Simulación de reactores biológicos en el tratamiento de aguas residuales

Por: **M. D. Grau** - J. **Soler**
Departament d'Enginyeria Minera i Recursos Naturals.
Universitat Politècnica de Catalunya.
Av. Bases de Manresa 61-73 08240-Manresa.
Tel. 93 8777228 Fax. 93 8777202

Resumen

El reactor biológico está presente en la mayoría de plantas de tratamiento de aguas residuales urbanas. Debido a que los bioprocesos ambientales consisten en interacciones complejas entre procesos físicos, químicos y biológicos, en su modelización matemática se plantean sistemas de ecuaciones complicadas. En este trabajo se analizan tres casos de estudio (reactor discontinuo, reactor continuo y sistema de fangos activados), simulando su comportamiento frente a variaciones de parámetros cinéticos, condiciones de operación, etc.

Palabras clave:

Agua residual, reactor biológico, fangos activados, modelo matemático.

Abstract

Simulation of biological reactors in the treatment of waste waters.

The biological reactor is present in most of the domestic wastewater treatment plants. Environmental bioprocesses consist of complex interactions between physical, chemical and biological processes, and in their mathematical modeling appear complicated systems of equations. In this work three cases of study (batch reactor, continuous reactor and a system of activated sludge) are analized. Their behaviour is simulated considering different kinetic parameters, operation conditions, etc.

Keywords:

Wastewater, biological reactor, activated sludge, mathematical model.

1. INTRODUCCION

Los objetivos principales en el tratamiento de aguas residuales urbanas (2) consisten en la reducción de su contenido orgánico y, en muchos casos, de los nutrientes como el nitrógeno y el fósforo. La estabilización de la materia orgánica se consigue biológicamente utilizando distintos microorganismos, y el substrato representa la materia orgánica o los nutrientes que sufren una conversión o que pueden constituir un factor limitante en el tratamiento biológico.

Los bioprocesos ambientales consisten en interacciones complejas entre procesos físicos, químicos y biológicos. En términos de ingeniería podemos representarlos mediante balances de materia, energía, cinética de crecimiento biológico, termodinámica, procesos de transporte, reacciones químicas y bioquímicas, transferencia de masa y calor, estequiometría, etc.

Los modelos matemáticos y la simulación nos permiten resolver el conjunto de ecuaciones que se plantean, utilizándolos para distintos propósitos como: predicción, control, diseño, fines educativos, etc.

La modelización matemática no puede reemplazar las técnicas experimentales, pero puede ser un excelente camino para representar y comprender ideas complejas de una forma eficiente.

2. LOS SISTEMAS DE REACCION BIOLOGICOS

2.1 *Modos de operación de los reactores biológicos*

Los procesos de reacción biológicos pueden llevarse a cabo en dos formas de operación principales: en discontinuo o en continuo (1). Los distintos modelos obtenidos pueden ser aplicados a los procesos de tratamiento de aguas residuales.

La operación discontinua consiste en tres etapas: en primer lugar se llena el recipiente con los reactivos, se espera el tiempo necesario para que se dé la reacción, y por último se vacía el contenido del reactor y se limpia el recipiente.

Algunos procesos de tratamiento de aguas residuales, así como lagos

y embalses pueden ser tratados como reactores discontinuos. Teniendo en cuenta que no entra ni sale ningún tipo de flujo del sistema durante el período de reacción, la concentración del substrato disminuirá. Una vez el agua residual haya sido purificada hasta el nivel deseado, se descargará, y el bioreactor estará en condiciones de volver a ser llenado con una nueva carga de agua no tratada, (ver ejemplo 1).

En la operación continua existe una corriente de alimentación que fluye de forma continua hacia el interior del reactor, a la vez que existe una corriente continua de salida. La velocidad de alimentación y de descarga son tales que el volumen del contenido del reactor se mantiene constante. Este es el caso más habitual en el tratamiento de aguas residuales donde los flujos de entrada y salida son controlados, (ver ejemplo 2).

En todos los ejemplos de aplicación que se presentarán se efectuarán las siguientes hipótesis:

- El volumen de reacción se mantiene constante.
- El contenido en el interior del reactor es completamente uniforme: Modelo de mezcla perfecta.

2.2 Cinética de reacción de sistemas biológicos

Para estos sistemas es necesario conocer la velocidad de utilización del substrato, y la de crecimiento y formación de los microorganismos.

Existen muchos factores que pueden influir en el crecimiento de los microorganismos, por otra parte, la mayoría de bioprocesos ambientales involucran microorganismos muy distintos entre ellos, cada uno con características diferentes.

Un modelo completo de un proceso medioambiental requiere muchísimos datos experimentales. Cuando no se dispone de ellos se efectúan diversas simplificaciones:

- La población microbiana se considera como una sola especie con los parámetros cinéticos basados en el comportamiento del conjunto.
- El crecimiento de la población se supone que está limitado por la concentración de un substrato (compuesto conteniendo C, N, P o un nutriente esencial).
- El crecimiento sigue la cinética descrita por la ecuación de Monod.

Cuando los microorganismos se encuentran en un sistema cerrado, con una fuente ilimitada de nutrientes y substrato (3), la forma general de producirse su crecimiento consiste en las siguientes fases, (Fig.1):

- **Fase de aclimatación:** Durante la cual los microorganismos se adaptan al nuevo substrato y a las nuevas condiciones de trabajo.

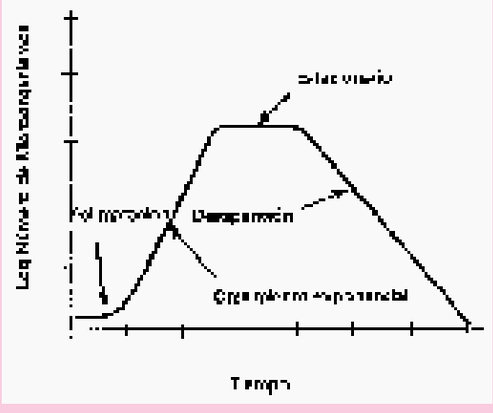


Fig. 1. Crecimiento de los microorganismos.

El contenido en el interior del reactor es completamente uniforme

- **Fase de crecimiento:** Período de rápido crecimiento con un incremento exponencial. Se llega a una población máxima. La velocidad de crecimiento es proporcional al número de microorganismos:

$$dX/dt = \mu \cdot X \qquad (1)$$

Integrando esta ecuación:

$$X = X_0 \cdot e^{\mu \cdot t} \qquad (2)$$

- **Fase estacionaria:** Empieza a disminuir la cantidad de nutrientes hasta que el crecimiento de los organismos se estaciona.
- **Fase endógena:** Por falta de alimento se produce una disminución del número de células. Este proceso puede ser descrito por una reacción de primer orden:

$$r_d = -K_d \cdot X \qquad (3)$$

Cuando los nutrientes o el substrato son limitantes, la constante m de la ecuación (1) varía con la concentración del substrato según la ecuación de Monod:

$$\mu = \frac{\mu_m \cdot S}{K_S \cdot S} \qquad (4)$$

sustituyendo la ecuación (4) en la (1) obtenemos:

$$r_x = \frac{dX}{dt} = \frac{\mu_m \cdot S \cdot X}{K_S + S} \quad (5)$$

Se define la fracción de substrato convertido a masa microbiana mediante el término de rendimiento:

$$Y = dX/dS \quad (6)$$

Combinando las expresiones (4) , (5) y (6) llegamos a obtener:

$$r_S = \frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \cdot \frac{\mu_m \cdot S \cdot X}{K_S + S} \quad (7)$$

Tanto en la ecuación (5) como en la (7) la concentración de substrato, S, como la de biomasa,

X, varían con el tiempo. Además, la ecuación de utilización de substrato (7) y la del crecimiento microbiano (5) no son independientes, es decir, deben ser resueltas simultáneamente, lo cual complica aún más el problema.

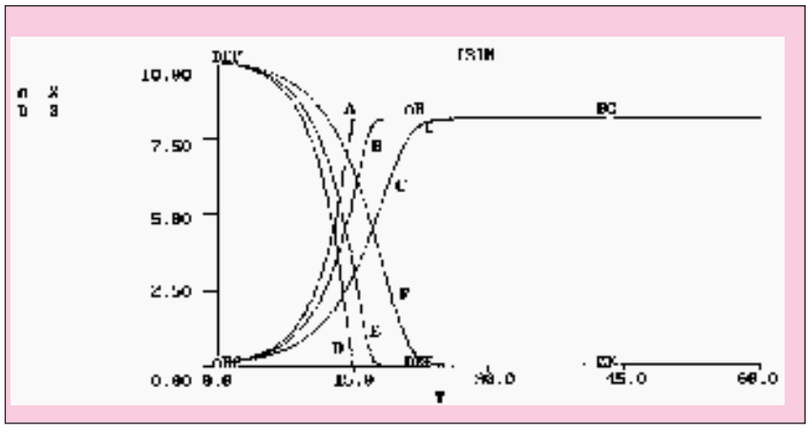
Todas estas cuestiones demuestran la necesidad de utilizar la modelización y la simulación, dada la complejidad matemática de los sistemas biológicos en reacción.

3. LA MODELIZACION MATEMATICA Y LA SIMULACION

La simulación consiste en diseñar un modelo de un sistema real y llevar a cabo experiencias con él, con la finalidad de comprender el comportamiento del sistema o de evaluar estrategias para su funcionamiento. El primer paso en el análisis de un sistema dinámico es la elaboración de un modelo matemático que lo represente de forma simplificada. El estudio de los modelos matemáticos es un importante proceso de aprendizaje (4).

El procedimiento general de la modelización consiste en:

- Definir correctamente el problema.
- Formular la teoría conocida en términos matemáticos.



A: Conc. de biomasa con $K_S = 0,1$
B: Conc. de biomasa con $K_S = 1$
C: Conc. de biomasa con $K_S = 3$
D: Conc. de biomasa con $K_S = 0,1$
E: Conc. de biomasa con $K_S = 1$
F: Conc. de biomasa con $K_S = 3$

Fig. 2. Concentraciones de biomasa y substrato en función del tiempo para distintos K_S.

- Resolver las ecuaciones una vez elaborado el modelo.
- Examinar las predicciones obtenidas mediante el ordenador y si es necesario introducir cambios en el modelo matemático.

Los modelos de procesos medioambientales son frecuentemente complejos y deben solucionarse con métodos numéricos, por lo cual la simulación por ordenador resulta una buena herramienta de cálculo.

La simulación dinámica es una técnica que permite resolver modelos matemáticos de procesos dependientes del tiempo. Los procesos en estado no estacionario son de difícil solución sin la ayuda del ordenador, debido a que pueden involucrar un número elevado de ecuaciones diferenciales.

4. METODOLOGIA

Existen muchos paquetes de software comerciales en el mercado en el campo de la Ingeniería Química. En este trabajo se ha utilizado el simulador ISIM (4), desarrollado por la Universidad de Salford (U.K.). Se trata de un simulador interactivo basado en el lenguaje FORTRAN, que funciona en un PC utilizando MS-DOS. Su estructura corresponde a la de un lenguaje de Simulación de Sistema Continuo (CSSL).

Todos los programas disponen de tres regiones: INITIAL, DYNAMIC y TERMINAL, con una región opcional de CONTROL. La región INITIAL se utiliza para introducir y calcular los valores iniciales de las constantes. La región DYNAMIC contiene las ecuaciones del modelo matemático, y la región TERMINAL es usada para finalizar los cálculos. Los archivos de resultados obtenidos en las ejecuciones se pueden representar gráficamente, y su sistema interactivo permite parar las ejecuciones pudiendo variar los valores de las constantes y continuar la simulación.

Las ventajas del simulador ISIM consisten en la claridad de los modelos, sencillez de nomenclatura, tratamiento de las operaciones independientemente y el poco tiempo de entrenamiento necesario para hacerlo funcionar. Como inconvenientes hay que tener en cuenta que para problemas complejos con más de 50 ecuaciones el cálculo resulta lento.

El simulador puede tener utilización industrial, pero es especialmente apto para la enseñanza y la investigación, en cuanto a la forma de presentar los ejemplos.

5. EJEMPLOS DE APLICACION

Se han escogido tres ejemplos de aplicación correspondientes a la simulación de un reactor discontinuo, un reactor continuo y un sistema de fangos activados. En todos los casos (4) se plantearán el modelo matemático, las condiciones iniciales y los resultados obtenidos.

Ejemplo 1

Este ejemplo permite estudiar el crecimiento de biomasa en un reactor tanque agitado discontinuo. En el reactor se carga, al comenzar la operación, la biomasa con una cierta concentración y un componente esencial para su crecimiento, el substrato.

Modelo matemático: constará de las ecuaciones del balance de materia para la biomasa y para el substrato, combinadas con la ecuación de Monod, es decir, las ecuaciones (5) y (7).

Condiciones iniciales:

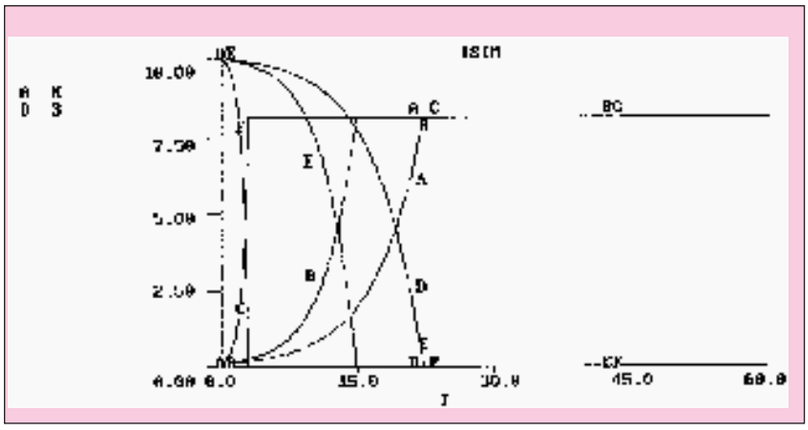
$K_s = 0.1$ kg/m^3
$\mu_m = 0.3$ 1/h $Y = 0.8$
$X = 0.01$ kg/m^3 $S = 10$ kg/m^3

Resultados:

Se ha realizado un estudio variando los parámetros de la ecuación de Monod, y viendo como influyen en el perfil de concentración de la biomasa y del substrato.

En la **Fig. 2** puede observarse la influencia de la constante de saturación (K_s). Cuanto menor es este valor, más rápida es la reacción (ver ecuación 4). En todos los casos podemos comprobar que al inicio de la reacción tenemos presencia de substrato que va consumiéndose poco a poco, mientras que la biomasa en el reactor empieza a aumentar en la misma proporción. Se trata de la fase de aclimatación de los microorganismos a las condiciones de trabajo.

Más tarde, la biomasa empieza a crecer mucho más rápidamente, consumiendo el substrato que se encuentra en el interior del reactor. Cuando este empieza a disminuir, el crecimiento de los microorganismos se reduce por falta de nutrientes, hasta que la reacción se para por haberse consumido todo el substrato.



A: Conc. de biomasa con $\mu_m = 0,2$
B: Conc. de biomasa con $\mu_m = 0,3$
C: Conc. de biomasa con $\mu_m = 1,5$
D: Conc. de biomasa con $\mu_m = 0,2$
E: Conc. de biomasa con $\mu_m = 0,3$
F: Conc. de biomasa con $\mu_m = 1,5$

Fig. 3. Comparaciones de biomasa y substrato en función del tiempo, para distintos μ_m.

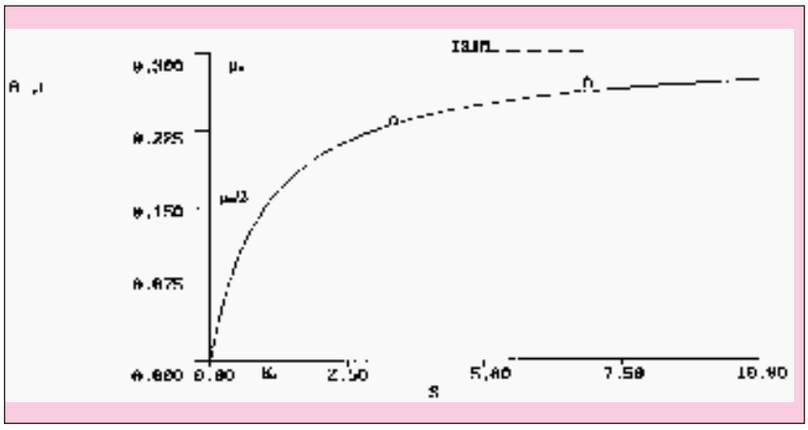


Fig. 4. Constante de crecimiento en función de la concentración de substrato.

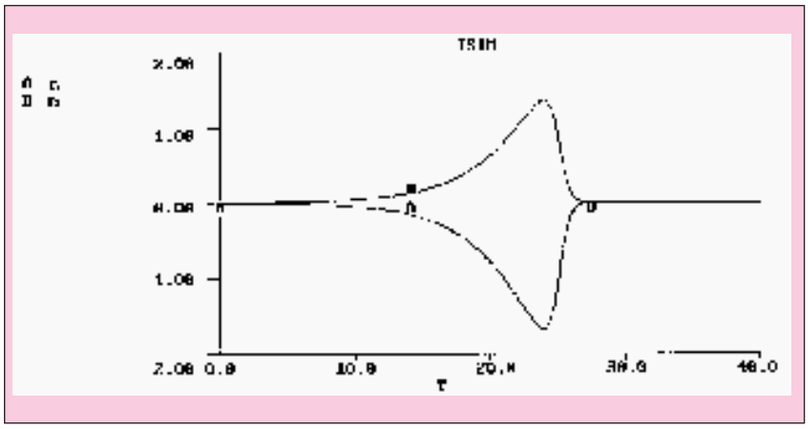
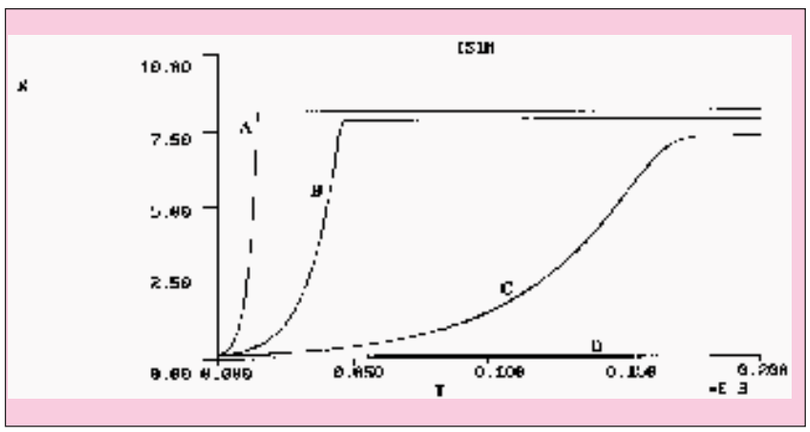


Fig. 5. Velocidades de reacción en función del tiempo.

Una característica del proceso discontinuo es que la conversión de substrato en biomasa es total según el valor del rendimiento. En este ca-



A: Concentración de biomasa con D = 0
B: Concentración de biomasa con D = 0,2
C: Concentración de biomasa con D = 0,27
D: Concentración de biomasa con D = 0,3

Fig. 6. Concentración de biomasa en función del tiempo.

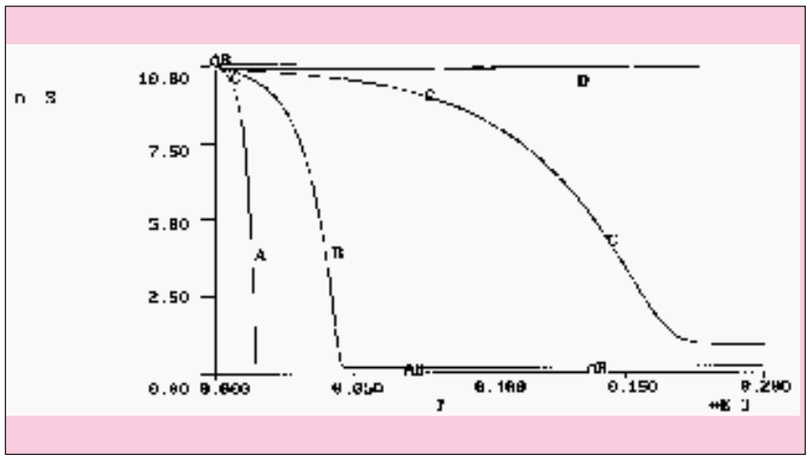
so S_0 = 10 kg/m^3 y el rendimiento Y = 0.8, por tanto la concentración máxima de biomasa a que se llegará será X = 8 kg/m^3.

En la **Fig. 3** podemos observar la influencia de la constante de crecimiento específico máximo, mm. En este caso el comportamiento es inverso, como era de esperar según la ecuación (4). Al aumentar el valor de μm la reacción se vuelve más rápida.

En la **Fig. 4** se encuentra representado el valor de crecimiento específico m frente a la concentración de substrato. Esta es la representación característica de la cinética de Monod. Mediante esta representación se puede calcular el valor de la constante K_s, que corresponde a la concentración del substrato cuando $\mu = \mu_m/2$.

En la **Fig. 5** se representan las velocidades de reacción del substrato y la biomasa frente al tiempo. Como era de esperar las curvas son simétricas (ver ec. (5) y (7)).

Estas curvas presentan un máximo y un mínimo que corresponde a la zona de crecimiento exponencial de la **Fig. 2**. Teniendo en cuenta que la velocidad de reacción es la derivada de la concentración respecto al tiempo, el máximo de la **Fig. 5** se corresponde con el punto de inflexión de la **Fig. 2**.



A: Concentración de substrato con D = 0
B: Concentración de substrato con D = 0,2
C: Concentración de substrato con D = 0,27
D: Concentración de substrato con D = 0,3

Fig. 6. Concentración de substrato en función del tiempo.

Ejemplo 2

Se trata de un reactor continuo en el que el caudal de entrada es igual al de salida . Este caso es más parecido a la realidad, puesto que la mayoría de depuradoras al trabajar con caudales considerables de agua a tratar, funcionan de forma continua.

Modelo matemático:

Balance de materia referido a la biomasa:

$$\frac{dX}{dt} = -D \cdot X + \frac{\mu_m \cdot S \cdot X}{K_S + S} \qquad (8)$$

Balance de materia referido al substrato:

$$\frac{dS}{dt} = D \cdot (S_f - S) - \frac{\mu_m \cdot S \cdot X}{Y \cdot (K_S + S)} \qquad (9)$$

Aparece una parámetro nuevo, D, que es el grado de dilución y se define como el cociente entre el caudal volumétrico y el volumen del reactor:

$$D = Q/V \qquad (10)$$

Condiciones iniciales:

K_s = 0.1 kg/m^3 μ_m = 0.3 1/h
Y = 0.8 S_f = 10 kg/m^3
S_0 = 10 kg/m^3 X_0 = 1 kg/m^3
D = 0 1/h

Resultados:

En la **Fig.6** y **7** se estudia el efecto de la variación del grado de dilución. El valor D = 0 corresponde al funcionamiento en discontinuo. A medida que aumenta el caudal, el tiempo necesario para la estabilización de la biomasa y, por tanto, para el consumo total del substrato aumenta, llegando incluso para un valor de D = 0.3 a una situación en la que la biomasa no tiene tiempo de generarse, puesto que el caudal es demasiado grande.

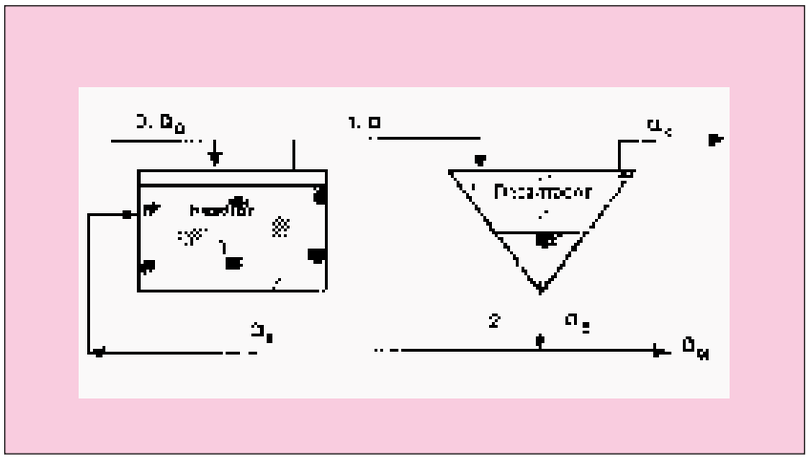
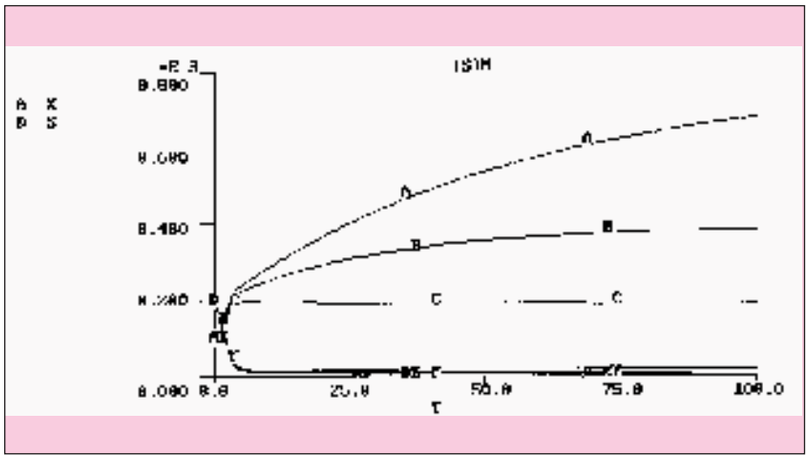
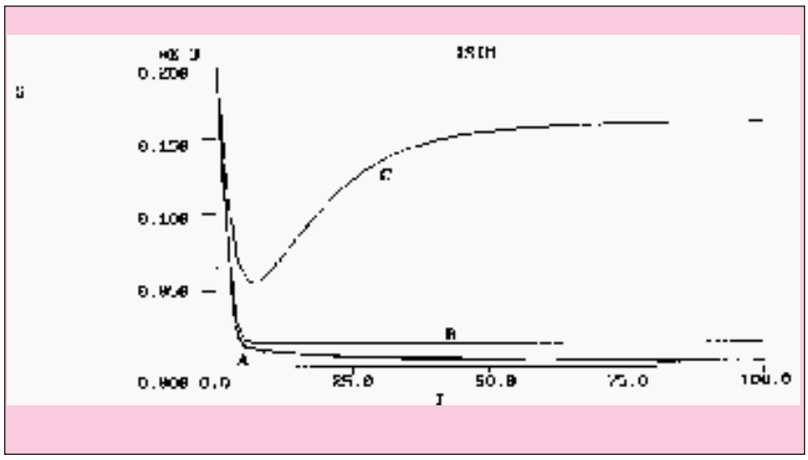


Fig. 8. Sistema de fangos activados.



A: Concentración de biomasa con $Q_X = 0.6$ C: Concentración de biomasa con $Q_X = 0.4$
B: Concentración de biomasa con $Q_X = 0.3$

Fig. 9. Concentraciones de biomasa y DBO en función del tiempo.



A: $K_d = 0{,}0021$ B: $K_d = 0{,}01$ C: $K_d = 0{,}3$

Fig. 10. Variación de DBO en el tanque en función del tiempo.

Ejemplo 3

En este caso se estudia un proceso de fangos activados. Los microorganismos se encuentran suspendidos entre la materia orgánica en el interior del reactor biológico. Después de un tiempo predeterminado, el efluente pasa a un tanque de sedimentación donde los sólidos floculados son separados del líquido tratado. Parte del fango se recircula de nuevo al tanque de aireación para poder mantener la concentración de microorganismos en éste.

Modelo matemático:

Caudal que sale del reactor:

$$Q = Q_0 + Q_r \qquad (11)$$

Relación de recirculación:

$$R = Q_r / Q_o \qquad (12)$$

Tiempo de residencia en el reactor:

$$\theta = V / Q_o \qquad (13)$$

Factor de recirculación:

$$\beta = X_r / X \qquad (14)$$

Balance de materia referido a la biomasa:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{X}{\theta} \cdot (\beta \cdot R - 1 - R) + \frac{\mu_m \cdot X \cdot S}{K_S + S} + Kd \cdot X \qquad (15)$$

Balance de materia referido al substrato:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{S_o - S}{\theta} - \frac{\mu_m \cdot X \cdot S}{Y \cdot (K_S + S)} \qquad (16)$$

Condiciones iniciales:

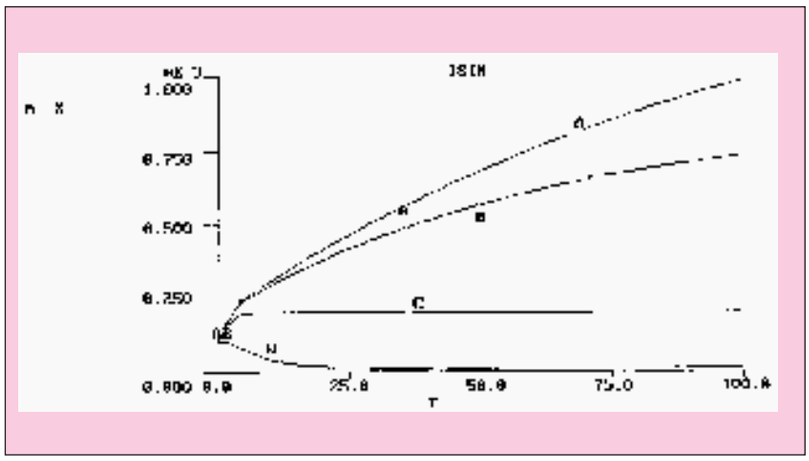
V = 17E6 l	$\beta = 4$
Qr = 0.65E6 l/h	Y = 0.6
$X_o = 100$ mg/l	$S_o = 200$ mg/l
$Q_o = 2.08E6$ l/h	$K_s = 100$ mg/l
$K_d = 0.0021$ 1/h	$\mu_m = 0.5$ 1/h

Resultados:

En la **Fig. 9** puede verse el perfil de concentraciones que da el programa por defecto (curvas A y D).

Se observa como la materia orgánica en el tanque disminuye a lo largo del tiempo, llegándose a consumir totalmente. Respecto a la biomasa, durante el tiempo representado, experimenta un crecimiento continuo no llegando a la estabilización. Esto es debido a que, en este caso, la corriente de recirculación representa un aporte continuo de biomasa al tanque, y hace falta un tiempo de estabilización mucho mayor en estas condiciones. Disminuyendo el caudal de recirculación se llega a la estabilización mucho antes.

También se ha estudiado la influencia de la constante de desaparición (**Fig.10** y **11**). Se comprueba que al ser K_d mayor la biomasa se estabiliza más rápidamente.



A: $K_d = 0{,}0021$ B: $K_d = 0{,}01$ C: $K_d = 0{,}06$ D: $K_d = 0{,}3$

Fig. 11. Concentración de biomasa en el tanque en función del tiempo.

6.CONCLUSIONES

Utilizando el simulador ISIM se han podido realizar estudios respecto al crecimiento de los microorganismos y la ecuación cinética a que se ajustan, trabajando en el modo de operación discontinuo. Este estudio previo ha permitido pasar a la operación en continuo y finalmente a un sistema de fangos activados.

En todos los casos se trata de estudios de simulación, que deberían ser contrastados con datos de plantas reales. Este trabajo es sólo un primer paso en el estudio del tratamiento biológico de aguas residuales, y su objetivo es ir más allá de los cálculos analíticos basados únicamente en los conocimientos teóricos.

7. NOMENCLATURA

D: grado de dilución T^{-1}
μ: coef. de crecimiento específico T^{-1}
K_d: constante de desaparición T^{-1}
Q: caudal volumétrico $L^3 T^{-1}$
K_s: constante de saturación: ML^{-3}
R: relación de recirculación —-
r: velocidad de reacción $ML^{-3}T^{-1}$
t: tiempo T
S: concentración de substrato ML^{-3}
Y: coeficiente de rendimiento —-
X: concentración de biomasa ML^{-3}
b: factor de concentración de fangos —-
V: volumen del reactor L^3
θ: tiempo de residencia en el reactor T

Los subíndices siguientes significan:
d : desaparición
m : máximo
s : substrato
f : alimentación
0 : inicial
x : biomasa
e : salida del sistema
r : recirculación
w : purga de fangos

8. BIBLIOGRAFIA

(1) GRADDY, J. Wastewater biological treatment, Ed. Weinheim, 1994
(2) METCALF and EDDY.. Wastewater Engineering, Ed. Mc. Graw-Hill, 1991
(3) RAY, B. T. Environmental Engineering, Ed. ITP, 1995
(4) SNAPE, J.B.-I. J. DUNN-J. INGHAM-J.E. PRENOSIL. Dynamics of Environmental Bioprocesses, Ed.VCH, 1995

TECNOLOGIA DEL AGUA

estará presente, con stand, en las siguientes ferias de 1998: SMAGUA (Zaragoza), TEM-TECMA (Madrid), AQUATECH (Amsterdam), EXPOANALITICA (Madrid)