UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA
FACULTAD DE INGENIERÍA

Tesis para Maestría en Ingeniería Química

REMOCIÓN NO CONVENCIONAL DE MATERIA ORGÁNICA EN REACTOR BATCH SECUENCIAL
(Análisis, Modelado, Data Mining)

ADRIÁN FERRARI ARGACHÁ

Ms. Sc. Ing. Quím. ALBERTO HERNANDEZ ROCHA
Prof. RAFAEL CANETTI

Montevideo, Uruguay
2009

RESUMEN

Los Reactores Batch Secuenciales son ampliamente utilizados para el tratamiento biológico de efluentes con elevado contenido de materia orgánica, nitrógeno y fósforo. En estos sistemas, pueden llevarse a cabo procesos de remoción aerobios, anóxicos, y también anaerobios.

Los fenómenos bioquímicos convencionales de remoción de materia orgánica que se presentan en estos reactores, son los siguientes: Desnitrificación Heterótrofa, en este caso el aceptor final de electrones en la cadena respiratoria es el anión nitrato o nitrito (NO_X^- / X: 2 ó 3), pudiéndose esquematizar el proceso de la siguiente manera: **Materia Orgánica + NO_X^- → CO_2 + N_2**; Remoción Carbonácea Aerobia, para esta situación el aceptor final de electrones es el oxígeno molecular, siendo la reacción la siguiente: **Materia Orgánica + O_2 → CO_2 + H_2O**; Remoción Carbonácea Anaerobia, aquí el aceptor de electrones es el propio sustrato llevándose a cabo la siguiente reacción: **Materia Orgánica → CO_2 + CH_4**.

Sin embargo, estos fenómenos bioquímicos no son los únicos que se manifiestan en el medio de reacción. Procesos de adsorción física y/o biológica, absorción ó acumulación, almacenamiento o polimerización, etc., pueden también estar presentes como vías causales de la desaparición de sustrato en el medio. En líneas generales, estos

procesos adquieren mayor relevancia en sistemas que operan en estado transitorio, motivados por la maximización de las capacidades de la biomasa desde el punto de vista de la rápida captura de sustrato cuando el mismo se presenta en abundancia. De esta manera, el sustrato velozmente asimilado funciona como alimento de reserva, el cual adquiere vital importancia sobre todo en los periodos de hambruna externa (déficit de sustrato exógeno).

Los Reactores Batch Secuenciales representan el sistema de tratamiento biológico de efluentes en estado transitorio por excelencia. Como consecuencia de ello, la probabilidad de existencia en una extensión apreciable de los procesos de remoción no convencionales es muy alta. Más allá de la importante relevancia que en sí mismo estos fenómenos presentan, la no consideración de estos mecanismos en estudios cinéticos, diseño del reactor, modelación matemática, desarrollo de leyes de control óptimo, etc., puede ocasionar graves distorsiones en los resultados obtenidos.

El presente trabajo, se concentra en el estudio de la desaparición de materia orgánica soluble (sustrato) por vías no convencionales de remoción (Desnitrificación Heterótrofa, Remoción Carbonácea Aerobia y Remoción Carbonácea Anaerobia se consideran vías convencionales), en un Reactor Batch Secuencial que trata efluente lácteo utilizando

poblaciones heterótrofas. El objetivo fundamental que se persigue es el de profundizar en el conocimiento del mecanismo de remoción no convencional presente en este sistema, así como también en su cinética. Variables como Tipo de Sustrato, Carga de Sustrato, Carga de Biomasa (lodo activado), Gradientes de Transferencia de Materia, pH, Potencial Redox, etc., fueron consideradas en este estudio con motivo de abarcar un amplio y representativo espectro de condiciones ambientales.

Fueron encontrados procesos de remoción de materia orgánica extremadamente veloces. En líneas generales, en un tiempo de tan solo 45 minutos, la biomasa resultó capaz de capturar un porcentaje muy importante de la totalidad del sustrato externo. Mientras que la medida de potencial redox confirma la ausencia de fenómenos de oxidación biológica en el sistema (reacciones aerobias, anóxicas, etc.), la medida de pH resulta un adecuado indicador de la evolución del proceso de desaparición de materia orgánica, efecto asociado a especies químicas generadas por reacciones de hidrólisis en el medio de reacción.

Los perfiles temporales encontrados de desaparición de materia orgánica sugieren la presencia en el medio de reacción de sucesivos fenómenos de sorción superficial e hidrólisis [sorción→hidrólisis→sorción→hidrólisis, etc.]. La desagregación del sustrato orgánico en distintos componentes, cada uno presentando un comportamiento diferente en el sistema, es

considerada en este estudio en aras de poder explicar los perfiles experimentales obtenidos.

Dada su elevada complejidad, fueron llevados adelante estudios preliminares de modelación matemática del sistema. Un mecanismo serie-paralelo, de sucesivos fenómenos de sorción superficial e hidrólisis, con discriminación entre sustratos disueltos y coloidales, con 14 parámetros cinéticos, fue propuesto y ajustado para algunas de las corridas experimentales disponibles.

Fenómenos de arrastre físico sobre el material sorbido deben también tenerse en cuenta en el modelo, sobre todo cuando sustrato fresco en cantidad apreciable se incorpora al medio de reacción.

Para la determinación del modelo matemático del sistema, se llevó a cabo un fuerte estudio en las técnicas de optimización para el ajuste de parámetros. Se evidenciaron fuertes no convexidades del sistema al intentar ajustar el modelo cinético con métodos convencionales de optimización determinística. Como consecuencia de ello, la inclusión de técnicas de optimización estocástica en la resolución de este problema se vuelve imprescindible. En líneas generales, los mejores resultados fueron obtenidos mediante la aplicación de técnicas determinísticas del tipo *Sequential Shooting/NLP* (fundamentalmente métodos *Quasi-Newton*

como códigos *NLP*, bajo *Steepest Descent/Linearsearch*) siendo estas precedidas por la técnica estocástica basada en poblaciones de *Particle Swarm Optimization* en su versión modificada.

La detección de la medida de pH como indicador de evolución del proceso; la propuesta de un mecanismo **Biosorción → Hidrólisis → Biosorción** tanto para especies coloidales como disueltas; la propuesta de formulaciones con mutua inhibición entre ambos mecanismos; el manejo de la estructura analítica que describe el sistema en términos de números adimensionales; la profundización en el empleo eficiente de métodos heurísticos para optimización en esta área de la ingeniería; la detección de una velocidad de reacción (**Biosorción**, **Hidrólisis**, etc.) sobre sustratos disueltos y/o sus derivados, comparable ó incluso superior respecto del caso análogo para sustratos coloidales; la detección de fenómenos de "arrastre físico" sobre especies biosorbidas derivadas de componentes tanto disueltos como coloidales; el planteo adimensional de la función objetivo del problema de optimización; la definición y forma de cálculo de un **Factor de Equilibrio Inter-Estados** a incluir en dicha función objetivo; el desarrollo de un **Problema de Optimización *Mini-Máx*** que intenta mejorar la captura de detalle cualitativo en los ajustes; así como el desarrollo de un algoritmo de **Programación Dual Estocástica** que permite resolver numéricamente tal problema,

constituyen algunos de los principales aportes de valor agregado del presente estudio.

Palabras Clave: Almacenamiento, Acumulación, Biosorción, Hidrólisis, Modelado, Data Mining, Optimización, Optimización Dual, Programación Dual, Optimización Estocástica, Optimización por Enjambre de Partículas, *Particle Swarm Optimization*.