



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Control predictivo en un sistema de tratamiento anaerobio: formulación y simulación numérica

Angélica María Alzate Ibañez

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería y Arquitectura
Departamento de Ingeniería Eléctrica, Electrónica y Computación
Manizales, Colombia
2015

Control predictivo en un sistema de tratamiento anaerobio: formulación y simulación numérica

Angélica María Alzate Ibañez

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Doctor en Ingeniería - Línea Automática

Director:
Ph.D. Gerard Olivar Tost

Grupo de Investigación:
Percepción y Control Inteligente (PCI)

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería y Arquitectura
Departamento de Ingeniería Eléctrica, Electrónica y Computación
Manizales, Colombia
2015

Predictive control in an anaerobic treatment system: formulation and numerical simulation

Angélica María Alzate Ibañez

A Thesis presented for the degree of:
Doctor of Engineering - Automatic

Thesis Advisor:
Ph.D. Gerard Olivar Tost

Research Group:
Percepción y Control Inteligente (PCI)

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería y Arquitectura
Departamento de Ingeniería Eléctrica, Electrónica y Computación
Manizales, Colombia
2015

Dedico esta tesis a mi familia, por su apoyo y amor incondicional, y en especial a mi mamá por su esfuerzo y dedicación.

La familia es base de la sociedad y el lugar donde las personas aprenden por vez primera los valores que les guían durante toda su vida.

Juan Pablo II

Agradecimientos

A mi director de tesis Ph.D. Gerard Olivar por su apoyo durante el programa doctoral.

Al profesor Ph.D. Carlos Ocampo Martínez por su paciencia, motivación y valiosos aportes. Se que un gracias no es suficiente.

A mi gran amigo Victor Manuel Trejos Montoya por su apoyo incondicional y grandes consejos, por haberme impulsado a finalizar este documento.

Al profesor Nelson de Jesús Gonzales y al ingeniero Luis Helmer Orozco, por la disposición, colaboración y aportes para la realización de esta tesis.

Al Institut de Robòtica i Informàtica Industrial (IRI) de la Universitat Politècnica de Catalunya, por su amable acogida y brindarme la oportunidad de realizar mi estancia en sus increíbles instalaciones.

Al Programa de Becas de Estudiantes Sobresalientes de Posgrado, por su apoyo económico y en general a la Universidad Nacional de Colombia por sus excelentes programas de formación.

Agradezco a todas las personas que de una u otra forma hicieron parte de este proceso, me acompañaron e impulsaron a culminar esta etapa del camino.

Resumen

En este trabajo se presenta el estudio de un proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB para el tratamiento de lixiviados, con el objetivo de proponer una estrategia de control predictivo basado en un modelo no lineal (NMPC) para la regulación de la concentración de sustrato orgánico a la salida del bioreactor. Inicialmente se presenta un modelo matemático para describir el comportamiento dinámico del sistema, se asume que la dinámica del proceso presenta dos etapas principales: etapa metanogénica y etapa acidogénica. El modelo involucra en sus expresiones cinéticas los efectos de la temperatura y el pH, los cuales se analizan empleando la teoría de bifurcaciones. Se hace uso de un observador no lineal para la estimación de las variables no medibles en línea, como lo son las concentraciones de biomasa y las velocidades máximas de crecimiento bacteriano. La calibración y validación del modelo y el observador se realiza empleando un conjunto de datos experimentales provenientes del bioreactor; como criterio de evaluación se considera el valor del error medio relativo. Finalmente, se evalúa el desempeño de la estrategia de control mediante simulaciones numéricas. Los resultados obtenidos muestran un buen desempeño de la técnica de control propuesta, para garantizar los valores permisibles del efluente del bioreactor en relación a la normatividad de vertimientos vigente en Colombia.

Palabras clave: tratamiento anaerobio, reactor anaerobio de flujo ascendente, modelo de bioprocesos, observador, control de bioprocesos.

Abstract

In this thesis, it is presented a study of an anaerobic digestion process in a UASB reactor for leachate treatment. The main objective of this work is to propose a predictive control strategy based on a non-linear model in order to regulate the outlet organic substrate concentration of the bioreactor. Initially, a mathematical model is presented to describe the dynamic behaviour of the system. The model assumes that the dynamics of the process involving two main stages: methanogenic stage and acidogenic stage. It includes temperature and pH parameters on kinetic rates expressions, and the effects of these parameters using the bifurcation theory are analysed. A non-linear observer to estimate non-measurable variables, such as biomass concentration and maximum bacterial growth rates is used. The model calibration and validation is performed using a set of experimental data. A comparative on the simulated and related measures has been made and the relative average error value is considered as criteria evaluating. Finally, by numerical simulations is evaluated the performance of the control strategy. The results obtained show a good performance of the technique proposed for control of the process, the NMPC guarantees the permissible discharge values by the regulations in Colombia.

Keywords: anaerobic treatment, upflow anaerobic sludge blanket, bioprocess modelling, observer, bioprocess control

Contenido

Agradecimientos	ix
Resumen	xi
Lista de símbolos	xv
1. Introducción	1
1.1. Organización de la tesis	4
1.2. Contribuciones	5
2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado	7
2.1. Antecedentes	7
2.2. Proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de aguas residuales . .	10
2.2.1. Características fisicoquímicas de las aguas residuales	13
2.3. Proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB	16
2.3.1. Factores que afectan el funcionamiento y desempeño de bioreactor .	16
2.4. Caso de estudio: proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixi- viados	19
2.4.1. Generalidades del proceso de tratamiento de lixiviados	19
2.4.2. Caracterización del afluente y efluente del reactor UASB	21
2.5. Modelo matemático simplificado del proceso	23
2.5.1. Inhibición por temperatura	26
2.5.2. Inhibición por pH	26
2.5.3. Ajuste de parámetros del modelo	28
2.6. Conclusiones	29
3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados	30
3.1. Antecedentes	30
3.2. Efectos de la temperatura y el pH sobre las velocidades cinéticas de reacción	32
3.3. Análisis de los puntos de equilibrio	35
3.4. Análisis de bifurcaciones	38
3.4.1. Método para la detección de bifurcaciones	39
3.4.2. Análisis del modelo simplificado del reactor UASB para el tratamien- to de lixiviado	41
3.4.3. Efectos del pH en el comportamiento dinámico del reactor	49
3.4.4. Efectos del la temperatura en el comportamiento dinámico del reactor	52

3.5. Conclusiones	55
4. Observadores no lineales	56
4.1. Antecedentes	56
4.2. Observabilidad en sistemas no lineales	57
4.2.1. Análisis de observabilidad local	58
4.3. Formulación del observador no lineal	60
4.4. Aplicación al reactor UASB	63
4.5. Conclusiones	77
5. Control predictivo basado en el modelo no lineal de un proceso de digestión anaerobia	78
5.1. Antecedentes	78
5.2. Control predictivo basado en el modelo no lineal	80
5.3. Estrategia de control predictivo no lineal	82
5.4. Planteamiento del problema de control predictivo aplicado a un reactor UASB	84
5.4.1. Formulación del control predictivo basado en el modelo no lineal . .	84
5.4.2. Objetivo de control	86
5.4.3. Función objetivo	86
5.4.4. Restricciones	88
5.4.5. Diseño del NMPC	89
5.5. Conclusiones	96
6. Conclusiones y trabajo futuro	97
6.1. Conclusiones	97
6.2. Trabajo futuro	98
A. Anexo: Efecto de la temperatura sobre la velocidad de reacción [1]	100
B. Anexo: Identificación de parámetros usando fminsearch del toolbox de optimización de MatLab	102
C. Anexo: Código GAMS	103
Bibliografía	105

Lista de símbolos

Símbolo	Término	Unidad SI
D	factor de dilución	día ⁻¹
k_1	coeficiente de rendimiento para la degradación de sustrato DQO	mg DQO/mg X_1
k_2	rendimiento producción AGV	mg AGV/mg X_1
k_3	rendimiento consumo AGV	mg AGV/mg X_2
K_{S1}	constante de saturación media asociada a S_1	mg/L
K_{S2}	constante de saturación media asociada a S_2	mg/L
K_I	constante de inhibición asociada a S_2	g/L
k_d	velocidad de decaimiento de biomasa	adimensional
pH	potencial de hidrógeno	adimensional
T	temperatura	(°C)
S_1	concentración de salida sustrato orgánico (DQO)	mg/L
S_1^0	concentración de entrada sustrato orgánico (DQO)	mg/L
S_2	concentración de salida ácidos grasos volátiles (AGV)	mg/L
S_2^0	concentración de entrada ácidos grasos volátiles (AGV)	mg/L
VSS	concentración de sólidos suspendidos volátiles	mg/L
VSS^0	concentración de entrada sólidos suspendidos volátiles	mg/L
X_1	concentración de biomasa acidogénica	mg/L
X_1^0	concentración de entrada biomasa acidogénica	mg/L
X_2	concentración de biomasa metanogénica	mg/L
X_2^0	concentración de entrada biomasa metanogénica	mg/L

Símbolos con letras griegas

Contenido

Símbolo	Término	Unidad SI
α	proporción de velocidad de dilución de bacteria	adimensional
Θ	coeficiente de actividad de temperatura	adimensional
θ	ganancia del observador	adimensional

Abreviaturas

Abreviatura	Término
ADM	anaerobic digestion model
AGV	ácidos grasos volátiles
DBO	demanda bioquímica de oxígeno
DQO	demanda química de oxígeno
IWA	International Water Association
NMPC	nonlinear model predictive control
SM	Standard Methods
SSV	sólidos suspendidos volátiles
SST	sólidos suspendidos totales
UASB	upflow anaerobic sludge blanket

1. Introducción

En esta tesis se presenta un estudio para el desarrollo de una estrategia de control predictivo no lineal aplicable a un bioproceso para el tratamiento de aguas residuales. Los sistemas de tratamiento de aguas residuales se caracterizan por la interdependencia de una combinación de procesos biológicos, físicos y químicos variables en el tiempo y se emplean para mejorar la calidad de los efluentes domésticos e industriales permitiendo que puedan ser utilizados en otros procesos o vertidos en un medio natural sin representar un peligro para la salud humana o el medio ambiente. Por lo tanto, su objetivo se encuentra directamente relacionado con la protección del medio ambiente, por ende, el cumplimiento de las disposiciones legales vigentes sobre los usos del recurso hídrico y los vertimientos.

En la actualidad, los procesos biológicos son uno de los sistemas más utilizados en las plantas de tratamiento de aguas residuales industriales y municipales debido a su eficacia y bajo costo de operación en relación con otros sistemas de tratamiento. El tratamiento biológico o secundario es un proceso en el cual intervienen microorganismos que se encargan de descomponer la materia orgánica disuelta presente en el agua residual. En este trabajo como caso de estudio es considerado un proceso biológico en un reactor anaerobio de flujo ascendente (RAFA), también conocido como UASB (por su sigla en inglés Upflow Anaerobic Sludge Blanket) para el tratamiento de lixiviados.

El proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB tiene lugar en un lecho de lodo formado por la acumulación de sólidos suspendidos provenientes del flujo de entrada y del crecimiento bacteriano, donde el tiempo de contacto del agua residual y la biomasa dentro del reactor es determinante para el buen funcionamiento y desempeño del proceso. El reactor se caracteriza por presentar tres zonas, la primera zona corresponde a la zona de reacción ubicada en la parte inferior del reactor seguida por la zona de clarificación y finalmente la tercera zona corresponde a la zona de separación de gas-sólido-líquido ubicada en la parte superior del reactor; el sistema de separación es un factor clave de diseño y operación en reactores anaerobios. Una de las principales ventajas del tratamiento de aguas residuales en reactores UASB, es que exhibe una alta eficiencia de remoción, incluso a altas velocidades de carga y bajas temperaturas. El desequilibrio del bioreactor puede ser causado por varios factores, tales como mezcla incompleta, bajo tiempo de residencia, presencia de sustancias tóxicas o inhibidores, cambios bruscos de temperatura y pH.

La digestión anaerobia consiste en la degradación de materia orgánica por un grupo de poblaciones interdependientes y simbióticas de microorganismos heterótrofos en ausencia de oxígeno. Generalmente, el proceso se lleva a cabo en tres etapas. La primera etapa implica la hidrólisis y conversión de material insoluble y la reducción de polímeros en monómeros. La segunda etapa (acidogénesis) implica la fermentación de monómeros en una variedad

1. Introducción

de productos finales: ácidos grasos volátiles, alcoholes, dióxido de carbono e hidrógeno. La tercera etapa (metanogénesis), los productos finales de la fermentación (acetato, butirato, propionato, ácido fórmico, hidrógeno y dióxido de carbono) son fermentados por otro grupo de microorganismos anaerobios en metano y dióxido de carbono con trazas de otros gases (sulfuros de hidrógeno, amoníaco, nitrógeno, mercaptanos y aminas)[2].

Hasta el momento se han desarrollado y descrito en la literatura un número considerable de modelos para representar la dinámica del proceso de digestión anaerobia, siendo el modelo genérico ADM1 (Anaerobic Digestion Model No. 1) [3] uno de los más utilizados a nivel mundial. Sin embargo, la adaptación de modelos complejos como el ADM1 en estrategias de control es limitada, ya que en su mayoría proporcionan una descripción bastante minuciosa de la cinética de las reacciones involucradas, efectos sinérgicos e interacciones entre las múltiples poblaciones bacterianas. No obstante algunos estudios han demostrado que modelos más simples pueden sintetizar y representar la compleja dinámica del proceso de digestión anaerobia [4, 5, 6]. En el diseño de un modelo matemático es importante tener en cuenta el propósito u objetivo del modelo a desarrollar, usualmente los modelos dinámicos son utilizados para la optimización de procesos, puesta en marcha de otros reactores, diseño de estrategias de control automático, sintonización de controladores, diagnóstico y detección de fallas y para la toma de decisiones.

Teniendo en cuenta que el propósito de este trabajo es el diseño de una estrategia de control, el modelo dinámico del proceso de digestión anaerobia debe ser capaz de predecir la formación y la degradación cinética de los compuestos principales, por consiguiente se presenta una extensión del modelo matemático simplificado del proceso propuesto por Bernard et. al. [7], a partir de los balances de materia asumiendo que el proceso se realiza en dos etapas fundamentales: metanogénesis y acetanogénesis, e involucrando la velocidad de decaimiento microbiano y los efectos de inhibición por temperatura y pH. El modelo fue calibrado y validado con datos históricos del reactor a diferentes puntos de operación.

Con el fin de analizar el comportamiento del sistema se efectuaron simulaciones numéricas y análisis de bifurcaciones. La simulación dinámica de los procesos ha demostrado ser una herramienta eficaz para el análisis, optimización, toma de decisiones, diseño de procesos y diseño de estrategias de control en procesos de tratamiento de aguas residuales individuales, así como en plantas de tratamiento de aguas residuales completas (PTARs) [8]. Los procesos de tratamiento de aguas residuales involucran un número considerable de entradas y parámetros variables en el tiempo, tales como concentraciones de biomasa y sustrato, velocidades de crecimiento bacteriano, caudal, temperatura y pH. La simulación dinámica permite observar el comportamiento del sistema ante diferentes condiciones de operación, perturbaciones en las variables de entrada y parámetros. El análisis de bifurcaciones permite identificar los valores críticos de los parámetros para el diseño de estrategias de control aplicables al proceso de tratamiento.

El control de procesos biotecnológicos ha sido un tema de investigación importante debido a la necesidad de aplicar estrategias que permitan mejorar la estabilidad operacional y la eficiencia de este tipo de procesos. Tradicionalmente, los procesos de tratamiento de aguas residuales han sido controlados por sistemas estándar y algoritmos basados en modelos

lineales; estas estrategias de control funcionan correctamente alrededor de un punto de operación presentando una convergencia fiable en pocos segundos, siendo útil en aplicaciones industriales [9], sin embargo, los bioprocesos son complejos y se caracterizan por un comportamiento dinámico altamente no lineal, con fuertes interacciones entre las variables y perturbaciones frecuentes, en algunos casos no medibles [10, 11].

El éxito del proceso de tratamiento biológico continuo depende de la forma en que se obtienen condiciones adecuadas para el crecimiento bacteriano, la muerte y la fase de respiración endógena. Estas condiciones óptimas de operación, sólo pueden ser obtenidas al implementar una tecnología de control adecuada, especialmente para mantener el funcionamiento del bioreactor en un régimen de trabajo más eficiente [12, 13].

El uso de estrategias de control moderno y avanzado aplicadas a bioprocesos ha sido baja [14], debido principalmente a la falta de información de la planta y a instrumentación adecuada para el monitoreo en línea de los sistemas de tratamiento de aguas residuales. Los avances recientes en tecnología, han permitido el mejoramiento y desarrollo de la instrumentación requerida, posibilitando la aplicación de sistemas de control avanzados [9].

Durante las dos últimas décadas, la comunidad científica ha contribuido con importantes resultados en la técnica del control predictivo basado en el modelo no lineal (NMPC) [13]; el estudio y desarrollo del NMPC en la industria y en el mundo académico ha crecido, posicionándose como una de las técnicas de control más importantes [15, 13].

La aplicación de modelos de predicción explícita del sistema para optimizar el comportamiento futuro de los procesos biológicos en plantas de tratamiento de aguas residuales (PTARs), ha demostrado ser una técnica de control apropiada; algunos autores han resalado beneficios en la industria tales como reducción en el consumo de energía y en el costo operacional y aumento en la eficiencia de la planta [16, 17, 9]. Sin embargo, a pesar de los grandes avances en el área, uno de los principales limitantes que dificulta la implementación de NMPC es el esfuerzo por desarrollar modelos dinámicos de plantas de gran escala industrial e integrarla de forma tal que garantice la eficiencia en tiempo real [18].

En este estudio se propone una estrategia de control predictivo no lineal (NMPC) para la regulación de la concentración de sustrato orgánico en un proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviados, en cumplimiento con la normatividad ambiental vigente. El modelo que describe el comportamiento dinámico del sistema es un modelo basado en la teoría de observador no lineal, teniendo en cuenta que no todas las variables de estado pueden ser medidas en línea y el proceso cuenta con parámetros desconocidos y variables en el tiempo. El observador estima la concentración de sustrato orgánico, concentración de biomasa y velocidades máximas de crecimiento bacteriano a partir de la medición de la concentración de ácidos grasos volátiles (componente intermedio de la reacción). El modelo matemático basado en la teoría de observadores es calibrado y validado con datos experimentales del bioreactor.

El desarrollo de esta tesis podría resumirse en cuatro pasos: en primer lugar, se describe el proceso de digestión anaerobia y se presenta una extensión de un modelo matemático no lineal para el sistema; segundo, se realiza un análisis dinámico del sistema, caracterización de puntos de equilibrio por el método de Lyapunov y representación gráfica de las solucio-

1. Introducción

nes del sistema ante variaciones en los parámetros; tercero, se obtiene un modelo basado en la teoría de observadores no lineales calibrado y validado con datos reales, evaluando el desempeño del modelo por medio de simulaciones numéricas. Finalmente, se diseña una estrategia de control predictivo basado en el modelo no lineal para la regulación de la concentración de sustrato orgánico a la salida del bioreactor.

1.1. Organización de la tesis

La tesis se encuentra estructurada de acuerdo a los siguientes capítulos:

- **CAPITULO 2: Modelo de digestión anaerobia para el tratamiento de aguas residuales**

Este capítulo introduce al lector sobre algunos conceptos y definiciones relacionados con el tratamiento de aguas residuales mediante sistemas biológicos. Se describe el proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviados en un reactor UASB (por su sigla en inglés Upflow Anaerobic Sludge Blanket). El lixiviado es un agua residual producto de los rellenos sanitarios y se caracteriza por tener una alta carga contaminante, su composición depende de diferentes factores asociados a la operación del relleno. En este capítulo se presenta una extensión de un modelo dinámico simplificado propuesto inicialmente por Bernard et.al. [7] para representar el comportamiento del sistema, asumiendo que la dinámica del proceso de digestión anaerobia presenta dos etapas principales: acidogénica y metanogénica. El modelo propuesto involucra la velocidad de decaimiento de los microorganismos, las expresiones matemáticas sobre las velocidades de crecimiento microbianos para representar los factores de inhibición por temperatura y pH, y el modelo de Haldane inhibición acompetitiva en la etapa metanogénica. La calibración y validación del modelo se realiza a partir de un conjunto de datos tomados en condiciones de operación normal del reactor UASB a escala real.

- **CAPITULO 3: Análisis del proceso de digestión anaerobia**

En este capítulo se presenta el análisis del modelo de digestión anaerobia que describe el comportamiento dinámico del reactor UASB para el tratamiento de lixiviado. El proceso de digestión anaerobia se caracteriza por una dinámica no lineal, con limitaciones en sus variables de estado, parámetros y variables de control. Inicialmente se estudian de forma analítica los puntos de equilibrio del sistema con significado físico, posteriormente se describe una metodología para la solución no trivial del sistema de ecuaciones como un problema de optimización no lineal y se realiza la caracterización de los puntos de equilibrio en el sentido de Lyapunov. Finalmente, se realiza un análisis de bifurcaciones variando el parámetro factor de dilución, temperatura y pH. A partir del diagrama de de continuación de puntos de equilibrio se observa el comportamiento del sistema ante variaciones en los parámetros, el sistema exhibe

puntos de equilibrio estables ante variaciones en estos parámetros dado a que las condiciones del afluente permiten garantizar la estabilidad del proceso por la presencia de biomasa a la entrada del reactor, no obstante, la pérdida de esta biomasa conlleva a condiciones de lavado. El análisis dinámico del sistema permite definir los valores óptimos de los parámetros que garantizan el correcto funcionamiento del bioreactor, además de proporcionar información clave para el diseño de estrategias de monitoreo y control como se presenta en el Capítulo 5.

■ **CAPITULO 4: Observador no lineal basado en el modelo**

En este capítulo se propone un observador no lineal para representar el proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB de tratamiento de lixiviado. El observador se basa en modelo dinámico del proceso descrito en el Capítulo 2, y en la teoría de observadores. El propósito del observador es estimar las variables de estado no medibles en línea y los parámetros desconocidos variables en el tiempo, a partir de la medición de la concentración de ácidos grasos volátiles a la salida del reactor. Los ácidos grasos volátiles son un producto intermedio del proceso. El desempeño del modelo se evalúa realizando simulaciones numéricas haciendo uso de los datos experimentales obtenidos del reactor UASB. Como criterios para determinar la aceptabilidad del modelo se considera el cálculo de los valores de $MMRE \leq 0.25$ y $PRED(0.25) \geq 0.75$. Dadas las características del modelo propuesto, puede ser utilizado en el diseño de esquemas de control.

■ **CAPITULO 5: Control predictivo basado en un modelo no lineal**

En este capítulo se presenta el diseño de un algoritmo de control predictivo basado en un modelo no lineal (NMPC) para el proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB de tratamiento de lixiviado. El objetivo de control es regular la concentración de sustrato orgánico a la salida del sistema de tratamiento en cumplimiento con la normatividad ambiental vigente en Colombia y garantizar el funcionamiento eficiente del bioreactor. En el diseño del controlador se incluyen explícitamente las no linealidades y las restricciones del proceso. El desempeño del controlador se evalúa realizando simulaciones numéricas del sistema en lazo cerrado con datos reales a diferentes condiciones de operación del reactor.

■ **CAPITULO 6: Conclusiones y trabajo futuro**

En este capítulo, se integran las conclusiones expuestas en los capítulos anteriores y trabajo futuro.

1.2. Contribuciones

Durante el desarrollo de este proyecto de investigación se han realizado una serie de contribuciones en el campo del modelado, simulación y control de sistemas anaerobios para el tratamiento de aguas residuales. La principales contribuciones se enumeran a continuación.

1. Introducción

- Descripción del proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB para el tratamiento de lixiviado y desarrollo de un modelo matemático simplificado a partir del balance de materia, asumiendo que el proceso se da en dos etapas principales: acidogénica y metanogénica. El modelo propuesto involucra los efectos de inhibición por temperatura y pH en las velocidades de crecimiento microbiano. El modelo se basa en el concepto descrito por Bernard et. al. [7], y se extiende introduciendo el efecto de la temperatura y pH, lo cual constituye una mejora significativa del modelo.
- Desarrollo de un observador no lineal basado en el modelo dinámico para estimar variables del proceso no medibles en línea y parámetros variables en el tiempo. El observador es adecuado para el diseño de estrategias de control debido a que la medición de la variable medible (concentración de ácidos grasos volátiles es fácilmente medible en línea al igual que otros parámetros como la temperatura y el pH. Se realizaron simulaciones numéricas para evaluar el desempeño del modelo y comparar sus resultados con respecto al conjunto de datos experimentales obtenidos del bioreactor a diferentes condiciones de operación.
- Análisis dinámico del comportamiento del sistema ante variaciones en el factor de dilución, temperatura y pH. A partir de los diagramas de continuación de puntos de equilibrio se determinan rangos de operación favorables para el proceso de digestión anaerobia, en los cuales se garantiza altos niveles de remoción de materia orgánica.
- El modelo basado en la teoría de observadores se ha integrado a la estrategia de control predictivo, y permite la observación de variables que no son fácilmente medibles en línea como la concentración de biomasa y parámetros variables en el tiempo como lo son las velocidades cinéticas.
- Estrategia de control predictivo basado en un modelo no lineal para mantener la concentración de sustrato orgánico a la salidad el bioreactor dentro de los límites permitidos por la legislación colombiana de vertimientos. La estrategia de control involucra el rechazo de las perturbaciones no medibles en la entrada del reactor que afectan el sistema, tales como la concentración de biomasa, la concentración inicial de sustrato orgánico, pH y temperatura.

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

Este capítulo introduce al lector con algunos conceptos y definiciones relacionados con el tratamiento de aguas residuales mediante sistemas biológicos. Se describe el proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviados en un reactor UASB (por su sigla en inglés Upflow Anaerobic Sludge Blanket), el lixiviado se caracteriza por tener una alta carga contaminante y su composición depende de diferentes factores asociados a la operación del relleno sanitario. Se presenta la extensión de un modelo dinámico simplificado para representar el comportamiento del sistema, asumiendo que la dinámica del proceso de digestión anaerobia presenta dos etapas principales: acidogénica y metanogénica; el modelo involucra la velocidad de decaimiento de los microorganismos y las factores de inhibición por temperatura y pH. La calibración y validación del modelo se realiza a partir de un conjunto de datos reales tomados del reactor UASB a diferentes condiciones de operación.

2.1. Antecedentes

El modelado de los bioprocesos resulta ser un ejercicio delicado, debido a la complejidad inherente de estos sistemas [4]. En particular, los procesos de digestión anaerobia involucran un gran número de poblaciones bacterianas, presentan un comportamiento altamente no lineal, fluctuaciones de carga, incertidumbres en el sistema, limitada información de medición en línea y restricciones en sus variables [10, 11].

En el entorno del modelado y la simulación, las condiciones son cuidadosamente manipuladas para estimular la degradación de la materia orgánica y estabilizar el lodo residual [19]. Particularmente, el modelado de la digestión anaerobia se ha realizado de manera heurística, siendo una línea de investigación muy activa durante las últimas décadas. Los primeros modelos propuestos para representar el comportamiento de estos sistemas involucraban la existencia de un solo grupo bacteriano, posteriormente, fueron propuestos modelos más complejos, en los cuales se ha considerado la existencia de múltiples grupos bacterianos [20]. Sin embargo, dependiendo del objetivo para el cual han sido desarrollados los modelos, se podrían clasificar en dos grupos; el primero corresponde a los modelos desarrollados

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

para capturar con precisión el comportamiento fenomenológico del proceso y el segundo, modelos simplificados con fines de optimización y control de bioprocesos [21].

Las primeras investigaciones sobre modelos matemáticos del proceso de digestión anaerobia fueron motivadas alrededor de los años 70 por la necesidad de que estos sistemas operaran de manera eficiente [22]. Los primeros trabajos publicados fueron desarrollados por Andrews and Graef [23, 24, 25, 26] y por Hill y Barth en 1977 [27], en este último trabajo ya se representaba la digestión anaerobia como un proceso de múltiples etapas, donde un paso más lento controlaba la velocidad de reacción global. En 1981, Eastman [28] considera como paso limitante la hidrólisis de los sólidos suspendidos, y en 1982 se consideró la concentración de ácidos grasos volátiles como el parámetro clave, incorporando las etapas de acidogénesis y acetogénesis por separado [29]. Posteriormente, Angelidaki [30] propuso un modelo que incluía cuatro etapas, 12 compuestos químicos y la inhibición por amoníaco. A finales de los 90's Jeyaseelan [31] y Angelidaki [32], realizaron las primeras publicaciones de trabajos de calibración y validación de los modelos en codigestión con diferentes residuos. A principios del siglo XXI era considerable la cantidad de modelos propuestos para representar el comportamiento de los reactores anaerobios, surgiendo la necesidad de un modelo estándar, con este propósito la International Water Association (IWA) estableció un grupo de expertos en el tema. El grupo de trabajo de la IWA desarrolló el modelo genérico denominado ADM1 (Anaerobic Digestion Model No. 1), el cual fue publicado por Batstone et. al. en el año 2002 [3]. El objetivo de este trabajo era maximizar la aplicabilidad de un modelo con una estructura razonablemente simple, aportando al diseño, operación y optimización de plantas a gran escala, así como a la optimización y control de procesos. Además de posicionarse en la base para futuros estudios de desarrollo y validación de modelos, contribuyendo a la transferencia tecnológica de la investigación a la industria [3].

En la Figura 2.1 se presenta el esquema del sistema de reacción anaerobia considerado para el desarrollo del modelo ADM1, se asume que el reactor se encuentra completamente agitado, a volumen constante, con una corriente de entrada y una corriente de salida. El ADM1 corresponde a un modelo estructurado que involucra los procesos bioquímicos y fisicoquímicos de biodegradación anaerobia de compuestos orgánicos complejos. Según Schoen et. al. [33] el ADM1 es un modelo biocinético universalmente aplicable que permite la descripción matemática de la digestión anaerobia de diferentes tipos de sustratos orgánicos.

El ADM1 ha sido formulado como un sistema de ecuaciones algebraicas y diferenciales (DAE), considerando siete grupos de bacterias, 26 variables de estado, 19 procesos cinéticos bioquímicos, tres procesos cinéticos de transferencia gas-líquido y ocho variables algebraicas implícitas [34]. Además, considera las expresiones de inhibición por hidrógeno, amoníaco libre, amoníaco total y pH. En el año 2009, Gali et. al. realizaron una modificación al modelo para su implementación como un sistema de ecuaciones diferenciales, involucrando 32 procesos y 41 componentes.

Desde su publicación, el modelo ADM1 ha sido utilizado y validado en un gran número de aplicaciones [35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44]. Batstone y Keller [35] emplearon el modelo ADM1 para estudiar y evaluar el comportamiento de un reactor UASB para

el tratamiento de un efluente de la industria papelera mediante la adición de ácido para reducir el pH y evitar la precipitación de carbonato de calcio (CaCO_3). El resultado del estudio permitió determinar la poca efectividad del ácido sobre la concentración del carbonato de calcio mediante simulaciones numéricas, sin afectar el comportamiento del reactor y su operación normal.

A pesar de la aplicabilidad del ADM1 en diferentes procesos, su uso en el diseño de estrategias de control y optimización ha sido limitado debido a su complejidad. Por esta razón, algunos autores como Marsili-Libelli y Beni [45], Bernard et. al. [7, 5], Muñoz [46] y Martínez [6], han desarrollado modelos simplificados para representar la dinámica de los procesos de digestión anaerobia.

El modelo simplificado presentado por Bernard et. al. [7] se desarrolló con el fin de representar la dinámica de un proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de vinazas. El modelo se basa en el balance de masa del reactor asumiendo que la dinámica del sistema presenta dos etapas principales: acidogénesis y metanogénesis. El modelo involucra dos grupos bacterianos, seis variables de estado e incluye la alcalinidad como componente clave para el monitoreo y control de la planta de tratamiento. La identificación de los parámetros y la validación del modelo se realizó con datos experimentales a diferentes condiciones de operación. Los experimentos se realizaron con vinazas obtenidas de destilerías industriales de la región de Narbona en Francia.

Por su parte, Muñoz [46] propone un modelo macroscópico aplicado a un reactor UASB a escala piloto para el tratamiento de lixiviado de la Empresa Metropolitana de Aseo de Manizales, EMAS. El modelo corresponde a un modelo cinético no estructurado y no segregado, de tercer orden considerando una reacción total en la que se agrupan las diversas colonias microbianas dentro de los Sólidos Suspendidos Volátiles (SSV), y los sustratos

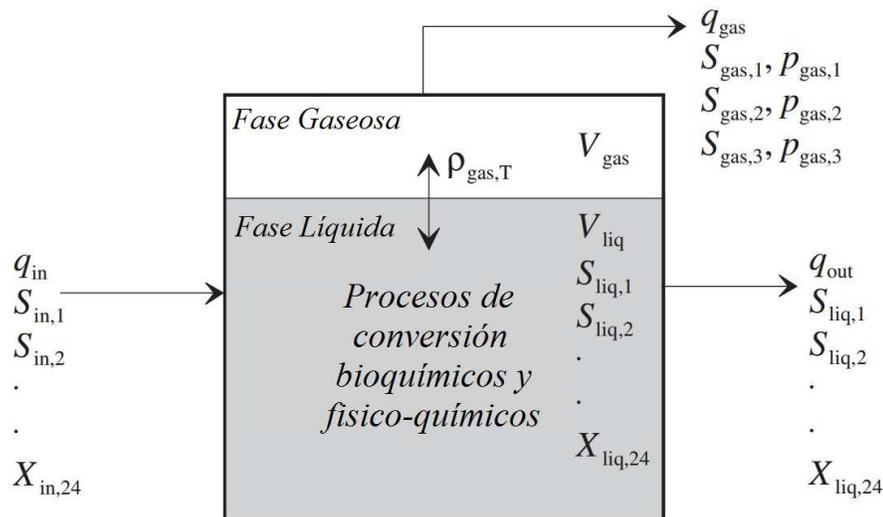


Figura 2.1.: Modelo ADM1: Esquema de un digestor típico de un solo tanque [3]

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

involucrados dentro de la Demanda Química de Oxígeno (DQO).

Finalmente, Martínez [6] desarrolla dos modelos simplificados a partir del ADM1 para representar la dinámica de un reactor UASB a escala laboratorio utilizado como caso de estudio. El primer modelo corresponde a un modelo de quinto orden considerando dos grupos bacterianos e involucrando los efectos de inhibición por pH y amonio libre. El segundo modelo de tercer orden, involucra un solo grupo de bacterias y los efectos de inhibición por pH. El modelo es usado para el desarrollo de un sistema de ayuda al operador humano para un reactor anaerobio, con un algoritmo de detección de falla que estima la velocidad de crecimiento de los grupos bacterianos.

2.2. Proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de aguas residuales

Dadas las características fisicoquímicas de las aguas residuales, los sistemas de tratamiento involucran una combinación de procesos físicos, químicos y biológicos, los cuales se llevan a cabo en una secuencia de etapas conocidas como tratamiento preliminar, tratamiento primario, tratamiento secundario o biológico y tratamiento terciario o avanzado [47].

El tratamiento preliminar involucra generalmente procesos físicos tales como el cribado, desarenador y homogenizador para la reducción de sólidos suspendidos y acondicionar el agua residual para los tratamientos posteriores. El tratamiento primario involucra operaciones físicas que permiten la eliminación de sólidos sedimentables y flotantes que se encunetran presentes en el agua residual. En el tratamiento secundario los procesos bioquímicos se encargan de eliminar la mayor parte de materia orgánica. Finalmente, en el tratamiento terciario se utilizan combinaciones de procesos y operaciones unitarias para eliminar otros componentes como nitrógeno y fósforo [48].

Los sistemas de tratamiento biológico de aguas residuales están diseñados para realizar el proceso de purificación que se produce naturalmente en ríos, lagos y arroyos. En el proceso biológico, los microorganismos utilizan aeróbica o anaerobiamente el material orgánico presente en el agua residual para la obtención de energía. Los tratamientos más comunes son: lodos activados, filtros percoladores, lagunas de estabilización, procesos de oxidación, biodiscos y digestión [47]. Se determina si el proceso de tratamiento es aerobio y/o anaerobio dependiendo de diferentes factores, como la composición del agua residual, el grado de estabilización necesario para el cumplimiento de la normatividad ambiental y la viabilidad económica. Inclusive, en algunos casos se considera y evalúa la posibilidad de que el sistema de tratamiento aeróbico y anaerobio sean un complemento el uno del otro. En la Figura 2.2 se presenta un esquema con las principales diferencias entre el tratamiento aeróbico y anaerobio.

La digestión anaerobia es uno de los procesos de estabilización más usados para el tratamiento de aguas residuales, es un proceso microbiológico complejo en el cual los micro-

2.2. Proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de aguas residuales

organismos descomponen el material biodegradable en ausencia de oxígeno. La materia orgánica contenida se convierte biológicamente bajo condiciones anaeróbicas, en metano (CH_4) y dióxido de carbono (CO_2).

El proceso de degradación del sustrato mediante digestión anaerobia implica tres etapas consecutivas: hidrólisis, acidogénesis y metanogénesis, en las cuales intervienen cinco grandes poblaciones microbianas [50]: (1) bacterias hidrolíticas-acidogénicas, (2) bacterias acetogénicas, (3) bacterias homoacetogénicas, (4) bacterias metanogénicas hidrogenófilas y 5) bacterias metanogénicas acetoclásticas, como se muestra en la Figura 2.3.

En la primera etapa tiene lugar la hidrólisis enzimática de las moléculas de mayor peso molecular tales como polisacáridos, lípidos y proteínas, generando otras moléculas de menor peso molecular que sirven como fuente de energía y de carbono celular. Posteriormente, se da la acidogénesis, en la cual se presenta la conversión bacteriana de oligómeros y monómeros resultantes de la primera etapa, a compuestos intermedios identificables de menor peso molecular denominados ácidos grasos volátiles (AGV), los más comunes son el ácido acético y el ácido propiónico. Finalmente, se presenta la metanogénesis donde por conversión bacteriana los ácidos grasos volátiles son degradados por bacterias metanogénicas a productos finales más simples, principalmente metano y dióxido de carbono [48, 47]. Cada etapa presenta diferentes tasas de crecimiento en función de la composición del sustrato, de acuerdo a la población microbiana involucrada. La estabilidad del proceso global se asocia principalmente a la acumulación de inhibidores intermedios o acumulación de ácidos grasos volátiles (AGV), los cuales podrían causar disminución del pH, como lo afirma Celis [51]. Por lo tanto, para hacer posible algunas reacciones y obtener un desempeño

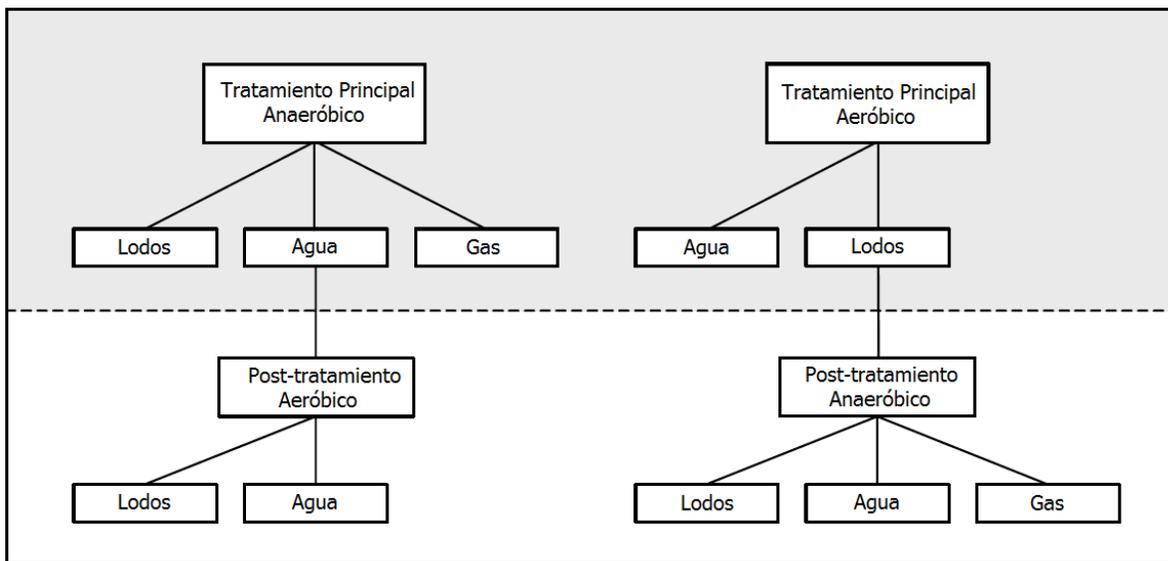


Figura 2.2.: Principal diferencia entre el tratamiento aeróbico y anaeróbico de aguas residuales [49]

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

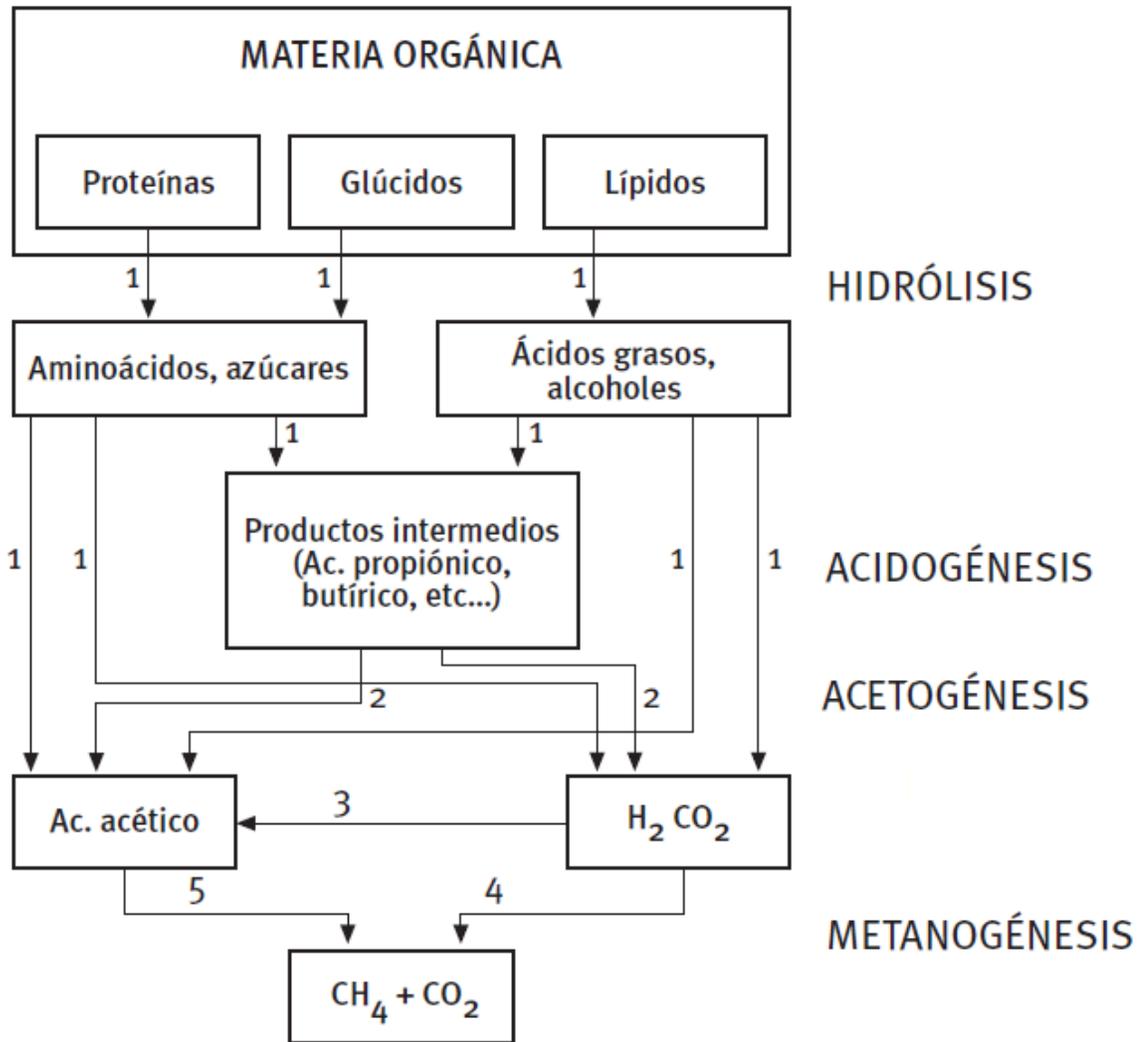


Figura 2.3.: Etapas del proceso anaerobio y poblaciones de microorganismos que intervienen en el proceso: 1) Bacterias hidrolíticas-acidogénicas; 2) Bacterias acetogénicas; 3) Bacterias homoacetogénicas; 4) Bacterias metanogénicas hidrogenófilas; 5) Bacterias metanogénicas acetoclásticas [50]

óptimo del bioreactor es necesario que exista una asociación sintrófica entre las bacterias acetogénicas y metanogénicas, de forma tal que se generen granulos o floculos de bacterias de estas diferentes poblaciones [50].

En términos generales, el proceso de digestión es un proceso de múltiples etapas y la velocidad del proceso se encuentra limitada por la velocidad de la etapa más lenta, la cual depende principalmente de las características y composición del residuo. Para los sustratos solubles, el paso limitante es generalmente la metanogénesis y para acelerar el proceso se deben adoptar diseños que permitan una alta concentración de microorganismos acetogéni-

cos y metanogénicos en el reactor. Para los residuos en los cuales la materia orgánica se encuentra en forma de partículas, el paso limitante es la hidrólisis, proceso enzimático cuya velocidad depende de la superficie de la partícula. Esta limitación hace que los tiempos de proceso sean del orden de semanas. Una estrategia para aumentar la velocidad de reacción del proceso es emplear un pretratamiento para la reducción de tamaño de partícula o mejorar la solubilidad por maceración, ultrasonido, tratamiento térmico, o combinación de altas presiones o temperaturas [50].

2.2.1. Características fisicoquímicas de las aguas residuales

Las aguas residuales se clasifican en dos grandes grupos: domésticas e industriales. Las aguas residuales domésticas contienen una serie de contaminantes orgánicos e inorgánicos en concentraciones muy bajas, con presencia de sólidos suspendidos y disueltos. Las aguas residuales industriales, incluyen residuos sanitarios, residuos derivados del proceso, aguas de lavado y aguas de proceso. Las aguas residuales industriales suelen tener características muy variadas, incluso cuando las industrias son similares [52]. Por lo tanto, las características físico químicas son propias y específicas para cada agua residual [53], siendo necesario un programa de muestreo apropiado para su seguimiento y realizar el análisis en laboratorios con normas estándar para su caracterización. En la Tabla 2.1 se encuentran relacionadas algunos de los principales contaminantes de las aguas residuales, incluyendo el parámetro típico y el impacto ambiental que genera.

A continuación se describen brevemente algunas de las características químicas y físicas de las aguas residuales:

Materia orgánica

La materia orgánica existente en el agua se encuentra en forma disuelta o en partículas, y se valora mediante el parámetro carbono orgánico total. Los compuestos orgánicos existentes en el medio acuático se clasifican de acuerdo a su biodegradabilidad, es decir, a la posibilidad de ser utilizados por microorganismos como fuente de alimentación [54].

Demanda química de oxígeno DQO: La demanda química de oxígeno (DQO) es la medida de oxígeno equivalente a la materia que es susceptible a ser oxidada por un oxidante químico fuerte en condiciones específicas [55], como el dicromato o el permanganato de potasio en medio ácido. La determinación del contenido total de materia orgánica oxidable contenida en una muestra que sea biodegradable o no, se expresa como la cantidad de oxígeno equivalente necesaria para la oxidación química de la materia orgánica oxidable del agua. El análisis de DQO toma alrededor de 3 horas y sus unidades se expresan en mg O₂/L.

Demanda bioquímica de oxígeno DBO: La DBO es el parámetro más usado para medir la calidad de aguas residuales y superficiales [53], corresponde a la cantidad de oxígeno consumido para la degradación bioquímica de la materia orgánica

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

Tabla 2.1.: Contaminantes de importancia en aguas residuales [53]

Contaminante	Párametro típico de medida	Impacto ambiental
Materia orgánica biodegradable	DBO, DQO	Desoxigenación del agua, generación de olores indeseable
Materia suspendida	SST, SSV	Caudal turbiedad en el agua, deposita lodos
Patógenos	CF	Hace el agua insegura para consumo humano
Amoniaco	$\text{NH}_4^+\text{-N}$	Desoxigenación del agua, tóxico para organismos acuáticos y puede estimular crecimiento de algas.
Fósforo	Ortofosfatos	Puede estimular el crecimiento de algas
Materiales tóxicos	Específico para cada material	Peligroso para la vida vegetal y animal
Sales inorgánicas	SDT	Limita los usos agrícolas e industriales del agua
Energía térmica	Temperatura	Reduce la concentración de saturación de oxígeno en el agua, acelera el crecimiento de organismos acuáticos.
Iones hidrógeno	pH	Riesgo potencial para organismos acuáticos

contenida en la muestra, durante un intervalo de tiempo específico y a una temperatura determinada, en condiciones aerobias. En condiciones normales de laboratorio, se realiza una incubación durante 5 días (DBO_5), a 20°C , en la oscuridad, a un pH de 7-7.5 y en presencia de nutrientes y oligoelementos que permitan el crecimiento de los microorganismos [55]. En estas condiciones de reacción se degrada un 60-70 % de la materia orgánica carbonada. Elevados valores de DBO_5 indican una alta concentración de materia orgánica biodegradable. La DBO se emplea para el diseño de unidades de tratamiento biológico, para evaluar la eficiencia de los procesos de tratamiento y fijar cargas permisibles en fuentes receptoras.

Alcalinidad

La alcalinidad es la medida de la capacidad del agua de neutralizar ácidos. La alcalinidad puede generarse por la presencia de hidróxidos, carbonatos y bicarbonatos de elementos como el calcio, magnesio, sodio, potasio o de amonio. Su capacidad para neutralizar ácidos y prevenir cambios bruscos de pH la hace importante en tratamientos anaerobios. Las aguas residuales con alcalinidad cáustica reaccionan con el CO_2 producido por la actividad microbial y reducen el pH [53].

Bacterias

Las bacterias son los organismos más importantes en la descomposición y estabilización de materia orgánica, se reproducen generalmente por fisión binaria, poseen pared celular, citoplasma con suspensiones coloidales, proteínas, carbohidratos, y otros compuestos orgánicos [53]. El crecimiento óptimo de bacterias ocurre en valores de pH entre 6.5. y 7.5, y generalmente no toleran pH mayor a 9.5 e inferior a 4.0, y a temperaturas según el tipo de bacterias: bacterias psicrófilas entre 12°C y 18°C, bacterias mesofílicas entre 25°C y 40°C, y bacterias termofílicas entre 55°C y 65°C.

pH

El pH es una medida de acidez o alcalinidad, indica a una temperatura dada la intensidad de las características ácidas o básicas del agua. Se define como el logaritmo de la inversa de la actividad de los iones hidrógeno, $pH = -\log[H^+]$ [55]. Es una propiedad de los sistemas químicos y biológicos de las aguas naturales; valores extremos de pH pueden originar drásticas alteraciones en la flora y fauna, y reacciones secundarias como cambios en la solubilidad de nutrientes y formación de precipitados [54]. El análisis de este parámetro se puede realizar en campo o en laboratorio, y los resultados se reportan en unidades de pH. El pH óptimo para el crecimiento de vida biológica se encuentra entre 5 y 9.

Temperatura

La temperatura de las aguas residuales es una de las características físicas más importantes a causa de sus efectos sobre la solubilidad de los gases y las sales, principalmente en la solubilidad del oxígeno, ya que de esta depende la actividad metabólica, la difusión y las velocidades de las reacciones químicas y bioquímicas. La temperatura también se encuentra directamente relacionada con la carga contaminante, temperaturas elevadas implican un aumento en la DBO y una disminución en el oxígeno disuelto [55]. El oxígeno disuelto es necesario para la vida de los peces y otros organismos acuáticos.

Sólidos

Los sólidos totales inorgánicos y orgánicos de las aguas residuales son los residuos que quedan una vez la parte líquida se ha evaporado [52], corresponden a la materia suspendida o disuelta en el agua residual y se clasifican en tres categorías: sólidos totales sedimentables, sólidos totales suspendidos y sólidos totales disueltos.

Sólidos totales disueltos: representan un índice de la cantidad de sustancias disueltas en el agua y proporcionan de manera general la calidad química del agua. Determinan la salinidad del medio, en consecuencia la conductividad del mismo.

Sólidos suspendidos: corresponden a la materia orgánica e inorgánica particulada existente en el agua. La presencia de sólidos en suspensión participa en el desarrollo

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

de la turbidez y el color del agua. La determinación de sólidos volátiles (SSV) puede ser un indicador del contenido orgánico de los residuos crudos y proporciona una medida de la población microbiana activa en los procesos biológicos, es decir, que constituye una medida aproximada de la materia orgánica (biomasa).

2.3. Proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB

Dentro de los tipos de reactores anaeróbicos más usados en la industria se encuentran los reactores UASB (reactor anaerobio de flujo ascendente) y los reactores de tipo EGSB (lecho de lodo granular expandido). El reactor anaerobio de flujo ascendente (RAFA) más conocido como UASB por su sigla en inglés *Upflow Anaerobic Sludge Blanket*, fue desarrollado a principios de los años setenta por Lettinga et. al. [56] e inicialmente aplicado en Holanda para el tratamiento de residuos de origen agrícola. Actualmente el reactor UASB es uno de los sistemas más utilizados para el tratamiento de diferentes tipos de aguas residuales, contando con múltiples aplicaciones a nivel mundial.

En América Latina, el primer reactor UASB a escala técnica para el tratamiento de aguas residuales domésticas fue construido en Cali (Colombia), por el grupo Gatze Lettinga de la Universidad de Wageningen en los Países Bajos. Posteriormente, en 1986, una planta piloto fue construida en Brasil por CETESB en Sao Pablo, y al mismo tiempo SANEPAR en Panamá desarrolló su propio diseño del reactor anaerobio. En 1991, fue construida la planta para el tratamiento de aguas residuales domésticas en Bucaramanga (Colombia) [57], y en el 2005 fue realizado el arranque y operación de los reactores UASB para el tratamiento de lixiviados en Manizales (Colombia) [58]. En la actualidad, el desarrollo en América Latina de la tecnología de tratamiento de aguas residuales mediante la digestión anaerobia ha madurado y se ha posicionado como una herramienta viable para el saneamiento económico de la región [57].

2.3.1. Factores que afectan el funcionamiento y desempeño de bioreactor

El concepto del reactor UASB se basa en un lecho de lodo formado principalmente por la acumulación de sólidos suspendidos provenientes del flujo de entrada y del crecimiento bacteriano, en el cual tiene lugar el proceso biológico. El agua residual se introduce por el fondo del reactor y fluye a través del manto de lodos; la retención de lodos activados en forma granular o floculante, permite un buen rendimiento para el tratamiento de aguas residuales con cargas orgánicas elevadas. La turbulencia natural generada por la entrada del flujo y la salida del biogas producido, genera un buen contacto entre el agua residual y la biomasa dentro del reactor [59]. La recirculación interna de sólidos removidos permite edades de lodos prolongadas y hace innecesaria la recirculación de lodos externa [53]. Las principales ventajas del tratamiento de aguas residuales en reactores UASB, es que

2.3. Proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB

presenta un alta eficacia de remoción, incluso a altas velocidades de carga y bajas temperaturas, se puede construir fácilmente a escala piloto e industrial, es una tecnología de bajo costo y operación simple, tiene un bajo requerimiento de espacio para su construcción, no requiere energía y la producción de lodos es baja en comparación con la digestión aerobia. El reactor UASB permite tratar cargas orgánicas volumétricas mayores y es el único proceso anaerobio que remueve nitrógeno, en muchos casos puede reemplazar el tratamiento primario, sin embargo, su efluente debe ser tratado para la remoción de materia orgánica remanente, nutrientes y patógenos.

En la Figura 2.4 se presenta un esquema típico de un reactor UASB, la parte inferior corresponde a la zona de reacción en la cual se encuentra dispuesta la mayor cantidad de biomasa en forma de gránulos, seguida de una zona de clarificación y finalmente, en la parte superior se encuentra la zona de separación líquido, sólido y gas, en la cual se encuentra la campana de recolección del biogas (principalmente metano y dióxido de carbono).

La desestabilización en el bioreactor puede estar asociada a la disminución del tiempo de residencia, mezcla no homogénea, alta concentración de sólidos a la entrada, presencia de sustancias tóxicas o cambios de temperatura, y puede llegar a ocasionar el lavado del reactor. Uno de los principales causantes de desestabilización de los reactores UASB es la acumulación de productos intermedios generados del mecanismo de la reacción, actuan-

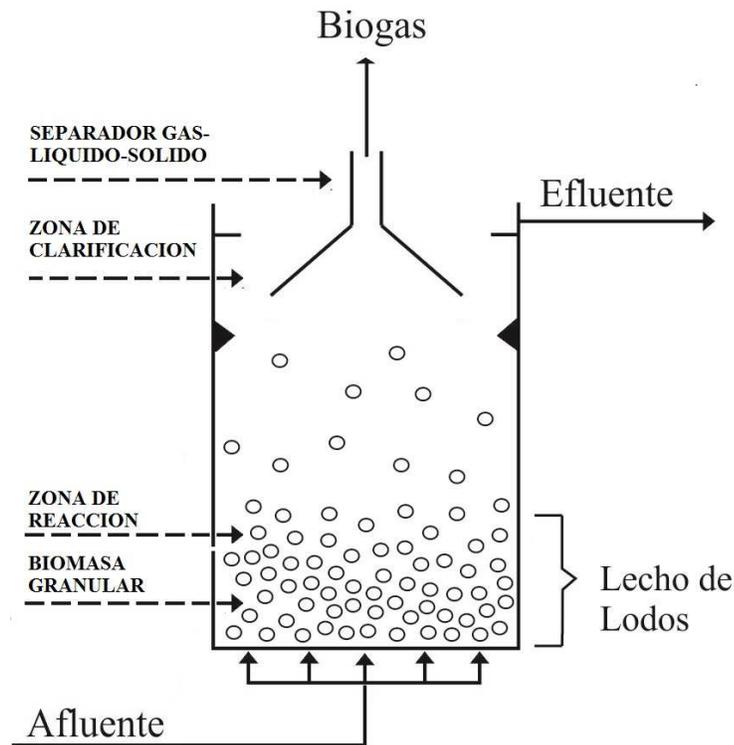


Figura 2.4.: Reactor UASB

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

do como inhibidores, generalmente por la acumulación de ácidos grasos volátiles (AGV). Otros de los principales factores que afectan el funcionamiento y desempeño de los digestores anaerobios son la capacidad y diseño del reactor, la temperatura, el pH, el tiempo de retención hidráulico y amoníaco [47, 60, 51, 6]. A continuación se enumeran las principales característica de los afectores que pueden afectar significativamente el funcionamiento y desempeño del reactor.

- **Capacidad y diseño del reactor:** el reactor debe estar diseñado para retener la biomasa bajo condiciones variables; a mayor concentración de células activas retenidas, se pueden tratar cargas orgánicas más altas. Por otra parte, el sistema de separación de gas-sólido-líquido también es un factor clave de diseño y operación en reactores anaerobios.
- **Tiempo de retención hidráulica (TRH):** el TRH debe ser suficiente para permitir un contacto estrecho entre los lodos y el sustrato, de acuerdo con Martínez et. al [6] para este tipo de reactores está determinado por la velocidad de crecimiento específico del microorganismo con crecimiento más lento en el sistema.
- **Temperatura:** la temperatura afecta directamente la actividad y el crecimiento bacteriano, así como la la solubilidad de los gases generados en el proceso. Existen tres rangos de temperatura definidos para el desarrollo del proceso: Psicrófilo (25°C), mesófilo (entre 25°C y 45°C) y termófilo (45°C). La mayoría de biorreactores y/o digestores anaerobios operan a una temperatura entre 30°C y 35°C , propiciando la formación de CH_4 .
- **pH:** el pH regula la coexistencia de poblaciones de microorganismos, siendo la actividad de la población metanogénica la más vulnerable a los cambios en el pH. Existen tres tipos de bacterias de acuerdo al pH, las acidófilas que crecen mejor en pH menor de 7, las neutrófilas que se desarrollan en un pH alrededor de 7 y las alcalófilas o basófilas, que son las que se desenvuelven mejor en un pH mayor a 7.8 [61]. El rango de tolerancia para microorganismos anaerobios se encuentra entre 6.8 a 7.5 de pH. Los valores de pH menores a 4.5 y superiores a 8.3 presentan inhibición de la actividad de todos los microorganismos implicados en el proceso.
- **Concentración de ácidos grasos volátiles (AGV):** los AGV son el sustrato para las bacterias metanogénicas, una alta concentración de AGV disminuye la velocidad de crecimiento de las bacterias metanogénicas, es decir que disminuye la tasa de consumo de ácidos, provocando una acidificación del reactor.
- **Relación de alcalinidad AGV:** la alcalinidad es el índice tampón del medio anaerobio, en presencia de un incremento de la concentración de AGV se neutraliza por efecto tampón de la alcalinidad debida al bicarbonato formándose la alcalinidad debida a los AGV. Un aumento en la alcalinidad debida a los AGV superior a la

2.4. Caso de estudio: proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviados

alcalinidad por bicarbonato, genera inestabilidad en el proceso. Por lo tanto, la relación de alcalinidad AGV es útil para determinar la acumulación de AGV en reactores anaerobios, un valor de 0.2 indica que el reactor opera normalmente hasta un máximo de 0.4, aunque un valor de 0.35 indica acidificación.

- **Amoniaco:** El amoníaco se produce por la degradación biológica de la materia nitrogenada, en su mayoría en forma de proteínas y urea. La cantidad de amoniaco que se genera a partir de una biodegradación anaeróbica de sustrato orgánico se presenta principalmente en forma de amoniaco libre generando inhibición en el mecanismo de reacción. Algunos estudios han demostrado que los microorganismos metanógenos son los menos tolerantes y los más propensos a inhibir su crecimiento por amoniaco [60].

2.4. Caso de estudio: proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviados

2.4.1. Generalidades del proceso de tratamiento de lixiviados

El lixiviado es un líquido generado principalmente por la descomposición de residuos dentro del relleno sanitario, la percolación de aguas lluvias y el contenido de humedad inherente de los desechos [62, 63, 64]. Los análisis de toxicidad realizados a lixiviados, han demostrado que este líquido es altamente tóxico, dado a que presentan un alto contenido de materia orgánica, nitrógeno de amonio, compuestos inorgánicos, sales inorgánicas, cloruro orgánico, metales pesados y materiales tóxicos como sustancias orgánicas xenobióticas [64, 65, 66] con altos valores de demanda bioquímica de oxígeno (DBO) y demanda química de oxígeno (DQO) [67].

La predicción exacta de la composición de los lixiviados durante la vida de un relleno sanitario es problemático [62], debido a que su composición varía dependiendo de diferentes factores como la composición de los residuos, los complejos procesos químicos y biológicos que ocurren dentro del relleno, la hidrología del vertedero, la antigüedad del relleno, la ingeniería y el clima [65, 62, 66], además, la composición del lixiviado también varía en los diferentes puntos de salida del relleno sanitario.

Comúnmente, los lixiviados se clasifican por la edad en tres etapas: jóvenes (menos de 5 años), medianos (5–10 años) y antiguos (más de 10 años). En la Tabla 2.2, se indican las composiciones típicas de lixiviados de rellenos sanitarios. La propiedad más representativa para determinar la edad del lixiviado, es la relación DBO/DQO, la cual está directamente relacionada con la biodegradabilidad. La relación de DBO/COD para lixiviados jóvenes se encuentra en los rangos de [0.5,1.0], los lixiviados medianos en el rango [0.1–0.5] y los lixiviados antiguos en una relación menor a 0.1 [65].

Por su alta toxicidad, los lixiviados constituyen un riesgo potencial para la población y los ecosistemas circundantes [68], representando un problema ambiental ya que pueden

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

contaminar el suelo, y corrientes de agua superficiales y subterráneas. Es obligatorio para los rellenos sanitarios, implementar sistemas de tratamiento que reduzcan la carga contaminante y cumplan con ciertos valores permisibles de descarga al medio receptor [63, 67]. Usualmente las entidades reguladoras establecen límites de DQO y DBO, los cuales son variables que miden la cantidad de materia orgánica presente en el agua residual. En Colombia, el Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible es el ente encargado de emitir las políticas ambientales nacionales, las regulaciones del medio ambiente aplicables y los estándares de contaminación permitidos.

Muchos procesos de tratamiento han sido estudiados para controlar la contaminación causada por los lixiviados, siendo los procesos de tratamiento biológicos los sistemas de tratamiento más comúnmente usados, incluyendo los procesos aeróbicos y anaerobios. Estos procesos han demostrado ser los sistemas de tratamiento más eficaces y económicos para el tratamiento de lixiviados con una alta relación de DBO/DQO [66, 67]. Para el tratamiento

Tabla 2.2.: Características típicas del lixiviado de rellenos sanitarios [52]

Componente	Antigüedad del relleno	
	Nuevo (<2 años)	Antiguo (>10 años)
Concentración orgánica		
DQO (mg/L)	3.000-60.000	100-500
DBO ₅ (mg/L)	2.000-30.000	100-200
COT (mg/L)	1.500-20.000	80-160
Sólidos totales en suspensión (mg/L)	200-2.000	100-400
Nitrógeno total (mg/L)	20-1.500	100-200
Fósforo total (mg/L)	5-100	5-10
Alcalinidad (mg/L CaCO ₃)	1.000-10.000	200-1.000
Sales solubles (Cl, SO ₄)	200-4.000	100-500
Hierro (mg/L)	50-1.200	20-200
Plomo (mg/L)	1-10	0.01-0.5
Zinc (mg/L)	25-250	0.1-10
pH	5-8	6.6-7.5

2.4. Caso de estudio: proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviados

de lixiviados con una relación DBO/DQO entre 0.7 (sin degradar) y 0.3 (parcialmente estabilizado), el tratamiento anaerobio ofrece ventajas respecto a los procesos aerobios, ya que tienen menor producción de lodos, menores requerimientos de energía, costos más bajos de operación y es poco probable que los sólidos en suspensión del lixiviado obstruyan los medios de filtración [52].

En este trabajo, como caso de estudio se asume un reactor anaerobio de flujo ascendente con manto de lodos (UASB) para el tratamiento de lixiviados de vertedero de la ciudad de Manizales (Colombia). Los lixiviados provenientes de diferentes puntos de salida del vertedero, son mezclados en un homogenizador antes de su ingreso al reactor UASB. El reactor consta de dos unidades, cada una con una capacidad en volumen de 90 m³. El flujo de entrada se distribuye en cada unidad por una canaleta superior dotada de vertederos que alimentan tubos laterales de dos pulgadas y entregan el flujo uniformemente en el fondo del reactor. El lixiviado de entrada al reactor contiene concentraciones significativas de materia orgánica biodegradable, con una relación promedio de 0,5 DBO/DQO, ácidos grasos volátiles y biomasa. En la Figura 2.5, se presenta un esquema general de la planta de tratamiento de aguas residuales (PTAR) de lixiviados, hasta la unidad de digestión anaerobia.

El reactor se encuentra diseñado para un tiempo de retención hidráulico de 24 horas, y para un caudal máximo total de lixiviado de 2 L/s. Cada unidad tiene una salida de fondo y válvulas que aseguran la purga parcial de lodos y la extracción de muestras. El efluente se recoge por una canaleta lateral y descarga en un conjunto de tuberías hasta la cámara, donde se pueden realizar mediciones.

Los gases generados se conducen desde el interior de cada reactor hacia la superficie, acumulándose en campanas que lo llevan hasta la chimenea, donde se quema en forma permanente con el fin de lograr la destrucción del metano generado [58, 69].

2.4.2. Caracterización del afluente y efluente del reactor UASB

A pesar de la existencia de caracterizaciones típicas de aguas residuales, las características de cada agua residual son únicas[53]. Por lo tanto resulta necesario realizar una caracte-

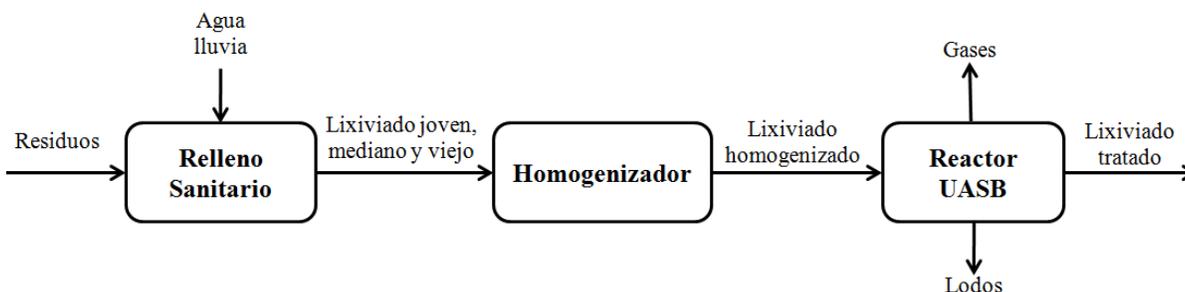


Figura 2.5.: Esquema general planta de tratamiento de lixiviados

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

Tabla 2.3.: Valores característicos del flujo de entrada y salida del reactor UASB

Componente	Rango de Entrada	Rango de Salida
Demanda biológica de oxígeno (DBO), mg/L	[3000-10000]	[1000-3000]
Demanda química de oxígeno (DQO), mg/L	[7000-20000]	[3000-10000]
Sólidos suspendidos totales (SST), mg/L	[200-2000]	[200-7000]
Acidos grasos volátiles (AGV), mg/L	[400-1200]	[100-500]
Sólidos suspendidos volátiles (SSV), mg/L	[100-2700]	[100-2700]
Temperatura, °C	[17-26]	[17-26]
pH	[7.0-8.5]	[7.0-8.5]
Caudal, L/s	[0.1-2.0]	[0.1-2]

rización del afluente y efluente del reactor UASB, lo cual implica un programa de muestreo que asegure la representatividad de la muestra y un análisis de laboratorio haciendo uso de metodologías estandarizadas que garanticen la precisión y exactitud en los resultados, como el *Standard methods for the examination of water and wastewater* [55].

Los datos experimentales utilizados para el desarrollo de este trabajo corresponden a análisis realizados a muestras puntuales y compuestas tomadas a la entrada y salida del reactor UASB para el tratamiento de lixiviados, a condiciones normales de operación. Las muestras puntuales o simples, representan las características del agua para el instante de muestreo, y las muestras compuestas son una mezcla de muestras individuales tomadas a intervalos de tiempo constantes; las muestras compuestas aseguran representatividad y detectan efectos de la descarga variable de diferentes contaminantes. El bioreactor no cuenta con instrumentación para mediciones en línea, por lo tanto, el muestreo manual y el análisis de parámetros se realizó por un laboratorio externo, basado en los métodos de análisis establecidos en el Standard Methods (SM) [55]. Para los muestreos se realiza toma de muestras simples cada hora y muestras compuestas cada cuatro horas. En total para este estudio se cuenta con un conjunto de 23 datos histórico en periodos de tiempo espaciados y a diferentes condiciones de operación del bioreactor, esto garantiza la representatividad de los datos.

Las variables consideradas para este estudio son: demanda biológica de oxígeno (DBO), demanda química de oxígeno (DQO), pH, temperatura, ácidos grasos volátiles (AGV), sólidos suspendidos volátiles (SSV) y sólidos suspendidos totales (SST). De acuerdo a los reportes del laboratorio externo que realiza los análisis, la DBO y DQO se determinaron por incubación (SM 5210 B) y reflujo cerrado (SM 5220 C), respectivamente. El pH y la temperatura se midió siguiendo el método electrometría (SM 4500-H+ y SM 2550 B, respectivamente), mientras que los AGV se determinaron por destilación (SM 5560 C).

Finalmente, las mediciones de SSV y SST, se realizaron por gravimetría (SM.2540 E y SM 2540 D, respectivamente).

En la Tabla 2.3, se presenta el rango de valores característicos de entrada y salida del reactor UASB para el tratamiento de aguas residuales de lixiviados de vertedero. El flujo de entrada corresponde a la entrada del reactor y el flujo de salida del reactor, corresponde al lixiviado tratado por el proceso de digestión anaerobia.

2.5. Modelo matemático simplificado del proceso

La digestión anaerobia es un proceso que implica múltiples etapas por la acción de diferentes grupos bacterianos, con pasos limitantes que determinan la velocidad del proceso [27], dependen principalmente de las características del agua residual. La hipótesis de paso limitante conduce a modelos más simples y fácilmente utilizables sobretodo para fines de control [70]. En este trabajo con el fin de representar la dinámica del proceso de digestión anaerobia en el reactor UASB para el tratamiento de lixiviado usado como caso de estudio, se presenta una extensión del modelo propuesto por Bernard et. al. [7] asumiendo que la dinámica del sistema presenta dos etapas principales: etapa metanogénica y etapa acidogénica. La acidogénesis es la etapa en la cual las moléculas orgánicas solubles son catabolizadas por grupos de microorganismos generando principalmente ácidos grasos volátiles y dióxido de carbono, que pueden ser utilizados por las bacterias metanogénicas para la formación de metano y dióxido de carbono [71]. Las reacciones asociadas a estas etapas se puede describir de la siguiente forma:

- Etapa acidogénica (con velocidad de reacción μ_1):



- Etapa metanogénica (con velocidad de reacción μ_2):



donde las constantes k_1 , k_2 y k_4 corresponden a los coeficientes estequiométricos asociados al consumo de sustrato orgánico (S_1) por las bacterias acidogénicas (X_1), producción de ácidos grasos volátiles (S_2) y dióxido de carbono (CO_2) en el proceso de acidogénesis, respectivamente. k_3 , k_5 y k_6 representan los coeficientes estequiométricos asociados al consumo de ácidos grasos volátiles (S_2) por acción de las bacterias metanogénicas (X_2), y producción de dióxido de carbono CO_2 y metano CH_4 durante el proceso de metanogénesis.

El modelo extendido involucra los efectos de inhibición por pH y temperatura para realizar una correcta simulación del proceso. El pH y la temperatura afectan directamente las velocidades de crecimiento de los microorganismos anaerobios en el proceso de digestión. Otros compuestos tóxicos también afectan la velocidad de crecimiento de los microorganismos,

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

esta inhibición se define en función de la reversibilidad y el parámetro cinético afectado, en este caso se involucra el efecto por inhibición acompetitiva en la etapa metanogénica.

En la Figura 2.6 se encuentra una representación gráfica del proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB. Donde, S_1^0 y S_1 , corresponde a la concentración de sustrato orgánico a la entrada y salida del reactor, respectivamente, medido en términos de la demanda química de oxígeno (DQO), S_2^0 y S_2 corresponde a la concentración de ácidos grasos volátiles (AGV), X_1^0 y X_1 corresponde a la concentración de biomasa acidogénica, y X_2^0 y X_2 a la concentración biomasa metanogénica. La biomasa se mide en términos de sólidos suspendidos volátiles (SSV), por lo tanto, corresponde a la suma de biomasa acidogénica y biomasa metanogénica, $SSV \cong X_1 + X_2$.

La concentración de biomasa acidogénica y metanogénica, X_1 y X_2 , la concentración de sustrato orgánico, S_1 , y la concentración de ácidos grasos volátiles, S_2 , se consideran como variables de estado del modelo dinámico que describe el comportamiento del sistema en fase líquida.

El balance por componente i en cualquier instante t se realiza de acuerdo a la ecuación de continuidad para un sistema abierto [72]:

$$\text{acumulación} = \text{entrada} - \text{salida} + \text{generación}.$$

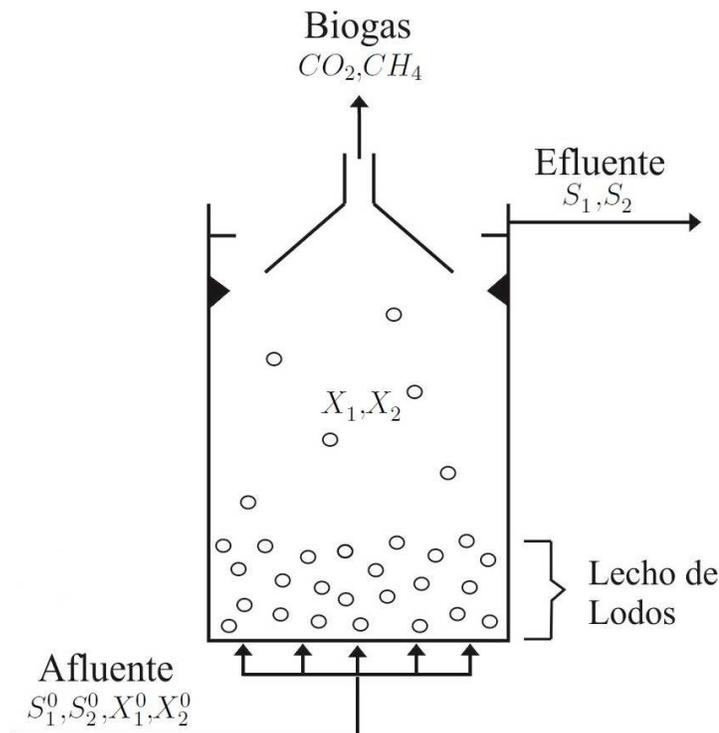


Figura 2.6.: Proceso de digestión anaerobia

Por lo tanto, el balance de masa por componente en la fase líquida se encuentra expresado como

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{C_i^0 q_{ent}}{V_{liq}} - \frac{C_i q_{sal}}{V_{liq}} + \sum_{j=1-2} \nu_{i,j} \mu_j, \quad (2.3)$$

donde C_i corresponde a la concentración másica del componente i , ν_i es el coeficiente de velocidad del componente i y μ velocidad cinética de la etapa j .

A continuación se presentan las ecuaciones del modelo dinámico por etapas y componente.

■ Etapa Acidogénica

$$\frac{dX_1}{dt} = D (X_1^0 - \alpha X_1) + \bar{\mu}_1 X_1 - k_d X_1, \quad (2.4)$$

$$\frac{dS_1}{dt} = D (S_1^0 - S_1) - k_1 \bar{\mu}_1 X_1. \quad (2.5)$$

■ Etapa Metanogénica

$$\frac{dX_2}{dt} = D (X_2^0 - \alpha X_2) + \bar{\mu}_2 X_2 - k_d X_2, \quad (2.6)$$

$$\frac{dS_2}{dt} = D (S_2^0 - S_2) + k_2 \bar{\mu}_1 X_1 - k_3 \bar{\mu}_2 X_2, \quad (2.7)$$

donde, S_1^0, S_2^0, X_1^0 y X_2^0 corresponden a las concentraciones de entrada en la fase líquida de sustrato (DQO), ácidos grasos volátiles (AGV) y biomasa (VSS), respectivamente. D es el factor de dilución y se define como la relación entre el caudal (q) y el volumen ocupado por el líquido en el interior del digestor anaerobio.

El parámetro $\alpha \in [0, 1]$ representa la proporción de bacterias que son afectadas por la dilución en el bioreactor, $\alpha = 0$ corresponde a un reactor ideal de lecho fijo y $\alpha = 1$ a un reactor ideal continuo de mezcla completa. Para las velocidades de crecimiento de biomasa, μ_1 and μ_2 , se considera la cinética de Monod [73] para el crecimiento de biomasa acidogénica ((2.8)), y la expresión de inhibición acompetitiva o modelo propuesto por Haldane [74] para la metanización ((2.9)).

$$\bar{\mu}_1 = \frac{\mu_{1 \text{ máx}} S_1}{K_{S1} + S_1} \Theta^{T-20} I_{pH} \quad (2.8)$$

$$\bar{\mu}_2 = \frac{\mu_{2 \text{ max}} S_2}{K_{S2} + S_2 + \frac{S_2^2}{K_I}} \Theta^{T-20} I_{pH} \quad (2.9)$$

donde, Θ^{T-20} representa la inhibición por temperatura e I_{pH} representa la inhibición por pH.

2.5.1. Inhibición por temperatura

La temperatura es un factor clave en el crecimiento y supervivencia de los microorganismos, para cada grupo bacteriano existe una temperatura mínima por debajo de la cual no se observa crecimiento (estado de latencia), una temperatura óptima a la que se produce el crecimiento óptimo y una temperatura máxima por encima de la cual no es posible el desarrollo y el microorganismo muere [61, 75].

Según Tchobanoglous [1] el rango de temperatura óptima para la actividad de los microorganismos bacterianos se encuentra entre 25-35 °C, cuando la temperatura disminuye hasta alrededor de 15 °C las bacterias metanogénicas pueden llegar a inactivarse. De acuerdo a Madonado [76] para el caso de las bacterias metanogénicas el rango óptimo es de 29-37 °C, fuera de este rango la actividad metabólica se ve reducida significativamente afectando directamente el tiempo de digestión (a menor temperatura mayor tiempo de digestión).

La estimación de los efectos por temperatura sobre la velocidad de reacción se encuentra dada por la ecuación de Arrhenius (Ver Anexo A). La velocidad de crecimiento microbiano se encuentra altamente influenciada por la temperatura y su efecto sobre la actividad celular se expresa de la siguiente forma [1]:

$$\frac{r_T}{r_{20}} = \Theta^{(T-20)} \quad (2.10)$$

donde, r_T es la tasa de actividad a T °C, r_{20} es la tasa de actividad a 20°C (V_{liq}), Θ es el coeficiente de actividad por temperatura y T la temperatura en °C. El coeficiente de actividad por temperatura se encuentra en un rango entre 1.04 y 1.09 según Crites [77], y entre 1.02 y 1.10 según Tchobanoglous [1].

2.5.2. Inhibición por pH

El pH es un factor determinante en el metabolismo y reproducción de las bacterias, su variación puede inactivar el sistema metabólico y destruir los microorganismos; la acidez o basicidad del medio influye en el tipo de microorganismos predominantes en el digester anaerobio y su desempeño, ya que cada grupo presenta un grado de sensibilidad distinto frente a este parámetro [78, 61]. Según Sánchez [79] el rango de tolerancia para microorganismos anaerobios se encuentra entre 6.8 a 7.4, rango en el cual se proporcionan condiciones óptimas de operación para el biorreactor particularmente para el crecimiento de las bacterias metanogénicas.

Generalmente la ausencia de crecimiento se produce a pH inferiores a 4-5 y por encima de pH de 9-9.5. Los microorganismos responsables de realizar la etapa acidogénica durante la metanogénesis pueden trabajar a pH superiores a 5, en contraste las bacterias metanogénicas soportan rangos de pH de 6.4-7.8, por debajo de 6.2 se inhibirá completamente su actividad. El pH presente en el digester es función de la producción de ácidos grasos volátiles y de la alcalinidad, los ácidos grasos son productos intermedios y generan desestabilización del bioreactor. Cuando ocurre la acidificación del reactor por acumulación de

Tabla 2.4.: Parámetros del modelo matemático simplificado

Parámetro	Descripción	Valor
k_1	coeficiente de rendimiento para la degradación de sustrato DQO, mg DQO/mg X_1	10.67
k_2	rendimiento producción AGV, mg AGV/mg X_1	0.43
k_3	rendimiento consumo AGV, mg AGV/mg X_2	1.12
α	proporción de velocidad de dilución de bacteria	0.6
K_{S1}	constante de saturación media asociada a S_1 , mg/L	14522
K_{S2}	constante de saturación media asociada a S_2 , mg/L	2507
K_I	constante de inhibición asociada a S_2 , mg/L	1033,62
k_d	velocidad de decaimiento de biomasa, adimensional	0,02 ^a
pH_{LL}	límite inferior de pH, adimensional	6.0
pH_{UL}	límite superior de pH, adimensional	8.0
Θ	Coficiente de actividad de temperatura, adimensional	1,04 ^b
μ_{1max}	velocidad máxima de crecimiento bacterias acidogénicas	1.07
μ_{2max}	velocidad máxima de crecimiento bacterias metanogénicas	0.81

^a De [46] ^b De [77, 1]

ácidos grasos volátiles las bacterias metanogénicas se inhiben. Al igual que las bacterias metanogénicas, la actividad de las bacterias acidogénicas se ven afecta por el pH. La disminución del pH favorece la generación de los ácidos grasos volátiles de alto peso molecular. La inhibición por pH puede ser expresada matemáticamente como lo propone Angelidaki [30],

$$I_{pH} = \frac{1 + 2 \times 10^{0,5(pH_{LL} - pH_{UL})}}{1 + 10^{(pH - pH_{UL})} + 10^{0,5(pH_{LL} - pH)}}. \quad (2.11)$$

donde, pH_{UL} y pH_{LL} corresponden a los límites superior e inferior de pH para los cuales la velocidad específica de crecimiento microbiano se reduce al 50 % de su valor, sin ningún tipo de inhibición.

El factor I_{pH} es determinado principalmente por la concentración de las especies iónicas vigentes en el medio, así como por el tipo de bacterias predominantes. Esta expresión se utiliza cuando se puede producir inhibición por pH alto y bajo [3].

2. Modelado del procesos digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado

Tabla 2.5.: Comparativo de modelos simplificados digestión anaerobia

Modelo	Orden	Etapas	Fases	Cinética (en función de)
Angelidaki et.al. [30]	N.A.	hidrólisis-acidogénesis acetogénesis metanogénesis	Líquido-Gas	Monod (temperatura, pH)
Bernard et.al. [7]	6	acidogénesis metanogénesis	Líquido-Gas (desacoplada)	Monod y Haldane
Muñoz et.al. [46]	3	metanogénesis	Líquido-Gas	Monod (temperatura)
Martinez et.al. [20]	5	acidogénesis metanogénesis	Líquido-Gas	Monod (pH)
	3	metanogénesis	Líquido-Gas	Monod (pH)
Alzate et.al.	4	acidogénesis	Líquido	Monod y
		metanogénesis		Haldane (temperatura, pH)

2.5.3. Ajuste de parámetros del modelo

Se emplearon los datos experimentales obtenidos del proceso real de tratamiento de lixiviado, para la calibración y validación del modelo matemático simplificado del sistema. Los valores de los parámetros cinéticos k_d , α y Θ se ajustaron heurísticamente basados en los rangos y valores reportados en la literatura [30, 77, 7, 3, 1, 46, 6]. La identificación de los coeficientes de rendimiento se calcularon con base en las ecuaciones del modelo matemático en estado estable usando el conjunto de datos experimentales disponibles del reactor UASB. Los valores de los parámetros k_1 , k_2 , k_3 , K_{S1} , K_{S2} , K_I , μ_{1max} y μ_{2max} se determinaron utilizando la función *fminsearch* del toolbox de optimización de Matlab, hasta que se cumplió con el criterio de error. A pesar de que los datos experimentales corresponden a diferentes puntos de operación fue posible determinar un conjunto de valores promedio de los parámetros de forma tal que se ajustarán a los datos experimentales. Los valores de los parámetros del modelo dinámico del sistema de tratamiento de lixivios se presentan en la Tabla 2.4.

2.6. Conclusiones

En este capítulo se presenta una extensión del modelo simplificado propuesto por Bernard [7] para un reactor UASB de la planta de tratamiento de lixiviado. El modelo se basa en el balance de masa de la fase líquida del proceso de digestión anaerobia, asumiendo que la reacción presenta dos etapas principales: etapa acidogénica y etapa metanogénica. Se asume la cinética de Monod para representar el crecimiento de biomasa acidogénica y el modelo de Haldane para la cinética de la etapa metanogénica, el modelo incluye la velocidad de decaimiento de los microorganismos y los factores de inhibición por temperatura y pH. En la Tabla 2.5, se presenta un resumen comparativo de modelos simplificados que han sido utilizados para representar el proceso de digestión anaerobia con el fin de resaltar el aporte que genera el modelo propuesto en esta tesis.

Para calibrar y validar el modelo e identificar los parámetros del proceso se emplea un conjunto de datos reales. El conjunto de datos representa diferentes puntos de operación del bioreactor, fueron adquiridos en tiempos espaciados, con el fin de garantizar representatividad de la muestra. El bioreactor no cuenta con instrumentación para realizar mediciones en línea, por lo tanto, el muestreo manual y análisis de ensayos se realizó por un laboratorio externo. Las características del lixiviado son específicas en cada muestreo, ya que su composición depende del tipo de residuos del relleno, de la tasa de evaporación y precipitación neta, y del sitio de drenaje del lixiviado. La incertidumbre del modelo se encuentra asociada a la variabilidad de la cinética de las reacciones que intervienen, siendo las velocidades máximas de reacción parámetros variables en el tiempo.

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

En este capítulo se presenta el análisis del modelo de digestión anaerobia que describe el comportamiento dinámico del reactor UASB para el tratamiento de lixiviado. El proceso de digestión anaerobia se caracteriza por una dinámica altamente no lineal, con limitaciones en sus variables de estado, parámetros y variables de control. Inicialmente se realiza el análisis de las velocidades de crecimiento ante variaciones en la temperatura y pH, y se estudian de forma analítica los puntos de equilibrio del sistema con significado físico, posteriormente se describe una metodología para la solución no trivial del sistema de ecuaciones como un problema de optimización no lineal y la caracterización de los puntos de equilibrio en el sentido de Lyapunov. Finalmente, se realiza un análisis de bifurcaciones variando el parámetro factor de dilución, temperatura y pH, con el fin de evaluar el desempeño del bioreactor ante variaciones en estos parámetros. A partir del diagrama de continuación de puntos de equilibrio se observa el comportamiento del sistema ante variaciones en los parámetros y se identifican rangos de operación óptimas con fines de control.

3.1. Antecedentes

El análisis dinámico es una herramienta que proporciona un marco sistemático para el estudio del comportamiento de los sistemas no lineales y su sensibilidad ante variaciones en los parámetros. Los sistemas no lineales se caracterizan por dar respuesta a entradas externas de forma muy diferente que los sistemas lineales debido a la ausencia de linealidad y al principio de superposición, por lo tanto su comportamiento presenta mayor complejidad que el comportamiento de los sistemas lineales.

En efecto, la dinámica de los sistemas no lineales exhibe ciertos fenómenos que no se evidencian al estudiar los sistemas lineales, como la existencia de múltiples puntos de equilibrio aislados cuya estabilidad depende de las condiciones iniciales, escape de tiempo finito, ciclos límites (oscilaciones de amplitud y periodo fijo sin perturbación externa), bifurcaciones por cambios en la estabilidad de los puntos de equilibrio ante variaciones en los valores de los parámetros, y caos [80, 81].

El propósito del análisis de la dinámica del proceso es conocer el comportamiento y carac-

terísticas no lineales ante variaciones en sus parámetros, principalmente con fines de control y determinación de estrategias operativas apropiadas. El proceso de digestión anaerobia presenta una complejidad inherente, caracterizado por la presencia simultánea de tres fases: líquida, sólida y gaseosa, con gradientes de temperatura y concentración de biomasa y sustrato, coexistiendo fenómenos de transferencia y de transformación bioquímica y de generación de superficie.

La dinámica no lineal de modelos simplificados de sistemas de digestión anaerobia ha sido un área de investigación muy activa en los últimos 10 años. Inicialmente, Grogard y Bernard [82] presentan un análisis de los parámetros asociados al objetivo de control, basados en el modelo de digestión anaerobia propuesto por Bernard [7]. En el 2007, Shen et. al. [83] presentan el análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia, basado en un modelo simplificado dos dimensional derivado de una dinámica seis dimensional con cinéticas no lineales. Hess y Bernard [84] en el 2008 publicaron un estudio de la dinámica del proceso basado en el modelo simplificado propuesto por [7], en este estudio se propone un criterio para evaluar el riesgo del proceso, el cual fue aplicado en una planta real demostrando que el criterio como estrategia de monitoreo permite detectar rápidamente las condiciones de una desestabilización del proceso. Posteriormente, en el año 2009, Hess y Bernard [85] presentaron una extensión del estudio anterior, incluyendo una metodología para evaluar la evolución del sistema por zonas y monitorizar en tiempo real su trayectoria. La estrategia propuesta se aplica a un proceso basado en el modelo ADM1 demostrando ser más eficiente.

Rincón et. al. [86] presentaron el análisis dinámico del modelo propuesto por [7], demostrando que la condición de lavado en el reactor se produce después de una bifurcación transcítica y una bifurcación fold con respecto al parámetro de dilución. Dimitrova y Krastanov [87] presentan un estudio de la estabilidad y equilibrios realizado un análisis de bifurcación del modelo propuesto por [7]. Por su parte, Sbarciog et. al. [88] publican el estudio de la dinámica de la digestión anaerobia teniendo en cuenta el carácter de la cinética (con o sin inhibición), proponiendo una metodología para estimar la separatriz que divide las cuencas de atracción de los puntos de equilibrio estables.

Finalmente, Benyahia et. al. [21] presentan un análisis matemático completo del modelo en dos etapas propuesto por [7], la í de análisis empleada, se podría definir como una metodología genérica, la cual puede ser empleada para el análisis de cualquier bioproceso de dos etapas. Además, en el análisis general, se incluye el concepto de “overloading tolerance”, con el fin de ser capaces de controlar procesos anaerobios bajo condiciones generales de funcionamiento no consideradas en otros estudios.

3.2. Efectos de la temperatura y el pH sobre las velocidades cinéticas de reacción

La velocidad de crecimiento microbiano de la etapa acidogénica, $\bar{\mu}_1 = f(S_1, T, pH)$, se encuentra expresada por la cinética de Monod modificada ((2.8)), y la velocidad de crecimiento microbiano de la etapa metanogénica, $\bar{\mu}_2 = f(S_2, T, pH)$, se encuentra descrita por el modelo de inhibición de Haldane modificado (2.9).

Los modelos de crecimiento microbiano presentan diferentes comportamientos como se observa en las Figuras 3.1 y 3.2. El crecimiento microbiano de la etapa acidogénica presenta un comportamiento creciente positivo al aumentar S_1 , considerando $S_1 \geq 0$, hasta exhibir un valor máximo de crecimiento, $\mu_1(+\infty) = \mu_{1\text{máx}}$ e igual a cero para $S_1 = 0$. En la Figura 3.1 se muestra la influencia de la temperatura y el pH sobre la velocidad de crecimiento microbiano de Monod ($\bar{\mu}_1$) en función del sustrato orgánico S_1 . En la Figura 3.1(a), el comportamiento de la velocidad de crecimiento se obtiene en un rango de temperatura entre 10°C y 30°C. Como se observa en esta figura, a bajas temperaturas la velocidad de crecimiento se reduce dramáticamente ya altas temperaturas como 30°C, se obtiene la curva máxima de la tasa de crecimiento. La velocidad de crecimiento en función del pH se muestra en la Figura 3.1(b). Las simulaciones numéricas se realizan en el intervalo de pH 5.0-9.0 con el fin de comparar el rendimiento del biorreactor a diferentes valores de pH. En el caso del pH, a medida que los valores se alejan del valor del pH neutro (pH=7), se observa una notable disminución de la tasa de crecimiento en función de los valores del sustrato orgánico S_1 .

El modelo de inhibición por sustrato de Haldane, utilizado en la etapa metanogénica presenta velocidades de crecimiento altas a bajas concentraciones de S_2 , y velocidades de crecimiento bajas a altas concentraciones de sustrato, lo que indica el efecto tóxico que tiene el sustrato a altas concentraciones. El comportamiento presenta un crecimiento positivo para $0 \leq S_2 \leq S_2^{\text{máx}}$, un valor máximo para $S_2 = S_2^{\text{máx}}$, un comportamiento decreciente para $S_2 > S_2^{\text{máx}}$ y cero para $S_2 = 0$.

La Figura 3.2 muestra el comportamiento de la tasa de crecimiento de Haldane modificado en función de la concentración de VFA, temperatura y pH. En la Figura 3.2(a) se muestra la velocidad de crecimiento de Haldane ($\bar{\mu}_2$), ante variaciones en la temperatura, se emplean los valores de 10, 15, 20, 25, 30°C. Aquí, se observa una curva máxima de crecimiento a 30°C correspondiente a la temperatura óptima. a medida que la temperatura disminuye, la velocidad de crecimiento también disminuye como se observa en el comportamiento de las curvas presentadas en la gráfica. El efecto del pH sobre la cinética de crecimiento de Haldane se representa en la Figura 3.2(b). Aquí, la curva máxima de crecimiento microbiano se obtiene al valor óptimo del pH de 7.0, a medida que el pH se aleja de la neutralidad el comportamiento de la velocidad de crecimiento disminuye.

3.2. Efectos de la temperatura y el pH sobre las velocidades cinéticas de reacción

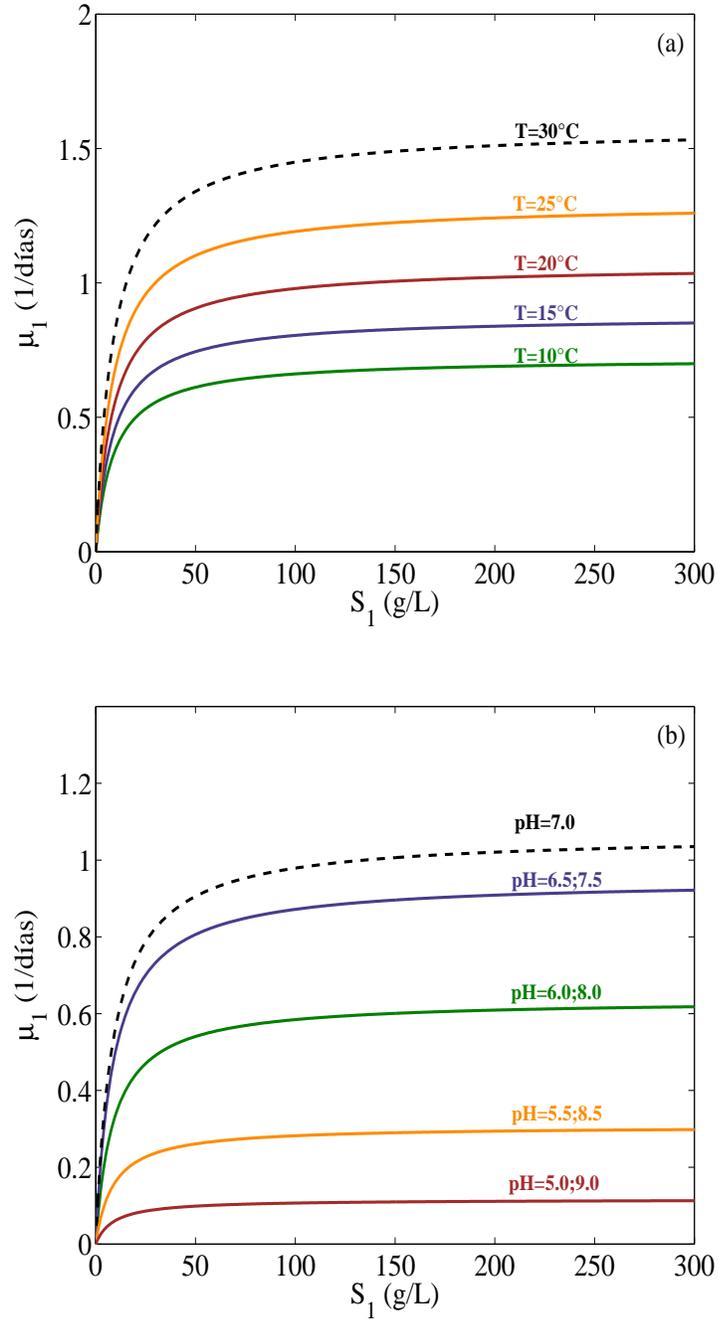


Figura 3.1.: Comportamiento del crecimiento microbiano empleando la cinética de Monod modificada ($\bar{\mu}_1$) en función del sustrato orgánico S_1 , (a) la temperatura, y (b) el pH. La línea punteada representa el comportamiento de la velocidad de crecimiento máximo a las condiciones de temperatura y pH óptimos, es decir, a $T=30^\circ\text{C}$ y $\text{pH}=7$.

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

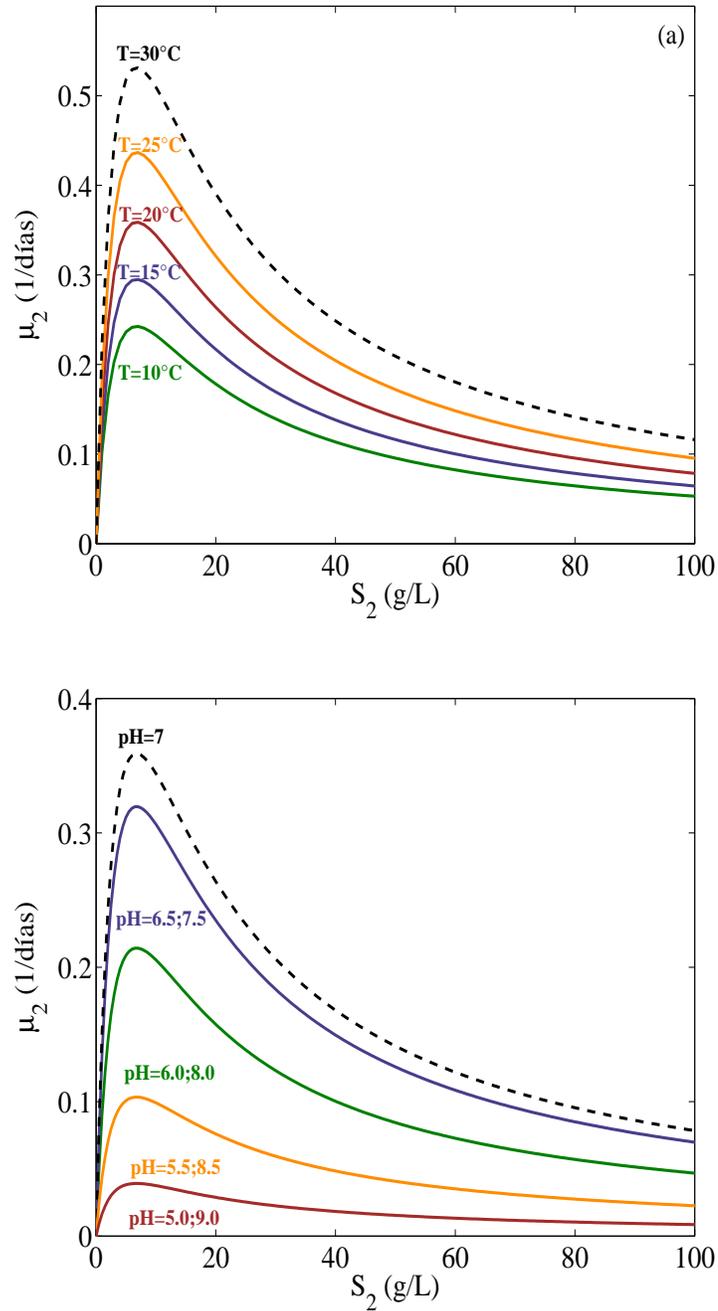


Figura 3.2.: Comportamiento del crecimiento microbiano empleando la cinética de Haldane modificada ($\bar{\mu}_2$) en función de la concentración de AGV S_2 , (a) la temperatura, y (b) el pH. La línea punteada representa el comportamiento de la velocidad de crecimiento máximo a las condiciones de temperatura y pH óptimos, es decir, a $T=30^\circ\text{C}$ y $\text{pH}=7$.

3.3. Análisis de los puntos de equilibrio

Considerando que el sistema dinámico es un sistema autónomo con un número finito de ecuaciones diferenciales ordinarias, y que un punto de equilibrio corresponde a un punto en el cual los estados del sistema permanecen, siempre y cuando no haya una fuerza externa actuando sobre ellos, lo cual implica que $\dot{x} = 0$ [80].

Los puntos de equilibrio son la solución del sistema dinámico no lineal propuesto en la Sección 2.5, igualadas a cero:

$$D (X_1^0 - \alpha X_1) + \bar{\mu}_1 X_1 - k_d X_1 = 0, \quad (3.1)$$

$$D (S_1^0 - S_1) - k_1 \bar{\mu}_1 X_1 = 0, \quad (3.2)$$

$$D (X_2^0 - \alpha X_2) + \bar{\mu}_2 X_2 - k_d X_2 = 0, \quad (3.3)$$

$$D (S_2^0 - S_2) + k_2 \bar{\mu}_1 X_1 - k_3 \bar{\mu}_2 X_2 = 0, \quad (3.4)$$

donde las velocidades de crecimiento microbiano, $\bar{\mu}_1$ y $\bar{\mu}_2$ se encuentra expresada por la cinética modificada de Monod y Haldane, respectivamente.

Los valores D , S_1^0 , S_2^0 , X_1^0 y X_2^0 , son positivos, y dado a que las variables de estado del sistema X_1 , X_2 , S_1 y S_2 , corresponden a las concentraciones de los compuestos involucrados en las reacciones químicas consideradas para la digestión anaerobia, se buscan soluciones no negativas del sistema, se asume que las siguientes desigualdades son válidas:

$$S_1 \leq S_1^0, \quad (3.5)$$

$$X_1 \geq X_1^0, \quad (3.6)$$

$$S_2 \leq S_2^0 + \frac{k_2}{k_1} S_1^0, \quad (3.7)$$

$$X_2 \geq X_2^0. \quad (3.8)$$

Las ecuaciones 3.1 y 3.2, asociadas a la etapa acidogénica se encuentran desacopladas con respecto a las variables S_2 y X_2 de la etapa metanogénica. Por lo tanto, la solución no trivial del sistema se encuentra definida por las siguientes expresiones:

$$X_1^{(*)} = \frac{(S_1^0 - S_1) D}{k_1 \mu_1(S_1) \Theta^{T-20} I_{pH}}, \quad (3.9)$$

$$S_1^{(*)} = \frac{(X_1^0 D) (k_1 \mu_1(S_1) \Theta^{T-20} I_{pH})}{\mu_1 \Theta^{T-20} I_{pH} - \alpha D - k_d} + S_1^0, \quad (3.10)$$

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

asumiendo,

$$\mu_1(S_1)\Theta^{T-20}I_{pH} - \alpha D - k_d > 0,$$

entonces,

$$D \in \left(0, \frac{\mu_1(S_1)\Theta^{T-20}I_{pH} - k_d}{\alpha}\right). \quad (3.11)$$

La solución trivial del sistema se relaciona con la condición de lavado por ausencia de biomasa acidogénica dentro del bioreactor, y esta dada por

$$S_1 = S_1^0 \wedge X_1 = 0 \quad (3.12)$$

Considerando 3.3 y 3.4 de la etapa metanogénica de la digestión anaerobia, la solución no trivial del sistema queda reducida a:

$$X_2^{(*)} = \frac{(k_1/k_2)(S_1^0 - S_1)D + (S_2^0 - S_2)D}{k_3\mu_2(S_2)\Theta^{T-20}I_{pH}}, \quad (3.13)$$

$$S_2^{(*)} = \frac{X_2^0(k_3\mu_2(S_2)\Theta^{T-20}I_{pH}) + (k_1/k_2)(S_1^0 - S_1)(\mu_2(S_2)\Theta^{T-20}I_{pH} - \alpha D - k_d)}{\mu_2(S_2)\Theta^{T-20}I_{pH} - \alpha D - k_d} + S_2^0, \quad (3.14)$$

asumiendo,

$$\mu_2(S_2)\Theta^{T-20}I_{pH} - \alpha D - k_d > 0.$$

Por lo tanto,

$$D \in \left(0, \frac{\mu_2(S_2)\Theta^{T-20}I_{pH} - k_d}{\alpha}\right). \quad (3.15)$$

El primer punto de equilibrio, corresponde a la solución no trivial del sistema,

$$E_1 = \left(X_1^{(1)}, S_1^{(1)}, X_2^{(1)}, S_2^{(1)}\right). \quad (3.16)$$

Sujeto a

$$D \in \left(0, \min\left(\frac{\mu_1(S_1)\Theta^{T-20}I_{pH} - k_d}{\alpha}, \frac{\mu_2(S_2)\Theta^{T-20}I_{pH} - k_d}{\alpha}\right)\right). \quad (3.17)$$

En un segundo caso, si,

$$S_2 = S_2^0, \quad (3.18)$$

entonces,

$$X_2^{(*)} = \frac{(k_1/k_2)(S_1^0 - S_1)D}{k_3\mu_2\Theta^{T-20}I_{pH}}. \quad (3.19)$$

El segundo punto de equilibrio del sistema,

$$E_2 = (X_1^{(1)}, S_1^{(1)}, X_2^{(2)}, S_2^0). \quad (3.20)$$

En un tercer caso, considerando la condición de lavado de las bacterias acidogénicas,

$$S_1 = S_1^0 \wedge X_1 = 0, \quad (3.21)$$

los puntos de equilibrio asociados a la etapa metanogénica quedan reducidos a

$$X_2^{(*)} = \frac{(S_2^0 - S_2)D}{k_3\mu_2(S_2)\Theta^{T-20}I_{pH}}, \quad (3.22)$$

$$S_2^{(*)} = \frac{X_2^0(k_3\mu_2(S_2)\Theta^{T-20}I_{pH})}{(\mu_2(S_2)\Theta^{T-20}I_{pH} - \alpha D - k_d)} + S_2^0. \quad (3.23)$$

Por lo tanto, el tercer punto de equilibrio,

$$E_3 = (0, S_1^0, X_2^{(3)}, S_2^{(3)}). \quad (3.24)$$

Finalmente, considerando que

$$S_2 = S_2^0, \quad (3.25)$$

el cuarto punto de equilibrio corresponde a la solución trivial del sistema, dada por

$$S_1 = S_1^0, X_1 = 0, S_2 = S_2^0, X_2 = 0. \quad (3.26)$$

Por lo tanto,

$$E_4 = (0, S_1^0, 0, S_2^0). \quad (3.27)$$

En la Figura 3.3, se presenta un diagrama esquemático en el cual se resumen los puntos de equilibrio del sistema (3.1 a 3.4), asumiendo válidas las condiciones 3.5 a 3.8.

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

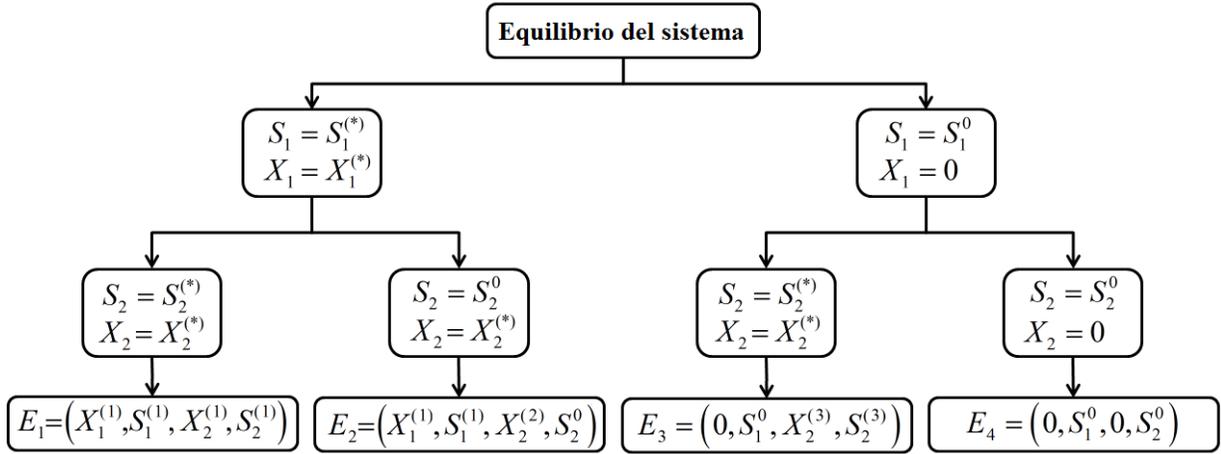


Figura 3.3.: Diagrama esquemático de los puntos de equilibrio del sistema

3.4. Análisis de bifurcaciones

La teoría de bifurcaciones facilita el estudio de los fenómenos, causados comúnmente por un cambio en uno o más parámetros obligando al sistema a un nuevo estado que difiere considerablemente del observado inicialmente. Matemáticamente, los estados de un sistema no lineal corresponden a la solución del conjunto de ecuaciones que modelan el sistema. Un estado puede ser observado si este es estable, sin embargo, si ese “estado fundamental” pierde su estabilidad cuando el parámetro alcanza un valor crítico, entonces ya no se observa el estado, y el sistema alcanza un nuevo estado estable que “bifurca” desde el estado fundamental [89]. Es decir, que la teoría de bifurcaciones intenta describir de forma cualitativa el comportamiento de un sistema en presencia de cambios en los parámetros, al estudiar la estabilidad de los puntos de equilibrio.

Considere un sistema de ecuaciones diferenciales autónomas en \mathbb{R}^n , con un parámetro p :

$$\dot{x} = f(x, p). \quad (3.28)$$

En términos generales, el retrato de fases de un sistema cambia gradualmente a medida que el parámetro varía, sin embargo, existen valores críticos de los parámetros que cambian drásticamente el retrato de fases. Estos cambios abruptos se denominan bifurcación.

La bifurcación es un cambio de tipo topológico del sistema dinámico el cual ocurre a medida que un parámetro cambia, es una representación gráfica que permite determinar la relación entre parámetros del sistema y el tipo de soluciones que puede presentar dicho sistema y explicar la dinámica del mismo [90]. Las bifurcaciones más comunes son: bifurcación silla-nodo, bifurcación Hopf y ciclos límite.

3.4.1. Método para la detección de bifurcaciones

El estudio de bifurcaciones permite determinar los límites de operación del sistema dinámico al analizar los cambios del comportamiento cualitativo del mismo ante variaciones en uno o más parámetros. Al realizar cambios en los parámetros del sistema los puntos fijos del sistema pueden ser creados, destruidos o cambiar sus propiedades de estabilidad. El valor del parámetro donde ocurre la bifurcación se conoce como valor crítico del parámetro [80].

La detección de bifurcaciones se realiza mediante el uso de métodos directos y métodos de continuación. Los métodos directos se emplean para determinar la localización de puntos de bifurcación singular, siendo muy eficaces para la identificación de bifurcaciones silla-nodo. Por otra parte, los métodos de continuación permiten calcular trayectorias de solución del sistema no lineal, y se emplean para detectar cualquier tipo de bifurcación.

Diferentes métodos numéricos son utilizados para la detección y cálculo de puntos de equilibrio y bifurcación de sistemas dinámicos no lineales por continuación. Sin embargo, la precisión de los métodos iterativos como el método de Newton para determinar las raíces, dependen de las condiciones iniciales, es decir que una inicialización no adecuada podría generar una no convergencia o soluciones no deseadas, por tanto, es importante que el método numérico empleado sea confiable y adecuado para la solución del conjunto de ecuaciones que representa el sistema.

En este trabajo se utiliza el método de continuación para estudiar el comportamiento del sistema ante variaciones en sus parámetros. Los valores de los estados de equilibrio son resueltos numéricamente empleando un algoritmo de optimización basado en la reformulación y solución del modelo matemático como un problema de optimización PNL (Programación No Lineal) como lo propone Matallana [91]. El conjunto de ecuaciones diferenciales que describen el modelo del sistema al ser resuelto mediante la estrategia de optimización no lineal, puede dar como resultado muchas soluciones locales. Sin embargo, para el caso particular de los bioreactores, y como se evidenció en la sección anterior, no todas las soluciones tienen significado físico, por lo tanto y con el fin de evitar soluciones ficticias, el modelo se resuelve bajo una estrategia que permita obtener el óptimo global sujeto a restricciones.

La optimalidad global se puede garantizar resolviendo el PNL utilizando un solucionador de optimización global, como BARON del software GAMS (General Algebraic Modeling System) [92]. BARON implementa un algoritmo de optimización global determinista que garantiza un óptimo global bajo supuestos bastante generales. El solucionador seleccionado maneja correctamente modelos con restricciones no lineales con un número moderado de grados de libertad, permitiendo el cálculo de múltiples soluciones. Una de las ventajas de GAMS es que ofrece a los usuarios de MATLAB la capacidad de utilizar todas las soluciones de optimización de GAMS, además permite la visualización de modelos GAMS directamente dentro de MATLAB [93].

El algoritmo de solución PNL (Algoritmo 1) permite realizar la continuación de los puntos de equilibrio variando un parámetro, con un programa en MATLAB con interface GAMS utilizando como solucionador BARON. El primer paso del algoritmo corresponde a la ini-

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

cialización del programa en MATLAB donde se especifica el valor del parámetro para la solución de los puntos de equilibrio del sistema. La formulación de la optimización en GAMS para resolver el sistema dinámico corresponden a:

$$\begin{aligned}
 & \underset{x,s}{\text{mín}} \quad s \\
 & \text{s.a} \quad f(x) - s \leq 0, \\
 & \quad \quad -f(x) - s \leq 0, \\
 & \quad \quad \quad s \geq 0, \\
 & \quad \quad x^l \leq x \leq x^u,
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

donde s es una variable *slack*, x representa el vector de variables de estado y $f(x)$ son las funciones diferenciales continuas igualadas a cero. En el Anexo C se presenta un ejemplo del código del programa en GAMS empleado para el cálculo de los puntos de equilibrio por optimización global. Es importante resaltar, que dependiendo del sistema y del estudio que se quiera realizar, se deben establecer las restricciones de las variables de estado.

La caracterización de los puntos de equilibrio se realiza empleando el Método Indirecto de Lyapunov¹, es decir, que las condiciones de estabilidad del sistema no lineal se realiza a través del estudio de la estabilidad del sistema linealizado alrededor del punto de equilibrio [95, 81]. La linealización es una aproximación en la vecindad de un punto de operación, por lo tanto, sólo puede predecir el comportamiento local del sistema no lineal en la vecindad del punto de operación [96].

El Teorema 1 proporciona las condiciones suficientes para determinar la estabilidad de un punto de equilibrio x_0 . Si x_0 es un punto fijo de un sistema dinámico de dimensión finita en tiempo discreto, las condiciones para su estabilidad pueden ser formuladas en términos de la matriz Jacobiana evaluada en x_0 [90].

Teorema 1 (Lyapunov, 1982). *Considerando un sistema dinámico definido por*

$$\dot{x} = f(x), x \in \mathbb{R}^n, \tag{3.30}$$

donde f es suave. Asumiendo que tiene un equilibrio x_0 (es decir, $f(x_0) = 0$), y denotando A como la matriz Jacobiana de $f(x)$ evaluada en el equilibrio, $A = f_x(x_0)$. x_0 es estable si todos los valores propios $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_i$ de A satisfacen $\text{Re } \lambda_i < 0$.

¹El enfoque más útil y general para el estudio de la estabilidad de los sistemas no lineales es la teoría introducida por el matemático ruso Aleksandr Mikhailovich Lyapunov [80]. Lyapunov en su trabajo titulado *The general problem of Motion Stability*, incluye dos métodos para el análisis de estabilidad. El primer método, corresponde al Método Indirecto de Lyapunov, el cual indica la estabilidad local alrededor de un punto de equilibrio, requiriendo la linealización del sistema alrededor de este punto. Sirve como una técnica de análisis de estabilidad local, proporcionando de forma cualitativa información sobre la estabilidad del sistema alrededor del punto de equilibrio, sin embargo, no proporciona información sobre la estabilidad global [94].

La matriz Jacobiana de $f(x)$ evaluada en el equilibrio x_0 , con $f(x)$ es una función continuamente diferenciable y para un valor dado de parámetros corresponde a

$$A = \left. \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right|_{x=\bar{x}}, \quad (3.31)$$

evaluado en el punto de equilibrio,

$$\dot{x} = Ax. \quad (3.32)$$

Los valores propios de la matriz Jacobiana A (3.31), se calculan a partir de las raíces del polinomio característico del Jacobiano, definidos por la ecuación 3.33 [90].

$$h(\lambda) = \det(A - \lambda I). \quad (3.33)$$

La estabilidad del sistema linealizado está determinada por el Teorema 2.

Teorema 2 (Estabilidad de sistemas linealizados). *La estabilidad de un sistema en un punto de equilibrio $x = \bar{x}$ se establece bajo los siguientes criterios [96]:*

1. *Si todos los valores propios de A se encuentran en el semiplano complejo izquierdo abierto (excluyendo el eje imaginario), es decir, que tienen parte real negativa ($Re(\lambda_i) < 0 \forall i$), el punto de equilibrio del sistema no lineal es asintóticamente estable en la vecindad del punto.*
2. *Si al menos un valor propio de A se encuentra en el semiplano complejo derecho abierto, es decir, que tiene parte real positiva ($Re(\lambda_i) > 0$ para algún i), el punto de equilibrio del sistema no lineal es inestable.*
3. *Si ninguno de los valores propios de A se encuentra en el semiplano complejo derecho abierto, pero al menos tiene uno en el eje $j\omega$ ($Re(\lambda_i) \leq 0 \forall i$), y los demás parte real negativa, no se puede concluir nada sobre la estabilidad del equilibrio del sistema, su comportamiento está determinado por los términos de orden superior que fueron despreciados en la linealización.*

3.4.2. Análisis del modelo simplificado del reactor UASB para el tratamiento de lixiviado

Para el análisis dinámico del modelo simplificado que representa la dinámica del reactor UASB, se utiliza un conjunto de los datos reales obtenidos del reactor. La representación gráfica permite analizar la relación existente entre los parámetros y las soluciones del sistema, observando la dinámica del proceso. El conjunto de datos reales seleccionado para el estudio de la dinámica del sistema representa un punto de operación del reactor, sin embargo, el reactor cuenta con un rango amplio de valores de operación, por lo tanto el análisis

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

Algoritmo 1 Algoritmo para el cálculo y caracterización de puntos de equilibrio con GAMS-MATLAB

- (1) Inicializar el programa en MATLAB especificando los valores de los parámetros.
 - (2) Definir el valor del parámetro ante el cual se va a realizar el análisis del comportamiento del sistema.
 - (3) Resolver el problema de optimización por minimización en GAMS.
 - (4) Caracterizar los puntos de equilibrio obtenidos de la solución del problema de optimización usando el Método Indirecto de Lyapunov.
 - (5) Representar gráficamente los puntos de equilibrio.
 - (6) Definir un nuevo valor del parámetro y utilizarlo en el Paso (2).
-

de un solo conjunto de datos de operación no envuelve la dinámica del sistema global.

El conjunto de datos utilizado para el estudio tiene las siguientes condiciones de entrada al reactor: $S_1^0 = 11400$ mg/L, $S_2^0 = 1074$ mg/L, $X_1^0 = 229$ mg/L y $X_2^0 = 100$ mg/L, $T = 24.5^\circ\text{C}$ y $\text{pH} = 7.6$. Resulta importante resaltar que la biomasa total a la entrada del reactor siempre es diferente de cero, dado a que el afluente del reactor es un lixiviado proveniente de relleno sanitario (biodigestor). Las características del lixiviado son función de las condiciones de operación del relleno sanitario y de otros factores que pueden incidir en su composición.

El algoritmo empleado para generar los diagramas de bifurcación, involucra la caracterización de los puntos de equilibrio empleando el Método de Lyapunov. La matriz jacobiana A para el sistema caso de estudio se encuentra definida como:

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial X_1} & \frac{\partial f_1}{\partial S_1} & \frac{\partial f_1}{\partial X_2} & \frac{\partial f_1}{\partial S_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial X_1} & \frac{\partial f_2}{\partial S_1} & \frac{\partial f_2}{\partial X_2} & \frac{\partial f_2}{\partial S_2} \\ \frac{\partial f_3}{\partial X_1} & \frac{\partial f_3}{\partial S_1} & \frac{\partial f_3}{\partial X_2} & \frac{\partial f_3}{\partial S_2} \\ \frac{\partial f_4}{\partial X_1} & \frac{\partial f_4}{\partial S_1} & \frac{\partial f_4}{\partial X_2} & \frac{\partial f_4}{\partial S_2} \end{bmatrix}. \quad (3.34)$$

Reemplazando las derivadas parciales en función de cada una de las variables de estado, la matriz Jacobiana del sistema caso de estudio queda reducida a

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\gamma_1 S_1}{\gamma_2} + \gamma_5 & \frac{\gamma_1 X_1}{\gamma_2} - \frac{\gamma_1 S_1 X_1}{(\gamma_2)^2} & 0 & 0 \\ -k_1 \frac{\gamma_1 S_1}{\gamma_2} & -k_1 \frac{\gamma_1 X_1}{\gamma_2} + k_1 \frac{\gamma_1 S_1 X_1}{(\gamma_2)^2} - D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\gamma_3 S_2}{\gamma_4} + \gamma_5 & \frac{\gamma_3 X_2}{\gamma_4} - \frac{\gamma_3 S_2 X_2 \left(1 + \frac{2S_2}{K_I}\right)}{(\gamma_4)^2} \\ k_2 \frac{\gamma_1 S_1}{\gamma_2} & k_2 \frac{\gamma_1 X_1}{\gamma_2} - k_2 \frac{\gamma_1 S_1 X_1}{(\gamma_2)^2} & -k_3 \frac{\gamma_3 S_2}{\gamma_4} & -k_3 \frac{\gamma_3 X_2}{\gamma_4} + k_3 \frac{\gamma_3 S_2 X_2 \left(1 + \frac{2S_2}{K_I}\right)}{(\gamma_4)^2} - D \end{bmatrix}, \quad (3.35)$$

donde

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= \mu_{1 \text{ máx}} \Theta^{T-20} I_{pH}, \\ \gamma_2 &= K_{S1} + S_1, \\ \gamma_3 &= \mu_{2 \text{ máx}} \Theta^{T-20} I_{pH}, \\ \gamma_4 &= K_{S2} + S_2 + \left(\frac{S_2^2}{K_I} \right), \\ \gamma_5 &= -\alpha D - 2k_d.\end{aligned}$$

El algoritmo de solución involucra las restricciones físicas del sistema, por lo tanto, los resultados obtenidos a partir de la solución del problema de optimización corresponden a condiciones con significado físico.

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

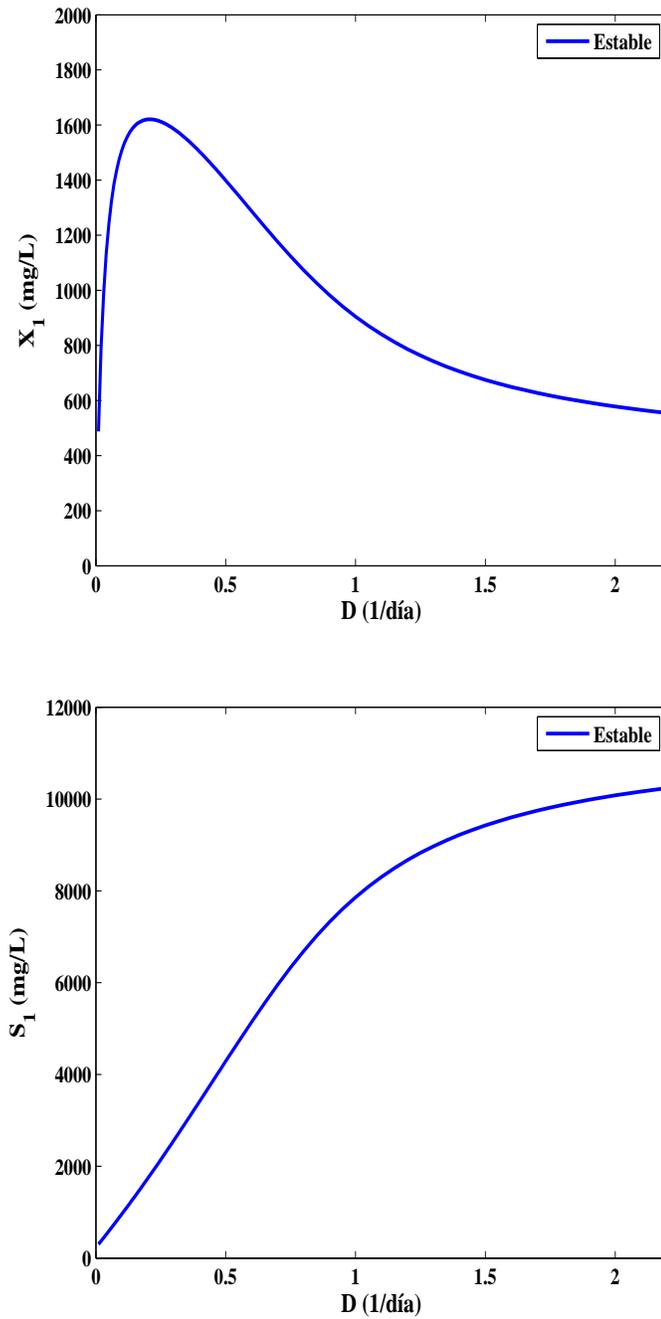


Figura 3.4.: Diagrama de continuación de puntos de equilibrio etapa acidogénica en presencia de biomasa en el afluente ante variaciones en el factor de dilución, D

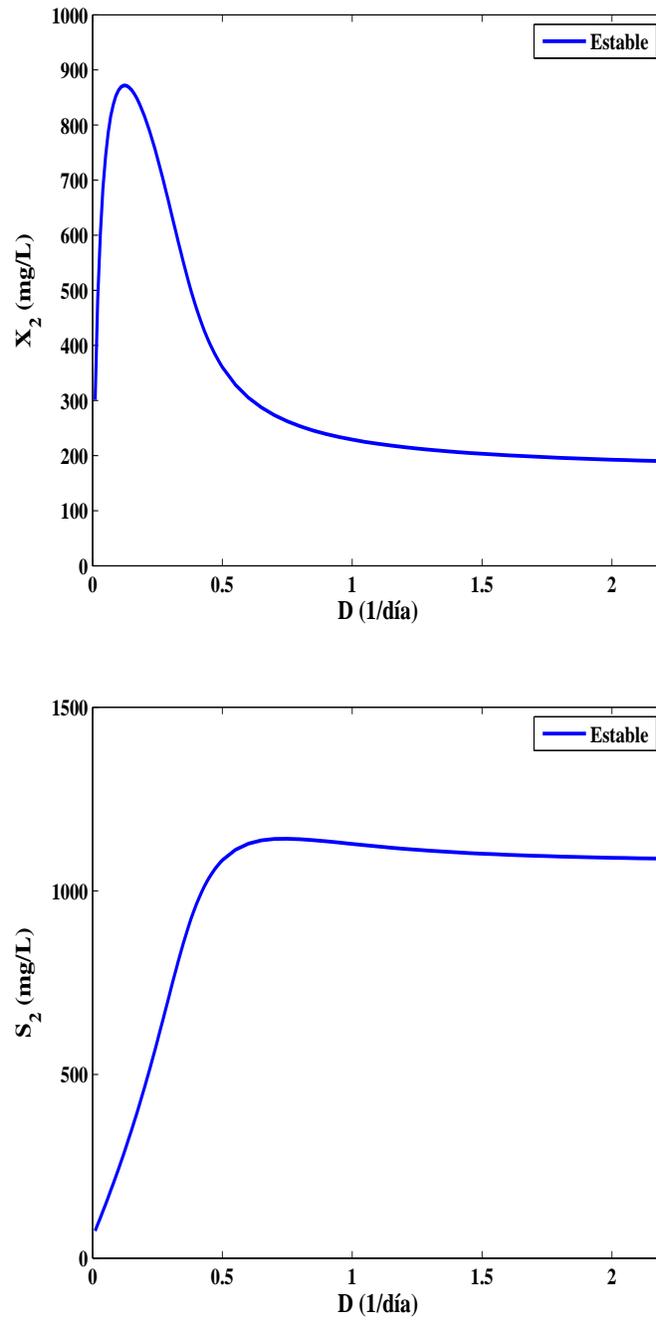


Figura 3.5.: Diagrama de continuación de puntos de equilibrio etapa metanogénica en presencia de biomasa en el afluente ante variaciones en el factor de dilución, D

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

Las Figuras 3.4-3.5 corresponde al análisis de bifurcaciones variando el parámetro factor de dilución D . El factor de dilución se encuentra asociado al tiempo de contacto o permanencia del agua residual en el bioreactor para la degradación de la materia orgánica. El diagrama presenta una continuación de puntos de equilibrio estables sin cambios topológicos. A partir del diagrama se observa que el proceso presenta un mejor rendimiento de la actividad acidogénica en un rango de 0.1 a 0.4 para el factor de dilución y un máximo en 0.21, con respecto a la actividad metanogénica se observa una actividad favorable en un rango de factor de dilución de 0.05 a 0.3 con un máximo en 0.15. A partir de la gráfica se puede definir un rango de valores de $[0,1 - 0,3]$ para el factor de dilución, en el cual el comportamiento del sistema favorece la degradación por la actividad de las bacterias acidogénicas y metanogénicas.

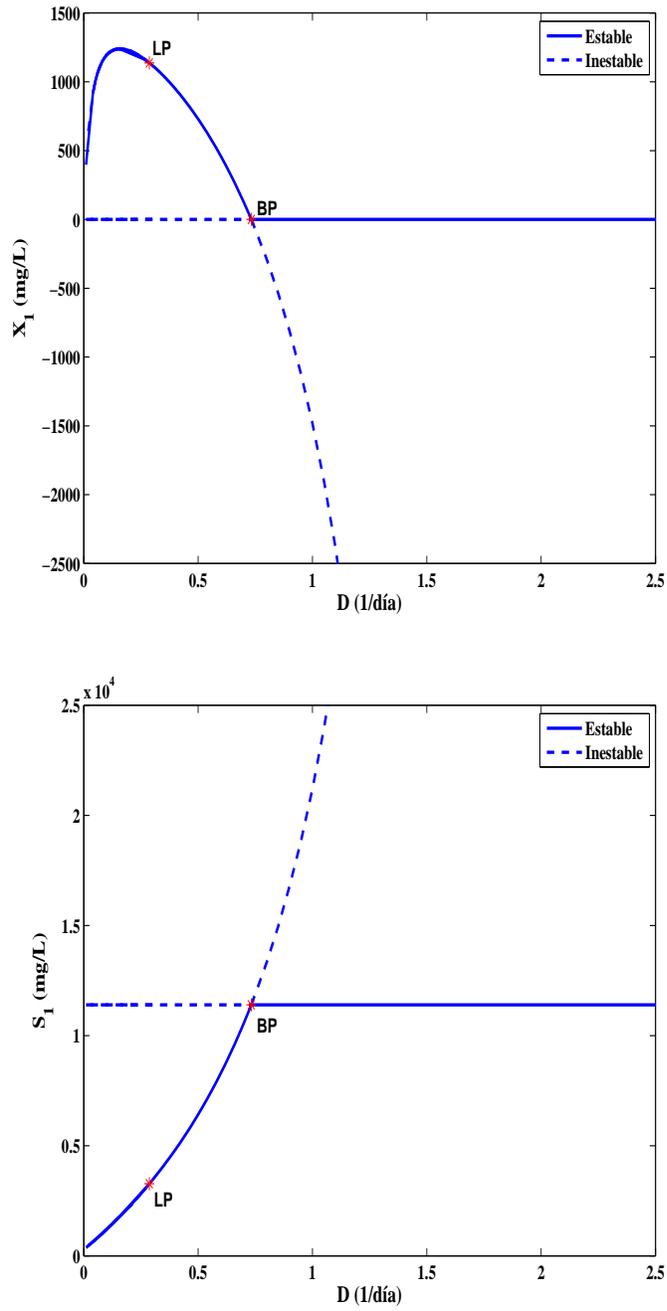


Figura 3.6.: Diagrama de continuación de puntos de equilibrio variando el parámetro factor de dilución en ausencia de biomasa en el afluente

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

Tabla 3.1.: Puntos de bifurcación en ausencia de biomasa a la entrada del UASB

Bifurcación	D, días ⁻¹	X ₁ , mg/L	X ₂ , mg/L	S ₁ ,mg/L	S ₂ , mg/L
Branch Point (BP)	0.7322	0.0000	0.00000	11400.00	1074.00
Limit Point (LP)	0.2869	1137.1647	-146.5964	33274.1329	1609.6047

El diagrama de continuación de puntos de equilibrio (Figuras 3.4-3.5) exhiben un comportamiento estable, el cual no se presentaba en los estudios dinámicos del modelo propuesto por Bernard et. al. [7], este comportamiento se asocia con las características del afluente. El lixiviado proviene de un biodigestor (relleno sanitario), por lo tanto una de sus características es la presencia de biomasa en su concentración de entrada al sistema evitando la presencia de comportamientos oscilatorios o puntos de bifurcación asociados a cambios en el desempeño aparente del sistema, minimizando el riesgo operacional asociado al lavado del reactor por pérdida de biomasa acidogénica y metanogénica. Este comportamiento dinámico del proceso se prueba realizando simulaciones asumiendo una concentración de X_1^0 y X_2^0 igual a cero. En la Figura 3.6 se presentan los resultados de la simulación numérica en ausencia de biomasa en el afluente del reactor. El sistema exhibe dos puntos de equilibrio, el primero corresponde a un punto límite a $D = 0,2869$ sin significado físico para la concentración de biomasa en la etapa metanogénica, y el segundo corresponde a una bifurcación transcítica a $D = 0,7322$ asociada a la condición de lavado de las bacterias acidogénicas y metanogénicas. En la Tabla 3.1 se presenta la relación de los puntos de equilibrio exhibidos por el sistema en ausencia de biomasa a la entrada del bioreactor.

3.4.3. Efectos del pH en el comportamiento dinámico del reactor

En las Figuras 3.7 y 3.8 se presenta el diagrama de bifurcaciones variando el parámetro, pH. El pH es un indicador de la estabilidad del proceso, permite evaluar el desempeño del reactor ya que regula la coexistencia de los microorganismos que intervienen en el proceso de digestión anaerobia. El diagrama presenta una continuación de puntos de equilibrio estables en el cual se observa que a valores inferiores de pH de 6 y valores superiores de pH de 8 hay inhibición de todos los microorganismos que intervienen en el proceso. A partir del diagrama se puede inferir que el pH óptimo en el cual debe permanecer reactor se encuentra en un rango cercano a la neutralidad entre 6.5 y 7.5, para favorecer la cinética del proceso de digestión anaerobia.

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

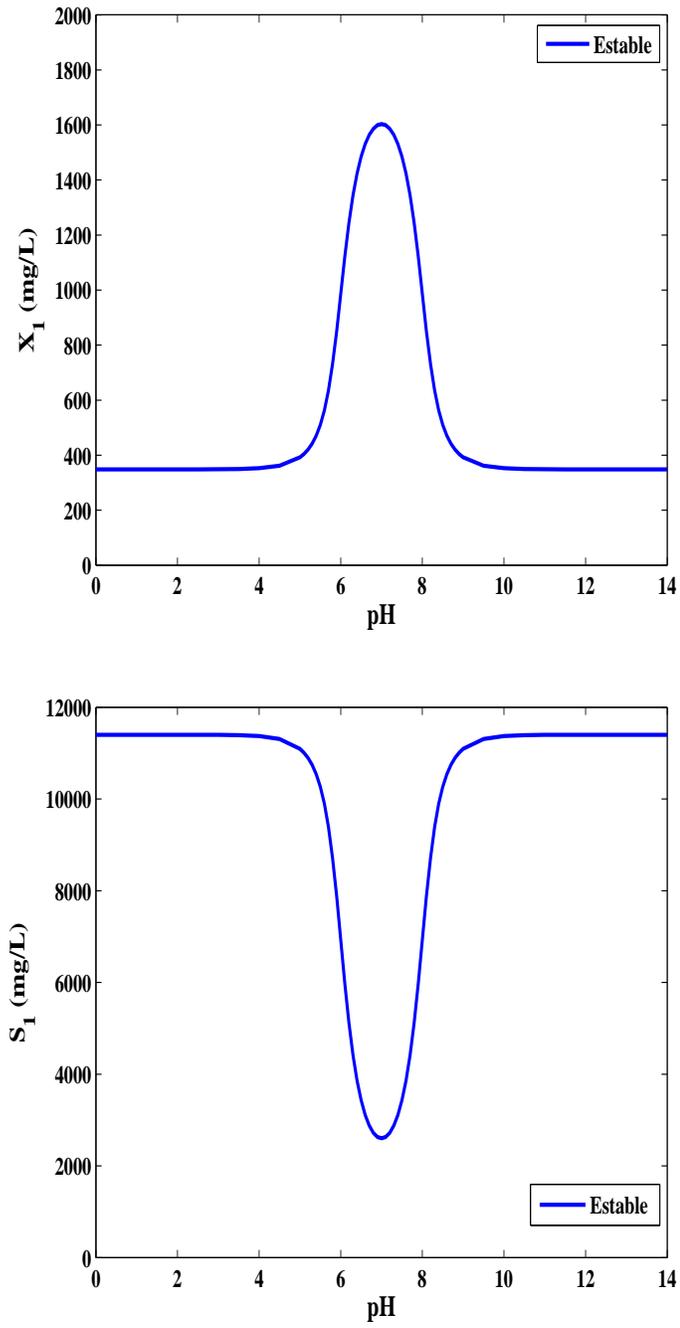


Figura 3.7.: Diagrama de continuación de puntos de equilibrio etapa acidogénica variando el parámetro pH

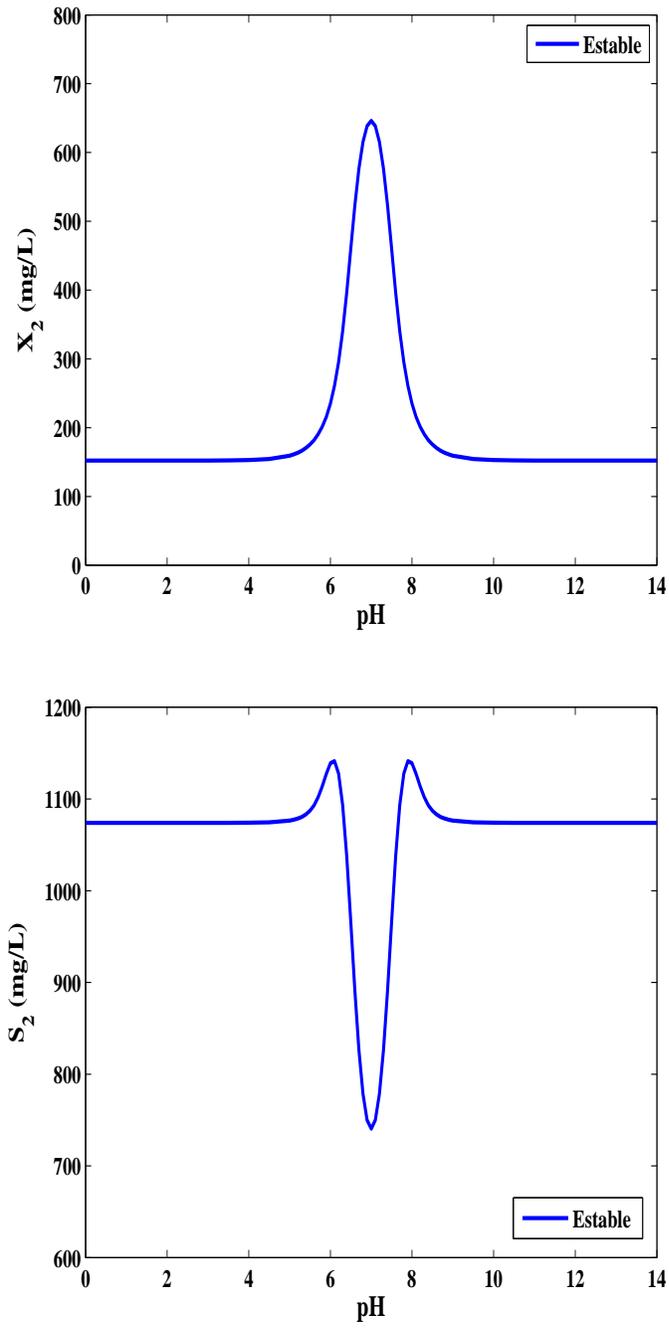


Figura 3.8.: Diagrama de continuación de puntos de equilibrio etapa metanogénica variando el parámetro pH

3.4.4. Efectos de la temperatura en el comportamiento dinámico del reactor

Las Figuras 3.9 y 3.10 exhiben el diagrama de bifurcaciones variando el parámetro temperatura, T . La temperatura afecta directamente el desarrollo del proceso de digestión anaerobia, siendo uno de los parámetros fisicoquímicos más importantes. El diagrama presenta una continuación de puntos de equilibrio estables en el cual se observa un comportamiento creciente con respecto a la temperatura en los rangos psicrófilico y mesófilico, siendo el mesófilico el más favorable para el proceso. En este estudio no se considera el rango de temperatura termófila ya que dadas las condiciones del reactor objeto de estudio, para alcanzar este rango de temperatura es necesario un requerimiento energético muy alto.

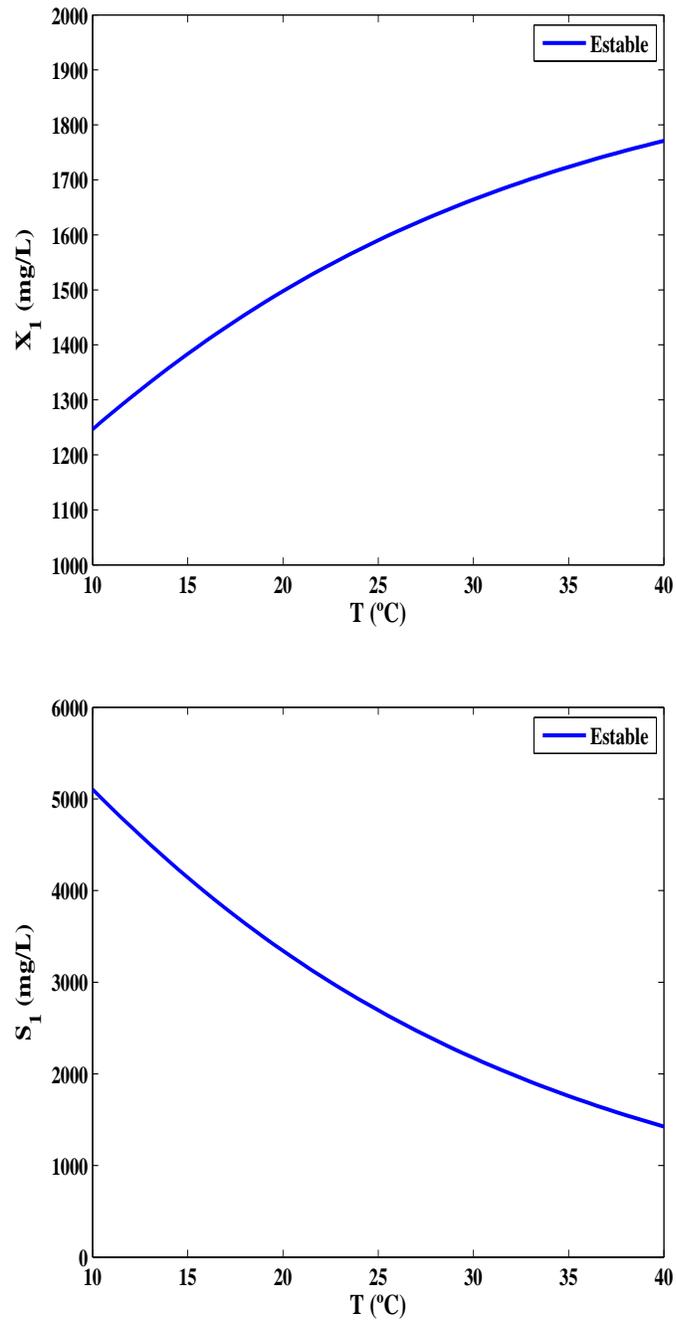


Figura 3.9.: Diagrama de continuación de puntos de equilibrio etapa acidogénica variando el parámetro temperatura

3. Análisis dinámico del proceso de digestión anaerobia de lixiviados

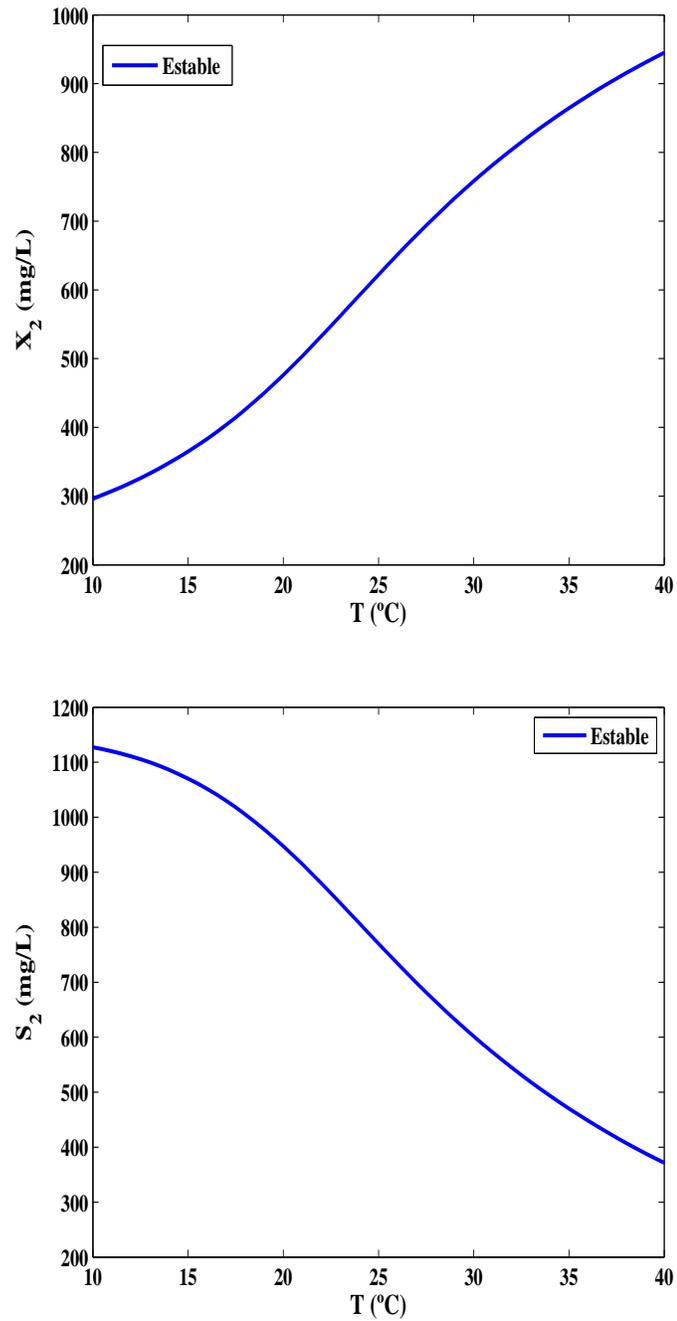


Figura 3.10.: Diagrama de continuación de puntos de equilibrio etapa metanogénica variando el parámetro temperatura

3.5. Conclusiones

Se ha analizado de forma numérica el conjunto de ecuaciones que describen el comportamiento del sistema dinámico del proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado en un reactor UASB. Se determinan rangos de operación a partir del estudio de la dinámica del sistema al realizar variaciones en el factor de dilución, pH y temperatura. A partir de los diagramas y teniendo en cuenta las características del afluente, es posible que debido a la presencia de biomasa a la entrada del reactor el sistema no presenta comportamientos oscilatorios ni bifurcaciones que puedan afectar el desempeño aparente del sistema, minimizando el riesgo operacional asociado al lavado del reactor por pérdida de biomasa acidogénica y metanogénica. Sin embargo, debido a la alta concentración de materia orgánica en el lixiviado, se puede inducir la acumulación de ácidos grasos volátiles (AGV) generando una reducción de pH en el proceso. Con fines de control, se recomiendan valores del factor de dilución bajos de acuerdo al análisis dinámico del sistema, para garantizar que el bioreactor se encuentre en un punto de operación estable.

4. Observadores no lineales

En este capítulo se construye un observador no lineal para la estimación de variables de estado no medibles en línea y parámetros desconocidos variables en el tiempo en un proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado, a partir de la medición de la concentración de ácidos grasos volátiles a la salida del reactor. Los ácidos grasos volátiles son un producto intermedio del proceso cuya acumulación genera inestabilidad global en el bioreactor. El desempeño del modelo se evalúa realizando simulaciones numéricas. Como criterios para determinar el modelo aceptable se considera el cálculo de los valores de $MMRE \leq 0.25$ y $PRED(0.25) \geq 0.75$. Dadas las características del modelo propuesto, puede ser utilizado en el diseño de esquemas de control.

4.1. Antecedentes

Las mediciones en línea de las variables de los procesos bioquímicos tales como sustrato, productos y concentración de biomasa, se dificultan debido a la carencia de sensores apropiados para la medición de algunas variables o a la existencia de sensores con costos elevados y restricciones de funcionamiento [97]. El diseño de observadores ha surgido como una alternativa para la simulación de los bioprocesos. En general, los observadores se podrían definir como sistemas dinámicos diseñados a partir del modelo matemático del proceso, capaces de reconstruir la información no disponible desde las variables de estado medibles.

El problema de observabilidad consiste en determinar si existen relaciones vinculantes entre las variables de estado de entradas, salidas y derivadas temporales, y definirlos en términos de cantidades controlables/medibles en algunos casos, dependiendo del observador sin la necesidad de conocer las condiciones iniciales. A partir de la información entrada-salida medible, el observador realiza la reconstrucción de las variables del sistema. Si no existen tales relaciones, el estado inicial del sistema no se puede deducir de la observación de su comportamiento entrada-salida [98].

Los primeros trabajos desarrollados para la estimación de estados basados en la propiedad observabilidad fueron presentados por Kalman en 1960 [99] y Luenberger en 1971 [100] para sistemas lineales. La propiedad de observabilidad de un sistema lineal se caracteriza por la condición del rango de la matriz de observabilidad, y en el caso de un sistema no

lineal, la observabilidad depende de las entradas del mismo, por lo tanto para los sistemas no lineales no hay una solución general.

El diseño de observadores no lineales ha sido un área de investigación muy activa [101], sobre todo a partir de los años setenta con los trabajos presentados por Krener y Isidori en 1983 [102], Krener y Respondek en 1985 [103], Marino en 1990 [104] y Deza en 1993 [105]. Entre los observadores más utilizados para la estimación de variables de estado y/o parámetros en sistemas no lineales se encuentran los observadores de Kalman extendidos (Extended Kalman Filter o EKF) [106, 107], los observadores de Luenberger extendidos [108, 10, 109], los observadores de alta ganancia no lineal [110, 109], observadores adaptativos [111, 112, 113, 114, 115, 116], observadores probabilísticos [117], observadores asintóticos [101, 118, 119] y observador de intervalos [120].

El mayor número de contribuciones que se han desarrollado en relación a los observadores no lineales, se han diseñado para el caso de mediciones en continuo. Sin embargo, algunos estudios han sido desarrollados sobre el diseño de observadores para la estimación de variables de estado en sistemas en tiempo continuo-discreto. Deza et. al. [105] proponen un observador de alta ganancia para sistemas no lineales asumiendo inicialmente la medición en tiempo continuo de la salida y posteriormente adaptándolo para mediciones en instantes de muestreo; a partir de este estudio se han derivado otros trabajos para sistemas específicos en tiempo continuo con medidas de la salida en tiempo discreto [121, 122, 123].

El uso de la teoría de observadores no lineales ha sido limitada debido a que en su gran mayoría requieren del conocimiento perfecto de las entradas del sistema y de los parámetros del sistema. Las incertidumbres del modelo están asociadas principalmente a la ausencia de mediciones confiables en línea para monitoreo en tiempo real [124], y a parámetros desconocidos, difíciles de medir o físicamente no medibles [125]. La teoría de los observadores de Luenberger y Kalman extendidos se desarrolla utilizando el conocimiento perfecto de la cinética del bioproceso, los observadores asintóticos toman ventaja de la estructura de los modelos dinámicos para reescribir parte del modelo en una forma independiente de la cinética del proceso y los observadores adaptativos realizan la estimación de variables de estado y parámetros del sistema dinámico de forma simultánea. Los observadores adaptativos han sido utilizados con éxito en una amplia variedad de procesos de ingeniería química, principalmente en bioreactores y reactores de polimerización [112, 115, 114, 4, 116].

4.2. Observabilidad en sistemas no lineales

En términos generales la observabilidad se puede definir como la posibilidad de construir el estado en un sistema a partir de la trayectoria de salida. En un sistema de control, la observabilidad es una propiedad estructural que da la posibilidad de estimar variables de estado en un sistema a partir de la observación del comportamiento entrada-salida [98]. El concepto de observabilidad se introdujo por primera vez en el contexto de los sistemas lineales, con el observador de Luenberger y el Filtro de Kalman; para sistemas lineales la observabilidad es independiente de la entrada y puede ser determinada mediante la cons-

4. Observadores no lineales

trucción de la matriz de observabilidad.

Para el diseño de un observador se debe tener en cuenta la información disponible del sistema sobre la dinámica y las mediciones. Esta propiedad refleja una condición necesaria para la construcción de un observador y se denomina detectabilidad, si el sistema es detectable es posible la existencia y construcción del observador, seguido por el análisis de convergencia. El análisis de las propiedades de convergencia y robustez son deseables desde el punto de vista práctico para evaluar el desempeño del observador ante la presencia de ruido o perturbaciones, sin embargo, esta no es una tarea sencilla [126]; en la literatura es posible encontrar diferentes contribuciones y aproximaciones teóricas relacionadas con el tema [102, 103, 110].

En sistemas no lineales la observabilidad no es una propiedad genérica debido a que estos sistemas pueden presentar entradas singulares que los hacen no observables. La observabilidad de un sistema no lineal depende de las entradas, generalmente un sistema no lineal puede ser observable para algunas entradas y no observable para otras [127]. Si todas las entradas son universales el sistema es observable de manera uniforme, es decir que estos sistemas son observables para cualquier tipo de entrada, los sistemas uniformemente observables se pueden reescribir bajo una forma específica [128], por ejemplo mediante un cambio de coordenadas a una forma canónica de estructura triangular [110].

Considerando un sistema de la forma:

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = f(x(t)) + g(x(t), u(t)); \\ y(t) = h(x(t)), \end{cases} \quad (4.1)$$

El estado $x(t)$ pertenece a un conjunto abierto V de \mathbb{R}^n , la entrada $u(t)$ pertenece a un subconjunto cerrado U de \mathbb{R}^m y la entrada $y(t) \in \mathbb{R}^q$. Dada una entrada u definida en algún intervalo $[t_0, t_1]$ se dice que el sistema (4.1) es observable si por cada dos estados iniciales $x_0 \neq x'_0$; en $t \in [t_0, t_1]$ tal que, $h(x(t, x_0)) \neq h(x(t, x'_0))$, donde $x(t, x_0)$ y $x(t, x'_0)$ son respectivamente las trayectorias asociadas a la entrada u a partir de los estados iniciales [127].

Existen diferentes clases de observadores para sistemas uniformemente observables, por ejemplo los basados en técnicas de modos deslizantes, los cuales poseen un tiempo de convergencia finito, los observadores de alta ganancia con convergencia asintótica y los observadores de estado extendido, los cuales presentan un desempeño notable bajo condiciones de dinámicas desconocidas, perturbaciones y ruido.

4.2.1. Análisis de observabilidad local

La primera condición para la construcción de un observador es la información disponible del sistema 4.1. La caracterización de observabilidad de un sistema con una sola entrada

se puede determinar a partir de la matriz

$$\mathcal{O}_N(x) = \begin{bmatrix} \nabla h(x) \\ \nabla L_f h(x) \\ \vdots \\ \nabla L_f^{n-1} h(x) \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

Donde, $\nabla h(x(t)) = \frac{\partial h}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial h}{\partial x_n}$ y $L_f h(x(t)) = \frac{\partial h}{\partial x} f(x(t))$ representa la derivada de Lie de $h(x(t))$ a lo largo del vector f .

Si la matriz satisface la condición de rango de observabilidad a x_0 [126]:

$$\text{rango}(\mathcal{O}_N(x_0)) = n, \quad (4.3)$$

el sistema es llamado localmente observable. Por lo tanto, la propiedad de observabilidad local está asociada al hecho de que la matriz jacobiana utilizada sea de rango completo.

Definición 1. *Un sistema no lineal de orden n es observable si la matriz jacobiana de la derivada de Lie de la función de salida del sistema $h(x)$ en la dirección de estados $f(x)$ es de rango completo (invertible).*

Basado en este principio Sedoglavic [129] presenta un algoritmo para determinar la observabilidad local algebraica, el estudio se centra en responder a las preguntas: Cuáles variables en teoría pueden ser deducidas del comportamiento entrada salida de un sistema? y Cuántas variables deben ser conocidas para determinar otras?

La observabilidad algebraica local es una propiedad estructural de un modelo y uno de los conceptos claves en la teoría de control. Un modelo algebraico diferencial es usualmente descrito en una representación en espacio de estados por medio de un vector que describe la evolución de las variables en función de la entradas y parámetros, y algunas salidas que son funciones algebraicas de estas variables.

Un caso particular del problema de observabilidad es la identificabilidad estructural local. El problema consiste en decidir si algunos parámetros desconocidos de un modelo son observables, considerando estos parámetros como una clase de variables de estado p invariantes en el tiempo $\dot{p} = 0$. Si no son observables, infinitos valores de estos parámetros pueden ajustarse al mismo conjunto de datos observados y la aproximación de estos parámetros por métodos numéricos es imposible [130]. El sistema considerado presenta la siguiente forma [129]:

$$\sum \left\{ \begin{array}{l} \dot{\Xi} = 0, \\ \dot{X} = F(X, \Xi, U), \\ Y = G(X, \Xi, U). \end{array} \right. \quad (4.4)$$

Donde las letras en mayúscula representan los objetos valores-vectoriales, asumiento l parámetros ($\Xi := (\xi_1, \dots, \xi_l)$); m variables de entrada ($U := (u_1, \dots, u_m)$), n variables

4. Observadores no lineales

de estado ($X := (x_1, \dots, x_n)$) y q variables de salida ($Y := (y_1, \dots, y_q)$).

El algoritmo probabilístico es utilizado para calcular el conjunto de variables observables del modelo y el número de variables no observables que deben ser asumidas como conocidas con el fin de obtener un sistema observable.

4.3. Formulación del observador no lineal

Considerando el sistema general (S) en tiempo continuo,

$$(S) \begin{cases} \dot{x}(t) = f(x(t), u(t)) + g(x(t), u(t)); & x(t_0) = x_0, \\ y(t) = h(x(t)), \end{cases} \quad (4.5)$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$ es el vector de estado de espacios, $u \in \mathbb{R}^m$ es el vector de entrada, $y \in \mathbb{R}^q$ es el vector de salida, x_0 es la condición inicial para el tiempo inicial t_0 , $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ es una entrada de estado de la función de mapeo y $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^q$ es una entrada-salida de la función de mapeo. Asumiendo que para el sistema (4.5) la entrada $u(t)$ y la salida $y(t)$ son conocidas, y las funciones f , g y h son conocidas del modelo matemático. Retomando el concepto de observabilidad para sistemas no lineales, el sistema (4.5) se dice que es uniformemente observable si para cada entrada $u(t)$ en algún intervalo de tiempo $[t_0, t_1]$; y por cada dos estados iniciales $x(t_0) \neq \bar{x}(t_0)$, las salidas asociadas $y(x, u, t)$ y $y(\bar{x}, u, t)$ no son idénticamente iguales en $[t_0, t_1]$ [110].

Definición 2. Dos estados x_0 y x'_0 son llamados indiscernibles, si para cualquier señal de entrada en función del tiempo $u(t)$ y para cualquier $t \geq 0$, las salidas $h(x(t, x_0))$ y $h(x(t, x'_0))$ son iguales [4].

Definición 3. El sistema es llamado observable, si este no tiene parejas distintas de estados iniciales x_0, x'_0 que son indiscernibles [4].

Suponiendo que la salida es función del estado y los parámetros, y asumiendo que los parámetros son variables de estado cuya derivada en el tiempo es cero, el modelo de simulación del sistemas se describe como:

$$\begin{aligned} \dot{p}(t) &= 0, \\ \dot{x}(t) &= f(x(t), p(t)) + g(x(t), u(t)), \\ y(t) &= h(x(t), p(t)). \end{aligned} \quad (4.6)$$

El observador para la estimación de variables y parámetros que se desarrolla en este estudio se basa en el observador propuesto por Gauthier et.al. [110], asumiendo que:

- El mapeo de $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ dado por $x \mapsto \phi(x)$ es un difeomorfismo desde Ω sobre $F(\Omega)$ un subconjunto de \mathbb{R} El sistema puede ser transformado mediante un cambio

de variables en

$$\dot{x} = \begin{pmatrix} x_2 \\ \vdots \\ x_n \\ \varphi(x) \end{pmatrix} := \tilde{F}(x), y = x_1, \quad (4.7)$$

donde φ esta dada por $\varphi(x) = L_f^n h(\varphi^{-1}(x))$;

- el mapeo φ puede ser extendida para todo \mathbb{R}^n como un C^∞ , globalmente Lipschitz.

Definición 4. Una función es infinitamente diferenciable (C^∞) si sus derivadas parciales de cualquier orden con respecto al vector de estado (x_1, \dots, x_n) existen y son continuas.

Definición 5. Se dice que un campo vectorial ϕ es un difeomorfismo, si ϕ es una función biyectiva, y ϕ y ϕ^{-1} , son mapeos suaves o funciones infinitamente diferenciables (C^∞).

El observador es una extensión del sistema de la forma (4.6) y el comportamiento de los parámetros variables en el tiempo pueden ser modelados de la siguiente forma [116],

$$p(t) = \zeta(t), \quad (4.8)$$

donde, $\zeta(t)$ es cualquier función acotada.

Un sistema no lineal uniformemente observable se puede transformar en un sistema local de coordenadas, en el cual el sistema toma una forma canónica [110, 127]. Considerando el siguiente cambio de coordenadas para el sistema no lineal:

$$\phi : x \rightarrow z = \begin{bmatrix} z_1 & z_2 & \dots & z_n \end{bmatrix}, \quad (4.9)$$

donde $z_1 = h(x(t))$, $z_2 = L_f h(x(t))$, $z_n = L_f^{n-1} h(x(t))$, siendo, $L_f h(x(t)) = \frac{\partial h}{\partial x} f(x(t))$ representa la derivada de Lie de $h(x(t))$ a lo largo del vector f . Así, si el sistema (4.5) es uniformemente observable, el sistema original puede ser transformado por un cambio de coordenadas en una forma triangular,

$$\dot{z}(t) = \zeta(t)Az(t) + \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \varphi(z(t)) \end{bmatrix} + \psi(z(t))u(t), \quad (4.10)$$

$$y(t) = Cz(t).$$

4. Observadores no lineales

Donde,

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix},$$

$$C = [1, 0, \dots, 0]$$

$$z(t) = \begin{bmatrix} h(x) & L_f h(x) & \cdots & L_f^{n-1} h(x) \end{bmatrix}^T,$$

$$\psi(z(t)) = \begin{bmatrix} \psi_1(z_1(t)) \\ \psi_2(z_1(t), z_2(t)) \\ \vdots \\ \psi_n(z_1(t), z_2(t), \dots, z_n(t)) \end{bmatrix},$$

$$\varphi(z(t)) = L_f^n h(\phi^{-1} z(t)),$$

con

$$\psi_i(z(t)) = \psi_i(z_1(t), z_2(t), \dots, z_i(t)) = L_g L_f^{(i-1)} h(\phi^{-1}(z(t)))$$

Por lo tanto las no linealidades del sistema se concentran en los términos $\varphi(z(t))$ y $\psi(z(t))$. La forma triangular es usada para diseñar el observador retomando las coordenadas iniciales con ϕ^{-1} . El observador adquiere la siguiente forma en la base original:

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}}(t) &= f(\hat{x}(t), \hat{\zeta}(t)) + g(\hat{x}(t))u(t) - \left[\frac{\partial \phi}{\partial x(t)} \right]_{x(t)=\hat{x}(t)}^{-1} W_\theta^{-1} C^T (h(\hat{x}(t)) - y(t)), \\ \dot{\hat{\zeta}}(t) &= -\frac{\theta_2^2}{\delta(t)} [h(\hat{x}(t)) - y(t)], \end{aligned} \quad (4.11)$$

donde, \hat{x} es el valor estimado, $\phi(x(t)) = \begin{bmatrix} h(x(t)) & L_f h(x(t)) & \cdots & L_f^{n-1} h(x(t)) \end{bmatrix}^T$, $L_f h(x(t))$ es la derivada de Lie de $h(x(t))$ a lo largo del vector $f(t)$, y W_θ^{-1} es la solución de la ecuación algebraica de Lyapunov $\theta W_\theta + A^T W_\theta + W_\theta A = C^T C$, siendo θ un parámetro de alta ganancia entero positivo ($\theta \gg 0$) el cual determina la velocidad de convergencia del observador y es fijado por el diseñador. Las matrices A y C se calculan como se describi en (4.10), y W_θ se calcula de acuerdo a la siguiente expresión:

$$W_\theta(i, j) = \frac{(-1)^{i+j} (i+j-2)!}{\theta^{i+j-1} (i-1)! (j-1)!}, \quad (4.12)$$

donde i, j es igual al orden del sistema (n).

4.4. Aplicación al reactor UASB

Como caso de aplicación se diseña un observador no lineal en un reactor UASB para el tratamiento de lixiviado. El proceso biológico puede ser reformulado como un modelo en espacio de estado con respecto a la entrada, donde la entrada corresponde al factor de dilución, $u = D$ [4, 128]. Se asume la concentración de ácidos grasos volátiles como la variable medible de salida, ya que esta variable ha demostrado ser una de las pruebas de control más importantes para la digestión anaerobia y determinante para la observación del comportamiento del sistema. Los ácidos grasos volátiles se forman como productos intermedios durante la reacción de descomposición anaerobia de materia orgánica compleja, un aumento en su concentración es uno de los primeros indicios de perturbación en el interior del reactor, indicando la necesidad de tomar medidas de control. La acumulación de AGV conduce a un descenso en el pH al interior del bioreactor, condición que promueve el crecimiento de las bacterias acetogénicas e inhibe la actividad de las bacterias metanogénicas. En casos extremos, una caída abrupta del pH puede afectar significativamente la eficiencia del reactor hasta inclusive llegar a condiciones de lavado.

El diseño del observador no lineal se realiza a partir de la teoría de observadores no lineales basado en las siguientes hipótesis:

Hipótesis 1. *El sistema no lineal es uniformemente observable (Definición 2).*

Hipótesis 2. *El sistema es localmente observable, es decir, que la matriz de observabilidad es de rango completo en un punto x_0 (Definición 1).*

Hipótesis 3. *La derivada de Lie de $h(x(t))$ a lo largo del campo vectorial $f(x(t))$ es un difeomorfismo (Definición 5)*

Considerando el modelo matemático del sistema descrito en el Capítulo 2 y reescribiendo el conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales de la siguiente forma,

$$(S) \begin{cases} \dot{x}(t) = f(x(t), \zeta(t)) + g(x(t), u(t)); & x(t_0) = x_0, \\ y(t) = h(x(t)), \end{cases} \quad (4.13)$$

Donde,

$$f(x(t), \zeta(t)) = \begin{bmatrix} \mu_1(t)X_1(t)\Theta^{T-20}I_{pH} - k_dX_1(t) \\ -k_1\mu_1(t)X_1(t)\Theta^{T-20}I_{pH} \\ \mu_2(t)X_2\Theta^{T-20}I_{pH} - k_dX_2(t) \\ k_2\mu_1(t)X_1(t)\Theta^{T-20}I_{pH} - k_3\mu_2(t)X_2(t)\Theta^{T-20}I_{pH} \end{bmatrix},$$

$$g(x(t)) = \begin{bmatrix} X_1^0 - \alpha X_1(t) \\ S_1^0 - S_1(t) \\ X_2^0 - \alpha X_2(t) \\ S_2^0 - S_2(t) \end{bmatrix}$$

4. Observadores no lineales

y $h(x(t)) = S_2(t)$.

La observabilidad de sistema se determina calculando el rango de la matriz de observabilidad

$$\mathcal{O}_S(x) = \begin{bmatrix} \nabla h(x) \\ \nabla L_f h(x) \\ \nabla L_f^2 h(x) \\ \nabla L_f^3 h(x) \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

donde

$$\begin{aligned} L_f h(x(t)) &= k_2 \mu_1^*(t) X_1(t) - k_3 \mu_2^*(t) X_2(t), \\ L_f^2 h(x(t)) &= k_2 \mu_1^*(t) (\mu_1^*(t) - k_d) X_1(t) - k_1 k_2 \mu_1^*(t) \frac{\partial \mu_1^*(t)}{\partial x} X_1(t)^2 \\ &\quad - k_3 \mu_2^*(t) (\mu_2^*(t) - k_d) X_2(t) \\ &\quad - k_3 \frac{\partial \mu_2^*(t)}{\partial x} X_2(t) (k_2 \mu_1^*(t) X_1(t) - k_3 \mu_2^*(t) X_2(t)), \\ L_f^3 h(x(t)) &= \frac{\partial}{\partial x} (L_f^2 h(x(t))) (x(t)), \end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned} \mu_1^*(t) &= \mu_1 \Theta^{T-20} I_{pH}, \\ \mu_2^*(t) &= \mu_2 \Theta^{T-20} I_{pH}, \\ \frac{\partial \mu_1^*(t)}{\partial x} &= \left(\frac{\mu_{1 \text{ máx}}}{K_{S_1} + S_1} - \frac{\mu_{1 \text{ máx}} S_1}{(K_{S_1} + S_1)^2} \right) \Theta^{T-20} I_{pH}, \\ \frac{\partial \mu_2^*(t)}{\partial x} &= \left(\frac{\mu_{2 \text{ máx}}}{K_{S_2} + S_2 + (S_2/K_I)^2} - \frac{\mu_{2 \text{ máx}} S_2 (1 + 2S_2/K_I^2)}{(K_{S_2} + S_2 + (S_2/K_I)^2)^2} \right) \Theta^{T-20} I_{pH}. \end{aligned}$$

El cálculo del rango de la matriz \mathcal{O}_S Posteriormente se realizó en Maple con el fin de determinar la observabilidad local del sistema.

$$\text{rango}(\mathcal{O}_S(x_0)) = 4, \quad (4.15)$$

Por lo tanto, la matriz de observabilidad es de rango completo ($n = 4$); el sistema es localmente observable a x_0 .

Teniendo en cuenta que el sistema es observable y siguiendo la metodología descrita en la sección anterior, se diseña un observador para estimar variables de estado (X_1 , S_1 , X_2 y S_2) y parámetros variables en el tiempo en el proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviado (velocidades de crecimiento microbiano, $\mu_{1 \text{ máx}}$ y $\mu_{2 \text{ máx}}$), asumiendo que la salida corresponde a la concentración de ácidos grasos volátiles (AGV), es decir,

Parámetros conocidos: $k_1, k_2, k_3, K_{S1}, K_{S2}, K_I, k_d, \alpha, \Theta, pH, T$

Parámetros desconocidos variables en el tiempo: μ_{1max} y μ_{2max}

Variables estimadas: X_1, S_1, X_2, S_2

Variables medida: S_2

$y(t) = S_2(t)$, del reactor UASB.

Retomando la ecuación (4.16)

$$\begin{aligned}\dot{\hat{x}}(t) &= f(\hat{x}(t), \hat{\zeta}(t)) + g(\hat{x}(t))u(t) - \left[\frac{\partial \phi}{\partial x(t)} \right]_{x(t)=\hat{x}(t)}^{-1} W_{\theta}^{-1} C^T (h(\hat{x}(t)) - y(t)), \\ \dot{\hat{\zeta}}(t) &= -\frac{\theta^2}{\delta(t)} [h(\hat{x}(t)) - y(t)],\end{aligned}\quad (4.16)$$

Donde,

$$f(\hat{x}(t), \hat{\zeta}(t)) = \begin{bmatrix} \hat{\mu}_1(t) \hat{X}_1(t) \Theta^{T-20} I_{pH} - k_d \hat{X}_1(t) \\ -k_1 \hat{\mu}_1(t) X_1(t) \Theta^{T-20} I_{pH} \\ \hat{\mu}_2(t) \hat{X}_2(t) \Theta^{T-20} I_{pH} - k_d \hat{X}_2(t) \\ k_2 \hat{\mu}_1(t) \hat{X}_1(t) \Theta^{T-20} I_{pH} - k_3 \hat{\mu}_2(t) \hat{X}_2(t) \Theta^{T-20} I_{pH} \end{bmatrix},$$

$$g(\hat{x}(t)) = \begin{bmatrix} X_1^0 - \alpha \hat{X}_1(t) \\ S_1^0 - \hat{S}_1(t) \\ X_2^0 - \alpha \hat{X}_2(t) \\ S_2^0 - \hat{S}_2(t) \end{bmatrix},$$

$$\phi = \begin{bmatrix} h(x(t)) \\ L_f h(x(t)) \\ L_f^2 h(x(t)) \\ L_f^3 h(x(t)) \end{bmatrix},$$

$$W_{\theta} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & -\frac{1}{\theta^2} & \frac{1}{4\theta^3} & -\frac{1}{\theta^4} \\ -\frac{1}{\theta^2} & \frac{1}{2\theta^3} & -\frac{1}{\theta^4} & \frac{1}{\theta^5} \\ \frac{1}{\theta^3} & -\frac{1}{\theta^4} & \frac{1}{\theta^5} & -\frac{1}{\theta^6} \\ -\frac{1}{\theta^4} & \frac{1}{\theta^5} & -\frac{1}{\theta^6} & \frac{1}{8\theta^7} \end{bmatrix},$$

$$C = [0 \ 0 \ 0 \ 1] y$$

$$h(\hat{x}(t)) = \hat{S}_2(t)$$

4. Observadores no lineales

. Finalmente, las siguientes funciones no lineales corresponden a $\hat{\delta}(t)$:

$$\delta(t) = \begin{bmatrix} \mu_1(t) \Theta^{T-20} I_{pH} X_1(t) - k_1 \mu_1(t) \Theta^{T-20} I_{pH} X_1(t) \\ \mu_2(t) \Theta^{T-20} I_{pH} X_2(t) - k_3 \mu_2(t) \Theta^{T-20} I_{pH} X_2(t) \end{bmatrix}.$$

El observador se encuentra diseñado para que a partir de la medición de la concentración de salida de ácidos grasos volátiles ($y = S_2$), se estime la concentración de biomasa acidogénica (\hat{X}_1), concentración biomasa metanogénica (\hat{X}_2), y la concentración de sustrato orgánico (\hat{S}_1); además, de los parámetros desconocidos y variables en el tiempo: velocidad máxima de crecimiento de bacterias acidogénica ($\hat{\mu}_{1max}$) y velocidad máxima de crecimiento de bacterias metanogénica ($\hat{\mu}_{2max}$).

En la Figura 4.1, se presenta un diagrama esquemático de la metodología aplicada, donde, *Reactor UASB* es el proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de lixiviados en un reactor UASB, *Observador No Lineal* corresponde al principio de observabilidad basado en un modelo matemático no lineal del sistema; $u(t)$ es el vector de entrada del proceso y el observador; $y(t)$ es el vector de la variable de salida medida del proceso, y $\hat{x}(t)$ es el vector de estados y parámetros estimados por el observador. Los estados estimados se comparan con el conjunto de datos reales históricos del proceso de digestión anaerobia, con el fin de validar el modelo y conocer su exactitud y precisión para describir el comportamiento del sistema.

Como criterio para determinar el desempeño del modelo basado en la teoría de observadores, se calcula el valor del error medio relativo, MMRE (por su sigla en inglés, Mean Magnitude of Relative Error) y el nivel l de predicción, PRED(l) [131, 132].

El MMRE se encuentra definido como

$$MMRE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{e_i - \hat{e}_i}{e_i} \right|, \quad (4.17)$$

donde, e es el valor real de la variable, \hat{e} es el valor estimado de la variable, y n es el número de ensayos. El criterio para determinar el modelo como aceptable es que el modelo exhiba un $MMRE \leq 0,25$.

La PRED(l) se define como el cociente entre el número de casos de estimaciones que se encuentran dentro del límite absoluto del valor real dividido por el número total de ensayos. Se considera el modelo como aceptable, si $PRED(0,25) \geq 0,75$. Esto significa que al menos 75 % de las estimaciones presentan un valor estimado dentro del rango del 25 % del valor real.

A continuación se presentan los resultados de las simulaciones realizadas con el observador diseñado para la estimación de la variables de estado: concentración de sustrato y de biomasa, y las velocidades de reacción (parámetros variables en el tiempo), basado en la teoría de observadores no lineales para el proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB. Las simulaciones se realizaron asumiendo que el sistema se alimenta con datos de entrada $u(t_0)$ a tiempo cero (t_0), cuando el sistema se encuentra en un estado desconocido $x(t_0)$,

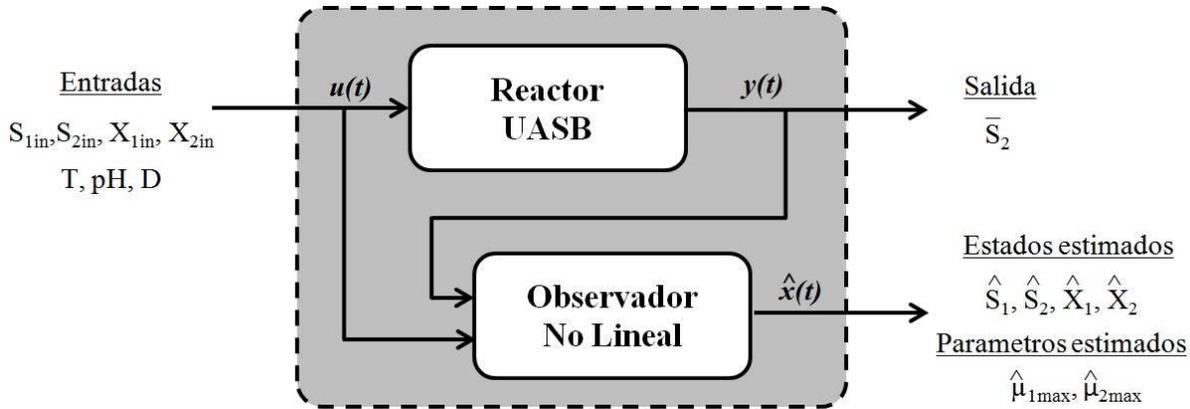


Figura 4.1.: Principio del observador no lineal basado en el modelo matemático del proceso

para efectos de simulación la salida medible $y(t_0)$ se adquirió de los datos reales históricos del reactor al igual que los valores de referencia para las variables de estado estimadas. La Figura 4.2 presenta el comportamiento del observador no lineal diseñado para la estimación de la concentración de ácidos grasos volátiles (variable medible). En la Figura 4.3 se presenta el comportamiento dinámico del observador con respecto a la variable estimada \hat{S}_1 , concentración de sustrato orgánico.

Los valores de ganancia del observador se encuentran sintonizados en $\theta_{11} = 0,08$, $\theta_{21} = 0,8$, $\theta_{12} = 0,04$ and $\theta_{22} = 0,02$. Las Figuras 4.5, 4.6 y 4.7 presentan los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas realizadas comparando el dato real y el valor de estado estable observado. La Figura 4.4 presenta la comparación de los datos reales de concentración de ácidos grasos volátiles y los estimados por el observador, resaltando que esta variable corresponde a la variable medida a la salida del reactor. Los resultados exhiben un MMRE del 0.02 %, y el 95 % de las simulaciones cumple con el criterio PRED(0.25).

La comparación entre los valores estimados y los valores reales de S_1 , expresados en términos de DQO , se presentan en la Figura 4.5. Los valores estimados presentan un error relativo medio de 8.27 %, con respecto a los valores experimentales, y un PRED(0.25) de 0.85. Por su parte, los valores reales de SSV con respecto a los valores estimados de X_1 y X_2 , se muestran en la Figura 4.6. Los resultados presentan un error relativo medio de error de 11.74 % y PRED(0.25) de 0,85.

En cuanto a los valores de los parámetros estimados, los resultados de las simulaciones se muestran en la Figura.4.7. Estos resultados son consistentes con la teoría, dado a que μ_{1max} se encuentra entre 0,5 y 3,8, y μ_{2max} entre los valores de 0,7 y 1,1.

4. Observadores no lineales

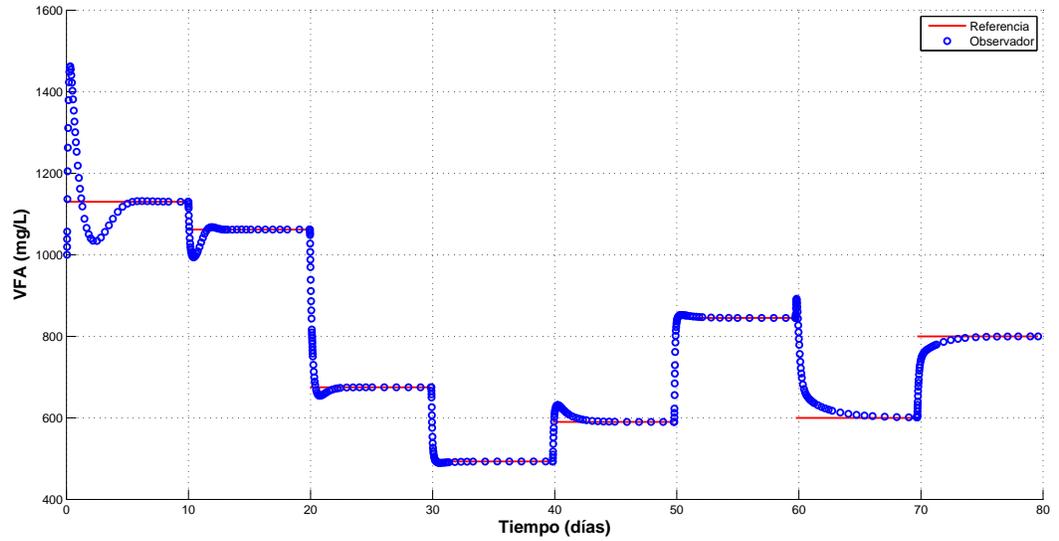


Figura 4.2.: Comportamiento dinámico del observador: estimación concentración AGV

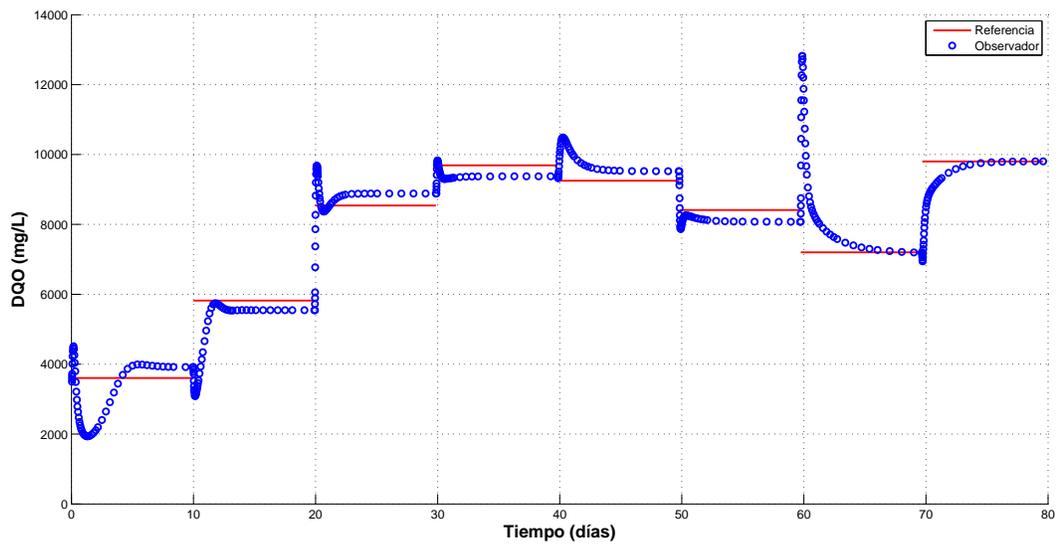


Figura 4.3.: Comportamiento dinámico del observador: estimación concentración DQO

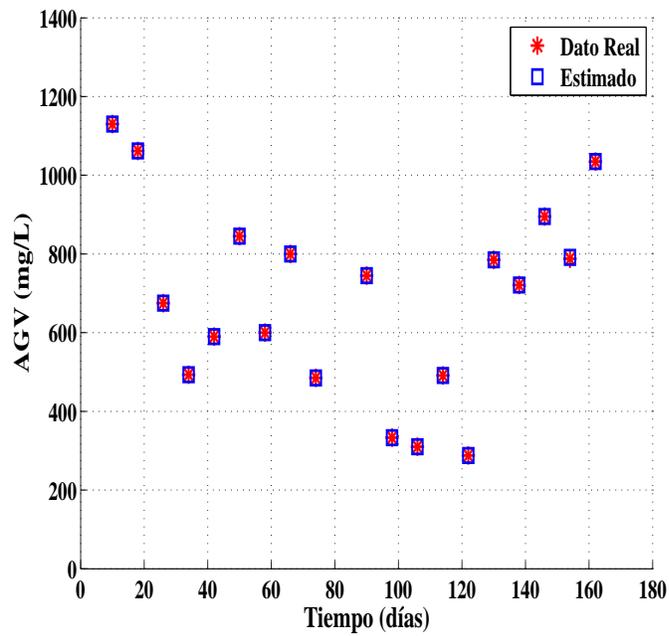


Figura 4.4.: Comparación entre valores estimados y datos reales de concentración de AGV

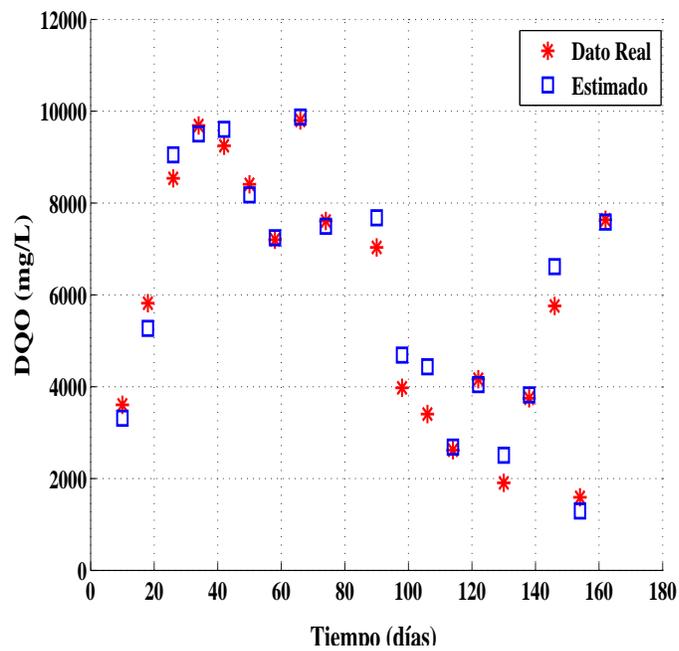


Figura 4.5.: Comparación entre valores estimados y datos reales de concentración de sustrato orgánico, DQO

4. Observadores no lineales

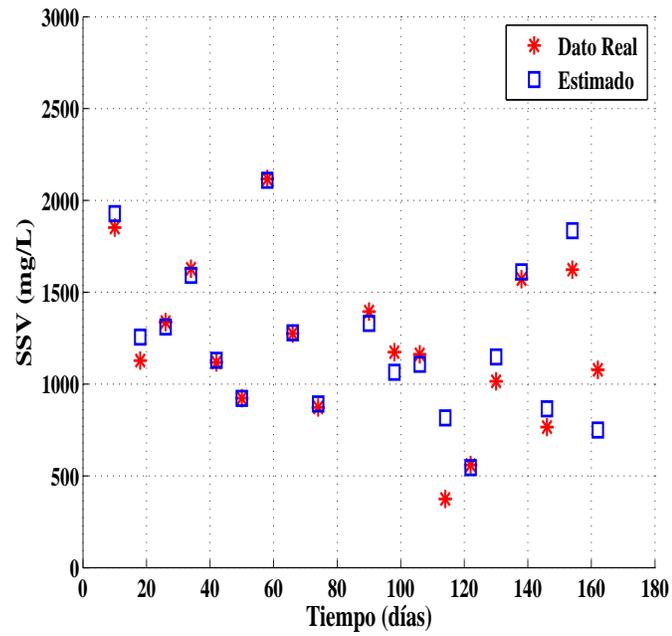


Figura 4.6.: Comparación entre valores reales de SSV y concentración total de biomasa estimadas (X_1+X_2)

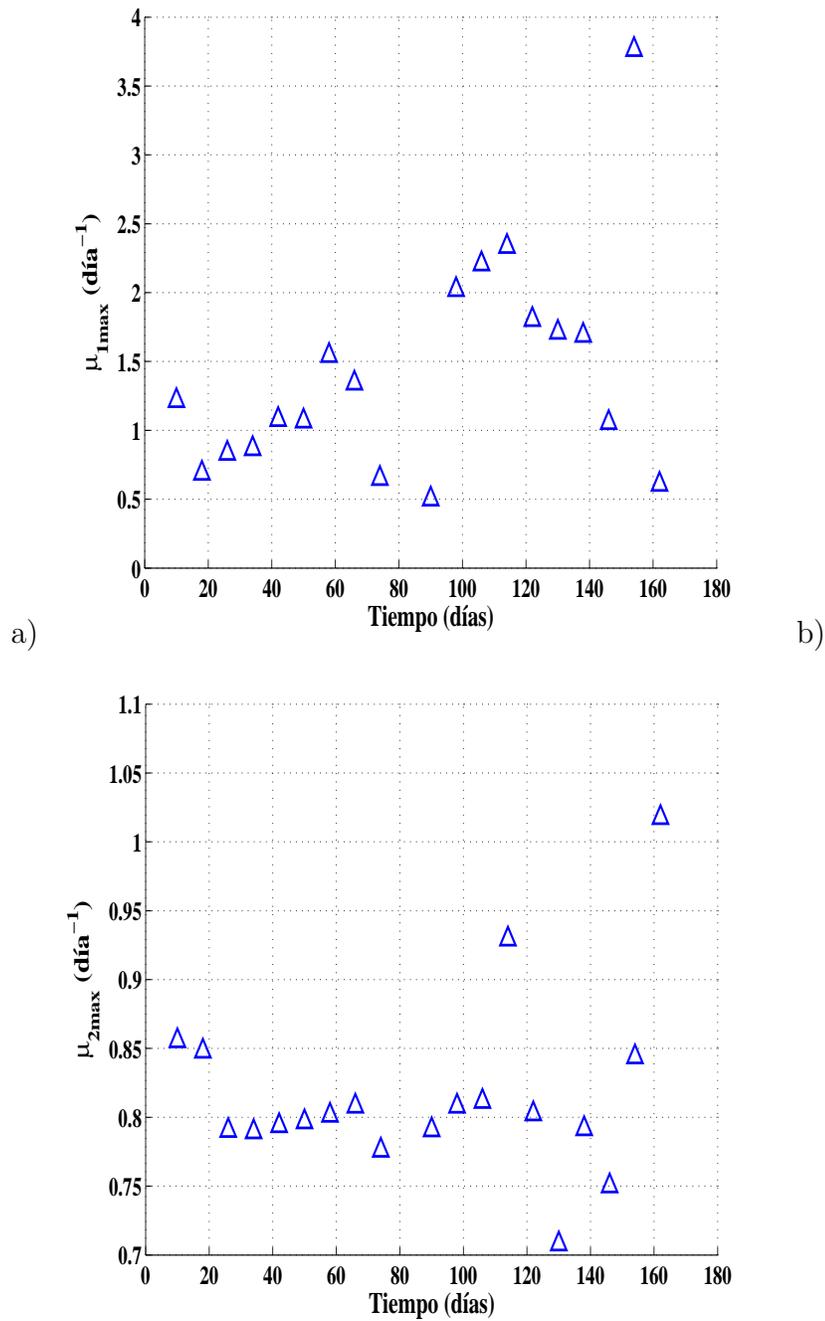


Figura 4.7.: Valores estimados de velocidad máxima de crecimiento bacteriano acidogénico (μ_{1max}) y metanogénico (μ_{2max})

4. Observadores no lineales

A partir de los resultados de las simulaciones numéricas y el error con respecto a los valores obtenidos de la planta real, se puede concluir que el modelo resultante representa adecuadamente la dinámica del sistema. En general, el modelo basado en la teoría de observadores no lineales presenta un MMRE de 6.68 % y un PRED(0.25) de 0.88. Eso significa que el modelo cumple con los criterios de MMRE y PRED(0.25), determinados para medir el desempeño del modelo.

Dada la complejidad del observador no lineal desarrollado en términos de su uso para estrategias de control, y teniendo en cuenta que las ecuaciones (3.1) y (3.2) del modelo matemático presentado en el Capítulo 2 correspondientes a la etapa acidogénica se encuentran desacopladas de las ecuaciones (3.3) y (3.4) de la etapa metanogénica, a continuación se propone un observador reducido basado en la teoría de observadores para representar la dinámica del proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB para el tratamiento de lixiviado. El observador no lineal se encuentra definido por las siguientes expresiones por etapas:

$$\dot{\hat{X}}_1 = D \left(X_1^0 - \alpha \hat{X}_1 \right) + \hat{\mu}_1 \hat{X}_1 \Theta^{T-20} I_{pH} - k_d \hat{X}_1 - \psi_1 \left(S_2 - \hat{S}_2 \right), \quad (4.18)$$

$$\dot{\hat{S}}_1 = D \left(S_1^0 - \hat{S}_1 \right) - k_1 \hat{\mu}_1 \hat{X}_1 \Theta^{T-20} I_{pH} - \theta_1^2 \left(S_2 - \hat{S}_2 \right), \quad (4.19)$$

$$\dot{\hat{\mu}}_{1 \text{ máx}} = - \frac{\theta_2^2}{\hat{\mu}_1 \hat{X}_1 \Theta^{T-20} I_{pH} - k_1 \hat{\mu}_1 \hat{X}_1 \Theta^{T-20} I_{pH}} \left(S_2 - \hat{S}_2 \right), \quad (4.20)$$

$$\dot{\hat{X}}_2 = D \left(X_2^0 - \alpha \hat{X}_2 \right) + \hat{\mu}_2 \hat{X}_2 \Theta^{T-20} I_{pH} - k_d \hat{X}_2 - \psi_2 \left(S_2 - \hat{S}_2 \right) - 2\theta_4 \left(S_2 - \hat{S}_2 \right), \quad (4.21)$$

$$\dot{\hat{S}}_2 = D \left(S_2^0 - \hat{S}_2 \right) + k_2 \hat{\mu}_1 \hat{X}_1 \Theta^{T-20} I_{pH} - k_3 \hat{\mu}_2 \hat{X}_2 \Theta^{T-20} I_{pH} - \theta_3^2 \left(S_2 - \hat{S}_2 \right) - 2\theta_4 \left(S_2 - \hat{S}_2 \right), \quad (4.22)$$

$$\dot{\hat{\mu}}_{2 \text{ máx}} = - \frac{\theta_4^2}{\hat{\mu}_2 \hat{X}_2 \Theta^{T-20} I_{pH} - k_3 \hat{\mu}_2 \hat{X}_2 \Theta^{T-20} I_{pH}} \left(S_2 - \hat{S}_2 \right), \quad (4.23)$$

donde

$$\hat{\mu}_1 = \frac{\hat{\mu}_{1 \text{ máx}} \hat{S}_1}{K_{S1} + \hat{S}_1},$$

$$\hat{\mu}_2 = \frac{\hat{\mu}_{2 \text{ máx}} \hat{S}_2}{K_{S2} + \hat{S}_2 + \left(\frac{\hat{S}_2}{K_I} \right)^2},$$

$$\psi_1 = \left(- \frac{\hat{X}_1 K_{S1} \theta_1^2}{\hat{S}_1 (K_{S1} + \hat{S}_1)} - \frac{(K_{S1} + \hat{S}_1) \theta_1^3}{k_1 \hat{\mu}_{1 \text{ máx}} \Theta^{T-20} I_{pH} \hat{S}_1} \right),$$

y

$$\psi_2 = \left(-\frac{\hat{X}_2 (K_{S_2} K_I^2 - \hat{S}_2^2) \theta_3^2}{\hat{S}_2 (K_{S_2} K_I^2 + \hat{S}_2 K_I^2 + \hat{S}_2^2)} + \frac{(K_{S_2} K_I^2 + \hat{S}_2 K_I^2 + \hat{S}_2^2) \theta_3^3}{k_3 \hat{\mu}_{2\text{máx}} \hat{S}_2 K_I^2} \right).$$

Los resultados de las simulaciones numéricas empleando el método matemático reducido se muestran en las Figuras 4.8, 4.9, 4.10 y 4.11.

La Figura 4.8, presenta la comparación de los datos de concentración de ácidos grasos volátiles, variable que corresponde a la variable medida a la salida del reactor, con respecto a la variable estimada por el observador. Los resultados exhiben un MMRE del 0.5 %, y todos los valores cumplen con el criterio PRED(0.25).

En la Figura 4.9, se presenta la comparación entre los valores estimados por el observador no lineal y los valores reales de concentración de sustrato orgánico (S_1) expresados en términos de demanda química de oxígeno (DQO). Los valores de referencia corresponden a los valores experimentales obtenidos del reactor real. Los valores estimados presentan un error relativo promedio (MMRE) del 10 % en relación con los datos reales; con respecto al nivel de predicción, el 85 % de los valores estimados se encuentran dentro del rango de 25 % del valor real del conjunto de datos.

El valor estimado de concentración de bacterias acidogénicas (X_1) y metanogénicas (X_2), se compara con el conjunto de datos reales de sólidos suspendidos volátiles (SSV). El 95 % de los valores estimados se encuentra dentro del rango 25 % del valor del conjunto de datos reales. El MMRE es del 12 %. Los resultados se presentan en la Figura 4.10.

Con respecto a los valores estimados de los parámetros desconocidos y variantes en el tiempo, los resultados son consistentes; el valor para la velocidad máxima de crecimiento acidogénica ($\mu_{1\text{max}}$) presenta valores estimados 0,4 y 3,8 y la velocidad máxima de crecimiento metanogénica ($\mu_{2\text{max}}$) entre 0,75 y 1,15. En la Figura 4.11 se presenta el resultado de las simulaciones.

4. Observadores no lineales

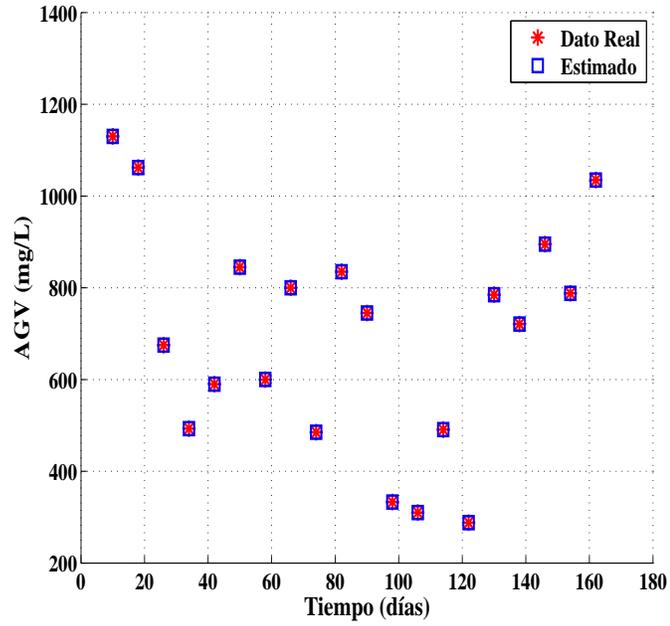


Figura 4.8.: Comparación entre valores estimados y datos reales de concentración de ácidos grasos volátiles (VFA)

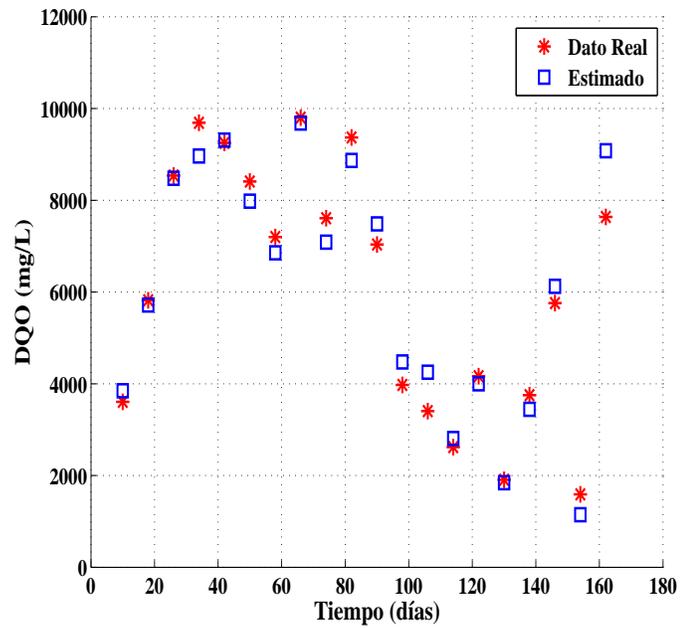


Figura 4.9.: Comparación entre valores estimados y datos reales de concentración de sustrato orgánico, COD

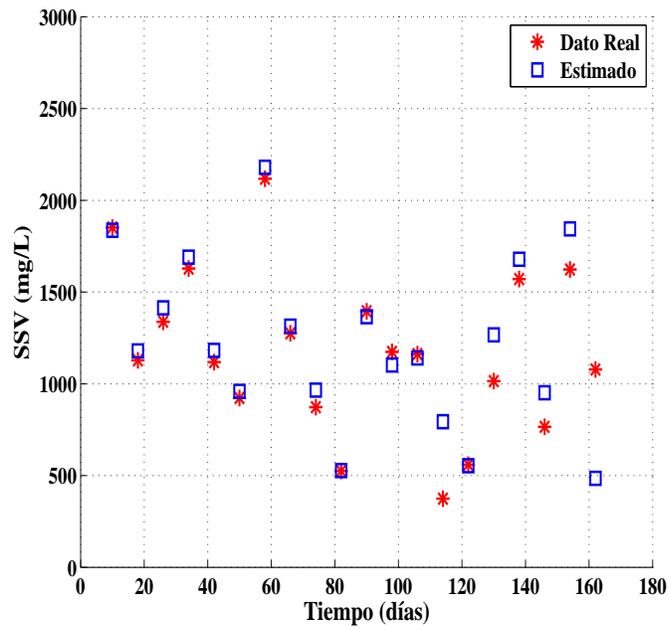
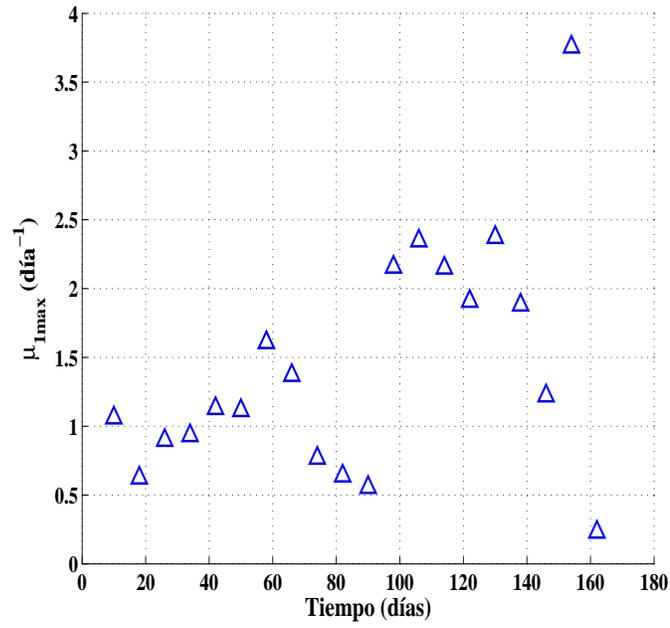
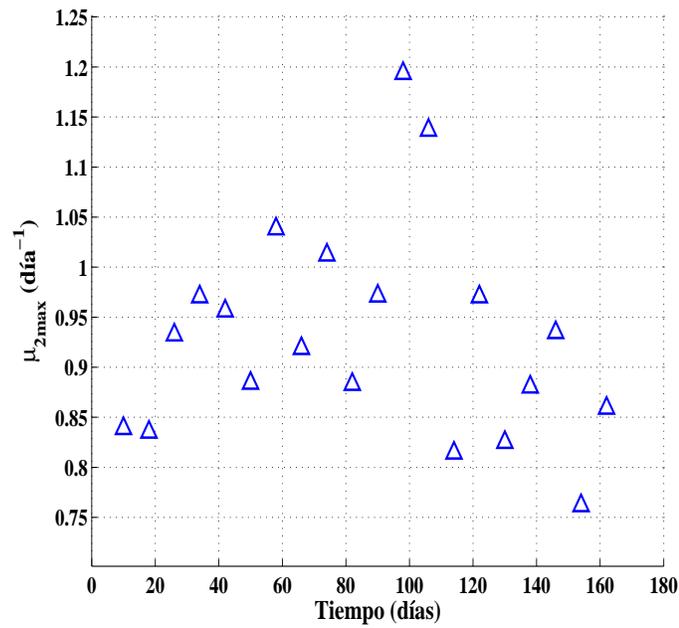


Figura 4.10.: Comparación entre valores reales de sólidos suspendidos volátiles y concentración total de biomasa estimadas (X_1+X_2)

4. Observadores no lineales



a)



b)

Figura 4.11.: Valores estimados de velocidad máxima de crecimiento bacteriano acidogénico (μ_{1max}) y metanogénico (μ_{2max})

El modelo diseñado presenta un desempeño adecuado para representar la dinámica del sistema. En general, el modelo basado en la teoría de observador no lineal para estimar variables de estado y parámetros desconocidos presenta un MMRE de 0.08 y PRED(0.25) de 0.93. Es decir, que satisface el criterio MMRE, ya que el valor calculado es inferior a 0.25 y el 93 % de las estimaciones están dentro del rango del 25 % del valor real. La Tabla 4.1 muestra el MMRE específico y PRED de cada una de las estimaciones de las variables.

Tabla 4.1.: Rendimiento exhibido por los modelos no lineales propuestos basado en la teoría de observadores

		Modelo 1	Modelo 2
Conjunto de datos 1: SSV	MMRE	0.1174	0.1211
	PRED(0.25)	0.8500	0.9500
Conjunto de datos 2: DQO	MMRE	0.0827	0.1074
	PRED(0.25)	0.8500	0.8500
Conjunto de datos 3: AGV	MMRE	0.0010	0.0046
	PRED(0.25)	1.0000	1.0000
General	MMRE	0.0668	0.0777
	PRED(0.25)	0.8333	0.9333

4.5. Conclusiones

Se presenta un modelo dinámico no lineal basado en la teoría de observadores para modelar el proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB de tratamiento de lixiviado. El modelo propuesto estima las variables de estado no medibles en línea y los parámetros desconocidos variables en el tiempo, a partir de la medición de la concentración de ácidos grasos volátiles. La concentración de ácidos volátiles es uno de los ensayos de control más importantes en el proceso de digestión anaerobia; los ácidos grasos son un producto intermedio cuya acumulación causa disminución de pH, generando la inestabilidad en el bioreactor hasta un posible lavado.

El criterio usado para evaluar el desempeño del observador, corresponde al $MMRE \leq 0.25$ y $PRED(0.25) \geq 0.75$. Los resultados muestran un buen desempeño del modelo no lineal, ya que satisface los dos criterios establecidos; considerándose como aceptable para representar la dinámica del proceso. Los observadores no lineales propuesto en este capítulo puede ser utilizado para el diseño de esquemas de control.

5. Control predictivo basado en el modelo no lineal de un proceso de digestión anaerobia

La necesidad de mejorar la estabilidad y eficiencia de los procesos biotecnológicos ha aumentado el interés por el uso de estrategias de control moderno. En este capítulo se presenta el diseño de un algoritmo de control predictivo basado en un modelo no lineal para el proceso de digestión anaerobia en un reactor UASB de tratamiento de lixiviado. El objetivo de control es regular la concentración de sustrato orgánico a la salida del sistema de tratamiento, en cumplimiento con la normatividad ambiental vigente en Colombia. La estrategia de control involucra un observador adaptativo a fin de garantizar la respuesta del controlador ante la presencia de perturbaciones o variaciones de parámetros. El diseño del controlador involucra de manera explícita las no linealidades y las restricciones del proceso, a fin de garantizar el cumplimiento de las especificaciones consideradas. El desempeño del controlador se evalúa realizando simulaciones numéricas del sistema en lazo cerrado con datos experimentales obtenidos a diferentes condiciones de operación del reactor.

5.1. Antecedentes

El concepto de control predictivo basado en el modelo o *Model Predictive Control* (MPC) surgió a principios de los años 60 con Zadeh y Whalen [133] y Propoi [134], quienes establecieron por primera vez el enfoque del horizonte en movimiento y lo denotaron con el nombre de Control óptimo en Lazo Abierto. A finales de la década del 70, Richalet [135] describe el control predictivo del modelo heurístico (MPHC) basado en un modelo de respuesta al impulso, cuyo software emplea un algoritmo interactivo heurístico para el cálculo de entradas óptimas denominado IDCOM (Identification and Command), más tarde conocido como control algorítmico del modelo (MAC).

En 1973 los ingenieros de Shell Oil Co. desarrollaron la primera aplicación de control predictivo a escala industrial, Cutler y Ramaker [136] presentaron el algoritmo de control multivariable denominado Control de Matriz Dinámica (DMC) con respuesta al escalón, función objetivo en un horizonte de predicción finito y solución del problema de opti-

mización por mínimos cuadrados. Los algoritmos del MAC y DMC fueron las primeras estrategias de control que utilizaron de manera explícita el modelo del proceso para predecir el efecto de las acciones de control en la salida mediante la minimización del error e incluyendo las restricciones operacionales del proceso [137].

Estos algoritmos impulsaron el interés por el desarrollo investigativo sobre el control óptimo aplicable, dando como resultado las primeras estrategias de MPC basado en el modelo del proceso y en una función de costo para obtener la señal de control óptima.

Las estrategias de control predictivo basado en el modelo (MPC) hacen uso de una representación explícita del proceso a controlar para predecir su comportamiento futuro. El modelo del proceso forma parte del algoritmo de control a fin de estimar el valor de las variables controladas a lo largo de un horizonte temporal. La señal de control adecuada para conducir la salida predicha al valor deseado se obtiene a partir de la minimización de una función de costo sujeta a las restricciones de las variables del proceso [138, 139]. Por lo tanto, el desempeño de la estrategia de control MPC depende de la exactitud del modelo del proceso y de una adecuada sintonización del controlador.

Inicialmente la implementación del MPC en la industria era limitada debido a las incertidumbres creadas por el uso de modelos lineales en los algoritmos de control, y a que el controlador no garantizaba la estabilidad del sistema. En general, el control predictivo basado en el modelo lineal (LMPC) se diseña con formulación explícita o implícita de la ley de control, en el espacio de estados o entrada-salida para sistemas SISO (Single Input/Single Output) o MIMO (Multiple Inputs/Multiple Outputs) [140].

De acuerdo al estudio realizado por Qin y Badgwell [15] en el año 2003, es evidente el aumento significativo en el número de aplicaciones totales de MPC desde el año 1997, lo cual implica la adaptabilidad y aceptación de esta tecnología en la industria. En este estudio se identificaron como principales áreas de aplicación de estrategias de control LMPC en la industria, las refinerías y petroquímicas, siendo Aspen Tech el proveedor con la aplicación más grande en olefinas con 283 variables manipuladas y 603 variables controladas.

Desde entonces, las estrategias de control predictivo tales como IDCOM, DMC, QDMC, RMPCT y GPC han sido ampliamente utilizadas y aplicadas exitosamente en la industria [139], éxito que ha sido analizado en detalle por Qin y Badgwell [141, 15] y por Bauer y Craig [142]. La implementación del MPC en la industria ha demostrado ser una estrategia de control adecuada para la operación de los procesos en una región óptima, ya que involucra las restricciones dadas por el proceso real garantizando un margen de seguridad adecuado. La estrategia de control también permite minimizar los costos operativos a partir de la optimización de la señal de control y maximizar la producción haciendo uso de la capacidad máxima del proceso, reduciendo costos a través de la conservación de energía [143].

La Figura 5.1 presenta una jerarquización típica de un sistema de control predictivo en planta. En la parte superior de la estructura se encuentra el optimizador de toda la planta, el cual como su nombre lo indica, se encarga de optimizar la configuración de cada unidad, dicha configuración es enviada a los optimizadores locales de cada unidad donde tiene lugar la optimización de la señal de control en consideración con las restricciones del sistema. En

5. Control predictivo basado en el modelo no lineal de un proceso de digestión anaerobia

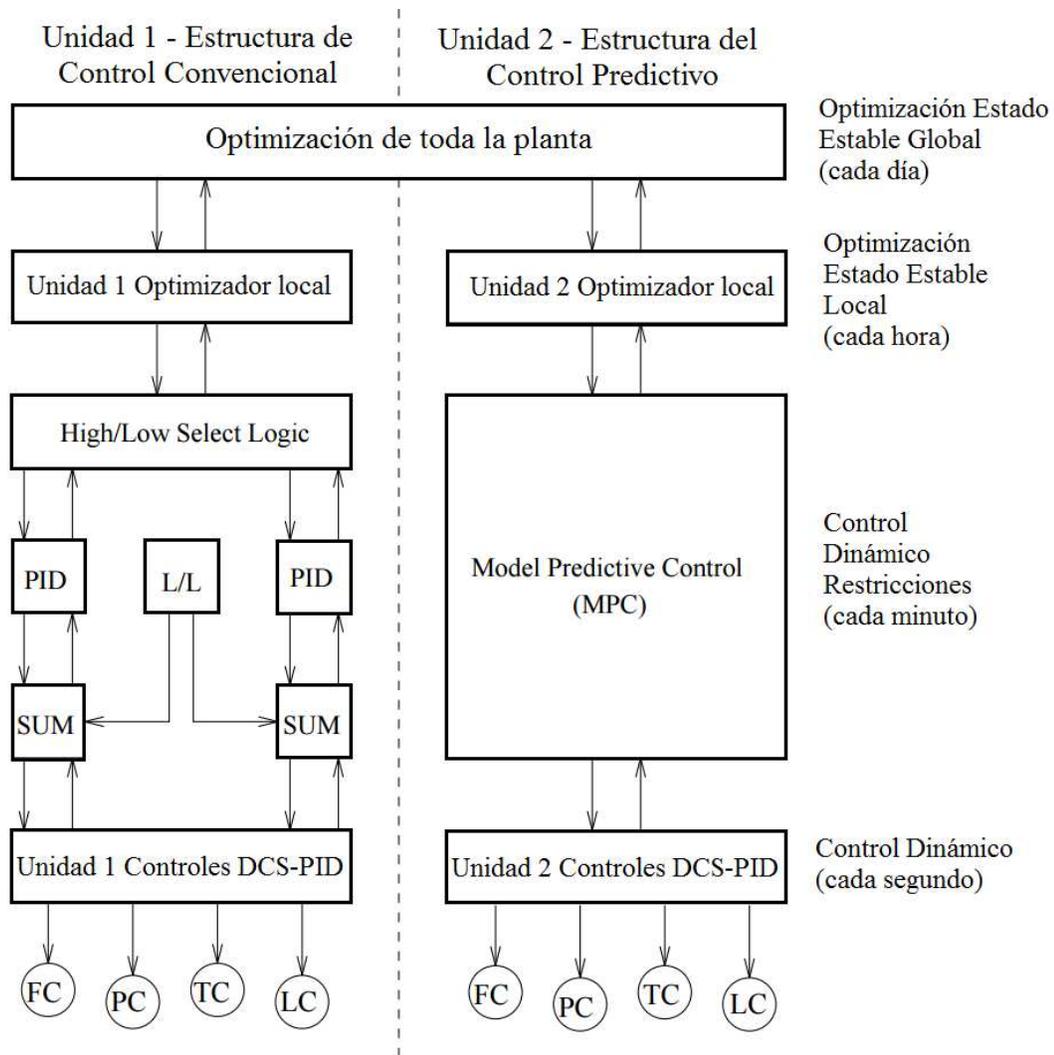


Figura 5.1.: Jerarquía típica de un sistema de control en una planta. A la izquierda se presenta la estructura convencional, a la derecha la estructura del MPC [141]

la estructura convencional esta estrategia de control se logra mediante una combinación de diferentes algoritmos de control, mientras que en la metodología MPC esta combinación se reemplaza por un único controlador MPC [141].

5.2. Control predictivo basado en el modelo no lineal

El control predictivo no lineal basado en el modelo (NMPC) se encuentra particularmente orientado al control de procesos altamente no lineales e inestables donde se requiere seguir una trayectoria desde la predicción de un modelo no lineal, procesos que operan en o

cerca a puntos que no pueden ser capturados por controladores lineales y donde se necesita información de orden superior [14]. De acuerdo al estudio desarrollado por Qin y Badgwell [15], las principales aplicaciones del NMPC en la industria se han realizado en el área de química, aire y gas, polímeros, y refinerías.

El NMPC se basa en el concepto de generación de valores para las entradas como resultado de la solución de un problema de optimización no lineal, en el cual el modelo dinámico del proceso cumple un papel fundamental debido a que se utiliza en diferentes fases del algoritmo de control para predecir los efectos sobre las variables controladas. Dependiendo del enfoque que se le quiera dar al diseño de la estrategia de control, la solución de la función de costo en cada periodo de tiempo permite mejorar la actuación del controlador y alcanzar el punto de referencia deseado, inclusive ante la presencia perturbaciones.

Las ventajas del NMPC se podrían asociar principalmente a su capacidad para manejar intrínsecamente la dinámica no lineal y complejidad de los procesos con múltiples entradas y salidas. El NMPC involucra las restricciones de las variables de estado y variables de control, optimiza el valor de la señal de control y el punto de operación dentro de diferentes rangos de operación, además, la estrategia de control puede ser formulada con base en modelos matemáticos o modelos semi-empíricos no lineales, siempre y cuando se resuelva de manera eficaz el problema de control óptimo dinámico en tiempo real [18, 144].

A pesar del gran desarrollo del NMPC y sus ventajas frente a otros controladores, su aplicación no se ha extendido como se esperaba, debido a algunas dificultades en el diseño e implementación del algoritmo, los cuales siguen siendo objeto de estudio. Dentro de las principales limitaciones que se han derivado para el diseño del algoritmo, se encuentra la dificultad de construir el modelo no lineal del proceso. Las dinámicas no lineales están presentes en casi todas las aplicaciones de ingeniería, y el desarrollo de los modelos adecuados para definir estas dinámicas resulta ser en ocasiones difícil, ya que no existe un modelo generalizado para representar dichos procesos. El diseño de modelos dinámicos no lineales se ha convertido en un reto para el control de procesos, debido a la ausencia del principio de superposición y a la necesidad de determinación experimental, requiriendo una gran cantidad de ensayos para analizar la respuesta del proceso ante todas las posibles señales de entrada.

Los tres tipos principales de modelos que se han utilizado para la construcción de las dinámicas no lineales son: (i) modelos empíricos, (ii) modelos fundamentales los cuales son obtenidos a partir de los balances, y (iii) modelos de caja gris los cuales son una combinación de los métodos empíricos y fundamentales [137]. Recientemente, ha aumentado el interés por el uso de redes neuronales para la identificación y el control de sistemas dinámicos complejos, la principal ventaja de estos modelos radica en la capacidad para aproximar uniformemente las asignaciones arbitrarias de entrada-salida y la capacidad de aprendizaje que permiten al controlador resultante adaptarse a las posibles variaciones en la dinámica de la planta controlada [14]. No obstante, este tipo de modelos requieren de una cantidad representativa y suficiente de datos experimentales, lo cual limita su uso en algunos procesos.

Otro de los grandes retos del diseño de estrategias de control basado en el modelo, es el

5. Control predictivo basado en el modelo no lineal de un proceso de digestión anaerobia

efecto de la estabilidad, este tema ha sido un campo de investigación bastante amplio en la academia. Inicialmente, las condiciones de estabilidad se lograban asumiendo un horizonte de predicción suficientemente largo. Posteriormente, en el año 2000 se propuso emplear la teoría de Lyapunov para determinar las condiciones de estabilidad del MPC [145].

Por otra parte, se encuentra la robustez del sistema de control, un tema que ha conducido a la literatura sobre MPC y NMPC diferir en diferentes aspectos, como lo expone Mayne en su publicación [144]. La solución del problema de optimización implica un aumento considerable en el tiempo de cálculo, dando lugar a que la ley de control se restrinja a un conjunto de sistemas de dinámica lenta. El problema de optimización es no convexo, por lo tanto, la obtención de un óptimo global depende del solucionador, afectando la calidad del control y conduciendo a otros problemas relacionados con la estabilidad y la robustez.

5.3. Estrategia de control predictivo no lineal

La estrategia de control predictivo basado en el modelo no lineal se aplica en un horizonte de predicción finito, como se presenta en la Figura 5.2. La estrategia de control corresponde a la solución de un problema de optimización en cada tiempo de muestreo, inicializando el algoritmo con las señales de entrada como estado inicial del problema de control óptimo. El problema de optimización se formula sobre un intervalo de tiempo u horizonte de predicción que inicia en el momento actual hasta un determinado momento en el futuro, el resultado de la optimización es una secuencia de señales de control óptimo. La estrategia de control se encuentra sujeta a un modelo dinámico, a unas restricciones, a un objetivo de control y a unos pesos de penalización, por lo tanto, para el desarrollo de la estrategia de control predictivo el primer paso corresponde al diseño de un modelo no lineal del proceso en lazo abierto que describa el comportamiento dinámico del sistema, seguido por la identificación de las restricciones de las variables, rangos de operación y puntos de referencia, y la especificación de los valores de penalización del error entre la variable medida y el punto de referencia, y la penalización del esfuerzo de control en la función de costo.

La solución del problema de optimización da como resultado las señales óptimas de control en el horizonte de predicción, la primera señal se aplica al proceso y se descartan las restantes. En el siguiente periodo de muestreo se inicializa nuevamente el problema de optimización, se resuelve sobre el horizonte de predicción y se aplica la primera señal de control de la secuencia. Esto implica que el algoritmo de control se alimenta con información actual del sistema en cada tiempo de muestreo, es decir, que corresponde un lazo de control por retroalimentación.

El resultado de la solución óptima de la estrategia de control depende de la precisión y exactitud del modelo, sin embargo, un modelo complejo implica un aumento considerable en el tiempo de cálculo, dando lugar a que la ley de control se restrinja a un conjunto de sistemas de dinámica lenta, como se mencionó en la sección anterior. Generalmente los modelos de predicción utilizados en NMPC suelen ser modelos simplificados capaces de

capturar las principales relaciones dinámicas del proceso.

La estrategia de control basado en el modelo se encuentra definida en términos generales de la siguiente forma:

- (1) En el tiempo t_0 , se predice la salida futura del proceso dentro del rango de predicción a partir del modelo no lineal. Las salidas predichas $y(t_0 + j|t_0); j = H_0, \dots, H_p$, dependen de los valores conocidos del pasado de las señales de entrada y de salida en el momento t_0 , y de la trayectoria futura de la señal de control $u(t_0 + j|t_0); j = 0, \dots, H_c - 1$, producto de la estrategia de control. La trayectoria futura de control se genera como una posible solución del problema de optimización.
- (2) La trayectoria de control se calcula a partir de la solución del problema de optimización, el cual considera una función objetivo J y las restricciones del proceso. La función objetivo normalmente devuelve la desviación de la trayectoria prevista $y(t_0 + j|t_0)$ de la referencia $r(t_0 + j)$. El criterio de optimización usualmente toma la forma de una función cuadrática del error de la trayectoria con respecto a la referencia, también puede incluir el término referente al esfuerzo de control.
- (3) En el tiempo $t \in \mathbb{Z}^+$, para controlar el proceso se aplica la primera señal $u(t_0|t_0)$ de la trayectoria de control obtenida. Las señales de control restantes se descartan, puesto que al siguiente instante de muestreo $t_0 + 1$ ya se conoce la nueva salida $y(t_0 + 1)$. La estrategia de control entra en un nuevo lazo de optimización y las señales de control restantes se utilizan para inicializar el optimizador. Por lo tanto, se calcula por tanto $u(t_0 + 1|t_0 + 1)$, el cual en principio será diferente al $u(t_0 + 1|t_0)$ ya que disponen de nueva información, haciendo uso del concepto de horizonte deslizante.

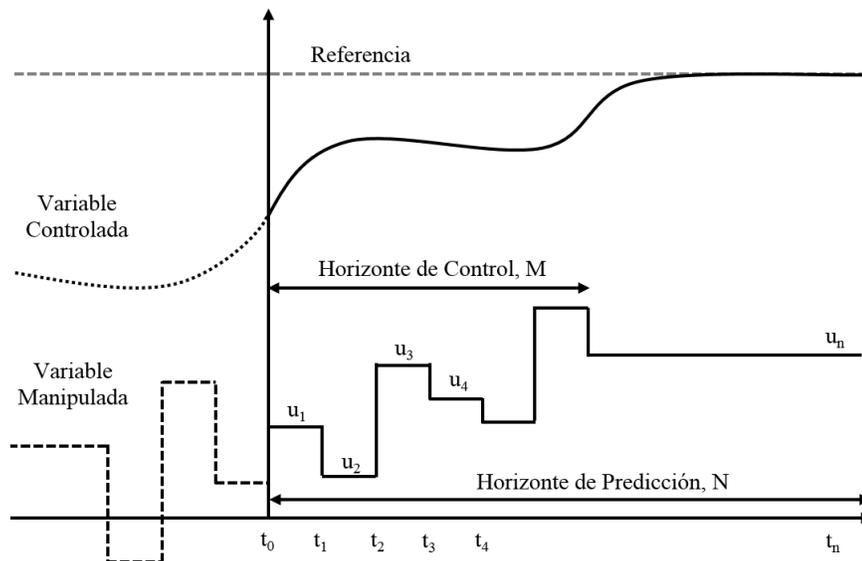


Figura 5.2.: Esquema de la estrategia de control NMPC

5.4. Planteamiento del problema de control predictivo aplicado a un reactor UASB

El objetivo del reactor UASB para el tratamiento de lixiviado es descomponer la materia orgánica del afluente, de tal manera que la concentración del sustrato en el efluente del reactor medido en términos de demanda química de oxígeno (DQO) se encuentre dentro de los límites permitidos por la reglamentación ambiental vigente. La degradación de la materia orgánica en un reactor UASB se realiza mediante un proceso de digestión anaerobia en el cual intervienen grupos microbianos sensibles a las variaciones de las condiciones operativas del reactor, principalmente por variaciones en la carga orgánica, en el pH y la temperatura.

Al realizar un análisis de los datos históricos del comportamiento del bioreactor, se observa que los valores de las variables y los parámetros a la entrada y salida del reactor presentan valores en un amplio rango, por lo cual no es posible hacer una linealización alrededor de un único punto de equilibrio, resultado necesaria la implementación de una estrategia de control que envuelva la dinámica del sistema incluyendo los efectos no lineales.

En este caso particular y dadas las características del proceso, se diseña una estrategia de control predictivo basado en un modelo no lineal. La estrategia involucra un observador adaptativo a fin de garantizar la respuesta del controlador ante la presencia de perturbaciones o variaciones de parámetros. El observador y el controlador utilizan el mismo modelo no lineal (modelo descrito en el Capítulo 2) para formular la estrategia de control.

El controlador hace uso del modelo de espacio de estado no lineal para la estimación de los parámetros y estados que no son medibles en línea, y para la síntesis de la ley de control. La solución del problema de optimización no lineal se realiza mediante un algoritmo, el cual tiene como propósito minimizar el error entre el modelo y el sistema en cada tiempo de muestreo al estimar parámetros desconocidos y generar la ley de control entre los puntos de ajuste futuros y salidas futuras a lo largo del horizonte de predicción, haciendo uso de la variable de salida como factor de ajuste.

5.4.1. Formulación del control predictivo basado en el modelo no lineal

El modelo que se emplea para describir el comportamiento del sistema es un modelo no lineal, en variables de estado y discretizado. El modelo de predicción considerado tiene la forma [146],

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= f(x_k, u_k) \\y_{k+1} &= g(x_{k+1})\end{aligned}\tag{5.1}$$

siendo f la función de estado no lineal, g la función de salida, $x \in \mathbb{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ es el vector de estado, $y \in \mathbb{Y} \subseteq \mathbb{R}^n$ es el vector de salida y $u \in \mathbb{U} \subseteq \mathbb{R}^m$ las actuaciones sobre el sistema

5.4. Planteamiento del problema de control predictivo aplicado a un reactor UASB

en el instante $k \in \mathbb{Z}^+ (t_0)$. Sea

$$\mathbf{u}_k(x_k) \triangleq (u_{0|k}, u_{1|k}, \dots, u_{H_p-1|k}) \in H_p \quad (5.2)$$

la secuencia de entrada en un horizonte fijo de predicción H_p . Por otra parte, la secuencia de entrada admisible con respecto al estado $x_k \in \mathbb{X}$ se encuentra definida por

$$\mathcal{U}_{H_p}(x_k) \triangleq \{ \mathbf{u}_k \in H_p \mid \mathbf{x}_k \in H_p \}, \quad (5.3)$$

donde

$$\mathbf{x}_k(x_k, \mathbf{u}) \triangleq (x_{1|k}, x_{2|k}, \dots, x_{H_p|k}) \in H_p \quad (5.4)$$

corresponde a la secuencia de estados generados mediante la aplicación de secuencia de entrada 5.2 para el sistema 5.1 del estado inicial $x_{0k} \triangleq x_k$, donde x_k es la medida o estimación del estado actual (condición inicial). Por lo tanto, el horizonte de predicción es la base para la solución del problema de optimización en lazo abierto (open-loop optimisation problem, OOP). En términos generales, el problema de optimización se puede escribir de la forma,

$$\min_{\{u_k \in \mathcal{U}_{H_p}\}} J(\mathbf{u}_k, x_k, H_p) \quad (5.5)$$

sujeto a

$$\begin{aligned} H_{iq}^u \mathbf{u}_k &\leq b_{iq}^u, \\ G_{iq} \mathbf{x}_k + H_{iq} \mathbf{u}_k &\leq b_{iq}, \\ H_{eq}^u \mathbf{u}_k &= b_{eq}^u, \\ G_{eq} \mathbf{x}_k + H_{eq} \mathbf{u}_k &= b_{eq}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

donde J es la función de costo con su dominio en el conjunto de estados factibles, H_p denota el horizonte de predicción, y H_{iq}^u , G_{iq} , H_{eq}^u , G_{eq} , b_{iq}^u , b_{iq} , b_{eq}^u , y b_{eq} son matrices.

La predicción en el horizonte H_p depende de la secuencia de actuaciones aplicadas desde el instante k hasta el instante $k + j$, donde el estado del sistema predicho se define como $x(k + j|k)$. Por lo tanto,

$$x(k + j + 1|k) = f(x(k + j|k), u(k + j|k)). \quad (5.7)$$

Cuando $H_p = \infty$, el problema de optimización es de horizonte infinito, y cuando $H_p \neq \infty$, es llamado problema de horizonte finito. Restricciones empleadas para garantizar la estabilidad del sistema en lazo cerrado pueden ser incluidas en las expresiones (5.6) [146]. Asumiendo que el problema de optimización es factible para $x \in \mathbb{X}$, es decir que \mathcal{U}_{H_p} , la solución óptima esta dada por

$$\mathbf{u}_k^*(x_k) \triangleq (u_{0|k}^*, u_{1|k}^*, \dots, u_{H_p-1|k}^*) \in \mathcal{U}_{H_p}, \quad (5.8)$$

siendo la señal de control

$$u_{NMPC}(x_k) \triangleq u_{0|k}^*. \quad (5.9)$$

5.4.2. Objetivo de control

El objetivo de control es garantizar la regulación de la concentración de sustrato orgánico en el valor límite máximo permisible por la normatividad ambiental aplicable. En Colombia, las autoridades ambientales regionales (CAR) son las instituciones encargadas de la aplicación de las políticas y reglamentos nacionales, así como la gestión de los recursos naturales y el control de la contaminación del agua de fuentes puntuales y no puntuales. Toda persona o entidad que desee realizar una descarga en un cuerpo de agua tiene que presentar una solicitud de permiso a la autoridad ambiental regional, donde se evalúa si la descarga se ajusta a las normas nacionales para cada contaminante, de lo contrario, la autoridad puede solicitar el tratamiento de las aguas vertidas dentro de un plan de cumplimiento [147].

El Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible por medio de la Resolución 0631 del 17 de marzo de 2015 establece los parámetros y valores límites máximos permisibles en los vertimientos puntuales a cuerpos de aguas superficiales. En el artículo 14, se encuentran dispuestos los parámetros físico químicos a monitorear y sus valores límites máximos permisibles en los vertimientos puntuales de aguas residuales no domésticas asociadas con actividades de servicios de tratamiento y disposición de residuos. En la Tabla 5.1, se encuentran estipulados los parámetros generales a monitorear y los valores límites permisibles aplicables al vertimiento de lixiviados. El valor límite permisible de concentración de sustrato orgánico, expresado en términos de demanda química de oxígeno (DQO) es de 2000 mg/L.

5.4.3. Función objetivo

El principio de la estrategia de control es predecir el comportamiento del sistema sobre el horizonte de predicción, H_p . En este sentido, el objetivo de control se expresa matemáticamente a través de la función objetivo o función de costo. Una función definida positiva que expresa el costo asociado con una evolución particular del sistema sobre el horizonte

Tabla 5.1.: Parámetros físico químicos generales a monitorear y sus valores límites máximos permisibles [148]

Parámetro	Unidades	Valor permisible
pH	Unidades de pH	6.00 a 9.00
Demanda Química de Oxígeno, DQO	mg/L O ₂	2000
Demanda Bioquímica de Oxígeno, DBO	mg/L O ₂	800
Sólidos Suspendidos Totales, SST	mg/L	400
Sólidos Suspendidos Sedimentables, Ssed	mg/L	5
Grasas y aceites	mg/L	50

5.4. Planteamiento del problema de control predictivo aplicado a un reactor UASB

de predicción, H_p , indicando el criterio a ser optimizado. La función de costo generalmente tiene la forma

$$J_{H_p}(x_k, u_F(k)) = \sum_{j=1}^{H_p} L(x(k+j|k), u(k+j|k)) + V(x(k+H_p|k)), \quad (5.10)$$

donde L es la función objetivo por etapa y V la función objetivo terminal hasta un horizonte H_p . Durante el horizonte de predicción,

$$u_F(k) = \{u(k|k), u(k+1|k), \dots, u(k+H_p-1|k)\}. \quad (5.11)$$

En este estudio el objetivo del controlador es garantizar que la salida predicha en el horizonte de predicción siga la señal de referencia, mientras se penaliza el esfuerzo de control. El criterio de minimización corresponde a la suma de errores al cuadrado de la salida predicha respecto a la referencia y al cuadrado de los incrementos en la señal de control, como se muestra a continuación,

$$J_{H_p}(x, u) = \sum_{j=1}^{H_p} \kappa_1 \|x_j - x_j^{ref}\|^2 + \sum_{j=1}^N \kappa_2 \|\Delta u\|^2, \quad (5.12)$$

donde x_j corresponde a la variable de salida predicha $x(k+j|k)$, para este caso, corresponde a la concentración de sustrato orgánico en términos de demanda química de oxígeno (S_1), x_j^{ref} es el valor de referencia, Δu es la diferencia generada por la secuencia de las señales del esfuerzo de control del factor de dilución, D . κ_1 and κ_2 , son los parámetros de penalización del error y del esfuerzo de control, respectivamente. Por otra parte, $\|\cdot\|$ indica la norma cuadrática.

En la Tabla 5.2, se presentan los valores de los parámetros usados en la estrategia de control aplicada a un bioreactor para el tratamiento de lixiviado.

Tabla 5.2.: Valores de los parámetros del controlador NMPC

Parámetro	Descripción	Valor
κ_1	Error de penalización de S_1	20
κ_2	Error de penalización del esfuerzo de control D	10
H_p	Horizonte de predicción	5
H_c	Horizonte de control	5
Δt	Tiempo de muestreo, días	0.5
t_{sim}	Tiempo de simulación, días	10

5.4.4. Restricciones

Las restricciones son el conjunto de límites dentro de los cuales se encuentran las variables del proceso. Generalmente, los límites son determinados por las restricciones físicas del proceso o condiciones de seguridad, y se expresan como el conjunto de las variables de estado $X \subseteq \mathbb{R}$ y el conjunto de variables de control $U \subseteq \mathbb{U}$.

Para este caso, los valores de las variables de estado admisibles corresponden a las concentraciones de sustrato y biomasa, por lo tanto, deben ser reales positivos ($x \in \mathbb{R}^+$). Estas restricciones son:

$$0 \leq F \leq 5L/s \quad (5.13)$$

La variable de control corresponde al factor de dilución, el cual es una relación del caudal y el volumen de líquido en el reactor ($D = F/V$); el volumen del reactor es constante, por ende la señal de control está limitada por las especificaciones de la válvula que regula el flujo de entrada al bioreactor. La válvula es en acero inoxidable de sello elástico según EN 593, especial para aguas residuales con disco céntrico montado en tres casquillos del cojinete libres de mantenimiento y velocidad de flujo máximo en posición abierta de 3 m/s. Por lo tanto, el límite para la señal de control se define como:

$$X_1 \geq 0, \quad (5.14)$$

$$X_2 \geq 0, \quad (5.15)$$

$$S_2 \geq 0, \quad (5.16)$$

$$0 \leq S_1 \leq S_1^0. \quad (5.17)$$

El problema de optimización asociado al controlador predictivo basado en el modelo no lineal de un reactor UASB para el tratamiento de lixiviado, se reduce a la siguiente formulación:

$$\begin{aligned} & \min_{u_F(k)} J_{H_p}(x_k, u_F(k)) \\ & \text{sujeto a} \\ & \quad x(k+j|k) \in \mathbb{U} \quad j = 0, \dots, H_p - 1 \\ & \quad u(k+j|k) \in \mathbb{X} \quad j = 0, \dots, H_p - 1 \\ & \quad x(k+H_p|k) \in \Omega. \end{aligned} \quad (5.18)$$

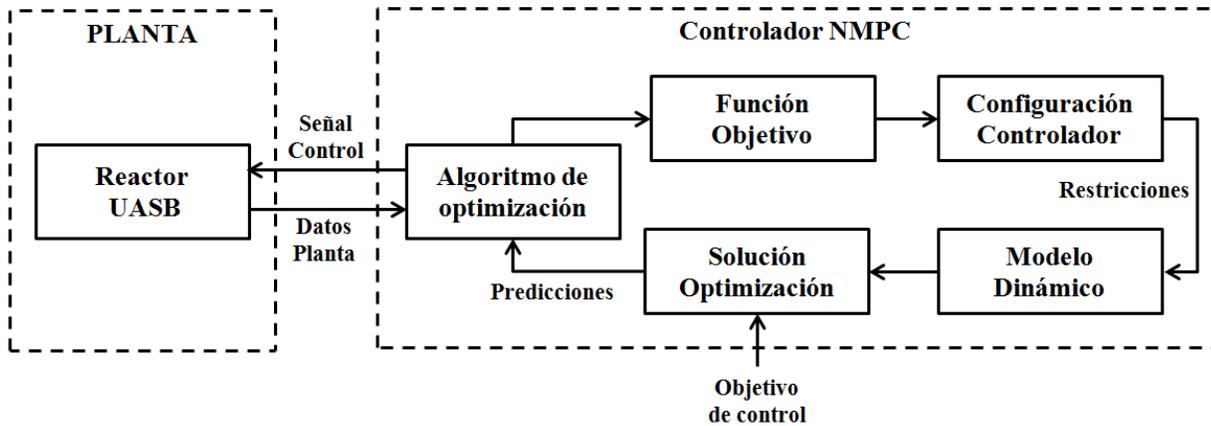


Figura 5.3.: Esquema de la estrategia de control NMPC

5.4.5. Diseño del NMPC

El diagrama del algoritmo propuesto se describe de manera gráfica en la Figura 5.3. El esquema de la estrategia de control NMPC para un reactor UASB involucra el flujo de datos desde la planta hacia el controlador y del controlador a la planta, incluyendo las etapas del mismo. El algoritmo empleado se diseña bajo el enfoque de rechazo de perturbaciones [146, 149], y se alimenta con los datos de entrada provenientes del bioreactor.

El método de Euler es usado para discretizar el modelo del sistema. Los valores de concentración de salida de ácidos grasos volátiles y de las perturbaciones medibles en línea se alimentan al modelo dinámico no lineal, los valores de las perturbaciones no medibles, se asumen como constantes y el valor de la variable manipulada es adquirido del controlador NMPC, a partir del cálculo de la secuencia de control más adecuada en cada tiempo de muestreo.

De esta forma, el algoritmo NMPC basado en el observador de estados se reduce a los siguientes pasos:

- 1) Adquirir los datos de la planta a partir de la medición de la salida del reactor UASB, $y(k)$.
- 2) Ingresar los datos al algoritmo de predicción.
- 3) Determinar el vector de estados y parámetros no medibles en línea, $\hat{x}(k)$.
- 4) Actualizar el modelo no lineal.
- 5) Predecir la salida del sistema sobre el horizonte de prección H_p y determinar la ley de control resolviendo el problema de optimización en concordancia con el criterio de aceptación (Ver Algoritmo 2).

Algoritmo 2 Algoritmo NMPC [149]

(1) Establecer $x_0 := x(k)$, para la solución del problema de optimización. Minimizar

$$J_N(x_0, u(\cdot)) = \sum_{k=0}^{H_p} \kappa_1 \ell(x_u(k, x_0), u(k)), \quad (5.19)$$

respeto a

$$u(\cdot) \in \mathbb{U}^{H_p}(x_0), \quad (5.20)$$

y sujeto a

$$x_u(0, x_0) = x_0, \quad (5.21)$$

$$x_u(k+1, x_0) = f(x_u(k, x_0), u(k)), \quad (5.22)$$

y denotar la secuencia de control óptimo obtenido $u^*(\cdot) \in \mathbb{U}^{H_p}(x_0)$,(2) Definir el valor de realimentación NMPC $\mu_{H_p}(x(n)) := u^*(0) \in U$ y utilizar el valor de la señal control en el próximo período de muestreo.

Las simulaciones se realizaron usando la rutina *fmincon* del *toolbox* de MatLab. Para evaluar el comportamiento del sistema en lazo cerrado empleando la estrategia de control NMPC, se emplearon los datos históricos del reactor UASB. Se realizaron simulaciones con diferentes valores de concentración de ácidos grasos volátiles en cada instante de muestreo, como variable medible para predecir el comportamiento del sistema por medio del modelo basado en el observador no lineal. A partir del modelo se estima la variable controlada correspondiente a la concentración de materia orgánica en términos de DQO.

El comportamiento dinámico en lazo cerrado de la variable controlada DQO (S_1) se presenta en la Figura 5.4, a diferentes condiciones de operación del reactor, es decir, a diferentes valores de salida de concentración de AGV (variable medible en línea). En la Figura 5.4 también se observa el comportamiento dinámico de la variable medida con respecto a la observada por el modelo. El comportamiento de la variable manipulada D , se presenta en la Figura 5.5. Los resultados de las simulaciones numéricas evidencian un buen desempeño de la estrategia de control en relación con el comportamiento del sistema en lazo cerrado ante cambios en las condiciones de operación del reactor, observándose el seguimiento de la referencia y una señal de control dentro del rango establecido. Las señales óptimas de control se ajustan a los rangos definidos en el análisis dinámico, garantizando condiciones óptimas para el proceso de digestión anaerobia.

Con el fin de evaluar el desempeño de la estrategia de control, se estudia el comportamiento del sistema ante perturbaciones en las condiciones de entrada de las variables no medibles en línea, se realizaron simulaciones aplicando una perturbación de $\pm 30\%$ en la

5.4. Planteamiento del problema de control predictivo aplicado a un reactor UASB

concentración de entrada de materia orgánica S_1^0 , a diferentes tiempos de simulación. La Figura 5.6 presenta los resultados obtenidos, evidenciándose que la estrategia de control responde adecuadamente ante perturbaciones en la concentración de entrada de materia orgánica al reactor.

Finalmente, se realizan cambios en la referencia para evaluar el desempeño de la estrategia de control. En la Figura. 5.7 se presenta el comportamiento del sistema en lazo cerrado a diferentes puntos de referencia.

5. Control predictivo basado en el modelo no lineal de un proceso de digestión anaerobia

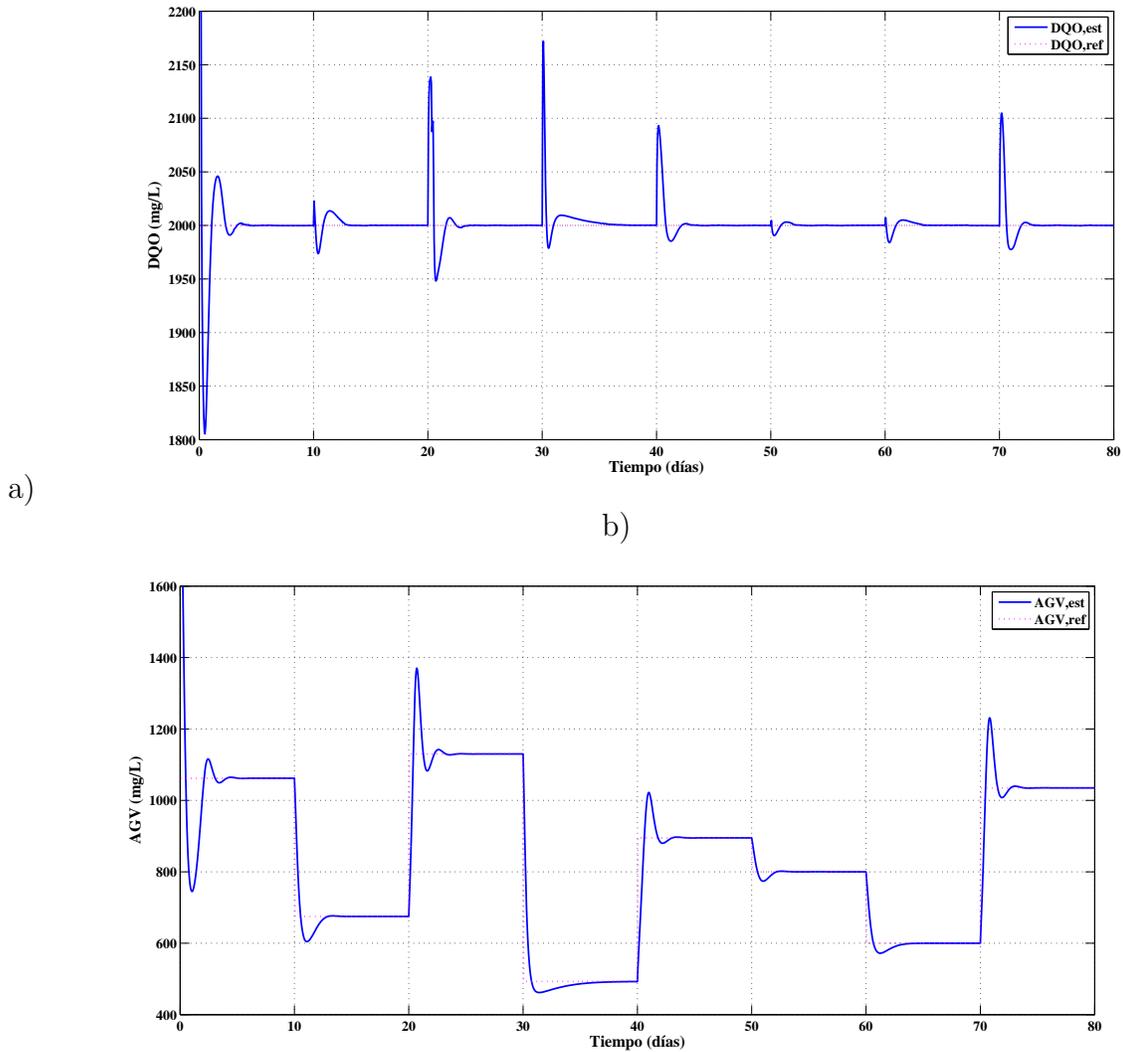


Figura 5.4.: Comportamiento dinámico en lazo cerrado de la concentración de: a) sustrato orgánico (variable controlada) b) ácidos grasos volátiles (variable medible)

5.4. Planteamiento del problema de control predictivo aplicado a un reactor UASB

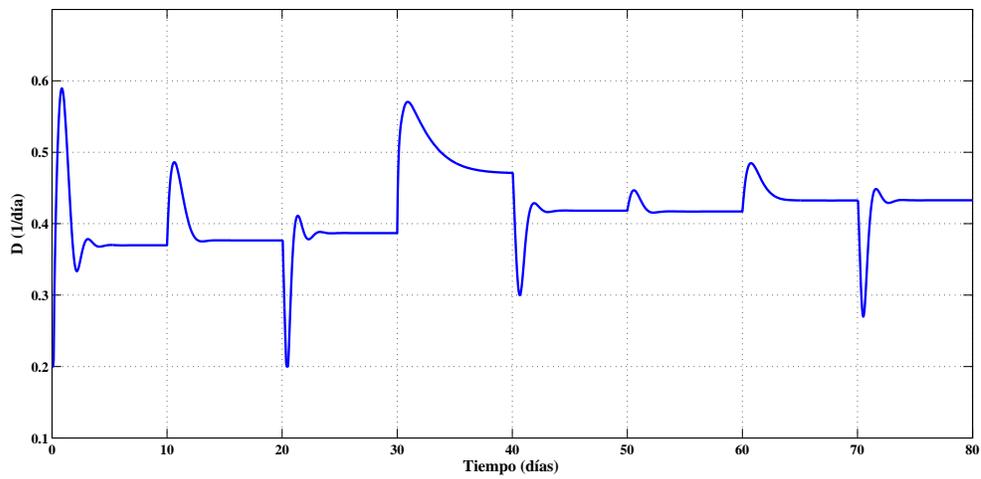
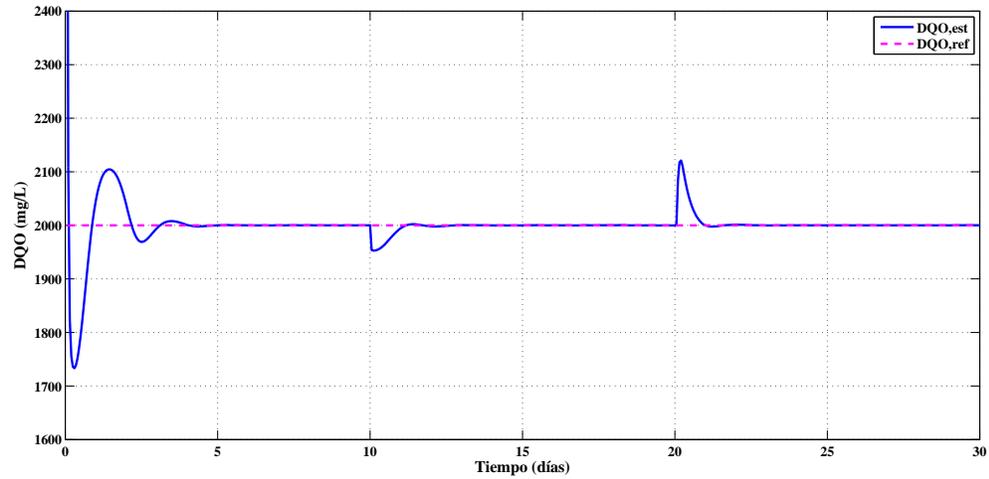


Figura 5.5.: Comportamiento dinámico del esfuerzo de control en lazo cerrado

5. Control predictivo basado en el modelo no lineal de un proceso de digestión anaerobia



a)

b)

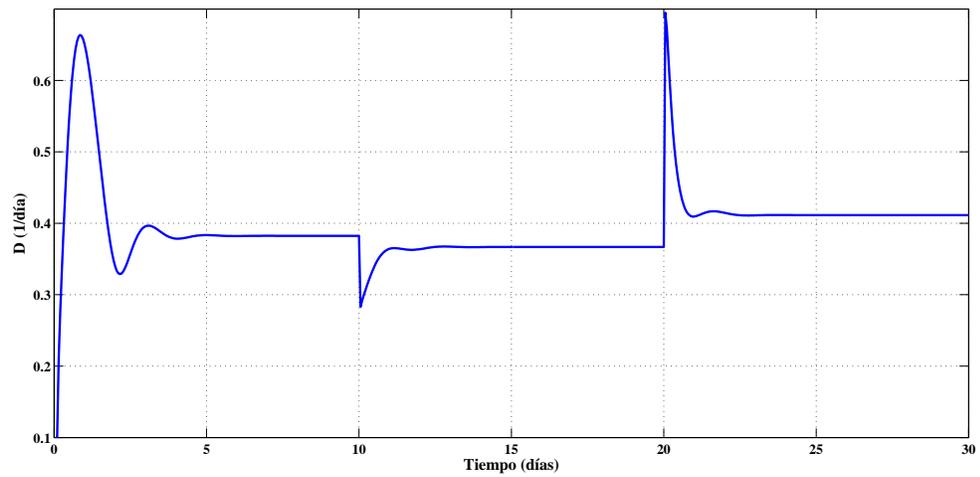
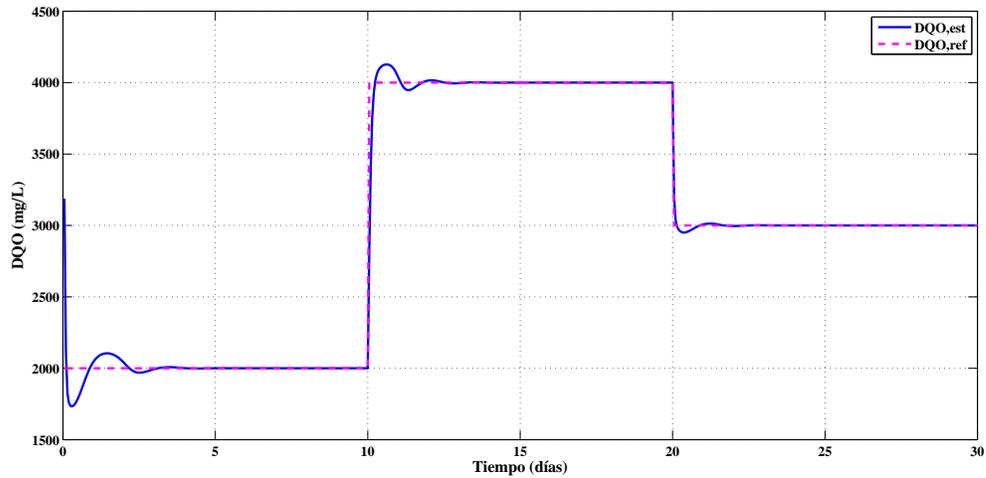


Figura 5.6.: Comportamiento dinámico del sistema en lazo cerrado ante perturbaciones en la concentración de entrada de sustrato orgánico a) Concentración de salida sustrato orgánico b) Esfuerzo de control

5.4. Planteamiento del problema de control predictivo aplicado a un reactor UASB



a)

b)

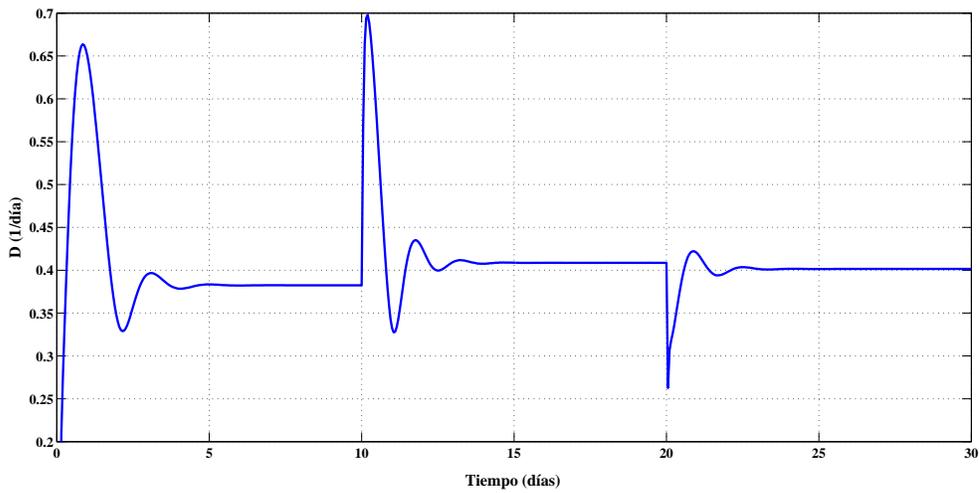


Figura 5.7.: Comportamiento dinámico del sistema en lazo cerrado ante cambios en la referencia a) Concentración de salida sustrato orgánico b) Esfuerzo de control

5.5. Conclusiones

En este capítulo se describe una estrategia de control predictivo basado en el modelo no lineal, la cual ha sido diseñada para la regulación de la concentración de sustrato orgánico en la corriente de salida de un sistema real de tratamiento de lixiviado en un reactor UASB. La estrategia del NMPC se basa en un observador de estado adaptativo, el cual a su vez se encuentra formulado con base en un modelo dinámico no lineal del sistema, permitiendo manejar la dinámica no lineal de la planta asegurando la concentración de sustrato orgánico en condiciones óptimas de operación, evitando la degradación y desestabilización del sistema, incluso en presencia de perturbaciones desconocidas. El observador permite disminuir los errores de modelado debidas a incertidumbres paramétricas y perturbaciones no medidas en el bioproceso.

El desempeño del controlador se evalúa mediante simulaciones numéricas empleando datos reales a diferentes condiciones de operación, variando el punto de referencia y perturbaciones en una variable no medible. Los resultados obtenidos en las simulaciones han sido satisfactorios para el conjunto de datos utilizado, además de presentar rechazo a perturbaciones. Como trabajo futuro resulta necesario realizar el análisis de estabilidad de la estrategia de control bajo el esquema propuesto, es decir, con estimación simultánea de parámetros y variables de estado en lazo cerrado. Por otra parte, validar en línea la aplicabilidad de la estrategia de control e integrarla de forma tal que garantice la eficiencia del proceso en tiempo real.

6. Conclusiones y trabajo futuro

6.1. Conclusiones

En esta tesis, se presentó una estrategia de control predictivo no lineal aplicado a un proceso de digestión anaerobia de tratamiento de aguas residuales. Como caso de estudio, se consideró un reactor UASB de tratamiento de lixiviados; digestor anaerobio en el cual por acción de diferentes grupos bacterianos se realiza la descomposición de la materia orgánica presente en el agua residual. En primer lugar, se realizó una revisión sobre los factores que afectan el funcionamiento del bioreactor y que generan un mayor impacto en el desempeño del reactor. Se identificaron como factores críticos la temperatura y el pH, los cuales afectan directamente el crecimiento bacteriano.

En segundo lugar, se describe un modelo matemático a fin de representar el comportamiento dinámico del proceso. Se presenta una extensión del modelo propuesto por Bernard et.al [7], asumiendo que el proceso de digestión anaerobia ocurre en dos etapas principales e involucrando los efectos de pH y temperatura en las cinéticas de reacción, al igual que la velocidad de decaimiento de biomasa. El modelo matemático, se calibró y validó con datos experimentales del reactor adquiridos en diferentes condiciones de operación en lazo abierto.

En tercer lugar, el comportamiento del sistema se analizó numéricamente ante variaciones en los parámetros de temperatura, pH y factor de dilución, haciendo uso de la teoría de bifurcaciones. A partir de los diagramas de continuación de puntos de equilibrio se determinaron las zonas de operación óptimas. Se observa que el modelo extendido pierde el comportamiento dinámico que exhibe el modelo de referencia propuesto por Bernard et.al., el cual ha sido estudiado por diferentes autores [86, 87, 21], y en los cuales las condiciones de lavado del bioreactor están asociadas a puntos de bifurcación por ausencia de biomasa.

A partir del análisis del comportamiento dinámico del proceso, se infiere que la estabilidad del proceso se encuentra asociada a la presencia de biomasa a la entrada del bioreactor, teniendo en cuenta que las características del lixiviado son función de las condiciones del relleno sanitario, el cual a su vez actúa como biodigestor. Por lo tanto, el desequilibrio del bioreactor por ausencia de grupos bacterianos es poco probable. Sin embargo, existen otras condiciones de desequilibrio que deben ser consideradas a fin de garantizar la estabilidad del bioreactor, condiciones como el aumento en las concentraciones de hidrógeno disuelto, cambios en las condiciones ambientales, presencia de compuestos tóxicos en el afluente del bioreactor, y la acumulación de ácidos grasos volátiles.

6. Conclusiones y trabajo futuro

En cuarto lugar, y debido a las limitaciones de medición en línea de algunas variables de estado y parámetros variables en el tiempo, se desarrolló un modelo basado en la teoría de observadores. Se formula un observador no lineal haciendo uso del modelo matemático propuesto para representar la dinámica del proceso, con el propósito de realizar la estimación de la concentración de sustrato y de biomasa a la salida del bioreactor, así como de las velocidades cinéticas, a partir de la medición de la concentración de ácidos grasos volátiles (AGV) a la salida del bioreactor. El desempeño del observador, se evaluó mediante simulaciones numéricas y el cálculo del error.

Finalmente, se diseña una estrategia de control predictivo no lineal basado en el modelo y observador no lineal. El objetivo de control es garantizar la regulación de la concentración de sustrato orgánico en el valor límite máximo permisible establecido por el Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible de Colombia, en la Resolución 0631 del 17 de marzo de 2015. La estrategia de control se basa en el cálculo de la señal de control en un horizonte de predicción, considerando como variable manipulada el factor de dilución y perturbaciones la temperatura, el pH y las concentraciones de entrada al bioreactor. Se realizaron simulaciones numéricas con el fin de evaluar el desempeño del controlador ante cambios en el punto de referencia y perturbación en la concentración de sustrato orgánico a la entrada del reactor. Los resultados exhiben un seguimiento adecuado de la referencia y rechazo a la perturbación, considerándose la estrategia de control como eficaz para el caso de estudio. La metodología desarrollada en este estudio, puede ser extendida a otros procesos.

6.2. Trabajo futuro

El aspecto más relevante para el desarrollo de estrategias de control bajo el concepto de control predictivo no lineal, es el diseño de un modelo que represente adecuadamente la dinámica del proceso. En este estudio, se representa la dinámica del proceso de digestión anaerobia mediante un modelo matemático simplificado considerando los efectos de temperatura y pH sobre las velocidades cinéticas de reacción, no obstante, existen diferentes métodos mediante los cuales se podrían mejorar los resultados de ajuste entre los valores simulados por el modelo y las mediciones experimentales. Una de ellas será incluir una expresión dinámica que permita simular el comportamiento del pH, como variable de estado del modelo dinámico del proceso, por otra parte, incluir el balance de la fase gaseosa, teniendo en cuenta que una de las ventajas de los procesos de digestión anaerobia es el uso del metano producido para suministro de energía.

En relación a la estrategia de control, resulta necesario el estudio de las propiedades de estabilidad de sistema controlado por la estrategia de control predictivo a fin de determinar la estabilidad, convergencia y admisibilidad de la estrategia de control propuesta; la estabilidad asintótica del sistema controlado por NMPC no garantiza la robustez del mismo. Durante la fase experimental, es importante evaluar algunos elementos a fin de garantizar un óptimo desempeño del controlador, como el gasto computacional durante el tiempo de ejecución del NMPC, los tiempos de adquisición de datos y los requerimientos de filtros

para minimizar el ruido durante el procesamiento de las mediciones de los sensores que alimentan la estrategia de control.

A. Anexo: Efecto de la temperatura sobre la velocidad de reacción [1]

La dependencia de la constante de velocidad de una reacción química con respecto a la temperatura se encuentra dada por la ecuación de Arrhenius.

$$\frac{d(\ln k)}{dT} = \frac{E}{RT^2} \quad (\text{A.1})$$

Integrando la Ecuación A.1 entre los límites T_1 y T_2 se obtiene:

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E(T_2 - T_1)}{RT_2 T_1} = \frac{E}{RT_2 T_1} (T_2 - T_1), \quad (\text{A.2})$$

donde,

k_2 = coeficiente de velocidad de reacción a la temperatura T_2 , (1/s, l/min, etc.).

k_1 = coeficiente de velocidad de reacción a la temperatura T_1 , (1/s, l/min, etc.).

T = temperatura, $K = 273.15 + ^\circ C$.

E = energía de activación, J/mol.

R = constante de los gases ideales, 8.314 J/mol K.

Con k_1 conocida para una temperatura dada y con E conocida, k_2 puede ser estimada usando la Ecuación A.2.

Las operaciones y procesos de tratamiento de aguas residuales son llevadas a cabo a temperaturas cercanas a la temperatura ambiente y la diferencia de temperaturas no es considerable, por lo tanto, para efectos prácticos la expresión $E/(RT_1 T_2)$ de la Ecuación A.2 puede ser asumida como constante. Si el valor de $E/(RT_1 T_2)$ se denota por c , la Ecuación A.2 se puede reescribir de la siguiente forma,

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = C (T_2 - T_1), \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{k_2}{k_1} = e^{C(T_2 - T_1)}. \quad (\text{A.4})$$

Reemplazando e^C en la Ecuación A.4 con el coeficiente Θ , se puede utilizar la siguiente expresión para ajustar el valor de la constante de velocidad cinética,

$$\frac{k_2}{k_1} = \Theta^{(T_2 - T_1)}. \quad (\text{A.5})$$

Una forma alternativa de la ecuación de corrección de la temperatura se puede obtener mediante la expansión en serie de la Ecuación A.1 y colocar todos los términos excepto los dos primeros. Cabe señalar, que aunque el valor de Θ se asume constante, a menudo puede variar considerablemente con la temperatura. Por lo tanto, se debe tener cuidado en la selección de valores apropiados para Θ .

B. Anexo: Identificación de parámetros usando fminsearch del toolbox de optimización de MatLab

```

1clc, close all, clear all
2global mm IT IpH S1 X1 X10 S1in S2 X2 X20 S2in alfa kd
3for mm=1:23 %Dataset
4set(0,'format','short_g'); set(0,'formatspacing','compact');
5ident = [1 10 10000 1 2000 1 1 40];
6[xa,fval,exitflag] = fminsearch(@func4, ident);
7result4(mm,:)=[mm fval exitflag];
8x4(mm,:)=xa;
9[t,XX]=ode15s(@(t,x) Modelo_UASB(t,x),[0 1000],x0);
10ErrorS2(mm)=(abs(S2-XX(end,4))/S2)*100
11ErrorS1(mm)=(abs(S1-XX(end,2))/S1)*100
12end
13
14function obj = func4(ident)
15global mm IT IpH S1 X1 X10 S1in S2 X2 X20 S2in alfa kd
16niu0=ident(1);
17k1=ident(2);
18KS1=ident(3);
19niu0=ident(4);
20KS2=ident(5);
21k2=ident(6);
22k3=ident(7);
23KI=ident(8);
24obj1=(niu0*IT*IpH*(S1/(KS1+S1)))*X1+(X10-alfa*X1)*D-kd*X1;
25obj2=-(k1*(niu0*IT*IpH*(S1/(KS1+S1)))*X1)+(S1in-S1)*D;
26obj3=(niu0*IT*IpH*S2*X2/(KS2+S2+(S2^2/KI)))+(X20-alfa*X2)*D-kd*X2;
27obj4=(k2*niu0*IT*IpH*S1*X1/(KS1+S1)-k3*niu0*IT*IpH*S2*X2/(KS2+S2+(S2^2/KI))
28+(S2in-S2)*D);
29obj = obj1^2 + obj2^2 + obj4^2 + obj3^2; %definition of objective
30end
31%

```

C. Anexo: Código GAMS

```

Parameters
a1, a2, a3, a4, h;

Equations
sis11, sis12, sis21, sis22, sis31, sis32, sis41, sis42, res;

sis11 .. ((niux*IT*IpH*(S1/(KS1+S1)))*X1+(X10-alfa*X1)*D-kd*X1)-s=1=0;
sis12 .. -((niux*IT*IpH*(S1/(KS1+S1)))*X1+(X10-alfa*X1)*D-kd*X1)-s=1=0;

sis21 .. ((niu0*IT*IpH*S2*X2/(KS2+S2+SQR(S2)/KI)+(X20-alfa*X2)*D-kd*X2))-s=1
=0;
sis22 .. -((niu0*IT*IpH*S2*X2/(KS2+S2+SQR(S2)/KI)+(X20-alfa*X2)*D-kd*X2))-s=1
=0;

sis31 .. -(k1*(niux*IT*IpH*(S1/(KS1+S1)))*X1)+(S1in-S1)*D)-s=1=0;
sis32 .. -(-(k1*(niux*IT*IpH*(S1/(KS1+S1)))*X1)+(S1in-S1)*D)-s=1=0;

sis41 .. ((k2*niux*IT*IpH*S1*X1/(KS1+S1)-k3*niu0*IT*IpH*S2*X2/(KS2+S2+SQR(S2
)/KI)+(S2in-S2)*D))-s=1=0;
sis42 .. -((k2*niux*IT*IpH*S1*X1/(KS1+S1)-k3*niu0*IT*IpH*S2*X2/(KS2+S2+SQR(S2
)/KI)+(S2in-S2)*D))-s=1=0;

res(di) .. sqr(a1(di)-X1)+sqr(a2(di)-X2)+sqr(a3(di)-S1)+sqr(a4(di)-s2)=g=1e
-4;

S1.Lo=0;
X1.Lo=0;
S2.Lo=0;
X2.Lo=0;
s.Lo=0;

$if exist matdata.gms $include matdata.gms

options nlp=baron, decimals=6;

model raiz_1/sis11, sis12, sis21, sis22, sis31, sis32, sis41, sis42 /;
solve raiz_1 using nlp minimazing s;

```

C. Anexo: Código GAMS

```
a1("1")=X1.1; a2("1")=X2.1; a3("1")=S1.1; a4("1")=S2.1;
display S1.1, X1.1, S2.1, X2.1, a1, a2, a3, a4, s.1;
*$ontext
model raiz_2/all/;
loop(i$(s.1=0),di(i)=yes; solve raiz_2 using nlp minimizing s;
a1(i+1)=X1.1; a2(i+1)=X2.1; a3(i+1)=S1.1; a4(i+1)=S2.1; h=card(di);
display S1.1, X1.1, S2.1, X2.1, a1, a2, a3, a4, s.1, h;
);
*$offtext
$libinclude matout a1 i
$libinclude matout a2 i
$libinclude matout a3 i
$libinclude matout a4 i
$libinclude matout h
```

Bibliografía

- [1] G. Tchobanoglous, F. Burton, and H.D. Stensel. *Wastewater engineering: treatment and reuse*. Metcalf & Eddy, Inc., New York, 2003.
- [2] A.E. Ghaly. A comparative study of anaerobic digestion of acid cheese whey and dairy manure in a two stage reactor. *Bioresource technology*, 58(1):61–72, 1996.
- [3] D.J. Batstone, J. Keller, I. Angelidaki, S.V. Kalyuzhnyi, S.G. Pavlostathis, A. Rozzi, W.T.M. Sanders, H. Siegrist, and V.A. Vavilin. The IWA anaerobic digestion model no 1 (ADM1). *Water Science and Technology*, 45(10):65–73, 2002.
- [4] D. Dochain. *Automatic control of bioprocesses. Control systems, robotics and manufacturing series*. John Wiley and Sons, 2001.
- [5] O. Bernard, B. Chachuat, A. Hélias, and J. Rodriguez. Can we assess the model complexity for a bioprocess: Theory and example of the anaerobic digestion process. *Water science and technology*, 53:85–92, 2005.
- [6] A. Martínez, C.M. Astorga, A. Alvarado, G. Aguila, R. Posada, G. Aguila, and J. Rodriguez. Simplified interval observer scheme: A new approach for fault diagnosis in instruments. *Sensors*, 11:612–622, 2011.
- [7] O. Bernard, Z. Hadj–Sadok, A. Genovesi, and S.P. Steyer. Dynamical model development and parameter identification for an anaerobic wastewater treatment process. *Biotechnology and bioengineering*, 75:143–438, 2001.
- [8] T. Janus. *Modelling and Simulation of Membrane Bioreactors for Wastewater Treatment*. PhD thesis, Faculty of Technology School of Engineering, Media and Sustainable Development. De Montfort University Leicester, 2013.
- [9] M. O’Brien, J. Mack, B. Lennox, D. Lovett, and A. Wall. Model predictive control of an activated sludge process: A case study. *Control Engineering Practice*, 19(1):54–61, 2011.
- [10] H.O. Méndez-Acosta, B. Palacios-Ruiz, V. Alcaraz-González, V. González-Álvarez, and J.P. García-Sandoval. A robust control scheme to improve the stability of anaerobic digestion processes. *Journal of Process Control*, 20(4):375 – 383, 2010.

- [11] V. Špalková, M. Hutňan, N. Kolesárová, and M. Lazor. Utilization of isotachophoresis for control of anaerobic digestion. In *Proceedings of 37th International Conference of Slovak Society of Chemical Engineering*, page 296, 2010.
- [12] M.V. Cristea and S.P. Agachi. Nonlinear model predictive control of the wastewater treatment plant. *Computer Aided Chemical Engineering*, 21(B):1365, 2006.
- [13] H. Han and J. Qiao. Nonlinear model-predictive control for industrial processes: an application to wastewater treatment process. *Industrial Electronics, IEEE Transactions on*, 61(4):1970–1982, 2014.
- [14] D. Sendrescu. Nonlinear model predictive control of a depollution bioprocess. In *Circuits, Communications and System (PACCS), Third Pacific-Asia Conference*, pages 1–4. IEEE, 2011.
- [15] S.J. Qin and T.A. Badgwell. A survey of industrial model predictive control technology. *Control Engineering Practice*, 11(7):733–764, 2003.
- [16] M.A. Brdys, M. Grochowski, T. Gminski, K. Konarczak, and M. Drewa. Hierarchical predictive control of integrated wastewater treatment systems. *Control Engineering Practice*, 16(6):751 – 767, 2008. Special Section on Large Scale Systems 10th IFAC/IFORS/IMACS/IFIP Symposium on Large Scale Systems: Theory and Applications.
- [17] W. Shen, X. Chen, M.N. Pons, and J.P. Corriou. Model predictive control for wastewater treatment process with feedforward compensation. *Chemical Engineering Journal*, 155(1):161–174, 2009.
- [18] F. Manenti. Considerations on nonlinear model predictive control techniques. *Computers & Chemical Engineering*, 35(11):2491–2509, 2011.
- [19] D. Robinson, J. White, and A. Callier. Environmental management: Wastewater and groundwater treatment. 2004.
- [20] A. Martínez. *Observabilidad y observadores. Estudio orientado hacia el diagnóstico de fallas en reactores biológicos*. PhD thesis, Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico, CENIDET, 2011.
- [21] B. Benyahia, T. Sari, B. Cherki, and J. Harmand. Bifurcation and stability analysis of a two step model for monitoring anaerobic digestion processes. *Journal of Process Control*, 22(6):1008–1019, 2012.
- [22] A. Donoso, J. Mailier, C. Martin, J. Rodriguez, C. Aceves, and A. Vande. Model selection, identification and validation in anaerobic digestion: A review. *Water Research*, 45, 2011.

- [23] J.F. Andrews. A mathematical model for the continuous culture of microorganisms utilizing inhibitory substrates. *Biotechnology and Bioengineering*, 10(6):707–723, 1968.
- [24] J.F. Andrews. Dynamic model of the anaerobic digestion process. *Journal of Sanitary Engineering Division, ASCE*, 95:95–116, 1969.
- [25] J.F. Andrews. Kinetic models of biological waste treatment processes. In *Biotechnology and Bioengineering Symposium*, volume 2, pages 5–33, 1971.
- [26] S.P. Graef and J.F. Andrews. Stability and control of anaerobic digestion. *Journal Water Pollution Control Federation*, pages 666–683, 1974.
- [27] D.T. Hill and C. Barth. A dynamical model for simulation of animal waste digestion. *Journal of Water Pollution Control Association*, 10:2129–2143, 1977.
- [28] J.A. Eastman and J.F. Ferguson. Solubilization of particulate organic-carbon during the acid phase of anaerobic digestion. *Journal of Water Pollution Control Federation*, 53:352–366, 1981.
- [29] D.T. Hill. A comprehensive dynamic model for animal waste methanogenesis. *Transactions of the ASAE*, 25:1374–1380, 1982.
- [30] I. Angelidaki, L. Ellegaard, and B.K. Ahring. A mathematical model for dynamic simulation of anaerobic digestion of complex substrates: Focusing on ammonia inhibition. *Biotechnology and Bioengineering*, 42:159–166, 1993.
- [31] S. Jeyaseelan. A simple mathematical model for anaerobic digestion process. *Water science and technology*, 35(8):185–191, 1997.
- [32] I. Angelidaki, L. Ellegaard, and B. Ahring. A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. *Biotechnology and Bioengineering*, 63(3):363–372, 1999.
- [33] M. A. Schoen, D. Sperl, M. Gadermaier, M. Goberna, I. Franke-Whittle, H. Insam, and B. Wett. Population dynamics at digester overload conditions. *Bioresource Technology*, 100(23):5648–5655, 2009.
- [34] V. Rivera-Salvador, J.S. Aranda-Barradas, T. Espinosa-Solares, F. Robles-Martínez, and J.U. Toledo. El modelo de digestión anaeróbica IWA-ADM1: una revisión de su evolución. *Ingeniería Agrícola y Biosistemas*, 1(2):109–118, 2009.
- [35] D.J. Batstone and J. Keller. Industrial applications of the IWA anaerobic digestion model No. 1 (ADM1). *Water Science and Technology*, 47(12):199–206, 2003.

- [36] F. Blumensaat and J. Keller. Modelling of two-stage anaerobic digestion using the IWA anaerobic digestion model no. 1 (ADM1). *Water Research*, 39(1):171–183, 2005.
- [37] W.J. Parker. Application of the ADM1 model to advanced anaerobic digestion. *Bioresource Technology*, 96(16):1832–1842, 2005.
- [38] Y. Shang, B. Johnson, and R. Sieger. Application of the IWA anaerobic digestion model (ADM1) for simulating full-scale anaerobic sewage sludge digestion. *Water Science and Technology*, 52(1-2):487–492, 2005.
- [39] H.S. Jeong, C.W. Suh, J.L. Lim, S.H. Lee, and H.S. Shin. Analysis and application of ADM1 for anaerobic methane production. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, 27(2):81–89, 2005.
- [40] Y. Feng, J. Behrendt, C. Wendland, and R. Otterpohl. Implementation of the IWA anaerobic digestion model no. 1 (ADM1) for simulating digestion of blackwater from vacuum toilets. *Water Science and Technology*, 53(9):253–263, 2006.
- [41] R. Kleerebezem and M.C.M. Van Loosdrecht. Waste characterization for implementation in ADM1. *Water Science and Technology*, 54(4):167–174, 2006.
- [42] H. Kalfas, I. Skiadas, H. Gavala, K. Stamatelatos, and G. Lyberatos. Application of ADM1 for the simulation of anaerobic digestion of olive pulp under mesophilic and thermophilic conditions. *Water Science and Technology*, 54(4):149–156, 2006.
- [43] D.J. Batstone, J. Keller, and J.P. Steyer. A review of ADM1 extensions, applications, and analysis: 2002-2005. *Water Science and Technology*, 54(4):1–10, 2006.
- [44] M. Lübken, M. Wichern, M. Schlattmann, A. Gronauer, and H. Horn. Modelling the energy balance of an anaerobic digester fed with cattle manure and renewable energy crops. *Water Research*, 41(18):4085–4096, 2007.
- [45] S. Marsili-Libelli and S. Beni. Shock load modelling in the anaerobic digestion process. *Ecological modelling*, 84(1):215–232, 1996.
- [46] R. Muñoz. Diseño e implementación de un sistema de control de la DQO en un reactor piloto UASB para el tratamiento de lixiviados. Master’s thesis, Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, 2006.
- [47] M.C. Díaz, S.E. Espitia, and F. Molina. Digestión anaerobia una aproximación a la tecnología. *Universidad Nacional de Colombia, Instituto de Biotecnología*, 2002.
- [48] G. Tchobanoglous and F.L. Burton. *Ingeniería sanitaria tratamiento, evacuación y reutilización de aguas residuales, Metcalf & Eddy, Inc.* McGraw-Hill Interamericana De España, SA, 1994.

- [49] N. Technolgieen and B. U. Wirtschaftsberatung. *Anaerobic methods of municipal wastewater treatment*. Deutsche Gesellschaft fr Technische Zusammenarbeit, Eschborn, Alemania, 2001.
- [50] IDAE. Biomasa: Digestores anaerobios. Technical report, Instituto para la Diversificacion y Ahorro de la Energía, 2007.
- [51] L.C. Celis and W.O. Castañeda. Influencia de la variación temporal de fenoles y materia orgánica sobre la capacidad de degradación de la biota bacteriana en un reactor anaerobio de flujo pistón. Master's thesis, Universidad de la Salle, Facultad de Ingeniería, 2009.
- [52] H. Glynn and H. Gary. *Ingeniería ambiental*. Pearson, Prentice Hall, 1999.
- [53] L.A. Romero Rojas. *Tratamiento de aguas residuales: teoría y principios de diseño*. Escuela Colombiana de Ingeniería, 2000.
- [54] J. Rodier. *Análisis de las aguas: aguas naturales, aguas residuales, agua de mar*. Omega, 1989.
- [55] Water Environmental Federation and American Public Health Association. Standard methods for the examination of water and wastewater. *American Public Health Association (APHA): Washington, DC, USA*, 2005.
- [56] G. Lettinga, A. Van Velsen, S. Hobma, W. De Zeeuw, and A. Klapwijk. Use of the upflow sludge blanket (UASB) reactor concept for biological wastewater treatment, especially for anaerobic treatment. *Biotechnology and bioengineering*, 22(4):699–734, 1980.
- [57] E. Giraldo, M. Peña, C. Chernicharo, J. Sandino, and A. Noyola. Anaerobic sewage treatment technology in Latin-America: A selection of 20 years of experiences. *Proceedings of the Water Environment Federation*, 2007(13):5208–5228, 2007.
- [58] F.C. Morillo, E. Fajardo, and N. J. Gonzalez. Estudio de los reactores UASB para el tratamiento de lixiviados del relleno sanitario la esmeralda. Master's thesis, Universidad Nacional de Colombia-Sede Manizales, 2005.
- [59] M. Halalsheh, Z. Sawajneh, M. Zubi, G. Zeeman, J. Lier, M. Fayyad, and G. Lettinga. Treatment of strong domestic sewage in a 96 m³ UASB reactor operated at ambient temperatures: two-stage versus single-stage reactor. *Bioresource technology*, 96(5):577–585, 2005.
- [60] Y. Chen, J.J. Cheng, and K.S. Creamer. Inhibition of anaerobic digestion process: a review. *Bioresource Technology*, 99(10):4044–4064, 2008.

- [61] R. Romero Cabello. *Microbiología y Parasitología Humana, Bases etiológicas de las enfermedades infecciosas y parasitarias*. Raúl. 3ª Edición. Barcelona: Médica Panamericana, 2007.
- [62] J. Duggan. The potential for landfill leachate treatment using willows in the UK a critical review. *Resources, Conservation and Recycling*, 45:97–113, 2005.
- [63] P. Kirmizakis, C. Tsamoutsoglou, B. Kayan, and D. Kalderis. Subcritical water treatment of landfill leachate: Application of response surface methodology. *Journal of Environmental Management*, 146:9–15, 2014.
- [64] S. Renou, J.G. Givaudan, S. Poulain, F. Dirassouyan, and P. Moulin. Landfill leachate treatment : Review and opportunity. *Journal of Hazardous Materials*, 150:468–493, 2008.
- [65] F. Ahmed and C. Lan. Treatment of landfill leachate using membrane bioreactors: A review. *Desalination*, 287:41–54, 2012.
- [66] H. Zhang, X. Wu, and X. Li. Oxidation and coagulation removal of COD from landfill leachate by Fered Fenton process. *Chemical Engineering Journal*, 210:188–194, 2012.
- [67] S. Xiao, J. Peng, Y. Song, D. Zhang, R. Liu, and P. Zeng. Degradation of biologically treated landfill leachate by using electrochemical process combined with UV irradiation. *Separation and Purification Technology*, 117:24–29, 2013.
- [68] J.P. Piñeiro. *Contribución a la educación ambiental: el tratamiento de los residuos urbanos*, chapter Vertederos controlados: Problemática de los lixiviados. Universidad Autónoma de Madrid, 1994.
- [69] N. J. Gonzalez. Taller de diseño de un reactor UASB, estudio de caso lixiviado relleno sanitario la esmeralda. Technical report, Curso en reactores biológicos para la depuración de aguas residuales con énfasis en remoción y recuperación de nutrientes, Universidad Nacional de Colombia, Sede Manizales, 2012.
- [70] G. Lyberatos and I.V. Skiadas. Modelling of anaerobic digestion-a review. *Global Nest International Journal*, 1(2):63–76, 1999.
- [71] E.D. Cendales and S.L. Rincón. Producción de biogás mediante la codigestión anaeróbica de la mezcla de residuos cítricos y estiércol bovino para su utilización como fuente de energía renovable. Master's thesis, Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ingeniería, 2011.
- [72] H. S. Fogler. Elements of chemical reaction engineering. 2006.
- [73] J. Monod. La technique de culture continué. théorie et applications. *Annales de L'Institut Pasteur*, 1950.

- [74] L.Y. Lokshina, V.A. Vavilin, R.H. Kettunen, J.A. Rintala, C. Holliger, and A.N. Nozhevnikova. Evaluation of kinetic coefficients using integrated monod and haldane models for low-temperature acetoclastic methanogenesis. *Water research*, 35(12):2913–2922, 2001.
- [75] C. Gamazo, S. Sánchez Gómez, and A. I. Camacho Peiro. *Microbiología basada en la experimentación+ Student consult en español*. Elsevier Health Sciences, 2013.
- [76] M.A. Maldonado Gonzalez. Disminución de masa de lodos proveniente de un reactor rafa para minimizar la disposición de residuos mediante el uso de filtro prensa y lecho de secado. Master’s thesis, Universidad de las Américas Puebla, 2007.
- [77] R. Crites and G. Tchobanoglous. *Small and decentralized wastewater management systems*, volume 32. McGraw Hill, 1998.
- [78] J. Del Real Olvera and F. Prieto. *Evaluación y modelado de la cinética de depuración anaerobia de vinazas de la industria alcoholera*. PhD thesis, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 2007.
- [79] E. Sanchez, R. Borja, P. Weiland, L. Travieso, and A. Martin. Effect of temperature and ph on the kinetics of methane production, organic nitrogen and phosphorus removal in the batch anaerobic digestion process of cattle manure. *Bioprocess Engineering*, 22(3):247–252, 2000.
- [80] J.J.E. Slotine and W. Li. *Applied Nonlinear Control*, volume 60. Prentice-Hall Englewood Cliffs, NJ, 1991.
- [81] H.K. Khalil and J.W. Grizzle. *Nonlinear systems*, volume 3. Prentice Hall New Jersey, 1996.
- [82] F. Grogard and O. Bernard. *Stability analysis of a wastewater treatment plant with saturated control*, volume 53. 2006.
- [83] S. Shen, G.C. Premier, A. Guwy, and R. Dinsdale. Bifurcation and stability analysis of an anaerobic digestion model. *Nonlinear Dynamics*, 48(4):391–408, 2007.
- [84] J. Hess and O. Bernard. Design and study of a risk management criterion for an unstable anaerobic wastewater treatment process. *Journal of Process Control*, 18(1):71–79, 2008.
- [85] J. Hess and O. Bernard. Advanced dynamical risk analysis for monitoring anaerobic digestion process. *Biotechnology progress*, 25(3):643–653, 2009.
- [86] A. Rincón, F. Angulo, and G. Olivar. Control of an anaerobic digester through normal form of fold bifurcation. *Journal of Process Control*, 19(8):1355–1367, 2009.

- [87] N. Dimitrova and M. Krastanov. Nonlinear stabilizing control of an uncertain bioprocess model. *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, 19(3):441–454, 2009.
- [88] M. Sbarciog, M. Loccufier, and E. Noldus. Determination of appropriate operating strategies for anaerobic digestion systems. *Biochemical engineering journal*, 51(3):180–188, 2010.
- [89] H. Kielhöfer. *Bifurcation theory: An introduction with applications to PDEs*, volume 156. Springer Science & Business Media, 2006.
- [90] Y.A. Kuznetsov. *Elements of applied bifurcation theory*. Springer-Verlag, New York, 2004.
- [91] L. G. Matallana. Curso modelado, simulación y optimización en GAMS. 2012.
- [92] L.G. Matallana, A.M. Blanco, and J.A. Bandoni. Nonlinear dynamic systems design based on the optimization of the domain of attraction. *Mathematical and Computer Modelling*, 53(5):731–745, 2011.
- [93] R.E. Rosenthal. GAMS – a user’s guide. *GAMS Development Corporation, Washington, DC, USA*, 2014.
- [94] K. Hedrih. Nonlinear dynamics and aleksandr mikhailovich lyapunov. *Facta Universitatis. Mechanics, Automatic Control Robotics. From Scientific Technical Review*, 6(1):211–218, 2007.
- [95] M. Vidyasagar. *Nonlinear Systems Theory*. 1993.
- [96] F. Angulo. *Análisis de Sistemas de Control No Lineales*. Universida Nacional de Colombia, Sede Manizales, 1999.
- [97] Ph. Bogaerts and A. Vande Wouwer. Software sensors for bioprocesses. *{ISA} Transactions*, 42(4):547 – 558, 2003.
- [98] M. Anguelova. Nonlinear observability and identificability: General theory and a case study of a kinetic model for *S. cerevisiae*, 2004.
- [99] R.E. Kalman. A new approach to linear filtering and prediction problems. *Transactions of the ASME-Journal of Basic Engineering*, 82:35–45, 1960.
- [100] D. G. Luenberger. An introduction to observers. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 16:596–602, 1971.
- [101] D. Dochain. State and parameter estimation in chemical and biochemical processes: a tutorial. *Journal of Process Control*, 13:801–818, 2003.

- [102] A.J. Krener and A. Isidori. Linearization by output injecton and nonlinear observers. *Systems and Control Letters*, 1983.
- [103] A.J. Krener and W. Respondek. Nonlinear observers with linearizable error dynamics. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 1985.
- [104] R. Marino. Adaptive observers for single output nonlinear systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 1983.
- [105] F. Deza, D. Bossanne, Busvelle E., J.P. Gauthier, and D. Rakotopara. Exponential observers for nonlinear systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 1993.
- [106] M. Boutayeb and D. Aubry. A strong tracking extended kalman observer for nonlinear discrete-time systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 44:1550–1556, 1999.
- [107] R. Belmonte-Izquierdo, S. Carlos-Hernandez, and E.N. Sanchez. A new neural observer for an anaerobic bioreactor. *International Journal of Neural Systems*, 20(1):75–86, 2010.
- [108] M. Zeitz. The extended luenberger observer for nonlinear systems. *Systems and Control Letters*, 9:149–156, 1987.
- [109] A. Tornambe. High-gain observers for nonlinear systems. *International Journal of Systems Science*, 23:1475–1489, 1992.
- [110] J.P. Gauthier, H. Hammouri, and S. Othman. A simple observer for nonlinear systems applications to bioreactors. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 37:875–880, 1992.
- [111] Y.H. Chen. Adaptive robust observers for non-linear uncertain systems. *International Journal of Systems Science*, 1990.
- [112] E. Bullinger and F. Allgower. An adaptive high-gain observer for nonlinear systems. *Proceedings of the 36th, Conference on Decision and Control, San Diego, California USA*, pages 4348–4353, December 1997.
- [113] G. Févotte, T.F. McKenna, S. Othman, and H. Hammouri. Non-linear tracking of glass transition temperatures for free radical emulsion copolymers. *Chemical Engineering Science*, 53:773–786, 1998.
- [114] A.M. Santos, G. Févotte, N. Othman, D. Othman, and T.F. Mickenna. On-line monitoring of methyl methacrylatevinyl acetate emulsion copolymerization. *Journal of Applied Polymer Science*, 75:1667–1683, 2000.

- [115] M. Perrier, E.C. Feyer de Azevedo, S. Ferreira, and D. Dochain. Tuning of observer-based estimators: theory and application to the on-line estimation of kinetic parameters. *Control Engineering Practice*, 8:377–388, 2000.
- [116] C.M. Astorga, N. Othman, S. Othman, H. Hammouri, and T.F. McKennab. Nonlinear continuous-discrete observers: application to emulsion polymerization reactors. *Control Engineering Practice*, 10:3–13, 2002.
- [117] B. Chachuat and O. Bernard. Probabilistic observers for a class of uncertain biological processes. *International Journal of Robust and Nonlinear Control*, 16(3):157–171, 2006.
- [118] I. López and L. Borzacconi. Modelling a full scale UASB reactor using a COD global balance approach and state observers. *Chemical Engineering Journal*, 146(1):1–5, 2009.
- [119] M. Sbarciog, J.A. Moreno, and A. Vande Wouwer. Application of super-twisting observers to the estimation of state and unknown inputs in an anaerobic digestion system. *Water Science and Technology*, 69(2):414–421, 2014.
- [120] J.L. Montiel-Escobar, V. Alcaraz-González, H.O. Méndez-Acosta, and V. González-Álvarez. ADM1-based robust interval observer for anaerobic digestion processes. *Clean - Soil, Air, Water*, 40(9):933–940, 2012.
- [121] H. Hammouri, M. Nadri, and R. Mota. Constant gain observer for continuous-discrete time uniformly observable systems. In *Decision and Control, 45th IEEE Conference*, pages 5406–5411. IEEE, 2006.
- [122] M. Nadri, H. Hammouri, and R.M. Grajales. Observer design for uniformly observable systems with sampled measurements. *Automatic Control, IEEE Transactions on*, 58(3):757–762, 2013.
- [123] I. Bouraoui, M. Farza, T. Ménard, R. B. Abdennour, M. M´Saad, and H. Mosrati. Observer design for a class of uncertain nonlinear systems with sampled outputs-application to the estimation of kinetic rates in bioreactors.
- [124] C. Aubrun, D. Theilliol, J. Harmand, and J.P. Steyer. Software sensor design for COD estimation in an anaerobic fluidized bed reactor. *Water Science and Technology*, 43(7):115–122, 2001.
- [125] S. Espinoza, J. Reyes, A. Alvarez, C.M. Astorga, E. Mendizabal, and G. Cadenas. Observador no lineal adaptativo de alta ganancia para procesos de copolimeración en emulsión. *Revista mexicana de Ingeniería Química, AMIDIQ*, 7:89–98, 2008.
- [126] M. Chaves. *Observer design for a class of nonlinear systems, with applications to biochemical networks*. PhD thesis, Rutgers, The State University of New Jersey, 2003.

- [127] H. Hammouri, B. Targui, and F. Armanet. High gain observer based on a triangular structure. *International Journal of Robust and Nonlinear Control*, 12(6):497–518, 2002.
- [128] O. Bernard and J. Gouzé. *State Estimation for Bioprocesses*, pages 79–114. ISTE, 2010.
- [129] A. Sedoglavic. A probabilistic algorithm to test local algebraic observability in polynomial time. *Journal Symbolic Computation*, 33:735–755, 2002.
- [130] L. Ljung. System identification: Theory for the user. *PTR Prentice Hall Information and System Sciences Series*, 198, 1987.
- [131] J. Dolado and L. Fernández. Genetic programming, neural networks and linear regression in software project estimation. *INSPIRE III*, pages 157–171, 1998.
- [132] I. Attarzadeh, A. Mehranzadeh, and A. Barati. Proposing an enhanced artificial neural network prediction model to improve the accuracy in software effort estimation. In *Computational Intelligence, Fourth International Conference on Communication Systems and Networks (CICSyN)*, pages 167–172, July 2012.
- [133] L. Zadeh and B. Whalen. On optimal control and linear programming. *Automatic Control, IRE Transactions on*, 7(4):45–46, 1962.
- [134] A Propoi. Use of LP methods for synthesizing sampled-data automatic systems. *Automatic Remote Control*, 1963.
- [135] J.A. Richalet, A. Rault, J.L. Testud, and J. Papon. Model predictive heuristic control: Applications to an industrial process. *Automatica*, 14(5):413–428, 1978.
- [136] C.R. Cutler and B.L. Ramaker. Dynamic matrix control - a computer control algorithm. In *Joint automatic control conference*, number 17, page 72, 1980.
- [137] R. Findeisen, F. Allgöwer, and L.T. Biegler. *Assessment and future directions of nonlinear model predictive control*, volume 358. Springer, 2007.
- [138] T.E. Marlin. *Process Control: Designing Processes and Control System for Dynamic Performance*. McGraw Hill International Editions, Second edition, 2000.
- [139] B. Huang and R. Kadali. *Dynamic modeling, predictive control and performance monitoring: a data-driven subspace approach*. Springer, 2008.
- [140] P.S. Agachi, M.V. Cristea, et al. *Model based control: case studies in process engineering*. John Wiley & Sons, 2007.

- [141] S.J. Qin and T.A. Badgwell. An overview of industrial model predictive control technology. In *AIChE Symposium Series*, volume 93, pages 232–256. New York, NY: American Institute of Chemical Engineers, 1971-c2002., 1997.
- [142] M. Bauer and I.K. Craig. Economic assessment of advanced process control—a survey and framework. *Journal of Process Control*, 18(1):2–18, 2008.
- [143] M. Kano and M. Ogawa. The state of the art in advanced chemical process control in Japan. *IFAC ADCHEM, Istanbul, Turkey*, 2009.
- [144] D.Q. Mayne. Model predictive control: Recent developments and future promise. *Automatica*, 50(12):2967–2986, 2014.
- [145] D. Q Mayne, J.B. Rawlings, C.V. Rao, and P.O.M. Scokaert. Constrained model predictive control: Stability and optimality. *Automatica*, 36(6):789–814, 2000.
- [146] C. Ocampo-Martinez. *Model predictive control of wastewater systems. Advances in Industrial Control*. Springer, 2010.
- [147] J. Blanco. Integrated water resource management in Colombia: paralysis by analysis? *Water Resources Development*, 24(1):91–101, 2008.
- [148] Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible. Resolución 0631, 15 de Marzo de 2015.
- [149] L. Grüne and J. Pannek. *Nonlinear model predictive control. Theory and Algorithms*. Springer, 2011.