



Universidad de Concepción

MODELOS DE SEDIMENTACIÓN REACTIVA PARA PROCESOS DE LODOS ACTIVADOS EN EL TRATAMIENTO DE AGUAS SERVIDAS

Raimund Bürger / Julio Careaga / Stefan Diehl
David Jeison / Romel Pineda



10
AÑOS
CRHIAM
CENTRO DE RECURSOS HÍDRICOS PARA LA AGRICULTURA Y LA MINERÍA
ANID/FONDAP/15130015

Serie Comunicacional CRHIAM

SERIE COMUNICACIONAL CRHIAM

Versión impresa ISSN 0718-6460

Versión en línea ISSN 0719-3009

Directora:

Gladys Vidal Sáez

Comité editorial:

Sujey Hormazábal Méndez

María Belén Bascur Ruiz

Serie:

Modelos de sedimentación reactiva para procesos de lodos activados en el tratamiento de aguas servidas.

Raimund Bürger, Julio Careaga, Stefan Diehl,

David Jeison y Romel Pineda.

Agosto 2023.

Agradecimientos:

Centro de Recursos Hídricos
para la Agricultura y la Minería
(CRHIAM)

ANID/FONDAP/15130015

Victoria 1295, Barrio Universitario,
Concepción, Chile

Teléfono +56-41-2661570

www.crhiam.cl



Universidad de Concepción

MODELOS DE SEDIMENTACIÓN REACTIVA PARA PROCESOS DE LODOS ACTIVADOS EN EL TRATAMIENTO DE AGUAS SERVIDAS

Raimund Bürger / Julio Careaga / Stefan Diehl
David Jeison / Romel Pineda

SERIE COMUNICACIONAL CRHIAM

PRESENTACIÓN

El Centro de Recursos Hídricos para la Agricultura y la Minería -Centro Fondap CRHIAM- está trabajando en el tema de "Seguridad Hídrica", entendida como la "capacidad de una población para resguardar el acceso sostenible a cantidades adecuadas de agua de calidad aceptable para el sustento, bienestar y desarrollo socioeconómico sostenibles; para asegurar la protección contra la contaminación transmitida por el agua y los desastres relacionados con ella, y para preservar los ecosistemas, en un clima de paz y estabilidad política" (ONU- Agua, 2013).

La "Serie Comunicacional CRHIAM" tiene como objetivo potenciar temas desde una mirada interdisciplinaria, con la finalidad de difundirlos a los tomadores de decisiones públicos, privados y a la comunidad general. Estos textos surgen como un espacio de colaboración colectiva entre diversos investigadores ligados al CRHIAM como un medio para informar y transmitir las evidencias de la investigación relacionada a la gestión del recurso hídrico.

Con palabras sencillas, esta serie busca ser un relato entendible por todos y todas, en el que se exponen los estudios, conocimientos y experiencias más recientes para aportar a la seguridad hídrica de los ecosistemas, comunidades y sectores productivos. Agradecemos el esfuerzo realizado por nuestras y nuestros investigadores, quienes han trabajado de forma mancomunada y han puesto al servicio de la comunidad sus investigaciones para aportar de forma activa en la búsqueda de soluciones para contribuir a la generación de una política hídrica acorde a las necesidades del país.

Dra. Gladys Vidal
Directora de CRHIAM

DATOS DE INVESTIGADORES



Raimund Bürger

CI²MA & Departamento de Ingeniería Matemática
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas,
Universidad de Concepción.
Investigador Asociado CRHIAM



Julio Careaga

Departamento de Matemáticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad del Bío-Bío.



Stefan Diehl

Centre for Mathematical Sciences,
Lund University,
P.O. Box 118, S-221 00 Lund,
Sweden.



David Jeison

Escuela de Ingeniería Bioquímica
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso,
Valparaíso.
Investigador Asociado CRHIAM.



Romel Pineda

CI²MA & Departamento de Ingeniería
Matemática.
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas,
Universidad de Concepción.

RESUMEN

En una planta de tratamiento aguas servidas (PTAS), el proceso de lodos activados (*activated sludge process*, ASP) es la tecnología más utilizada para la eliminación biológica de nutrientes y la reducción de la materia orgánica. Dicho proceso puede tener lugar en un tanque aireado combinado con un sedimentador secundario (*secondary settling tank*, SST) o en un reactor por lotes secuenciales (*sequencing batch reactor*, SBR). Los modelos de sedimentación reactiva describen dicho proceso combinando un modelo mecánico de sedimentación de una suspensión floculada con un modelo cinético para describir las reacciones bioquímicas. El resultado presentado en esta contribución es un modelo espacio-temporal novedoso, formulado por ecuaciones en derivadas parciales, el cual extiende la formulación habitual de los modelos cinéticos descritos por ecuaciones diferenciales ordinarias, correspondientes a un reactor bien mezclado. Se presentan simulaciones numéricas.



INTRODUCCIÓN

En una planta de tratamiento biológico de aguas residuales, el proceso de lodos activados (*activated sludge process*, ASP) es la tecnología más utilizada para la eliminación de nutrientes y la remoción de la materia orgánica. Varios textos ofrecen una visión sobre el proceso de lodos activados: mencionamos las partes introductorias de obras de referencia del tratamiento de aguas servidas (Metcalf & Eddy 2014; Droste & Gehr 2019; Chen *et al.*, 2020), la monografía sobre el modelamiento matemático de sistemas de lodos activados (Makinia & Zaborowska 2020) y algunos textos en español (Fall 2003; Ferrer-Polo & Seco-Torrecillas 2008; Howe *et al.*, 2017).

Un componente clave en el proceso de lodos activados es la sedimentación reactiva. La suspensión que se somete a sedimentación que está conformada por dos fases, una fase sólida y otra líquida, cada una formada por varios componentes. La fase sólida contiene componentes sólidos particulados (bacterias; lodos activados), que pueden ser compuestos orgánicos e inorgánicos. La fase líquida está compuesta de agua, que contiene sustratos (nutrientes) disueltos. La sedimentación reactiva combina la sedimentación de pequeñas partículas sólidas que están inmersas en un fluido (compuestos por sustratos y agua) y la ocurrencia simultánea de reacciones bioquímicas entre los componentes de ambas fases. Una parte significativa de las reacciones bioquímicas en el proceso de lodos activados para el tratamiento de aguas residuales tiene lugar en los tanques de sedimentación secundarios (SSTs, por sus siglas en inglés) que siguen a los reactores biológicos en una planta de tratamiento. Estas reacciones también ocurren en reactores por lotes secuenciales (SBRs, por sus siglas en inglés) durante la etapa de sedimentación. Por lo tanto, es de interés desarrollar los llamados modelos de sedimentación reactiva que describan las reacciones biológicas que tienen lugar en el manto de lodo del sedimentador.

Para presentar nuestros propios aportes, empezamos por una breve reseña histórica del proceso de lodos activados y su modelamiento, enfocándonos en la familia de modelos ASM (sigla de *activated sludge models*, modelos de lodos activados).

Presentaremos luego el enfoque de nuestros modelos que describen la sedimentación reactiva en un SBR o un SST en una dimensión espacial y en dependencia del tiempo (modelamiento espacio-temporal). Luego describimos el modelamiento matemático en más detalle y especificamos la estructura del modelo matemático final. Presentamos tres simulaciones de sedimenta-

ción reactiva en un SST y un SBR, utilizando el modelo de desnitrificación o el modelo ASM1 completo. Durante la desnitrificación, las bacterias transforman los nitratos y nitritos (NO_3^-) en nitrógeno gaseoso (N_2). Este proceso es anaeróbico, lo que significa que ocurre en ausencia de oxígeno. Finalmente, se comenta sobre direcciones de trabajo futuro.

BREVE HISTORIA DE LOS MODELOS DE LODOS ACTIVADOS

El proceso de lodos activados surgió a partir de las investigaciones del Doctor Angus Smith en Inglaterra, a partir de los años 1880, quien propuso introducir burbujas de aire en tanques de aguas servidas para reducir problemas de malos olores no deseados (Makinia & Zaborowska 2020). El término lodos activados fue propuesto por Edward Ardern y William T. Lockett en un trabajo presentado en una reunión científica el día 3 de abril de 1914 (Ardern & Lockett 1914), acontecimiento que cien años más tarde dio origen a la colección Activated Sludge – 100 Years and Counting (“Lodos activados – 100 años y más”, Jenkins & Wanner 2014). A partir de la presentación del trabajo de Ardern & Lockett (1914) y hasta la década de los 1950s, los modelos de lodos activados estaban mayoritariamente basados en diseño empírico y experimentación. Faltaban una teoría estructurada y un modelo matemático riguroso de dichos procesos. Un resultado típico de esta época son las ecuaciones simples y empíricas propuestas por Eckenfelder & Porges (1957).

De acuerdo a Makinia & Zaborowska (2020), una segunda etapa en el desarrollo de modelos para procesos de lodos activados puede ser caracterizada por la aplicación formal de la cinética química, es decir de la descripción de la rapidez de las reacciones químicas involucradas. Mediante la consideración de la cinética química se logró relacionar, en estado estacionario, el crecimiento microbiano y la utilización de sustratos orgánicos bajo condiciones aerobias (es decir, condiciones caracterizadas por la presencia de oxígeno). Los aspectos generales de los principios cinéticos, la historia de modelos microbianos mecanísticos (relacionados al crecimiento de poblaciones de microbios y su propagación espacial) y sus aplicaciones ecológicas fueron resumidos por Panikov (1995).

Cabe mencionar, en particular, el rol preponderante dentro de este tipo de modelos de la relación algebraica de Monod (ver, por ejemplo, Monod, 1949) la cual relaciona la tasa de crecimiento de la biomasa y la concentración local del sustrato. Esta relación forma un ingrediente importante también en los modelos basados en ecuaciones diferenciales ordinarias que describen el crecimiento microbiano y reacciones bioquímicas, tales como el ASM1 en el que nos enfocaremos en esta serie. Concluimos la discusión de esta etapa mencionando que el modelo de diseño del proceso de lodos activados más común de este tipo, es el modelo unificado de Lawrence & McCarty (1970).

La tercera etapa de los modelos matemáticos para el proceso de lodos activados puede ser caracterizada por la aplicación de principios de la ingeniería de reactores en combinación con la inclusión de matrices largas de expresiones cinéticas y constantes estequiométricas. La complejidad de estos modelos modernos resulta de la capacidad de definir el comportamiento de los componentes del agua servida (por ejemplo, fracciones orgánicas, de nitrógeno o de fósforo y sus compuestos) y de la biomasa, además de un número de reacciones y relaciones estequiométricas. A lo anterior se agrega el modelamiento mediante procesos dinámicos (transientes) y de componentes que varían no sólo temporalmente, sino que también espacialmente. Tales configuraciones dan origen a modelos formulados mediante ecuaciones diferenciales ordinarias (cuando, por ejemplo, se considera un reactor bien mezclado) o como es el enfoque de los presentes autores, a ecuaciones en derivadas parciales.

Para sistematizar el desarrollo de modelos dinámicos, en 1982 la entonces IAWQ (Asociación Internacional de Calidad del Agua, creada en 1965; fusionada en 1999 con la Asociación Internacional de Servicios de Agua (IWSA) para formar la Asociación Internacional del Agua (IWA)) incentivó la formación de un grupo de estudio internacional encargado de acelerar el desarrollo de la modelación dinámica de las plantas de tratamiento, crear una plataforma consensual y proponer un modelo simple de inicio. El grupo concentró sus primeros esfuerzos en inventariar los modelos existentes así como los obstáculos a su desarrollo (Fall, 2003). Se concluyó que los únicos modelos que tuvieron una amplia difusión y nivel de utilización fueron los más simples, que están basados en la hipótesis simplificadora de régimen estacionario y mezcla completa para los reactores.

Por otra parte, existía un gran número de modelos dinámicos, cuya difusión fue obstaculizada por la complejidad, la falta de orden en términos de presentación y las limitaciones en el poder de las computadoras. Por

ejemplo, en los años 70, la University of Cape Town (Sudáfrica) fue una de las pioneras en la modelación dinámica con los trabajos del profesor Gerrit V.R. Marais. Otros trabajos tuvieron lugar después o simultáneamente en un número muy restringido de universidades de Europa y Estados Unidos.

Parte de los pioneros en este tema se reunirían luego en 1980 en el primer grupo de estudio de la IAWQ (actual IWA) formado por Mogens Henze (Dinamarca), C.P. Leslie Grady (USA), Willi Gujer (Suiza), Gerrit Van R. Marais (Sudáfrica) y Tomonori Matsuo (Japón).

Las conclusiones del grupo fueron publicadas en un informe (Henze *et al.*, 1987a) y poco después en un artículo (Henze *et al.*, 1987b) que presentaba lo conocido hoy como el modelo ASM1 (activated sludge model no. 1), modelo dedicado a describir la degradación de materia orgánica, nitrificación y desnitrificación en un proceso de lodos activados. La nitrificación es la oxidación biológica de amonio con oxígeno para dar nitrito, seguida por la oxidación de esos nitritos a nitratos. A su vez, la desnitrificación es un proceso metabólico que usa el nitrato como receptor terminal de electrones en condiciones anaerobias (ausencia de oxígeno) principalmente, conduciendo finalmente a nitrógeno molecular. Los logros más destacados del grupo fueron un consenso en los procesos biológicos que integran el modelo, la estandarización de los símbolos, la presentación del modelo utilizando una notación matricial, la propuesta de valores por defecto para los parámetros del modelo, la adopción de la demanda química de oxígeno (DQO; en inglés: chemical oxygen demand, COD) y su fraccionamiento para caracterizar las aguas y lodos, y un código de programación para el desarrollo futuro de software de modelización.

En 1995, los trabajos del grupo de estudio renovado se prolongaron para publicar la versión ASM2, la cual está dirigida principalmente a predecir el comportamiento del fósforo. En 1999 hubo dos otras modificaciones con la aparición de la versión ASM2d (versión modificada del ASM2) y de la versión ASM3 (alternativa al ASM1). Comentamos que todos estos modelos están resumidos en el informe técnico de Henze *et al.*, (2000) y más recientemente en el artículo de Hauduc *et al.*, (2013) y ampliamente en Makinia y Zaborowska, (2020).

NUEVOS ENFOQUES



Figura 1.

Los múltiples propósitos del uso de modelos matemáticos para la simulación, el diseño y el control de plantas de tratamiento de aguas servidas (PTAS). Fuente: Elaboración propia.

La Figura 1 ilustra, en términos generales, los propósitos del uso de modelos matemáticos para plantas de tratamiento de aguas servidas. En nuestro caso específico, la aplicación de modelos matemáticos dinámicos espacio-temporales para describir el modelo ASM (o sus variantes) en un tanque de sedimentación secundario (SST) o un reactor por lotes secuenciales (SBR) tiene los siguientes objetivos:

- La modelación dinámica espacio-temporal permite predecir la calidad del efluente, la demanda de oxígeno y la producción de lodo en respuesta a las fluctuaciones en tiempo real de la carga (composición) y del caudal de alimentación.

- Se facilita la comprensión del proceso y se pueden reducir las necesidades de estudio piloto, el tiempo y la inversión que se requiere para esto, realizando, primero los estudios por modelación y sólo probar en escala piloto algunas de las soluciones identificadas.
- Una vez que el proceso esté modelado y calibrado para una planta específica, el modelo se puede utilizar para fines de diagnóstico, proyección, comparación de variantes, desarrollo de estrategias de control, y optimizar la operación. Por ejemplo, en una planta normalmente se usan varios SBR en paralelo, y se puede utilizar la simulación numérica para determinar la duración de cada una de las etapas de operación.
- Obviamente, mediante la modelación se pueden realizar estudios sin perturbar el funcionamiento de la planta, ni poner en riesgo sus equipos. Especialmente con la ayuda de métodos numéricos eficientes se pueden llevar a cabo predicciones del comportamiento de un equipo a largo plazo.
- La simulación numérica por métodos eficientes ayuda a resolver problemas de diseño óptimo: aun cuando la planta proyectada no existe todavía físicamente, se puede probar configuraciones innovadas y comparar variantes, y se puede optimizar la configuración y el funcionamiento de una planta de tratamiento, así como responder preguntas respecto a su capacidad e impactos de modificaciones proyectadas.

La principal limitación del presente planteamiento consiste en la necesidad de realizar estudios anteriores para calibrar los modelos. Los datos que se necesitan para esto son generalmente diferentes de los datos rutinarios de caracterización que se tienen en las plantas de tratamiento de aguas servidas. Todavía falta realizar investigación para evaluar la aplicabilidad de los modelos.

MODELAMIENTO MATEMÁTICO

Los modelos son una descripción matemática de una serie de procesos (físicos, químicos o biológicos) que ocurren en un espacio delimitado (tanques y reactores, tales como un SST o un SBR). En tratamiento de aguas, los modelos se expresan a través de balances de masas que toman en cuenta la cinética de reacción de los procesos (procesos de transformación), la hidrodinámica (tipo de flujo y mezcla en el reactor), movimiento relativo de las fases sólida y líquida (y gaseosa si hay) incluyendo la formación de la capa de biomasa (anteriormente denominada sedimento) con el eventual efecto de compresibilidad, y el transporte de materia a través de los límites del sis-

tema (flujos de entrada y salida). Los procesos de transporte son una característica específica de cada sistema: configuración del reactor, distribución del influente, mezcla, dispersión, y como se trata de un modelo de planta (no sólo operación unitaria), hay que incluir la recirculación, la extracción de lodo, entre otros.

Los procesos de transformación, por el contrario, ocasionan cambios a los componentes químicos con una velocidad que depende del ambiente local del proceso. Los procesos individuales que forman el modelo son relacionados a través de ecuaciones de leyes de conservación de masas (balances), las cuales se deben resolver, para poder describir los cambios en el estado del sistema a través de las variables de estado (concentraciones de biomasa, oxígeno, DQO, nitrógeno, por ejemplo). La escritura de balances de masas de un modelo dinámico, pero sin variación espacial, resulta en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs), mientras que la dependencia de las concentraciones de la coordenada espacial entrega un modelo formulado en términos de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs). Claramente, la solución de cada uno de estos tipos de modelos requiere de la implementación de métodos numéricos especializados.

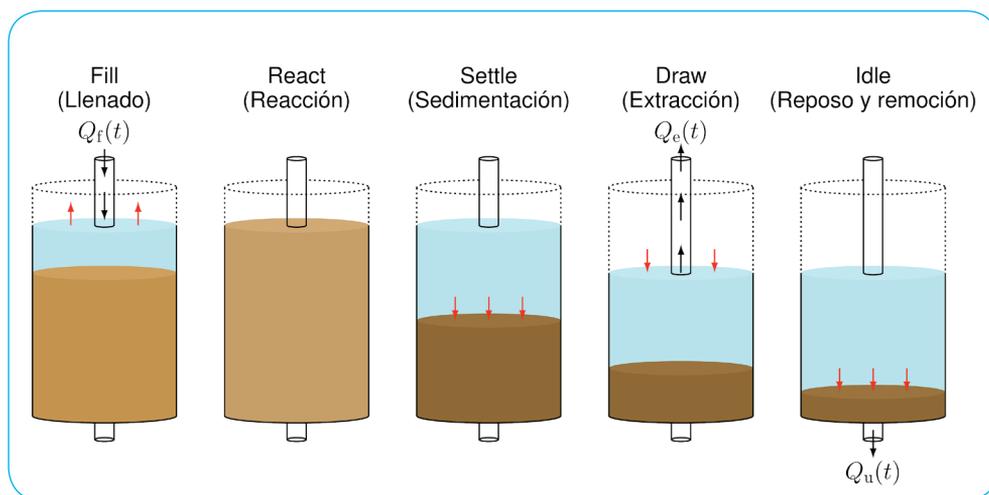


Figura 2.

Las cinco etapas son: (1) el llenado del equipo, (2) la reacción, (3) la sedimentación, (4) la extracción, y (5) el reposo y la remoción (etapa también llamada ralentí). Las simulaciones 1 y 3 están basados en este concepto de proceso. Fuente: Elaboración propia.

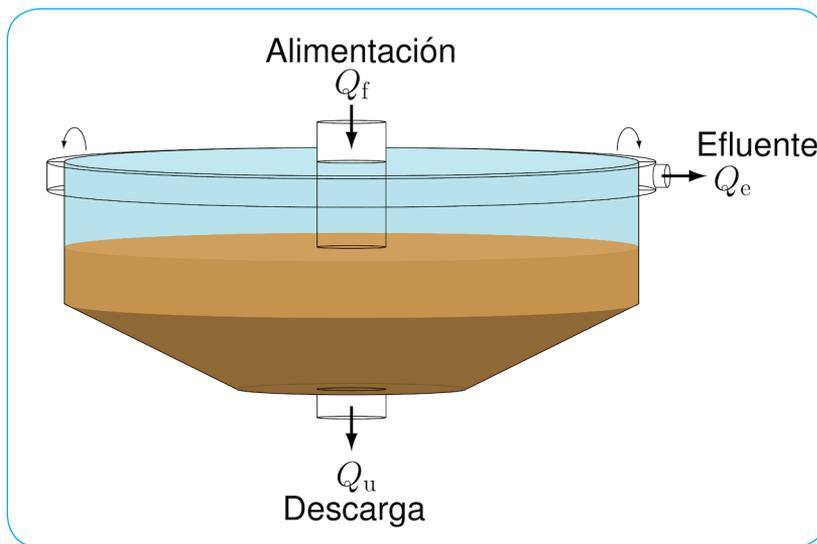


Figura 3.

Diseño de un tanque de sedimentación secundario (SST) utilizado para remover la biomasa y sólidos suspendidos. Es operado en forma continua, al contrario de un reactor por lotes secuenciales (SBR). La simulación 2 está basada en este concepto de proceso. Fuente: elaboración propia.

Para llevar a cabo el proceso de lodos activados se pueden considerar diferentes configuraciones. Una opción es el modo de operación realizado en un reactor por lotes secuenciales (SBR; Figura 2) que contempla un ciclo de cinco etapas diferentes de operación. Los reactores por lotes secuenciales (SBR) son una forma especial de tratamiento de lodo activado en el que todos los procesos del tratamiento se realizan en el reactor y no se requieren clarificadores. Este proceso trata las aguas residuales en modo de lotes y cada lote se secuencia a través de una serie de etapas de tratamiento. Durante la etapa de reacción se pueden suministrar burbujas de aire para que el equipo funcione como tanque de aireación.

De todas maneras, se supone que durante esta etapa el contenido del equipo está completamente mezclado y por lo tanto las concentraciones son iguales en cada nivel de altura, es decir no exhiben variación espacial, lo que permite describir este sistema durante la etapa de reacción por un sistema de EDOs (este aspecto se detallará más adelante). Notamos que un SBR cuenta, conceptualmente, con un dispositivo que permite agregar influente o extraer

efluente desde arriba, además de una apertura de descarga inferior para la remoción del sedimento (biomasa) durante la etapa de reposo y remoción (también llamada ralenti). La opción más común es un proceso continuo de un reactor (tanque de aireación) acoplado con un tanque de sedimentación secundario (usamos aquí la abreviatura en inglés, SST (secondary settling tank); ver Figura 3).

En este caso, nuestro modelamiento se refiere solamente al SST, dejando fuera aquí la descripción del tanque de aireación. Comentamos que un SST funciona análogamente a un espesador-clarificador en la industria minera, donde la fase sólida (que forma el sedimento) es formada por partículas de ganga (fracción de la mena sin valor comercial) que se encuentra suspendida en relaves de las que se desea recuperar el agua. Curiosamente, por un largo tiempo los modelos matemáticos para SSTs fueron desarrollados en forma independiente en las áreas de ingeniería sanitaria e ingeniería metalúrgica, respectivamente. No obstante, los principios y modelos que describen la sedimentación de partículas sólidas artificialmente floculadas (en la minería) son los mismos que gobiernan la sedimentación de biomasa (orgánica), por lo tanto el desarrollo de los presentes modelos, su análisis matemático, y simulación numérica están altamente basados en resultados previos de parte de los autores (ver, por ejemplo, Betancourt *et al.*, 2014a, 2014b; Bürger *et al.*, 2000, 2005, 2017, 2021a; Bustos *et al.*, 1999; Concha & Bürger 2022).

Tabla 1.

Variables de densidad de las componentes del material particulado (biomasa; letra X con índice) y de las componentes solubles (sustratos; letra S con índice) del modelo ASM1 (Henze *et al.* 1987a, b; 2000), en forma utilizada por Bürger *et al.* (2022b).

Material	Notación	Unidad
Partículas de materia orgánica inerte	X_I	(kg COD) m ⁻³
Sustrato de biodegradación lenta	X_S	(kg COD) m ⁻³
Biomasa heterótrofa activa	$X_{B,H}$	(kg COD) m ⁻³
Biomasa autótrofa activa	$X_{B,A}$	(kg COD) m ⁻³
Productos de partículas derivados de la descomposición de la biomasa	X_p	(kg COD) m ⁻³
Nitrógeno orgánico biodegradable en partículas	X_{ND}	(kg N) m ⁻³
Materia orgánica inerte soluble	S_I	(kg COD) m ⁻³
Sustrato fácilmente biodegradable	S_S	(kg COD) m ⁻³
Oxígeno	S_O	(kg COD) m ⁻³
Nitrógeno en forma de nitrato y nitrito	S_{NO}	(kg N) m ⁻³
Nitrógeno NH ₄ ⁺ + NH ₃	S_{NH}	(kg N) m ⁻³
Nitrógeno orgánico biodegradable soluble	S_{ND}	(kg N) m ⁻³

El modelo ASM1 (Henze *et al.*, 1987a, 1987b) tiene como propósito simular la degradación de la materia orgánica así como la nitrificación y desnitrificación de los procesos de lodos activados de tipo lodos únicos. El modelo cuenta con 13 componentes en total, de los cuales 6 corresponden a biomasa (materia particulada), cuyas concentraciones son denotadas por la letra *X* con algún índice, más 6 sustratos (sustancias solubles), con concentraciones denotadas por *S* con algún índice, ver Cuadro 1. El componente décimotercero es la alcalinidad, la cual no es un parámetro esencial al modelo, pero que sirve como información adicional añadida para detectar indirectamente los riesgos de cambio en el pH que se utiliza opcionalmente (ver, por ejemplo, Kirim, 2022; Kirim *et al.*, 2019, 2022; Bürger *et al.*, 2023a). Por otro lado, el modelo ASM1 original incluye 8 procesos: tres procesos de crecimiento, dos procesos de decaimiento, tres procesos de hidrólisis de partículas ligadas a los bio-flocs, y un proceso de amonificación.

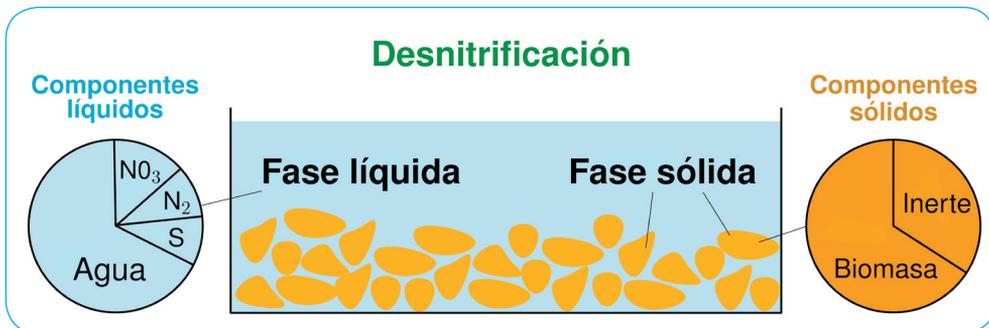


Figura 4.

Explicación de los conceptos de fase sólida y fase líquida y de sus componentes para el proceso de desnitrificación. La simulación 1 está basada en este proceso.

Fuente: Elaboración propia.

A parte del modelo ASM1, estudiamos también un modelo más simplificado que no contempla la totalidad de los procesos del ASM1, sino que solamente aquellos que ocurren en ausencia de oxígeno. El resultado es un modelo de desnitrificación formado por dos componentes sólidos y tres componentes solubles, a parte del agua, que forman las fases sólida y líquida, respectivamente (ver Figura 4).

FORMA FINAL DEL MODELO MATEMÁTICO

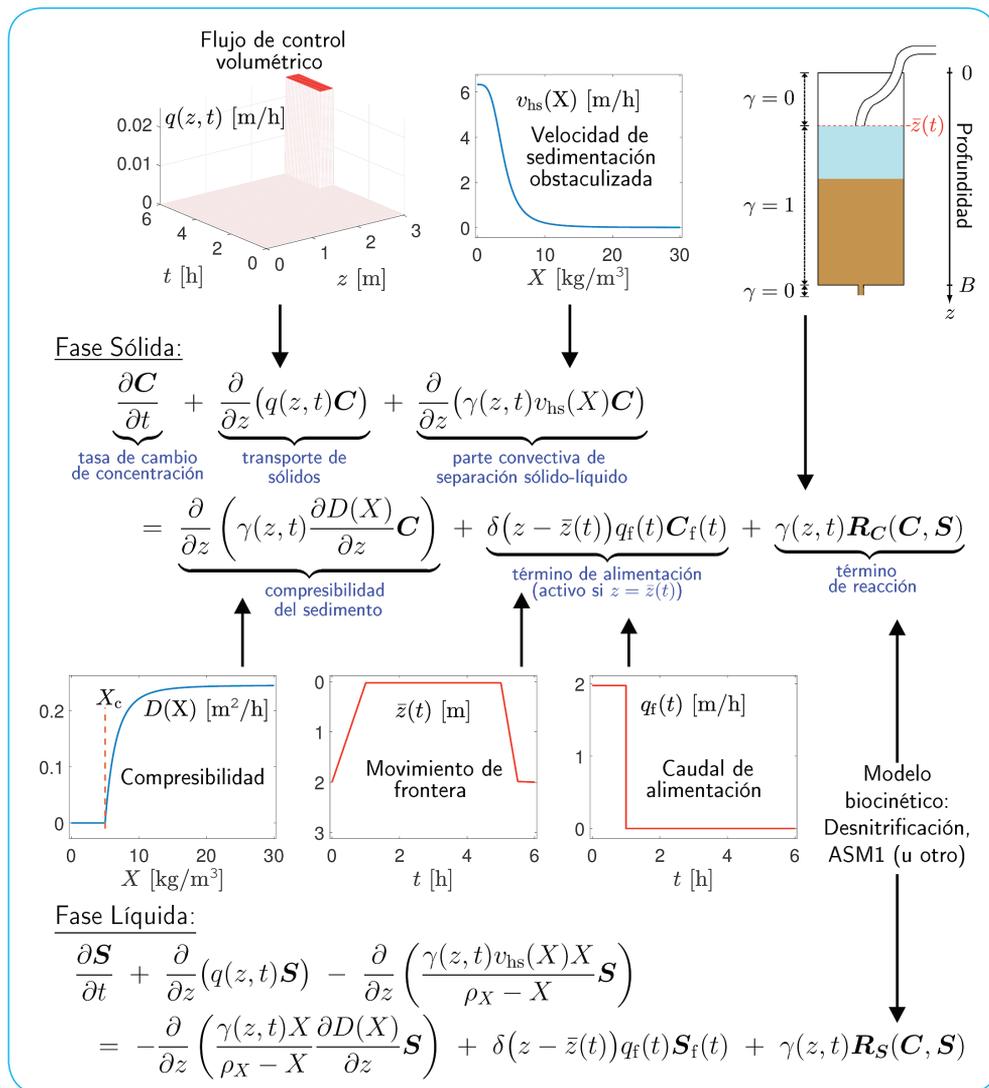


Figura 5.

Estructura del modelo matemático del reactor por lotes secuenciales (SBR), mostrando los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales y a modo de ejemplo, las funciones constitutivas (en color azul) y las funciones de control (en color rojo). Ver detalles en el término de reacción es especificado a través del modelo ASM1 o uno de sus variantes. Fuente: Elaboración propia.

Tabla 2.

Las simulaciones 1 y 3 están basadas en la solución numérica de estas ecuaciones. Fuente: Elaboración propia.

Variable	Significado
\mathbf{C}	Vector de 6 componentes sólidas
\mathbf{S}	Vector de 6 componentes solubles
$r(\mathbf{C},\mathbf{S})$	Vector de procesos de reacción
M_c, M_s	Matrices estequiométricas
$R_c(\mathbf{C},\mathbf{S})=M_c r(\mathbf{C},\mathbf{S})$	Vector de términos de reacción, balance de componentes sólidas
$R_s(\mathbf{C},\mathbf{S})=M_s r(\mathbf{C},\mathbf{S})$	Vector de términos de reacción, balance de componentes solubles

El modelo matemático en su forma final es representado en la Tabla 2. Está basado en ecuaciones de balance que asumen la forma de ecuaciones diferenciales parciales del tipo convección-difusión-reacción que entregan las variables contenidas en los vectores \mathbf{C} y \mathbf{S} como funciones de la altura (o equivalentemente, profundidad) y del tiempo. A su vez, la variable X denota la concentración total de la fase sólida. De esta cantidad dependen las ecuaciones constitutivas que modelan la velocidad de sedimentación obstaculizada de las partículas sólidas (la biomasa) y la compresibilidad del sedimento. La Figura 5 ilustra, además, cómo los vectores de reacción se incorporan en el modelo espacio-temporal. Cabe señalar que dicha figura ilustra solamente el caso de un SBR; los ingredientes del modelo para un SST son similares (ver Bürger *et al.*, 2023a).

Dado que las ecuaciones gobernantes son no lineales, el modelo se puede resolver solamente a través de métodos numéricos, cuyo desarrollo ha sido tema de la tesis doctoral de uno de los autores (Pineda, 2023) y de una serie de trabajos especializados (Bürger *et al.*, 2022a, 2022b, 2023a, 2023b). De hecho, el modelo presentado en la Figura 5 muestra algunas dificultades que motivaron investigación original en matemática aplicada:

- El mecanismo de llenado y extracción de un SBR genera una frontera móvil, la cual dificulta la aplicación de un método de diferencias con malla computacional fija. En Bürger *et al.*, (2022b) y Bürger *et al.*, (2023b) se presentan dos formas conceptualmente diferentes para abordar este problema.
- El efecto de compresibilidad de sedimento es activo solamente cuando la densidad local de sólidos excede un valor crítico. La posición espacial donde este valor es asumido marca el nivel de sedimento. La ecuación gobernante cambia de tipo a través de este nivel. Sin embargo, el método numérico apropiadamente captura este cambio; no es necesario explícitamente rastrear este nivel.

- Debido a la dependencia no lineal del flujo convectivo del modelo, se pueden formar discontinuidades en las concentraciones. Esta propiedad igualmente es considerada por el método numérico, y por otro lado es consistente con la observación de que una suspensión sólido-líquido al sedimentar forma interfaces suspensión-agua o sedimento-agua nítidas.
- Para ser de interés en las aplicaciones prácticas, un método numérico debe ser eficiente para resolver el modelo (entregar una solución después de un tiempo de simulación corto). Esta eficiencia se logra mediante un método numérico implícito, que entrega ganancias en tiempo computacional medibles (Bürger *et al.*, 2023b).
- La variante del modelo para un SST (no mostrada en la Figura 5) contempla, además, un flujo volumétrico que depende en forma discontinua de la coordenada espacial. El modelo resultante, por lo tanto, posee tanto coeficientes discontinuos como soluciones discontinuas.
- Los métodos numéricos desarrollados satisfacen un principio de región invariante; han sido desarrollados para asegurar que todas las concentraciones son no negativas y la concentración total de sólidos nunca excede una concentración máxima dada.

SIMULACIONES

A continuación, presentamos tres simulaciones numéricas en el tratamiento de aguas residuales: operaciones continuas en SST usando ASM1 (Figura 8), y operaciones secuenciales en SBR para el proceso de desnitrificación (Figura 7) y con ASM1 (Figura 9). Para fines de simulación, en las Figuras 7 y 9 la zona arriba de la fuente móvil ilustrada con color menta. En estas figuras, simulamos un tanque cilíndrico de 3 m de altura y un área de sección transversal de 400 m², el cual se simula durante 6 horas. Inicialmente, el tanque está lleno hasta 1m de altura, con concentraciones de biomasa y sustratos. El proceso del SBR es secuencial: primero, llenamos el tanque completamente con agua residual y concentraciones de sustratos, sin incluir biomasa, durante la primera hora, lo que provoca que la superficie móvil ascienda (línea negra, Figuras 7 y 9).

A continuación, durante las siguientes dos horas ($1\text{ h} < t < 3\text{ h}$) se lleva a cabo la etapa de reacción, caracterizada por una mezcla completa. Como resultado, las componentes particuladas y solubles en el tanque se distribuyen homogéneamente. Una vez completadas las reacciones, se inicia la fase de sedimentación, que dura dos horas. En esta etapa, el material particulado

sedimenta hacia el fondo del tanque, formando una capa de lodo y dejando el líquido clarificado en la parte superior (color azul, Figura 7: primera columna y Figura 9). Posteriormente, se realiza la extracción del líquido clarificado durante media hora ($5 \text{ h} < t < 5.5 \text{ h}$), lo que provoca el descenso de la superficie móvil. Finalmente, en la última media hora, el tanque entra en la fase de reposo y descarga, donde se extrae parte del material concentrado desde la parte inferior del tanque.

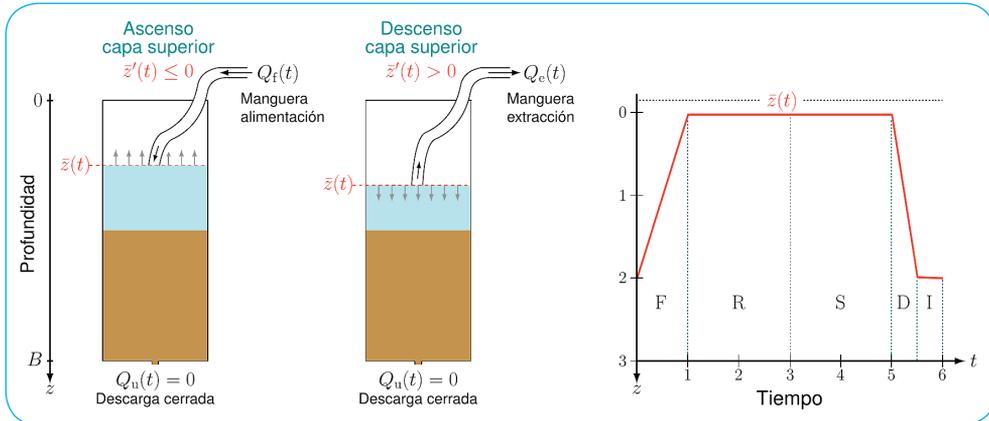


Figura 6.

Simulaciones 1 (desnitrificación en un SBR) y 3 (modelo ASM1 en un SBR): (izquierda) funcionamiento del reactor durante la etapa de llenado (fill; letra F) y de extracción (draw; letra D), (derecha) trayectoria típica de la frontera líquido-aire (o posición del dispositivo flotante) durante un ciclo completo de la operación. Fuente: Elaboración propia.

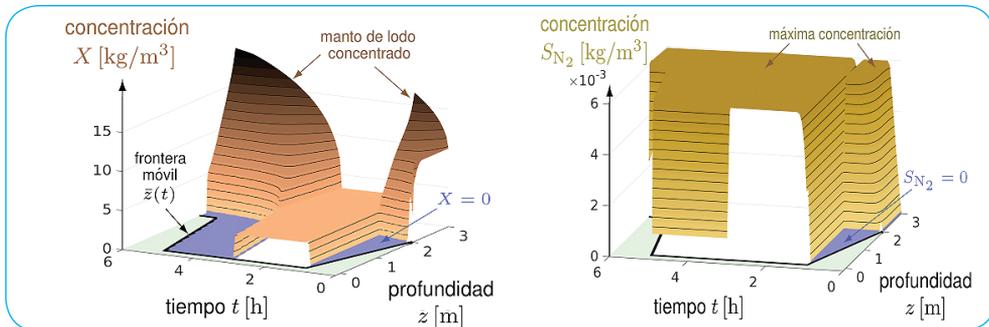


Figura 7.

Simulación 1: desnitrificación en un reactor por lotes secuenciales (SBR). A modo de ejemplo se muestra la evolución espacio-temporal de la concentración de fase sólida total (izquierda) y de uno de los tres sustratos que forman la fase líquida (derecha). Fuente: Elaboración propia.

La Simulación 1 (Figuras 6 y 7) muestra el proceso biológico de la desnitrificación que modelan los términos de reacción del modelo matemático del SBR (Figura 5), para la eliminación de nitrógeno en las aguas residuales. En la Figura 7 se presenta la evolución espacio-temporal de una de las concentraciones del material particulado (ver Cuadro 1). Las reacciones de conversión de nitrato NO_3 en N_2 comienzan de manera inmediata y son rápidas.

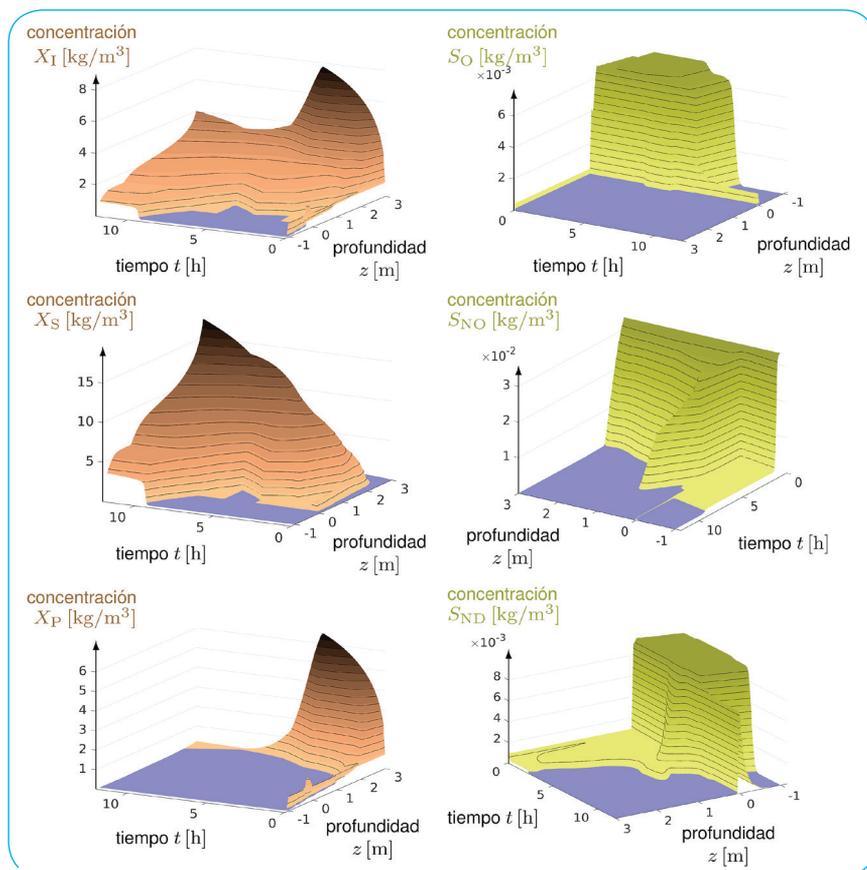


Figura 8.

Simulación 2: el modelo ASM1 en un tanque de sedimentación secundaria (SST) con fuente de alimentación ubicada en $z=0$ m. Se muestra la evolución de tres de las concentraciones de los componentes que forman la fase sólida (columna izquierda), y tres de las concentraciones de los componentes (sustratos) que forman la fase líquida (columna derecha), bajo una variación de los caudales de alimentación y descarga y de la composición del caudal de alimentación. Fuente: Elaboración propia.

En términos del ASM1, las bacterias se consideran como sólidos particulados, ya que estas son partículas sólidas que están presentes en el lodo activado. Las bacterias participan en la degradación de la materia orgánica y los procesos de nitrificación y desnitrificación. Las especies solubles son los componentes químicos disueltos en el agua residual, como los compuestos de nitrógeno (amoníaco, nitrito, nitrato) y la materia orgánica. Estos componentes solubles son los que las bacterias del lodo activado utilizan como fuente de nutrientes y energía para llevar a cabo sus procesos metabólicos, como la degradación de la materia orgánica, nitrificación y desnitrificación.

La Simulación 2 (Figura 8) ilustra el proceso de lodos activados para el tratamiento de aguas residuales en un SST que siguen a los reactores biológicos. Para los términos de reacción, se usan las variables de densidad del ASM1 (ver Cuadro 1). El tanque es un cilindro de altura de 4 m y un área de sección transversal de 400 m². Las concentraciones de alimentación provienen del reactor biológico, donde el lodo activado (biomasa) se mezcla con el agua residual. En este proceso, las bacterias presentes en el lodo degradan la materia orgánica, eliminando parte de los contaminantes. Tras el tratamiento biológico, la mezcla de lodo y agua ingresa al tanque de sedimentación secundario por medio de la fuente de alimentación. La Figura 8 muestra la evolución de tres de las seis concentraciones particuladas y tres de las seis concentraciones de los componentes (sustratos) que forman la fase líquida del ASM1 en función de diferentes caudales de alimentación y descarga. En el fondo del tanque, el material particulado se acumula y retorna al reactor biológico como lodo activado recirculado. Mientras tanto, el agua tratada sale por la parte superior del tanque para su descarga o reutilización.

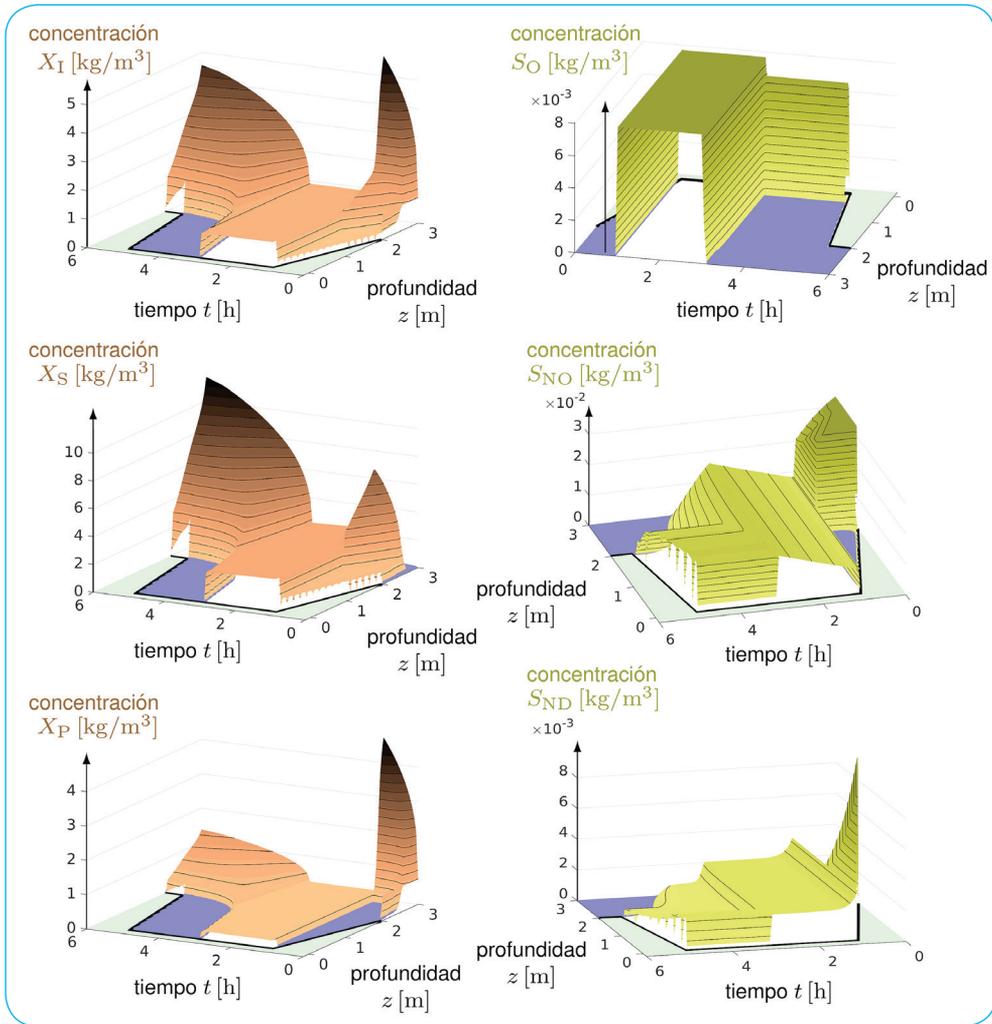


Figura 9.

Simulación 3: el modelo ASM1 en un reactor por lotes secuenciales (SBR). Se muestra la evolución de los perfiles espacio-temporales de tres de las concentraciones de los componentes de la fase sólida y de tres de las concentraciones de todos los componentes (sustratos) de la fase líquida. Notar que durante la segunda etapa (etapa de reacción) el contenido del reactor se considera bien mezclado, por lo tanto, las ecuaciones gobernantes no dependen de la posición espacial y los perfiles no exhiben variación espacial. Fuente: Elaboración propia.

Finalmente, la Simulación 3 (Figura 9) muestra el proceso biológico del sistema de lodos activados que modelan los términos de reacción del modelo matemático del SBR (Figura 5) con el ASM1.

CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

En la literatura, todos los aportes en la optimización del SBR, están basados en modelos temporales (sin resolución espacial) basados en ecuaciones diferenciales ordinarias que modelan las reacciones bioquímicas que ocurren durante las etapas de llenado y reacción. En trabajos futuros, el modelo y los métodos numéricos descritos brevemente descritos en esta contribución, y detallados en Bürger *et al.* (2022a, b; 2023a, b) y Pineda (2023), permitirán realizar investigaciones y contribuciones con respecto a la optimización de la sedimentación reactiva del proceso de SBR. Por ejemplo, hay interés en diseñar el ciclo de operación en forma óptima (elección adecuada de la duración de cada una de las etapas), considerando también que una planta normalmente emplea varios equipos SBR en paralelo, para asegurar que siempre uno de éstos se encuentre en etapa de llenado. De hecho, se podrá considerar el problema general de optimización bi-objetivo para el diseño y operación periódica de una planta SBR para un conjunto constante de datos de entradas (por ejemplo, condiciones climáticas) que se pueda formular como: Minimizar tanto el costo de construcción como los costos de funcionamiento sujetos a que la planta entregue concentraciones de efluentes por debajo de los límites permitidos por las normativas de emisión. El costo de construcción está claramente relacionado con el tamaño de la planta, mientras que los costos de operación consisten principalmente en costos de energía requeridos para la aireación del reactor (Åmand *et al.*, 2013). Como ya mencionamos arriba, otro aspecto de interés es la implementación de varios SBR acoplados en serie o paralelo, con etapas sincronizadas que permitan, por ejemplo, obtener un flujo continuo de efluente de cierta calidad. Este enfoque permitiría una comparación más precisa entre los SBR y los SST de funcionamiento continuo, ya que se puede preferir uno u otro en función del tamaño de la planta y de otras consideraciones prácticas, como se menciona por Droste & Gear (2019).

Otra aplicación con posibles ventajas de modelado es el uso del SBR con fondo poroso. En este proceso, el líquido se filtra a través de un medio filtrante, como puede ser una tela filtrante o una membrana. Este medio tiene la propiedad de retener los sólidos suspendidos en el agua mientras permite el paso del fluido. Aunque aplicar presión puede acelerar el proceso

de filtración, la creciente resistencia hidráulica del sedimento acumulado en el fondo del reactor puede contrarrestar la presión aplicada, lo que puede reducir la eficiencia del proceso. Este fenómeno da origen a un problema de frontera libre (Bürger *et al.*, 2001), el cual añade complejidad al modelo SBR, ya que la trayectoria del pistón que presiona el fluido a través del medio filtrante depende de cómo cambia la resistencia hidráulica del fondo a lo largo del tiempo. Comprender como esta resistencia hidráulica afecta la trayectoria del pistón es fundamental para mejorar la eficacia del proceso de filtrado.

Como se menciona en diversos estudios (Collivignarelli *et al.*, 2020, Dapena-Mora *et al.*, 2004, Guo *et al.*, 2015, Jenkins *et al.*, 2004), la formación de burbujas es un problema crítico en las plantas de tratamiento de aguas residuales con lodos activados, ya que disminuyen el rendimiento general de la planta y causan problemas operativos. Durante la etapa de reacción del SBR, se busca la eliminación biológica completa del nitrógeno. Sin embargo, una parte sustancial de esto, sigue presente, como lo es el nitrito, que no se elimina por completo, liberando gas nitrógeno durante la fase de sedimentación. Esta liberación de gas nitrógeno provoca la formación de pequeñas burbujas en el lodo activado, dando como resultado la flotación del manto de lodo en el tanque. La adhesión de las burbujas de gas nitrógeno al material particulado ocurre durante la etapa de sedimentación del SBR, en una zona de flujo en sentido contrario, lo que implica que las burbujas de gas nitrógeno se mueven hacia arriba mientras las partículas sólidas sedimentan (Kim *et al.*, 2011), produciéndose la unión de las burbujas a las partículas. Se ampliará el modelo SBR para incluir el proceso de agregación mencionado. Además, será necesario introducir una EDP adicional para una tercera variable, por ejemplo, el número de partículas sólidas adheridas a una sola burbuja en cada posición espacial y tiempo. La inclusión de esta nueva EDP permitirá modelar la dinámica de las burbujas de gas y las partículas sólidas adheridas en el reactor, lo que ayudara a comprender mejor los mecanismos que rigen la formación y flotación del manto de lodo en los SBR y los SST.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo del Centro de Recursos Hídricos para la Agricultura y la Minería (CRHAM; proyecto ANID/FONDAP/15130015). Además, agradecemos el apoyo de FONDECYT 1210610 a través de los proyectos Centro de Modelamiento Matemático (CMM; BASAL proyecto FB210005); proyecto Anillo ANID/PIA/ACT210030; y Fondecyt 2120610. JC es apoyado por ANID a través de FONDECYT proyecto Postdoctoral 3230553. SD agradece el apoyo del Consejo de Investigación Sueco (Vetenskapsrådet; proyecto 2019-04601). RP es apoyado por la beca ANID, folio ANID-PCHA/Doctorado Nacional/2020-21200939.

REFERENCIAS

- Åmand, L., Olsson, G., Carlsson, B. 2013. Aeration control a review. *Water Science and Technology*, 67, 2374–2398.
- Ardern E., Lockett W.T. 1914. Experiments of the oxidation of sewage without the aid of filters. *Journal of the Society of Chemical Industry*, 33 (10), 523–539.
- Betancourt F., Bürger R., Diehl S., Mejías C. 2014a. Advanced methods of flux identification for clarifier-thickener simulation models. *Minerals Engineering* 63, 2–15.
- Betancourt F., Bürger R., Diehl S., Farås S. 2014b. Modelling and controlling clarifier-thickeners fed by suspensions with time-dependent properties. *Minerals Engineering* 62, 91–101.
- Bürger R., Careaga J., Diehl S. 2017. A simulation model for settling tanks with varying cross-sectional area. *Chemical Engineering Communications*, 204, 1270–1281.
- Bürger R., Careaga J., Diehl S. 2021a. A method-of-lines formulation for a model of reactive settling in tanks with varying cross-sectional area. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 86, 514–546.
- Bürger R., Concha F., Karlsen K.H. 2001. Phenomenological model of filtration processes: 1. Cake formation and expression. *Chemical Engineering Science*, 56, 4537–4553.
- Bürger R., Diehl S., Careaga J., Pineda R. 2022a. A moving-boundary model of reactive settling in wastewater treatment. Part 1: Governing equations. *Applied Mathematical Modelling*, 106, 390–401.
- Bürger R., Diehl S., Careaga J., Pineda R. 2022b. A moving-boundary model of reactive settling in wastewater treatment. Part 2: Numerical scheme. *Applied Mathematical Modelling*, 111, 247–269.
- Bürger R., Diehl S., Careaga J., Pineda R. 2023a. A model of reactive settling of activated sludge: Comparison with experimental data. *Chemical Engineering Science*, 267, article 118244 (13pp).

- Bürger R., Diehl S., Careaga J., Pineda R. 2023b. Preprint 2023-11, Centro de Investigación en Ingeniería Matemática, Universidad de Concepción; submitted. por ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis, to appear.
- Bürger R., Karlsen K.H., Towers J.D. 2005. A model of continuous sedimentation of flocculated suspensions in clarifier-thickener units. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 65, 882–940.
- Bürger R., Wendland W.L., Concha F. 2000. Model equations for gravitational sedimentation-consolidation processes. *ZAMM Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 80, 79–92.
- Bustos M.C., Concha F., Bürger R., Tory E.M. 1999. Sedimentation and Thickening: Phenomenological Foundation and Mathematical Theory, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands.
- Chen G., van Loosdrecht M.C.M., Ekama G.A., Brdjanovic D. 2020. Biological Wastewater Treatment, 2nd Edition, IWA Publishing, London, UK.
- Collivignarelli M.C., Baldi M., Abbà A., Caccamo F.M., Miino M.C., Rada E.C., Torretta V. 2020. Foams in wastewater treatment plants: from causes to control methods. *Applied Sciences*, 10, article 2716 (21pp).
- Concha F., Bürger R. 2022. Sedimentation. Chapter 6 en Contado, C. (ed.), Particle Separation Techniques: Fundamentals, Instrumentation, and Selected Applications, Elsevier (series: Handbooks in Separation Science), Amsterdam, The Netherlands, pp. 155–177.
- Dapena-Mora A., Arrojo B., Campos J.L., Mosquera-Corral A., Méndez R. 2004. Improvement of the settling properties of Anammox sludge in an SBR. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 79, 1417–1420.
- Droste R., Gear R. 2019. Theory and Practice of Water and Wastewater Treatment, 2nd Edition, Wiley, Hoboken, NJ, USA.
- Eckenfelder, W.W., Porges, N. 1957. Activity of microorganisms in organic waste disposal. IV. Bio-calculations. *Applied Microbiology*, 5, 180–187.

- Fall, C. 2003. Modelación matemática de plantas de tratamiento de lodos activados. Capítulo 22 (pp. 240–255) en Díaz-Delgado C., Fall C., Quentin E., Jiménez-Moleón M.C., Esteller-Alberich M.V., Garrido-Hoyos S.E., López-Vázquez C.M., García-Pulido (Eds), Agua Potable para Comunidades Rurales, Reuso y Tratamientos Avanzados de Aguas Residuales Domésticas. LIBRO DIGITAL, Red Iberoamericana de Potabilización y Depuración del Agua (RIPDA-CYTED) y Centro Interamericano de Recursos del Agua, Facultad de Ingeniería de la Universidad Autónoma del Estado de México (CIRA-UAEM).
- Ferrer-Polo, J., Seco-Torrecillas, A. 2008. Tratamientos Biológicos de Aguas Residuales. Primera Edición. Alfaomega Grupo Editor, S.A. de C.V., México.
- Guo F., Wang Z.-P., Yu K., Zhang T. 2015. Detailed investigation of the microbial community in foaming activated sludge reveals novel foam formers. *Scientific Reports*, 5, article 7637 (9pp).
- Hauduc H., Rieger L., Oehmen A., van Loosdrecht M.C.M, Comeau Y., Héduit A., Vanrolleghem P.A., Gillot S. 2013. Critical review of activated sludge modeling: state of process knowledge, modeling concepts, and limitations. *Biotechnology and Bioengineering*, 110, 24–46.
- Henze M., Grady C.P.L., Gujer W., Marais G.V.R., Matsuo T. 1987a. Activated Sludge Model No. 1. Technical Report 1. IAWQ, London, UK.
- Henze M., Grady C.P.L., Gujer W., Marais G.V.R., Matsuo T. 1987b. A general model for single-sludge wastewater treatment systems. *Water Research*, 21, 505–515.
- Henze M., Gujer W., Mino T., van Loosdrecht M.C.M. 2000. Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3. IWA Scientific and Technical Report No. 9, IWA Publishing, London, UK.
- Howe, K.J., Hand, D.W., Crittenden, J.C., Trussell, R.R., Tchobanoglous, G. 2017. Principios del Tratamiento del Agua. Cengage Learning Editores S.A. de C.V., México.
- Jenkins D., Richard M., Daigger G. 2004. Manual on the Causes and Control of Activated Sludge Bulking, Foaming, and Other Solids Separation Problems. Third ed. CRC Press, Boca Raton, FL, USA.

- Jenkins D., Wanner J. (eds.) 2014. Activated Sludge – 100 Years and Counting. IWA Publishing, London.
- Kim J.H., Kim H.S., Lee B.H. 2011. Combination of sequential batch reactor (SBR) and dissolved ozone flotation–pressurized ozone oxidation (DOF–PO₂) processes for treatment of pigment processing wastewater. *Environmental Engineering Research*, 16, 97–102.
- Kirim G. 2022. Modelling and Model-Based Optimization of N-removal WRRFs: Reactive Settling, Conventional & Short-Cut N-Removal Processes, PhD thesis, Université Laval, Canadá.
- Kirim G., Torfs E., Vanrolleghem P. 2019. A 1-d reactive Bürger-Diehl settler model for SST denitrification considering clarifier geometry, in: Proceedings: 10th IWA Symposium on Modelling and Integrated Assessment (Watermatex 2019). Copenhagen, Denmark, Sept. 1–4, 2019.
- Kirim G., Torfs E., Vanrolleghem P. 2022. An improved 1d reactive Bürger-Diehl settler model for secondary settling tank denitrification. *Water Environment Research*, 94, article e10825 (17pp).
- Lawrence A.W., McCarty P.L. 1970. Unified basis for biological treatment design and operation. *Journal of Sanitary Engineering ASCE*, 96, 757–778.
- Makinia J., Zaborowska E. 2020. Mathematical Modelling and Computer Simulation of Activated Sludge Systems. 2nd ed., IWA Publishing, London, UK.
- Metcalf L., Eddy H.P. 2014. Wastewater Engineering. Treatment and Resource Recovery, 5th Edition, McGraw–Hill, New York, USA.
- Monod, J. 1949. The growth of bacterial cultures. *Annual Review of Microbiology*, 3, 371–394.
- Panikov N.S. 1995. Microbial Growth Kinetics. Chapman and Hall, New York, USA.
- Pineda R. 2023. Modelos de Sedimentación Reactiva para el Tratamiento de Aguas Servidas [Models of Reactive Sedimentation for Wastewater Treatment], Tesis, Programa de Doctorado en Ciencias Aplicadas con Mención en Ingeniería Matemática, Universidad de Concepción.



Universidad de Concepción

MODELOS DE SEDIMENTACIÓN REACTIVA PARA PROCESOS DE LODOS ACTIVADOS EN EL TRATAMIENTO DE AGUAS SERVIDAS



UNIVERSIDAD
DE LA FRONTERA



Universidad del Desarrollo
Universidad de Excelencia



10 AÑOS
CRHIAM

CENTRO DE RECURSOS HÍDRICOS PARA LA AGRICULTURA Y LA MINERÍA
ANID/FONDAP/15130015

Serie Comunicacional CRHIAM