



MODELO PARA CALCULOS ESTEQUIOMETRICOS DE LAS AGUAS RESIDUALES DOMESTICAS

Gonzalo Villa Manosalvas¹

Docente Investigador de la Carrera Ingeniería Química de la Universidad de Guayaquil
gonzalo.villam@ug.edu.ec

Teresa Villa Cox²

Docente de la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad de Guayaquil
viviana.villa.c@ug.edu.ec

Sandra Ronquillo Castro³

Delegada del consejo de la Universidad de Guayaquil Facultad de Ingeniería Química
sandra.ronquillo.c@ug.edu.ec

Sandra Peña Murillo⁴

Directora de Carrera de Ingeniería Química Universidad de Guayaquil
sandra.penam@ug.edu.ec

Para citar este artículo puede utilizar el siguiente formato:

Gonzalo Villa Manosalvas, Teresa Villa Cox, Sandra Ronquillo Castro y Sandra Peña Murillo (2017): "Modelo para cálculos estequiometricos de las aguas residuales domesticas", Revista Caribeña de Ciencias Sociales (agosto 2017). En línea:
<http://www.eumed.net/rev/caribe/2017/08/aguas-residuales-ecuador.html>

Resumen

Los procesos biológicos pueden ser presentados de forma similar a las reacciones químicas, en este contexto la estequiometría nos permite evaluar diferentes relaciones entre reactantes y productos. Este trabajo presenta la construcción de un modelo, para la simulación de la estequiometría de procesos biológicos, utilizando como plataforma de cálculo la GUI de Matlab. Esto nos permite calcular parámetros tales como el ajuste estequiométrico de la reacción de Oxidación de la materia orgánica; el ajuste estequiométrico de la reacción de la generación de la biomasa con Agua Residual como sustrato; la fórmula del agua residual en base a datos de ingreso; la relación en gr de DQO/gr SSV; relación de gr de DQO de S/gr de S; relación para eliminación de N; rendimiento producción de lodos/consumo de sustrato; rendimiento de producción de lodos/DBO5 de S; rendimiento de biomasa generada/DBO agua residual; oxígeno teórico consumido/DQO de S eliminado.

Palabras claves: modelado – simulación – estequiometría -procesos biológicos

Abstract

The biological processes can be presented in a similar way to the chemical reactions, in this context the stoichiometry allows us to evaluate different relations between reactants and products. This paper presents the construction of a model for the simulation of the stoichiometry of a biological processes, using as a calculation platform the Matlab GUI. This allows us to calculate parameters such as the stoichiometric adjustment of the Oxidation reaction of an organic matter; the stoichiometric adjustment of the biomass generation reaction with Residual Water as the substrate; the residual water formula based on income data; The ratio in gr of

COD / gr SSV; Ratio of COD gr of S / gr of S; Ratio for elimination of N; production sludge yield/ substrate consumption; Production of sludge yield / BOD5 of S; biomass yield generated / BOD residual water; theoretical oxygen consumed / S COD of eliminated.

Keyword: modeling – simulation – stoichiometry - biological processes

1. INTRODUCCIÓN

Los Procesos Biológicos pueden ser representados de forma similar a las reacciones químicas, puesto que tenemos compuestos reactantes y productos, dentro de este planteamiento la estequiometría es una expresión de la ley de conservación de la materia, que equilibra los moles de ambos lados de la reacción Biológica, y nos permite evaluar las diferentes relaciones entre los compuestos participantes del proceso. (Silvia, 2004)

Podemos por ejemplo encontrar la cantidad de Biomasa que se genera con un sustrato seleccionado de una composición determinada, o quizás cuanto oxígeno se consume en esta generación, etc., etc. La construcción de este modelo pretende contestar estas preguntas, con las ventajas del modelado de procesos; que contesta la conocida pregunta, ¿Que pasa si.....Para el efecto como plataforma de Desarrollo se utiliza <<el GUI de Matlab en la versión R-2015>>!

2. MATERIALES Y MÉTODOS

Para desarrollo de este modelo utilizaremos MATLAB (abreviatura de matrix laboratory, o "Laboratorio de Matrices"); que es un lenguaje de programación matemático de altísimo nivel. La última versión del programa es La R2017a, y continuamente se van actualizando versiones tanto del cuerpo principal cuanto de las aplicaciones incrustadas y la muy extensa biblioteca de funciones internas, que vienen organizadas en paquetes de aplicación en diversas áreas de las ciencias llamadas <<Cajas de Herramientas>> (Toolboxes). Está disponible para las plataformas Unix, Windows, Mac OS X y GNU/Linux.

2.1. Guide -Interfaz gráfica de usuario en Matlab

Matlab dispone de un entorno de programación basada en interfaces gráficas, para interactuar con los usuarios a la manera de lenguajes tradicionales de programación como Visual Basic, o C++. Para empezar a construir las interfaces graficas debemos desplegar la paleta para crear los objetos escribiendo en la Command Windows la palabra **GUIDE**, (o desde la cinta de opciones como vemos en la gráfica 1). Seguidamente se despliega una ventana con varias opciones para empezar a trabajar con la programación de las interfaces gráficas. Revisaremos brevemente estas opciones:

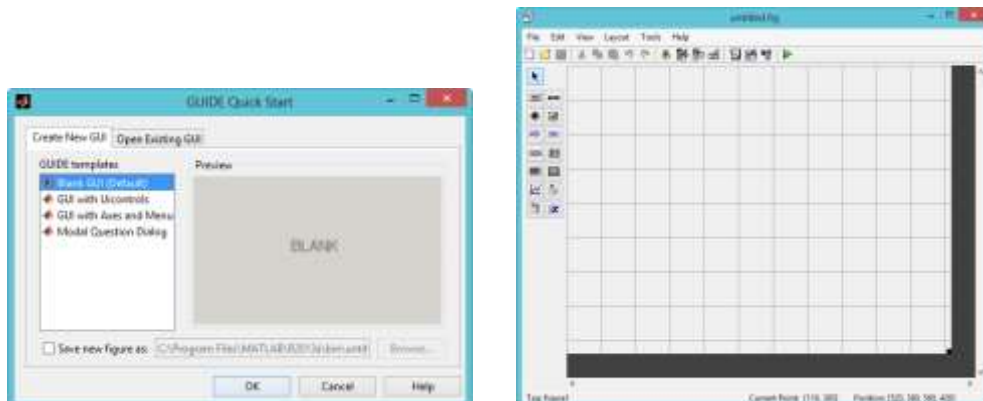


Figura 1. Formularios para construcción de aplicaciones usando la GUI de Matlab

3. METODOLOGIA USADA PARA EL DESARROLLO DEL MODELO PARA CALCULOS ESTEQUIOMETRICOS DE LAS AGUAS RESIDUALES DOMESTICAS

Figura 2. Formulario de salida del modelo propuesto -Cálculos Estequiométricos de las reacciones biológicas en las aguas residuales domesticas-

3.1. Presentación del Modelo

Al momento de pulsar el icono de arranque del modelo la Ayuda del mismo presenta un mensaje de advertencia para empezar a usar de manera correcta los cálculos propuestos. Claramente leemos que para empezar a operar el modelo es necesario ingresar los parámetros del agua residual que discutimos a continuación.



Figura 3. Información de arranque modelo

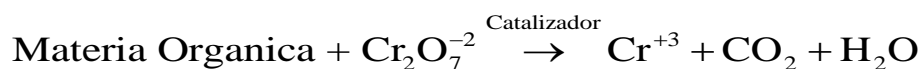
Figura 4. Parámetros para ingreso del

3.2. Demanda química de oxígeno <<DQO>>.

La demanda química de oxígeno es un parámetro que mide la cantidad de sustancias susceptibles de ser oxidadas por medios químicos que hay disueltas o en suspensión en una muestra líquida. Se utiliza para medir el grado de contaminación y se expresa en miligramos de oxígeno diatómico por litro (Lobo, 2014).

El agente oxidante generalmente es dicromato de potasio, en medio ácido y a temperaturas altas, en ocasiones es necesaria la intervención de un catalizador como sulfato de plata, cuando hay compuestos orgánicos resistentes. La muestra debe ser preparada para evitar interferencia de compuestos como los cloruros. (Se utiliza sulfato de mercurio, que forma HgCl_2 y previene la reacción del ion dicromato con el ion cloruro.

La relación estequiométrica que se desarrolla en este proceso es:



Sólidos volátiles <<SV>>.- En las aguas residuales tenemos muchos componentes sólidos que se podrían clasificar de acuerdo con su diámetro; los de mayores diámetros (gruesos) los removemos previamente al análisis. Luego dentro de este, primero se separan por filtración los Sólidos Suspendidos Totales (SST); de los Sólidos Totales (ST). Encontramos los Sólidos volátiles (SV) por diferencia entre estos. Se estima que los SV representan a la materia orgánica, pero esto no es del todo exacto ya que parte de la misma no se incinera en el análisis de Sólidos Totales, y algunos compuestos inorgánicos se descomponen a altas temperaturas, sin embargo, para efectos de cálculos de ingeniería los SV o SSV, es válido suponer que estos representan a la materia orgánica disuelta.

Nitrógeno <<N>>.- Tanto el Nitrógeno cuanto el fósforo son constituyentes esenciales para la nutrición celular, puesto que el Nitrógeno participa en la síntesis de las proteínas, es necesario hacer su contabilidad en el momento de realizar diseños de tratamientos biológicos. Si el contenido de nitrógeno es deficitario hay que suplirlo. En todo caso para las aguas residuales domésticas generalmente esto no es necesario. (Cardenas Calvachi & Sanchez Ortiz, 2013)

Carbono orgánico total.- Este parámetro mide la cantidad total de carbono en el agua residual y es un medio alternativo para medir la cantidad total de materia orgánica del agua, de manera rápida si se cuenta con el equipo apropiado. El ensayo se realiza a altas temperaturas y se oxida la materia orgánica a CO₂, en presencia de un catalizador, este se mide por medio de un analizador infrarrojo. En caso de existir en la muestra compuestos orgánicos resistentes a la oxidación puede dar lugar a resultados erróneos y el COT medido es menor al real (Chamorro Bolaños, Rodríguez Martínez, Enrique Brand, & Rosero Moreano, 2009).

3.3. Los botones de acción

Estos Botones son los que permiten utilizar el modelo de acuerdo a las necesidades, así tenemos que:

Botón <<FORM AG RESID>>.- calcula la fórmula del agua residual en base a los parámetros ingresados.

Botón <<AJUSTE ENERGIA>>.- Realiza el ajuste estequiométrico de la reacción de Oxidación de la materia orgánica.

Botón <<AJUSTE ENERGIA>>.- Realiza el ajuste estequiométrico de la reacción de la generación de la biomasa con Agua Residual como sustrato.

Botón <<AJUSTE ESTEQ>>.- Realiza el ajuste estequiométrico de la reacción completa para generación de biomasa con Agua Residual como sustrato.

Botón <<COEFICIENTES ESTEQ>>.- Este botón presenta en la **COMAND WINDOWS**, el vector de ajuste seleccionado en formato de número fraccionario, de forma tal que pueda seleccionar el denominador de mayor valor para convertir el número decimal en entero, en el vector de ajuste de las reacciones estequiométricas.

Botón <<RELACIONES EST>>.- una vez ajustadas las ecuaciones este botón me permite calcular las diversas relaciones de la estequiometría.



Figura 5. Botones de Acción

4. RESULTADOS

Para validar el modelo vamos a realizar una simulación que calcule las relaciones estequiométricas del tratamiento biológico de una agua residual doméstica, cuya caracterización nos entrega los siguientes parámetros.

$$\text{DQO} = 550 \text{ mg/lit}; \text{SV} = 265 \text{ mg/lit}; \text{COT} = 165 \text{ mg/lit}; \text{N-K}=19 \text{ mg/lit}$$

Siguiendo las indicaciones de la Presentación del Modelo ingresamos los parámetros del agua residual de estudio en los cuadros de texto correspondientes.

PARAMETROS DEL AGUA RESIDUAL			
DQO	SV	COT	N-K
555	265	165	19

Figura 6. Ingreso de Parámetros del Modelo

Es importante seguir un orden correcto de cálculo así en primer lugar debemos ir al cuadro de mando del modelo (Los Botones de acción) y pulsar primero el botón que corresponde al cálculo de la fórmula del agua residual. Note que al señalar el botón se despliega un Tool Tips donde se orienta la utilidad del botón.

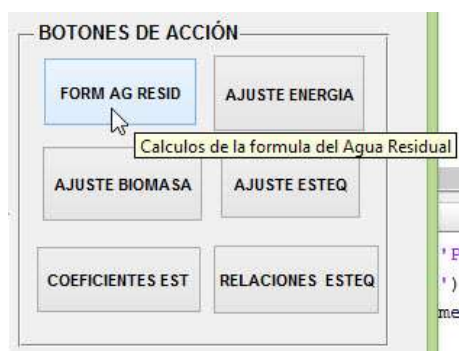


Figura 7. Botón Fórmula del Agua Residual

Luego de pulsar el botón se calcula y despliega los coeficientes de la formulas del agua residual en cada una de las reacciones estequiométricas planteadas. Para los parámetros ingresados podemos observar que la fórmula del agua residual es $\text{C}_{10}\text{H}_{19}\text{O}_3\text{N}_1$.



Figura 8. Fórmula del Agua Residual

Una vez ingresada la fórmula del agua residual estamos listos para empezar a balancear las ecuaciones estequiométricas planteadas empezando por la <<Reacción de oxidación con agua residual como sustrato>>; para lo que pulsamos el botón correspondiente.

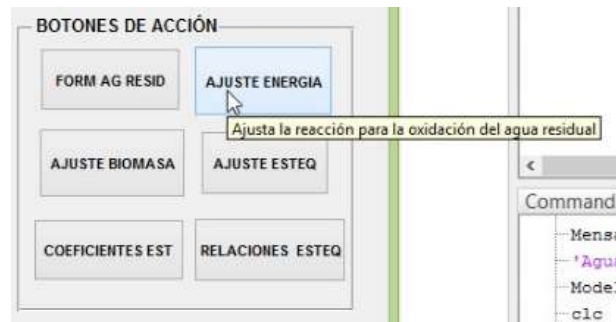


Figura 9. Botón Ajuste de Energía

Al pulsar el botón se presenta un mensaje del sistema, donde se pregunta si desea ajustar la reacción o no, hay ocasiones que el número de ajuste no es muy fácil de visualizar, en este caso es mejor pulsar el botón <<NO>>

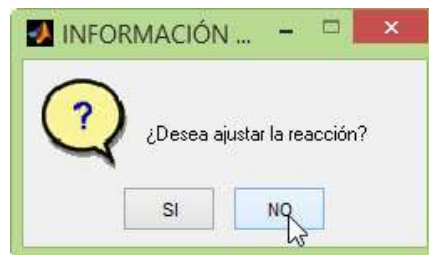


Figura 10. Mensaje de Sistema

Luego el modelo regresa al formulario general y buscamos en los <<Botones de Acción>>; el botón



Figura 11. Botón Coeficiente <<COEFICIENTES EST>>.

Estequiométrico

Al pulsarlo llegamos a un mensaje de Sistema que presenta tres botones, cada uno de los cuales presenta en la COMMAND WINDOWS un vector de ajuste. Que en este caso para la reacción de Oxidación del agua residual convierte los coeficientes decimales al formato de fracción para encontrar el número de ajuste.

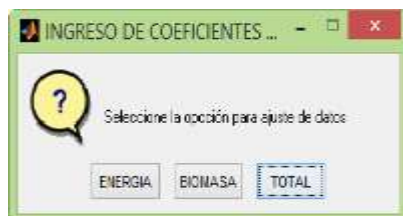


Figura 12. Mensaje de Sistema



Figura 13. Vector de Ajuste

Notemos que el sistema ofrece un mensaje donde nos aconseja que seleccionemos el denominador más alto como número de ajuste, en este caso solo tenemos un denominador que seleccionamos que es el 2.

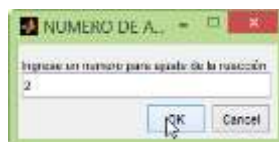


Figura N° 14: Coeficiente de Ajuste

Volvemos a pulsar el botón <<AJUSTE ENERGIA>>; para que el modelo recalcule el vector de ajuste de la ecuación, y nos presente nuevamente el mensaje de sistema que nos consulta si queremos equilibrar la reacción. En este caso pulsamos que <<SI>>.

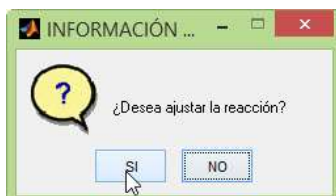


Figura N° 15: Información de Sistema

Veamos la reacción de oxidación del sustrato antes y después del ajuste. Notamos que la reacción sin ajuste es multiplicada por el número de ajuste (en este caso 2). Para que todos los coeficientes sean enteros



Figura16. Reacción de oxidación sin ajuste



Figura18. Reacción de oxidación con ajuste

Ahora repetimos la secuencia para la reacción de generación de la biomasa y se presentan los mismos mensajes, para ajustar la reacción por tanto procedemos en consecuencia hasta llegar al vector de ajuste en la Command Windows. En este caso también se presenta un solo denominador que seleccionamos como numero de ajuste. (En este caso se repite el numero 2). Pulsamos el botón <<OK>> del mensaje para regresar al formulario del modelo.



Figura N° 19: Vector de Ajuste para generación de Biomasa

Volvemos a pulsar el botón <<AJUSTE BIOMASA>>; para que el modelo recalcule el vector de ajuste de la ecuación, y nos presente nuevamente el mensaje de sistema que nos consulta si queremos equilibrar la reacción. En este caso pulsamos que <<SI>>. E ingresamos el número de ajuste para obtener la ecuación equilibrada

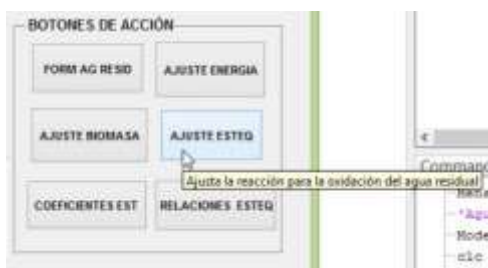


Figura 20. Botón Ajuste Biomasa



Figura 21. Ecuación Equilibrada para el Ajuste de Biomasa

Ahora vamos a trabajar



con la reacción global,

siguiendo la misma secuencia. Se presentan los mismos mensajes, para ajustar la reacción por tanto procedemos en consecuencia hasta llegar al vector de ajuste en la Command Windows.

Figura 22. Botón Ajuste Estequiométrico (oxidación del AR)

Este caso también se presenta una situación particular puesto que tenemos 5 fracciones, seleccionamos el mayor denominador como número de ajuste. (En este caso se repite el numero 18). Pulsamos el botón <<OK>> del mensaje para regresar al formulario del modelo.



Figura 23. Vector de Ajuste para reacción de oxidación

Volvemos a pulsar el botón <<AJUSTE ESTEQ>>; para que el modelo recalculé el vector de ajuste de la ecuación, y nos presente nuevamente el mensaje de sistema que nos consulta si queremos equilibrar la reacción. En este caso pulsamos que <<SI>>. E ingresamos el número de ajuste para obtener la ecuación equilibrada



Figura 24. Ecuación Equilibrada para oxidación de biomasa

Finalmente tenemos equilibradas las 3 reacciones por lo que podemos proceder al cálculo de los Coeficientes estequiométricos pulsando el botón <<RELACIONES ESTEQ>>.

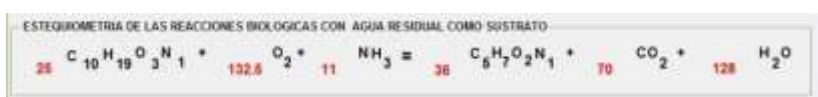


Figura 25. Ecuación Equilibrada

4.1.

Relaciones estequiométricas

Veamos la sección <<RELACIONES CALCULADAS POR LA ESTEQUIOMETRIA>>; antes y después del cálculo. Notemos que al pulsar sobre los nombres se presenta una ayuda contextual que nos orienta sobre el valor calculado, unidades, etc.

RELACIONES CALCULADAS POR LA ESTEQUIOMETRIA

PARAMETROS DEL AGUA RESIDUAL				Rendimiento Y ORO (gr)		Rendimiento DQO	
DQO	SV	COT	N/L	550gr DQO	550gr ORO	550gr DQO	550gr ORO
100	250	100	10				
Relación gr DQO de 5 gr de S				Relación gr DQO de 550		Relación para eliminación de N	
				Rendimiento (Y ₅₅₀) gr 550gr DQO			

Figura N° 26: Relaciones calculadas con la estequiometria



Figura N° 27: Botón Relaciones estequiométricas

En el proceso de Tratamiento Biológico de aguas residuales. La materia orgánica disuelta, también llamada <<Sustrato Orgánico (S)>>; y el producto de la reacción, también llamada <<Biomasa (X)>>; se relacionan de diferente manera de acuerdo con las ecuaciones estequiométricas correctamente balanceadas.



Figura 28. Cálculos de las Relaciones Estequiométricas

En los lodos activados, la materia orgánica (Biomasa) se mide como los S_{SV} , su Relación con el DQO en gr de DQO/gr de S_{SV} , se calcula en el modelo. Entonces podemos determinar por cada gramo de Biomasa que se degrada cuantos gramos de oxígeno molecular se necesitan.

La DQO de las aguas residuales, la encontramos en su proceso de oxidación, en esta reacción estequiométrica. En el modelo podemos obtener la Relación de esta DQO en gr del Agua Residual (Sustrato) a su peso en gr.

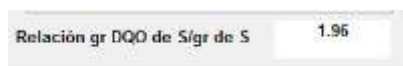


Figura 29. Relación gr DQO de S/gr de S

La Relación para la eliminación del Nitrógeno amoniacal se obtiene en la reacción de la oxidación de la biomasa en gr de nitrógeno eliminado/gr de biomasa generada.



Figura 30. Relación para eliminación del Nitrógeno

El cálculo del Rendimiento en la producción de lodos (Y), en función del consumo de Sustrato (Agua residual), lo obtenemos en el modelo de la reacción global, lo expresamos en gr de S_{SV} /por gr de DQO del sustrato

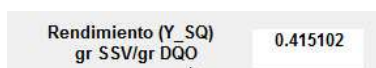


Figura N° 31:

Rendimiento de la producción de lodos/consumo de sustrato

El Rendimiento (Y) en la producción de lodos, en función del DBO₅ del Sustrato (Agua Residual), se calcula en el modelo en gr de S_{SV} /gr de DBO₅.



Figura 32. Rendimiento de la producción de lodos/DBO Sustrato

El Rendimiento de Biomasa generada expresada como su DBO, en función del DBO del Agua Residual (S) en el modelo se calcula en gr de DQO generada/gr de DQO consumido.

Rendimiento DQO Biomasa/DQO Sustrato	0.587755
---	----------

Figura N° 33: Rendimiento de DQO Biomasa/DQO Sustrato

Finalmente, el modelo nos entrega el Rendimiento del oxígeno que se ha consumido en función del DQO del sustrato eliminado (materia orgánica del agua residual). en gr de O₂/gr de DQO

Rendimiento O2	0.412245
----------------	----------

Figura N° 34: Rendimiento O2

4.2. Código para la construcción del modelo para cálculos estequiométricos de las aguas residuales domésticas.

El código ha sido listado numerando cada una de sus filas en una secuencia que empieza con el número 1. Por economía de espacio se han suprimido las líneas numeradas que están vacías (es decir no tienen ni código ni comentarios, y que son dejadas para expansión). También se ha suprimido algunas de las líneas numeradas que tienen comentarios propios de Matlab, que no son significativos, y lector encontrara al desarrollar la GUI de Matlab.

N. línea	CODIGO PARA LA CONSTRUCCIÓN DEL MODELO PARA CALCULOS ESTEQUIOMETRICOS DE LAS AGUAS RESIDUALES DOMESTICAS
1	function varargout = Modelo_Estequimetria_Aguas_Residuales(varargin)
2	% MODELO_ESTEQUIMETRIA_AGUAS_RESIDUALES MATLAB code for Modelo_Estequimetria_Aguas_Residuales.fig
25	% Last Modified by GUIDE v2.5 31-May-2017 20:47:51
27	% Begin initialization code - DO NOT EDIT
28	gui_Singleton = 1;
29	gui_State = struct('gui_Name', mfilename, ...
30	'gui_Singleton', gui_Singleton, ...
31	'gui_OpeningFcn', @Modelo_Estequimetria_Aguas_Residuales_OpeningFcn,
32	'gui_OutputFcn', @Modelo_Estequimetria_Aguas_Residuales_OutputFcn,
33	'gui_LayoutFcn', [] , ...
34	'gui_Callback', []);
35	if nargin && ischar(varargin{1})
36	gui_State.gui_Callback = str2func(varargin{1});
37	end
39	if nargin

[illegible]

```

123 set(hObject,'BackgroundColor' , 'white');
124 end
127 function edit3_Callback(hObject, eventdata, handles)
128 % hObject    handle to edit3 (see GCBO)
137 function edit3_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
143 %    See ISPC and COMPUTER.
144 if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), ...
145     get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
146     set(hObject,'BackgroundColor' , 'white');
147 end
150 function edit4_Callback(hObject, eventdata, handles)
151 % hObject    handle to edit4 (see GCBO)
161 function edit4_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
167 %    See ISPC and COMPUTER.
168 if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), ...
169     get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
170     set(hObject,'BackgroundColor' , 'white');
171 end
174 % --- Executes on button press in pushbutton1.
175 function pushbutton1_Callback(hObject, eventdata, handles)
180 %Calculo de la fórmula del agua residual. El cálculo está basado en la estequiometria
182 %Realizamos un balance de masas por elementos
184 %Cc_Hh_Oo_Nn_ + mO_O2 = c_C02 + ag_H20 + n_NH3
186 % Debemos calcular los coeficientes c;/h;/o;/n/; Ingresamos los parámetros analizados de
la muestra. El DQO nos indica el consumo de Oxigeno para la oxidación de la muestra
189 % El COT nos indica la cantidad de carbono en la muestra. El N nos da la cantidad de
nitrógeno en la muestra. Los SV son los sólidos disueltos en la muestra
194 %Toma datos de parametros del agua residual
196 DQO=str2num(get(handles.edit1,'String'));
197 SV=str2num(get(handles.edit2,'String'));
198 COT=str2num(get(handles.edit3,'String'));
199 N=str2num(get(handles.edit4,'String'));
201 mO_ =DQO/32;    %Coeficiente del Oxigeno molecular
03/06/14 11:50 PME:\TESIS MAESTRIA\MATLAB GUIDE\...6 of 16
202 n_ =N/14;    %Coeficiente para el Nitrógeno en la muestra
203 c_ =COT/12;    %Coeficiente del Carbono en la muestra
205 %Para calcular los coeficientes tanto el Oxigeno cuanto del hidrogeno realizamos un
balance de masas para ambos elementos.
208 % O_+2*mO_ = 2*c_+ ag_          Balance de O
209 % h_ = 3*n_ +2*ag          Balance de H

```

```

210 % Tenemos 3 incógnitas con dos variables, buscamos una 3era ec.
211 % presentamos la ec de los Solidos volátiles (SV)
213 %  $SV = 12 \cdot c_{-} + 1 \cdot h_{-} + 16 \cdot o_{-} + 14 \cdot n_{-}$ 
216 %Algoritmo para resolver matrices mediante el método de Gauss Jordán
217 %Desarrollado por Ing. Gonzalo Villa Manosalvas & Lcda Teresa Villa Cox
218 %Fac de Ing. Química de la Universidad de Guayaquil
221 % CALCULO DE LA FORMULA DEL AGUA RESIDUAL
223 % Resolvemos el sistema de ecuaciones planteado.
224 %Calculo de las constantes de la matriz desarrollada
226 global Formula
227 global e
228 global GB_S
230  $K1 = (3/14) \cdot N$ ;
231  $K2 = (DQO/16) - (COT/6)$ ;
232  $K3 = COT + N - SV$ ;
233 %Ingresar la matriz
235  $B = [1 \ 16 \ 0 \ K3; 0 \ 1 \ -1 \ K2; -1 \ 0 \ 2 \ K1]$ ;
236 %Definir las dimensiones de la matriz
237  $N = \text{length}(B) - 1$ ;
238 %Reducción de Gauss Jordán
239 for j=1:N
240      $[a,b] = \max(\text{abs}(B(j:N,j:j)))$ ;
241      $c = (j+b) - 1$ ;
242      $B([c \ j], :) = B([j \ c], :)$ ;
243     for i=1:N
244         if  $i \sim j$ 
245              $B(i,:) = B(i,:) - ((B(j,:)/B(j,j)) \cdot B(i,j))$ ; 246     end
247     end
248 end
249 for i=1:N
250      $B(i,:) = B(i, :)/B(i,i)$ ;
251 end
253  $\text{Formula} = [c_{-} - 1 \cdot B(1,4) - 1 \cdot B(2,4) \ n_{-}]$ ;
254  $\text{Formula} = \text{round}(\text{Formula}/\min(\text{Formula}))$ ;
256  $O = \text{Formula}(1,3)$ ;  $C = \text{Formula}(1,1)$ ; 257  $H = \text{Formula}(1,2)$ ;  $N = \text{Formula}(1,4)$ ;
259 %Presentar formula del agua residual, en la reacción
260 %de oxidación con agua residual como sustrato.
261 set(handles.text18,'String',C)
262 set(handles.text19,'String',H)

```

```

263 set(handles.text20,'String',O)
264 set(handles.text21,'String',N)
266 %Presentar formula del agua residual, en la reacción.para la generación con agua residual
268 set(handles.text59,'String',C)
269 set(handles.text60,'String',H)
270 set(handles.text61,'String',O)
271 set(handles.text62,'String',N)
273 %Presentar formula del agua residual, en la reacción. total con agua residual como
    sustrato.
275 set(handles.text123,'String',C)
276 set(handles.text124,'String',H)
277 set(handles.text125,'String',O)
278 set(handles.text126,'String',N)
280 %Vector para Oxidación del agua residual
281 b_E=[O C H N]';
282 %Vector para generación de biomasa
283 b_B = [O N H C]';
285 %REACCION DE OXIDACION DEL AGUA RESIDUAL (GENERACION DE ENERGIA)
287 %Matriz para generación de energía
288 GE = [2 2 1 0;0 1 0 0;0 0 2 3;0 0 0 1];
289 D=[GE b_E];
291 %Definir las dimensiones de la matriz
292 N=length(GE);
293
294 %Reducción de Gauss Jordán
295 for j=1:N
296     [a,b]=max(abs(D(j:N,j:j)));
297     c=(j+b)-1;
298     D([c j],:)=D([j c],:);
299     for i=1:N
300         if i~=j
301             D(i,:)=D(i,:)-((D(j,:)/D(j,j))*D(i,j));
302         end
303     end
304 end
305 for i=1:N
306     D(i,:)=D(i,:)/D(i,i);
307 end
309 d=D(:,5)';
310 e=[1 d] ;
312 %Reacción de generación de biomasa con agua residual como sustrato.

```



```

314 %C10H2O3N + O2 + NH3 = C5H7O2N + H2O
316 %matriz para generación de Biomasa
317 GB =[2 0 1 2;0 1 0 1;0 3 2 7;0 0 0 5] ;
319 GB_S =[GB b_B];
321 %Definir las dimensiones de la matriz
322 N=length(GB);
323 %Reducción de Gauss Jordán
324 for j=1:N
325 [a,b]=max(abs(GB_S(j:N,j:j)));
326 c=(j+b)-1;
327 GB_S([c j],:)=GB_S([j c],:);
328 for i=1:N
329 if i~=j
330 GB_S(i,:)=GB_S(i,:)-((GB_S(j,:)/GB_S(j,j))*GB_S(i,j)); 331 end
332 end
333 end
334 for i=1:N 335 GB_S(i,:)=GB_S(i,:)/GB_S(i,i);
336 end
339 % --- Executes on button press in pushbutton2.
340 function pushbutton2_Callback(hObject, eventdata, handles)
345 %Presentación de vectores para ajuste de ecuaciones; construye tres opciones para
respuesta
347 global Total
348 global GB_S
349 global e
351 Pregunta =questdlg('Seleccione la opción para ajuste de datos' , ...
352 'INGRESO DE COEFICIENTES DE AJUSTE' , 'ENERGIA' , 'BIOMASA' , ...
353 'TOTAL' , 'TOTAL');
355 %Seleccionando opción
356 switch Pregunta
358 case 'ENERGIA'
360 Vector_Energia =rats(e)
361 warndlg('Use el mayor denominador para ajustar los coeficientes' , ...
362 'SISTEMA')
364 case 'BIOMASA'
366 %Ajuste para la reacción de generación con agua residual
368 gb_s=GB_S(:,5);
369 gb_sf =[1 gb_s];
370 Vector_Biomasa =rats(gb_sf)
371 warndlg('Use el mayor denominador para ajustar los coeficientes' , ...

```

```

372     'SISTEMA')
374     case 'TOTAL'
376     Vector_Total =rats(Total)
377     warndlg('Use el mayor denominador para ajustar los coeficientes' , ...
378     'SISTEMA')
379 end
382 % --- Executes on button press in pushbutton5.
383 function pushbutton5_Callback(hObject, eventdata, handles)
384 %Ajuste para la reacción de oxidación del agua residual; Declaración de variables globales
390 global e
392 EE_1=e(1);EE_2=-1*e(2);EE_3=e(3);EE_4=e(4);EE_5=e(5); 393
394 %=Presentar, la reacción de oxidación con agua residual como sustrato balanceada
397 set(handles.text114,'String',EE_1)
398 set(handles.text105,'String',EE_2)
399 set(handles.text107,'String',EE_3)
400 set(handles.text108,'String',EE_4)
401 set(handles.text109,'String',EE_5)
403 %Ajuste de ecuación
405 Respuesta = questdlg('¿Desea ajustar la reacción?' , ...
406     'INFORMACIÓN DE SISTEMA', 'SI' , 'NO' , 'NO');
407 if strcmp(Respuesta,'SI')
408     %return;
409 Valor1 = inputdlg('Ingrese un numero para ajuste de la reacción' , ...
410     'NUMERO DE AJUSTE');
411 Valor=str2num(Valor1{1});
413 %Ingreso de valor
415 RR = Valor*e;
416 EE_1=RR(1);EE_2=-1*RR(2);EE_3=RR(3);EE_4=RR(4);EE_5=RR(5);
418 set(handles.text114,'String',EE_1)
419     set(handles.text105,'String',EE_2)    420     set(handles.text107,'String',EE_3)    421
set(handles.text108,'String',EE_4) 422 set(handles.text109,'String',EE_5) 423
424 end
427 % --- Executes on button press in pushbutton6.
428 function pushbutton6_Callback(hObject, eventdata, handles)
433 %Ajuste para la reacción de generación con agua residual
435 global GB_S
437 GB_S ;%Presentar resultados
439 gb_s=GB_S(:,5);
440 gb_sf =[1 gb_s];
442 %Ingresar resultados

```

```

443 AguaR=gb_sf(1);Oxigeno=-1*gb_sf(2);Amoniaco=-1*gb_sf(3);
444 Agua=gb_sf(4);Biomasa=gb_sf(5)
446 %=Presentar, la reacción de síntesis de biomasa con agua residual como sustrato
449 set(handles.text115,'String',AguaR)
450 set(handles.text110,'String',Oxigeno)
451 set(handles.text111,'String',Amoniaco)
452 set(handles.text112,'String',Biomasa)
453 set(handles.text113,'String',Agua)
455 %Ajuste de ecuación
457 Respuesta = questdlg('¿Desea ajustar la reacción?' , ...
458     'INFORMACIÓN DE SISTEMA', 'SI' , 'NO' , 'NO');
460 if strcmp(Respuesta,'SI')
462     Valor2 = inputdlg('Ingrese un numero para ajuste de la reacción' , ...
463         'NUMERO DE AJUSTE');
464     ValorF=str2num(Valor2{1});
466     %Ingreso de valor
468     Ajuste = ValorF*gb_sf;
470     AguaR2=Ajuste(1);Oxigeno2=-1*Ajuste(2);Amoniaco2=-1*Ajuste(3);
471     Agua2=Ajuste(4);Biomasa2=Ajuste(5);
473     %=Presentar, la reacción de síntesis de la biomasa con agua residual como sustrato
476     set(handles.text115,'String',AguaR2)
477     set(handles.text110,'String',Oxigeno2)
478     set(handles.text111,'String',Amoniaco2)
479     set(handles.text112,'String',Biomasa2)
480     set(handles.text113,'String',Agua2)
482 end
485 % --- Executes on button press in pushbutton7.
486 function pushbutton7_Callback(hObject, eventdata, handles)
492 %CALCULOS DE COEFICIENTES DE TRANSFORMACION
494 %En la literatura técnica sobre tratamiento de aguas la Biomasa se expresa en la variable
X, y se mide en SSV, la relación entre este Parámetro SSV a su DQO se calcula por su
relación estequiometrica. La materia orgánica se conoce como Sustrato S. Definición de
variables globales
500 global e
501 global Formula
502 global Total
504 %Calculo de los gramos de Sustrato Consumido
506 PM_AR =[12 1 16 14]; %Peso Molecular de componentes del AR (CHON)
507 PM_Sustrato = sum(PM_AR.*Formula);
509 %Biomasa Generada (Peso molecular de Biomasa y DQO )

```

```

510 PM_Biomasa=113;PM_O2=32;PM_N=14;
512 %Relación del consumo de O2 en la oxidación de la biomasa
513 % (gr de DQO/gr de SSV)
514 %C5H7O2N + 5O2 = 5CO2 + 2 H2O +NH3
515 R_DQO_B = (5*PM_O2)/PM_Biomasa;
516 %Ingreso de resultados
517 set(handles.text99,'String',R_DQO_B)
519 %Calculo Relación DQO Sustrato a su masa en gr de DQO de Sustrato/gr Sustrato
521 R_S=(-1*e(2)*PM_O2)/(e(1)*PM_Sustrato);
522 %Ingreso de resultados
523 set(handles.text97,'String',R_S)
525 %Rendimiento Lodos consumo sustrato (gr de SSV de Sustrato generado/gr de DQO)
527 R_Y = ((PM_Biomasa*Total(4))/(PM_Sustrato*Total(1)))/R_S;
528 set(handles.text87,'String',R_Y)
530 %Producción de lodos SSV/DQO5 (Rendimiento)
531 R_Y_DBO5 = R_Y/0.7 ; %en gr de SSV/gr de DBO5
532 set(handles.text101,'String',R_Y_DBO5)
534 %Rendimiento Y (DQO de Biomasa en función del DQO del Sustrato)
535 R_YBS = R_Y*R_DQO_B; %en gr de DQO generado/gr de DQO consumido
536 set(handles.text95,'String',R_YBS)
538 %Rendimiento Oxígeno consumido por DQO de sustrato eliminado
539 %(en gr de O2 consumido/gr de DQO Sustrato a gr de Sustrato)
540 RO = (Total(2)*PM_O2)/(Total(1)*PM_Sustrato)/R_S;
541 set(handles.text85,'String',RO)
543 %Relación de eliminación de nitrógeno
544 R_N = PM_N/PM_Biomasa;
545 set(handles.text91,'String',R_N)
548 % --- Executes on button press in pushbutton8.
549 function pushbutton8_Callback(hObject, eventdata, handles)
554 %ajuste de la ecuación estequiométrica para la producción de biomasa
555 global e
556 global GB_S
557 global Total
559 GB_S ;%Presentar resultados
561 gb_s=GB_S(:,5)';
562 gb_sf =[1 gb_s];
564 % INGRESO DE VARIABLES ECUACIÓN DE ENERGIA
565 AR = e(1); O2 = -1*e(2); CO2 = e(3);
566 H2O = e(4); NH3 = e(5);

```

```

568 %ingreso de variables ecuación de biomasa
569 AR_B = gb_sf(1);O2_B = -1*gb_sf(2);
570 NH3_B = -1*gb_sf(3);Biomasa = gb_sf(5);
571 H2O_B = gb_sf(4);
573 %Calculo de h
575 h_E = (Biomasa-1.44)/1.44;
577 %ajuste de la ecuacion general de la biomasa
579 Agua_Residual = AR_B + AR*h_E;
580 Oxigeno = O2*h_E + O2_B;
581 Amoniacos = NH3_B-NH3*h_E;
582 Biomasa; Dioxido = CO2*h_E;
583 Agua = H2O_B + H2O*h_E;
585 Total=[Agua_Residual Oxigeno Amoniacos Biomasa Dioxido Agua];
587 %=Presentar, la reacción de síntesis de la biomasa con agua residual como sustrato
590 set(handles.text150,'String',Agua_Residual)
591 set(handles.text146,'String',Oxigeno)
592 set(handles.text147,'String',Amoniacos)
593 set(handles.text148,'String',Biomasa)
594 set(handles.text155,'String',Dioxido)
595 set(handles.text160,'String',Agua)
597 %Ajuste de ecuación
599 Respuesta = questdlg('¿Desea ajustar la reacción?' , ...
600     'INFORMACIÓN DE SISTEMA', 'SI' , 'NO' , 'NO');
602 if strcmp(Respuesta,'SI')
603     %return;
604 Valor2 = inputdlg('Ingrese un numero para ajuste de la reacción' , ...
605     'NUMERO DE AJUSTE');
606 ValorF=str2num(Valor2{1});
608 %Ingreso de valor
610 Ajuste = ValorF*Total;
612 AguaR2=Ajuste(1);Oxigeno2=Ajuste(2);Amoniacos2=Ajuste(3);
613 Biomasa2=Ajuste(4);Dioxido2=Ajuste(5);Agua2=Ajuste(6);
615 %=Presentar, la reacción de síntesis de la biomasa con agua residual como sustrato
618 set(handles.text150,'String',AguaR2)
619 set(handles.text146,'String',Oxigeno2)
620 set(handles.text147,'String',Amoniacos2)
621 set(handles.text148,'String',Biomasa2)
622 set(handles.text155,'String',Dioxido2)
623 set(handles.text160,'String',Agua2)

```

625 end

628 % --- Executes during object creation, after setting all properties.

629 function figure1_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)

630 % hObject handle to figure1 (see GCBO)

5. CONCLUSIONES

El desarrollo de soluciones informáticas lograra actualizar el manejo de los procedimientos y datos experimentales en el área de tratamiento de aguas residuales, mediante el uso de herramientas de computación modernas. El uso de lenguajes de programación tan versátiles y diversificados como la GUI de Matlab, permite manejar los procesos biológicos planteados en este trabajo, de forma muy elástica, con las ventajas de la simulación de procesos. También se logra que los alumnos de pregrado y postgrado que utilicen los modelos para reforzar su formación académica entiendan los diferentes conceptos, y que no sólo retengan determinadas fórmulas aisladas de todo contexto. Se pretende, con las diferentes simulaciones y visualización de los efectos, una mejor comprensión de los procesos biológicos.

6. BIBLIOGRAFÍA

Cardenas Calvachi, G. L., & Sanchez Ortiz, I. A. (2013). Nitrógeno en aguas residuales: orígenes, efectos y mecanismos de remoción para preservar el ambiente y la salud pública. *Scielo*.

Chamorro Bolaños , X., Rodriguez Martinez , G., Enrique Brand, A. L., & Rosero Moreano , M. (2009). MONTAJE Y VALIDACIÓN DEL MÉTODO DE ANÁLISIS POR COMBUSTIÓN Y DETECCIÓN POR INFRARROJO NO DISPERSIVO PARA DETERMINACIÓN DE CARBONO ORGÁNICO TOTAL (COT) EN AGUA. *Scielo*.

Lobo, S. O. (2014). En *Operaciones para la Gestion de residuos Industriales* . Málaga : IC Editorial.

Silvia, C. (2004). *Reacciones Químicas* . Mérida.