



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

# Universidad Nacional Autónoma de México

---

## PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA

Instituto de Ingeniería

### Modelo para la estimación de la tasa de respiración en un SBR

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

**MAESTRO EN INGENIERIA**

ING. AMBIENTAL - AGUA

P R E S E N T A:

**Ing. Rosangela Zaragoza Pérez**

TUTOR:

**Dr. Alejandro Vargas Casillas**



**JURADO ASIGNADO:**

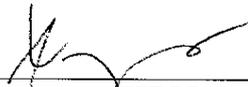
Presidente: Dr. Alfonso Durán Moreno  
Secretario: Dr. Alejandro Vargas Casillas  
Vocal: Dr. Víctor Alcaraz González  
1<sup>er</sup>. Suplente: Dr. Gerardo René Espinosa Pérez  
2<sup>do</sup>. Suplente: Dr. Simón González Martínez

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:

Coordinación de Bioprocesos Ambientales, Instituto de Ingeniería, UNAM

**TUTOR DE TESIS:**

Dr. Alejandro Vargas Casillas



---

**FIRMA**

**No basta saber, se debe también aplicar.  
No es suficiente querer, se debe también hacer.**

Johann Wolfgang Goethe

## **Agradecimiento**

A Dios, por estar conmigo a cada paso que doy y por brindarme la oportunidad de alcanzar una meta más en mi vida.

A mi hija Sofía Ayelen que llegaste a cambiar e iluminar mi vida, eres mi mayor tesoro. Gracias por tus sonrisas y besos.

A mi esposo por su amor y apoyo incondicional, por estar conmigo en los momentos más difíciles a lo largo de la realización de este proyecto. Gracias por tu paciencia, TE AMO.

A mis Padres por su comprensión y cariño, que con su ejemplo me han hecho la mujer que soy. Gracias por su amor.

A Sra. Lina y al Sr. Alejandro por su apoyo incondicional y ayuda.

A mis hermanas Sandra y Angélica, que aun cuando no estaban de acuerdo con mi decisión me apoyaron y alentaron para seguir. Las quiero mucho

A mi hermano **Rubén**, que me apoyaste desde el primer momento, pues decías que siempre lograba lo que me proponía. Me hace mucha falta tu presencia y tu compañía. Te extraño mucho. **Esta tesis es a tu memoria.**

Al Dr. Alejandro por su asesoría y dirección en el trabajo de investigación realizada así como sus observaciones, sugerencias y paciencia.

A todos los profesores del Instituto que gracias a sus enseñanzas y vivencias obtuvimos un poco más de conocimiento.

A la UNAM por la oportunidad de una educación de calidad y por las enseñanzas obtenidas en sus aulas

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico que recibí durante la realización de mi tesis

A todas aquellas personas que con su amistad y confianza hicieron de esta etapa de mi vida un momento grato, esperando que esta amistad que ahora nos une crezca día con día

## Indice

Resumen	i
Abstract	ii
<b>Capítulo I. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Justificación	2
1.2. Objetivos generales	4
1.3. Objetivos particulares	4
1.4. Metas	5
<b>Capítulo II. Antecedentes</b>	<b>6</b>
2.1. Reactor discontinuo secuencial (SBR)	6
2.2. Transferencia de oxígeno	8
2.2.1 Coeficiente de transferencia de masa de oxígeno ( $k_La$ )	9
2.2.2 Efecto de consumo de oxígeno	10
2.2.3 Métodos de estimación del $k_La$	11
2.3. Respirometría	16
2.4. Control de oxígeno disuelto (OD)	18
2.5. Control robusto y de tiempo óptimo	20
<b>Capítulo III. Metodología y materiales</b>	<b>24</b>
3.1 Descripción del biorreactor	24
3.2 Hardware	25
3.3 Desarrollo experimental	26
3.3.1 Montaje y aclimatación del reactor	26

3.3.2	Determinación del modelo del sensor	27
3.3.3	Determinación del modelo del coeficiente de transferencia de masa de oxígeno (kLa)	27
3.3.4	Ajuste de parámetros con pruebas dinámicas	29
<b>Capítulo IV. Resultados</b>		<b>31</b>
4.1	Modelo matemático	33
4.1.1	Estructura general	33
4.2	Modelo del sensor	34
4.3	Determinación del modelo del sensor	36
4.4	Modelo de transferencia de oxígeno	37
4.4.1	Determinación del modelo de transferencia de oxígeno	39
4.5	Modelo de respiración biológica	41
4.6	Pruebas experimentales del modelo dinámico	45
4.7	Desempeño del reactor y graficas de respirometría experimentales	46
4.8	Cinéticas de biodegradación	48
<b>Conclusiones</b>		<b>49</b>
5.1	Trabajo a futuro	50
Referencias		51
Apéndice A		54

## Índice de figuras

1.	Figura 2.1	Etapas de un ciclo de operación de un reactor SBR	7
2.	Figura 2.2	Teoría de doble capa	9
3.	Figura 2.3	Valor de $k_{La}$	12
4.	Figura 2.4	Métodos dinámicos	13
5.	Figura 2.5	Calculo de $k_{La}$	15
6.	Figura 2.7	Estrategia ED-TOC	22
7.	Figura 4.1	Reactor	31
8.	Figura 4.2	Interfaz con el usuario	32
9.	Figura 4.3	Registro del proceso	33
10.	Figura 4.4	Modelo matemático: dinámica del OD en el SBR	34
11.	Figura 4.5	Respuesta un escalón unitario (sistema de segundo orden)	35
12.	Figura 4.6	Caracterización del sensor	37
13.	Figura 4.7	Efecto del parámetro m	38
14.	Figura 4.8	Modelo de transferencia en las diferentes corridas	39
15.	Figura 4.9	Modelo de transferencia de oxígeno	40
16.	Figura 4.10	Modelo Monod	43
17.	Figura 4.11	Modelo Haldane	44
18.	Figura 4.12	Modelo $k_{La}$ vs $Q_{air}$	45
19.	Figura 4.13	Respirometria	46
20.	Figura 4.14	Cinéticas	48

## **1. Introducción**

El tratamiento y reutilización de aguas residuales industriales ha tomado importancia en todos los países, lo cual obliga a mejorar las tecnologías de tratamiento utilizadas para no sólo cumplir las normas ambientales, sino también para abatir los costos de construcción y operación, pues esto afecta directamente la economía industrial. Para poder satisfacer lo anterior son necesarios, además de procesos de tratamiento eficaces, estrategias de control adecuadas.

En las aguas residuales industriales es común encontrar contaminantes orgánicos resistentes a la biodegradación química y tóxicos para el desarrollo de la actividad de los microorganismos en tratamientos biológicos convencionales. Estos contaminantes son producidos por las industrias química, petroquímica, textil, papelera y farmacéutica, entre otras. Algunas tecnologías de tratamiento avanzadas han utilizado procesos de oxidación bioquímica, los cuales permiten la mineralización de contaminantes a dióxido de carbono y agua o su transformación hacia otros productos de menor toxicidad que sean fácilmente biodegradables. Dentro de estas tecnologías de tratamiento biológico se encuentran los reactores discontinuos secuenciales (SBR), que son utilizados en el tratamiento y depuración de aguas residuales industriales y han demostrado ser una de las mejores opciones para este tipo de aguas residuales. Las condiciones de operación de la tecnología SBR han sido ampliamente estudiadas utilizando tanto agua sintética como real.

En el Instituto de Ingeniería se ha trabajado en el manejo y operación de este tipo de reactores aerobios y en trabajos previos se han propuesto técnicas que combinan la teoría de control automático, el control de procesos y los métodos avanzados para el tratamiento de aguas residuales, encaminados a mejorar las capacidades de procesos SBR para el tratamiento de efluentes tóxicos.

Un paso más allá consiste en emplear la instrumentación y controladores automáticos para incrementar la productividad, reducir el consumo de energía e incrementar la fiabilidad de la planta. Sin embargo, para plantear estrategias de control adecuadas conviene contar con modelos matemáticos. En el caso de biorreactores aerobios, un modelo matemático que es importante conocer es el que describe adecuadamente la relación entre el oxígeno disuelto y el flujo de aire que entra al reactor.

## Resumen

En el presente trabajo de tesis se explica una estrategia de estimación de la tasa de respiración en un reactor secuencial discontinuo (SBR), por medio del desarrollo de un modelo matemático que considera la dinámica del oxígeno disuelto. La importancia del estudio radica en tomar en cuenta los diversos factores que entran y afectan directamente al sistema biológico, para así ayudar en el desarrollo de tecnologías de aplicación industrial.

Para proponer los modelos de estimación para el sistema se utilizó en la experimentación un biorreactor piloto de 10 L, con un volumen de operación de 3 (L) y uno máximo de 7 (L), el cual se inoculó con lodo extraído de la planta de tratamiento del Cerro de la Estrella. El sistema fue alimentado con agua sintética preparada de 4-clorofenol continuamente.

El modelo se desarrolló en base a la dinámica del oxígeno disuelto, tomando en cuenta el suministro de aire ( $Q_{air}$ ), el cual provoca un cierto coeficiente de transferencia de masa de oxígeno ( $k_La$ ); el transporte del oxígeno disuelto (OD) por el caudal de la planta, el consumo producido por la actividad biológica y una entrada incierta al sistema que es la tasa de respiración ( $r$ ). Pero considerando que la salida producida por el OD no se puede leer directamente, por lo que se utilizó un sensor con dinámica propia y esta variable es la que deseamos leer.

La integración del sistema de ecuaciones diferenciales y algebraicas obtenidas, y el ajuste de los parámetros del modelo, se realizaron mediante la programación en Matlab y LabView. Los valores de los parámetros que mejor ajustaron el modelo matemático a los resultados experimentales fueron: para las variables del sensor:  $\tau_1=78$  seg y  $\tau_2=48$ seg, los cuales se consideraron para el ajuste del modelo de  $k_La$  y  $Q_{air}$ . El valor de estos últimos fue el promedio de las diferentes corridas obtenidas en los experimentos. En el capítulo cuatro se presenta el modelo empleado y los resultados experimentales que permiten observar con suficiente precisión los ajustes de los parámetros los cuales son usados en el modelo de estimación de la tasa de respiración.

## Abstract

This thesis work explained a strategy to estimate the rate of respiration in a sequential intermittent reactor (*SBR*), by developing a mathematical model that considers the dynamics of dissolved oxygen. The importance of the study is to take into account several factors that come and directly affect the biological system; in that way, they help the development of technologies for industrial application.

To propose models to estimate the system was used in testing a pilot of 10 L bioreactor, with a volume of transaction 3 (L) and a maximum of 7 (L), which are inoculated with mud extracted from the Treatment Plant of “Cerro de la Estrella”. The system was fed with synthetic water prepared for 4-chlorophenol continuously.

The model was developed based on the dynamics of dissolved oxygen, taking into account the provision of air ( $Q_{air}$ ), which causes a certain ratio of mass transfer of oxygen ( $k_{La}$ ), the transport of dissolved oxygen (DO) by the flow of the plant, consumption produced by biological activity and an uncertain entrance to the system which is the rate of respiration ( $r$ ). But, considering that the output produced by the OD can not be read directly, we use a sensor with a dynamic variable and this is what we want to read.

The integration of the system of differential equations and algebraic obtained, and adjusting the parameters of the model were made by programming in Matlab and LabView. So, the model can adequately describe the system under study. The parameters values parameters that best adjusted the mathematical model to the experimental results were: for the variables of the sensor:  $\tau_{11} = 78$  sec and  $\tau_2 = 48$ seg, which was considered to adjust the model of  $k_{La}$  and  $Q_{air}$ . The value of the latter was the average of different races obtained in the experiments. In Chapter Four presents the model used and experimental results show that with sufficient precision adjustment of the parameters which are used in the model to estimate the rate of respiration.

## 1.1 Justificación

La transferencia de oxígeno dentro de reactores secuenciales discontinuos aerobios es un proceso importante, pues determina el ambiente adecuado para la función degradadora de contaminantes por microorganismos aerobios. Por ello, conocer el valor de la tasa de respiración real de los microorganismos presentes en el reactor para el tratamiento de agua, permite determinar la cantidad de aire que se debe suministrar para el correcto funcionamiento del estado biológico del proceso, ante la posible presencia de inhibición y toxicidad en el agua residual. A través de esta variable es posible conocer el requerimiento energético necesario y así implementar estrategias para incrementar la eficiencia y reducir los costos de operación del proceso.

Actualmente, para medir la tasa de respiración dentro de los reactores biológicos para el tratamiento de agua residual se utilizan los respirómetros, que son equipos complejos que se encargan de analizar muestras extraídas del proceso en las llamadas pruebas respirométricas. Dichas pruebas también pueden realizarse de manera manual y no automatizada, pero el tiempo de procesamiento y la incertidumbre asociada es grande.

Medir la tasa de respiración usando uno de estos equipos implica mayor trabajo y costos asociados, además de que los resultados obtenidos de las respirometrías no son en tiempo real y por lo tanto ya no son útiles para ser empleados en controladores automáticos. Los modelos matemáticos existentes para describir la dinámica del oxígeno disuelto resultan adecuados cuando se tiene variaciones en el flujo de aire, y por lo tanto en el coeficiente de transferencia de masa de oxígeno ( $k_La$ ), es lenta, o bien si la tasa de respiración no cambia drástica o súbitamente.

El oxígeno disuelto en el seno del reactor (OD) puede ser limitante en una reacción bioquímica aerobia si éste llega a niveles suficientemente bajos, pero tampoco aporta

ninguna ventaja adicional si se mantiene en niveles cercanos a la saturación. Por ello, es común la regulación de esta variable en un valor de referencia, empleando para ello controladores automáticos que manipulan el flujo de aire para este propósito. Aunque es común el uso de controladores clásicos, tales como los PID, se obtiene una mejora sustancial al hacer uso de modelos matemáticos adecuados para el diseño de los mismos. Esto redundaría en una mejora en la eficiencia energética de la planta, ahorrando energía que de otra manera se desperdiciaría operando los sopladores o aeradores por encima de lo requerido.

Moreno y Buitrón (2004) han propuesto una estrategia de operación para reactores discontinuos secuenciales (SBR) que mejora la robustez del proceso ante variaciones en el influente, tanto en toxicidad, como en concentración. Dicha estrategia se basa en una determinación de la tasa másica de consumo de oxígeno, la cual se considera proporcional a la tasa específica de biodegradación. Esta tasa se estima a partir de la señal medida en línea del oxígeno disuelto, pero bajo la condición de que el flujo de aire sea constante, de tal manera que  $k_{La}$  también lo sea. Si se implementa un control de oxígeno disuelto para que este se mantuviera constante a lo largo de la reacción, manipulando el flujo de aire, esta estrategia dejaría de funcionar adecuadamente ya que la determinación de la tasa másica de consumo de oxígeno se basa en detectar las variaciones en el oxígeno disuelto cuando la entrada del aire es constante, pues no toma en cuenta la dinámica del sensor de oxígeno, ni la de los actuadores.

Mediante un modelo matemático para explicar el perfil observado del OD, tomando como variable de entrada el flujo de aire y como variable de salida el oxígeno disuelto medido por el sensor, se espera que sea posible no sólo proponer mejores estrategias de regulación para mantener el OD en un valor de referencia, sino también para adecuar la estrategia de operación del SBR ante este cambio operacional.

## **1.2 Objetivo general**

Obtener un modelo matemático que describa adecuadamente la dinámica del oxígeno disuelto en un proceso SBR empleado para tratamiento de efluentes tóxicos ante variaciones del flujo de aire.

### **1.3 Objetivos particulares**

La base del modelo propuesto es la correcta estimación de la tasa de respiración en un biorreactor de tipo SBR a partir de mediciones en línea de la concentración de oxígeno disuelto (OD). Por ello, se plantean como objetivos particulares la obtención de:

1. Un modelo matemático para predecir el comportamiento de la concentración OD en el sensor del reactor.
2. Un modelo matemático que relacione el coeficiente de transferencia de masa de oxígeno ( $k_L a$ ) con el flujo de aire ( $Q_{air}$ ).
3. Un modelo matemático para estimar la tasa de respiración que sea adecuado para usarse con una estrategia de control óptimo como ED-TOC (véase capítulo II); es decir, que considere las variaciones en el flujo de aire.

### **1.4 Metas**

Con base en la justificación anterior, se proponen las siguientes metas encaminadas a obtener un modelo matemático adecuado de la dinámica del OD en un biorreactor de tipo SBR empleado para el tratamiento de aguas residuales tóxicas.

1. Establecer una metodología para obtener los parámetros del modelo matemático que describe el comportamiento del oxígeno disuelto considerando también la dinámica del sensor y la dependencia no lineal del  $k_{La}$  con respecto a  $Q_{air}$ .
2. Validar el modelo matemático del comportamiento del OD mediante pruebas experimentales donde el flujo de aire que entra al reactor varía considerablemente.
3. Proponer un modelo de estimación de la tasa de respiración con base en el modelo matemático propuesto.

## **2. Antecedentes**

### **2.1 Reactor discontinuo secuencial aerobio (SBR)**

Los procesos biológicos han sido ampliamente utilizados para el tratamiento de efluentes tóxicos, los cuales son producidos principalmente por las actividades industriales. Estas aguas residuales contienen contaminantes orgánicos que muchas veces son resistentes a la degradación por vía química convencional y que resultan tóxicos para el desarrollo de la actividad de los microorganismos. Entre los procesos de tratamiento biológico se encuentran los reactores discontinuos secuenciales que han demostrado su capacidad para el tratamiento y depuración de aguas residuales industriales (Wilderer et al. 2001).

Los reactores discontinuos secuenciales, (genéricamente llamados SBR por sus siglas en inglés), son sistemas de tratamiento de lodos activados que operan mediante un procedimiento de llenado y vaciado alternante en un mismo tanque, a diferencia de los procesos continuos donde más de un tanque es necesario. El agua residual es adicionada a un solo reactor que trabaja repitiendo un ciclo (secuencia) a lo largo del tiempo. Este proceso de tratamiento biológico es muy eficiente en cuanto a costo y a la eficiencia de remoción de contaminantes orgánicos en aguas domésticas e industriales (Wilderer et al. 2001).

El principio de operación de un SBR aerobio se basa en la siguiente secuencia: llenado-reacción-sedimentación-vaciado, como se ilustra en la figura 2.1. Normalmente las dos primeras etapas varían en duración dependiendo del flujo y la carga orgánica; las dos siguientes (sedimentación/vaciado) son de duración constante.

En la fase de llenado, se introduce el agua residual al sistema. Durante la segunda fase del ciclo, el agua residual es mezclada mecánicamente para homogenizar la distribución de microorganismos y sustratos en el reactor y eliminar las posibles espumas superficiales. En esta fase de reacción puede también funcionar con la de llenado al operar el reactor en lote alimentado (fedbatch). Esta fase puede ser aerobia si las reacciones bioquímicas se

llevan a cabo en presencia de oxígeno, o anóxica o anaerobia si hay ausencia de oxígeno disuelto en el medio. En el caso de un SBR aerobio, la etapa de reacción es un proceso cuyos resultados varían con su duración, y en la que el agua residual es continuamente mezclada y aerada, permitiendo que se produzca el proceso de degradación biológica. La tercera etapa, llamada de sedimentación, genera condiciones de reposo en todo el tanque para que los lodos (el consorcio de microorganismos que llevan a cabo la biodegradación) puedan sedimentar. Durante la última fase (vaciado), el agua tratada es retirada del tanque mediante un sistema de eliminación del sobrenadante superficial. Finalmente, se puede purgar el lodo generado en el reactor para mantener más o menos constante la cantidad de biomasa durante una etapa de tiempo muerto previa al reinicio del ciclo.

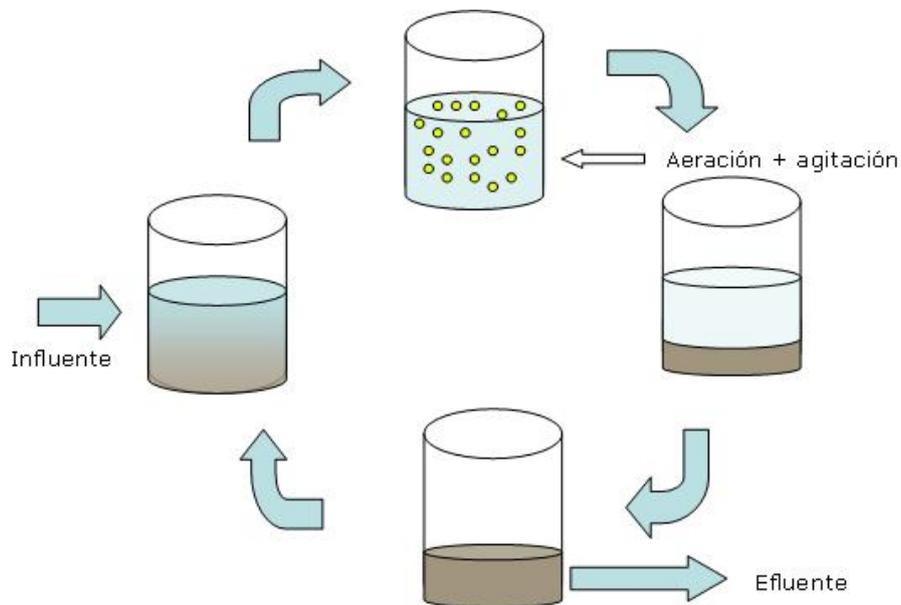


Figura 2.1. Etapas de un ciclo de operación de un reactor SBR aerobio.

Dado que en un SBR los microorganismos están expuestos a concentraciones variables a lo largo de las fases de llenado y reacción, su población es más tolerante a cambios en la concentración de tóxicos en el influente y logran soportar un rango mayor de cargas orgánicas (Moreno-Andrade y Buitrón, 2004).

## 2.2 Transferencia de oxígeno

La transferencia de gases es un proceso importante en el tratamiento de agua. En el caso de aguas residuales que pueden ser tratadas mediante diferentes procesos, tales como los reactores secuenciales discontinuos, la eficiencia depende de la disponibilidad de cantidades suficientes de oxígeno.

Existen varias teorías que han sido propuestas para el mecanismo de transferencia de oxígeno en el agua. Estas teorías son ampliamente utilizadas al modelar la cinética de la transferencia de oxígeno. Aún cuando existen modelos complejos para explicarla, las formas más sencillas han probado ser efectivas en el diseño de sistemas de aereación y proporcionan predicciones equivalentes de transferencia de oxígeno (Antezana, 2003).

La teoría más utilizada para explicar el mecanismo de transferencia de masa en el intercambio gas-líquido es la teoría de la doble capa de Whitman (1923). El modelo se basa en la existencia de dos capas: una de líquido y otra de gas en la interfase gas-líquido. Estas dos fases presentan una resistencia al paso de las moléculas de gas de una fase a otra.

En el caso de gases poco solubles, la capa que ofrece una mayor resistencia al paso de las moléculas de la fase gaseosa a la fase líquida se le conoce como la capa líquida y la capa gaseosa se da con los gases mucho más solubles en agua y es la capa que presenta una mayor resistencia.

En la figura 2.2 se muestra una distribución de estas capas. Para cada gas, existe un determinado gradiente de presión parcial a lo largo de la película delgada de gas, representado por  $P$  y  $P^*$ , donde  $P^*$  es la presión parcial del gas en la interfase, y  $P$  es la presión parcial en el resto de la masa de gas. A lo largo de la película delgada, existe un gradiente de concentraciones de  $O_2$  representado por  $C$  y  $C^*$ , donde  $C^*$  es la concentración de  $O_2$  en la interfase y  $C$  la concentración de  $O_2$  en el resto del líquido ( $C^* > C$ ) (Molina, et al. 2003)

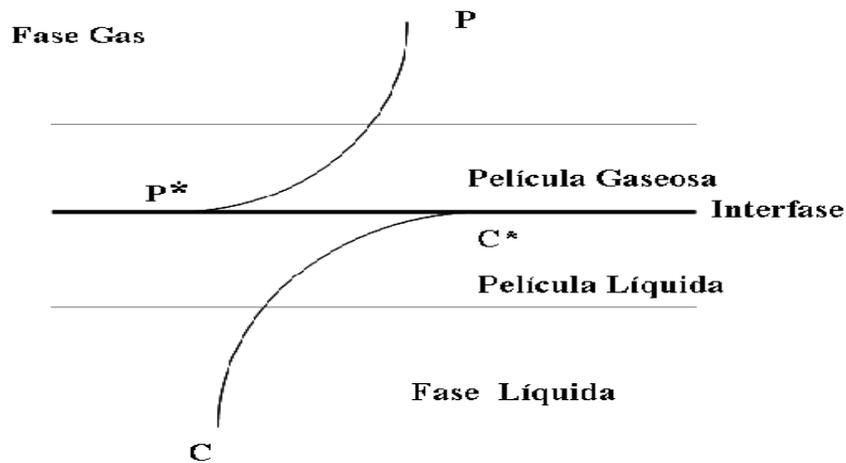


Figura 2.2. Teoría de doble capa para la transferencia de gases

### 2.2.1 Coeficiente de transferencia de masa de oxígeno ( $k_L a$ )

La velocidad de transferencia de oxígeno desde la fase gaseosa (burbujas) hasta la fase líquida (medio líquido) está determinada por la ecuación 2.1, (Erazo et al, 2001)

$$\frac{dC}{dt} = k_L a (C^* - C); C(0) = C_0 \quad (2.1)$$

En esta ecuación  $dC/dt$  es la razón de cambio de OD con respecto al tiempo,  $k_L a$  representa el coeficiente de transferencia de oxígeno,  $C$  es la concentración de oxígeno disuelto en el seno del líquido,  $C^*$  es la concentración de oxígeno disuelto en equilibrio con la presión parcial de oxígeno de la fase gaseosa y  $C_0$  es la concentración inicial del OD. El valor de  $k_L a$ , y por lo tanto el grado de transferencia de oxígeno desde el seno del líquido hasta las células o microorganismos en cultivo, depende del diseño del biorreactor y de las condiciones de operación del sistema de cultivo: flujo de aire, volumen del líquido, régimen de agitación, etc. En realidad  $k_L a$  es el producto de dos parámetros:  $k_L$  es el coeficiente de transferencia de oxígeno en la interface líquido-gas, mientras que  $a$  representa la razón de área superficial de burbujas con respecto al volumen total de agua. De esta manera,

disminuyen el  $k_L a$ : la viscosidad y el volumen del líquido y aumentan el  $k_L a$ : el área de transferencia, la agitación y la presencia de dispositivos que aumenten una, la otra, o ambas. Por otro lado, a la diferencia  $(C^*-C)$  se le conoce como el déficit de oxígeno. Es de destacar que el valor de  $C^*$  se puede calcular usando la ley de Henry y varía con la temperatura y la presión parcial de oxígeno. (Sinclair, 1987)

Considerando lo anterior, si no hay consumo de oxígeno, el oxígeno disuelto debe tender exponencialmente a su valor de saturación cuando se introduce aire al reactor a través de difusores o aeradores, puesto que la solución de la ecuación 2.1 es ecuación 2.2. La tasa con la cual tiende a la saturación depende de  $k_L a$ , que a su vez depende de la cantidad de aire que entre, entre otros muchos factores como son la temperatura, la viscosidad, etc.

$$C(t) = C^* (1 - \exp(-k_L a t)) + C_0 \exp(-k_L a t) \quad (2.2)$$

### 2.2.2 Efecto del consumo de oxígeno

Cuando en el medio líquido se encuentran microorganismos aerobios, éstos consumen el oxígeno disuelto para realizar sus funciones metabólicas. Aún si no se está llevando a cabo la biodegradación de un contaminante, existe una tasa basal de respiración, llamada tasa de respiración endógena, la cual es proporcional a la concentración de microorganismos presentes,  $X$ . Entonces la dinámica del oxígeno disuelto está regida por la siguiente ecuación diferencial 2.3:

$$\frac{dC}{dt} = -bX + k_L a (C^* - C) \quad (2.3)$$

Si la concentración de microorganismos se mantiene constante y la tasa específica de respiración endógena  $b$  también lo es, entonces el valor del oxígeno disuelto tiende al valor de estado estacionario siguiente:  $C^*-bX/k_La$ , se compone la tasa de transferencia con la tasa de consumo. Por otro lado, si no hay suministro de aire, entonces  $k_La=0$  y por lo tanto el OD tiende a ser consumido con una tasa igual a  $bX$ . Este comportamiento da pauta para proponer diferentes métodos experimentales para la determinación de  $k_La$ .

### 2.2.3 Métodos de estimación de $k_La$

Un método que se puede emplear para medir el valor de  $k_La$  consiste en eliminar el oxígeno disuelto mediante el burbujeo de nitrógeno o bisulfito hasta que se tenga un valor igual a  $C=0$ . Estableciendo las condiciones de operación de aeración y agitación que se desea emplear, se inicia la aeración hasta que el oxígeno disuelto esté en valores cercanos a la saturación ( $C = C^*$ ).

Se grafica entonces  $C$  en función del tiempo (figura 2.3). Si no hay consumo endógeno de oxígeno, la curva resultante es una exponencial:

$$C(t) = C^* (1 - \exp(-k_L a t)) \quad (2.4)$$

Para un tiempo suficientemente largo (cuando  $C$  llegue casi a la saturación), el área entre la curva  $C(t)=C^*$  y el perfil del OD será aproximadamente  $A=C^*/k_La$ . Véase la figura 2.3.

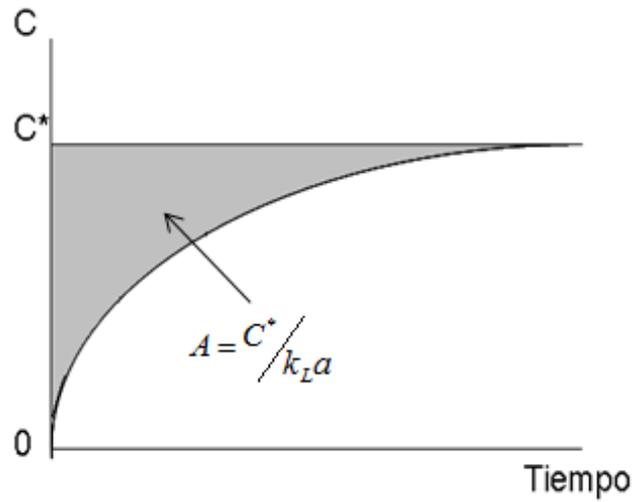


Figura 2.3. Valor de  $k_L a$

Una manera alternativa de calcular  $k_L a$ , si  $bX=0$ , es resolviendo directamente la ecuación 2.1. Si a través del tiempo se miden las distintas concentraciones de oxígeno en el medio ( $C$ ), como resultado de la integración de la ecuación (2.1) se tiene que

$$\ln\left(\frac{1-C}{C^*}\right) = k_L a * t \quad (2.5)$$

Se observa que es una relación lineal y graficando  $\ln\left(\frac{1-C}{C^*}\right)$  en función del tiempo, la pendiente de la recta resultante es  $k_L a$ .

Las ventajas de este método es que es relativamente rápido y puede usarse directamente en el medio. Sus limitaciones son que es que se requieren grandes volúmenes de nitrógeno, por lo que no es usado a gran escala y no contempla el hecho de que  $bX>0$ , ni una condición inicial de  $C$ , ni tampoco el tiempo de respuesta del sensor de oxígeno.

Los métodos que son utilizados en condiciones de operación más acordes con la realidad utilizan un cultivo continuo. En este caso, en estado estacionario, se tiene que  $dC/dt=0$ ; es decir el OD no cambia. Entonces:

$$\begin{aligned}
 dc / dt &= \text{oferta} - \text{demanda} = 0 \\
 k_L a(C^* - C_s) - r \\
 k_L a(C^* - C_s) &= r \therefore k_L a = \frac{r}{C^* - C_s}
 \end{aligned}
 \tag{2.6}$$

Para aplicar este método sería necesario de antemano lograr que el OD se mantenga estacionario, además de conocer la tasa de respiración,  $r$ , y que ésta también sea estática.

Una manera más adecuada cuando existen condiciones dinámicas se logra introduciendo una perturbación al sistema (Taguchi y Humphrey, 1966). Se interrumpe la aeración o la agitación, por lo que el sistema responde modificando  $C$  y de su variación se puede calcular  $k_L a$ .

La medición debe efectuarse en forma rápida, cuando los parámetros fisiológicos (respiración) y cinéticos ( $C$ ,  $C^*$ ) puedan considerarse constantes. Es decir, se considera que el cultivo, desde el punto de vista biológico y fisicoquímico, se encuentra en estado estacionario. El método se ilustra en la figura 2.4.

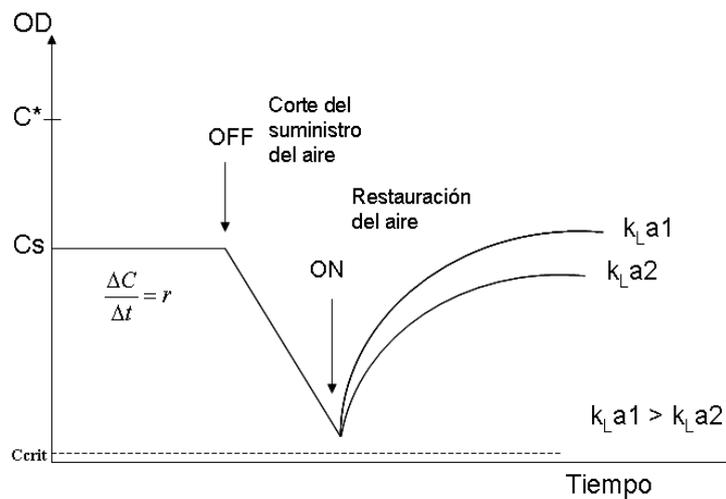


Figura 2.4. Esquema del método dinámico

El balance de OD en la fase líquida se explica en tres pasos. En el primer paso se tiene que  $r = k_L a(C^* - C)$  y  $C$  se encuentra en un valor cercano a la saturación; de hecho, de la ecuación diferencial correspondiente es posible ver que el valor de  $C$  debiera ser (Taguchi y Humphrey, 1966).

$$C = C^* - \frac{r}{k_L a} \quad (2.7)$$

Esta relación se obtiene de la ecuación diferencial, al considerar que  $dC/dt = 0$ . Sin embargo, también requiere conocer el valor exacto de  $C^*$ . En el segundo paso se suspende la aereación al sistema; considerando que  $dC/dt \neq 0$  y  $k_L a = 0$ , se tiene que  $dC/dt = r$ . El consumo de oxígeno que es registrado corresponde a la tasa de respiración (demanda) y puede calcularse por la pendiente de la recta con la variación de la concentración de oxígeno en el tiempo ( $C^*$  no debe descender al valor de  $C_{crítica}$ , que es el valor a partir del cual el OD es limitante).

En el tercer paso se restablece la aereación al sistema y entonces (Casas, 2006)

$$dC / dt = k_L a(C^* - C) - r \quad (2.8)$$

Reordenando la ecuación 2.8 se tiene lo siguiente:

$$C = C^* + \left( - \frac{1}{k_L a} \right) \left( \frac{dC}{dt} + r \right) \quad (2.9)$$

Suponiendo que es posible aproximar  $dC/dt$  en intervalos cortos entonces se puede graficar  $C$  en función de  $dC/dt + r$ , donde  $r$  se ha obtenido del paso anterior, como se observa en la figura 2.5.

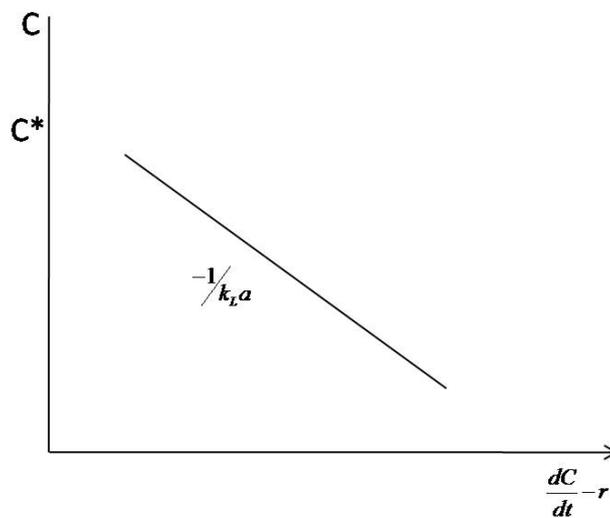


Figura 2.5. Calculo del  $k_L a$

Finalmente, otra estrategia de estimación de  $k_L a$  se obtiene resolviendo un problema de ajuste de parámetros, para lo cual hay que usar métodos de optimización o de ajuste de curvas. Integrando la ecuación 2.8 se encuentra que la respuesta del OD debe seguir un comportamiento exponencial:

$$C(t) = C_0 \exp[-k_L a t] + \left( C^* - \frac{r}{k_L a} \right) (1 - \exp[-k_L a \cdot t]) \quad (2.10)$$

Si se conoce el valor  $C^*$  y del paso anterior se ha hallado el valor de  $r$ , es posible buscar el parámetro  $k_L a$  que mejor ajuste la curva, suponiendo que  $C_0$  es conocido (es el valor de OD al inicio de este paso).

Las ventajas de este método son que la determinación se hace en *in situ*, es relativamente rápida y sólo se requiere un sensor de oxígeno disuelto. Pero también tiene sus limitaciones, pues se necesitaría un sensor de oxígeno disuelto de respuesta rápida, y el  $k_L a$  que se calcula corresponde a un valor para cierto flujo de aire o condiciones de operación.

Para minimizar los posibles errores en la medición deben introducirse correcciones que contemplen la resistencia del sensor, el tiempo de respuesta del mismo, y la transferencia superficial del oxígeno. Ese es uno de los objetivos de este trabajo.

### **2.3 Respirometría**

La respirometría es la medición e interpretación de la velocidad de respiración biológica bajo condiciones experimentales definidas, donde el consumo de oxígeno está directamente asociado con el crecimiento de biomasa y con la remoción de sustrato. En los años 60's, la respirometría se desarrolló como una técnica en el control de procesos, mientras que durante la década pasada, se ha empleado para obtener características biocinéticas, considerándose como la fuente más importante de información en el modelado de los procesos biológicos aerobios(Pacheco-Salazar et al, 2007).

Son importantes las respirometrías dentro del tratamiento de aguas residuales ya que sus determinaciones sirven para (Calderón, 2004)

1. Determinar la tasa de consumo de oxígeno en efluentes domésticos e industriales.
2. Determinar la combinación óptima de factores para el tratamiento por biodegradación en suelos contaminados con petróleo y/o sus derivados.
3. Determinar la influencia tóxica y el poder inhibitorio de algunos vertimientos sobre las poblaciones microbiológicas en las plantas de tratamiento de aguas residuales.
4. Determinar la efectividad de cultivos microbiológicos y su comportamiento en la digestión de algún sustrato en particular.
5. Determinar las características de biodegradación de productos químicos específicos o de mezclas químicas.
6. Determinar los parámetros cinéticos para las reacciones de biodegradación.
7. Monitorear la aclimatación de un cultivo de microorganismos a materiales orgánicos refractarios.
8. Medir la actividad de cultivos aerobios.

En la actualidad, las técnicas respirométricas, como medida e interpretación del consumo biológico de oxígeno, están adquiriendo cada vez más importancia como herramienta para el monitoreo y control de los procesos biológicos aerobios de depuración de aguas residuales. Su principal ventaja es que aportan gran información para caracterizar el proceso, junto a una relativa sencillez y robustez operacional.

Debido a su condición de reactor biológico, los resultados son extremadamente dependientes de las condiciones de trabajo; por lo tanto, puede existir variabilidad en la salida. Esta variabilidad cuestiona el hecho de que se considere sensor al respirómetro y obliga a que los resultados de las respirometrías se acompañen de las condiciones de operación (Baeza,2002):

- Estado de la biomasa (concentración, pH, temperatura, DQO, edad, etc)
- Tipo de sustrato utilizado
- Temporalidad de la medida de oxígeno (puntual, continua)

Sin embargo, una determinación respirométrica implica tiempo, aun estando automatizada la toma de muestras. Los resultados obtenidos ya no serían los apropiados para utilizarlos en el sistema automatizado que requiera de esta variable para dictar su operación, puesto que tendrían un retraso significativo u otras variaciones. Sin embargo, mediante el conocimiento de un modelo matemático de la dinámica del oxígeno disuelto en el reactor, podría ser posible estimar la tasa de respiración usando métodos computacionales adecuados para tal efecto.

## **2.4 Control de oxígeno disuelto (OD)**

La medición confiable y continua del oxígeno disuelto en línea es importante en el tratamiento de agua residual. La disponibilidad de mediciones de valores de concentraciones precisas y en tiempo es necesario para el monitoreo y control dinámico de procesos que aseguren una operación eficiente en el tratamiento de agua.

Los sistemas de control de oxígeno disuelto tienen un sensor y un controlador al igual que otros sistemas de control. En estos casos se establece una cantidad mínima de oxígeno disuelto en la cual se activan elementos de control para aumentar la cantidad de oxígeno presente en el medio. Estos elementos pueden ser compresores o válvulas de aire. También los sistemas de control de oxígeno disuelto pueden aumentar la velocidad de agitación, causando turbulencia que ayuda a exponer más área de superficie del líquido al aire y así aumentar la transferencia de oxígeno al medio.

Por ello, es de interés regular la concentración del oxígeno disuelto (OD) a un punto óptimo. En sistemas de lodos activados ésta se ha vuelto una práctica común y se han propuesto algunas estrategias de control que han resultado exitosas (Olsson et al. 2005). Estos van desde un ON/OFF simple o controladores PID a esquemas más complejos que involucran control en cascada (Gerkšič et al. 2006) o incluso adaptable y control predictivo no lineal (Lindberg y Carlsson 1996, Chotkowski et al. 2005).

Debido a su operación en batch, las concentraciones variables durante la fase de reacción hacen al SBR más robusto a concentraciones variables en el influente que las plantas de lodos activados convencionales. Sin embargo, estas concentraciones variables también implican que la tasa de respiración de los microorganismos varíe durante la fase completa de reacción, lo opuesto a sistemas continuos como lodos activados, donde la concentración de sustrato permanece baja y así la tasa de respiración permanece casi constante o varía muy lentamente con respecto al tiempo.

En un biorreactor continuo, el comportamiento dinámico del OD puede ser descrita por la siguiente ecuación diferencial de primer orden (Spanjers et al. 1996)

$$\frac{dy}{dt} = (y_{in} - y) \frac{Q_{in}}{V} + (y_{sat} - y) k_L a - r \quad (2.11)$$

Donde,  $y(t)$  es la concentración del OD dentro del reactor (asumiendo la homogeneidad durante la mezcla del licor),  $y_{in}$  es la concentración del OD en el influente (casi siempre despreciable),  $y_{sat}$  es la constante de saturación del oxígeno disuelto,  $V(t)$  es el volumen actual y  $Q_{in}(t)$  es la tasa del influente. Por otro lado  $k_L a(t)$  es el coeficiente de transferencia masa de oxígeno, que depende (no linealmente) de la tasa del flujo de aire  $Q_{air}(t)$  y de las propiedades fisicoquímicas del licor mezclado y del mecanismo de difusión de aire.

La tasa de respiración  $r(t)$  en la ecuación anterior puede descomponerse en dos partes: una que representa la respiración endógena que permanece casi constante y es proporcional a la concentración de biomasa  $X(t)$ , y otra más que representa la respiración debido al metabolismo durante la biodegradación. Esta última es también proporcional a la concentración de biomasa  $X(t)$ , pero también a una función  $\mu$  que puede depender de la concentración de los diferentes sustratos involucrados en la biorreacción, pero es cero cuando el sustrato está presente. Matemáticamente se escribe con la siguiente ecuación, donde  $b$  representa la tasa de respiración endógena específica y  $Y_{XO}$  el coeficiente de rendimiento del oxígeno:

$$r = bX + \frac{1}{Y_{XO}} \mu X \quad (2.12)$$

En un reactor batch, lo que hace difícil el control de OD es que la tasa de respiración metabólica  $\mu X$  puede ser variante durante la fase de reacción. Considerando sólo un sustrato no inhibitorio, al principio de la fase de la reacción la concentración del sustrato es alta y así  $\mu X$  tendrá algún valor alto, y conforme se lleva a cabo la biorreacción y el sustrato es consumido,  $\mu X$  tiende a cero. Para el caso de un solo compuesto que inhibe la reacción a

concentraciones altas, la variación de  $\mu X$  a lo largo del tiempo es más pronunciada. Además, durante la fase de llenado, también conocida como fase de lote alimentado, la concentración de biomasa también cambia y disminuye conforme incrementa el volumen, también contribuyendo así a la variación de la tasa de respiración  $r(t)$ .

Hay varios reportes sobre estrategias de control de OD exitosas en reactores batch, tal como el presentado por Puig et al. (2006) usando control de lógica difusa. Sin embargo, el objetivo principal de éste no era el control de OD, sino que fue usado como un medio para regular otros parámetros y variables del reactor.

En todo caso, para lograr proponer e implementar estrategias de control de OD acordes con el sistema estudiado, es necesario contar con un modelo matemático adecuado. Dado que la variable de control emplea el flujo de aire, y se sabe que  $k_L a$  depende de  $Q_{air}$ , se vuelve indispensable contar con un modelo matemático que considere a  $Q_{air}$  como la variable de entrada al sistema.

En general se asume que existe una dependencia no lineal entre  $Q_{air}$  y  $k_L a$ , siendo que  $k_L a = 0$  cuando  $Q_{air} = 0$ , y con  $k_L a$  teniendo un valor de saturación máximo; es decir, para valores muy altos de  $Q_{air}$ , el valor de  $k_L a$  prácticamente ya no cambia.

## **2.5 Control robusto y de tiempo óptimo**

Aunque en este estudio no se aplicó el control robusto y de tiempo óptimo al reactor estudiado, es conveniente presentar sus generalidades con el fin de justificar la pertinencia de contar con un mejor modelo matemático de la dinámica del OD.

La estrategia de control se ha denominado “control de tiempo óptimo dirigido por eventos” (ED-TOC por sus siglas en inglés). Es empleada para la degradación de efluentes tóxicos y en particular ha sido aplicada e implementada en un reactor piloto para biodegradar agua

residual sintética que contiene 4-clorofenol (compuesto tóxico) como compuesto modelo. También se ha logrado su implementación en un prototipo a escala industrial usando agua residual real adicionada con 4-clorofenol (Moreno-Andrade et al. 2006).

La estrategia busca minimizar el tiempo de reacción. Para ello, requiere estimar la tasa de biodegradación de tal manera que la actividad microbiana se mantenga en un nivel máximo durante casi toda la reacción. Está basada en medir en línea el oxígeno disuelto. Lo anterior se logra estimando la velocidad de consumo másico de oxígeno por los microorganismos ( $\gamma$ ), relacionada directamente con la actividad de los microorganismos y por lo tanto con la tasa de reacción. (Betancur *et al.*, 2004).

En este caso  $\gamma$  es proporcional a  $\mu$  y para los propósitos del control, no es necesario conocer el valor de dicha constante de proporcionalidad. La ecuación 2.13 que describe  $\gamma$  fue obtenida del modelo matemático del comportamiento del oxígeno disuelto en un reactor discontinuo (Betancur *et al.*, 2004):

$$\gamma = k_L a(O_s - O)V - OQ_{en} - V \frac{dO}{dt} \quad (2.13)$$

Donde:

$V$ : Volumen de agua dentro del reactor, L.

$O$ : Concentración de oxígeno disuelto, (mg/L)

$k_L a$ : Coeficiente de transferencia de masa,

$O_{en}$ : Concentración de oxígeno disuelto en el influente, (mg/L)

$Q_{en}$ : tasa de flujo de entrada,

$O_s$ : Concentración de oxígeno disuelto a saturación, (mg/L)

$\mu$ : velocidad de consumo másico de oxígeno. ( $h^{-1}$ )

En la figura 2.6 se ejemplifica la manera de operar de esta estrategia de control, donde la zona gris es el punto donde la tasa de consumo de sustrato es la máxima. La tasa de reacción es controlada manteniendo la concentración del sustrato oscilando en este punto durante el llenado del SBR. Cada vez que la concentración del sustrato intenta dejar este punto, el evento es reportado y la estrategia ED-TOC enciende o apaga la bomba del flujo de entrada. La estrategia funciona a pesar de cambios de actividad de los microorganismos presentes en el SBR. Tampoco importa el valor de la concentración de sustrato en el influente (Moreno-Andrade *et al.*, 2005a). Para estimar  $\gamma$  solamente se necesita el coeficiente de transferencia de masa,  $k_L a$ , y la concentración de oxígeno disuelto a la saturación,  $O_s$ , e incluso estas variables no necesitan ser conocidas con precisión. Sin embargo, requiere forzosamente que  $k_L a$  se mantenga constante o sólo dependiente del volumen de licor mezclado en el reactor, lo cual prácticamente se logra manteniendo un flujo de aire constante. Donde  $V_0$  indica el volumen inicial en el tanque. El flujo es alimentado de manera tal que se mantiene la tasa de reacción cerca del valor óptimo (zona gris). Una vez que se alcanza el volumen final,  $V_f$ , el reactor actúa como un proceso en lotes (batch) y la tasa de reacción disminuye.

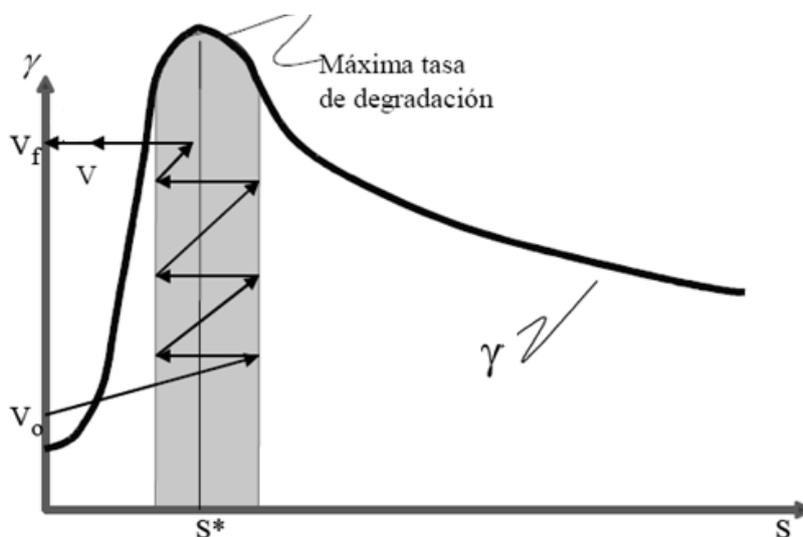


Figura 2.6 Estrategia ED-TOC.

La estrategia de ED-TOC puede manejar incrementos en la concentración de compuestos tóxicos en el influente de hasta 11200 mg<sub>4CF</sub>/L sin ningún problema (Buitrón et al, 2004).

Se menciona la estrategia ED-TOC pues en esta se tiene una estimación de  $k_{La}$  pero no se tiene un control adecuado sobre esta variable y sobre el aire que es introducido al sistema. Para mejorar aún más la eficiencia de este tipo de reactor sería conveniente implementar un regulador del oxígeno disuelto. Sin embargo, esto requeriría estar continuamente manipulando el valor de  $k_{La}$  al variar el flujo de aire.

Un primer paso para proponer una estrategia de operación que sea óptima y robusta como ED-TOC, pero adicionalmente energéticamente eficiente desde el punto de vista del suministro de aire, es la obtención de un modelo matemático de la dinámica del OD. De esta manera se pretende justificar este trabajo de investigación.

### 3. Metodología y materiales

Para determinar el coeficiente de transferencia de materia de la fase gas a líquido ( $k_La$ ) para el oxígeno dentro de los reactores, el nivel de oxígeno en el medio de cultivo debe ser adecuado para el crecimiento aerobio. A menudo, la velocidad de transferencia de oxígeno es un factor limitante en un biorreactor. Por la misma razón, la transferencia de oxígeno de la fase gas a líquido ( $k_La$ ) es una variable limitante en la operación de los sistemas que operan en continuo.

La velocidad de transferencia de oxígeno puede ser medida mediante técnicas químicas o físicas. Habitualmente implica realizar lo que en identificación de sistemas dinámicos se conoce como un escalón; esto es, un cambio inmediato de un valor a otro en la variable de entrada del modelo en este caso es la concentración de oxígeno en la entrada del reactor y medir la concentración del oxígeno disuelto. De esta forma es posible determinar los parámetros de los modelos matemáticos propuestos.

#### 3.1 Descripción del biorreactor

El biorreactor empleado en esta investigación consiste de un tanque cilíndrico de 10 L con un fondo cónico. Tiene un volumen de operación mínimo de  $V_{min}=3L$  y un volumen máximo de operación de  $V_{max}=7L$ , dando un volumen de recambio de  $V_{ex}=4L$ . Está provisto con un mezclador para garantizar la homogeneidad de la mezcla del licor dentro del reactor. La operación es como reactor discontinuo secuencial (SBR), con un tiempo de llenado variable o fijo, un tiempo de reacción variable que dura casi hasta completar la biodegradación del sustrato, un tiempo de sedimentación de 30 min, un vaciado tan rápido como sea posible y un tiempo de inactividad de solo 5 min. Durante el llenado y la reacción, el aire entra al reactor a través de un difusor cerámico en el fondo del reactor, cuyo flujo se controla por medio de un controlador de flujo másico (Aalborg modelo GFC-17)

Usa bombas peristálticas digitales para controlar el llenado y el vaciado del reactor (Cole-Parmer, MasterFlex). Se controla la temperatura a  $20\pm 1$  °C mediante la recirculación de agua a través de la chaqueta del reactor. Se utiliza agua residual sintética con una concentración de 110 mg/L de 4-clorofenol (4-CF), complementada con nutrientes según AFNOR (1985). Los microorganismos en el reactor fueron previamente aclimatado a la biodegradación de 4-CF usando lodos activados de la planta de tratamiento del Cerro de la Estrella (ver sección 4.3.1) como inóculo y una estrategia de aclimatación de tiempo variable (Moreno y Buitrón 2004). Véase figura 4.1 del capítulo 4.

### **3.2 Hardware y Software**

El oxígeno disuelto es medido usando un sensor y transmisor industrial (Endress & Hauser, COS-41 y COM-223). Las medidas y la señal de comando son leídas y escritas usando una tarjeta de adquisición de datos (National Instruments USB6009) montada y conectada a una computadora personal con un software programado usando *LabView* (National Instruments) para el control del proceso completo. El software desarrollado, llamado *BioReC*, incluye módulos para pruebas de diferentes esquemas de control de oxígeno disuelto. Esta es la plataforma que es usada para programar la nueva estrategia de control de OD y realizar pruebas para estimar el flujo de aire que entra al reactor y finalmente proponer un modelo matemático para la tasa de respiración.

### **3.3 Desarrollo experimental**

Dado que el proyecto busca proponer un modelo matemático de la dinámica del oxígeno disuelto, así como posteriormente proponer un estimador de la tasa de respiración para un proceso SBR real y no sólo un resultado teórico, se requirió probar y evaluarlo en un biorreactor de laboratorio a nivel experimental. Por lo tanto, se montó un biorreactor con las características anteriormente mencionadas en el Laboratorio de Bioprocesos e Ingeniería Ambiental del Instituto de Ingeniería de la UNAM, donde se realizaron las pruebas correspondientes. A continuación se explican las fases empleadas en el desarrollo experimental

#### **1.3.1 Montaje y aclimatación del reactor**

Se verificó que el hardware trabajara correctamente. Se preparó la alimentación para una concentración inicial baja en el biorreactor de 50 mg/L de 4-clorofenol (4-CF) para aclimatar el lodo. El lodo fue traído de la planta de tratamiento del Cerro de la Estrella, en Iztapalapa, D.F., el cual se caracterizó haciendo una respirometría tradicional para ver el nivel de actividad que tenía antes de la aclimatación, medir el índice volumétrico de lodo (IVL) y calcular sólidos suspendidos totales y volátiles.

Para la aclimatación se trabajó sin control de oxígeno disuelto, fijando a un valor adecuado el flujo de aire, de tal manera que no existieran condiciones limitantes de oxígeno. La concentración de 4-CF se determinó fuera de línea usando la técnica de aminoantipirina (Standard Methods, 1992). Tomando muestras regulares del reactor a lo largo de un ciclo se fue leyendo la concentración de 4-clorofenol dentro del reactor para saber cuando la reacción ya había llegado a su término. Así, tras varios ciclos se logró la aclimatación de la biomasa a la degradación de este tóxico como fuente única de carbono.

### 3.3.2 Determinación del modelo del reactor

En lo que se realizaba la aclimatación de los microorganismos se determinó el modelo dinámico del sensor. Se realizaron pruebas con el sensor del oxígeno disuelto (OD). En dos recipientes, ambos con agua; en el primero se le colocó un difusor de aire para propiciar la saturación de oxígeno disuelto en el medio. En el otro se dejó que, después de adicionarle una pequeña cantidad de lodo, los microorganismos consumieran todo el oxígeno del medio. Se pasó el sensor en agua sin OD hasta que se estabilizara a un valor bajo, a agua con OD a nivel de saturación. Teniendo una respuesta en la entrada de tipo escalón.

Se realizaron en total 6 repeticiones del procedimiento anterior, con lo cual se generaron archivos con datos para hacer la caracterización del sensor (ver sección 4.2). En particular, se ajustó un modelo dinámico de segundo orden para el sensor, caracterizado por dos parámetros, que son las dos constantes de tiempo:  $\tau_1$  y  $\tau_2$  de las ecuaciones (4.1) y (4.2). Usando estos datos también se probó ajustar un sistema con retraso, pero experimentalmente era evidente que el sistema podía ser modelado adecuadamente con un sistema de segundo orden.

### 3.3.3 Determinación del modelo del coeficiente de transferencia de masa de oxígeno ( $k_La$ )

Inicialmente, para determinar  $k_La$  se realizaron experimentos similares a los que se realizaron con el sensor de oxígeno disuelto. Al término de la reacción y teniendo el reactor en fase de tiempo muerto se realizaron los experimentos, introduciendo un escalón en la entrada, guardando los datos cada segundo en archivos de excel. En esta etapa, cuando ya se ha agotado el sustrato, la tasa de respiración corresponde únicamente a la endógena:  $r=bX$ .

Lo que se hace es cambiar el valor del flujo de aire de entrada ( $Q_{air}$ ), de manera similar a como se explica en la sección 3.3.2. Primero se pone a cero, para observar el valor de  $bX$ , la tasa de respiración endógena, observando una curva casi recta con pendiente igual a  $bX$ . Esto se hace hasta llegar a un valor suficientemente bajo de oxígeno disuelto. Después se aplica un escalón de flujo de aire constante, observando una respuesta exponencial que hace que el oxígeno disuelto tienda a un valor cercano al de saturación. Este experimento se repite varias veces con distintos valores del flujo de aire de entrada.

El procedimiento anterior, sin embargo, es tardado, y no pueden hacerse muchas pruebas al final de un mismo ciclo, ya que puede causar la inhibición en los microorganismos por el ayuno al que se someten. Por ello fue preferible hacer una variante de este método. Al final de cada fase reacción, cuando ya no había prácticamente sustrato en el medio y la tasa de respiración era prácticamente constante y correspondiente sólo a la endógena, se realizan pruebas en las que se enciende y apaga el flujo de aire por intervalos de tiempo relativamente cortos (5 min).

En cada ocasión el flujo de aire se escoge de manera aleatoria, pero cuidando que el oxígeno disuelto se mantenga entre dos valores: ni muy cercano a la saturación, ni demasiado bajo para no resultar limitante. El problema del ajuste del parámetro  $k_L a$  en estos casos es que debe considerarse la dinámica del sensor. Sin embargo, es posible hacerlo usando métodos numéricos de ajuste de curvas por mínimos cuadrados. Los datos generados fueron almacenados en archivos para después procesarlos, pero se pretende que esta prueba se realice automáticamente al final de cada ciclo.

### 3.3.4 Ajuste de parámetros con pruebas dinámicas

Para ajustar los parámetros del modelo se colectaron datos experimentales considerando lo siguiente:

#### a) *Control de oxígeno disuelto aleatorio*

Se cambió el modo de operación del programa *BioReC*, trabajando ya con un control muy burdo de oxígeno disuelto. Se utilizó el control denominado “random ON/OFF” (ver figura 4.2), el cual busca mantener el oxígeno disuelto dentro de un rango decidido por el usuario. Para hacerlo, en principio cada cierto intervalo de tiempo cambia el valor del flujo de aire a un valor aleatorio, pero si el oxígeno disuelto sale de cierto rango (con histéresis), toma una acción drástica para llevarlo a este rango de valores: ya sea que fije el flujo de aire a cero o que pruebe otro valor aleatorio más alto que el anterior. El propósito de este control burdo de oxígeno disuelto es simular condiciones distintas de operación durante la reacción para generar los datos que pudieran servir para probar el algoritmo de estimación de la tasa de respiración que se propone. Ver capítulo 4

#### b) *Pruebas bajo dos condiciones de operación*

Se operó el reactor con dos condiciones de concentración del influente: “bajo”, a 100 mg/L de 4-CF y “alto”, a 300 mg/L 4-CF al inicio de la reacción. En total se generaron 8 corridas: 3 con concentración baja y cinco con concentración alta.

Los últimos datos de cada corrida se tomaron para determinar el modelo de dependencia algebraica de  $k_{La}$ , ya que en condiciones bajas de concentración la reacción termina en menos de una hora y en las de alta concentración, la reacción termina en aproximadamente dos horas. El modelo para esto es expresado en la siguiente ecuación: ver sección (4.3)

$$k = \frac{(m+1)k_{\max}u}{u_{\max} + mu} \quad (3.1)$$

En esta ecuación,  $k=k_{LA}$  y  $u=Q_{air}$ , lo que representa una curva. Por lo tanto si  $u=0$ ,  $k=0$ ,  $k=k_{\max}$  ( $k_{LA}$  máxima) si  $u=u_{\max}$  ( $Q_{air}$  máxima) y tiende a un valor constante conforme  $u$  se hace grande. Así que los parámetros son:  $u_{\max}$ ,  $k_{\max}$ , y  $m$ . En realidad la curva es definida por el punto  $(u_{\max}, k_{\max})$  y por el parámetro  $m$ , que es el responsable de su curvatura. Conforme  $m$  tiende a cero, la curva tiende a una recta que pasa por el origen.

### c) *Modelo de estimación de la tasa de respiración*

La idea detrás del modelo consiste en coleccionar los datos para una cierta ventana de tiempo en el que el flujo de aire es prácticamente constante. En ese caso el modelo del sistema es lineal y se tiene una expresión analítica para describir la curva de oxígeno disuelto medido ( $t$  vs.  $z$ ). Se utiliza entonces un ajuste exponencial por mínimos cuadrados para hallar un estimado de la tasa de respiración. Ver capítulo 4

## 4. Resultados

La figura 4.1, muestra físicamente cómo está conformado el reactor donde se realizaron los experimentos.



Figura 4.1. Reactor

La figura 4.2 muestra la pantalla que se presenta al usuario. Del lado izquierdo se observa el funcionamiento del reactor, en una pequeña pantalla (en este caso con un modo de operación en tiempos fijos) y la fase que lleva la reacción. En la parte superior derecha se ve la pantalla donde se elige el tipo de control de oxígeno disuelto junto con los parámetros que se pueden manipular, los cuales son  $\delta$ ,  $Q_{air-ON}$ . En la parte inferior derecha se presenta la pantalla del control empleado, que corresponde en este caso a un “*On/Off aleatorio*”, el cual se encarga de fijar el flujo de aire al reactor de manera aleatoria cada cinco minutos, pero apagándolo cuando el valor de oxígeno se sale de cierto rango preestablecido, definido en la pantalla superior derecha.

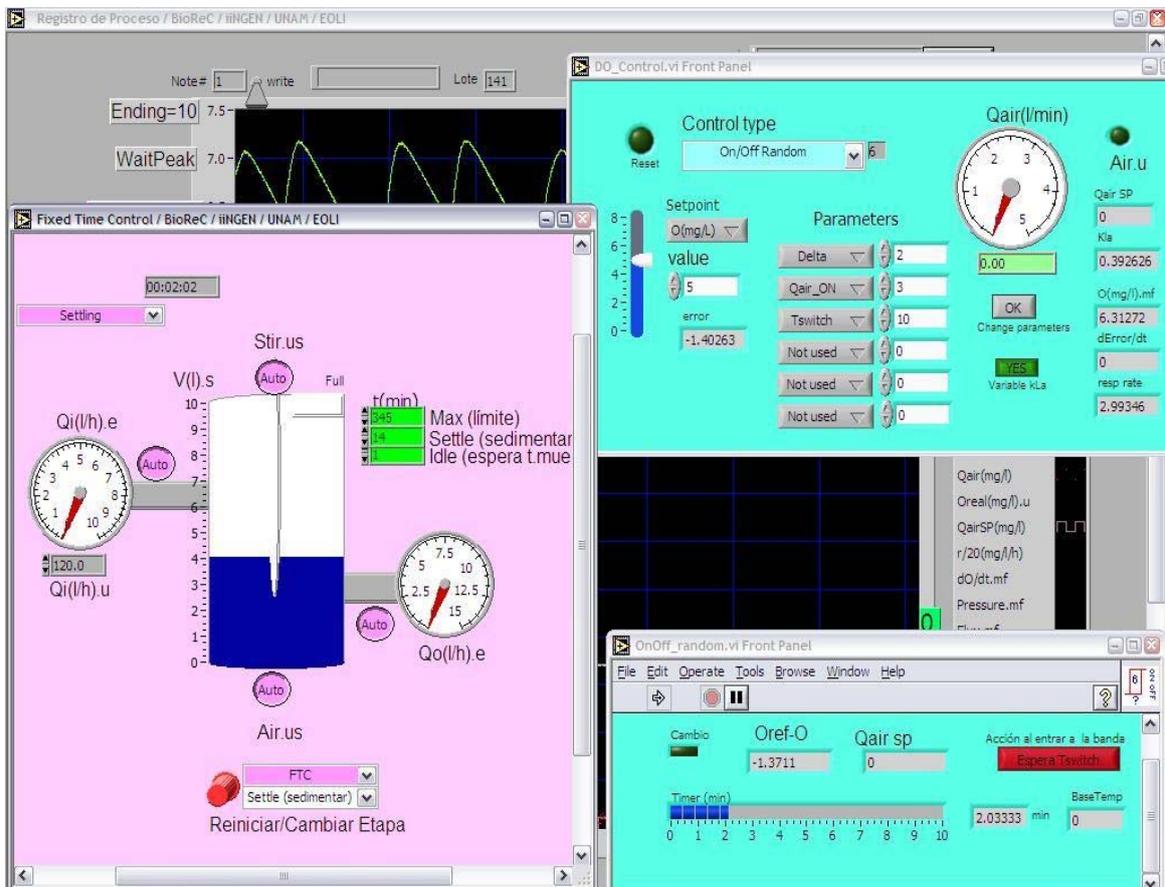


Figura 4.2. Interfaz con el usuario

El monitoreo del oxígeno disuelto y el flujo de aire del sistema se muestra en la figura 4.3, donde se observan los cambios que el flujo de aire,  $Q_{air}$ , sufre cada periodo de tiempo (en nuestro caso cada 5 minutos) y el comportamiento del OD con respecto a esos cambios, la cual está representada por escalones, determinados por un rango del flujo de aire definido por el usuario, (grafica inferior). También se grafica el volumen del reactor en cada ciclo de la reacción, esta se encuentra entre 4 y 6.5, se observa también el inicio y el final de cada ciclo en el reactor. El oxígeno disuelto representado por una grafica en zic-zac, se observa las variaciones del OD en las diferentes fases de la reacción.

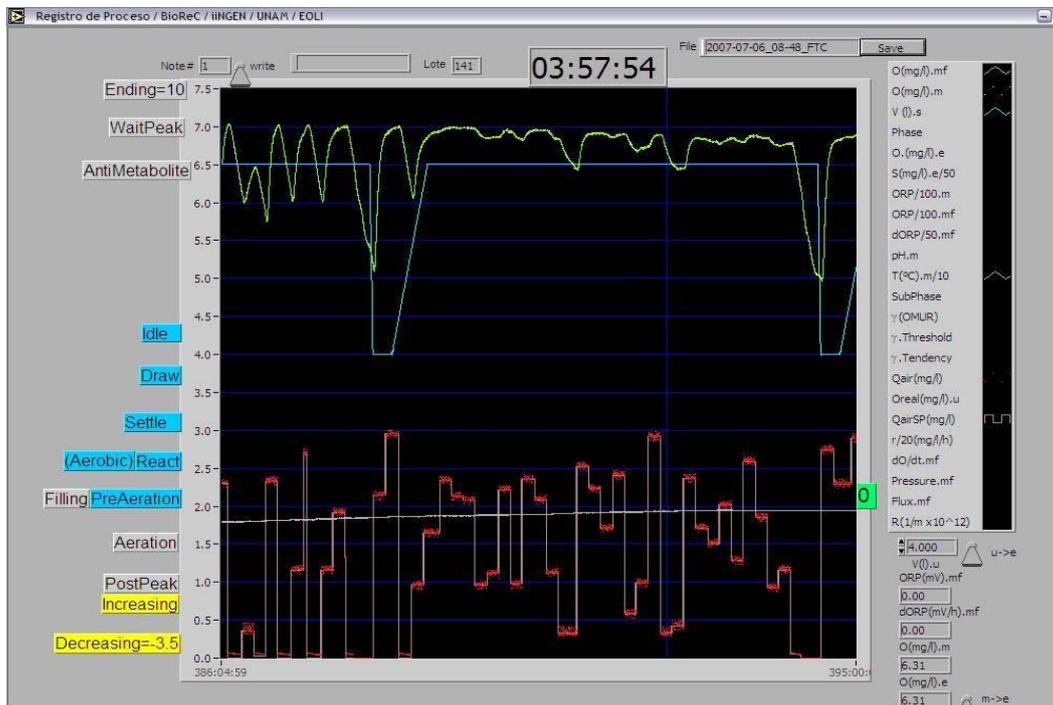


Figura 4.3. Registro del proceso

## 4.1 Modelo matemático empleado

### 4.1.1 Estructura general

El modelo matemático que se propone para explicar el comportamiento dinámico del oxígeno disuelto consta de tres partes interconectadas, donde cada una es modelada mediante ecuaciones algebraicas no lineales o diferenciales. En la figura 4.4 se esquematiza la estructura general del modelo matemático como un diagrama de bloques. Cada bloque representa un conjunto de ecuaciones que involucran variables de entrada y salida representadas por flechas. Es decir, cada bloque representa una relación causa efecto en las variables involucradas. En este capítulo se explicaran los modelos propuestos para cada bloque.

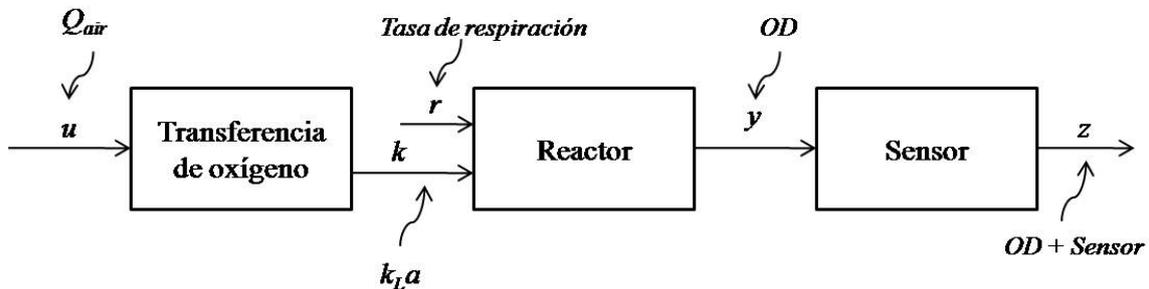


Figura 4.4 Modelo matemático: Dinámica del OD en el SBR

El modelo cuenta con una entrada de flujo de aire denotada con la variable  $u$ , que es el que transfiere oxígeno al reactor ( $Q_{air}$ ). En términos prácticos el flujo de aire un valor del coeficiente de transferencia de masa de oxígeno  $k_{La}$ , que en el modelo esta denotado con la variable  $k$ . Se considera una relación algebraica entre las variables  $u$  y  $k$ . La variable  $k$  puede ser considerada la entrada del reactor y la salida de este es la entrada al modelo dinámico que describe el comportamiento del oxígeno disuelto, denotado por la variable  $y$ . Este modelo tiene una entrada incierta, que es la tasa de respiración  $r$ . Esta variable es justamente la que se buscaría estimar en línea a partir del conocimiento de las variables de entrada y salida del modelo. La variable de salida en este modelo del reactor es el oxígeno disuelto, pero su lectura se hace mediante un sensor con dinámica propia. Por lo tanto la variable que se tiene accesible es en realidad el oxígeno disuelto (OD) medido con el sensor, denotado por la variable  $z$ .

## 4.2 Modelo del sensor

Una primera aproximación para modelar la dinámica del sensor es mediante un sistema dinámico de primer orden, puesto que la respuesta de un sensor no es inmediata. Siendo  $w(t)$  la señal registrada y  $y(t)$  el oxígeno disuelto dentro del reactor, se define por la siguiente ecuación, parametrizada por la constante de tiempo  $\tau_1$ :

$$\tau_1 \frac{dw(t)}{dt} + w(t) = y(t) \quad (4.1)$$

Otra posibilidad es considerar un sistema de segundo orden, si se observa que la respuesta no es inmediata y existe un retraso en la señal (ver capítulo 3). En ese caso, representando la señal medida por  $z(t)$ , se agrega otra ecuación diferencial de primer orden al modelo, con constante de tiempo  $\tau_2$  (Olsson et al. 2005):

$$\tau_2 \frac{dz(t)}{dt} + z(t) = w(t) \quad (4.2)$$

Ahora bien, si además se considera que existe un retraso en la medición, la señal registrada no es  $z(t)$ , sino  $z_d(t)$ , que es  $z(t)$  retrasada un tiempo  $L$ :

$$z_d(t) = z(t - L) \quad (4.3)$$

En la figura 4.5 se muestran distintas respuestas al escalón para variaciones en los parámetros de dicho modelo.

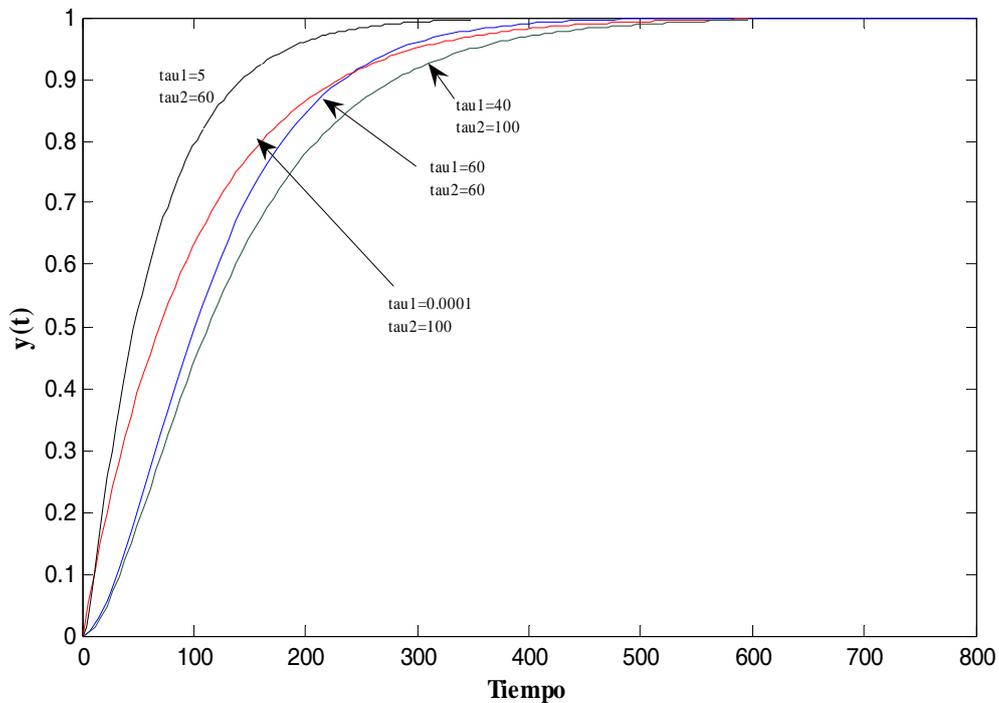


Figura 4.5. Respuesta a un escalón unitario (sistema de segundo orden)

Una señal de entrada de tipo escalón permite conocer la respuesta del sistema frente a cambios abruptos en su entrada. Así mismo, da una idea del tiempo de establecimiento de la señal, es decir, cuanto se tarda el sistema en alcanzar su estacionario.

#### 4.2.1 Determinación del modelo del sensor.

A partir de los datos generados con los experimentos realizados, se obtuvo un modelo del sensor empleando el software Matlab. Los experimentos representaron entradas de tipo escalón al sensor, y las respuestas del sensor son evidentemente de segundo orden. El algoritmo empleado para determinar las dos constantes de tiempo:  $\tau_1$  y  $\tau_2$ , se basó en ajustar las curvas exponenciales que resultan de la respuesta al escalón para dicho modelo, considerando todas las curvas experimentales en un mismo ajuste, dejando libre el parámetro de la condición inicial en cada caso. Es decir, se considera el modelo de la ecuación 4.4:

$$S_o^m(t) = \left( \frac{1}{(\tau_1 s + 1)(\tau_2 s + 1)} \right) S_o(t) \quad (4.4)$$

Su respuesta al escalón está representada en la ecuación 4.5:

$$S_o^m(t) = S_o(0) + ((S_o(\infty) - S_o(0)) \left( 1 - \frac{\tau_2 e^{-t/\tau_2}}{\tau_2 - \tau_1} - \frac{\tau_1 e^{-t/\tau_1}}{\tau_2 - \tau_1} \right)) \quad (4.5)$$

La figura 4.6 muestra el comportamiento del sensor con una línea continua y los ajustes según el modelo con líneas punteadas. Corresponden a los valores de las constantes de tiempo en  $\tau_1=78$  y  $\tau_2=48$  segundos, lo cual en la práctica ocasiona que la señal medida tenga un retraso de aproximadamente de un minuto y medio, que puede ser considerable para fines de control fino del oxígeno disuelto.

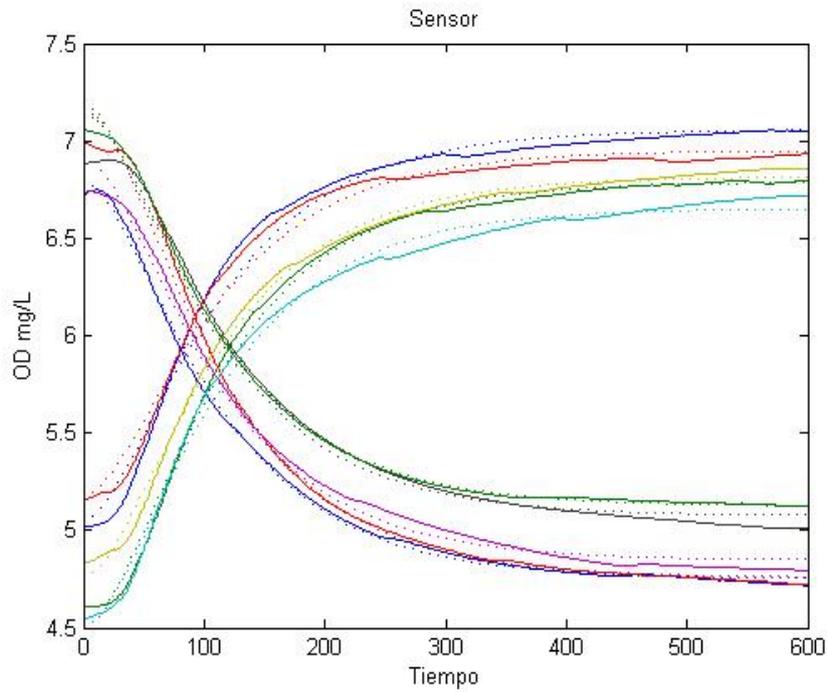


Figura 4.6. Caracterización del sensor

### 4.3 Modelo de transferencia de oxígeno

Se considera que el coeficiente de transferencia de masa de oxígeno depende del flujo de aire ( $Q_{air}$ ), tal que cuando  $Q_{air}$  es cero, entonces  $k_L a = 0$ , pero si  $Q_{air}$  es suficientemente grande también se considera que  $k_L a$  llega a un nivel de saturación. Aun cuando es dinámico el comportamiento, si los cambios en  $Q_{air}$  no son demasiado rápidos, la relación entre  $k$  y  $u$  puede modelarse por un ecuación algebraica. En este trabajo se propone la siguiente relación, la cual posteriormente será validada, ecuación 4.6:

$$k = \frac{(m+1)k_{max}u}{u_{max} + mu} \quad (4.6)$$

En la ecuación anterior, los valores de  $m$ ,  $k_{\max}$ ,  $u_{\max}$  son conocidos o estimados a partir de datos experimentales. La constante  $m$  determina la curvatura de la relación  $k$  vs  $u$ : un valor de  $m=0$  implica una relación lineal entre  $k$  y  $u$ ; es claro también que  $k=k_{\max}$  sucede cuando  $u=u_{\max}$ .

Para ilustrar el efecto del parámetro  $m$  con distintos valores de este parámetro se grafica en la figura 4.7. Vale la pena recalcar que los parámetros  $u_{\max}$  y  $k_{\max}$  determinan una coordenada conocida en la curva. La misma curva se puede obtener con otros valores de estos parámetros, pero también cambia el valor de  $m$ .

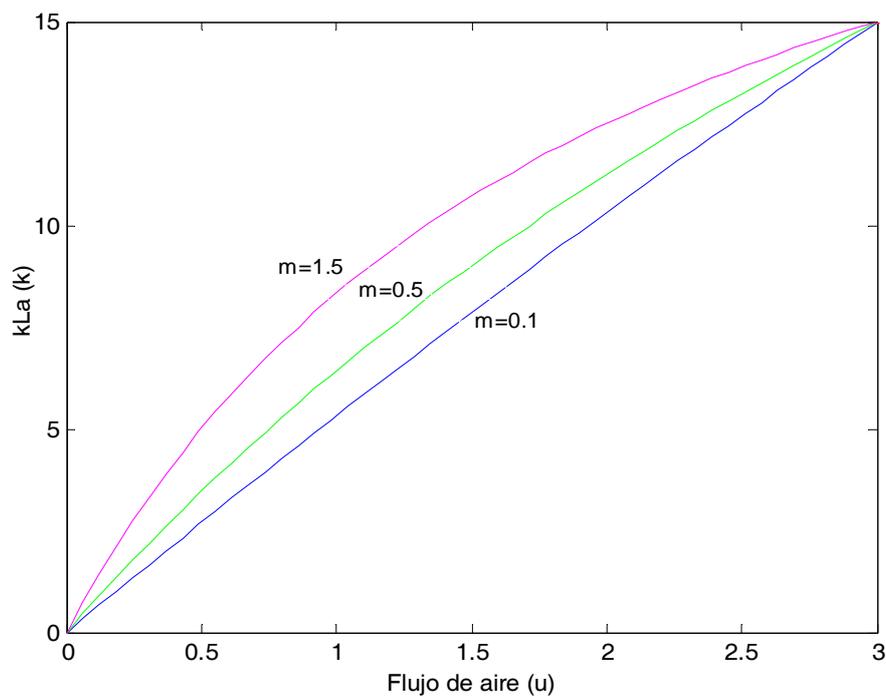
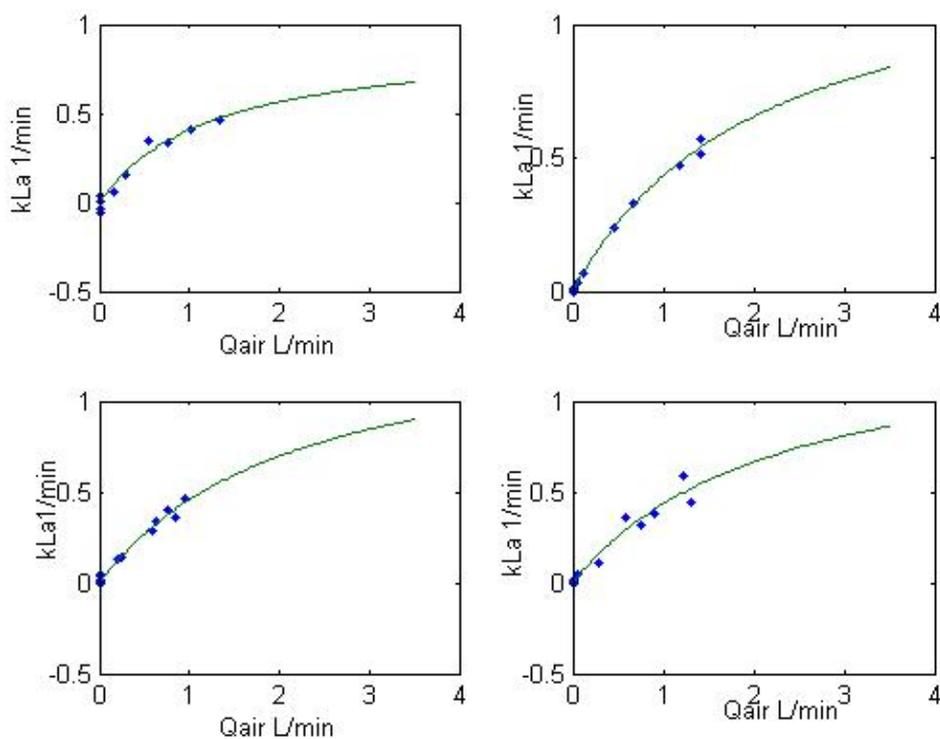


Figura 4.7. Efecto del parámetro  $m$

### 4.3.1 Determinación del modelo de transferencia de oxígeno

Se realizaron 8 corridas durante la fase de reacción, con las cuales se generaron datos y fueron utilizados para determinar el modelo de dependencia de  $k_{La}$  con respecto al flujo de aire  $Q_{air}$  (ecuación 4.6), tomando de cada archivo generado los últimos datos solamente, cuando se tenía la certeza de que la tasa de respiración correspondía sólo a la endógena porque ya se había agotado el sustrato. La figura 4.8 se observan las graficas de las diferentes corridas, donde los puntos representan los datos experimentales y las líneas continuas el ajuste fijando los parámetros  $m$  y  $k_{max}$  del modelo propuesto. Es evidente que el ajuste en la mayoría de los casos es relativamente bueno, lo cual indica que el modelo propuesto es adecuado. Sin embargo, dado que cada corrida se hizo en días y momentos distintos, era de esperarse que los parámetros hallados no fueran los mismos. La figura 4.9 muestra las curvas obtenidas superpuestas y es claro que no todas son idénticas, pero sí similares.



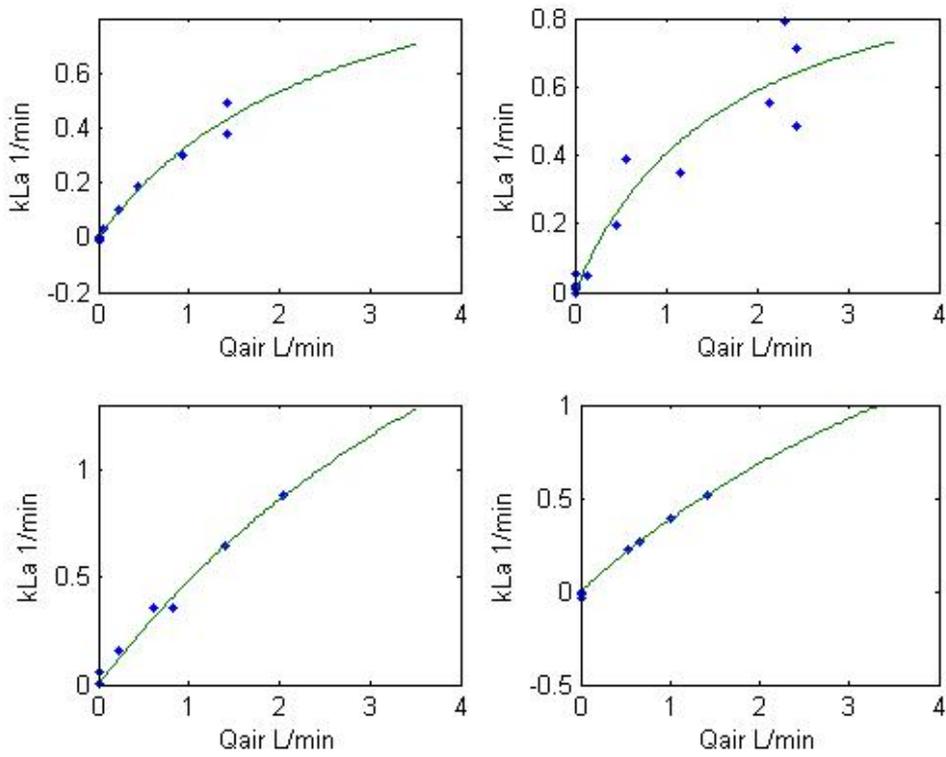


Figura 4.8. Modelo en las diferentes corridas

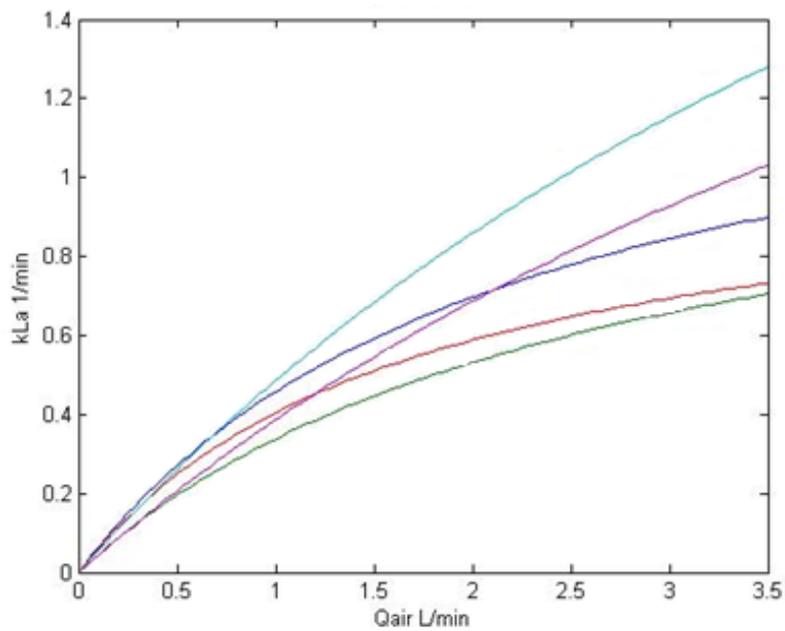


Figura 4.9. Modelo de transferencia de oxígeno

En la tabla 4.1 se resumen los valores de  $m$ ,  $k_{max}$ ,  $u_{max}$  obtenidos en cada corrida experimental. De la última gráfica de la Figura 4.12 se aprecia que el modelo obtenido sigue la misma tendencia en todos los casos, aún cuando para algunos casos no sea muy similar. Sin embargo se optó por probar como modelo de  $k_{LA}$  vs  $Q_{air}$  aquel en el que los parámetros fueran el promedio de los parámetros correspondientes de todas las corridas.

**Tabla. 4.1.** Valores obtenidos de ajustes

<i>Corrida</i>	<i>M</i>	<i>kmax</i>	<i>Umax</i>
1	2.8033	0.6755	3.5
2	1.6607	0.8387	3.5
3	1.58	0.8992	3.5
4	1.5314	0.861	3.5
5	1.2947	0.7052	3.5
6	2.0698	0.7317	3.5
7	0.5288	1.2797	3.5
8	0.4960	1.0305	3.5
	1.49	0.8777	

#### 4.4 Modelo de respiración biológica

En un reactor en lote, cuando no hay flujo volumétrico de entrada de influente ( $Q_{in}=0$ ), el modelo de la respiración biológica (ecuación 2.13) puede simplificarse a la siguiente ecuación diferencial de primer orden:

$$\frac{dy}{dt} = -r + k(y_{sat} - y) \quad (3.5)$$

En la ecuación anterior,  $k$  representa  $k_L a$ , que puede ser variable en el tiempo al ser manipulada a través del flujo de aire,  $y_{\text{sat}}$  es la concentración de oxígeno disuelto de saturación, que puede modelarse como constante, pero que en realidad depende de factores externos como la presión atmosférica, la temperatura, el pH, y otros factores fisicoquímicos. Por otro lado,  $r$  representa la tasa de respiración de los microorganismos y puede ser altamente variable, especialmente en un proceso en lote como el estudiado. En general, ésta se compone de dos partes: una fase endógena que se considera casi constante y que es proporcional a la concentración de la biomasa y otra parte que representa la respiración debida al metabolismo durante la degradación. Esta se expresa en la siguiente ecuación.

$$r = bX + \frac{1}{Y_{xo}} \mu X \quad (3.6)$$

El primer término de la ecuación (3.6) representa la respiración endógena. Ésta se modela proporcional a la concentración de microorganismos activos, denotada por  $X$ , a través de una constante de proporcionalidad: la tasa específica de respiración endógena, denotada por  $b$ .

El segundo término representa la tasa de respiración metabólica y es proporcional a la tasa de crecimiento de microorganismos y es nuevamente proporcional a la concentración de biomasa activa,  $X$ . La constante  $Y_{xo}$  relaciona esta proporcionalidad y es llamada coeficiente de conversión biomasa-oxígeno. De hecho  $Y_{xo}$  es la proporción de la masa de microorganismos (re)producidos por unidad de masa de oxígeno consumido para este propósito. Si el oxígeno consumido se usara exclusivamente para la reproducción de microorganismos (sin mortandad de estos últimos), su tasa de crecimiento relativa sería  $dX/dy = Y_{xo}$ .

El término  $\mu$  es la tasa específica de crecimiento de microorganismos, y para el caso de un biorreactor aerobio como el estudiado, depende de la concentración de la fuente de carbono o alimento, de la concentración de oxígeno disuelto misma y de otros factores

fisicoquímicos. Sin embargo, un modelo válido para el sistema estudiado establece que es cero si la concentración de sustrato,  $S$ , o la de oxígeno disuelto son cero. Por ello,  $\mu$  se puede modelar como se expresa en la siguiente ecuación:

$$\mu = \mu_s(S) \cdot \left( \frac{y}{K_o + y} \right) \quad (3.7)$$

La velocidad específica de crecimiento de sustrato sigue la ecuación de Monod (ecuación 3.7), la cual considera que la dependencia del sustrato de la velocidad de crecimiento específico ( $\mu$ ) es de forma que si la cantidad de sustrato es muy grande, la tasa específica se aproxima al valor máximo y si la concentración de sustrato tiende a cero, se aproxima a cero (Figura 4.10)

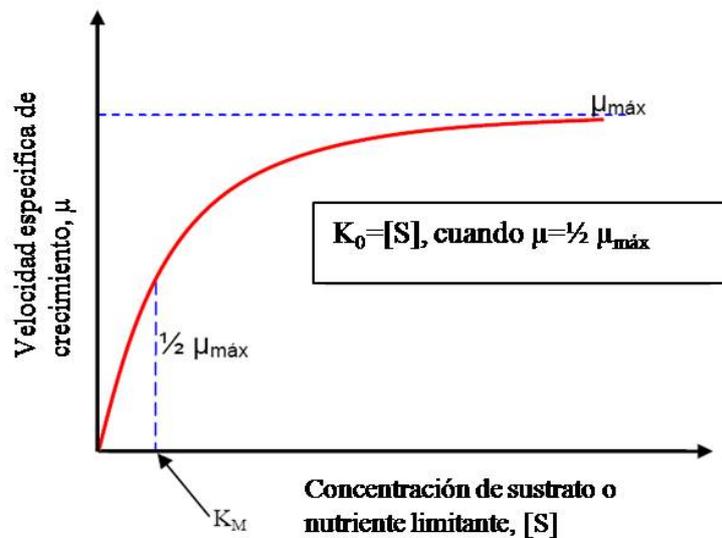


Figura 4.10.- Modelo de Monod (Ritman,2001)

La presencia de un compuesto tóxico para los microorganismos se refleja en una menor tasa de crecimiento de los mismos. No todos los microorganismos se ven afectados de la misma forma por los mismos compuestos. A través de las constantes “biocinéticas” de la ecuación de Monod (3.7) para la tasa de crecimiento específico y de utilización de sustrato, se puede ajustar el modelo para tener en cuenta los factores inhibitorios. La expresión de la inhibición se denomina Cinética de Haldane, y ha sido utilizada para expresar la inhibición por el propio sustrato (S) (Andrews y Graef, 1971). El modelo de Haldane predice que la velocidad de crecimiento específico de la biomasa aumenta cuando crece la concentración de sustrato hasta que ésta comienza a ser inhibitoria para los microorganismos (figura 4.11).

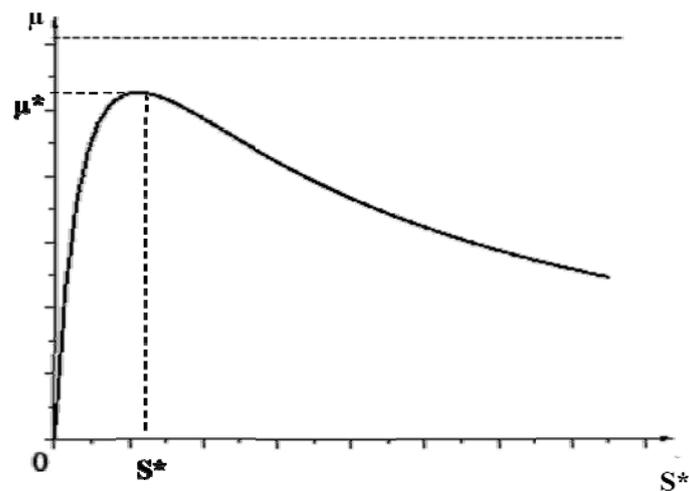


Figura 4.11 Modelo de Haldane

#### 4.5 Pruebas experimentales del modelo dinámico

Combinando el modelo del sensor de oxígeno disuelto, con el modelo algebraico de dependencia de  $k_{La}$  con respecto al flujo de aire, se obtiene un modelo del comportamiento dinámico del oxígeno disuelto medido en el reactor. La prueba de este modelo se realizó en corridas suplementarias al final de la etapa de reacción.

La figura 4.11 muestra el resultado de la predicción del perfil del oxígeno disuelto empleando el modelo resultante, junto con los datos experimentales. Si bien el ajuste no es perfecto, describe adecuadamente tanto la tendencia, como las constantes de tiempo del sistema.

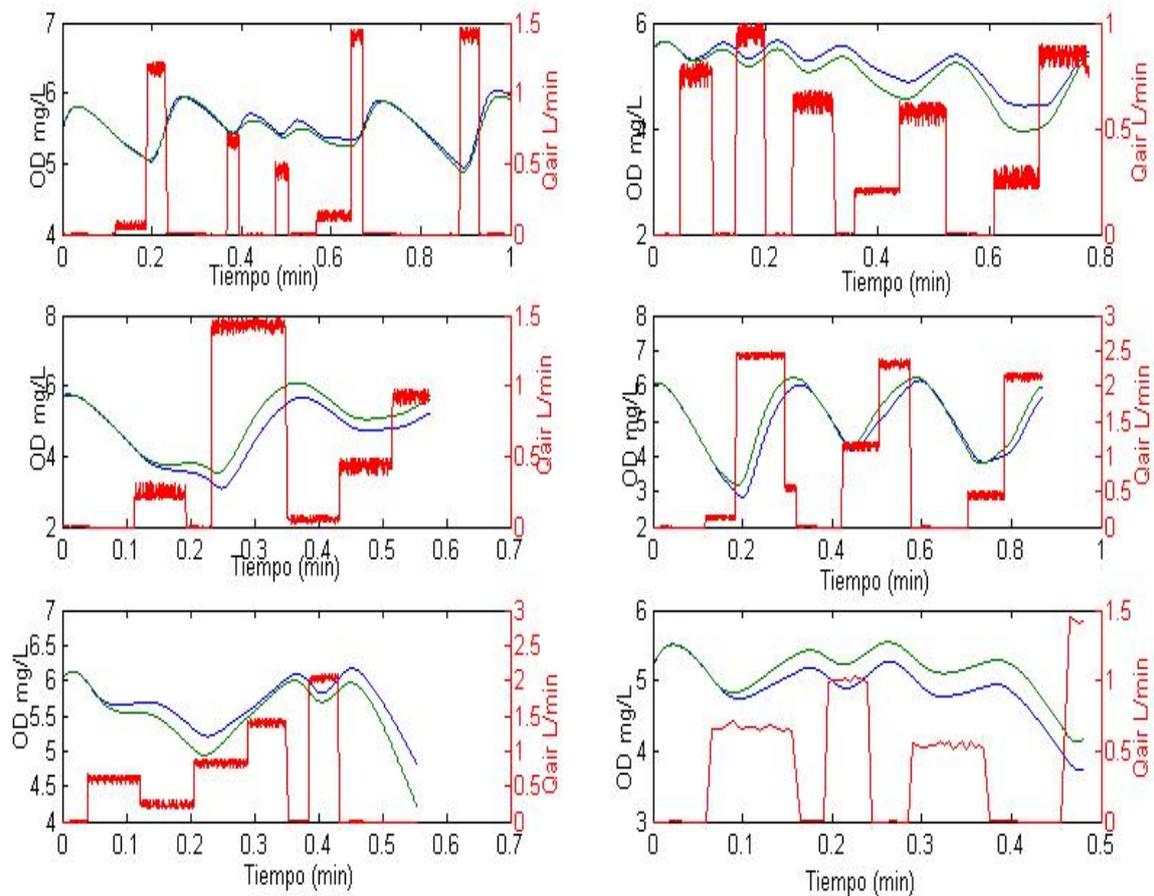
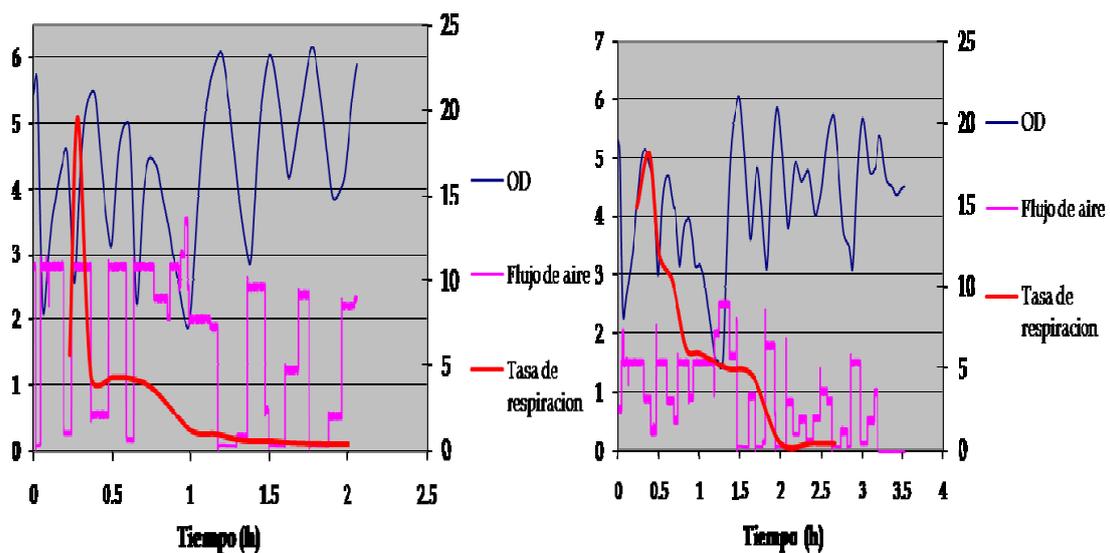


Figura 4.12. Modelo de  $k_{La}$  vs  $Q_{air}$

#### 4.6 Desempeño del reactor y gráficas de respirometría experimental.

Para las 8 corridas consideradas se realizaron respirometrías durante la fase de reacción a cada una de las muestras tomadas por este periodo. Con estas respirometrías se obtuvo el valor experimental de la tasa de respiración como la pendiente de la curva de oxígeno disuelto observada en la prueba. Los datos generados fueron graficados junto con el flujo de aire ( $Q_{air}$ ) y el OD. La Figura 4.12 muestra los resultados obtenidos en los experimentos y se puede observar que al principio de reacción se tiene una tasa de respiración mayor y conforme se va consumiendo el OD y el sustrato dentro del reactor va disminuyendo, mientras que la tasa de respiración también lo hace. Este comportamiento no es precisamente el esperado para un sustrato tóxico, donde debería observarse un incremento de la tasa de respiración cuando el sustrato pasa por el valor en el que la biodegradación es máxima, recordando que en ese caso la relación entre tasa de biodegradación y concentración de sustrato se modela por la ley de Haldane. Este comportamiento sólo se observa en una de las corridas. Será, por lo tanto, necesario revisar las curvas experimentales de respirometría para determinar el origen de esta discrepancia. Así mismo, se espera que una vez que el respirómetro en línea que se propone funcione adecuadamente, el estimado de la tasa de respiración sí siga la tendencia esperada.



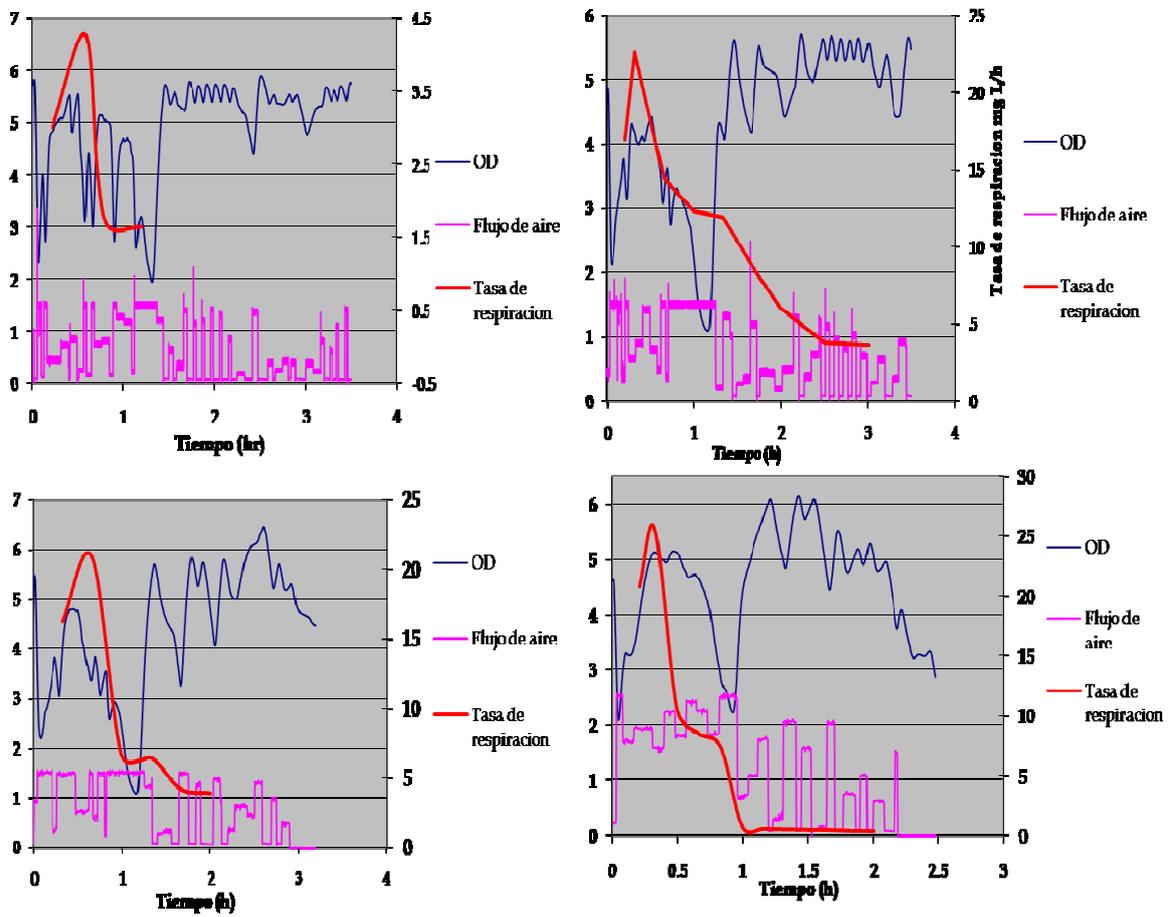


Figura 4.13. Respirometrías

## 4.7 Cinéticas de biodegradación

También se realizaron cinéticas conforme se consumía el sustrato. La figura 4.14 muestra tanto la respirometría correspondiente a esa corrida en el lado izquierdo, mientras que del lado derecho se muestra la cinética y la tasa de respiración respectivamente.

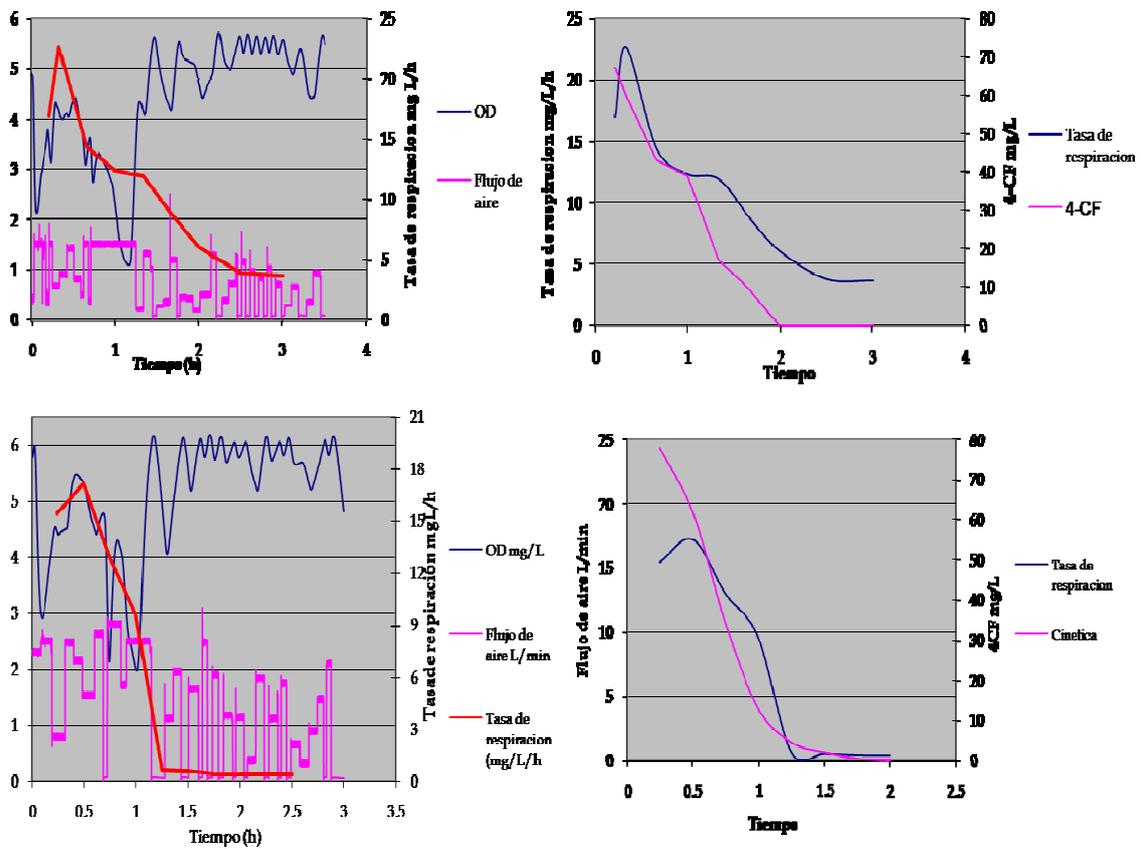


Figura 4.14. Cinético

## 5. Conclusiones

- Se estableció una metodología para obtener los parámetros del modelo matemático que describe el comportamiento del oxígeno disuelto considerando la dinámica del sensor y la dependencia no lineal del  $k_{LA}$  con respecto a  $Q_{air}$ .
- Se determinó el modelo matemático de dependencia del coeficiente de transferencia de masa  $k_{LA}$  y el flujo de aire  $Q_{air}$ , con los últimos datos generados de cada corrida obteniendo un buen resultado con los datos experimentados y el ajuste fijando los parámetros  $m$  y  $k_{max}$ .
- Para la caracterización del sensor, se pasó de un recipiente con OD en saturación a uno sin OD, fue aplicar una entrada tipo escalón a la entrada, por lo que se determinó el modelo del sensor de segundo orden.
- Experimentalmente se determinó que las constantes de tiempo que mejor reprodujeron la dinámica observada fueron  $\tau_1=78$  y  $\tau_2=48$  segundos, lo cual prácticamente implica un retraso de aproximadamente un minuto y medio en la medición.
- Se realizaron pruebas experimentales del modelo dinámico completo, variando el flujo de aire y comparando el perfil del oxígeno disuelto medido con el predicho por el modelo matemático propuesto, dando como resultado un ajuste casi perfecto, describiendo adecuadamente la tendencia, como las constantes de tiempo del sistema.
- Finalmente, se ha propuesto un sencillo modelo de estimación de la tasa de respiración durante la biodegradación. Si se conoce el modelo matemático del comportamiento del oxígeno disuelto tomando como una señal externa la tasa de

respiración (una perturbación al modelo), es posible, durante una ventana de tiempo corta en la que no cambie el flujo de aire de entrada, suponer un modelo lineal del sistema. Usando los datos durante esta ventana es entonces posible determinar la tasa de respiración haciendo un ajuste por mínimos cuadrados y resolviendo para hallar justamente un parámetro del modelo, que sería la tasa de respiración.

### **5.1 Trabajo a futuro**

Como perspectivas de continuación de la investigación se plantean las siguientes actividades a futuro:

1. Automatizar la obtención del modelo algebraico relacionando  $k_{La}$  con  $Q_{air}$  para el final de la reacción, de tal manera que continuamente se estén actualizando los parámetros de dicho modelo y se tomen en cuenta los cambios a mediano y largo plazo presentes en el biorreactor;
2. Implementar un control de oxígeno disuelto usando el modelo matemático obtenido, estimando la tasa de respiración en línea y ajustando el nivel de flujo de aire periódicamente para mantener la concentración de oxígeno disuelto alrededor de un valor de referencia durante toda la etapa de reacción.
3. Adecuar la estrategia de operación robusta que ajusta el flujo de influente al reactor para mantener la tasa de biodegradación en su valor máximo, empleando para ello el estimado de la tasa de respiración al mismo tiempo que se regula el oxígeno disuelto; la idea es mejorar la eficiencia energética del proceso evitando el consumo innecesario de electricidad al operar los aereadores o sopladores más allá de lo estrictamente necesario.

## Apéndice A

### Nomenclaturas

OD.	Oxígeno disuelto (mg/L)
C.	Concentración de oxígeno disuelto (mg/L)
C*	Concentración de oxígeno disuelto en saturación. (mg/L)
$k_L$	Coefficiente de transferencia de oxígeno en la interfase líquido-gas ( $\text{cmh}^{-1}$ )
a	área superficial de la burbuja con respecto al volumen total del agua
$k_L a$	Coefficiente de transferencia de masa de oxígeno, ( $\text{h}^{-1}$ )
$Q_{\text{air}}$	Flujo de aire
r	Tasa de respiración de los microorganismos
b	constante de proporcionalidad
X	Concentración de microorganismos activos
t	Tiempo (h)
$\mu$	velocidad de crecimiento específico ( $\text{h}^{-1}$ )
V	Volumen del reactor (L)
y	oxígeno disuelto en el modelo matemático (ver capítulo 4)
z	oxígeno disuelto medido por el sensor
m	constante que determina la curvatura de la relación
$u_{\text{max}}$	flujo de aire máxima
$k_{\text{max}}$	coeficiente de transferencia máxima
k	Coefficiente de transferencia de masa de oxígeno
u	Flujo de aire
$\tau_1, \tau_2$	constantes de tiempo
L	Tiempo de retraso

## Referencias

- AFNOR (1985). Evaluation en milieu aqueux de la biodegradabilité aérobie "ultime" des produits organiques solubles, Normalisation Française, NTF 90-312
- Baeza, J.A., Gabriel D, La-Fuente F.J., (2002) "In-linefast OUR measurement for monitoring and control of WWTP" *Water Science and Technology* 45(4-5) 19-28.
- Buitrón, G., Moreno, J., Moreno-Andrade, I., Betancur, M., y Vargas, A., (2004), Control óptimo de biorreactores aerobios para el tratamiento biológico de aguas residuales industriales inhibitorias, IV foro mundial del agua. 51-57
- Casas López J.L., Rodríguez Porcel E.M., Oller Alberola I., Ballesteros Martín M.M., Sánchez Pérez J.A., Fernández Sevilla J.M., Chisti Y. (2006). Simultaneous determination of oxygen consumption rate and volumetric oxygen transfer coefficient in pneumatically agitated bioreactors. *Industrial Engineering Chemistry Research*, 45, 1167-1171
- Chotkowsk, W. i, Brdys, M. and Konarczak, K. (2005), Dissolved oxygen control for activated sludge processes, *Int. J. Syst. Sci.* 36(12):
- Denbigh, K.G., y Turner, J.C.R (1990). Introducción a la teoría de los reactores químicos. Limusa, México.
- Dochain, D., y Perrier, J. (1990) *Modeling and Control of Bioreactors*, Elsevier, Amsterdam.
- Froment, G.F., y Bischoff, K.B. (1990). *Chemical reactor analysis and design*. Wiley, New York.
- Grady, Jr., Daigger, G. and Lim, H. (1999), *Biological Wastewater Treatment*, 2 end, Marcel Dekker, New York.
- Hagglund, T. (1996). An industrial dead-time compensating PI controller. *Control Engineering Practice*, 4(6):749-756.
- Kiely, G.(1999), *Ingeniería Ambiental*, McGraw Hill, España.
- Lee, T.H., Wang, Q.G. y Tan, K.K. (1996). Robust Smith predictor controller for uncertain delay systems. *AIChE Journal*, 42(4): 1033-1040.
- Marsili-Libelli, S. and Tabani, F. (2002). Accuracy analysis of a respirometer for activated sludge dynamic modelling. *Wat. Res.* 36: 1181 - 1192.

- Moreno-Andrade, I., Buitrón, G., Perez, J., Betancur, M., and Moreno, J. (2006), Biodegradation of high 4-chlorophenol concentrations in a discontinuous reactor fed with an optimally controlled influent flow rate, *Wat. Sci. Tech.* 53(11), 261–268.
- Moreno, J.A., Buitrón M., G., y Betancur B, M.J. (2005). Proceso para operar un Biorreactor Aerobio, Patente en curso.
- Moreno, J., Betancur, M., Buitrón, G. and Moreno-Andrade, I. (2006), Event-driven time-optimal control for a class of discontinuous bioreactors, (*revista*) 94(4), 803–814.
- Normey-Rico, J.E.(1999). Predicción para control. Tesis doctoral. Escuela Superior de Ingenieros, Universidad de Sevilla.
- Olsson, G., Nielsen, M.K., Yuan, Z., Lynggaard-Jensen, A. y Steyer, J.-P. (2005) *Instrumentation, Control, and Automation in Wastewater Systems*, IWA Publishing, London.
- Palmor, Z.J. (1996). *The Control Handbook. Time Delay Compensation: Smith Predictor and its Modifications*. CRC Press and IEEE Press.
- Quintero, R. (1981). *Ingeniería bioquímica: Teoría y aplicaciones*. 1.a ed. México. Ed. Alhambra Mexicana, S.A. Vol. 1. pp. 288-291.
- Ritmann, B.E., McCarty, P. L. (2001) *Biotecnología del Medio Ambiente*. Mc Graw Hill.
- Shinskey, F.G. (1996). *Sistemas de control de procesos*. Tomo I, McGraw-Hill, México.
- Smith, C. y Corripio, A. (2000). *Control automático de procesos, Teoría y Práctica*. LIMUSA, México.
- Smith O.J. (1957). Closed control of loops with dead-time. *Chemical Engineering Progress*, 53:217-219.
- Standard Methods for Examination of Water and Wastewater* (1992). 18th ed., American Public Health Association/American Water Works Association/Water Environment Federation, Washington DC, USA.
- Taguchi, H. y Humphrey A E. (1966). Dynamic measurement of the volumetric oxygen transfer coefficient in fermentation systems. *Journal of Ferm. Technology*, 44 (12), 881 – 889.
- Takatsu. H., Itoh. T. y Araki, M. (1998). Future needs for the control theory in industries –report and topics of the control technology survey in Japanese industry. *Journal of Process Control* 8(5-6).

- Vargas, A., Soto, G., Moreno, J. and Buitrón, G. (2000), Observer based time-optimal control of an aerobic SBR for chemical and petrochemical wastewater treatment, *Wat. Sci. Tech.* 42(5- 6), 163–170.
- Vrecko , D., Hvala, N. and Carlsson, B. (2003), Feedforward feedback control of an activated sludge process: a simulation study, *Wat. Sci. Tech.* 47(12), 19–26.
- Yang , X., Z. Mao, S. Yang. (1988), An improved method for determination of the volumetric oxygen transfer coefficient in fermentation process. *Biotechnology and Bioengineering.* Vol. 3. pp. 1006-1009.