Research, 27(2): 231-236.
104. Henze, M., Grady Jr., C.P.L., Gujer, W., Marais, G.V.R., Matsuo, T. (1987), *Activated Sludge Model No. 1*, Report STR1, IAWPRC, London, UK.
105. Henze, M., Gujer, W., Mino, T., van Loosdrecht, M. (2000), *Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*, IWA Publishing, London, UK.
106. Henze, M., Harremoës, P., la Cour J., J., Arvin, E. (1997), *Wastewater Treatment. Biological and Chemical Processes*, Springer, Germany.
107. Hines, W.W., Montgomery, D.C. (1996), *Probabilidad y Estadística para Ingeniería y Administración*, 2da. Edición, CECSA, México.
108. Holmberg, U., Olsson, G., Andersson, B. (1989), *Simultaneous DO Control and Respiration Estimation*, Water Science & Technology, 21(11-12): 1185-1195.

109. Hussein, I.A.J., Abu-Sharar, T.M., Mrayyan, B. (2005), *Treated Wastewater and Sewage Sludge in Productive Agriculture: A Case Study from Northern Jordan*, WEJ Journal of the Chartered Institution of Water and Environmental Management, 19(4): 394-403.
110. IPOPT, <http://en.wikipedia.org/wiki/IPOPT> , online, google, julio 2007.
111. Iruegas-Evaristo, A.A. (2007), *Apuntes del Curso de Diseño de Experimentos para la Industria Alimentaria*, Departamento de Ingeniería de Alimentos de la Escuela de Ingeniería y Ciencias Químicas de la UIA, México.
112. Isaacs, S.H., Zhao, H., Sørensen, H., Kümmel, M. (1995), *Modeling the Nitrogen Dynamics in An Alternating Activated Sludge Process*, Mathematics and Computers in Simulation, 39(5-6): 617-626.
113. Jeppsson, U. (1997), *Modelling Aspects of Wastewater Treatment Processes*, PhD thesis, Department of Industrial Electrical Engineering Automation, Lund Institute of Technology, Sweden.
114. Jeppsson, U., Diehl, S. (1996), *On the Modelling of the Dynamic Propagation of Biological Components in the Secondary Clarifier*, Water Research and Technology, 34(5-6): 85-92.
115. Jeppsson, U., Rosen, C., Alex, J., Copp, J., Gernaey, K., Pons, M.N., Vanrolleghem, P.A. (2006), *Towards A Benchmark Simulation Model for Plant-Wide Control Strategy Performance Evaluation of WWTPs*, Water Science and Technology, 53(1): 287-295.
116. Kameswaran, S., Biegler, L.T. (2006), *Simultaneous Dynamic Optimization Strategies: Recent Advances and Challenges*, Computers and Chemical Engineering, 30(10-12): 1560-1575.
117. Kim, J.R., Ko, J.H., Lee, J.J., Kim, S.H., Park, T.J., Kim, C.W., Woo, H.J. (2006), *Parameter Sensitivity Analysis for Activated Sludge Models No. 1 And 3 combined with One-Dimensional Settling Model*, Water Science and Technology, 53(1): 129-138.
118. Kim, S., Lee, H., Kim, J., Kim, C., Ko, J., Woo, H., Kim, S. (2002), *Genetic Algorithms for the Application of Activated Sludge Model No. 1*, Water Science and Technology, 45(4-5): 405-411.
119. Ko, K.Y.J., McInnis, B.C., Goodwin, G.C. (1982), *Adaptive Control and Identification of the Dissolved Oxygen Process*, Automatica, 18(6): 727-730.

120. Ko, J., Woo, H., Copp, J.B., Kim, S., Kim, C. (2002), *Evaluation of Several Respirometry-Based Activated Sludge Toxicity Control Strategies*, *Water Science and Technology*, 45(4-5): 143-150.
121. Koehne, M., Hoen, K., Schuhen, M. (1995), *Modelling and Simulation of Final Clarifiers in Wastewater Treatment Plants*, *Mathematics and Computers in Simulation*, 39(5-6): 609-616.
122. Komorowska-Kaufman, M., Hanna Majcherek, H., Eugeniusz Klaczyński, E. (2006), *Factors Affecting the Biological Nitrogen Removal from Wastewater*, *Process Biochemistry*, 41(5): 1015-1021.
123. Kugele, S.C., Trosset, M.W., Watson, L.T. (2006), *The Cost of Numerical Integration in Statistical Decision-theoretic Methods for Robust Design Optimization*, Technical Report TR-06-27, Computer Science, Virginia Tech.
124. Kugele, S.C., Watson, L.T., Trosset, M.W. (2007), *Multidimensional Numerical Integration for Robust Design Optimization*, ACM Southeast Regional Conference. Proceedings of the 45th Annual Southeast Regional Conference, pages: 385-390
125. Kuo, W.C.J., Smith, R. (1997), *Effluent Treatment System Design*, *Chemical Engineering Science*, 52(23): 4273-4290.
126. Lang, Y.D., Biegler, L.T. (2007), *A Software Environment for Simultaneous Dynamic Optimization*, *Computers & Chemical Engineering*, 31(8): 931-942.
127. Langergraber, G., Rieger, L., Winkler, S., Alex, J., Wiese, J., Owerdieck, C., Ahnert, M., Simon, J., Maurer, M. (2004), *A Guideline for Simulation Studies of Wastewater Treatment Plants*, *Water Science and Technology*, 50(7): 131-138.
128. Le Bonté, S., Potier, O., Pons, M.N. (2005), *Toxic Event Detection by Respirometry and Adaptive Principal Components Analysis*, *Environmetrics*, 16(6): 589-601.
129. Ledzewicz, U., Schättle, H. (1997), *An Extended Maximum Principle*, *Nonlinear Analysis, Theory, Methods & Applications*, 29(2): 159-183.
130. Lee, T.T., Wang F.Y., Newell, R.B. (1999), *Distributed Parameter Approach to the Dynamics of Complex Biological Processes*, *AIChE Journal*; 45(10): 2245-2268.
131. Lee, T.T., Wang, F.Y., Newell, R.B. (1999), *Dynamic Modelling and Simulation of Activated Sludge Process Using Orthogonal Collocation Approach*, *Water Research*, 33(1): 73-86.
132. Lentz, R.V. (1989), *Quick and Easy Analysis of Unreplicated Factorials*, *Technometrics*, 31: 469-473.

133. Lim, J.M., Jum, B.J., Hwang, H. (1996), *Determination Of An Optimal Configuration Of Operating Policies For Direct-Input Output Manufacturing Systems Using The Taguchi Method*, Computers & Industrial Engineering, 31(3-4): 555-560.
134. Lindberg, C.F. (1997), *Control and Estimation Strategies Applied to the Activated Sludge Process*, PhD thesis, Department of Materials Science, Systems and Control Group, Uppsala University, Sweden.
135. Linninger, A.A. Chakraborty, A., (1999), *Synthesis and Optimization of Waste Treatment Flowsheets*, Computers & Chemical Engineering, 23(10): 1415-1425.
136. Little, G., Pinch, E. R. (1996), *The Pontryagin Maximum Principle: The Constancy of The Hamiltonian*, IMA Journal of Mathematical Control & Information 13(4):403-408.
137. Lodos Activados, <http://www.geocities.com/jdelosri/procesos.htm>, online, google, noviembre 2006.
138. Lukasse, L.J.S., Keesman, K.J., van Straten, G. (1999), *L(1)-Norm Optimal Control of N-Removal in an Activated Sludge Process*, Control Engineering Practice, 7(1): 63-70.
139. Madaeini, S.S., Koochek, S. (2006), *Application of Taguchi Method in the Optimization of Wastewater Treatment Using Spiral-Wound Reverse Osmosis Element*, Chemical Engineering Journal, 19(1): 37-44.
140. Makinia, J., Wells, S.A. (1999), *Improvements in Modelling Dissolved Oxygen in Activated Sludge Systems*, CiteSeer.IST, online, enero 2007.
141. Mapp, H.P., Bernardo, D.J., Sabbagh, G.J., Geleta, S., Watkins, K.B. (1994), *Economic and Environmental Impacts of Limiting Nitrogen Use to Protect Water-Quality - A Stochastic Regional-Analysis*, American Journal of Agricultural Economics, 76(4): 889-903.
142. Maryns, F., Bauwens, W. (1997), *The Application of the Activated Sludge Model No. 1 to a River Environment*, Water Science and Technology, 36(5): 201-208.
143. Metcalf & Eddy, Inc. (2003), *Wastewater Engineering. Treatment and Reuse*, revised by G. Tchobanoglous, F.L. Burton, H.D. Stensel, 4<sup>th</sup> Ed., McGraw-Hill, USA.
144. Minitab, Inc., *Manual del Usuario*, 2003.
145. Moles, C.G., Gutierrez, G., Alonso, A.A., Banga, J.R. (2003), *Integrated Process Design and Control Via Global Optimization – A Wastewater Treatment Plant Case Study*, Chemical Engineering Research & Design, 81(A5): 507-517.

146. Montgomery, D.C., *Design and Analysis of Experiments*, 5<sup>th</sup> Edition, John Wiley & Sons, Inc., USA, 2001.
147. Murphy, K.L., Boyko, B.I. (1970), *Longitudinal Mixing in Spiral Flow Aeration Tanks*, Journal of the Sanitary Engineering Division, ASCE, 96(2): 211-221.
148. Murrer, J., Macbeth (2005), *Water Re-Use – Capturing A Waste Resource*, WEJ Journal of the Chartered Institution of Water and Environmental Management, 19(4): 323-327.
149. Nejjari, F., Roux, G., Dahhou, B., Benhammou, A. (1999), *Estimation and Optimal Control Design of a Biological Wastewater Treatment Process*, Mathematics and Computers in Simulation, 48(3): 269-280.
150. Nowak, O., Franz, A., Svardal, K., Müller, V., Kühn, V. (1999), *Parameter Estimation for Activated Sludge Models with the help of Mass Balances*, Water Science and Technology, 39(4): 113-120.
151. Nuhoglua, A., Keskinlerb, B., Yildiz, E. (2005), *Mathematical Modelling of the Activated Sludge Process—The Erzincan Case*, Process Biochemistry, 40(7): 2467–2473.
152. Ochieng, A., Odiyo, J.O., Mustago, M. (2003), *Biological Treatment of Mixed Industrial Wastewaters in Fluidised Bed Reactor*, Journal of Hazardous Materials, B96: 79-90.
153. Olsson, G., Andrews, J.F. (1978), *The Dissolved Oxygen Profile – A Valuable Tool for Control of the Activated Sludge Process*, Water Research, 12(11): 985-1004.
154. Olsson, G., Newell, B. (2001), *Wastewater Treatment Systems. Modelling, Diagnosis and Control*, IWA Publishing.
155. Ortiz-Estrada, C.H. (1991), *Aplicación del Método de Colocación Ortogonal en la Modelación del Proceso de Adsorción*, Tesis Maestría, Sección de Graduados, ESI-QIE-IPN, México.
156. Otterpohl, R., Freund, M. (1992), *Dynamic-Models for Clarifiers of Activated-Sludge Plants With Dry and Wet Weather Flows*, Water Science and Technology, 26(5-6): 1391-1400.
157. Pala, A., Bölükbaş, Ö. (2005), *Evaluation of Kinetic Parameters for Biological CNP Removal from a Municipal Wastewater through Batch Tests*, Process Biochemistry, 40(2): 629-635.
158. Payne, W.J. (1991), *A Review of Methods for Field Measurements of Denitrification*, Forest Ecology and Management, 44: 5-14.

159. Pincince, A.B. (1992), *Concepts for Minimizing Emissions at Activated-Sludge Plants*, Water Science and Technology, 26(9-11): 2417-2420.
160. Pons, M.N., Potier, O., Roche, N., Colin, F., Prost, C. (1993), *Simulation of Municipal Waste-Water Treatment Plants by Activated-Sludge*, Computers & Chemical Engineering, 17(Suppl. S): S227-S232.
161. Pretatamiento de aguas residuales, <http://www2.cbm.uam.es/jalopez/personal/SeminariosVarios/ERARtexto.htm>, online, google, noviembre 2006.
162. Proceso de sedimentación, <http://es.wikipedia.org/wiki/Sedimentaci%C3%B3n>, online, google, noviembre 2006.
163. Queinnec, I., Dochain, D. (2001), *Modelling and Simulation of the Steady-State of Secondary Settlers in Wastewater Treatment Plants*, Water Science and Technology, 43(7): 39-46.
164. Queinnec, I., Sperandio, M. (2005), *Simultaneous Estimation of Sludge Biological Activity and Influent Nitrogen Load Using ORP and DO Dynamics*, Bioprocess and Biosystems Engineering, 27(5): 329-337.
165. Rege, M.A., Bhojani, S.H., Tock, R.W., Narayan, R.S. (1991), *Advanced Oxidation Processes for Destruction of Dissolved Organics in Process Wastewater - Statistical Design of Experiments*, Industrial & Engineering Chemistry Research, 30(12): 2583-2586.
166. Remoción de nitrógeno, <http://www.ufro.cl/rrnn/ciudad.html>, google, online, diciembre 2006.
167. Richards, A., How, J. (2005), *Mixed-Integer Programming for Control*, Bristol University.
168. Rieger, L., Alex, J., Winkler, S., Boehler, M., Thomann, M., Siegrist, H. (2003), *Progress in Sensor Technology - Progress in Process Control? Part I: Sensor Property Investigation and Classification*, Water Science and Technology, 47(2): 103-112.
169. Riesenfeld, E.H. (1955), *Tratado de Química Inorgánica*, Editora Nacional, S.A., México.
170. Rigopoulos, S., Linke, P. (2002), *Systematic Development of Optimal Activated Sludge Process Designs*, Computers & Chemical Engineering, 26(4-5): 585-597.



171. Rouleau, S., Lessard, P., Bellefleur, D. (1997), *Simulation of Transient Failure in a Wastewater Treatment Plant: A Case Study*, Water Research and Technology, 36(5): 349-355.
172. Ruiz, G., Jeison, D., Rubilar, O., Ciudad, G., Chamy, R., (2006), *Nitrification–Denitrification Via Nitrite Accumulation for Nitrogen Removal from Wastewaters*, Bioresource Technology, 97(2): 330-335.
173. Samuelsson, P. (2005), *Control of Nitrogen Removal in Activated Sludge Process*, PhD thesis, Department of Materials Science, Systems and Control Group, Uppsala University, Sweden.
174. Sarychev, A.V. (1992), *Sufficient Optimality Conditions for Pontryagin Extremals*, Systems & Control Letters, 19(6): 451-460.
175. Schmidt, I., Sliemers, O., Schmid, M., Bock, E., Fuerst, J., Kuenen, J.G., Jetten, S.M., Strous, M. (2003), *New Concepts of Microbial Treatment Processes for the Nitrogen Removal in Wastewater*, FEMS Microbiology Reviews, 27(4): 481-492.
176. Schügerl, K. (1991), *Bioreaction Engineering Volume 2. Characteristic Features of Bioreactors*, Translator V. Cottrell, John Wiley & Sons, UK.
177. Seco, A., Ribes, J., Serralta, J., Ferrer, J. (2004), *Biological Nutrient Removal Model No.1 (BNRM1)*, Water Science and Technology, 50(6): 69-78.
178. Sedlak, R. (1991), *Phosphorus and Nitrogen Removal from Municipal Wastewater. Principles and Practice*, 2<sup>nd</sup> Ed., Lewis Publisher, USA.
179. Shannon, R.E., *Simulación de Sistemas. Diseño, Desarrollo e Implantación*, Trad. Fernando Aldrete B., Ed. Trillas, México, 1988.
180. Sherwood, T.K., Pigford, R.L. and Wilke, C.R., *Mass Transfer*, McGraw-Hill, Inc., USA, 1975.
181. Sinnott, R.K., *Coulson & Richardson's Chemical Engineering. Chemical Engineering Design*, 6 vols., 3<sup>rd</sup> ed., Butterworth Heinemann, Gran Bretaña, 2001.
182. Sintic, A., Rolfs, T., Freund, M., Dorgeloh, E. (1998), *Dynamic Simulation for Upgrading of Wastewater Treatment Plants – An Assessment of Treatment Plant Performance with Regard to the Ec-Directive Concerning Urban Wastewater Treatment*, Water Science and Technology, 37(9): 73-79.
183. Smets, I.Y., Haegebaert, J.V., Carrette, R., Van Impe, J.F. (2003), *Linearization of the Activated Sludge Model ASM1 for Fast and Reliable Predictions*, Water Research, 37(8): 1831-1851.

184. Sollfrank, U., Gujer, W. (1990), *Simultaneous Determination of Oxygen Uptake Rate and Oxygen Transfer Coefficient in Activated Sludge Systems by an On-line Method*, Water Research, 24(6): 725-732.
185. Somlyody, L., Kularathna, M., Masliev, I. (1994), *Development of Least-Cost Water-Quality Control Policies for the Nitra River Basin in Slovakia*, Water Science and Technology, 30(5): 69-78.
186. Sotomayor, O.A.Z., *Mass Transfer Oxygen-Air*, Comunicación personal, julio 2006.
187. Sotomayor, O.A.Z., Park, S.W., Garcia, C. (2001), *A Simulation Benchmark to Evaluate the Performance of Advanced Control Techniques in Biological Wastewater Treatment Plants*, Brazilian Journal of Chemical Engineering, 18(1): 81-101.
188. Sotomayor, O.A.Z., Park, S.W., Garcia, C. (2002), *Software Sensor for On-line Estimation of the Microbial Activity in Activated Sludge Systems*, ISA Transactions, 41, 127-143.
189. Sotomayor, O.A.Z., Park, S.W., Garcia, C. (2003), *Multivariable Identification of An Activated Sludge Process UIT Subspace based Algorithms*, Control Engineering Practice, 11(8): 961-969.
190. Sorour, M.T., Bahgat, L.M.F. (2006), *Simulation Analysis of ASM/Takács Models in the BSM1 Configuration*, Environmental Technology, 27(10): 1163-1170.
191. Spanjers, H., Vanrolleghem, P., Olsson, G., Dols, P.L. (1998), *Towards a Benchmark for Evaluating Control Strategies in Wastewater Treatment Plants by Simulation*, Water Science and Technology, 37(12): 219-226.
192. Steffens, M.A., Lana, P.A., Newell, R.B. (1997), *A Systematic Approach for Reducing Complex Biological Wastewater Treatment Models*, Water Research, 31(3): 590-606.
193. Takács, I., Patry G.G., Nolasco D., (1991), *A Dynamic Model of the Clarification-Thickening Process*, Water Research, 25(10): 1263-1271.
194. Takama, N., Kuriyama, T., Shiroko, K., Uneda, T. (1980), *Optimal Water Allocation in a Petroleum Refinery*, Computers and Chemical Engineering, 4(4): 251-258.
195. Tanartkit, P., Biegler L.T. (1996), *A Nested, Simultaneous Approach for Dynamic Optimization Problems-I*, Computers and Chemical Engineering, 20(6-7): 735-741.
196. Tanartkit, P., Biegler L.T. (1997), *A Nested, Simultaneous Approach for Dynamic Optimization Problems-II: The Outer Problem*, Computers and Chemical Engineering, 21(12): 1365-1388.

197. Taylor, R., Krishna, R. (1993), *Multicomponent Mass Transfer*, John Wiley & Sons, Inc., USA.
198. Tomita, R.K., Park, S.W., Sotomayor, O.A.Z. (2002), *Analysis of Activated Process using Multivariate Statistical Tools - A PCA Approach*, *Chemical Engineering Journal*, 90(3): 283-290.
199. Torng, C.C., Chou, C.Y., Liu, H.R. (1998), *Applying Quality Engineering Technique to Improve Wastewater Treatment*, *Journal of Industrial Technology*, 15(1): 1-7.
200. Torres, D.F.M. (2002), *A Remarkable Property of the Dynamic Optimization Extremals*, *Investigacao Operacional*, 22(2): 253-263.
201. Traoré, A., Grieu, S., Thiery, F., Polit, M., Colprim, J. (2006), *Control of Sludge Height in a Secondary Settler Using Fuzzy Algorithms*, *Computers and Chemical Engineering*, 30(8): 1235-1242.
202. Tratamiento biológico, <http://www.geocities.com/jerr922/biologic.html>, online, google, noviembre 2006.
203. Tratamiento de aguas residuales domésticas, <http://www.puc.cl/quimica/agua/tratamiento.htm>, online, google, noviembre 2006.
204. Tratamiento de aguas servidas, [http://www.peruecologico.com.pe/lib\\_c26\\_t04.htm](http://www.peruecologico.com.pe/lib_c26_t04.htm), online, google, noviembre 2006.
205. Treybal, R.E. (1980), *Mass-Transfer Operations*, 3<sup>th</sup> ed., McGraw-Hill, Inc., USA.
206. Trosset, M.W., Alexandrov, N.M., Watson, L.T. (2003), *New Methods for Robust Design Using Computer Simulations*, *Proceedings of the Section on Physical and Engineering Sciences*, American Statistical Association, p. 1-9.
207. van Soest, F., Stein, A., Dekkers, A.L.M., van Duijvenbooden, W. (2001), *A Quantitative Evaluation of Monitoring Networks for Region-Specific Nitrate Reduction Policies*, *Journal of Environmental Management*, 61(3): 215-225.
208. Uppsala University (2006), *JASS (Java based Activated Sludge process Simulator)*, <http://www.it.uu.se/research/project/jass>, online.
209. Vanhooren, H., Yuan, Z., Vanrolleghem, P.A. (2002), *Benchmarking Nitrogen Removal Suspended-Carrier Biofilm Systems Using Dynamic Simulation*, *Water Science and Technology*, 46(1-2): 327-332.

210. Vanrolleghem, P., Coen, F. (1995), *Optimal-Design of In-Sensor-Experiments for Online Modeling of Nitrogen Removal Processes*, Water Science and Technology, 31(2): 149-160.
211. Vanrolleghem, P.A., Spanjers, H., Petersen, B., Ginestetf, P., Takács, I. (1999), *Estimating (combinations of) Activated Sludge Model No. 1 Parameters and Components by Respirometry*, Water Science and Technology, 39(1): 195-214.
212. Vassos, T.D. (1993), *Future-Directions in Instrumentation, Control and Automation in the Water and Waste-Water Industry*, Water Science and Technology, 28(11-12): 9-14.
213. Venkata Mohan, S., Chandrasekhara Rao, N., Krishna Prasad, K., Murali Krishna, P., Screenivas Rao, R., Sarma, P.N. (2005), *Anaerobic Treatment of Complex Chemical Wastewater in a Sequencing Batch Biofilm Reactor: Process Optimization and Evaluation of Factor Interactions Using the Taguchi Dynamic DOE Methodology*, Biotechnology and Bioengineering, 90(6): 732-745.
214. Vesilind, A.P. (1968), *Discussion of Evaluation of Activated Sludge Thickening Theories*, Journal of the Sanitary Engineering Division, American Society of Civil Engineers (Edited by R.I. Dick and B.B. Ewing), 94: 185-191.
215. Vidal, N., Bañares-Alcántara, R., Rodríguez-Roda, I., Poch, M. (2002), *Design of Wastewater Treatment Plants Using a Conceptual Design*, Industrial & Engineering Chemistry Research, 41(20): 4993-5005.
216. Vitasovic Z. Z. (1989), *Continuous Settler Operation: A Dynamic Model*. In Dynamic Modelling and Expert Systems in Wastewater Engineering (Edited by Patry G. and Chapman, D.), pp. 59-81. Lewis, Chelsea.
217. Vrečko, D., Hvala, N., Carlsson, B. (2003), *Feedforward-Feedback Control of an Activated Sludge Process: A Simulation Study*, Water Science and Technology, 47(12): 19-26.
218. Vrečko, D., Hvala, N., Kocijan, J., Zec, M. (2001), *System Analysis for Optimal Control of a Wastewater Treatment Benchmark*, Water Science and Technology, 43(7): 199-206.
219. Wang, Y.P., Smith, R. (1994), *Design of Distributed Effluent Treatment Systems*, Chemical Engineering Science, 49(18): 3127-3145.
220. Wang, Y.P., Smith, R. (1994), *Wastewater Minimisation*, Chemical Engineering Science, 49(7): 981-1006.

221. Wanner, O., Panagiotidis, V., Clavadetscher, P., Siegrist, H. (2005), *Effect of Heat Recovery from Raw Wastewater on Nitrification and Nitrogen Removal in Activated Sludge Plants*, *Water Research*, 39(19): 4725-4734.
222. Warga, J. (1978), *A Second-Order Condition that Strengthens Pontryagin's Maximum Principle*, *Journal of Differential Equations*, 28(2): 284-307.
223. Welch, W.J., Sacks, J. (1991), *A System for Quality Improvement via Computer Experiments*, *Communications in Statistics-Theory and Methods*, 20(2): 477-495.
224. White, D.A., Verdone, N. (2000), *Numerical Modelling of Sedimentation Processes*, *Chemical Engineering Science*, 55(12): 2213-2222.
225. Wik, T., Mattsson, A., Hansson, E., Niklasson, C. (1995), *Nitrification in A Tertiary Trickling Filter at High Hydraulic Loads — Pilot Plant Operation and Mathematical Modeling*, *Water Science and Technology*, 32(8): 185-192.
226. Wild, D., Vonschulthess, R., Gujer, W. (1995), *Structured Modeling of Denitrification Intermediates*, *Water Science and Technology*, 31(2): 45-54.
227. Wilken, J.W., Nel, N.J., Hugo, W. (1998), *Facilities Development and Planning Model - A Management Tool for the Strategic Planning Process and Application Thereof*, *Water Science and Technology*, 38(11): 69-76.
228. WPCF (1985), *Clarifier Design*, WPCF Manual of Practice FD-10, Water Pollution Control Federation, Alexandria, Virginia, US.
229. Yong, M., Yong-Zhen, P., Xiao-Lian, W., Shu-Ying, W. (2006), *Intelligent Control Aeration And External Carbon Addition for Improving Nitrogen Removal*, *Environmental Modelling & Software*, 21(6): 821-828.
230. Yong, M., Yong-Zhen, P., Xiao-Lian, W., Shu-Ying, W. (2006), *New Automatic Control Strategies for Sludge Recycling and Wastage for the Optimum Operation of Predenitrification Processes*, *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 81(1): 41-47.
231. Yong, M., Yong-Zhen, P., Jeppsson, U. (2006), *Dynamic Evaluation of Integrated Control Strategies for Enhanced Nitrogen Removal in Activated Sludge Processes*, *Control Engineering Practice*, 14(11): 1269-1278.
232. Yoo, C.K., Choi, S.W., Lee, I. (2002), *Disturbance Detection and Isolation in the Activated Sludge Process*, *Water Science and Technology*, 45(4-5): 217-226.
233. Yuan, Z., Keller, J. (2003), *Integrated Control of Nitrate Recirculation and External Carbon Addition in a Predenitrification System*, *Water Science and Technology*, 48(11-12): 345-354.

234. Zavala, V.M., Flores-Tlacuahuac, A., Vivaldo-Lima, E. (2005), *Dynamic Optimization of a Semi-batch Reactor for Polyurethane Production*, Chemical Engineering Science, 60(11): 3061-3079.
235. Zeidan, A., Rohani, S., Bassi, A., Whiting, P. (2003), *BioSys: Software for Wastewater Treatment Simulation*, Advances in Engineering Software, 34(9): 539-549.
236. Zhao, H., Isaacs, S. H., Sørensen, H., Kümmel, M., (1994), *A Novel Control Strategy for Improved Nitrogen Removal in an Alternating Activated Sludge Process—Part I. Process Analysis*, Water Research, 28(3): 521-534.
237. Zhao, H., Isaacs, S. H., Sørensen, H., Kümmel, M. (1994), *A Novel Control Strategy for Improved Nitrogen Removal in an Alternating Activated Sludge Process—Part II. Control Development*, Water Research, 28(3): 535-542.