

UNIVERSIDAD MIGUEL HERNÁNDEZ DE ELCHE

FACULTAD DE CIENCIAS EXPERIMENTALES

GRADO EN CIENCIAS AMBIENTALES



**MODELIZACIÓN DEL PROCESO DE FANGOS
ACTIVOS COMO HERRAMIENTA DE OPTIMIZACIÓN
ENERGÉTICA**

TRABAJO FIN DE GRADO

SEPTIEMBRE 2020

AUTOR: ROBERTO GÓMEZ PÉREZ

TUTOR: IGNACIO MELÉNDEZ PASTOR

DEPARTAMENTO DE AGROQUÍMICA Y MEDIO AMBIENTE

ÁREA DE INGENIERÍA QUÍMICA

MODELIZACIÓN DEL PROCESO DE FANGOS ACTIVOS COMO HERRAMIENTA DE OPTIMIZACIÓN ENERGÉTICA:

Resumen: La actual crisis ambiental de degradación de los recursos naturales, contaminación, cambio climático y superpoblación, hace más necesario que nunca el disponer de sistemas de tratamiento de las aguas residuales eficaces y eficientes, que sean capaces de afrontar el reto de optimizar los procesos de eliminación de contaminantes, disminuyendo los costes operativos y consumos energéticos, sin comprometer la calidad de los efluentes tratados.

En este trabajo se desarrollan diferentes experimentos de modelización computacional, del funcionamiento de una planta de tratamiento de aguas residuales mediante fangos activos. El objetivo de esta experimentación es indagar en posibles estrategias de optimización del proceso de tratamiento, en una configuración estandarizada de estación depuradora de aguas residuales (EDAR), de tal modo que se busque un equilibrio entre una eficiente eliminación de contaminantes de diversos tipos y un reducido consumo energético.

Palabras clave: fangos activados, modelo ASM1, modelización computacional, optimización energética.

MODELING THE ACTIVATE SLUDGE PROCESS AS AN ENERGY OPTIMIZATION TOOL:

Abstract: The current environmental crisis of natural resources degradation, pollution, climate change and overpopulation, makes it more necessary than ever to have effective and efficient wastewater treatment systems, that are capable of facing the challenge of optimizing the process of pollutants removal, reducing operating costs and energy consumption, without compromising the quality of the treated effluents.

In this work, different computational modeling experiments for the operation of an activated sludge wastewater treatment plant are developed. The objective of this experimentation is to investigate possible strategies for optimizing the treatment process, in a standardized configuration of a wastewater treatment plant (WWTP), in such a way that a balance is sought between an efficient elimination of pollutants of various types and low energy consumption.

Key words: activated sludge, ASM1 model, computation simulation, energy optimization.

Agradecimientos

Al Departamento de Agroquímica y Medio Ambiente por facilitar los medios necesarios para desarrollar este trabajo de investigación y en especial a mi tutor, el Dr Ignacio Meléndez Pastor, por su excelente trato personal, así como su inmensa ayuda y predisposición activa, en especial, en estos tiempos donde la pandemia provocada por el coronavirus ha alterado los procedimientos habituales, cobrando más importancia el teletrabajo.

No quisiera olvidarme de agradecer profundamente al conjunto del profesorado que he tenido a lo largo de estos años, y que me han ayudado a adquirir conocimientos extensos en materia de medioambiente, así como a todo el equipo humano de la UMH, que velan por el correcto funcionamiento de la Universidad en todos sus campos.

Por último, me urge agradecer a mi familia y a mis compañeros de clase por el apoyo que me han proporcionado durante la realización de este trabajo, así como durante toda mi estancia universitaria.



ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN.....	4
1.1. Las primeras plantas de tratamiento de aguas residuales.....	4
1.2. La complejidad del tratamiento de las aguas residuales mediante procesos de fangos activados	6
1.3. El origen de los modelos de fangos activados	7
2. ANTECEDENTES Y OBJETIVOS	9
3. MATERIALES Y MÉTODOS	11
3.1. Descripción general del modelo ASM1	11
3.1.1. Variables de estado	13
3.1.2. Procesos dinámicos.....	15
3.1.3. Parámetros del modelo	17
3.1.4. Restricciones de modelo.....	19
3.2. Descripción del procedimiento experimental	20
3.3. Análisis estadísticos	24
4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	27
4.1. Eliminación de contaminantes	27
4.2. Consumo energético.....	29
4.3. Optimización del proceso	31
5. CONCLUSIONES Y PROYECCIÓN FUTURA	36
6. BIBLIOGRAFÍA	38
6.1. Referencias bibliográficas.....	38
6.2. Recursos de Internet.....	40
ANEXO I. DATOS PARA LA CREACIÓN DE LA PLANTA.	41
ANEXO II: DATOS OPERACIONALES Y RECOPIACIÓN DE DATOS.	44

1. INTRODUCCIÓN

Durante la breve historia del ser humano en la Tierra, este se ha enfrentado a multitud de retos y desafíos relacionados con su supervivencia y búsqueda de la prosperidad. Se estima que los seres humanos han sido cazadores-recolectores nómadas durante el 90% de su existencia en la Tierra, suponiendo que gran parte de la energía era gastada en la búsqueda y obtención de los alimentos. Cuando los recursos escaseaban en un determinado lugar, nuestros antepasados migraban a otra ubicación donde podían acceder a fácilmente a nuevos recursos sin emplear grandes cantidades de energía. Este estilo de vida nómada, con constantes migraciones, junto con la baja densidad poblacional existente, implicaba que el impacto que generaban sus residuos desde el punto de vista sanitario y ambiental eran casi nulos [1].

No es hasta que la humanidad comienza a dominar la agricultura y la ganadería, cuando se produce un cambio fundamental en el modo de vida. Se pasa de poblaciones nómadas a sedentarias, cambiando totalmente las necesidades de la sociedad y los impactos que esta genera. Dando un salto temporal, concretamente, hasta la época de dominio Romano, se empieza a percibir la necesidad de gestionar los residuos que provocaban las grandes ciudades, como las aguas fecales. Los Romanos utilizaban un gran sistema colector llamado Cloaca Máxima [2], un hito de la ingeniería que todavía puede admirarse en las proximidades del río Tiber. Cuando el imperio Romano colapsó, hubo un retroceso notable desde el punto de vista sanitario, pues aproximadamente entre los años 450 y 1.750, la gestión de los residuos era simplemente su vertido directo en las calles, motivo por el cuál surgieron grandes pandemias como la Peste Negra. Alrededor de 1.800, y a causa de los olores y continuos brotes de cólera, se empezaron a construir los primeros sistemas colectores de aguas en diversas ciudades europeas como París o Londres. Este sistema fue gratamente recibido por los agricultores, quienes utilizaban estas aguas para fertilizar sus tierras. En 1900, el ingeniero holandés Liernur propuso un plan para recolectar aguas grises y aguas pluviales por separado. En este sistema, las aguas residuales no recibían tratamiento, sino que eran esparcidas por la tierra. Esto llegó a ser un problema grave, ya que las tierras se saturaban y cada vez había menos hectáreas disponibles debido a la expansión urbana [3].

1.1. Las primeras plantas de tratamiento de aguas residuales

Este contexto propició el surgimiento de nuevas ideas relacionadas con dar un mejor uso a los microorganismos del agua residual, tanto es así que sobre la década de 1890 se empezaron

a instalar los primeros filtros biológicos (biopelículas sobre rocas de lecho de río) en Manchester. Posteriormente, en 1913 se iniciaron los primeros ensayos de fangos activados en la planta de tratamiento de aguas residuales de Davyhulme-Manchester a cargo de los ingenieros Lockett y Fowleras [4,5].

Con el rápido crecimiento de las ciudades fue evidente que los ríos no iban a ser capaces de asumir tanta carga orgánica, y como consecuencia, se incrementaron los requisitos para el tratamiento de aguas (mejorando la eficiencia de eliminación de materia orgánica). En la segunda mitad del siglo XX se experimentaron problemas de eutrofización, de este modo, se introdujeron conocimientos de bacteriología y bioenergética, aplicando el modelo cinético de Monod [6] al tratamiento de aguas residuales. Para reducir la demanda de oxígeno en ríos y eliminar efectos nocivos del amonio fue introducida la nitrificación (oxidación biológica del amonio con oxígeno, para dar nitrito, seguida de la oxidación de nitritos a nitratos). Entre otros descubrimientos se demostró que la edad del fango tenía que ser significativamente grande para alcanzar bajas concentraciones de amonio en el afluente. También se descubrió que una sección del reactor biológico que no fuera aireada podía inducir la desnitrificación. En 1972, Bernard combinó pre y post-desnitrificación e introdujo flujos de recirculación para controlar la entrada de nitrato en el reactor predesnitrificante [3].

Se sabe que, para paliar la eutrofización, aparte del nitrógeno, también hay que eliminar el fósforo, que solo puede eliminarse en su fase sólida. Sobre 1960 se demostró que el consumo de fosfato estaba ligado a un proceso biológico, que fue denominado eliminación biológica del fósforo aumentada (*Enhanced Biological Phosphorus Removal* - EBPR). Se observó que el apagado de aireadores al final del afluente optimizaba la eliminación del fósforo, así que se implementó el principio *Phoredox* (introducir ciclos anaerobios y aerobios en el sistema de lodos activados).

En la década de 1970, se necesitó de una compactación de las instalaciones, lo que provocó una evolución de los sistemas de biofiltros y de lodos activados con separación de la biomasa por membrana en lugar de sedimentadores. La continua necesidad de mejorar la calidad de los efluentes produjo la implementación de procesos más complejos (e.g., *Sharon*, *Annamox*, *Babe*) y con ello el control operacional fue ganando importancia, tanto los controles directos de procesos, como los indirectos (sedimentación del lodo, crecimiento de biopelículas, etc).

Debido a la falta de personal cualificado y altos costes operativo, se empezó a introducir la automatización de los distintos procesos (adición de químicos, control de aireaciones,

recirculación de flujos, etc.). De esta manera, junto con la evolución de la informática, los modelos matemáticos comenzaron a usarse con regularidad. La técnica de depuración biológica por fangos activados lleva implementándose desde hace más de 100 años, por lo que ya se han desarrollado varios modelos que describen los procesos que aquí tienen lugar.

1.2. La complejidad del tratamiento de las aguas residuales mediante procesos de fangos activados

El proceso de fangos activados es un sistema de tratamiento de las aguas residuales en el que se mantiene un cultivo biológico, formado por diversos tipos de microorganismos y el agua residual a tratar. Los microorganismos se alimentarán de las sustancias que lleva el agua residual para generar más microorganismos y, en el transcurso de dicho proceso, se forman unas partículas fácilmente decantables que se denominan flóculos y que, en conjunto, constituyen los denominados fangos activos o biológicos.

En el proceso de fangos activos pueden distinguirse dos operaciones claramente diferenciadas, la oxidación biológica y la separación sólido-líquido. La primera tiene lugar en el reactor biológico, donde vamos a mantener el cultivo biológico en contacto con el agua residual. El cultivo biológico, denominado licor de mezcla, está formado por gran número de microorganismos agrupados en flóculos, junto con materia orgánica y sustancias minerales entremezcladas. Dichos microorganismos transforman la materia orgánica mediante las reacciones de oxidación biológica mencionadas.

Para el correcto funcionamiento del reactor biológico, la población de microorganismos en el reactor debe mantenerse en un determinado nivel de concentración (cuantificada mediante el parámetro MLVSS - *Mixed-Liquor Volatile Suspended Solids*), para llegar a un equilibrio entre la carga orgánica a eliminar y la cantidad de microorganismos necesarios para que se elimine dicha carga (relación cuantificada mediante el parámetro de diseño de Carga Masíca o *Food-Microorganism F/M*). En esta fase del proceso que ocurre en el reactor, es necesario un sistema de aireación y agitación, que suministre el oxígeno necesario para la actividad metabólica de los microorganismos aerobios y que permita una adecuada homogeneización del licor mezcla, para que toda la materia orgánica disuelta sea fácilmente accesible al conjunto de la población microbiana, y se evite la sedimentación y putrefacción de los fangos.

Una vez que la materia orgánica ha sido suficientemente oxidada, lo que requiere un determinado tiempo de retención del agua en el reactor (en función de las características del

agua residual, condiciones ambientales, objetivos de tratamiento, etc.), el licor mezcla pasará al denominado decantador secundario o clarificador. Aquí, el agua con fango se deja reposar y, por tanto, los fangos floculados tienden a sedimentar por gravedad, consiguiéndose separar el agua clarificada de los fangos (proceso de separación sólido-líquido). El agua clarificada constituye el efluente que posteriormente se verterá a un cauce receptor (previa desinfección y posible afinado), y parte de los fangos sedimentados son recirculados de nuevo al reactor biológico para mantener en el mismo una concentración suficiente de organismos. El excedente de fangos se extrae del sistema (purga) y se evacua hacia el tratamiento de fangos [3,4].

Como se puede observar, el proceso de fangos activados es complejo, y para su estudio y optimización mediante modelos ha sido necesario un amplio periodo de desarrollo, donde diferentes organizaciones e investigadores han trabajado duramente, para que en la actualidad gocemos de diferentes tipos de modelos que nos ayudan a ser más exigentes con los niveles de eliminación de contaminantes, con el gran beneficio que ello conlleva para la salud pública y el cuidado del medio. Sin lugar a duda hay que agradecer a la comunidad científico-técnica por habernos proporcionado estas herramientas, tan poco publicitadas como inmensamente necesarias.

1.3. El origen de los modelos de fangos activados

Los modelos más conocidos son los *Activated Sludge Models* (ASM), desarrollados al auspicio de la *International Water Association* (IWA). Tienen como objetivo principal mejorar la comprensión de las condiciones que favorecen la conversión de carbono, nitrógeno y fósforo presente en las aguas residuales, así como el consumo asociado de oxígeno y la cantidad de lodos producidos [7]. Antes de la década de 1980, se desarrollaron varios modelos de lodos activados, con el inconveniente de que todos estos modelos fueron creados de manera independiente por distintos grupos de investigación. No es hasta principios de los 80, cuando la IWA, anteriormente denominada IAWPRC (*The International association of Water Pollution, Research and Control*), desarrolla el primer modelo de referencia de lodos activados, basado en los anteriores modelos más importantes, y que recibirá el nombre de ASM1 [7].

El ASM1 es, incluso hoy en día uno de los modelos más utilizados a nivel mundial, siendo utilizado (a veces con modificaciones) en muchos de los softwares comerciales disponibles para el modelado y simulación de EDAR. El modelo ASM1 está basado en la ecuación de Monod, un modelo matemático que relaciona la tasa de crecimiento microbiano en ambiente acuoso con

la concentración de un nutriente limitante, lo que permite predecir las distintas reacciones bioquímicas que se desarrollan en un proceso de fangos activados. Una de las limitaciones principales del modelo ASM1 es que no incluye la eliminación biológica mejorada del fósforo [8], debido a que en la época en que fue desarrollado en modelo ASM1, la mayoría de las EDAR no habían incorporado la tecnología necesaria para eliminar fósforo [9].

Años después de la creación del ASM1, y con la mejora de la comprensión y expansión de los procesos EBPR [10], diferentes grupos de investigación trabajaron en la implementación de mejoras del ASM1, incorporando tales procesos. Fruto de estas investigaciones surgió un nuevo modelo, el ASM2, que esta vez sí incluía los procesos de EBPR [11]. La investigación prosiguió y se han desarrollado nuevos modelos (ASM2d y ASM3) más sofisticados (y complejos) que básicamente son mejoras de los anteriores.

Hace más de dos décadas, se introdujo el concepto de una herramienta que podría usarse para evaluar objetivamente el desempeño de las estrategias de control, a través de la simulación del proceso de tratamiento utilizando una implementación de modelo estándar para EDAR de fangos activados. Este concepto dio como resultado el desarrollo del modelo de simulación de referencia No 1 (*Benchmark Sludge Model 1* - BSM1), el posterior BSM1_LT y más recientemente BSM2. Los modelos de simulación de referencia (BSM) han estado en desarrollo durante muchos años, a través de un esfuerzo cooperativo que involucra la investigación y entidades corporativas de todo el mundo. El razonamiento inicial para el desarrollo de estos modelos fue crear una herramienta imparcial que pudiera usarse para evaluar las estrategias de control del tratamiento de aguas residuales [12]. En ese momento, la literatura contenía muchos conceptos de control publicados, pero la metodología utilizada para probar o examinar el impacto de la estrategia en cada caso era específica de esa estrategia de control. Es decir, estas publicaciones tendieron a centrarse en las ventajas específicas de la estrategia particular en cuestión sin destacar necesariamente algunos de los efectos adversos o derivados. Debido a que los impactos de la estrategia no se informaron completamente, la comparación de diferentes estrategias publicadas fue casi imposible. En ese momento se creía que una herramienta basada en simulación proporcionaría un medio para evaluar los méritos relativos de todo tipo de ideas de control diferentes, teniendo en cuenta todos los efectos que la estrategia podría tener en el proceso de tratamiento. El fin último de un modelo es predecir el comportamiento de uno o varios procesos que suceden en la vida real, y su éxito se medirá en función de lo precisos que sean los resultados que arroja, es decir, lo fiel que el modelo es al proceso real.

2. ANTECEDENTES Y OBJETIVOS

Como se ha expuesto al inicio de esta memoria, el aumento poblacional ha supuesto, supone y supondrá grandes retos en el ámbito del tratamiento de aguas, especialmente desde mediados del siglo XX hasta la actualidad, donde la población mundial ha sufrido un considerable aumento demográfico. Dicho aumento en la población ha generado problemas ambientales de diversa índole (escasez de recursos, contaminación, cambios en la dinámica de los ecosistemas, etc.), y por este motivo es necesario llevar a cabo investigaciones que nos permitan minimizar nuestro impacto en el medioambiente tanto directa como indirectamente y alcanzar formas de vida más sostenibles.

Desde este enfoque, y aplicando lo anterior a nuestro campo de estudio, que es el de tratamiento de aguas, es fundamental que los procesos que se llevan a cabo en una estación de tratamiento de aguas residuales sean lo más eficientes posibles, esto es, alcanzar la máxima calidad de efluente con los mínimos requerimientos energéticos posibles. Sólo así se podrá alcanzar la máxima eficiencia, y en consecuencia, obtener la configuración más óptima con la que trabajar.

La importancia de la optimización energética en el tratamiento de aguas no es un asunto baladí. Según los datos del Instituto de Diversificación y Ahorro Energético (IDAE), el consumo específico medio de las EDAR de España es de 0,5 kWh/m³ de agua depurada, lo que representa para el conjunto de las instalaciones un consumo de electricidad de 2.225 GWh/año (web IDAE). Haciendo unos breves cálculos del precio del kWh en España, podemos hacernos a la idea del coste que supone el funcionamiento de las EDAR. Tomando como base un precio medio final de 0,092 €/kWh, si multiplicamos esta cifra por el total de kWh necesarios para hacer funcionar a las EDAR en España, obtenemos un total aproximado de 204,7 millones de euros en gasto energético.

Pero esto no es todo, ya que hay que tener en cuenta también que el mix energético español está formado por aportaciones de diferentes tecnologías productoras de energía (Tabla 1). Teniendo en cuenta que el porcentaje de energía de origen renovable que se genera es del 37,17% no ha de pasar inadvertido el gran impacto ambiental que puede llegar a causar los procesos que se dan en las EDAR. Por todos estos motivos, tanto económicos como ambientales, es necesario la investigación en nuevas formas de optimizar los procesos de las EDAR y obtener la configuración óptima que sacrifique la menor calidad posible en virtud de un menor gasto energético.

Tabla 1. Generación eléctrica entre los años 2016 y 2018. Fuente: Ministerio de Transición Ecológica y Reto Demográfico

Tecnología	Producción neta (GWh)	Producción neta (%)
Nuclear	53.234	20,18
Eólica	49.654	18,82
Solar fotovoltaica	7.799	2,96
Solar térmica	4.425	1,68
Combustibles	112.545	42,66
Hidráulica	36.170	13,71
TOTAL	263.827	100

Para llevar a cabo este propósito, este trabajo se plantea con el objetivo de evaluar mediante el empleo de software de modelización de sistemas de tratamiento de aguas residuales, diferentes configuraciones de los sistemas de aireación y recirculación interna en el reactor biológico de una EDAR (principal agente demandante de energía durante el proceso de depuración de las aguas residuales), con la finalidad de alcanzar un equilibrio entre bajos consumos energéticos y elevados porcentajes de eliminación de contaminantes. Se empleará el modelo matemático *Activated Sludge Model* versión 1 y la configuración de la planta de tratamiento según el sistema *Benchmark Sludge Model* versión 1. Una vez realizadas las simulaciones en diferentes escenarios de sistemas de aireación y recirculación, se procederá a evaluar los resultados de las diferentes configuraciones mediante diversos análisis estadísticos, con el fin último de obtener directrices para planificar mejores estrategias de optimización del proceso de depuración.

3. MATERIALES Y MÉTODOS

En esta sección se explican las características fundamentales del modelo ASM1, como requisito fundamental para la comprensión de las capacidades y limitaciones de las modelizaciones del sistema de fangos activados que se han realizado. Posteriormente se explica el procedimiento experimental de modelización llevado a cabo, así como el compendio de procedimientos estadísticos empleados para el análisis de los resultados de las modelizaciones.

3.1. Descripción general del modelo ASM1

En 1983, la Asociación Internacional de Calidad del Agua (*International Association of Water Quality* - IAWQ, anteriormente *International Association on Water Pollution Research and Control* - IAWPRC) formó un grupo de trabajo que debía promover el desarrollo y facilitar la aplicación de modelos prácticos para el diseño y operación de sistemas biológicos de tratamiento de aguas residuales [7]. El primer objetivo era revisar los modelos existentes y el segundo objetivo era llegar a un consenso sobre el modelo matemático más simple, que tuviera la capacidad de predecir de manera realista el rendimiento de los sistemas de fangos activados que llevan a cabo los procesos de oxidación de la materia orgánica, nitrificación y desnitrificación. El resultado final se presentó en 1987 como el modelo de lodo activado IAWQ No.1 (ASM1). Aunque el modelo se ha revisado desde entonces, por ejemplo, para incorporar más fracciones de materia orgánica degradable (cuantificada mediante la demanda química de oxígeno - DQO) para acomodar nuevas observaciones experimentales, describir el crecimiento y la dinámica de la población de las bacterias filamentosas y formadoras de flóculos, e incluir nuevos procesos para describir la eliminación del fósforo, el modelo original es probablemente el más utilizado para describir los procesos de tratamiento de aguas residuales en todo el mundo. Debido a su gran impacto en la comunidad científica, merece un poco de atención adicional y aún puede considerarse como un modelo "de vanguardia", cuando no se considera la eliminación biológica de fósforo.

Muchos conceptos básicos se adaptaron del modelo anterior de UCT (*University of Cape Town*, Sudáfrica), como la hipótesis del bi-sustrato y la hipótesis de la regeneración de la muerte celular. De acuerdo con experimentos prácticos, se propuso en el modelo UCT que la DQO biodegradable en el agua residual influente consistía en dos fracciones: DQO fácilmente biodegradable y DQO lentamente biodegradable. Esta fue la hipótesis del bi-sustrato presentada en 1980. Se suponía que la DQO fácilmente biodegradable consistía en moléculas simples,

capaces de atravesar la pared celular e inmediatamente ser utilizadas para la síntesis celular por parte de los organismos. La DQO lentamente biodegradable consistiría en moléculas complejas más grandes, que se enredaba con la masa de lodo, se adsorbía y luego requería la descomposición enzimática extracelular (hidrólisis) antes de ser transferida a través de la pared celular y utilizada para el metabolismo. Se consideró que este enfoque mejoraba significativamente las predicciones del modelo del proceso en condiciones de carga y flujo cíclicos. La hipótesis de la regeneración de la muerte celular, se introdujo en un intento de identificar las diferentes reacciones que tienen lugar cuando los organismos mueren.

En similitud con el modelo UCT, la ecuación de Monod se utilizó para describir la tasa de crecimiento de los organismos heterótrofos y autótrofos en el modelo IAWQ. La DQO también se seleccionó como el parámetro adecuado para definir el material carbonoso.

El grupo de trabajo de la IAWQ también propuso algunas modificaciones sustanciales con respecto al modelo UCT, principalmente en términos de la absorción (almacenamiento) y de la solubilización (hidrólisis). El grupo de trabajo rechazó la opinión de que la DQO particulada biodegradable fuera adsorbida y almacenada en la masa de los organismos. En cambio, propusieron que el material biodegradable enredado en la masa del lodo, se hidrolizaba a DQO fácilmente biodegradable, y se liberaba al licor-mezcla por la acción de enzimas extracelulares secretadas por los organismos. Con respecto a la desnitrificación, el grupo separó los procesos de hidrólisis y crecimiento. Finalmente, el destino del nitrógeno orgánico y la fuente de nitrógeno orgánico para la síntesis se trataron de manera algo diferente. El grupo de trabajo también introdujo el concepto de funciones de conmutación, para activar y desactivar gradualmente las ecuaciones de velocidad de proceso a medida que cambiaban las condiciones ambientales (principalmente entre condiciones aeróbicas y anóxicas). Las funciones de conmutación son expresiones "tipo Monod" que son matemáticamente continuas y, por lo tanto, reducen los problemas de inestabilidad numérica durante las simulaciones. Además, el trabajo del grupo promovió la presentación estructural de modelos biocinéticos a través de un formato matricial, de tipo Petersen [13], donde la matriz contiene coeficientes estequiométricos y vectores cinéticos (Tabla 2). Todas las variables de estado involucradas en el proceso se disponen en columnas, y todos los procesos donde las variables de estado están involucradas se presentan en las filas de la matriz. Este formato de matriz ayuda a mostrar el modelo de una manera más condensada y clara.

Tabla 2. Ejemplo de matriz de Petersen, del modelo ASM1 para la representación del crecimiento aerobio heterótrofo [14].

Componente i → Proceso j ↓	1 X _H	2 S _{DQO}	3 S _{O2}	4 S _{NH4}	Cinética
1 Crecimiento heterotrofo aerobio	+1	$-\frac{1}{Y_H}$	$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$	-i _{XB}	$\mu_H \frac{S_{DQO}}{K_{DQO} + S_{DQO}} X_H$
2 R. endógena heterotrofa	-1		-1		$b'_H \frac{S_{O2}}{K_{O2,H} + S_{O2}} X_H$
Parámetros estequiométricos: Y	Velocidad de reacción observada (ML ⁻³ T ⁻¹) $r_i = \sum_j v_{ji} P_j$				Parámetros cinéticos: μ _H , K _{DQO} , b' _H , K _{O2,H}
	Biomasa (g DQO/m ³)	Sustrato (g DQO/m ³)	Oxígeno (g O ₂ /m ³)	Amonio (g N/m ³)	

A modo de comparación, las catorce ecuaciones de proceso del modelo UCT se redujeron a ocho en el modelo IAWQ, mientras que el número de variables de estado solo se redujo en uno (de catorce a trece). Una evaluación de los dos modelos reveló predicciones más o menos idénticas en la mayoría de las condiciones de operación cuando ambos modelos habían sido calibrados adecuadamente.

3.1.1. Variables de estado

El material carbonoso en el modelo IAWQ se divide en DQO biodegradable, DQO no biodegradable (material inerte) y biomasa (Figura 1).

La DQO biodegradable se divide además en sustrato fácilmente biodegradable (S_S) y sustrato lentamente biodegradable (X_S). Se presume que el sustrato fácilmente biodegradable consiste en moléculas solubles simples, que pueden ser fácilmente absorbidas por los organismos y metabolizadas para energía y síntesis, mientras que el sustrato lentamente biodegradable está formado por moléculas orgánicas particuladas/coloidales complejas, que requieren descomposición enzimática antes de la absorción y utilización. La DQO no biodegradable se divide en material soluble (S_I) y en materia particulada (X_I). Ambos se consideran no afectados por la acción biológica en el sistema. El material soluble inerte abandona el sistema por el efluente del clarificador secundario, mientras que el material inerte particulado queda retenido en la masa de lodo y se acumula como sólidos suspendidos volátiles (*volatile suspended solids* - VSS) inertes. El material inerte particulado se eliminará del sistema mediante la eliminación del exceso de lodo (purga) y, en cierta medida, estará presente en el

efluente del sedimentador. Además, la biomasa activa se divide en dos tipos de organismos: biomasa heterotrófica (X_{BH}) y biomasa autotrófica (X_{BA}) en función de su metabolismo microbiano. Finalmente, se incluye una variable de estado adicional (X_P) para modelar los productos de partículas inertes que surgen de la descomposición de la biomasa [15].

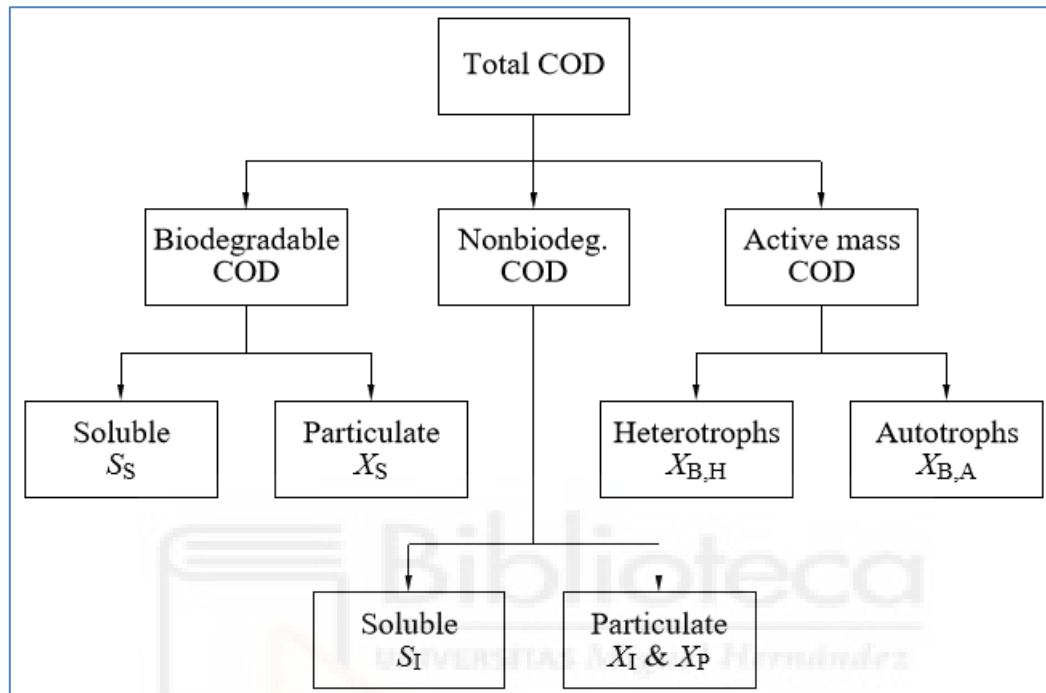


Figura 1. Caracterización de aguas residuales para componentes carbonosos [15]

El material nitrogenado en las aguas residuales se divide de acuerdo con la Figura 2. Según las mediciones del nitrógeno total Kjeldahl (*Total Kjeldahl Nitrogen* - TKN), el nitrógeno se divide en nitrógeno amoniacal libre y salino (S_{NH}), nitrógeno unido orgánicamente y nitrógeno de masa activa, es decir, una fracción de la biomasa que se supone que es nitrógeno. Similar a la división del material orgánico, el nitrógeno unido orgánicamente se divide en fracciones solubles y fracciones particuladas, que a su vez pueden ser biodegradables o no biodegradables. Cabe señalar que solo el nitrógeno orgánico biodegradable particulado (X_{ND}) y el nitrógeno orgánico biodegradable soluble (S_{ND}) se incluyen explícitamente en el modelo. El nitrógeno de masa activa (X_{NB}) se incluye en el modelo, solo en el sentido de que la descomposición de la biomasa conducirá a una producción de nitrógeno orgánico biodegradable en partículas. El nitrógeno orgánico asociado con los productos de partículas orgánicas inertes (X_{NP}) y la materia de partículas orgánicas inertes (X_{NI}) se puede calcular fácilmente, aunque no se describe en la

matriz del modelo. No se modeliza el nitrógeno inerte soluble (S_{NI}). Finalmente, nitratos y nitritos se combinan en una variable (S_{NO}), como una forma de simplificar el modelo [15].

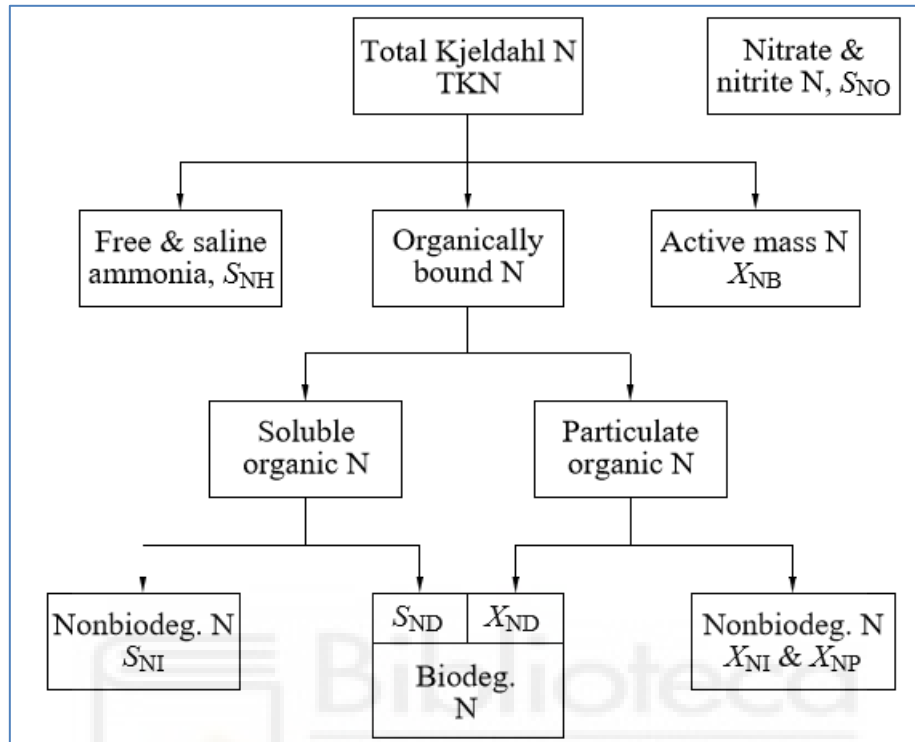


Figura 2. Caracterización de aguas residuales para componentes nitrogenados [15].

Los dos últimos componentes descritos en el modelo IAWQ son la concentración de oxígeno disuelto (S_O), expresada como DQO negativa, y la alcalinidad (S_{alk}).

3.1.2. Procesos dinámicos

Los diferentes procesos incorporados en el modelo ASM1 se describen brevemente a continuación.

- **Crecimiento aeróbico de heterótrofos:** una fracción del sustrato fácilmente biodegradable se utiliza para el crecimiento de la biomasa heterotrófica y el resto se oxida para generar energía, lo que genera una demanda de oxígeno asociada. El crecimiento se modela utilizando la cinética de Monod [6]. El amoníaco (amonio) se utiliza como fuente de nitrógeno para la síntesis celular y se incorpora a la biomasa. Tanto la concentración de S_S como de S_O pueden limitar la velocidad del proceso de crecimiento. Este proceso es generalmente el principal contribuyente a la producción de

nueva biomasa y la eliminación de DQO. También se asocia con un cambio de alcalinidad.

- **Crecimiento anóxico de heterótrofos:** en ausencia de oxígeno, los organismos heterótrofos son capaces de utilizar nitrato como aceptor de electrones terminal con S_s como sustrato. El proceso conducirá a una producción de biomasa heterotrófica y nitrógeno molecular (proceso de desnitrificación).
- **Crecimiento aeróbico de autótrofos:** el amonio se oxida a nitrato a través de un proceso de un solo paso (nitrificación) que resulta en la producción de biomasa autótrofa y da lugar a una demanda de oxígeno asociada. El amonio también se usa como fuente de nitrógeno para la síntesis y se incorpora a la masa celular. El proceso tiene un efecto marcado en la alcalinidad (tanto por la conversión de amonio en biomasa, como por la oxidación de amonio en nitrato) y la demanda total de oxígeno. El efecto sobre la cantidad de biomasa formada es pequeño, ya que el rendimiento de producción celular de los microorganismos nitrificantes es bajo. Una vez más, la tasa de crecimiento se modela utilizando la cinética de Monod.
- **Decadencia de heterótrofos:** el proceso se modela de acuerdo con la hipótesis de la regeneración de la muerte celular. Los organismos mueren a un cierto ritmo y una parte del material se considera no biodegradable y se agrega a la fracción X_p . El resto se agrega al conjunto de sustrato lentamente biodegradable. El nitrógeno orgánico asociado con el X_s está disponible como nitrógeno orgánico particulado. No hay pérdida de DQO y no se utiliza ningún aceptor de electrones. Se supone que el proceso continúa con la misma velocidad en condiciones aeróbicas, anóxicas y anaeróbicas.
- **Decadencia de autótrofos:** el proceso se modeliza de la misma manera que se usa para describir la decadencia de heterótrofos.
- **Amonificación de nitrógeno orgánico soluble:** el nitrógeno orgánico soluble biodegradable se convierte en amonio libre y salino, en un proceso de primer orden mediado por los heterótrofos activos. Los iones de hidrógeno consumidos en el proceso de conversión resultan en un cambio de alcalinidad.
- **Hidrólisis de compuestos orgánicos atrapados:** el sustrato lentamente biodegradable retenido en la masa de lodo se descompone extracelularmente, produciendo un sustrato fácilmente biodegradable disponible para el crecimiento de los organismos. El proceso se modeliza sobre la base de la cinética de reacción superficial, y ocurre en condiciones aeróbicas y anóxicas. La tasa de hidrólisis se reduce en condiciones anóxicas en comparación con las condiciones aeróbicas por un factor $\eta_h (<1)$. La tasa también es de

primer orden con respecto a la biomasa heterotrófica presente, pero se satura a medida que la cantidad de sustrato retenido aumenta en proporción a la biomasa.

- **Hidrólisis del nitrógeno orgánico atrapado:** el nitrógeno orgánico particulado biodegradable se descompone en nitrógeno orgánico soluble, a una velocidad definida por la reacción de hidrólisis para los compuestos orgánicos retenidos descritos anteriormente.

3.1.3. Parámetros del modelo

La selección de valores para los coeficientes cinéticos y estequiométricos de un modelo matemático se conoce como calibración del modelo. En el caso de los modelos de fangos activado, la calibración se ha llevado a cabo tradicionalmente a través de experimentos específicos y bien controlados, en plantas piloto y a escala de laboratorio, asumiendo condiciones de operación constantes. Sin embargo, los valores obtenidos de tal manera pueden no ser totalmente fiables por dos razones principales. La primera razón es la dificultad de configurar y operar una planta a pequeña escala, exactamente de la misma manera que una planta a gran escala y, por lo tanto, introducir un riesgo de cambiar el comportamiento de la población de microorganismos y también las condiciones que influyen en los valores de los parámetros que deben determinarse. La segunda razón es que los experimentos y cálculos a menudo se basan en el hecho de que los coeficientes son constantes. Dado que los experimentos pueden tardar varios días o incluso semanas en realizarse, no se llevan a cabo con mucha frecuencia. Muchos de los parámetros varían en el tiempo y algunos de ellos pueden cambiar considerablemente durante un período de tiempo limitado. Factores como la configuración de la planta, las condiciones de operación, la dinámica de la población de microorganismos, el grado de inhibición por compuestos tóxicos, la composición de las aguas residuales influyentes, la temperatura, el pH, etc., todos afectan los valores de los parámetros del proceso. El mismo tipo de problema se enfatiza aún más para caracterizar las aguas residuales influyentes. Si bien los parámetros discutidos anteriormente pueden cambiar sus valores considerablemente durante un período de unos pocos días, las características de las aguas residuales influyentes pueden cambiar significativamente en unas pocas horas. El hecho de que la influencia de la composición de aguas residuales influyentes en el comportamiento del modelo sea generalmente grande, amplifica aún más estas dificultades [16].

Al examinar la sensibilidad, la variabilidad y la incertidumbre de los parámetros del modelo, se da una indicación de qué coeficientes son más importantes para la precisión de este. Dicha

investigación se ha realizado para el modelo IAWQ. Establece que para las plantas que realizan nitrificación y desnitrificación, el modelo muestra poca sensibilidad con respecto a la DQO debido al largo tiempo medio de residencia celular. Los parámetros que se consideran los más importantes para este tipo de proceso son:

- Tasa de descomposición de los heterótrofos.
- Tasa para el crecimiento anóxico de heterótrofos.
- Tasa de hidrólisis específica máxima.
- Coeficiente de saturación media para la hidrólisis.
- Factor de corrección para la hidrólisis anóxica.
- Tasa de crecimiento específica máxima de autótrofos.

También se ha demostrado cómo diferentes conjuntos de valores de parámetros, pueden conducir a aproximadamente al mismo comportamiento del modelo. Esto se debe al hecho de que muchos coeficientes del modelo están correlacionados. Implica que los parámetros a menudo no pueden ajustarse uno por uno, sino que todo un conjunto debe ajustarse simultáneamente. Algunos ejemplos de tales interrelaciones se dan a continuación.

- Tasa de crecimiento y tasa de descomposición: el aumento de la tasa de crecimiento y descomposición puede producir una tasa de crecimiento neta idéntica, pero aumentará la demanda de oxígeno y acelerará el ciclo del sustrato.
- Rendimiento y tasa de crecimiento: el aumento del rendimiento de eliminación de sustrato y la tasa de crecimiento, pueden compensarse entre sí con respecto a la tasa de conversión del sustrato, pero aumentará el consumo de oxígeno.
- Rendimiento y heterótrofos en las aguas residuales afluentes: el alto rendimiento y una baja concentración de heterótrofos en las aguas residuales afluentes, es igual a un bajo rendimiento y una alta concentración de heterótrofos en el afluente.

La situación descrita anteriormente, es una indicación de que deben emplearse métodos para identificar y estimar las variables de estado no medibles y los parámetros del modelo. Esto debe hacerse para extraer toda la información posible de las mediciones disponibles, así como de las investigaciones de laboratorio.

3.1.4. Restricciones de modelo

Se debe hacer un cierto número de simplificaciones y suposiciones para que un modelo de tratamiento de aguas residuales sea útil prácticamente. Algunos de estos están asociados con el propio sistema físico, mientras que otros se refieren al modelo matemático. A continuación, se resumen algunas de esas restricciones relacionadas con el modelo IAWQ.

- El sistema funciona a temperatura constante. Para permitir variaciones de temperatura, se puede usar una ecuación de Arrhenius para ajustar los parámetros del modelo dentro de una región determinada.
- El pH es constante y casi neutral. La inclusión de la alcalinidad en el modelo permite al usuario detectar posibles problemas con el control del pH.
- No se han tenido en cuenta los cambios en la naturaleza de la materia orgánica dentro de una fracción dada (por ejemplo, el sustrato fácilmente biodegradable). Por lo tanto, se supone que los coeficientes en las expresiones de velocidad tienen valores constantes. Esto significa que el modelo no puede manejar adecuadamente los cambios en el carácter de las aguas residuales.
- No se han considerado los efectos de las limitaciones de nitrógeno, fósforo y otros nutrientes inorgánicos, en la eliminación de sustrato orgánico y en el crecimiento celular. Por lo tanto, se debe tener cuidado y asegurarse de que haya suficientes cantidades de nutrientes inorgánicos para permitir un crecimiento equilibrado.
- Los factores de corrección para la desnitrificación son fijos y constantes para un agua residual dada.
- Se supone que los coeficientes de nitrificación son constantes e incorporan cualquier efecto inhibitorio que otros constituyentes de desecho puedan tener sobre ellos.
- La biomasa heterotrófica es homogénea y no sufre cambios en la diversidad de especies con el tiempo.
- Se supone que la captura de materia orgánica particulada en la biomasa es instantánea.
- La hidrólisis de la materia y el nitrógeno orgánicos se acoplan y ocurren simultáneamente con tasas iguales.
- El tipo de aceptor de electrones presente no afecta la pérdida de biomasa activa por descomposición.

3.2. Descripción del procedimiento experimental

Una vez se ha expuesto la información necesaria para entender el modelo con el que se va a trabajar en este ensayo, procedo a exponer la metodología con la que se ha llevado a cabo este experimento de modelización.

El modelo ASM1 de la IAWQ necesita un software en el cual llevar a cabo las simulaciones, y, en resumidas cuentas, “hacerlo trabajar”. Hoy en día existen numerosos softwares de simulación de tratamiento de aguas residuales, algunos de los más utilizados son SIMBA, GPX, SUMO, BIOWIN, WEST, etc. Dado a que la mayoría de estos programas informáticos presentan caras licencias de uso, se optó por la versión gratuita para el ámbito educativo del software GPX llamada GPX-Lite (Figura 3). Es una versión gratuita, con ciertas funcionalidades inhabilitadas, pero que cumple con las funciones básicas para la realización de este trabajo. Además, posee un manejo relativamente intuitivo y con posibilidad de generar gráficos de consumo energético bastante interesantes. Por todos estos motivos, se optó por el GPX-Lite como el software elegido para la realización de este trabajo.

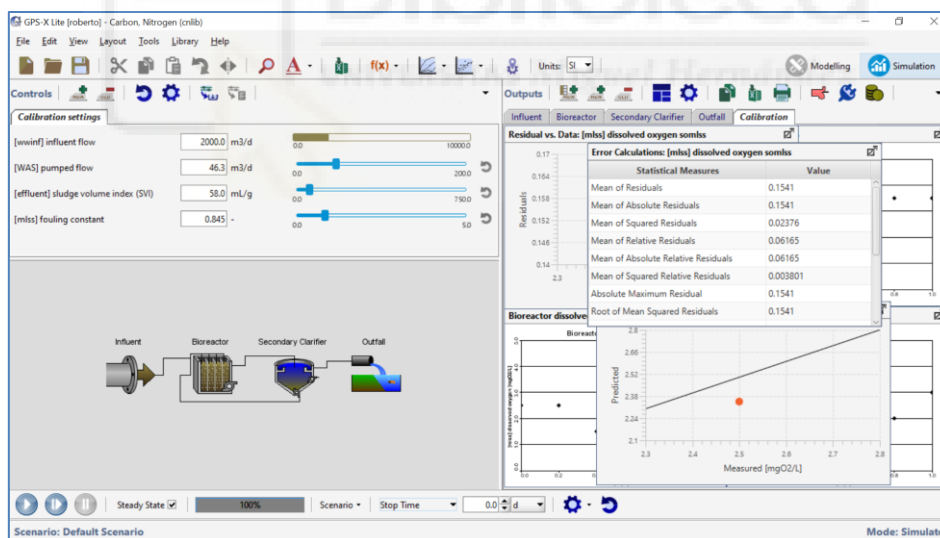


Figura 3. Captura de pantalla del software GPS-X lite en modo simulación.

El primer paso del ensayo fue diseñar una EDAR conforme a la configuración estándar del *Benchmark Sludge Model*, compuesta por influente, biorreactor con cinco sectores, clarificador secundario, efluente y purga (Figura 4).

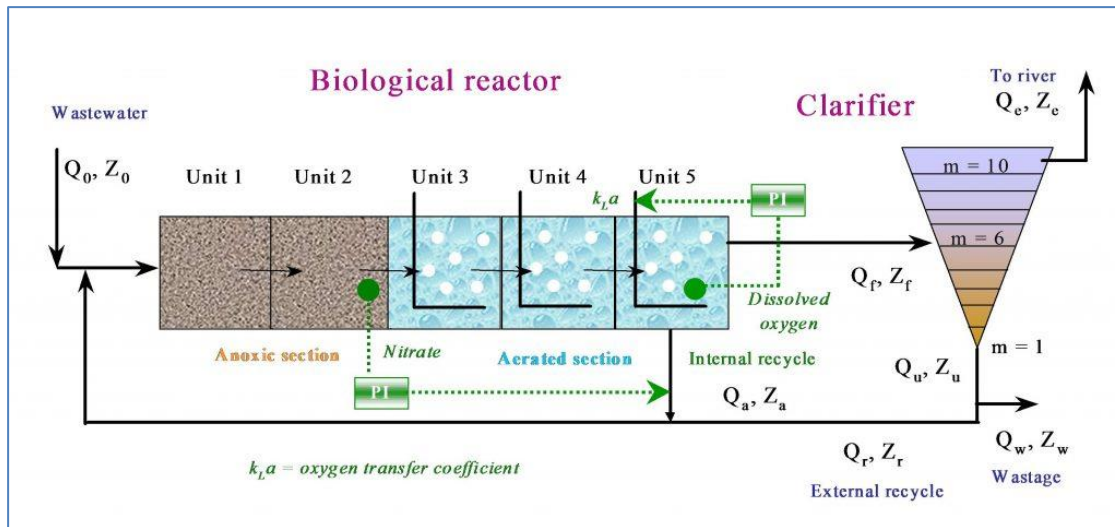


Figura 4. Configuración del sistema de depuración empleado en la fase experimental, basado en el entorno de simulación BSM1 (Modelling & Integrated Assessment Specialist Group of the International Water Association).

En esta planta virtual es donde nosotros realizaremos las distintas simulaciones para obtener los datos. Por lo tanto, se procederá a explicar los detalles de la EDAR a continuación, para que el ensayo sea replicable por todo el mundo y, en consecuencia, sea un ensayo transparente y accesible.

- **Influente:** el caudal del influente será de $3.000 \text{ m}^3/\text{día}$, los demás valores vienen dados por defecto (ver anexo).
- **Biorreactor:** Estará compuesto por 5 compartimentos, de 4 metros de profundidad cada uno (volumen total = 1.000 m^3), que nos servirán para cambiar los valores de oxígeno disuelto (*Dissolved Oxygen* - DO) y generar diferentes escenarios, tanto en las condiciones del biorreactor como en la energía necesaria para suministrar el aire. El método de aireación será mediante difusores de aire, con sondas de control del oxígeno disuelto en cada compartimento. Además, se creará una recirculación interna que conectará el quinto compartimento del biorreactor con el primero, siendo su caudal variable según diferentes ensayos. Esta configuración del reactor se basa en el diseño *Modified Ludzack-Ettinger* (MLE) para la eliminación de nitrógeno [4].
- **Clarificador secundario:** se utilizan los valores por defecto, algunos ejemplos:
 - Área del decantador: 100 m^2
 - Altura del decantador: 3 m
 - Caudal de fangos bombeado: $46,3 \text{ m}^3/\text{día}$
- **Efluente:** Se utilizan los valores límite por defecto, algunos ejemplos:

- Concentración máxima permitida de sólidos en suspensión (TSS): 20 mg/L
- Concentración máxima permitida de DQO: 40 mg/L
- Concentración máxima permitida de DBO: 10 mg/L
- Concentración máxima permitida de amonio: 4 mgN/L
- Concentración máxima permitida de nitrógeno total Kjeldahl (TKN): 6 mgN/L
- Concentración máxima permitida de nitrógeno total (TN): 10 mgN/L

Una vez creado el modelo de EDAR se procede a realizar las simulaciones. El objetivo último de estas simulaciones es encontrar la configuración óptima de suministro de oxígeno disuelto en el biorreactor, tanto para obtener un efluente de calidad como para minimizar el gasto energético. Para la realización de simulaciones se tendrán en cuenta 4 diferentes sistemas de aireación:

- **Sistema de aireación 0:** Se trata del diseño más simple, donde los cinco compartimentos del reactor serán aerobios, con una aeración controlada de 2,0 mg O₂/L. En este escenario sólo se realizará una única simulación bajo esta configuración.
- **Sistema de aireación 1:** Se implementará una primera zona anóxica que constará de los dos primeros compartimentos del reactor (los 2 primeros compartimentos tendrán una concentración de oxígeno disuelto de 0 mg O₂/L), mientras que los tres compartimentos restantes mantendrán una aeración fija de valor variable según la simulación. Se realizarán 5 simulaciones, procediendo de la siguiente forma:
 - Simulación 1.1: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios es de 1,0 mg O₂/L.
 - Simulación 1.2: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios es de 1,5 mg O₂/L.
 - Simulación 1.3: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios es de 2 mg O₂/L.
 - Simulación 1.4: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios es de 2,5 mg O₂/L.
 - Simulación 1.5: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios es de 3 mg O₂/L.
- **Sistema de aireación 2:** Se implementará una primera zona anóxica que constará de los dos primeros compartimentos del reactor, mientras que los tres compartimentos

restantes tendrán valores de aeración crecientes, siguiendo su orden físico. Se realizarán 5 simulaciones, procediendo de la siguiente forma:

- Simulación 2.1: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios será 1,4; 1,6 y 1,8 mg O₂/L respectivamente para los compartimentos 3, 4 y 5 del reactor.
- Simulación 2.2: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios será 1,6; 1,8 y 2 mgO₂/L respectivamente para los compartimentos 3, 4 y 5 del reactor.
- Simulación 2.3: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios será 1,8; 2 y 2,2 mgO₂/L respectivamente para los compartimentos 3, 4 y 5 del reactor.
- Simulación 2.4: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios será 2; 2,2 y 2,4 mgO₂/L respectivamente para los compartimentos 3, 4 y 5 del reactor.
- Simulación 2.5: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios será 2,2; 2,4 y 2,6 mgO₂/L respectivamente para los compartimentos 3, 4 y 5 del reactor.
- **Sistema de aireación 3**: Se implementará una primera zona anóxica que constará de los dos primeros compartimentos del reactor, mientras que los tres compartimentos restantes tendrán valores de aeración decrecientes, siguiendo su orden físico. Se realizarán 5 simulaciones, procediendo de la siguiente forma:
 - Escenario 3.1: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios será 2,6; 2,4 y 2,2 mg O₂/L respectivamente para los compartimentos 3, 4 y 5 del reactor.
 - Simulación 3.2: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios será 2,4; 2,2 y 2 mgO₂/L respectivamente para los compartimentos 3, 4 y 5 del reactor.
 - Simulación 3.3: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios será 2,2; 2 y 1,8 mg O₂/L respectivamente para los compartimentos 3, 4 y 5 del reactor.
 - Simulación 3.4: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios será 2; 1,8 y 1,6 mg O₂/L respectivamente para los compartimentos 3, 4 y 5 del reactor.

- Simulación 3.5: el valor de oxígeno disuelto de los compartimentos aerobios será 1,8; 1,6 y 1,4 mg O₂/L respectivamente para los compartimentos 3, 4 y 5 del reactor.

Este procedimiento se repetirá con los distintos valores de recirculación interna, que serán:

- 500 m³/día
- 1000 m³/día
- 2000 m³/día
- 4000 m³/día

Es decir, para un valor de recirculación interna de 500 m³/día se simularán los diferentes escenarios expuestos anteriormente y se obtendrán los datos. De igual manera se procederá con los valores de recirculación interna de 1000, 2000 y 4000 m³/día, obteniendo un total de 4 tandas de simulaciones.

El objetivo último al realizar estas simulaciones es generar una base de datos lo suficientemente extensa para realizar los estudios estadísticos posteriores, que nos ayudarán a obtener la configuración óptima para nuestra planta.

3.3. Análisis estadísticos

Con los resultados obtenidos en las diferentes simulaciones de funcionamiento del sistema de tratamiento de agua residuales mediante GPS-X, se generó una gran base de datos para posteriores análisis estadísticos. Para tales análisis estadísticos se empleó el software *IBM SPSS statistics* v.26 (International Business Machines Corporation - IBM, Armonk NY, EE. UU.) y el lenguaje de programación estadístico *R*.

Se calcularon estadísticos descriptivos (media, desviación estándar, etc.) y se evaluó la distribución estadística de las variables mediante histogramas de distribución de frecuencias y el test de Kolmogorov-Smirnov [17,18]. Para realizar comparaciones entre valores medios, usando como factores el nivel de recirculación o el sistema de aireación, se empleó el test no paramétrico de análisis de la varianza de Kruskal-Wallis [19]. Dicho test fue aplicado para evaluar de manera independiente, las mejores estrategias de eliminación de parámetros contaminantes o menores consumos energéticos.

Con la finalidad de evaluar conjuntamente las mejores estrategias de eliminación de parámetros contaminantes y optimización de consumos energéticos, se empezó analizando las correlaciones entre las variables utilizando el coeficiente de correlación de Spearman [20]. Seguidamente se emplearon el análisis de componentes principales y el algoritmo de clasificación no supervisada de k -medias. Previamente a aplicar ambas técnicas, todos los datos de rendimiento de eliminación de parámetros contaminantes y consumo energéticos fueron transformados mediante la técnica de z -scores cuya expresión matemática es la siguiente [21]:

$$z(s) = \frac{x - \bar{x}}{s}$$

donde $z(s)$ representa la distancia de x respecto a la media (\bar{x}) medida en múltiplos de la desviación estándar (s). Esta transformación permite que todas las variables empleadas tengan un rango de valores similar.

Seguidamente se empleó el análisis de componentes principales [22] para evaluar de manera conjunta las relaciones entre los parámetros contaminantes y consumos energéticos. El análisis de componentes principales se basa en una descomposición de valores singulares, para lo que se realiza una búsqueda de la dimensión a lo largo de la cual existe la máxima difusión o contenido de información. Tras encontrar el primer componente principal, el algoritmo intenta encontrar el siguiente componente de dispersión máxima en el espacio $n-1$ dimensional restante que es ortogonal al primer componente, continuando el proceso hasta que se llega a la última dimensión. Este proceso proporciona coeficientes para cada uno de los componentes principales que representan la dispersión relativa a lo largo de esa dimensión, permitiendo no solamente reducir las dimensiones, sino también encontrar las dimensiones óptimas que representan los datos [23]. Se utilizó el criterio de Kaiser (valores propios > 1) para la elección del número óptimo de componentes.

Finalmente se empleó el algoritmo k -means [24] para encontrar agrupaciones de estrategias de recirculación y sistemas de aireación. Las técnicas de agrupamiento (*clustering*) son unos de los métodos más ampliamente reconocidos en el campo de *machine learning* (una disciplina de la inteligencia artificial). El algoritmo k -means se fundamenta en el empleo de una métrica (e.g., distancia Euclídea) que permite decidir al amparo de ciertos criterios (como el número de agrupamientos o *clusters*) el grado de pertenencia a un determinado grupo del caso de estudio en cuestión. El algoritmo desarrolla un proceso iterativo de optimización no supervisado hasta alcanzar una solución óptima (ver ejemplo de Figura 5), fijándose de partida el número de agrupamientos deseados [23].

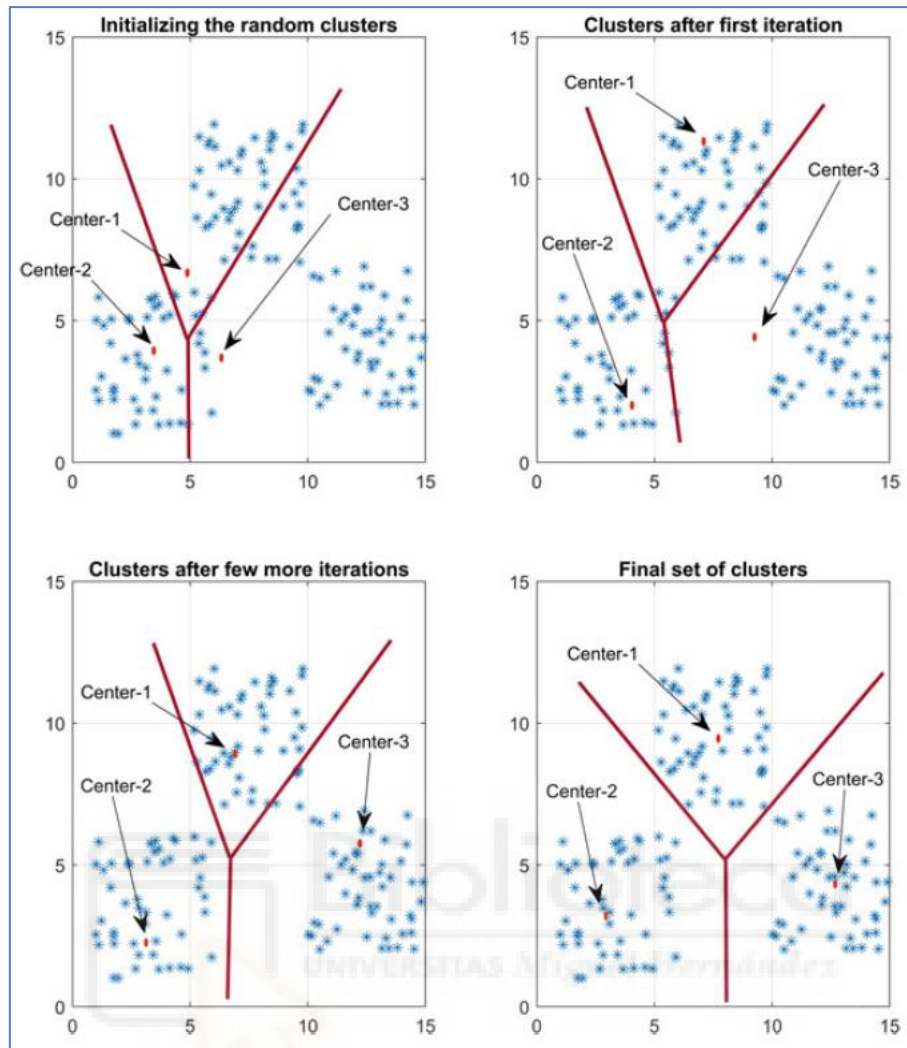


Figura 5. Ejemplo del proceso iterativo de agrupamiento del algoritmo k-means hasta converger en el número de agrupamientos deseados $k=3$ [23]

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se han realizado un total de 64 simulaciones con diferentes configuraciones de recirculación interna y sistema de aireación. A continuación, se muestran los resultados más relevantes obtenidos con relación a la eficiencia de eliminación de contaminantes y consumo energético.

4.1. Eliminación de contaminantes

Analizando los rendimientos promedio de eliminación de contaminantes (Tabla 3), podemos destacar algunas observaciones relevantes.

Tabla 3. Valores promedio de reducción de parámetros de calidad del agua residual según los diferentes porcentajes de recirculación interna y sistemas de aireación.

Recirculación interna	Sistema aireación	Rendimiento eliminación (%)							
		SST	SSV	DBO ₅	DQO	NH ₄ ⁺	NTK	NT	Alcalinidad
25 %	0	95,1	95,8	98,2	92,0	99,6	96,1	43,0	47,1
	1	95,1	95,7	97,8	91,8	99,4	95,1	71,6	34,9
	2	95,1	95,7	97,8	91,8	99,4	95,1	71,1	35,0
	3	95,1	95,7	97,8	91,8	99,4	95,2	70,8	35,3
50 %	0	95,1	95,8	98,2	92,0	99,6	96,1	43,0	47,1
	1	95,1	95,7	97,8	91,8	99,4	95,1	73,8	34,0
	2	95,1	95,7	97,8	91,8	99,4	95,1	73,4	34,2
	3	95,1	95,7	97,8	91,8	99,4	91,0	73,2	34,3
100 %	0	95,1	95,8	98,2	92,0	99,6	96,1	43,0	47,1
	1	95,1	95,7	97,8	91,7	99,4	95,0	77,2	32,6
	2	95,1	95,7	97,8	91,8	99,4	95,1	76,8	32,8
	3	95,1	95,7	97,8	91,8	99,4	95,1	76,7	32,9
200 %	0	95,1	95,8	98,1	92,0	99,6	96,0	43,0	47,1
	1	95,1	95,7	97,8	91,7	99,3	95,0	81,5	30,9
	2	95,1	95,7	97,8	91,7	99,4	95,0	81,2	31,0
	3	95,1	95,7	97,8	91,7	99,4	95,0	81,1	31,0

En primer lugar, podemos afirmar que el rendimiento de eliminación del nitrógeno total (NT) mejora proporcionalmente a mayor porcentaje de recirculación interna, esto se debe a que el agua de entrada al ser escasa en nitratos tiene que esperar a que, a lo largo del proceso, y con ayuda de oxígeno, el amonio se transforme (nitrificación), y una vez con la aparición de nitratos y propulsado por condiciones anóxicas, esos nitratos vayan desnitrificando hasta eliminar el

nitrógeno del sistema en forma de N_2 . La recirculación interna transporta los nitratos generados desde el final del reactor hasta el comienzo, donde se sitúan las zonas anóxicas.

También se observan diferencias obvias entre los distintos sistemas de aireación. Por ejemplo, se observa que el rendimiento de eliminación del nitrógeno total (TN) de los sistemas de aireación 1 y 2 son siempre superiores a los sistemas de aireación 0 y 3, y que la reducción de la alcalinidad en el sistema de aireación 0 es bastante superior a los otros sistemas. Estas diferencias se deben a la no presencia de parte anóxica en el reactor biológico del sistema de aireación 0.

Mediante el test de Kruskal-Wallis se evaluó si había diferencias significativas en la reducción de parámetros de calidad de aguas en función del nivel de recirculación interna o el sistema de aireación adoptado. Se observaron diferencias significativas para todos los parámetros de calidad de aguas (p -valor $\leq 0,05$) en función del sistema de aireación. Respecto al caudal de recirculación interna, se observaron diferencias significativas para todos los parámetros de calidad de aguas (p -valor $\leq 0,05$) excepto para el amonio (p -valor = 0,08).

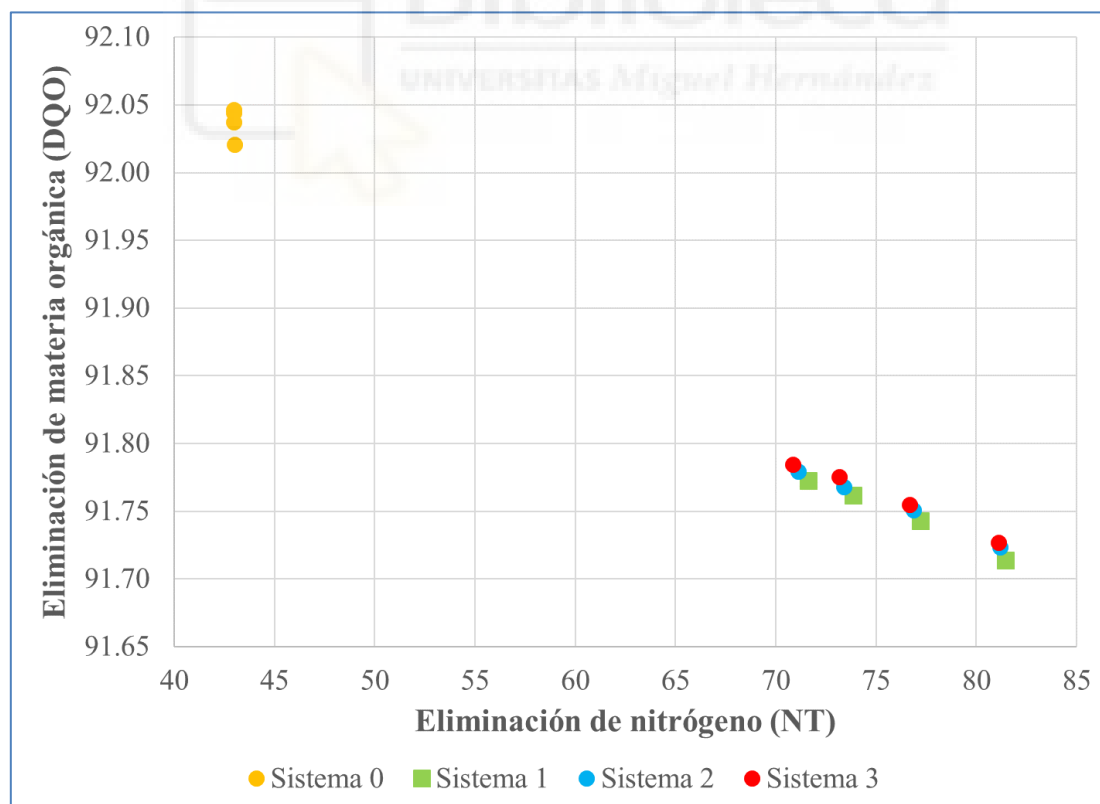


Figura 6. Diagrama de dispersión de los valores promedio de eliminación nitrógeno total y demanda química de oxígeno para los diferentes sistemas de aireación.

Resulta evidente que el comportamiento del sistema de aireación 0 es totalmente diferente a los demás (Figura 6), de hecho, únicamente sirve para la eliminación de materia orgánica ya que resulta claramente ineficaz en la eliminación de nitrógeno. Estos resultados corroboran la importancia de una zona anóxica en el biorreactor para la eliminación de nitrógeno.

En segundo lugar, se muestra un comportamiento similar de los sistemas de aireación 1, 2 y 3, aunque con ligeros matices. Se puede observar que el sistema 1 es el que mejores resultados arroja, tanto en eliminación de materia orgánica como en eliminación del nitrógeno, seguido por el sistema 2 y el 3, respectivamente.

4.2. Consumo energético

Los principales procesos que condicionan en el consumo energético de la EDAR son los sistemas de aireación (suministro de oxígeno al biorreactor), la energía necesaria para mezclar el agua y el bombeo de la recirculación interna. Estos procesos presentan comportamientos diferentes según el porcentaje de recirculación interna instalado o los sistemas de aireación presentes, y así lo muestra la Tabla 4.

Tabla 4. Valores promedio consumo energéticos en el sistema biológico según los diferentes porcentajes de recirculación interna y sistemas de aireación.

Recirculación interna	Sistema aireación	Consumos energéticos (kWh)		
		Aireación	Mezcla	Bombeo
25 %	0	518	240	54
	1	469	240	54
	2	463	240	54
	3	471	240	54
50 %	0	518	240	60
	1	466	240	60
	2	459	240	60
	3	467	240	60
100 %	0	518	240	71
	1	460	240	71
	2	454	240	71
	3	461	240	71
200 %	0	518	240	95
	1	452	240	95
	2	447	240	95
	3	453	240	95

En dicha tabla se puede observar un aumento lógico en la cantidad de energía necesaria para el bombeo de la recirculación interna conforme esta va aumentando. Esto es absolutamente lógico, ya que a más caudal bombeado, más trabajo ha de realizar la bomba y más energía será necesaria. Otro dato que resulta interesante es la disminución de consumo energético en la aireación, conforme aumenta el caudal de la recirculación interna, posiblemente debido a que el flujo másico de oxígeno del agua de la recirculación interna tiende a ser cada vez mayor, en proporción al flujo másico de oxígeno del agua “fresca” que entra al tratamiento secundario, cuyo caudal es constante.

En la tabla también se puede apreciar el mayor gasto energético del sistema de aireación 0, independientemente del porcentaje de recirculación interna existente. Esto es consecuencia de la ausencia de tanques anóxicos en el biorreactor del sistema 0, por lo que estos tanques presentan en su totalidad un constante gasto de oxígeno, aumentando así su coste final. Los gastos energéticos referentes al mezclado son siempre constantes.

Mediante el test de Kruskal-Wallis se evaluó si había diferencias significativas en los consumos energéticos en función del nivel de recirculación interna o el sistema de aireación adoptado. Se observaron diferencias significativas en el consumo energético para aireación (p -valor = 0,022) en función del sistema de aireación. También se observaron diferencias significativas para el consumo energético del bombeo (p -valor = 0,002) según el caudal de recirculación interna.

Representando gráficamente los valores promedio del consumo del bombeo frente a los de aireación para los 4 diferentes sistemas de aireación (Figura 7), resulta evidente que el sistema de aireación que menos energía consume es el 2, con una diferencia de unos 6-7 kWh respecto a los sistemas 1 y 3. Por otro lado tenemos al sistema 0 como el más costoso energéticamente, debido a, como hemos expuesto anteriormente, el sistema de aireación 0 carece de zonas anóxicas en el biorreactor, lo que automáticamente le hace inyectar más oxígeno que los sistemas 1,2 y 3 que poseen 2 zonas anóxicas.

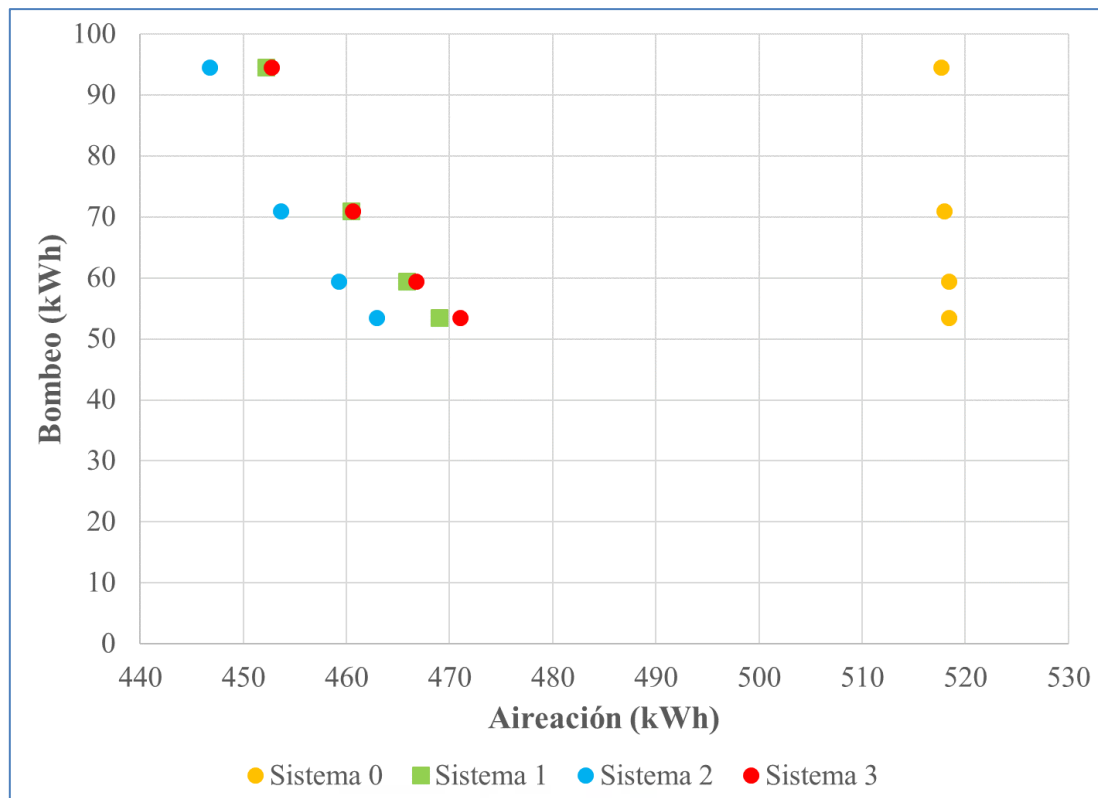


Figura 7. Diagrama de dispersión de los valores promedio de consumo energético de aireación y bombeo para los diferentes sistemas de aireación.

4.3. Optimización del proceso

Un primer paso en el análisis de las relaciones entre variables de eliminación de parámetros de calidad de aguas y consumos energético, nos la aporta la matriz de correlaciones de Spearman (Tabla 5). La interpretación de coeficiente de Spearman es igual que la del coeficiente de correlación de Pearson. Oscila entre -1 y +1, indicándonos asociaciones negativas o positivas respectivamente.

Existe una correlación negativa entre la eliminación de materia orgánica y el nitrógeno total. Esto es un fenómeno conocido, de hecho, junto a la eliminación biológica del fósforo, es la causa de que las EDAR posean 2 zonas claramente diferenciadas en el biorreactor, una primera parte anaeróbica y una segunda parte aerobia. Cuando existen estas dos zonas diferenciadas es posible compatibilizar la eliminación de la materia orgánica y de nitrógeno, mientras que, si el reactor biológico solamente posee parte aeróbica, este último, resultará claramente inútil para la eliminación del nitrógeno, como hemos podido comprobar en la Figura 6. Recordemos que la eliminación biológica del nitrógeno se consigue mediante dos procesos sucesivos, la nitrificación y la desnitrificación. En la nitrificación, el amoníaco es oxidado a nitritos y nitratos

bajo condiciones aerobias. Durante la desnitrificación y bajo condiciones anóxicas, los nitratos y nitritos son utilizados por bacterias heterótrofas facultativas para la respiración celular, como resultado de este proceso, se produce N_2 que es liberado a la atmósfera. Aquí reside la importancia de la recirculación interna, que aporta esos nitritos-nitratos necesarios para que se desarrollen procesos de desnitrificación.

Tabla 5. Matriz de correlaciones de Spearman entre los parámetros de calidad de aguas y consumos energéticos. Las celdas en rojo indican correlaciones significativas con p -valor $\leq 0,01$ mientras que las celdas amarillas indican correlaciones significativas con p -valor $\leq 0,05$.

	SST	SSV	DBO ₅	DQO	NH ₄ ⁺	NTK	NT	Alcalinidad	Aireación	Bombeo
SST	1	0,502	0,397	0,390	0,462	0,409	-0,302	0,304	0,406	0,135
SSV	0,502	1	-0,165	-0,202	0,128	-0,083	0,451	-0,436	0,239	0,811
DBO ₅	0,397	-0,165	1	0,996	0,905	0,976	-0,912	0,917	0,843	-0,606
DQO	0,390	-0,202	0,996	1	0,879	0,961	-0,930	0,933	0,815	-0,638
NH ₄ ⁺	0,462	0,128	0,905	0,879	1	0,936	-0,703	0,709	0,954	-0,323
NTK	0,409	-0,083	0,976	0,961	0,936	1	-0,856	0,861	0,885	-0,529
NT	-0,302	0,451	-0,912	-0,930	-0,703	-0,856	1	-0,995	-0,591	0,825
Alcalinidad	0,304	-0,436	0,917	0,933	0,709	0,861	-0,995	1	0,603	-0,813
Aireación	0,406	0,239	0,843	0,815	0,954	0,885	-0,591	0,603	1	-0,194
Bombeo	0,135	0,811	-0,606	-0,638	-0,323	-0,529	0,825	-0,813	-0,194	1

Se observa una correlación positiva entre la aireación y la eliminación de materia orgánica (DQO y DBO₅). Esta correlación es coherente ya que la materia orgánica necesita oxígeno para su oxidación. Las bacterias heterótrofas utilizan la materia orgánica presente en el agua residual como fuente de carbono para la síntesis celular. Sin embargo, si nos fijamos en la correlación entre la eliminación del nitrógeno total (NT) y la aireación, nos daremos cuenta de que es una correlación negativa. Esto puede deberse a que la oxidación de la materia orgánica produce nitrógeno amoniacal, lo que, junto con los procesos de nitrificación, ayudan a mantener valores altos de nitrógeno en el reactor biológico.

Otra correlación de interés es la que mantienen la eliminación de nitrógeno total (NT) con el bombeo de recirculación interna. Esta es una correlación positiva, y se debe a la aportación de nitratos que la recirculación interna hace al reactor biológico (parte anóxica). Evidentemente, a más caudal de recirculación interna, más aporte de nitratos, y en consecuencia, los procesos de desnitrificación se verán magnificados.

Analizando los resultados del análisis de componentes principales (Figura 8) podemos observar nuevamente la afinidad entre el consumo energético de aireación con la eliminación de materia orgánica (DQO Y DBO₅), y la no afinidad entre el consumo energético de la aireación con la eliminación del nitrógeno total, que, sin embargo, sí muestra una clara afinidad por el bombeo de la recirculación interna.

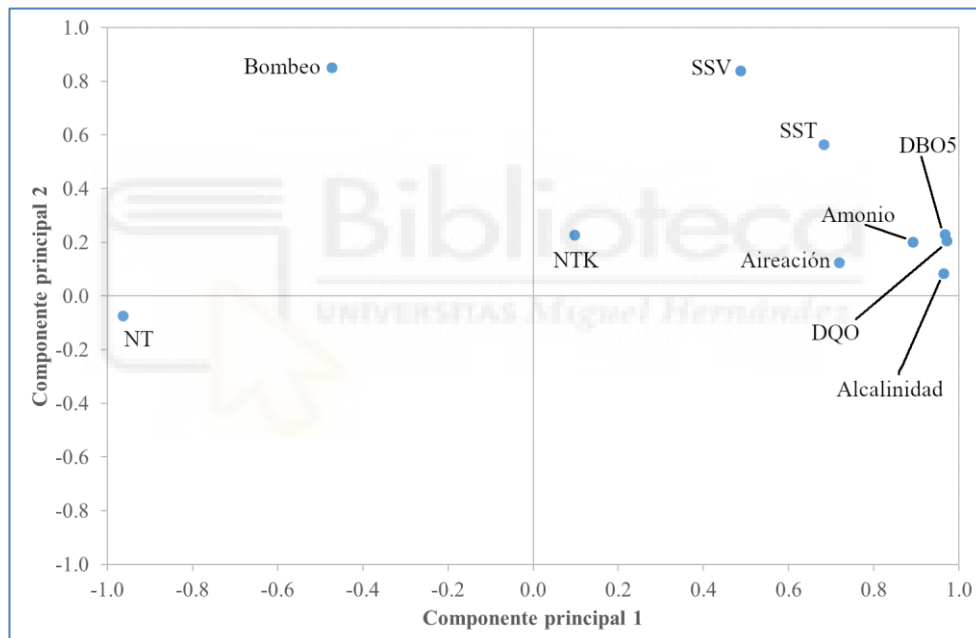


Figura 8. Diagrama de dispersión de los valores de los dos primeros componentes para las variables de calidad de aguas y consumo energético.

Otro punto de interés es el de la eliminación del nitrógeno total Kjeldahl (NTK), que representa el nitrógeno orgánico más el amonio. Como podemos observar el TKN se sitúa en un punto medio entre el bombeo de la recirculación interna y la aireación, ligeramente más próximo a esta última, probablemente por la nitrificación, donde se produce la oxidación del amonio a nitritos y nitratos en presencia de oxígeno (aireación).

Finalmente se aplicó el método de clasificación *k-means* para identificar *clusters* en base a todos los datos de parámetros contaminantes y energéticos. El objetivo es intentar conseguir agrupaciones de estrategias similares respecto a la reducción de contaminantes y consumo energético. Una vez realizados los agrupamientos de forma no supervisada por el algoritmo, hay que analizar que hay en cada cluster o agrupación.

Tras diversas interacciones, se empleó una $k=9$ como el número óptimo que permitía obtener unas agrupaciones con una explicación lógica. Observando la Figura 9 se pueden identificar qué tipo de estrategias son más o menos eficientes.

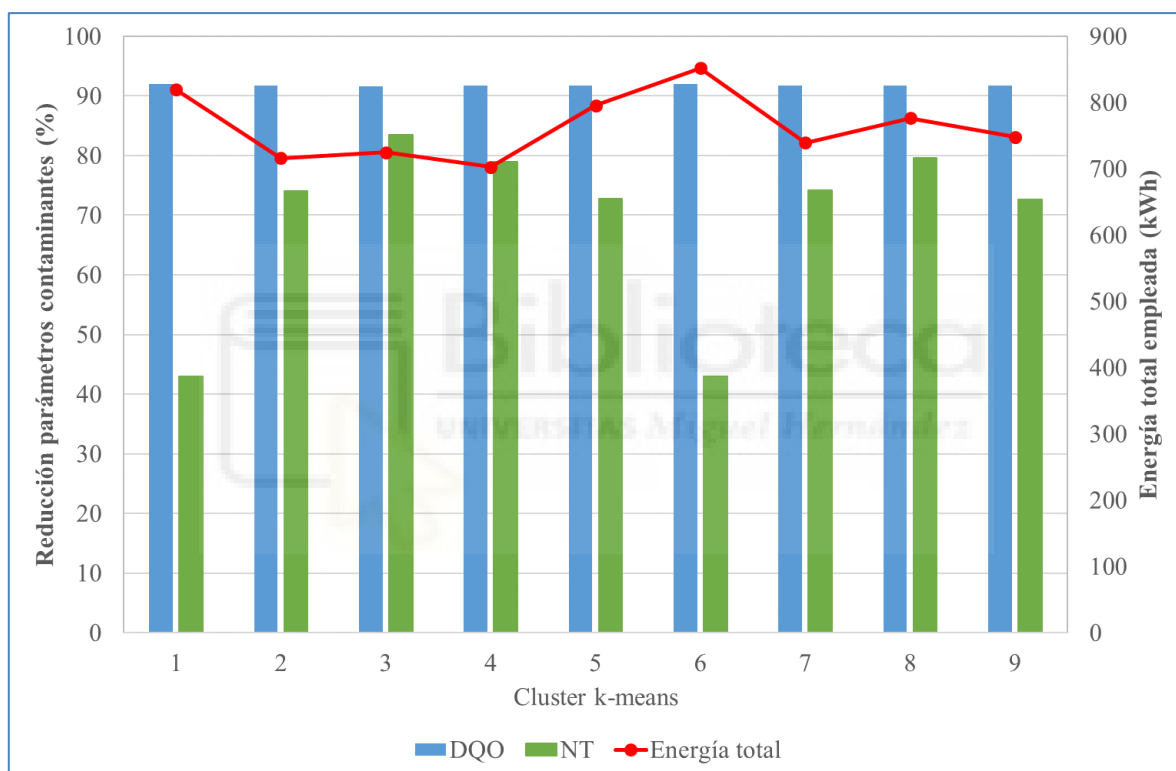


Figura 9. Valores promedio de reducción de demanda química de oxígeno, nitrógeno total, y consumo energético total para los diferentes agrupamientos (clusters) obtenidos mediante el algoritmo *k-means*.

Los agrupamientos óptimos, es decir, aquellos que presentan mayor reducción de contaminantes a la vez que un menor consumo energético parecen ser:

Cluster 3 = Este cluster hace referencia al sistema de aireación 1, concretamente al escenario 1.1, el cual presenta las siguientes características: presencia de zona anóxica en los 2 primeros tanques del reactor biológico, seguido por 3 tanques con unos valores de oxígeno disuelto de 1 mgO₂/L. El valor de la recirculación interna es de 4000 m³/día. La eliminación de

materia orgánica (DQO) y de nitrógeno total es de 91% y 84% respectivamente, mientras que el consumo energético alcanza los 700 kWh

Cluster 4 = Este cluster hace referencia al sistema de aireación 1, concretamente al escenario 1.1, el cual presenta las siguientes características: presencia de zona anóxica en los 2 primeros tanques del reactor biológico, seguido por 3 tanques con unos valores de oxígeno disuelto de 1 mgO₂/L. El valor de la recirculación interna es de 2000 m³/día y 1000 m³/día. La eliminación de materia orgánica (DQO) y de nitrógeno total es de 91% y 79% respectivamente, mientras que el consumo energético alcanza los 685 kWh.

El cluster 8 quedaría descartado pese a obtener grandes resultados en la eliminación de materia orgánica y nitrógeno total (91% y 80%), ya que presenta un elevado consumo energético (765 kWh).



5. CONCLUSIONES Y PROYECCIÓN FUTURA

Tras el desarrollo del este trabajo experimental, cuyo objetivo es buscar estrategias de optimización energética de los procesos de depuración de aguas residuales que se llevan a cabo en una EDAR, se han obtenido resultados esclarecedores. Se han comparado diferentes configuraciones de una EDAR mediante simulaciones del modelo ASM1, variando datos en la estructura del reactor biológico (presencia/ausencia de zona anóxica), en los niveles de oxígeno disuelto y en los caudales de recirculación interna. Todo esto, con el objetivo de optimizar el gasto energético sin comprometer la eliminación de contaminantes.

De este trabajo se pueden extraer interesantes conclusiones:

- Se corrobora la tremenda importancia de establecer una primera zona anóxica en el reactor biológico. En concordancia con los resultados de este trabajo, se ha comprobado que la existencia de dicha zona anóxica favorece, tanto a la eliminación del nitrógeno total, como a la reducción del gasto energético.
- Los resultados respaldan configuraciones que suministren poco oxígeno disuelto (1 mg O₂/L) al sector aerobio del biorreactor. Es entendible teniendo en cuenta que valores superiores de suministro de oxígeno implican mayor gasto energético y no reportan excesivas ventajas en la eliminación de varios tipos de contaminantes.
- Respecto al caudal de recirculación interna, se recomienda un caudal, a rasgos generales, iguales o superiores al caudal del influente. El caudal de la recirculación interna se comporta como un arma de doble filo, en parte, un mayor caudal de recirculación interna implica mayores gastos energéticos en el bombeo del agua, pero, por otra parte, a mayor caudal de recirculación mayores cantidades de nitratos son aportados al sector anóxico del reactor biológico favoreciendo así la eliminación del nitrógeno. Parece ser que nuestros resultados ponderan más la eliminación del nitrógeno asumiendo un leve incremento en el gasto energético final.

Como punto final del trabajo, es necesario realizar una reflexión desde un punto de vista más amplio y en un contexto que nos permita saber que hemos aportado con esta investigación.

Si bien el campo de la ingeniería ambiental, en nuestro caso el tratamiento de aguas residuales es un campo realmente complejo, creo que con este trabajo se han demostrado diversas hipótesis que se han formulado a lo largo de la historia reciente, que a nosotros ya nos parecen obvias, pero han requerido décadas de investigación y mucha creatividad, como pueden ser la presencia de parte anóxica en el reactor biológico o la introducción de una recirculación

interna. Además, se ha tenido en cuenta la variable del consumo energético, lo cual es fundamental en un escenario de crisis energética en el que nos situamos hoy en día, obteniendo resultados relevantes que pueden servir de base para futuras investigaciones.

De este modo, este trabajo puede ser complementado con futuros proyectos que pueden revelar información interesante que nos ayude a seguir mejorando la eficiencia de nuestras plantas de tratamiento de aguas residuales. Como sugerencia, podría ser realmente interesante comprobar cómo afectaría la presencia de una segunda recirculación interna al consumo y a la eliminación de contaminantes, así como incorporar a la investigación el ciclo de eliminación del fósforo. Otra rama de investigación futura podría ser un estudio técnico de viabilidad de autosuficiencia energética de una EDAR, incorporando cogeneración energética.



6. BIBLIOGRAFÍA

A continuación, se presentan las referencias bibliográficas y recursos de Internet empleados para la elaboración de esta memoria de Trabajo Fin de Grado.

6.1. Referencias bibliográficas

1. Lee, R.B.; Daly, R.; Daly, R.H. *The Cambridge Encyclopedia of HUNTERS AND GATHERERS*; 1999;
2. Hopkins, J.N.N. The Cloaca Maxima and the monumental manipulation of water in Archaic Rome. *Water Rome* **2007**, 1–15.
3. Henze, M.; van Loosdrecht, M.C.; Ekama, G.A.; Brdjanovic, D. *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modeling and Design*; Henze, M., van Loosdrecht, M.C., Ekama, G.A., Brdjanovic, D., Eds.; 2008;
4. Tchobanoglous, G.; Burton, F.L.; Stensel, H.D. *Wastewater Engineering. Treatment and Reuse. Fourth Edition. Metcalf & Eddy*; McGraw-Hill Education: New York, USA, 2003;
5. IWA History of activated sludge.
6. Monod, J.-L. The Growth of Bacterial Cultures. *Annu. Rev. Microbiol.* **1949**, *3*, 371–394, doi:10.1146/annurev.mi.03.100149.002103.
7. Van Loosdrecht, M.C.M.; Lopez-Vazquez, C.M.; Meijer, S.C.F.; Hooijmans, C.M.; Brdjanovic, D. Twenty-five years of ASM1: Past, present and future of wastewater treatment modelling. *J. Hydroinformatics* **2015**, *17*, 697–718, doi:10.2166/hydro.2015.006.
8. Gujer, W.; Henze, M. Activated sludge modelling and simulation. In Proceedings of the Water Science and Technology; IWA Publishing, 1991; Vol. 23, pp. 1011–1023.
9. Fenu, A.; Guglielmi, G.; Jimenez, J.; Spèrandio, M.; Saroj, D.; Lesjean, B.; Brepols, C.; Thoeye, C.; Nopens, I. Activated sludge model (ASM) based modelling of membrane bioreactor (MBR) processes: A critical review with special regard to MBR specificities. *Water Res.* 2010, *44*, 4272–4294.
10. Henze, M.; Gujer, W.; Mino, T.; Loosdrecht, M.C.M. van *Activated sludge models*

- ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*; IWA Publishing, 2000; ISBN 1-90022-224-8.
11. Gujer, W.; Henze, M.; Mino, T.; Matsuo, T.; Wentzel, M.C.; Marais, G. v. R. The Activated Sludge Model No. 2: Biological phosphorus removal. *Water Sci. Technol.* **1995**, *31*, 1–11, doi:10.1016/0273-1223(95)00175-M.
 12. Spanjers, H.; Vanrolleghem, P.; Nguyen, K.; Vanhooren, H.; Patry, G.G. Towards a simulation-benchmark for evaluating respirometry-based control strategies. In *Proceedings of the Water Science and Technology*; Elsevier Sci Ltd, 1998; Vol. 37, pp. 219–226.
 13. Petersen, E. *Chemical reaction analysis*. **1965**.
 14. Jácome, A.; Suarez, J. Tema Modelación Dinámica de Fangos activos ASM1 - IWA. **1970**, 1–28.
 15. Jeppsson, U.; Olsson, G. A General Description of the IAWQ Activated Sludge Model No. 1. *Dep. Ind. Electr. Eng. Autom.* **1996**, 444.
 16. Jeppsson, U. *A General Description of the IAWQ Activated Sludge Model No. 1*; Lund, Sweden, 1996;
 17. Kolmogorov, A. Sulla determinazione empirica di una legge di distribuzione. *G. dell'Istituto Ital. degli Attuari* **1933**, *4*, 83–91.
 18. Smirnov, N. Table for estimating the goodness of fit of empirical distributions. *Ann. Math. Stat.* **1948**, *19*, 279–281.
 19. Kruskal, W.H.; Wallis, W.A. Use of Ranks in One-Criterion Variance Analysis. *J. Am. Stat. Assoc.* **1952**, *47*, 583–621.
 20. Spearman, C. The proof and measurement of association between two things. *Am. J. Psychol.* **1904**, *15*, 72–101.
 21. Kreyszig, E. *Advanced Engineering Mathematics. Tenth Edition*; John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken (NJ), USA, 2011;
 22. Pearson, K. On Lines and Planes of Closest Fit to Systems of Points in Space. *Philos. Mag.* **1901**, *2*, 559–572.
 23. Joshi, A. V *Machine Learning and Artificial Intelligence*; Springer Nature Switzerland: Cham, Switzerland, 2020; ISBN 9783030266219.
 24. Lloyd, S.P. Least squares quantization in PCM. *IEEE Trans. Inf. Theory* **1982**, *28*, 129–

137.

6.2. Recursos de Internet

IWA publishing. Repositorio bibliográfico de las publicaciones de la *International Water Association* (IWA). URL <https://www.iwapublishing.com/> [Último acceso: 24-08-2020]

SCOPUS. Base de datos de documentos científicos revisados por pares. URL www.scopus.com [Último acceso: 29-08-2020]

SCIENCEDIRECT. Base de datos de documentos científicos. URL www.sciencedirect.com [Último acceso: 29-08-2020]

IDAE. Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía. URL: <https://www.idae.es/> [Último acceso: 12-08-2020]



ANEXO I. DATOS PARA LA CREACIÓN DE LA PLANTA.

En este anexo se incluyen diversas capturas de pantalla del proceso de creación del modelo de planta de tratamiento de aguas residuales empleada en este trabajo.

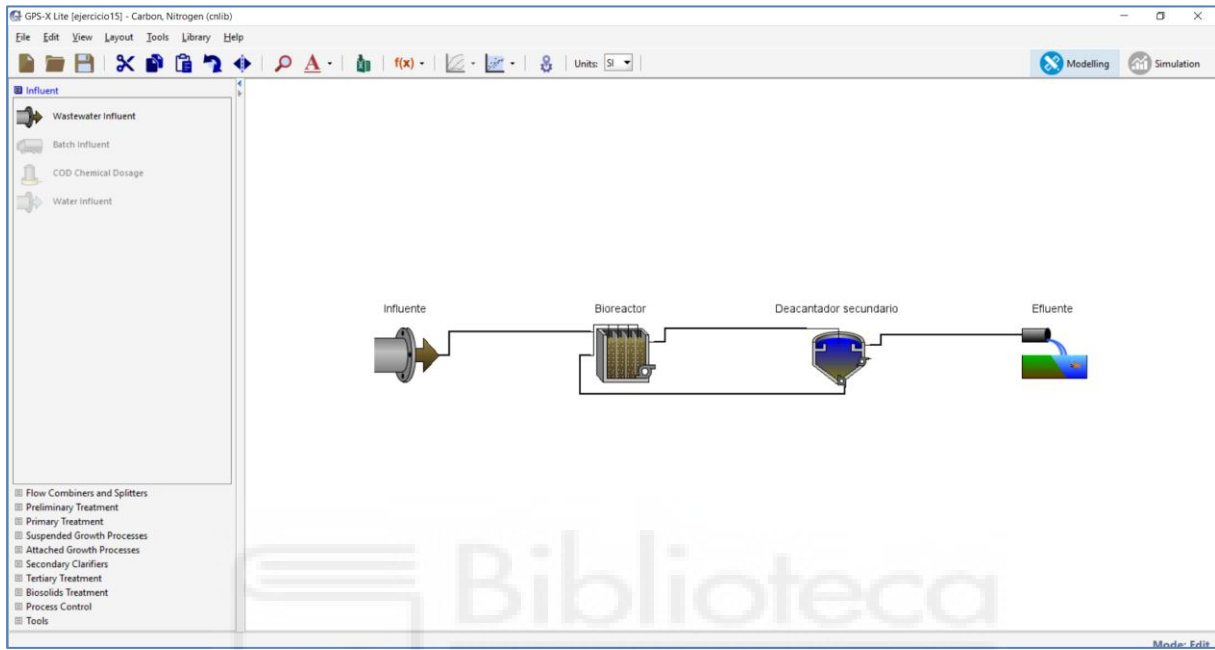


Figura 10. Vista general de la planta virtual e interfaz del software GPS-X Lite

User Inputs			State Variables			Composite Variables					
Influent Composition			Inorganic Suspended Solids			Volatile Fraction					
cod	total COD	gCOD/m ³	430.0	xii	inert inorganic suspended solids	g/m ³	59.7	ivt	VSS/TSS ratio	gVSS/gTSS	0.75
tkn	total TKN	gN/m ³	40.0	Organic Variables			Composite Variables				
snh	free and ionized ammonia	gN/m ³	25.0	si	soluble inert organic material	gCOD/m ³	21.5	x	total suspended solids	g/m ³	238.9
Dissolved Oxygen			ss	readily biodegradable substrate	gCOD/m ³	86.0	vss	volatile suspended solids	g/m ³	179.2	
so	dissolved oxygen	gO ₂ /m ³	0.0	xi	particulate inert organic material	gCOD/m ³	55.9	viss	total inorganic suspended solids	g/m ³	59.7
Nitrogen Compounds			xs	slowly biodegradable substrate	gCOD/m ³	266.6	bod	total carbonaceous BOD5	gO ₂ /m ³	232.7	
sno	nitrate and nitrite	gN/m ³	0.0	xbh	active heterotrophic biomass	gCOD/m ³	0.0	cod	total COD	gCOD/m ³	430.0
snn	dinitrogen	gN/m ³	0.0	xba	active autotrophic biomass	gCOD/m ³	0.0	tkn	total TKN	gN/m ³	40.0
Alkalinity			xu	unbiodegradable particulates from cell decay	gCOD/m ³	0.0	Additional Composite Variables				
salk	alkalinity	mole/m ³	7.0	xsto	internal cell storage product	gCOD/m ³	0.0	sbod	filtered carbonaceous BOD5	gO ₂ /m ³	56.8
Influent Fractions			Dissolved Oxygen			Composite Variables					
icv	XCOD/VSS ratio	gCOD/gVSS	0.1	so	dissolved oxygen	gO ₂ /m ³	0.0	xbod	particulate carbonaceous BOD5	gO ₂ /m ³	176.0
fbod	BOD5/BODultimate ratio	-	0.66	Nitrogen Compounds			sbodu	filtered ultimate carbonaceous BOD	gO ₂ /m ³	86.0	
ivt	VSS/TSS ratio	gVSS/gTSS	0.75	snh	free and ionized ammonia	gN/m ³	25.0	xbodu	particulate ultimate carbonaceous BOD	gO ₂ /m ³	266.6
Organic Fractions			Alkalinity			Composite Variables					
frsi	soluble inert fraction of total COD	-	0.05	salk	alkalinity	mole/m ³	7.0	bodu	total ultimate carbonaceous BOD	gO ₂ /m ³	352.6
frss	readily biodegradable fraction of total COD	-	0.2	Nitrogen Fractions			scod	filtered COD	gCOD/m ³	107.5	
frxi	particulate inert fraction of total COD	-	0.13	frsnh	ammonium fraction of soluble TKN	-	0.9	xcod	particulate COD	gCOD/m ³	322.5
frxu	part. cell decay products fraction of total COD	-	0.0	ixbn	N content of active biomass	gN/gCOD	0.086	stkn	filtered TKN	gN/m ³	27.8
frxbh	heterotrophic biomass fraction of total COD	-	0.0	ixun	N content of endogenous/inert mass	gN/gCOD	0.06	stkn	particulate TKN	gN/m ³	12.2
frxba	autotrophic biomass fraction of total COD	-	0.0	Stoichiometric Ratios			tn	total nitrogen	gN/m ³	40.0	
Nitrogen Fractions			Stoichiometric Ratios			Stoichiometric Ratios					
ASMI Nutrient Fractions			ccod	COD / TKN	gCOD/gN	10.8	Stoichiometric Ratios				
ASMI Nutrient Fractions			ccodbiodeg	CODbiodeg / TKN	gCOD/gN	8.82	Stoichiometric Ratios				
ASMI Nutrient Fractions			cnh4	NH4 / TKN	-	0.625	Stoichiometric Ratios				
ASMI Nutrient Fractions			vss	VSS / TSS	gVSS/gTSS	0.75	Stoichiometric Ratios				
ASMI Nutrient Fractions			xcod	XCOD / VSS	gCOD/gVSS	1.8	Stoichiometric Ratios				
ASMI Nutrient Fractions			rbod	RBOD / COD	gRBOD/gCOD	0.541	Stoichiometric Ratios				

Figura 11. Composición del influente.

Physical

Dimensions

[mlss] number of reactors: 5

[mlss] tank depth (not editable in GPS-X Lite): 4.0 m

[mlss] volume setup method (not editable in GPS-X Lite): Volume Fractions

Individual Volumes

[mlss] individual volumes: (...) m3

Volume Fractions

[mlss] maximum volume (not editable in GPS-X Lite): 1000.0 m3

[mlss] volume fractions: (...) -

More...

Accept Cancel

Figura 12. Datos físicos del reactor biológico.

Physical

Clarifier Type

[effluent] clarifier type (not editable in GPS-X Lite): Flat Bottom

Input Required for All Types of Clarifiers

[effluent] feed point from bottom: 1.0 m

Flat Bottom Clarifier Input

[effluent] surface (not editable in GPS-X Lite): 100.0 m2

[effluent] water depth (not editable in GPS-X Lite): 3.0 m

Other Clarifier Types

More...

Accept Cancel

Figura 13. Datos físicos del decantador secundario.

The image shows a software dialog box titled "Effluent Limits". It contains a section "Effluent Limits for Violations" with a table of parameters. Each row has a text label, a numerical input field, a unit dropdown menu, and a document icon. At the bottom right, there are "Accept" and "Cancel" buttons.

Parameter	Value	Unit
[effluent] maximum TSS concentration	20.0	mg/L
[effluent] maximum COD concentration	40.0	mg/L
[effluent] maximum BOD concentration	10.0	mg/L
[effluent] maximum ammonia concentration	4.0	mgN/L
[effluent] maximum TKN concentration	6.0	mgN/L
[effluent] maximum TN concentration	10.0	mgN/L
[effluent] maximum NOx (NO2+NO3) concentration	4.0	mgN/L

Figura 14. Valores límites del efluente.



ANEXO II: DATOS OPERACIONALES Y RECOPIACIÓN DE DATOS.

En este anexo se incluyen diversas capturas de pantalla del proceso de especificación de los parámetros de los diferentes escenarios simulados y la extracción de información de los resultados de modelización.

Parameter	Value
[mlss(1)] DO setpoint	2.0
[mlss(2)] DO setpoint	2.0
[mlss(3)] DO setpoint	2.0
[mlss(4)] DO setpoint	2.0
[mlss(5)] DO setpoint	2.0

Figura 15. Configuración del sistema de aireación 0. Donde [mlss(x)] DO setpoint = 2 corresponde al valor de oxígeno suministrado al tanque x del biorreactor.

Scenario	[mlss(1)]	[mlss(2)]	[mlss(3)]	[mlss(4)]	[mlss(5)]
1.1	0.0	0.0	1.0	1.0	1.0
1.2	0.0	0.0	1.5	1.5	1.5
1.3	0.0	0.0	2.0	2.0	2.0
1.4	0.0	0.0	2.5	2.5	2.5
1.5	0.0	0.0	3.0	3.0	3.0

Figura 16. Diferentes escenarios simulados (1.1, 1.2, 1.3, 1.4 y 1.5) en el sistema de aireación 1. Cada escenario posee una configuración distinta en el suministro de oxígeno disuelto.

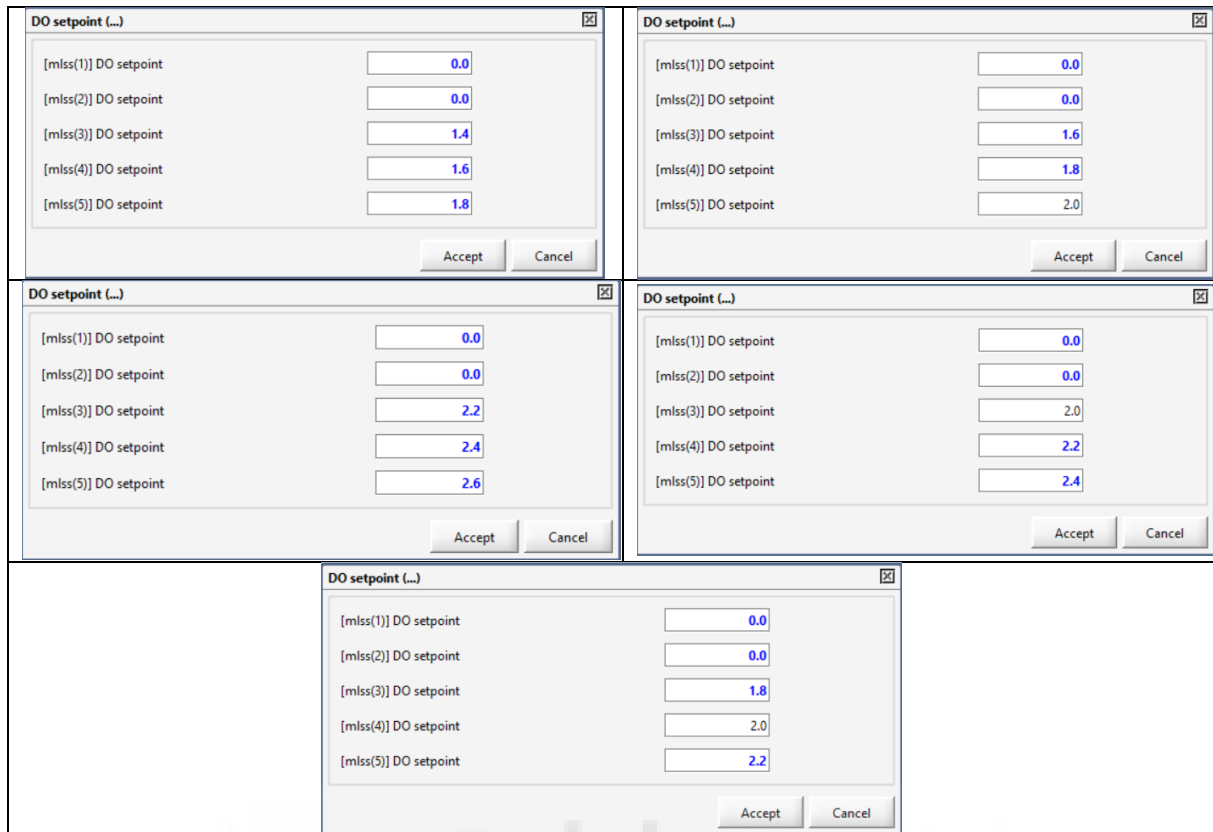


Figura 17. Diferentes escenarios simulados (2.1, 2.2, 2.3, 2.4 y 2.5) en el sistema de aireación 2. Cada escenario posee una configuración distinta en el suministro de oxígeno disuelto.

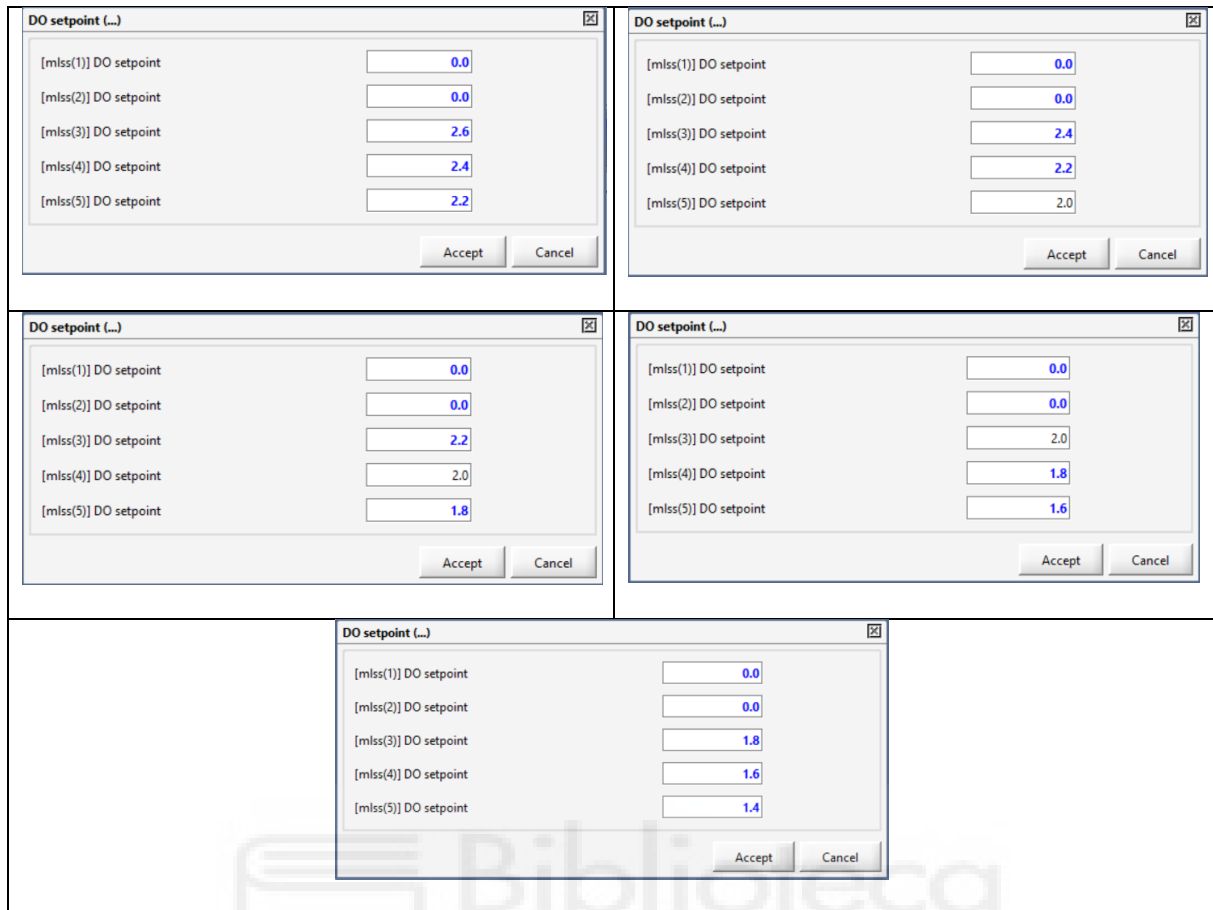


Figura 18. Diferentes escenarios simulados (3.1, 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5) en el sistema de aireación 3. Cada escenario posee una configuración distinta en el suministro de oxígeno disuelto.

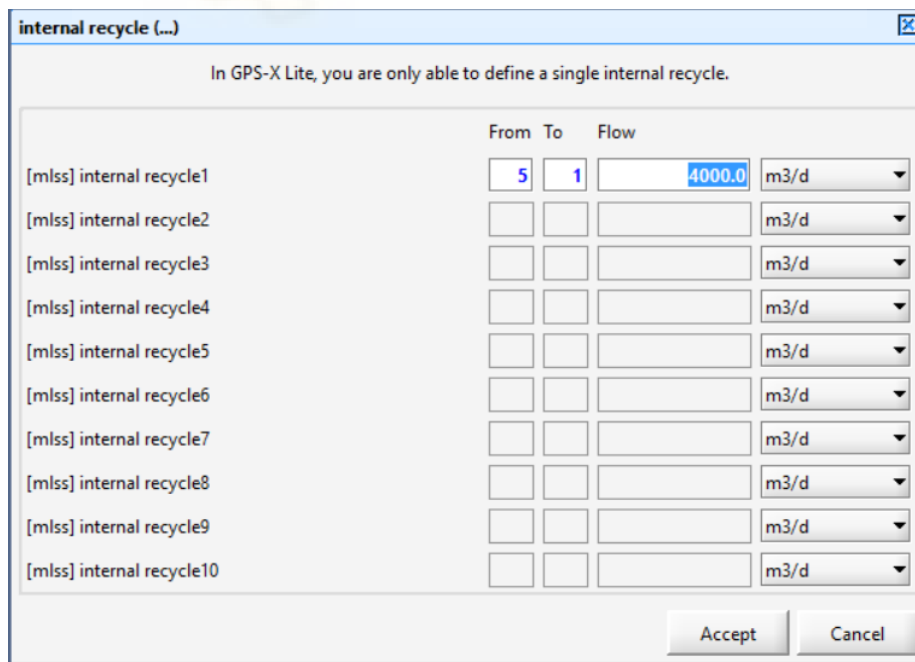


Figura 19. Se observa que le valor de recirculación interna es de 4000 m³/día, siendo esta recirculación del tanque 5 al 1 del reactor biológico.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V	W	X	Y	Z	AA	
	SIMULATION RESULTS																				MASS FLOWS			POWER (kw)				
	Flow(m ³ /d)	TSS(mg/L)	VSS(mg/L)	BO5(mg/L)	OD(mg/L)	COD(mg/L)	SOD(mg/L)	Ammonia N(mg/L)	TN(mg/L)	TKN(mg/L)	Alkalinity	MLSS(mg/L)	MVSS(mg/L)	Nitrite/Nitrate	Air Flow(m ³ /h)	TSS(Kg/d)	COD(Kg/d)	TN(Kg/d)	Aeration	Pumping	Mixing	Heating	Other	Total				
3	Influyente	2000	238,9	179,2	232,7	430	107,5	25	40	40	350	238,9	179,2		477,8	860	80	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
4	MLSS1					2,002	28,28	1,499			201,2	3543	2309	18,16														
5	MLSS2					2	24,5	0,1793			192,7	3531	2297	19,24														
6	MLSS3					2	23,38	0,1007			190,2	3522	2288	19,84														
7	MLSS4					2	23,02	0,1029			187,7	3514	2280	20,54														
8	MLSS5					2	22,93	0,1016			185,2	3507	2273	21,25														
9	MLSS	4000	3507	2273	983,9		3387		0,1016	241,3	262,6	185,2		21,25	14030	13550	1050											
10	Efluente	1954	11,74	7,61	4,248	34,21			0,1016	1,563	22,82	185,2		21,25	22,94	66,84	44,58											
11	WAS	46,3	6844	4456	1919	6588			0,1016	470,2	491,5	185,2		21,25	316,9	305	22,78											
12	RAS	2000	6844	4456	1919	6588			0,1016	470,2	491,5	185,2		21,25	13690	13100	983											
13	Efluente	1954	11,74	7,61	4,248	34,21			0,1016	1,563	22,82	185,2		21,25	22,94	66,84	44,58											
14	Influyente	2000	238,9	179,2	232,7	430	107,5	25	40	40	350	238,9	179,2		477,8	860	80	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
15	MLSS1					0,000447	34,58	10,01			296	3575	2341	0,1415														
16	MLSS2					1,38E-06	33,89	10,31			297,5	3575	2342	0,0004047														
17	MLSS3					0,9809	27,77	2,613			252,7	3555	2321	4,807														
18	MLSS4					0,9799	25,9	4,561			239,6	3537	2303	6,372														
19	MLSS5					1,01	24,99	0,1902			236,8	3525	2291	6,891														
20	MLSS	4000	3525	2291	1010	3415			0,1902	244,1	251	236,8		6,891	14100	13660	1004											
21	Efluente	1954	11,74	7,64	5,267	35,69			0,1902	2,049	8,939	236,8		6,891	22,97	69,74	17,46											
22	WAS	46,3	6879	4471	1969	6641			0,1902	475,2	482	236,8		6,891	318,5	307,5	22,32											
23	RAS	2000	6879	4471	1969	6641			0,1902	475,2	482	236,8		6,891	13760	13280	964,1											
24	Efluente	1954	11,74	7,64	5,267	35,69			0,1902	2,049	8,939	236,8		6,891	22,97	69,74	17,46											
25	Influyente	2000	238,9	179,2	232,7	430	107,5	25	40	40	350	238,9	179,2		477,8	860	80	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
26	MLSS1					0,000731	32,16	9,768			294,5	3574	2340	0,2083														
27	MLSS2					1,9E-06	31,15	10,08			296,7	3574	2340	0,006964														
28	MLSS3					1,517	27,55	2,186			248,1	3553	2319	5,711														
29	MLSS4					1,501	25,7	0,3449			235,6	3535	2301	7,379														
30	MLSS5					1,494	24,18	0,1602			232,2	3523	2289	8,143														
31	MLSS	4000	3523	2289	1007	3413			0,1602	243,8	252	232,2		8,143	14090	13650	1008											
32	Efluente	1954	11,75	7,638	5,122	35,48			0,1602	1,983	10,13	232,2		8,143	22,96	69,32	19,78											
33	WAS	46,3	6876	4468	1964	6637			0,1602	474,8	482,9	232,2		8,143	318,3	307,3	22,36											
34	RAS	2000	6876	4468	1964	6637			0,1602	474,8	482,9	232,2		8,143	13750	13270	965,8											
35	Efluente	1954	11,75	7,638	5,122	35,48			0,1602	1,983	10,13	232,2		8,143	22,96	69,32	19,78											

Figura 20. Estructura de la hoja de Excel que recopila los datos proporcionados por las simulaciones.

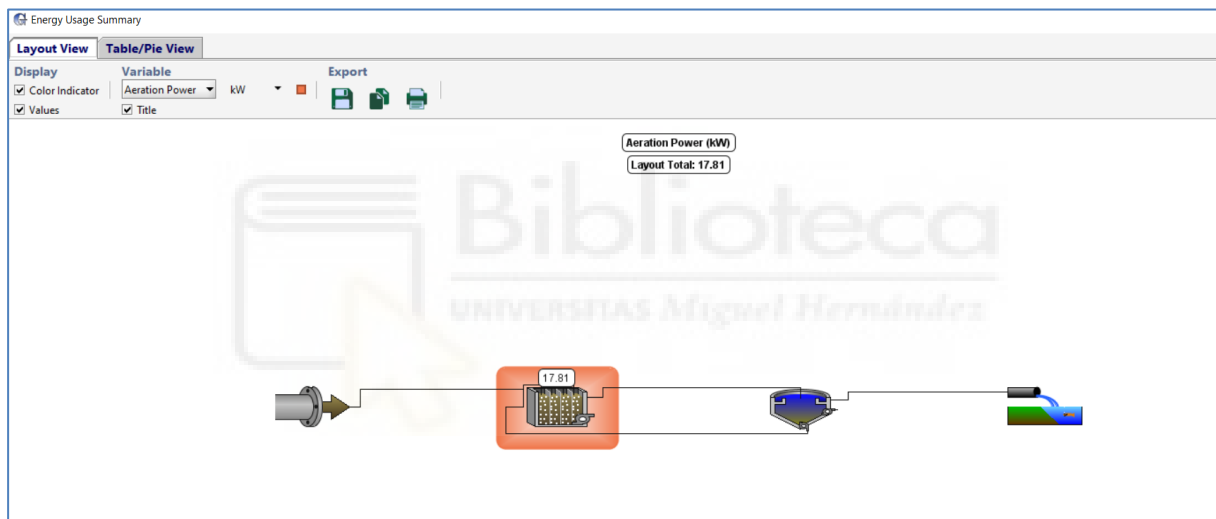


Figura 21. Captura de pantalla del GPS-X Lite, donde se muestra el consumo de energía de la aireación (sistema de aireación 3, escenario 3.5)

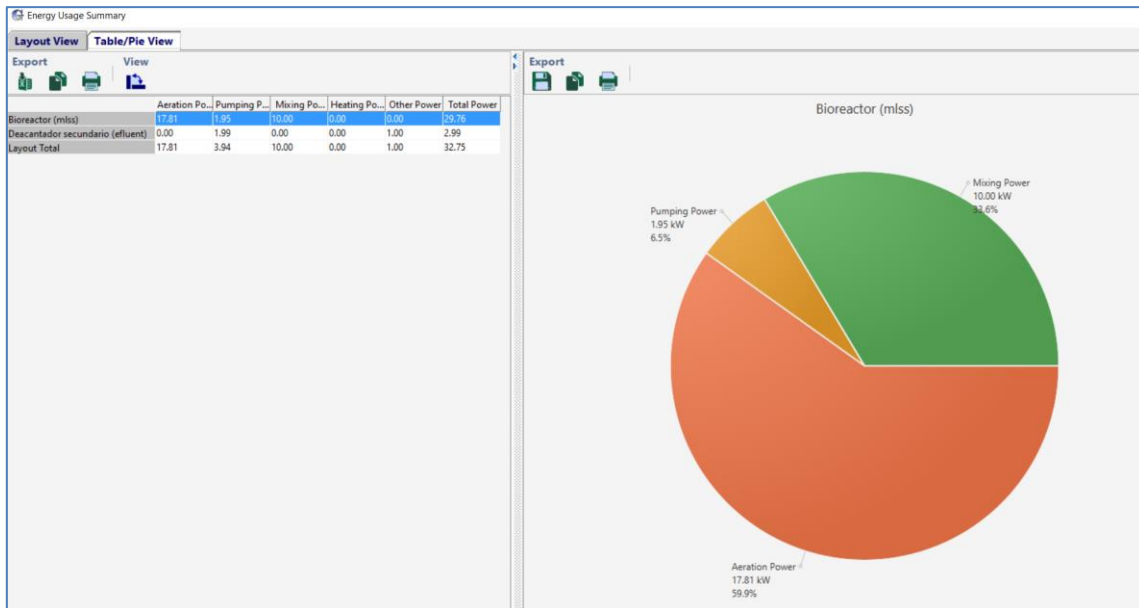


Figura 22. Captura de pantalla del GPS-X Lite, donde se muestra el gráfico del consumo total de energía de un determinado escenario, en este caso, el 3.5.

