

ESTUDIO DE PROCESOS BIOLÓGICOS DE TRATAMIENTO DE RESIDUOS BASADO EN LA MODELIZACIÓN

Albert Magrí
Xavier Flotats
GIRO Centro Tecnológico

Francina Solé-Mauri
Josep Illa
Universidad de Lleida

Summary

Mathematical models have become a basic tool for increasing our comprehension of the biological processes related to the treatment of organic waste. By means of modelling it is possible to create a common language of communication. Modelling assists in the design of experiments and the evaluation of results, as well as in testing hypotheses. It also helps to reveal relationships between different variables, to predict the evolution of systems and, in summary, in the design of optimised management and treatment strategies. In this paper, this working area is presented, and results in two different fields are shown: composting of waste mixtures and biological nitrogen removal from pig slurry.

Introducción

Los modelos matemáticos se han convertido en una herramienta básica para aumentar la comprensión de los procesos biológicos relacionados con el tratamiento de residuos orgánicos. En este sentido, la modelación permite crear un lenguaje de comunicación común, orientar el diseño experimental, evaluar resultados, contrastar hipótesis,

revelar relaciones entre variables, prever la evolución de sistemas y, en definitiva, diseñar estrategias de gestión y tratamiento optimizados. En el presente artículo se presenta esta línea de trabajo y resultados concretos en dos ámbitos de aplicación: compostaje de mezclas de residuos y eliminación biológica de nitrógeno en purines de cerdo.

INTRODUCCIÓN

Los modelos sirven en investigación y desarrollo para integrar el conocimiento actual de los procesos estudiados y estructurar la complejidad, para probar hipótesis, para revelar relaciones entre variables, para guiar el diseño de experimentos y ahorrar en costes experimentales, para evaluar resultados experimentales, para predecir situaciones, para aprender y comunicar utilizando un lenguaje común,

para entrenar operadores y usuarios de procesos y, en definitiva, para obtener diseños y estrategias de operación optimizados.

El objetivo de universalidad y de describir procesos mediante un conjunto de ecuaciones diferenciales, en las cuales cada subconjunto o cada ecuación individual describen un subproceso determinado, explica la evolución de la generación de modelos dinámicos y estructurados, como es el caso de los modelos ADM1 (Batstone et ál.,

2002) y los de la familia ASM (Henze et ál., 2000). En general, el proceso de creación de modelos es una disciplina con entidad propia, que va desde la creación de estructuras matemáticas que permitan la integración del conocimiento de los fenómenos a considerar hasta el diseño y ejecución de experimentos que permitan la identificabilidad de los parámetros, posterior comprobación y/o validación, y reinicio del proceso para mejoras en base a los resultados obtenidos.

Un buen modelo requiere de parámetros significativos para ser útil. A pesar de que la metodología general de identificación de parámetros constituye una herramienta de trabajo importante, muy a menudo se omite, ya sea por la dificultad que conlleva un estudio detallado de identificabilidad o bien porque puede llegar a ser materialmente imposible. Sin este estudio también es extremadamente difícil la definición del diseño experimental adecuado para obtener un conjunto unívoco de parámetros en el proceso de calibración (Flotats et ál., 2003).

Un modelo complejo no es necesariamente mejor que uno simple si no se disponen de suficientes datos. Un modelo con un gran número de parámetros incógnita y datos experimentales limitados da lugar a sistemas no identificables, situación para la que infinitas familias de parámetros pueden aportar buenos ajustes estadísticos, y erróneas interpretaciones.

En el presente artículo se analizan dos trabajos ilustrativos de la utilidad de las actividades de modelización. En el primero se desarrolla un modelo del proceso de compostaje con el objetivo de obtener una estructura que permita la síntesis del conocimiento del proceso, entender los procesos observados y, en definitiva, estructurar la complejidad. En el segundo se muestran dos conceptos de modelización aplicados a la combinación de los procesos de nitrificación-desnitrificación: la predicción numérica y la necesidad de disponer de técnicas experimentales adecuadas, la respirometría en este caso, sin las cuales no es posible calibrar, y utilizar, un modelo. Todo lo anterior configura las herramientas de modelización como de suma importancia en investigación. Su adopción, desarrollo y aplicación forma parte de las líneas estratégicas de trabajo de nuestro grupo de investigación, para fomentar capacidades de análisis y de síntesis, de valoración crítica de resultados experimentales y de comunicación utilizando un lenguaje universal.

FIGURA 1

estructura básica de la unidad de tres fases, con los flujos de energía y materia

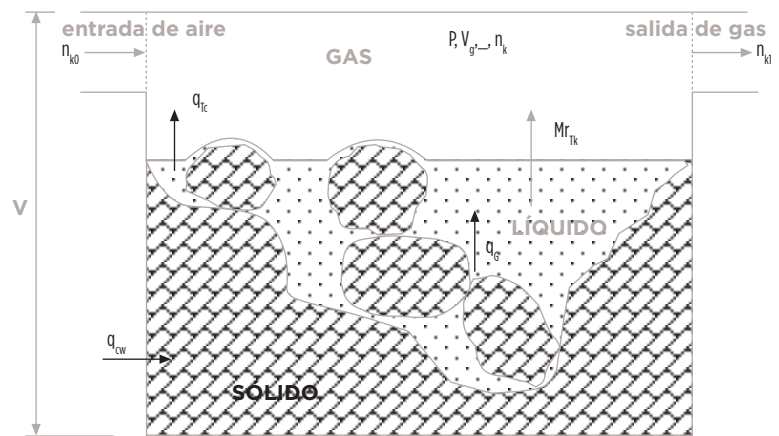
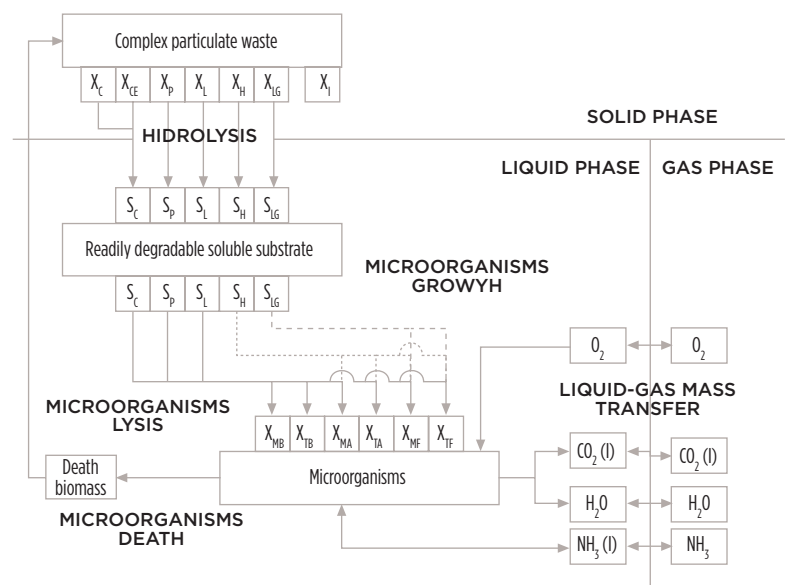


FIGURA 2 procesos bioquímicos considerados



CASO 1. MODELIZACIÓN DEL PROCESO DE COMPOSTAJE

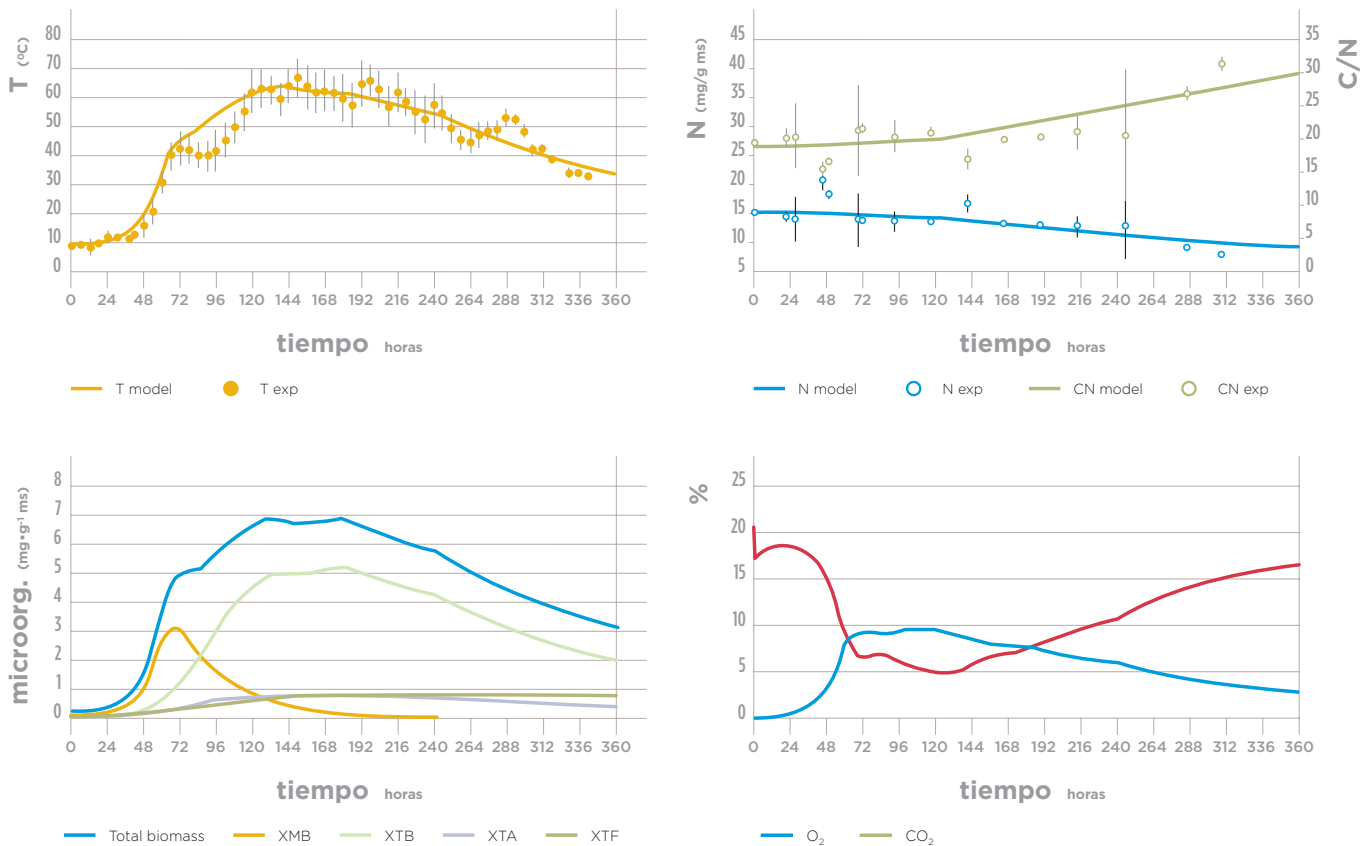
Ámbito de estudio

La modelización del proceso de compostaje está menos desarrollada que la de otros procesos biológicos, aerobios o anaerobios, en fase líquida, debido a su mayor complejidad por la coexistencia de tres fases, la existencia de gradientes de concentración y temperatura, o la variación de la temperatura en el tiempo, principalmente.

La modelización de los aspectos bioquímicos relacionados con el compostaje se ha realizado desde dos enfoques distintos. En primer lugar, los modelos empíricos consideran la degradación de la materia orgánica

ca mediante una cinética de primer orden respecto al sustrato, pudiendo incorporar también factores que afectan al proceso, tales como temperatura, oxígeno, humedad, FAS-free air space, etc. (Haug, 1993). A pesar de la simplicidad de estos modelos, su capacidad de predicción es limitada (Keener et ál., 1993; Marugg et ál., 1993). Por otra parte, los modelos mecanísticos se basan en los principios de la física, la química y la microbiología. Hasta el presente, la mayoría de estos modelos han considerado un único sustrato y una única población de microorganismos. En este sentido, el modelo más completo es el de Kaiser (1996), quien clasificó la biomasa microbiana en cuatro poblaciones distintas, cada una con capacidad selectiva

FIGURA 3 resultados experimentales y simulados mediante el modelo



Los modelos matemáticos son, en definitiva, una herramienta básica para obtener diseños y estrategias de operación optimizados.

para degradar diferentes categorías de sustratos, aunque sin considerar procesos de hidrólisis de la materia orgánica. Referente a la modelización de los fenómenos físicos del proceso, deben considerarse dos aspectos fundamentales: el balance de energía y la distribución espacial, considerada mayoritariamente homogénea.

Un modelo integrado para el proceso de compostaje

Se ha desarrollado un modelo para el proceso de compostaje considerando procesos bioquímicos así como aspectos físicos (Solé-Mauri et ál., 2005; Solé-Mauri, 2006). Se considera un volumen de control ocupado parcialmente por una fase sólido-líquida, constituida por materiales sólidos de diferentes masas y por el agua (figura 1). Los materiales sólidos están distribuidos uniformemente, con un tamaño suficientemente pequeño para despreciar cualquier gradiente en su interior. El agua se encuen-

tra formando película sobre la superficie de las partículas sólidas o bien ocupando el espacio existente entre ellas. El resto del volumen está ocupado por la fase gaseosa, que es una mezcla de gases (O₂, CO₂, NH₃, H₂O y N₂). A través de las paredes del sistema se considera un flujo de calor (q_{cw}) originado por la diferencia de temperatura entre el ambiente y la fase sólido-líquida. En esta fase se considera la generación de calor por reacción biológica (q_c).

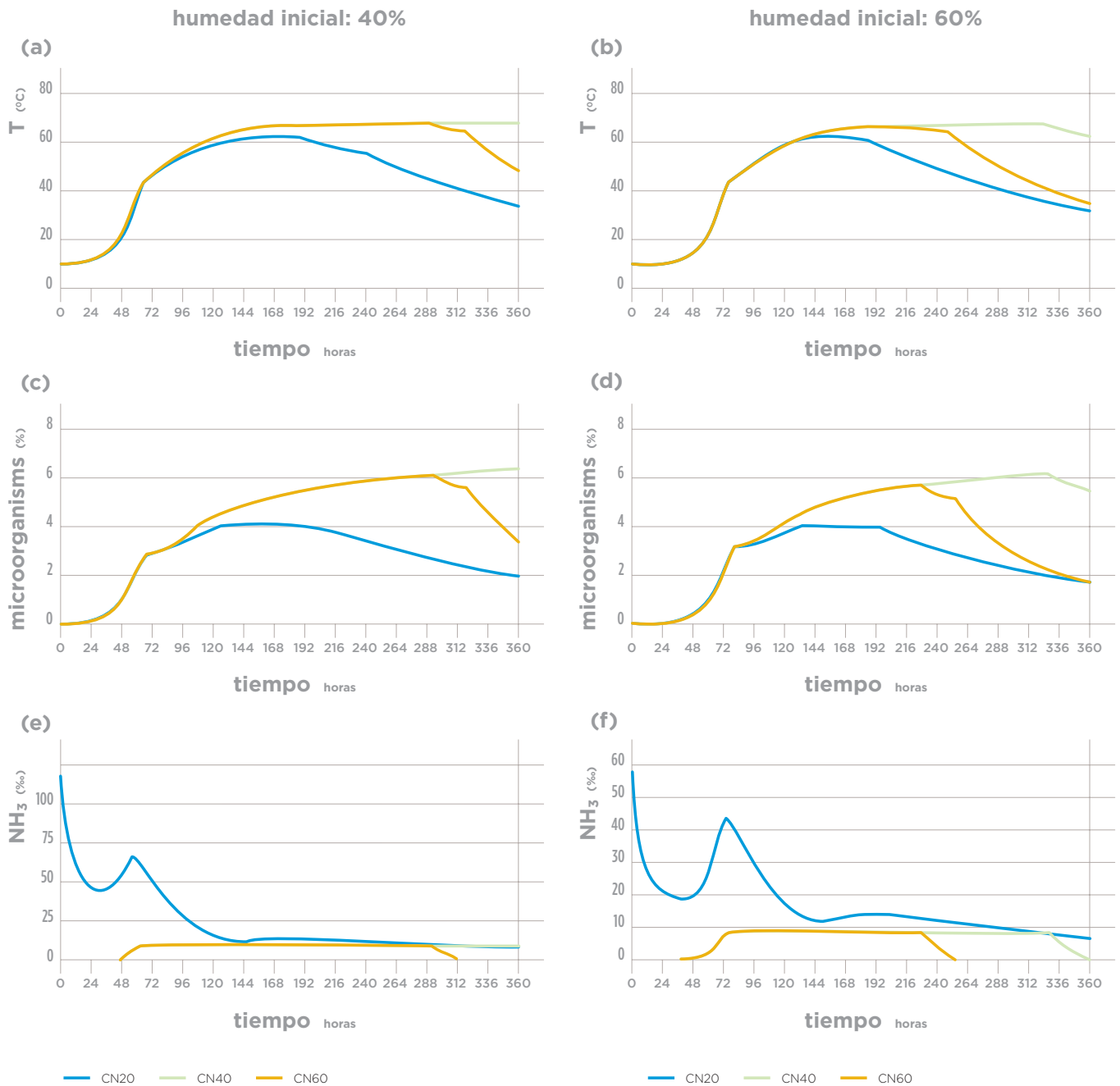
En cuanto a los procesos bioquímicos (figura 2), se ha considerado la hidrólisis del sustrato particulado, proceso que supone una transferencia de masa de la fase sólida a la líquida. Asimismo, se consideran seis poblaciones de microorganismos con diferente afinidad para cada una de las fracciones de la materia orgánica solubilizada. El crecimiento de los microorganismos conlleva la degradación de las fracciones monoméricas, un consumo de oxígeno, y la producción de CO₂, H₂O y NH₃. Entre la

fase líquida y la gaseosa se considera la transferencia de O₂, CO₂ y NH₃ y la evaporación del agua.

El espacio 1D se ha discretizado en volúmenes de control uniformes y no se permite el flujo de componentes de las fases sólida y líquida a través de su frontera. Entre dos volúmenes consecutivos se considera el flujo de gases debido al gradiente de presión.

El modelo ha sido contrastado con datos experimentales obtenidos en un reactor de compostaje de mezcla completa, demostrando su capacidad para predecir la evolución del sistema (figura 3). En las simulaciones de la figura 4 se muestra la predicción de la evolución de la temperatura, el amoníaco y los microorganismos bajo distintas condiciones de humedad y relación C/N. La figura 5 muestra la distribución espacial de diferentes variables según el modelo extendido al espacio 1D.

FIGURA 4 evolución prevista bajo diferentes condiciones de humedad y relación C/N



CASO 2. MODELIZACIÓN DEL PROCESO DE ELIMINACIÓN BIOLÓGICA DE NITRÓGENO EN PURINES

Ámbito de estudio

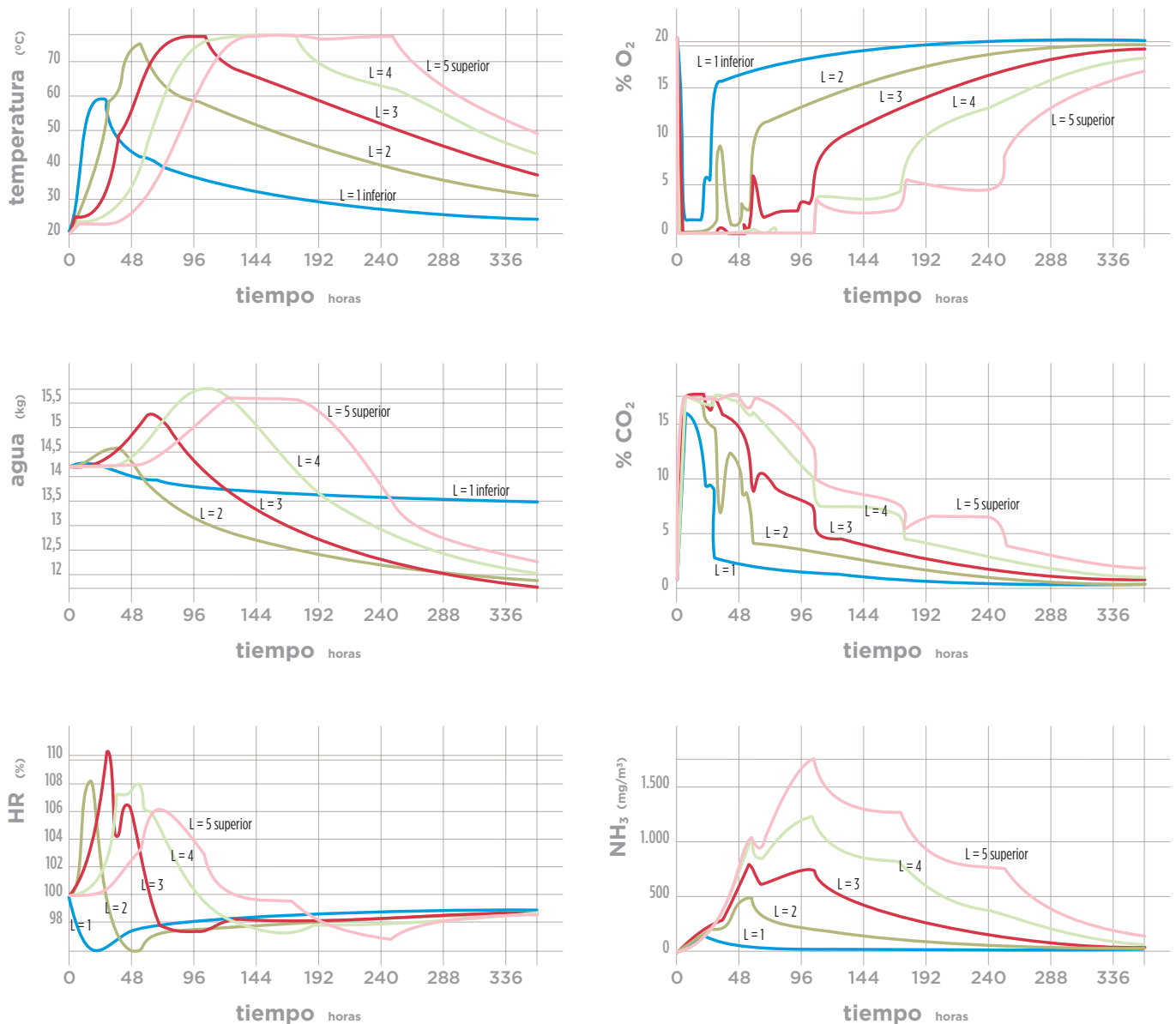
La modelización del tratamiento de la fracción líquida de purines (FLP) mediante nitrificación-desnitrificación (NDN) requiere de un enfoque similar al de un agua residual con alta carga amoniacal, baja relación DQO/NH₄⁺ y con un contenido elevado en fósforo y metales.

Tomando como referencia los modelos de la

familia ASM (Henze et ál., 2000) y con la consigna de desarrollar un modelo suficientemente flexible como para adaptarse a un amplio rango de carga nitrogenada, se ha desarrollado un nuevo modelo que incluye conceptos como: división de la nitrificación en dos etapas, fenómenos inhibitorios por compuestos de nitrógeno, modelización del pH (basado en Campos y Flotats, 2003), precipitación de sales, stripping de gases, etc. Una versión reducida de este modelo aplicada al proceso SHARON (Single reactor system for High Ammonium Removal Over Nitrite) ha sido ya presentada a la comunidad científica por Magrí et ál. (2005).

La respirometría es una técnica experimental complementaria de la modelización matemática de un proceso de NDN. Su fundamento radica en el seguimiento de la velocidad de consumo de oxígeno en condiciones aerobias (OUR) o de las formas oxidadas de nitrógeno en condiciones anóxicas (NUR). Se trata de una herramienta que permite la caracterización de aguas residuales, la evaluación de la actividad biológica de los fangos activados y la calibración de modelos matemáticos. Los principios de esta técnica se encuentran bien descritos en Spanjers et ál. (1998).

FIGURA 5 evolución del sistema en diferentes capas de la distribución vertical



La modelización tiene también una utilidad formativa, como herramienta que permite abordar el estudio de procesos y problemas complejos de forma sistemática.

A continuación se plantean brevemente dos problemas potenciales en un tratamiento convencional de eliminación de nitrógeno de la FLP, y como la modelización permite abordar su estudio.

Inhibición de la nitrificación por amoníaco

La composición de los purines en una explotación ganadera puede fluctuar de manera notable dependiendo de factores como la edad de los animales estabulados,

su estado fisiológico, el sistema de manejo, la época del año, etc. (Campos et ál., 2004). Si esta realidad no se considera en el momento de diseñar el sistema de tratamiento pueden producirse capítulos de acumulación de nitrógeno dentro del reactor biológico.

Conocida la concentración de amonio (NH_4^+) en el interior del reactor y en función de cual sea la temperatura y el pH del medio, puede establecerse el contenido en

amoníaco (NH_3) del líquido en base al equilibrio químico existente entre ambas especies. El NH_3 es el verdadero sustrato de los organismos nitrificantes pero a concentraciones elevadas limita su crecimiento. Así pues, una acumulación de amoníaco en el medio supondrá una ralentización del proceso de nitrificación. La cinética de Haldane permite modelizar este comportamiento para la nitrificación. En el caso de la nitrificación, se considera mediante una inhibición no competitiva reversible.

FIGURA 6 simulación de un proceso NDN de FLP en un SBR expuesto a sobrecarga

Ciclo de 24 h con 3 subciclos LLEN/ANOX/AER idénticos y con $t_{ANOX}/t_{REAC} = 0,45$

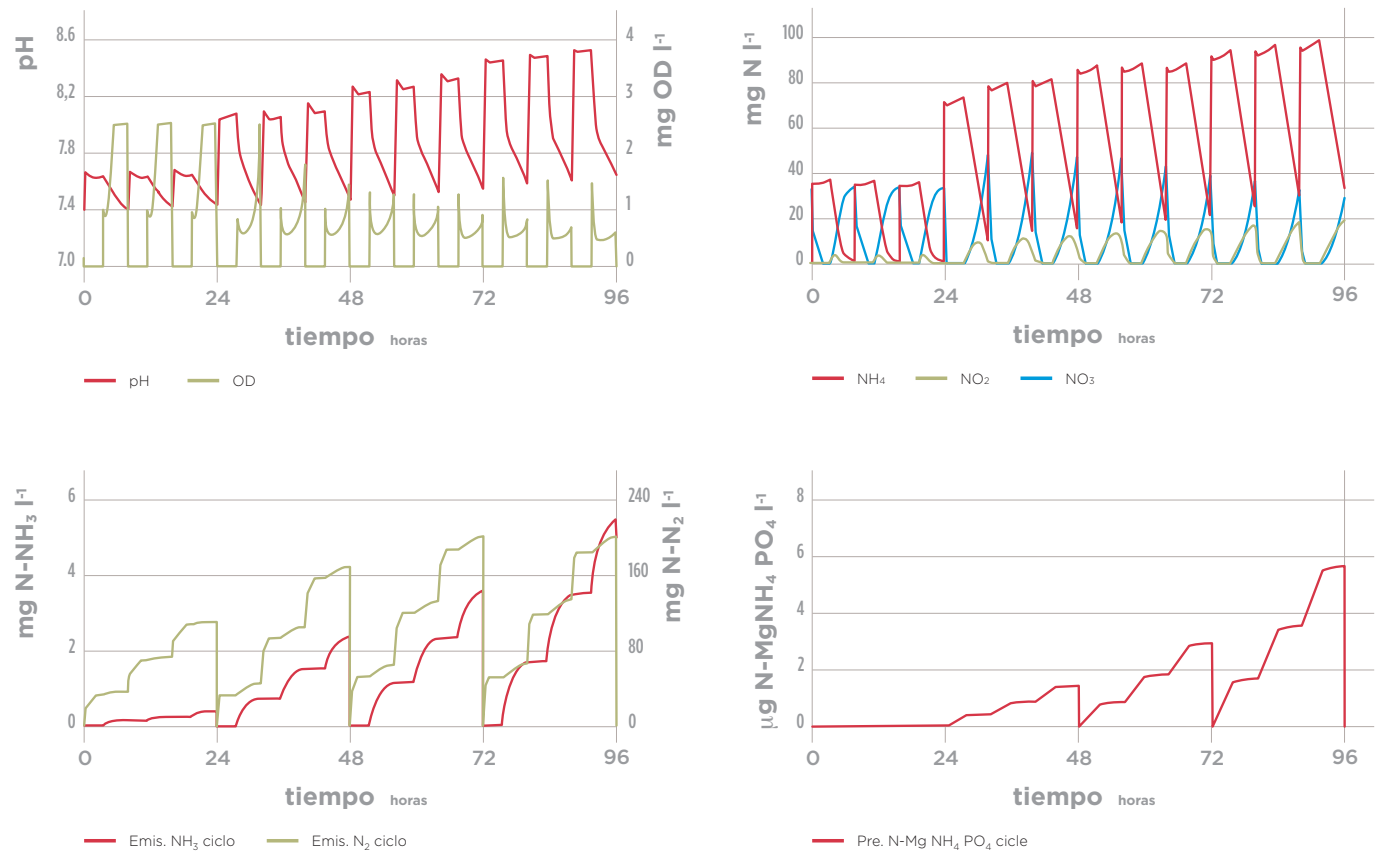
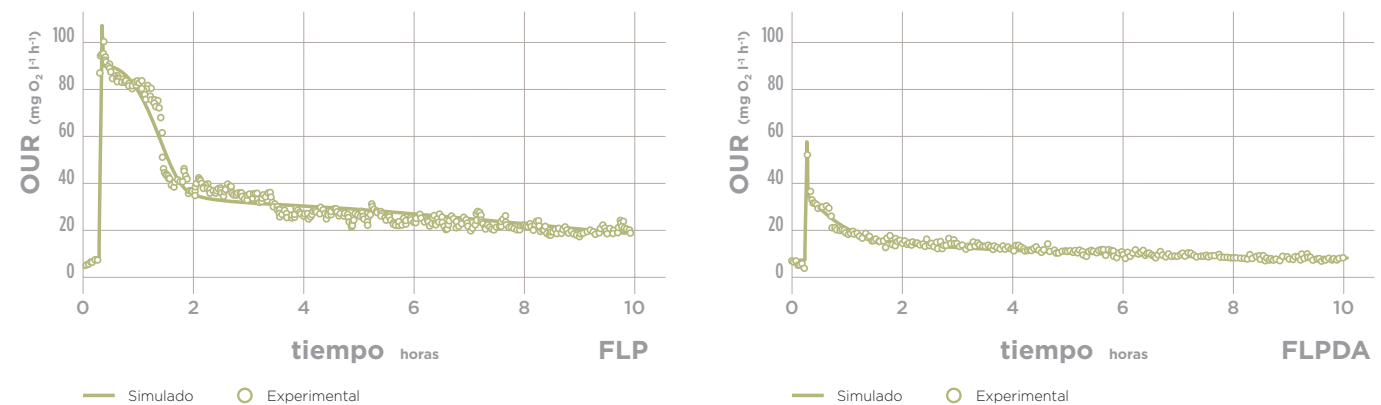


FIGURA 7 respirometrías para la determinación de las fracciones orgánicas biodegradables en FLP y FLPDA



Asimismo, la circulación de aire en el reactor para suministrar oxígeno favorecerá la transferencia del NH₃ desde la fase líquida a la gaseosa y, por lo tanto, su arrastre indeseado fuera del sistema. A nivel ilustrativo, la **figura 6** muestra la evolución de las diferentes especies de nitrógeno en un proceso de NDN obtenida tras simular el tratamiento de la FLP en un reactor discontinuo secuencial (SBR) expuesto a sobrecarga.

Disponibilidad de materia orgánica durante la desnitrificación

En una estrategia integrada de tratamiento basada en un proceso de NDN, uno de los limitantes a considerar es la disponibilidad de suficiente materia orgánica biodegradable en condiciones anóxicas para desnitrificar todo el nitrógeno amoniacal, previamente oxidado en condiciones aerobias, sin necesidad de una fuente externa de carbono. Así pues,

tratamientos previos como separación de fases, electrocoagulación, digestión anaerobia, aireación, etc., pueden ir en contra de este propósito. En este sentido, la **figura 7** evidencia la escasa disponibilidad de carbono orgánico biodegradable en la fracción líquida de unos purines previamente digeridos (FLPDA), en comparación con la FLP (respirometrías realizadas a partir de 2 l fangos endógenos diluidos; 150 ml sustrato; 20 °C; 10



Reactores a escala laboratorio para el estudio del compostaje y la NDN

mg I⁻¹ de ATU –inhibidor de la nitrificación–).

El uso combinado de métodos de análisis químico y ensayos respirométricos permite cuantificar las diferentes fracciones orgánicas del sustrato. Para conseguir una desnitrificación satisfactoria interesa disponer de suficiente materia orgánica soluble fácilmente biodegradable (S_s). También es posible desnitrificar a partir de la materia orgánica particulada lentamente biodegradable (X_s), pero en este caso la velocidad del proceso estará limitada por la hidrólisis (Boursier et ál., 2005). Según muestra este ejemplo, la respirometría es una técnica básica para la caracterización del sustrato y la calibración del modelo. Una vez se dispone del modelo calibrado, es posible afrontar con garantías la optimización de la estrategia de tratamiento. ®

CONCLUSIONES

Del análisis de los ejemplos ilustrativos expuestos, correspondientes a trabajos en

progreso, se concluye que la modelización es una herramienta de utilidad para sintetizar conocimiento, para predecir, para entender y para comunicar. Tiene también una utilidad

formativa para todo investigador e ingeniero, como herramienta que permite abordar procesos y problemas complejos de forma sistemática.

BIBLIOGRAFÍA

- Batstone, D.J.; Keller, J.; Angelidaki, I.; Kalyuzhnyi, S.V.; Pavlostathis, S.G.; Rozzi, A.; Sanders, W.T.M.; Siegrist, H. y Vavilin, V.A. "Anaerobic Digestion Model N° 1 (ADM1)" Scientific and Technical Report 13. IWA Publishing, London (UK) (2002).
- Boursier, H.; Béline, F. y Paul, E. 'Piggery wastewater characterisation for biological nitrogen removal process design' *Bioresource Technol.* (2005) 96:351-358.
- Campos, E. y Flotats, X. 'Dynamic simulation of pH in anaerobic processes' *Appl. Biochem. Biotech.* (2003) 109:63-76.
- Campos, E.; Illa, J.; Magrí, A.; Palatsi, J.; Solé, F. y Flotats, X. *Guia dels Tractaments de les Dejeccions Ramaderes*. ARC, DARP de la Generalitat de Catalunya (2004)
 - <http://www.arc-cat.net/ca/altres/purins/guia.html>
- Flotats, X.; Ahring, B.K. y Angelidaki, I. 'Parameter identification of thermophilic anaerobic degradation of valerate' *Appl. Biochem. Biotech.* (2003) 109:47-62.
- Haug, R.T. "The Practical Handbook of Compost Engineering" Lewis Publishers, Boca Raton (USA) (1993).
- Henze, M.; Gujer, W.; Mino, T. y van Loosdrecht, M. 'Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3' *Scientific and Technical Report* (2000) 9. IWA Publishing. London (UK).
- Kaiser, J. 'Modelling composting as a microbial ecosystem: a simulation approach' *Ecol. Model.* (1996) 91: 25-37.
- Keener, H.M.; Marugg, C.; Hansen, R.C. y Hoitink, H.A.J. 'Optimizing the efficiency of the composting process' en: Hoitink, H.A.J. y Keener H.M. (ed.) "Science and Engineering of Composting: Design, Environmental, Microbiological and Utilization Aspects" Renaissance Publication. Worthington (USA) (1993).
- Magrí, A.; Corominas, Ll.; López, H.; Campos, E.; Balaguer, M.; Colprim, J. y Flotats, X. "A model for the simulation of the SHARON process: pH as a key factor" en: Proc. Specialized Conference Nutrient Management in Wastewater Treatment Processes and Recycle Streams. IWA. Krakow (Poland) 19-21 sept. 735-744 (2005).
- Marugg, C.; Grebus, M.; Hansen, R.C.; Keener, H.M. y Hoitink, H.A.J. 'A kinetic model of the yard waste composting process' *Compost Sci. Util.* (1993) 1:38-51.
- Solé-Mauri, F. "Mathematical Modelling of the Composting Process" Tesis doctoral. Universidad de Lleida (2006).
- Solé-Mauri, F.; Illa, J.; Magrí, A.; Prenafeta-Boldú, F.X. y Flotats, X. 'An integrated biochemical and physical model for the composting process' *Bioresource Technol.* (2005) (accepted).
- Spanjers, H.; Vanrolleghem, P.A.; Olsson, G. y Dold, P.L. "Respirometry in Control of the Activated Sludge Process: Principles" Scientific and Technical Report 7. IAWQ, London (UK) (1998).