



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA ELÉCTRICA

DISEÑO DE NUEVAS ESTRATEGIAS DE ESTIMACIÓN Y PRONÓSTICO DEL
TÉRMINO DE LA FASE AERÓBICA PARA EL PROCESO DE REMOCIÓN
BIOLÓGICA DE NITRÓGENO EN REACTORES BATCH SECUENCIALES

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
DOCTOR EN INGENIERÍA ELÉCTRICA

FRANCISCO ROBERTO JARAMILLO MONTOYA

PROFESOR GUÍA:
DR. MARCOS ORCHARD CONCHA

PROFESOR CO-GUÍA:
DR. CARLOS MUÑOZ POBLETE

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
DR. JUAN CARLOS AGÜERO VÁSQUEZ
DR. JORGE SILVA SÁNCHEZ
DR. JUAN YUZ EISSMANN

SANTIAGO DE CHILE

2018

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR
AL TÍTULO DE DOCTOR EN INGENIERÍA ELÉCTRICA
POR: FRANCISCO ROBERTO JARAMILLO MONTOYA
FECHA: 2018
PROF. GUÍA: DR. MARCOS ORCHARD CONCHA

DISEÑO DE NUEVAS ESTRATEGIAS DE ESTIMACIÓN Y PRONÓSTICO DEL TÉRMINO DE LA FASE AERÓBICA PARA EL PROCESO DE REMOCIÓN BIOLÓGICA DE NITRÓGENO EN REACTORES BATCH SECUENCIALES

En la actualidad existen industrias (petroquímicas, farmacéuticas) cuyos residuos líquidos contienen elevadas concentraciones de nitrógeno. Una alternativa altamente utilizada es la Remoción Biológica de Nitrógeno en Sequencing Batch Reactors. Esta técnica ofrece como ventajas alta eficiencia de conversión y consumo reducido de productos químicos. Como desventaja posee los gastos operacionales inherentes del proceso, como por ejemplo: gastos energéticos y costos asociados a la eliminación de biomasa.

Gran parte de las investigaciones que buscan optimizar la eficiencia de la Remoción Biológica de Nitrógeno, se centran en la fase de nitrificación (fase aeróbica), por ser la encargada de la conversión de productos que son utilizados posteriormente en la desnitrificación. Dentro de estas investigaciones se cuentan el uso de modelos fenomenológicos, estimación de estados, estimación del término de fase aeróbica y la estrategia denominada nitrificación parcial, que destaca por sus alcances en reducción de costos y tiempos de operación del reactor.

A pesar de que existe un gran número de investigaciones, todavía existen brechas importantes que acortar, y una de esas representa la falta de una “integración de estrategias”, en la cual, estrategias tales como estimación del término de fase aeróbica, permitan potenciar y mantener una nitrificación parcial estable en el largo plazo.

En el presente trabajo de Tesis se propone la elaboración de estrategias de estimación y pronóstico del término de la fase aeróbica para el proceso de Remoción Biológica de Nitrógeno en un Sequencing Batch Reactor, con el fin de aumentar la eficiencia del proceso y reducir sus costos.

En primer lugar y mediante simulación, se analiza la influencia de la duración de la fase aeróbica sobre la eficiencia global del proceso de Remoción Biológica de Nitrógeno operado bajo nitrificación parcial. En segundo lugar, se proponen y desarrollan dos tipos de enfoques que aportan con la estimación del término de la fase aeróbica. El primero es un enfoque basado en extracción de características y clasificadores Support Vector Machines. En cambio, el segundo es un enfoque basado en Filtro de Partículas para estimar la concentración de amonio en el reactor y posteriormente pronosticar el término de la fase aeróbica.

Los resultados de simulación refuerzan la idea de incorporar herramientas que estimen el término de la fase aeróbica de manera precisa, para así lograr una reducción de los costos y de los tiempos de operación de manera estable en el largo plazo. En cuanto a los enfoques propuestos, su entrenamiento, verificación y posterior validación fueron realizados utilizando datos experimentales provenientes de un reactor secuencial batch a escala piloto.

Abstract

Today discharge wastewater with high nitrogen concentrations prevails in the petrochemical, pharmaceutical, fertilizer, and food industries. A commonly used and economically viable alternative for the treatment of industrial and municipal wastewater is the biological nitrogen removal process (BNR) in sequencing batch reactors (SBRs). The BNR process can achieve high efficiency, low consumption of external organic matter, and low surplus sludge. The operating costs involve energetic expenses for aeration, reagents like alkaline solution and exogenous chemical oxygen, and sludge management.

The optimization of BNR in SBRs to increase efficiency and reduce operating costs has become the aim of researchers worldwide. Efforts mainly focus on the nitrification phase (aerobic) as the limiting reaction rate of BNR. These investigations include the use of different strategies such as: achieving partial nitrification, real-time control, monitoring to detect characteristic patterns of nitrification/denitrification, modeling based on activated sludge (ASM), and the use of data-driven models to estimate variables that cannot be obtained experimentally or online.

There are still important gaps to be filled in this field. One of these relates to the lack of a methodology that adequately integrates different strategies. For example partial nitrification working along aerobic phase end-point estimation can achieve a more stable and efficient BNR process.

In this thesis estimation and prognostic techniques for the aerobic phase end-point for BNR in SBRs are proposed, aiming to improve efficiency and reduce costs.

First the influence of aerobic phase duration over BNR efficiency is analyzed by simulating a partial nitrification process. Then two different approaches for aerobic phase end-point estimation are proposed. The first is based on feature extraction and support vector machines classifiers. The second is based on particle filters for ammonium concentration estimation, and aerobic phase end-point prognosis.

The simulation results support that accurate aerobic phase end-point estimation reduce both costs and operating times in the short and long term. The training, verification, and validation of both approaches were developed using experimental data from a lab-scale SBR.

*Con mucho cariño a toda mi familia, en especial
a mis padres María Montoya y Miguel Jaramillo,
y a mis hermanas Marta Graciela y María Alejandra.*

Agradecimientos

Quiero agradecer en primer lugar a mi familia, por ser apoyo fundamental en este camino que decidí seguir. A mis padres: María y Miguel por su amor, dedicación y esfuerzo. A mis hermanas: Marta y Alejandra por su preocupación, consejos y enseñanzas. A mis cuñados Sergio y Claudio, por su confianza, amistad y colaboración. A mis sobrinas: Sophia, Lakshmi y Laura, que a pesar de la lejanía, ellas me demuestran su cariño y respeto. A mis tíos: Carmen, Juan, Elizabeth y Edgardo por su compromiso, motivación y ejemplo. Y a mis primas: Daniela, Romané, Paola, Rocío y Valentina por sus logros, alegrías y respaldo.

En segundo lugar quiero incluir a mi profesor guía Dr. Marcos Orchard, por la oportunidad y confianza que me dio para realizar el doctorado, por los conocimientos transmitidos, los variados consejos, por su apoyo, integridad y calidad humana que siempre tuvo tanto conmigo, como con todos los alumnos bajo su guía. Muchísimas gracias.

Agradecimientos también a los profesores Dr. Carlos Muñoz y Dr. Christian Antileo, por su valiosa ayuda, por sus consejos y colaboración para generar investigación entre Universidades.

A la comisión que revisó este trabajo de Tesis: Dr. Juan Yuz, Dr. Juan Agüero, Dr. Carlos Muñoz y Dr. Jorge Silva. Muchas gracias por su tiempo, su dedicación y por las sugerencias que sirvieron para mejorar el documento final.

A los amigos que hice dentro del doctorado (los poetas expatriados), a los que siento muy cercanos, a los que respeto y aprecio mucho: Aramis, Vanessa, Luis, Sebastián, Jacqueline, Diego, Carlos y Leonardo. Gracias por permitirme compartir con ustedes y por enseñarme parte de la cultura de sus países.

A los amigos que fui conociendo en mi estadía en Santiago, gracias por su ayuda, paciencia y apoyo: Pablo, Carolina, Freddy, Marco, Jorge, Juan Pablo, Heraldito, Miguel, Camilo y Felipe.

Especiales agradecimientos a todas las personas que fueron parte del departamento 1709, con los que pude compartir momentos valiosos de la vida, en los cuales fui muy feliz y en los que aprendí mucho: Juan Carlos, Gonzalo, Jorge, Ángela, Tedy, Alejandro, Fernanda, Elizabeth y Luis.

A mis amigos ICE-UFRO, que a pesar de las distancias y por los turnos de trabajo, siempre tuvieron palabras de apoyo y me alentaron a seguir adelante: Jorge, Carlos U., Carlos P., Carlos S., Eduardo, Claudio, Paulo, Marisol, Miguel, Lautaro, Roberto, Rodrigo, Rodney,

Andrés y Marcelo. Ver el éxito que ustedes logran, me impulsa a seguir adelante para poder alcanzarlos.

A mis amigos de Temuco, que desde la época del colegio han sido una fuente inagotable de frases e historias. La inteligencia y logros que destacan en ustedes, son fuente de motivación en mi para seguir mejorando. Muchas gracias Claudio, Fernando, Herson, Jaime, Jorge, Juan Carlos, Leonardo, Marcelo, Mario, Óscar y Roberto.

Gracias también a Joana por toda su paciencia y asesorías en temas de inglés, a Rosana por su amistad y alegría, a Marcela por su preocupación y motivación, a Ramón por sus sabios consejos y a John por su constante apoyo tanto con mi familia como con mi persona.

A los amigos que conocí por el crossfit: Agatha, Aucán, Cristian A., Cristian S., Elena, José L., José R., Juan Pablo, Nicolás, Pedro, Rodrigo, Sebastián, Tania y Xenia. Gracias por todos los gratos momentos que he pasado con ustedes, y porque me han demostrado que con esfuerzo y dedicación se van alcanzando metas que se ven sumamente difíciles.

Muchas gracias a la Dra. Doris Sáez por toda la cooperación brindada en estos años. Al igual que para Eliana, Carol y Milena por las gestiones y orientación que necesité de ustedes.

Finalmente mis agradecimientos a Conicyt por la beca CONICYT-PCHA/Doctorado Nacional/2014-21140201.

Tabla de contenido

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Definición del Problema	2
1.2.1. Proceso de nitrificación-desnitrificación	2
1.2.2. Nitrificación parcial	3
1.2.3. Sistemas convencionales de BNR: Reactor Batch Secuencial	4
1.2.4. Mejoras al proceso de BNR en SBRs (I): Modelo de Lodos Activados	6
1.2.5. Mejoras al proceso de BNR en SBRs (II): Nitrificación parcial por control en lazo cerrado de pH y DO	7
1.2.6. Mejoras al proceso de BNR en SBRs (III): Estimación en línea del término de fase, concepto de bending points	7
1.2.7. Mejoras al proceso de BNR en SBRs (IV): Modelamiento basado en datos y estimación en línea	8
1.3. Hipótesis	10
1.4. Objetivos	10
1.4.1. Objetivo General	10
1.4.2. Objetivos Específicos	11
1.5. Contribuciones	11
1.6. Publicaciones generadas durante el programa de doctorado	12
1.6.1. Publicaciones en Journals	12
1.6.2. Publicaciones en Conferencias Internacionales	12
1.7. Estructura del Documento	13
2. Marco Teórico y Antecedentes Preliminares	14
2.1. Modelo de lodos activados	14
2.2. Planta piloto e instrumentación	15
2.2.1. Base de datos experimental	16
2.3. Extracción de Características	18
2.4. Fusión de Características	19
2.5. Support Vector Machines	20
2.5.1. Evaluación del desempeño del clasificador	22
2.6. Estimación y pronóstico de estados	23
2.6.1. Estimación de estados Bayesiana	24
2.6.2. Filtro de Partículas	25
2.6.3. Evolución artificial de parámetros	26
2.6.4. Pronóstico basado en Filtro de Partículas	26

2.6.5. Lazos de Corrección Externos	27
3. Simulación de BNR a través de ciclos consecutivos de operación en un SBR	29
3.1. Consideraciones generales de la simulación de BNR en un SBR	29
3.2. Resultados simulaciones	32
3.3. Discusión	37
3.3.1. Análisis variables en estado estacionario	37
3.3.2. Análisis ciclos de estabilización	37
4. Estimación en línea del término de la fase aeróbica en un SBR basado en extracción de características y clasificadores SVM	38
4.1. Problemas evidenciados en la estimación del término de la fase aeróbica de la base de datos	38
4.2. Extracción de características sobre las variables manipuladas	39
4.3. Estimación del término de la fase aeróbica como problema de clasificación binaria	41
4.3.1. Clasificador SVM: entrenamiento y prueba	41
4.3.2. Resultados del entrenamiento y prueba del clasificador SVM	42
4.3.3. Mejoras en la estimación del término de la fase aeróbica con respecto a metodología previa	43
4.4. Discusión de resultados	46
4.4.1. Desempeño clasificador SVM	46
4.4.2. Mejoras en la estimación del término de fase	47
5. Estimación y pronóstico de amonio en la fase aeróbica de un ciclo SBR operando en nitrificación parcial para BNR	48
5.1. Metodología propuesta	48
5.1.1. Modelamiento en espacios de estados: representación del sistema	49
5.1.2. Modelamiento en espacio de estados: Modelo empírico de la dinámica del amonio en la fase aeróbica	50
5.1.3. Modelamiento en espacio de estados: Ecuación de observación	51
5.1.4. Modelo en espacio de estados para estimación y pronóstico basado en Filtro de Partículas	52
5.1.5. Parámetros del Filtro de Partículas para estimación	53
5.1.6. Consideraciones para la etapa de pronóstico basado en Filtro de Partículas	53
5.2. Resultados	54
5.2.1. Resultados Estimación	54
5.2.2. Resultados Pronóstico	56
5.3. Discusión	59
5.3.1. Análisis modelos de proceso y observación	60
5.3.2. Análisis resultados de estimación de amonio	60
5.3.3. Análisis resultados del pronóstico del término de fase aeróbica	61
6. Conclusiones	63
6.1. Trabajo Futuro	64
Anexos	65

A1. Modelo de nitrificación-desnitrificación	66
A2. Resultados simulación (continuación)	71
Bibliografía	79

Índice de figuras

1.1.	Esquema proceso de nitrificación-desnitrificación.	3
1.2.	Tendencia amonio, nitrito y nitrato en el proceso de nitrificación-desnitrificación.	3
1.3.	Esquema proceso de nitrificación parcial.	4
1.4.	Esquema de la secuencia de fases en un ciclo SBR.	5
1.5.	La franja verde indica los <i>bending points</i> relativos a la nitrificación. La franja naranja indica el <i>bending point</i> relativo a la desnitrificación (imagen tomada desde [62]).	9
2.1.	Esquema de instrumentación y lazos de control de la planta piloto.	17
2.2.	Gráficos de las concentraciones de amonio, nitrito y nitrato, medidos en laboratorio.	18
2.3.	Perfiles de los sensores de pH (A) y DO (B), junto con sus variables manipuladas: pulsos de carbonato (C) y %AVO (D). La fase aeróbica es finalizada cuando los pulsos de carbonato se mantienen constantes por 30 minutos y el %AVO alcanza un 25 %.	19
2.4.	Clasificación binaria a través del hiperplano calculado por SVMs. tado de [25].	21
2.5.	Clasificación no-lineal utilizando funciones <i>kernel</i> , lo que permite separar las clases en un espacio dimensional de orden mayor.	22
3.1.	Esquema que muestra las condiciones iniciales con las cuales se simula la operación del SBR. En cada ciclo el valor de $C_{\text{TAN}}(0)$, $C_{\text{NO}_2^-}(0)$, $C_{\text{NO}_3^-}(0)$ y $S_{\text{N}_2}(0)$ son fijos. En cambio para las otras variables de estado, a partir del ciclo k (con $k > 1$), las condiciones iniciales son iguales a las condiciones finales del ciclo $k - 1$ menos la purga de lodos.	31
3.2.	Esquema que ejemplifica el algoritmo de simulación propuesto. Se utiliza un ASM para simular ciclos consecutivos en un SBR. Además, se define un término fijo para las fases aeróbicas y al término de cada ciclo, almacena la condición final de la concentración de AOB/NOB, junto con la duración de la fase aeróbica y anóxicas.	32
3.3.	Gráficos de los resultados para el Caso 1, y con concentración de amonio inicial de 500 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.	34
3.4.	Gráficos de los resultados para el Caso 2, y con concentración de amonio inicial de 500 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.	36

4.1.	Ciclo en el cual las perturbaciones en el controlador no permitieron tener una tendencia constante de los pulsos de carbonato (C), a pesar de tener un %AVO menor a 20 % (D), lo que resulta en una estimación poco precisa del término de la fase aeróbica.	39
4.2.	Característica P_R (C) extraída de los pulsos de carbonato (A), y característica $P_{\%AVO}$ (D) extraída de %AVO (B). En verde, y sobre los gráficos de las variables manipuladas (A-B), se observa la ventana de tiempo usada para calcular las características.	40
4.3.	Ejemplo de la tendencia seguidas por las características en el plano $P_R - P_{\%AVO}$. Los puntos azules representan las características pertenecientes a la clase de degradación de amonio, mientras que los puntos rojos representan a la clase de degradación completa de amonio.	41
4.4.	Pasos para el entrenamiento y prueba del clasificador SVM.	42
4.5.	Conjunto de datos de entrenamiento en el plano de características. La clase de degradación de amonio (puntos azules) y la clase de degradación completa (puntos rojos) forman dos zonas bien definidas, pero no linealmente separables.	43
4.6.	En verde, se muestra la frontera de decisión óptima que permite discriminar entre las clases de degradación de amonio y degradación completa de amonio.	44
4.7.	Histograma que representa las diferencias entre los tiempos de duración de cada fase aeróbica perteneciente a la base de datos, y de sus respectivos tiempos de duración estimados con la metodología propuesta.	45
5.1.	Esquema metodología estimación y pronóstico en línea. El PF utiliza los datos provenientes del modelo de proceso y de las observaciones para generar estimación/pronóstico de la variable de interés.	49
5.2.	Modelo amonio normalizado en tiempo continuo, versus datos de amonio medidos en línea.	50
5.3.	Modelo <i>Característica</i>	52
5.4.	Gráficos estimación Ciclo 3: Observación (<i>Característica</i>), Parámetro artificial y concentración de amonio.	54
5.5.	Gráficos estimación Ciclo 16: Observación (<i>Característica</i>), Parámetro artificial y concentración de amonio.	55
5.6.	Gráficos estimación Ciclo 22: Observación (<i>Característica</i>), Parámetro artificial y concentración de amonio.	56
5.7.	Gráficos de los resultados del algoritmo de pronóstico para el Ciclo 3. Se incluyen los gráficos del parámetro artificial, concentración de amonio en el reactor y PMF-EoP.	57
5.8.	Gráficos de los resultados del algoritmo de pronóstico para el Ciclo 16. Se incluyen los gráficos del parámetro artificial, concentración de amonio en el reactor y PMF-EoP.	58
5.9.	Gráficos de los resultados del algoritmo de pronóstico para el Ciclo 22. Se incluyen los gráficos del parámetro artificial, concentración de amonio en el reactor y PMF-EoP.	59
1.	Gráficos de los resultados para el Caso 1, y con concentración de amonio inicial de 600 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.	72

2.	Gráficos de los resultados para el Caso 1, y con concentración de amonio inicial de 700 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.	74
3.	Gráficos de los resultados para el Caso 2, y con concentración de amonio inicial de 600 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.	76
4.	Gráficos de los resultados para el Caso 2, y con concentración de amonio inicial de 700 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.	78

Índice de tablas

2.1. Ejemplo Matriz Estequiométrica	15
2.2. Parámetros adicionales de las fases aeróbicas de la base de datos experimental.	16
2.3. Matriz de confusión para clasificación binaria.	22
3.1. Condiciones Iniciales Caso 1.	31
3.2. Condiciones Iniciales Caso 2.	31
3.3. VEE Caso 1 para entrada de amonio 500 mg N/L.	33
3.4. CE de las variables analizadas Caso 1 para entrada de amonio 500 mg N/L.	33
3.5. VEE Caso 2 para entrada de amonio 500 mg N/L.	35
3.6. CE de las variables analizadas Caso 2 para entrada de amonio 500 mg N/L.	35
4.1. Hiperparámetros sintonizados del clasificador SVM.	43
4.2. Matriz de confusión y medidas de desempeño del clasificador con datos de entrenamiento.	44
4.3. Matriz de confusión y medidas de desempeño del clasificador con datos de prueba.	45
5.1. Valores RMSE obtenidos de la estimación amonio en el reactor versus datos de laboratorio.	61
5.2. Valores RMSE obtenidos de la salida filtrada versus observaciones.	61
5.3. Valores RMSE obtenidos de la estimación/pronóstico del amonio en el reactor versus datos de laboratorio.	62
A1. Variables de Estado	66
A2. Parámetros relacionados a las AOB	66
A3. Parámetros relacionados a las NOB	67
A4. Parámetros relacionados a las bacterias heterotróficas	67
A5. Otros parámetros	67
A6. Constantes de ionización	68
A7. Tasa específica máxima de crecimiento [h^{-1}]	68
A8. Tasa de decaimiento [h^{-1}] [59]	68
A9. Concentraciones amoniaco y óxido nitroso [$\text{mg} \cdot \text{N/L}$] [59]	68
A10. Procesos cinéticos	69
A11. Cálculo OUR (Oxygen Uptake Rate)	69
A12. VEE Caso 1 para entrada de amonio 600 mg N/L.	71
A13. CE de las variables analizadas Caso 1 para entrada de amonio 600 mg N/L.	71
A14. VEE Caso 1 para entrada de amonio 700 mg N/L.	73

A15. CE de las variables analizadas Caso 1 para entrada de amonio 700 mg N/L. .	73
A16. VEE Caso 2 para entrada de amonio 600 mg N/L.	75
A17. CE de las variables analizadas Caso 2 para entrada de amonio 600 mg N/L. .	75
A18. VEE Caso 2 para entrada de amonio 700 mg N/L.	77
A19. CE de las variables analizadas Caso 2 para entrada de amonio 700 mg N/L. .	77

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

El desarrollo económico en Chile, ha derivado en el crecimiento de las ciudades y de sus zonas industriales con la respectiva generación de enormes cantidades de desechos y residuos de naturaleza muy variada, con el consiguiente impacto en el medio ambiente. Debido a esto, una adecuada gestión de estos desechos constituye un desafío de complejidad creciente para lograr un desarrollo sustentable en el tiempo. El efecto nocivo de los residuos es de distinta naturaleza, dependiendo de sus características físicas, químicas o biológicas, y del lugar donde son generados y depositados. En términos generales, algunos alteran y perjudican el entorno medioambiental por sus efectos dañinos en el corto, mediano y largo plazo.

Dentro de las industrias que generan desechos y residuos químicos, existen algunas que generan residuos líquidos con elevadas concentraciones de nitrógeno (petroquímicas, farmacéuticas, fertilizantes y alimenticias [9, 22, 112, 113]), el cual se encuentra en forma de nitrógeno amoniacal: amoniaco (NH_3), amonio (NH_4^+) y en sus compuestos oxidados nitrito (NO_2^-) y nitrato (NO_3^-). Y en caso de ser vertidos directamente en ríos y lagos, puede causar la disminución en su concentración de oxígeno disuelto (DO, por sus siglas en inglés), producir toxicidad en la fauna acuática y acelerar el proceso de eutrofización¹ [90, 117]. Adicionalmente, la ingestión de agua con altas concentraciones de nitrito y nitrato puede causar metahemoglobinemia² en infantes y promover la formación de nitrosaminas cancerígenas [96, 124].

Una alternativa ampliamente utilizada y económicamente viable para el tratamiento de aguas residuales municipales e industriales es la remoción biológica de nitrógeno (BNR, por sus siglas en inglés) [6, 130], la cual consiste en aplicar de manera secuencial dos tipos de procesos: nitrificación (que se efectúa en condiciones aeróbicas) y desnitrificación (que se efectúa en condiciones anóxicas). Esta técnica ofrece como ventajas: alta eficiencia de

¹ Proceso de enriquecimiento de nutrientes en cualquier cuerpo acuático, que produce un excesivo crecimiento de la flora acuática [4].

² Presencia de metahemoglobina en la sangre, la cual, a diferencia de hemoglobina, no logra cumplir con la función de transportar oxígeno por la sangre [118].

conversión, consumo reducido de productos químicos y baja generación de biomasa [18]. Como desventajas se tienen los costos operacionales inherentes a este proceso: el gasto energético por consumo de oxígeno en la nitrificación, los requerimientos de materia orgánica³ en la desnitrificación y los costos asociados a la eliminación de lodo⁴ [106, 127].

En base a las ventajas y desventajas asociadas a la BNR, está presente que diversos grupos de investigación en el mundo dedican sus esfuerzos a la generación de nuevas estrategias operacionales necesarias para reducir los costos y aumentar la eficiencia del proceso, manteniendo siempre la restricción de remoción total de nitrógeno amoniacal contenido en las aguas residuales que son tratadas. Es en este sentido que el problema de estimar y predecir/pronosticar el término de la nitrificación en reactores batch secuenciales cobra especial relevancia en función de la complejidad que presenta este tipo de operación, como también por su aplicabilidad o expansión a otro tipo de procesos bioquímicos ejecutados en las distintas configuraciones de reactores presentes en el área de la Ingeniería Química.

1.2. Definición del Problema

1.2.1. Proceso de nitrificación-desnitrificación

La BNR a través de nitrificación-desnitrificación es un proceso extensamente estudiado, en conjunto con ser uno de los más útiles para remover nitrógeno de las aguas residuales. En comparación con los tratamientos físico-químicos⁵, la BNR resulta ser más efectiva y relativamente barata, siendo con esto cada vez más utilizado en la práctica [26, 46, 124].

En el proceso de nitrificación y bajo condiciones aeróbicas, el amonio (NH_4^+) es transformado en nitrito (NO_2^-) mediante la acción de bacterias amonio-oxidantes (AOB, por sus siglas en inglés), y subsecuentemente el nitrito es transformado en nitrato (NO_3^-) por acción de bacterias nitrito-oxidantes (NOB, por sus siglas en inglés) [6]. En el proceso de desnitrificación, bajo condiciones anóxicas, se reduce el nitrato mediante la participación de bacterias heterotróficas (HB, por sus siglas en inglés), pasando por tres compuestos intermedios: nitrito (NO_2^-), óxido nitroso (NO) y óxido nítrico (N_2O), para así finalmente, y en presencia de materia orgánica⁶, producir nitrógeno molecular (N_2), que al ser un gas es liberado a la atmósfera [124]. Un esquema de este proceso se muestra en la Figura 1.1.

Para más detalles del proceso, en la Figura 1.2 se visualiza la evolución que presentan el amonio, nitrito y nitrato para nitrificación (fase aeróbica) y desnitrificación (fase anóxica). Como es de notar en la fase aeróbica, el amonio es degradado al transcurrir el tiempo, y a medida que esto ocurre, se va generando nitrito y nitrato. Una vez degradado el amonio, se pasa a la fase anóxica en donde se reduce el nitrato y el nitrito.

³ Sustancias que contienen compuestos de carbono, usualmente de origen animal o vegetal [88].

⁴ (Referido a lodo activado) Se le llama a los sólidos biológicamente activos en un proceso de lodos activados de una planta de tratamiento de aguas residuales [88].

⁵ Tipos de tratamientos: cloración al breakpoint, arrastre por aire e intercambio iónico [102].

⁶ Sustancias que contienen compuestos de carbono, usualmente de origen animal o vegetal [88].

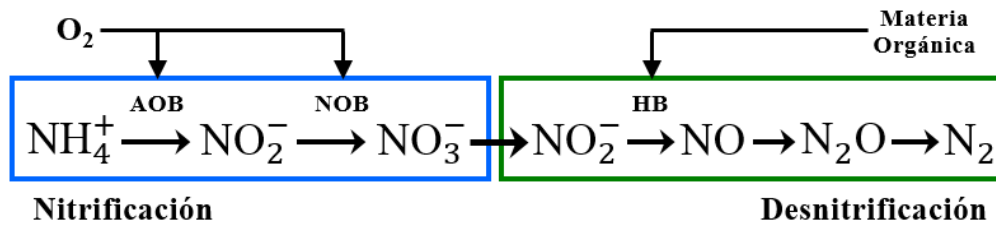


Figura 1.1: Esquema proceso de nitrificación-desnitrificación.

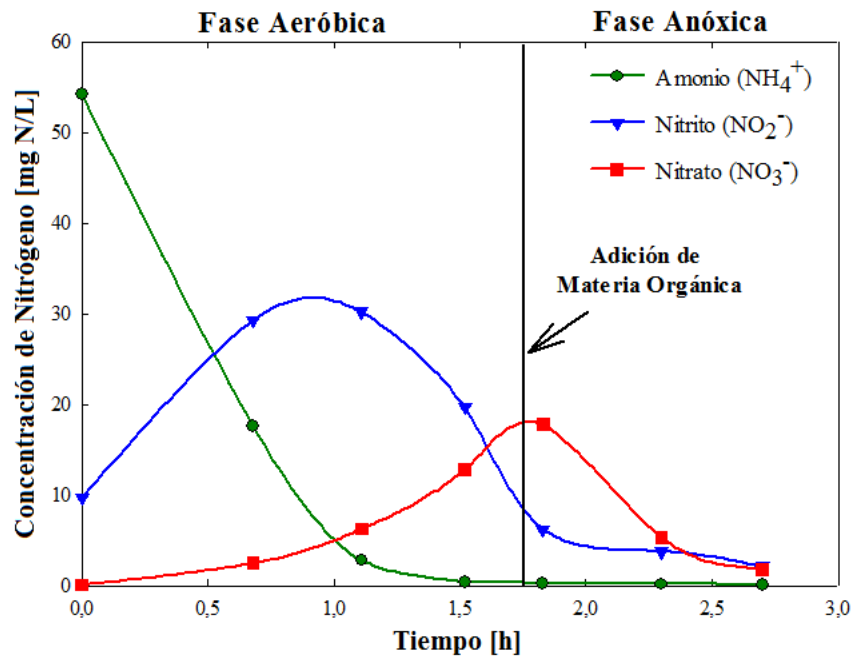


Figura 1.2: Tendencia amonio, nitrito y nitrato en el proceso de nitrificación-desnitrificación.

1.2.2. Nitrificación parcial

Debido a que el nitrito es formado y consumido durante la nitrificación y generado nuevamente en la fase de desnitrificación (Figura 1.1), se desprende que la conversión de nitrito a nitrato se convierte en una reacción innecesaria [6]. A causa de esto es que la variante de nitrificación-desnitrificación vía acumulación de nitrito (o llamado también nitrificación parcial) aparece como una atractiva alternativa para realizar BNR [20, 32].

Para llevar a cabo este tipo de estrategia se requiere enriquecer selectivamente la actividad de las AOB y de modo contrario, inhibir/limitar la actividad de las NOB [46, 132]. Esto se efectúa a través del manejo de variables tales como: pH, temperatura y concentración de DO [11, 121]. Una vez acumulado el nitrito, éste se utiliza posteriormente para comenzar la desnitrificación [107] (Figura 1.3). Como desventaja, esta estrategia resulta ser considerablemente inestable en el largo plazo (meses), debido a las características no lineales del proceso de BNR y a las fluctuaciones en las concentraciones de las poblaciones bacterianas entre un ciclo batch y los siguientes ciclos batch [30, 48, 57].

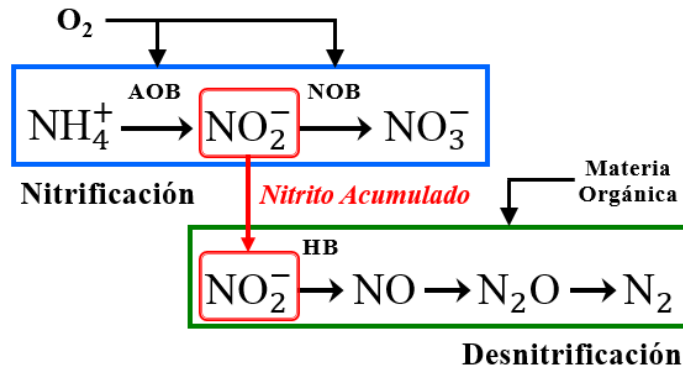


Figura 1.3: Esquema proceso de nitrificación parcial.

En la literatura se menciona que si el proceso global de eliminación de nitrógeno es realizado mediante la estrategia de nitrificación parcial, es posible ahorrar aproximadamente un 25 % en consumo de oxígeno⁷ y entre un 40-60 % de materia orgánica, además de tener una baja producción de lodo⁸ [14, 16, 87].

1.2.3. Sistemas convencionales de BNR: Reactor Batch Secuencial

Dentro de los sistemas convencionales que se utilizan para BNR, existen diversas configuraciones de reactores que se diferencian por:

- 1) Disposición del lodo activado en su interior:
 - a) Lodo fijo sobre una bio-película.
 - b) Lodo suspendido en un medio acuoso que es constantemente agitado.
- 2) Modo de operación (ingreso del contaminante):
 - a) Continuo: Alimentación continua del reactor a lo largo de la reacción.
 - b) Discontinuo (Batch): La alimentación al reactor se ingresa de manera intermitente.

Entre las diversas configuraciones de sistemas indicados anteriormente, se destaca el reactor batch secuencial (SBR, por sus siglas en inglés), debido a que es ampliamente usado por su flexibilidad y bajo costo [74], además de presentar la ventaja de realizar la BNR en un único reactor a través del desarrollo secuencial de las fases aeróbicas y anóxicas [92].

Un ciclo SBR está caracterizado por una serie de etapas o fases que son principalmente: llenado, reacción, decantación y vaciado, teniendo cada una un tiempo definido [125]. Un esquema de este proceso se visualiza en la Figura 1.4.

Aplicado a la BNR, la operación de este tipo de reactor comienza con la fase de llenado, ingresando el agua residual (el reactor contiene inicialmente en su interior lodo activado,

⁷ El consumo de oxígeno, o consumo por aireación, constituye aproximadamente el 50 % del consumo de la energía eléctrica de la planta de tratamiento [58].

⁸ El manejo de lodos representa un porcentaje considerable (20 % - 60 %) de los costos operacionales de las plantas de tratamiento de aguas residuales [41].

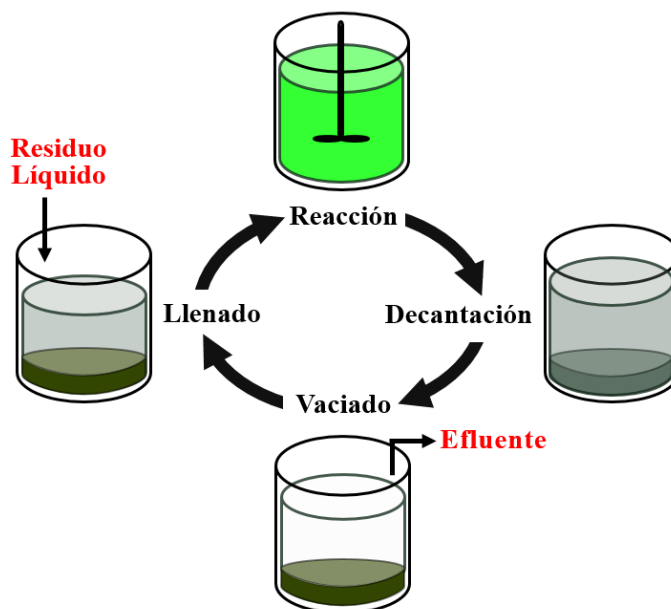


Figura 1.4: Esquema de la secuencia de fases en un ciclo SBR.

que incluye los microorganismos que son capaces de realizar la nitrificación-desnitrificación) [95, 106]. Una vez llenado el reactor, se procede a la fase de reacción, que a su vez puede dividirse en 2 fases: aeróbica y anóxica. En la fase aeróbica existe una permanente aireación y agitación del lodo dentro del reactor, lo que permite que se lleve a cabo la nitrificación. En la fase anóxica se corta la aireación pero sin interrumpir la agitación del lodo, dando con esto la posibilidad de que se lleve a cabo la desnitrificación. En lo que respecta a la decantación, se corta la aireación y agitación de modo que el lodo decante al interior del tanque, para así finalmente iniciar la fase de vaciado. Una vez vaciado el reactor, éste se vuelve a llenar iniciando así un nuevo ciclo, que puede ser igual al anterior en la secuencia de fases aeróbica/anóxica, o distinta dependiendo del criterio del operador.

Dentro de las características relevantes de los SBRs en BNR, se menciona que este es un proceso que presenta un comportamiento dinámico altamente no lineal, variante en el tiempo y severamente afectado por incertidumbres. Siendo esto debido a la diversidad de comunidades microbianas en el lodo activado y por el uso de éstas entre un batch y el siguiente [27, 48]. Junto con lo anterior, este proceso al igual tiene la particularidad de estar sujeto a perturbaciones significativas tales como: cambios hidráulicos, variabilidad de la concentración del agua residual que ingresa en el reactor, cambios en la actividad microbiana y fallas en la instrumentación [64, 129]. Además, cabe resaltar que pequeños cambios en las concentraciones o flujos que se producen entre los distintos ciclos batch (inclusive consecutivos), pueden afectar la cinética de las reacciones no lineales. Lo que conduce a una variabilidad en la calidad del efluente, al crecimiento de lodo y a desviaciones en las trayectorias específicas de las variables del proceso entre un ciclo batch y otro ciclo batch. Esto dificulta el desempeño de la operación de estrategias de control o estimación de variables en el largo plazo [27, 64, 129].

Otro rasgo destacado de los procesos SBR es su modo de operación batch, lo que permite tener un control de la reacción. Esto se traduce en manipular la aireación y los tiempos

de mezclado para ser ajustados en respuesta a la calidad del agua residual. Esto mejora la eficiencia operacional y ahorra energía en las plantas de tratamiento de aguas. Sin embargo, esto también trae modos de operación complicados que requieren métodos de automatización altamente confiables [128].

En un diseño normal, cada fase tiene una duración prescrita independientemente de la dinámica del proceso y la cantidad de nitrógeno amoniacal existente en el agua residual, lo que puede resultar en una operación altamente ineficiente. Por esta razón, existe la creciente necesidad de tener herramientas de monitoreo y control avanzados capaces de estimar los tiempos de duración de las fases aeróbica y anóxica respecto de los actuales requerimientos del proceso [74]. Cabe destacar que este requerimiento conlleva una cierta complejidad debido a la precisión con que se debe determinar los cambios de fase, ya que si su duración es muy corta, la remoción de nitrógeno no está completa, y la calidad del efluente no cumplirá con los límites de calidad impuestos por las leyes locales. Por otro lado, si los ciclos son más largos de lo necesario, se disminuye la capacidad de la planta (volumen de agua residual por día), como también se incrementan los costos operacionales y para el caso de fases aeróbicas muy largas, se tienen pérdidas de energía por aireación [125, 129].

1.2.4. Mejoras al proceso de BNR en SBRs (I): Modelo de Lodos Activados

Los tratamientos biológicos de aguas residuales son sistemas complejos, en donde se generan una gran variedad de procesos físicos, químicos y biológicos que son difíciles de medir o estimar, lo que hace necesario recurrir al uso de modelos matemáticos para obtener una evaluación cuantitativa [42].

Con el fin de crear una plataforma común que pueda ser usada para el desarrollo de futuros modelos de remoción de nitrógeno en procesos de lodos activados, la *International Water Association* (IWA) generó unos modelos fenomenológicos que llamaron *Modelos de Lodos Activados* (ASM, por sus siglas en inglés) [52], los cuales incluyen los modelos: ASM1⁹, ASM2¹⁰, ASM2d¹¹ y ASM3¹². La finalidad de estos modelos es la de describir los procesos físico-químicos que ocurren en las plantas municipales de tratamiento de aguas residuales correspondientes a la remoción de todos los componentes contaminantes, tales como: compuestos orgánicos, nitrógeno y fósforo, además de incluir también la producción de lodo y microbios. En la actualidad, los ASMs, o los modelos que los utilizan como base, son comúnmente usados en la descripción matemática del modelamiento de procesos biológicos de tratamiento de aguas, agregando además que están incorporados en muchos software de diseño, simulación y optimización de plantas de tratamiento de aguas residuales [69].

⁹ El ASM1 describe los procesos relativamente complejos asociados a la remoción aeróbica y anóxica de carbono y nitrógeno de las aguas residuales municipales [124]. Probablemente este modelo es el más conocido y el que tiene mayor aceptación entre los investigadores [82].

¹⁰ El ASM2 modela la acumulación biológica de fósforo por microorganismos [124].

¹¹ El ASM2d fue construido a partir del ASM2. Éste incluye la actividad de los microorganismos que acumulan fósforo en la desnitrificación [44].

¹² El ASM3 fue desarrollado para corregir algunos problemas del ASM1 [124].

Las principales desventajas de este tipo de modelos se centran en su complejidad y sobreparametrización [28, 34, 61], sumando a esto la limitada disponibilidad de datos que se tienen en la mayoría de las plantas de tratamiento de aguas para utilizar en su calibración [104]. En el Anexo A1, se presenta la estructura y los parámetros del modelo para la nitrificación basado en un ASM1 utilizado en el presente trabajo de Tesis.

1.2.5. Mejoras al proceso de BNR en SBRs (II): Nitrificación parcial por control en lazo cerrado de pH y DO

En la última década, el concepto de nitrificación parcial ha logrado un gran alcance en la comunidad científica en lo que respecta a reducción de tiempo de operación de las fases aeróbica/anóxica y disminución del consumo de energía, acrecentando de este modo el interés por encontrar estrategias que logren mantener una nitrificación parcial estable en el tiempo.

En literatura existen propuestas que muestran que con una estrategia de control en lazo cerrado para el pH (para valores entre 7.5 - 8.5) y DO (para valores entre 1.0 - 2.0 mg O₂/L), se puede alcanzar una alta eficiencia, tanto en remoción de nitrógeno como en acumulación de nitrito, las que pueden ser mantenidas sobre un prolongado periodo de tiempo [5, 30, 79].

Debido a las diversas características que presentan los procesos de tratamientos de aguas, tales como: la complejidad del fenómeno biológico y bioquímico, dinámicas no-lineales [114], efectos de acoplamiento entre variables [51], variabilidad en el afluente, además del largo rango de las constantes de tiempo (desde unos pocos minutos a varios días) [53], es que se hace complicado aplicar control en lazo cerrado de las variables del proceso, inclusive, muchas estrategias han sido propuestas en literatura, pero su evaluación y comparación, tanto práctica o basada en simulación también se hace difícil.

1.2.6. Mejoras al proceso de BNR en SBRs (III): Estimación en línea del término de fase, concepto de bending points

Actualmente los sistemas de BNR están basados principalmente en sensores/analizadores de nitrógeno (amonio y nitrato) en línea [99], lo que permite tener información valiosa acerca del estado de la planta, que puede ser usada por el operador para aplicar estrategias de control en tiempo real, y así optimizar el rendimiento del proceso [32, 55]. Sin embargo, la mayor desventaja de estos sensores/analizadores son: su alta inversión, costos de mantención, tiempos de retardo significativos, y complejidad de operación [23, 98]. Con el fin de sobrellevar este problema, muchos investigadores han considerado el uso de mediciones físico-químicas disponibles en línea e industrialmente factibles (llamadas también variables secundarias) correspondientes al pH, DO y potencial de óxido-reducción (ORP por sus siglas en inglés)¹³ como indicadores indirectos del monitoreo y control en línea del proceso de BNR [32, 73].

Con respecto a los procesos de BNR en SBR, el típico objetivo es lograr predecir la

¹³ Es el potencial requerido para transferir electrones desde un oxidante a un reductor, el cual indica la intensidad del potencial relativo a una reacción de oxidación-reducción [88].

tendencia de la concentración de nutrientes durante las fases aeróbica y anóxica a través del monitoreo de las variables secundarias, con el fin de poder estimar el largo de cada una de estas fases [49]. Las estrategias que utilizan este tipo de técnica se llaman *bending points* [99] y consisten en encontrar cambios relativos (generalmente se analiza el comportamiento de la primera y segunda derivada) en los perfiles de DO, pH y ORP medidos durante el proceso SBR ejecutado y en los cuales no se tiene control de estas variables en lazo cerrado. Una vez detectados, éstos son usados para definir el término de la nitrificación y el de la desnitrificación [126], dependiendo de la fase en que se esté operando. Una consecuencia directa del uso de *bending points* se asocia a su aplicación en el largo plazo, debido a que influye directamente en el incremento de la población de AOB y en la disminución de la población de NOB [46], lo que constituye un factor importante para mantener una acumulación de nitrito estable [47].

A pesar de que esta estrategia es muy conveniente para la investigación y la industria, existe el problema asociado a que la aparición de estos *bending points* es muy sensible a cambios en las condiciones de operación del reactor y a los ruidos de medición [92]. Los *bending points* asociados al término de la nitrificación son: DO breakpoint y pH ammonia valley. Y para la desnitrificación: ORP nitrate knee. En la Figura 1.5 se muestran los perfiles de pH, DO y ORP, junto con los respectivos *bending points* para nitrificación y desnitrificación.

1.2.7. Mejoras al proceso de BNR en SBRs (IV): Modelamiento basado en datos y estimación en línea

El poder contar con la información de la evolución del sistema permite a los operadores de la planta mejorar sus políticas de operación, dando paso a mejoras en la eficiencia del volumen de agua que es tratada diariamente. Para esto es necesario contar con sensores de amonio y nitrato instalados en los reactores, pero lo que sucede en la realidad, es que estos sensores están lejos de ser de acceso masivo debido a sus altos costos y complejidad en su mantenimiento. Lo que impulsa el desarrollo de modelos basados en datos y/o sensores virtuales basados en las variables secundarias, que sean capaces de estimar en línea las dinámicas del amonio, nitrito y nitrato. Redes neuronales [29, 45, 54, 70, 71] y redes neuro-difusas [31, 55] han sido las técnicas preferidas para cumplir con este propósito.

Los trabajos desarrollados en este ámbito presentan algunas brechas con respecto a cómo se puede ver afectado el desempeño de los estimadores en el largo plazo operando en régimen de nitrificación parcial. También existen falencias con respecto a la cuantificación y manejo de las incertidumbres propias del proceso, así como también que los modelos basados en datos solamente consideran sistemas sin control en lazo cerrado de pH y DO.

En base a esto, es que muchas de las mejoras (previamente introducidas) al proceso de BNR en SBRs van dirigidas en mayor parte a la fase aeróbica (ya que el desempeño de la fase anóxica dentro de un ciclo depende del desempeño de la fase aeróbica previa). Pero debido a la complejidad del proceso (sistema no lineal, múltiples perturbaciones, incertidumbre en: las variables de estado, en los parámetros de la planta y en los datos medidos; además de que la dinámica de un ciclo batch es distinta a la de un ciclo consecutivo), es que todavía está latente la motivación por seguir desarrollando nuevas estrategias que permitan sobreponerse

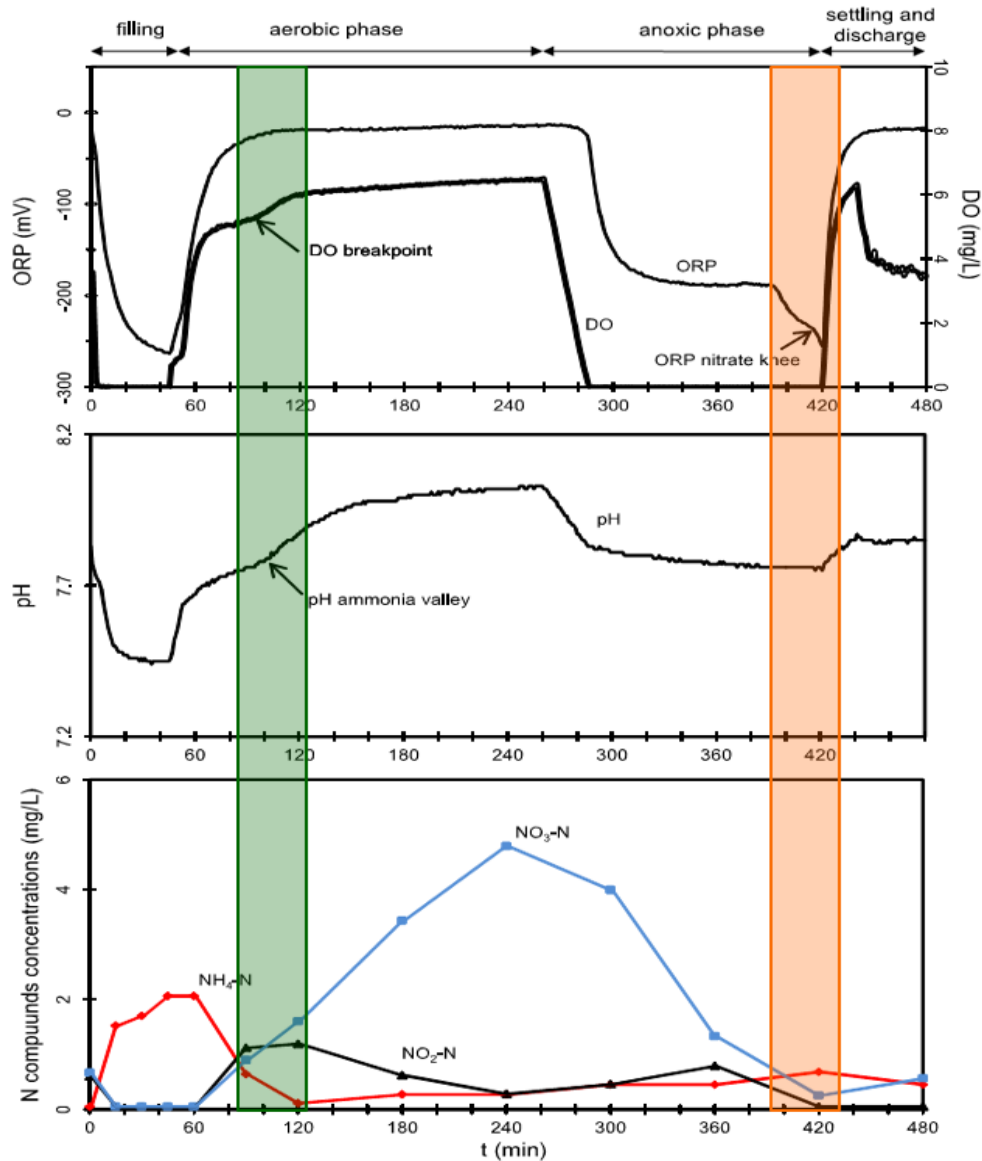


Figura 1.5: La franja verde indica los *bending points* relativos a la nitrificación. La franja naranja indica el *bending point* relativo a la desnitrificación (imagen tomada desde [62]).

a estos inconvenientes para realizar BNR de manera eficiente y estable en el largo plazo.

Con lo introducido anteriormente, el principal problema a abordar en BNR en SBRs se centra en dos puntos fundamentales con el fin de mejorar la eficiencia del proceso en el corto, mediano y largo plazo. Primero, asegurar una completa degradación de amonio (o la degradación hasta un nivel en el que se cumple la norma ambiental local) en la fase aeróbica y la posterior conversión del nitrito y nitrato a nitrógeno gaseoso en la fase anóxica en un proceso de BNR en SBRs. Segundo, minimización de los gastos operacionales, sujeto a la restricción previa de remoción de nitrógeno.

Otro elemento a considerar, y como gran falencia de las mejoras introducidas, es la falta de propuestas en donde exista una “integración de estrategias”. Dicho de otro modo, el es-

cenario en el cual las estrategias se puedan complementar, para potenciar de este modo, sus características individuales. Por ejemplo, si nos centramos en el caso de nitrificación parcial (y pensando solamente en la fase aeróbica), su implementación implica el uso de controladores en lazo cerrado de pH y DO. Esto descarta de plano el uso complementario de búsqueda de *bending points* o de estimadores en línea de amonio, dejando al proceso sin un método efectivo de estimación del término de la nitrificación (o término de la fase aeróbica). Esto puede tener repercusiones en la estabilidad de la nitrificación parcial en el largo plazo.

Es en este punto, donde la presente propuesta busca focalizarse y aportar con nuevas estrategias que permitan estimar tendencias de la degradación del amonio, basándose ahora en los perfiles de las variables manipuladas que controlan el pH y el DO, con el fin de potenciar el desarrollo de nitrificación parcial en un SBR.

1.3. Hipótesis

- Se puede definir una “zona óptima de término para la fase aeróbica” que permita, en el transcurso de ciclos consecutivos de operación del reactor, favorecer el crecimiento de las bacterias amonio-oxidantes, y por otro lado, propiciar un lavado de las bacterias nitrito-oxidantes. Lo que se traduce en que si existen algoritmos de estimación o pronóstico del término de la fase aeróbica que permitan que el sistema cumpla con esta “zona óptima de término”, será posible alcanzar altos niveles de acumulación de nitrito que se mantengan estables en el largo plazo.
- A partir de los datos de pH, oxígeno disuelto y sus variables manipuladas medidas en línea durante la fase aeróbica, es posible encontrar y extraer información a través de características en el dominio del tiempo y/o de la frecuencia, que estén directamente correlacionadas con la dinámica del proceso de BNR.
- A partir de las características extraídas, es posible generar una estrategia de estimación y pronóstico para el término de la fase aeróbica, que logre ser eficaz a lo largo de ciclos consecutivos de operación del reactor y que permita incluir una caracterización tanto de la incertidumbre asociada al proceso, como de los ruidos de medición.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivo General

Diseñar un sistema de estimación y pronóstico del tiempo requerido para lograr una remoción total del nitrógeno amoniacal; permitiendo, a su vez, favorecer la acumulación de nitrito en la fase aeróbica a lo largo de ciclos consecutivos en un proceso de nitrificación-desnitrificación aplicado en reactores secuencial batch que opera con control en lazo cerrado de pH y oxígeno disuelto.

1.4.2. Objetivos Específicos

- Definir mediante simulación una “zona de término de fase aeróbica” en un reactor batch secuencial que permita, a lo largo de ciclos consecutivos de operación, favorecer el crecimiento de las bacterias amonio-oxidantes e inhibir la acción de las bacterias nitrito-oxidantes con el fin de mantener altos índices de acumulación de nitrito en el reactor.
- Extraer características en el dominio del tiempo y frecuencia de los datos medidos en línea en la fase aeróbica, que estén directamente correlacionadas con la dinámica del proceso de remoción biológica de nitrógeno.
- Desarrollar una metodología basada en selección y fusión de las características extraídas desde los datos medidos en línea que permitan generar una estimación y pronóstico del término de la fase aeróbica en un SBR.

1.5. Contribuciones

Este trabajo de Tesis presenta varias contribuciones originales respecto de la problemática de estimación y pronóstico del término de fase aeróbica en SBRs.

- Revisión profunda y actualización del estado del arte en lo que respecta a las diversas estrategias implementadas en SBRs que buscan maximizar la eficiencia del proceso de nitrificación. Dentro de estas estrategias se incluyen las que buscan estimar/predecir el término de la fase aeróbica. Esta revisión evalúa fortalezas y debilidades de las estrategias, con el fin de proponer u orientar los esfuerzos futuros en investigación. Contribución publicada en la revista científica internacional *Journal of Environmental Management*.
- Simulación de ciclos de operación SBR para BNR en el largo plazo bajo nitrificación parcial. En donde se estudia la influencia del término de fase (término de fase correcto versus términos de fase en donde existe retardos, o dicho de otro modo una incorrecta estimación de su término) sobre las poblaciones bacterianas.
- Se proponen estrategias de estimación del término de fase aeróbica, que puedan complementarse con la estrategia de nitrificación parcial, en donde el pH y oxígeno disuelto en el reactor son variables controladas.
- Proponer una metodología basada en la utilización de variables manipuladas de los controladores de pH y oxígeno disuelto, en conjunto con el concepto de extracción de características, para obtener nuevos vectores de datos que sirvan como entradas para los algoritmos de estimación y pronóstico del término de fase aeróbica.
- Re-definición del concepto de término de fase aeróbica por un concepto de clasificación binaria. El cual puede ser resuelto mediante una metodología basada en extracción de características y clasificadores Support Vector Machines. Contribución publicada en la revista científica internacional *Chemical Engineering Journal*.

- Desarrollo de una metodología para estimación y pronóstico de la concentración de amonio en el SBR, basado en Filtro de Partículas.

1.6. Publicaciones generadas durante el programa de doctorado

1.6.1. Publicaciones en Journals

F Jaramillo, M Orchard, C Muñoz, M Zamorano, and C Antileo. Advances strategies to improve nitrification process in sequencing batch reactors - A review. *Journal of Environmental Management*, 218:154-164, 2018.

F Jaramillo, M Orchard, C Muñoz, C Antileo, D Sáez, and P Espinoza. On-line estimation of the aerobic phase length for partial nitrification processes in SBR based on features extraction and SVM classification. *Chemical Engineering Journal*, 331 (Supplement C):114-123, 2018.

A Pérez, V Quintero, **F Jaramillo**, H Rozas, D Jimenez, M Orchard, and R Moreno. Characterization of the Degradation Process of Lithium-ion Batteries when Discharged at Different Currents. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part I: Journal of Systems and Control Engineering*, 0(0):0959651818774481, 2018.

D L Leottau, K Lobos-Tsunekawa, **F Jaramillo**, and J Ruiz-del-Solar. Accelerating Decentralized Reinforcement Learning of Complex Individual Behaviors. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, Submitted, 2017.

M A Diaz, J C Zagal, C Falcon, M Stepanova, J A Valdivia, M Martinez-Ledesma, J Diaz-Peña, **F R Jaramillo**, N Romanova, E Pacheco, M Milla, M Orchard, J Silva, and F P Mena. New opportunities offered by Cubesats for space research in Latin America: The SUCHAI project case. *Advances in Space Research*, 58(10):2134-2147, 2016.

C Antileo, H Medina, C Bornhardt, C Muñoz, **F Jaramillo**, and J Proal. Actuators monitoring system for real-time control of nitrification-denitrification via nitrite on long term operation. *Chemical Engineering Journal*, 223(0):467-478, 2013.

1.6.2. Publicaciones en Conferencias Internacionales

A Pérez, **F Jaramillo**, V Quintero, and M Orchard. Characterizing the Degradation Process of Lithium-ion Batteries Using a Similarity-Based-Modeling Approach. In *Fourth European Conference of the Prognostics and Health Management Society 2018 - PHME 2018*, 2018, Utrecht, Netherlands.

F Jaramillo, V Quintero, A Pérez, and M Orchard. Spatio-temporal probabilistic mo-

deling based on Gaussian mixture models and neural gas theory for prediction of criminal activity. In *Annual Conference of the Prognostics and Health Management Society 2017*, 2017, St. Petersburg, FL, USA.

A Pérez, V Quintero, H Rozas, **F Jaramillo**, R Moreno, and M Orchard. Modelling the degradation process of lithium-ion batteries when operating at erratic state-of-charge swing ranges. In *4th International Conference on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT)*, pages 860-865, 2017, Barcelona, Spain.

S Seria, V Quintero, P Espinoza, A Pérez, **F Jaramillo**, M Benavides, and M Orchard. Electric Bicycle Energy Management Given an Elevation Traveling Profile. In *Annual Conference of the Prognostics and Health Management Society 2017*, 2017, St. Petersburg, FL, USA.

C Tampier, A Pérez, **F Jaramillo**, V Quintero, M Orchard, and J Silva. Lithium-Ion Battery End-of-Discharge Time Estimation and Prognosis based on Bayesian Algorithms and Outer Feedback Correction Loops: A Comparative Analysis. In *Annual Conference of the Prognostics and Health Management Society 2015*, 2015, San Diego, CA, USA.

P Flores, M Vergara, P Fuentes, **F Jaramillo**, D Acuña, A Pérez, and M Orchard. Modeling and Prediction of Criminal Activity Based on Spatio-Temporal Probabilistic Risk Functions. In *Annual Conference of the Prognostics and Health Management Society 2015*, 2015, San Diego, CA, USA.

1.7. Estructura del Documento

El documento está organizado de la siguiente manera: En Sección 2 se presenta el marco teórico sobre los cuales se sustenta el presente trabajo de Tesis, y en donde además se incluye una descripción de la planta piloto junto con base de datos utilizada. En Sección 3 se muestra la metodología elaborada para la generación de simulaciones a largo plazo del proceso de BNR en SBRs bajo nitrificación parcial, en donde además se incluyen y discuten los resultados obtenidos. Para la Sección 4 se propone una estrategia para la estimación del término de la fase aeróbica en SBRs, basado en extracción de características y clasificación binaria. En la Sección 5 se propone la estrategia de estimación en línea del amonio en el SBR y del pronóstico del término de la fase aeróbica basado en Filtro de Partículas. Finalmente en Sección 6 se exponen las conclusiones principales de este trabajo de Tesis.

Capítulo 2

Marco Teórico y Antecedentes Preliminares

Con motivo de alcanzar los objetivos propuestos, se utilizan herramientas pertenecientes a distintas ramas de la ingeniería. De modo análogo, se utiliza una base de datos extraídos desde una planta piloto para poder entrenar y validar los algoritmos propuestos. Es por esto que el presente capítulo se organiza a modo de revisar estas herramientas y los antecedentes preliminares de la planta piloto que sirvieron como base para el presente trabajo de Tesis.

2.1. Modelo de lodos activados

Un modelo de lodos activados es un modelo matemático que combina ecuaciones diferenciales y algebraicas formuladas en base a principios de ingeniería correspondientes a balances de masas y balance de energía. Convencionalmente se utiliza una notación matricial (Matriz Estequiométrica) [52] para mostrar de manera práctica la relación entre todos los elementos del modelo (variables de estado, procesos cinéticos, parámetros modelo y/o coeficientes estequiométricos).

Por cada variable de estado y proceso cinético se tiene un coeficiente estequiométrico, el cual explica el nivel de interacción de los procesos cinéticos con las variables de estado. Coeficientes positivos o negativos se utilizan para describir un incremento (producción) o decrecimiento (consumo) de la concentración de la variable de estado. Por otra parte, los elementos vacíos de la matriz indican un valor igual a cero. La mayoría de los coeficientes son calculados en base a estequiometría empírica o conocimiento a priori de los balances de masa de las variables del proceso. Sin embargo, algunos de estos coeficientes no pueden ser directamente estimados y deben ser obtenidos a partir de ecuaciones de conservación de energía [89]. Para ejemplificar una matriz estequiométrica se muestra a continuación la Tabla 2.1.

Para definir las ecuaciones diferenciales del modelo a partir de esta matriz, se considera lo siguiente: Llamando α_j^i al j-ésimo elemento del i-ésimo estado del proceso, y ρ_j al j-ésimo

Tabla 2.1: Ejemplo Matriz Estequiométrica

Variable de estado \rightarrow		i	1	2	3
j	Procesos cinéticos \downarrow	V1	V2	V3	
1	P1	a		f	
2	P2	b	d		
3	P3				g
4	P4		e		
5	P5	c			h

proceso cinético. Entonces, las 3 ecuaciones de estado del modelo se forman a partir de la expresión:

$$\dot{V}_i = \sum_{j=1}^5 \alpha_j^i \cdot \rho_j \quad , i = 1, \dots, 3 \quad (2.1)$$

Por lo tanto, y a partir de lo anterior, un ejemplo de la ecuación diferencial correspondiente a la variable de estado 1 queda determinada por la Ec. 2.2.

$$\dot{\mathbf{V}}\mathbf{1} = a \cdot \mathbf{P}\mathbf{1} + b \cdot \mathbf{P}\mathbf{2} + c \cdot \mathbf{P}\mathbf{5} \quad (2.2)$$

Para más detalles del modelo de lodos activados utilizado en el presente trabajo de Tesis (por ejemplo: vector de estados, parámetros modelo, procesos cinéticos y matriz estequiométrica) revisar Anexo A1.

Como los ASMs son utilizados para simulación del proceso de BNR, en el presente trabajo de Tesis se simulan múltiples ciclos de operación SBR bajo nitrificación parcial y con una condición de término de fase aeróbica determinada. Y a través de esto, poder analizar el comportamiento de las poblaciones bacterianas en el largo plazo. Las simulaciones no utilizan datos en línea del proceso. Los parámetros del ASM y las condiciones iniciales utilizadas son extraídas desde experimentos realizados en una planta piloto y/o desde la revisión bibliográfica.

2.2. Planta piloto e instrumentación

Un reactor a escala piloto es utilizado en este trabajo, el cual cuenta con un volumen de 2.4 litros. Al principio de cada ciclo una bomba peristáltica (Masterflex easy-load 75-18-00) es la encargada del llenado con agua residual. El DO, ORP y pH/temperatura son medidos con tres electrodos: WTW (Oxi 701, Germany), EUTECH (alpha-pH 2000, Singapore) y HACH (EC 310, USA), respectivamente. La temperatura es regulada por medio de un termostato

(Julabo, Model EC, Germany) que manipula el flujo de agua que circula a través de una chaqueta externa al reactor. Para la agitación del agua residual con el lodo activado, se instaló un agitador mecánico (HEIDOLPH, RSR 2050, Germany) que funciona a 360 rpm. El control de pH es realizado a través de un controlador proporcional-integral (PI) que manipula una bomba de diafragma (LANG, type ELADOS EMP II, 41 L/h, Germany) encargada de inyectar al reactor pulsos (0.125 mL) de 0.8 mol de carbonato de sodio (Na_2CO_3). La aireación es suministrada por un aireador para acuarios (COSMOS double type 1000, China) a través de dos difusores (Double COSMOS 1000, China). El control de DO también se realiza mediante un control PI, el cual manipula la apertura de una válvula neumática (Festo, 457, MSG-24DC, Germany) por modulación por ancho de pulso (PWM, por sus siglas en inglés), simulando de este modo la apertura de esta válvula entre un 0 y 100 %. En el final de cada ciclo, una segunda bomba peristáltica (Masterflex easy-load 75-18-00) drena el agua tratada fuera del reactor. Para la automatización de la planta piloto se utiliza un controlador lógico programable (PLC por sus siglas en inglés) operado a través de una interfaz PC/PLC programada en MATLAB[®], encargada a su vez de almacenar los datos de sensores y variables manipuladas adquiridos en línea mediante la plataforma KepServer. La comunicación entre MATLAB[®] (cliente) y el KepServer (servidor) es efectuada por DDE (protocolo dynamic data exchange de Microsoft). Finalmente, el tiempo de muestreo considerado es de 1 minuto para todos los datos medidos. Un esquema de la planta piloto y su automatización son mostrados en la Figura 2.1.

2.2.1. Base de datos experimental

La base de datos utilizada en este trabajo de Tesis consiste de 533 ciclos completos (llenado, reacción aeróbica, reacción anóxica, decantación y vaciado) correspondientes a 10 meses de operación del reactor a escala piloto, en donde solamente la fase de nitrificación (o fase aeróbica) es considerada. En la Tabla 2.2 se muestran parámetros adicionales de las fases aeróbicas registradas en la base de datos. Adicionalmente, existen 20 ciclos de operación con datos fuera de línea de amonio, nitrito y nitrato medidos a través de pruebas de laboratorio, que cuentan con un tiempo de muestreo de aproximadamente 1 hora (En la Figura 2.2 se visualiza un ejemplo de estos datos).

Tabla 2.2: Parámetros adicionales de las fases aeróbicas de la base de datos experimental.

Variable	Condiciones operacionales
TAN Inicial (mg N/L)	479 ± 63
C/N (g COD/g L)	0
pH	7.6 (294 cycles)
	8.5 (239 cycles)
DO (mg O_2 /L)	2.0

En los experimentos realizados, se logró desarrollar nitrificación parcial por medio del

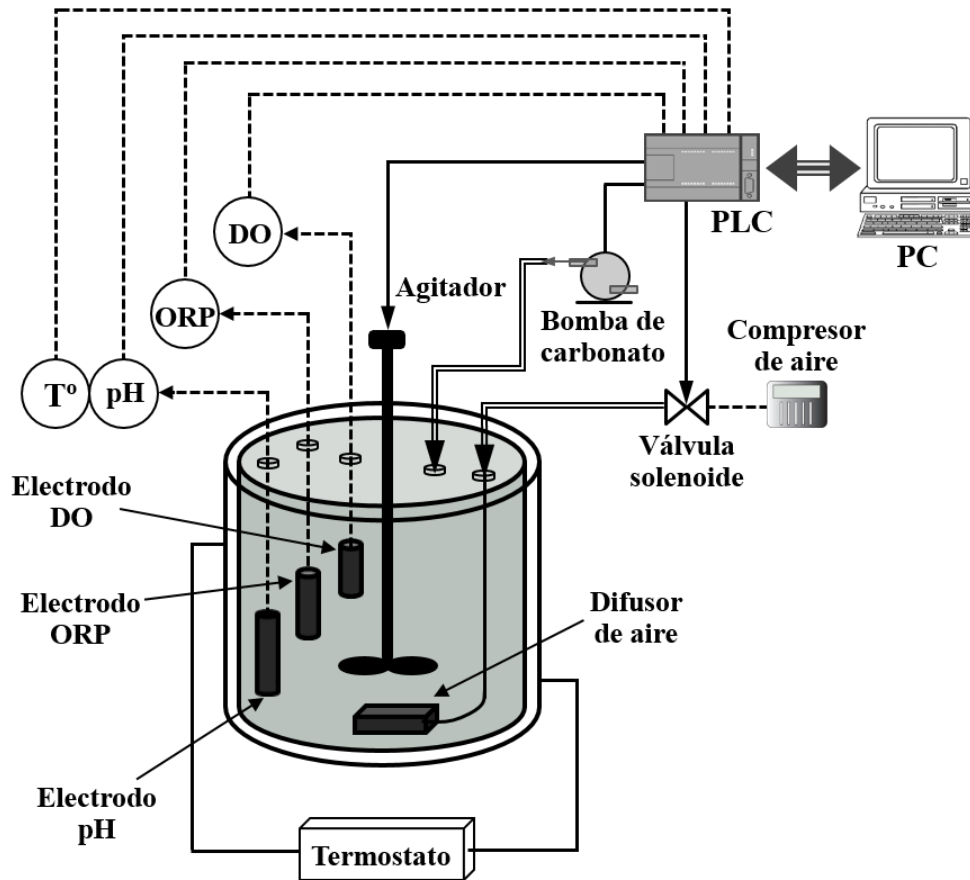


Figura 2.1: Esquema de instrumentación y lazos de control de la planta piloto.

control de pH y DO, utilizando un set-point de 7.6 (y otros casos se utilizó un set-point de 8.5, dependiendo de criterios experimentales) para pH y 2.0 mg O₂/l para DO [5, 30]. Cada 15 minutos, la aireación fue interrumpida por 33 segundos con el objetivo de calcular un parámetro denominado *tasa de absorción de oxígeno* (OUR¹, por sus siglas en inglés). La duración de la fase aeróbica fue estimada utilizando la estrategia implementada en [5], donde los *bending points* fueron obtenidos desde los perfiles de las variables manipuladas de los controladores de pH (pulsos de carbonato) y DO (%AVO). Con respecto a los detalles del proceso de desnitrificación, estos también se pueden revisar en [5]. Un ejemplo de una fase aeróbica registrada en la base de datos se muestra en la Figura 2.3, en donde se incluyen los perfiles de pH, DO y las variables manipuladas de sus controladores. Además se pueden observar las condiciones de término de fase que propone la estrategia implementada en [5] para el término de fase aeróbica: que la inyección de pulsos de carbonato se mantenga constante por 30 minutos y que el %AVO alcance un 25%.

¹ Es un indicador de la actividad de las bacterias y puede ser usado para predecir su estado de crecimiento [36].

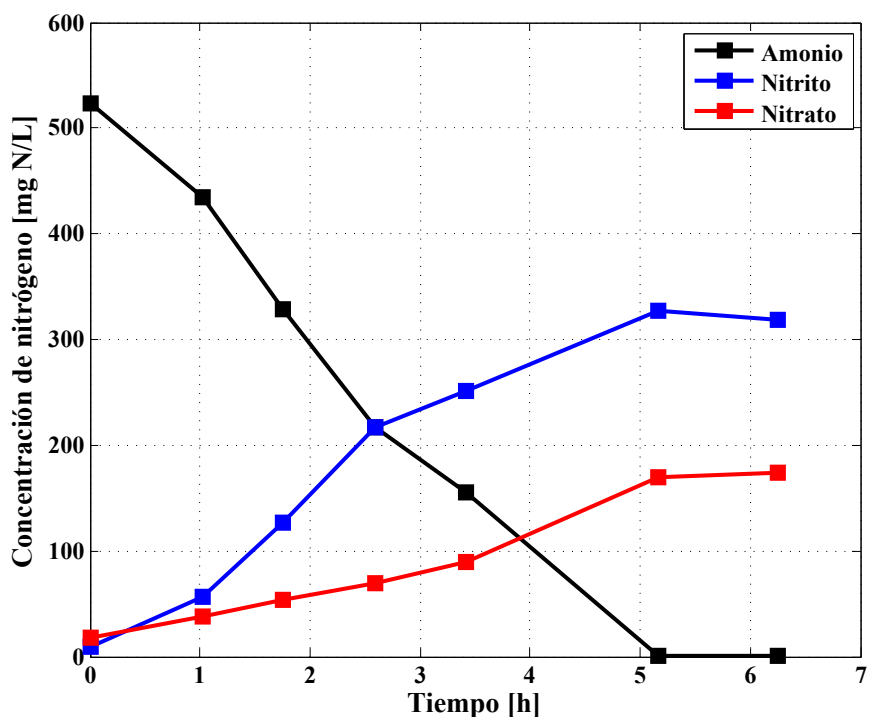


Figura 2.2: Gráficos de las concentraciones de amonio, nitrito y nitrato, medidos en laboratorio.

2.3. Extracción de Características

Extracción de características involucra un procesamiento preliminar de las mediciones de los sensores, con la intención de obtener parámetros o indicadores adecuados que revelen si un patrón interesante está surgiendo. Las características extraídas en sí, representan los datos originales en una forma compacta, bajo el supuesto de que la estructura principal de estos se encuentra en un espacio de menor dimensión [116]. La extracción de características comienza con la segmentación de las señales registradas (o desde mediciones en línea) en ventanas de tiempo separadas [7]. Luego, cada característica (previamente elegida) es calculada para cada segmento. En la práctica, y dependiendo de las propiedades del proceso del cual se obtienen datos de sensores, la extracción de características puede aplicarse sobre diferentes dominios (tiempo, frecuencia, tiempo-frecuencia), como se detalla a continuación:

- Métodos en el dominio del tiempo: Están basados en extraer características directamente desde muestras de la señal. Ejemplos de estos incluyen momentos estadísticos (mínimo, máximo, valor esperado, varianza, skewness, kurtosis y momentos de orden superior), así como también características dinámicas (sobre-impulso, tiempo de asentamiento, tiempo de subida, entre otros) [17, 100, 131].
- Métodos en el dominio de la frecuencia: Están basados en extraer características desde la señal en el dominio de la frecuencia obtenidas del análisis de Fourier o de la transformada rápida de Fourier. Ejemplos de estos incluyen coeficientes de Fourier, bandas de frecuencia, energía de una banda de frecuencia, locaciones de los peaks de frecuencia y densidad

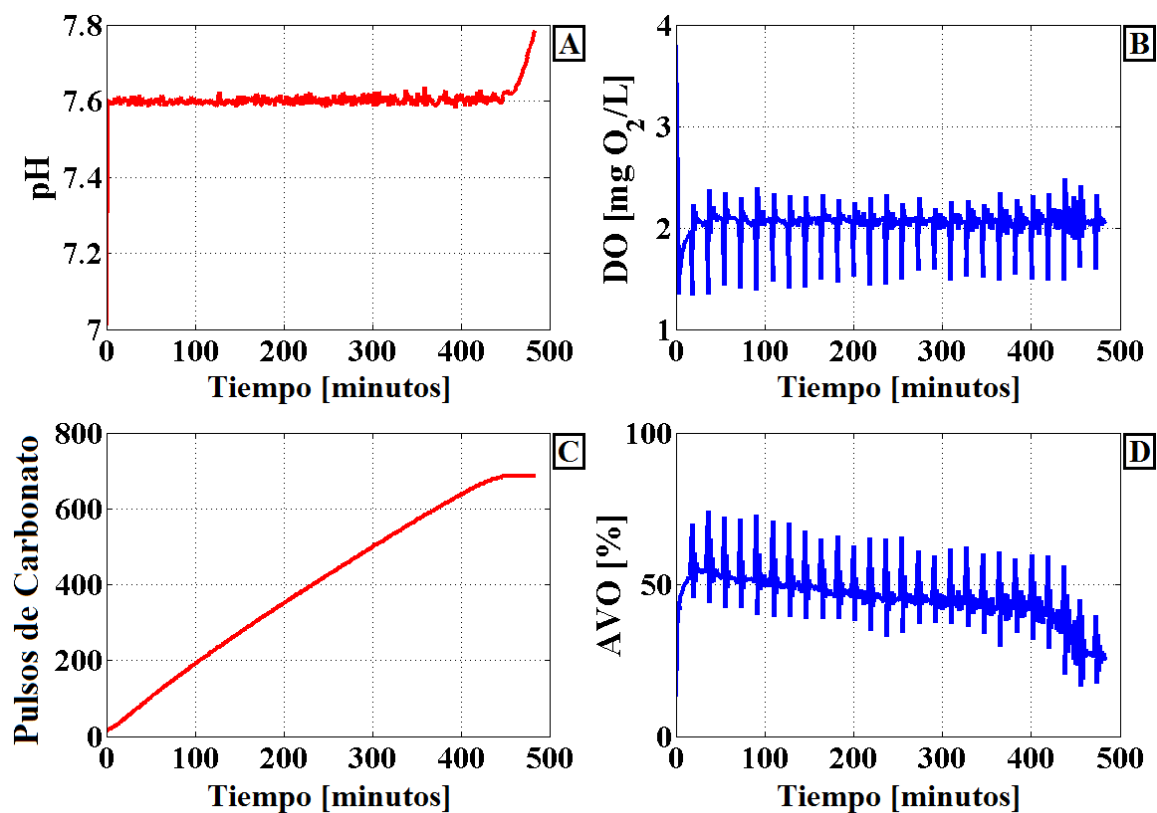


Figura 2.3: Perfiles de los sensores de pH (A) y DO (B), junto con sus variables manipuladas: pulsos de carbonato (C) y %AVO (D). La fase aeróbica es finalizada cuando los pulsos de carbonato se mantienen constantes por 30 minutos y el %AVO alcanza un 25 %.

espectral de potencia (PSD, por sus siglas en inglés) [103, 108].

- Métodos en tiempo-frecuencia: Están basados en extraer características desde el dominio que representa la evolución temporal de la señal en el dominio de la frecuencia. Espectrogramas de la señal y transformada Wavelet son métodos comúnmente usados [35, 120].

2.4. Fusión de Características

El término fusión de características se utiliza cuando los datos que serán fusionados corresponden a características extraídas desde datos medidos. En caso de que sea otra la fuente de información sobre la que se trabaja, es posible encontrar otros términos, tales como: fusión de datos, fusión sensorial o fusión de conocimientos. De las múltiples definiciones y aplicaciones que pueden ser encontradas en literatura [19, 50, 75, 94, 101, 109], es clara su convergencia a una misma idea: representar en una sola señal, la información que proviene de distintas fuentes (datos de sensores o características extraídas desde señales medidas), con el fin de tener un mejor desempeño según la aplicación.

Como se menciona en [116], dos temas deben ser considerados cuando se aplica este método, el primero consiste en que utilizando cualquier técnica de fusión de datos, existe el peligro de producir una señal fusionada cuyo desempeño resulte peor que la mejor señal o fuente de información individual. La solución a esta preocupación es ponderar a priori las fuentes de información, de acuerdo a su capacidad y desempeño. El segundo tema está relacionado a que de todas las técnicas que están disponibles para desarrollar fusión de datos o características, no existen reglas para decidir qué técnica de fusión trabaja mejor que otra para una determinada aplicación. A continuación se describen algunas técnicas de fusión de características que son encontradas en literatura.

- Inferencia Bayesiana [1, 78]: El teorema de Bayes fue propuesto por Thomas Bayes en un paper de 1763 [12]. Esta inferencia ayuda a usar la información conocida actual (observaciones) y la información base inicial (*a priori*) para inferir el futuro (*a posteriori*) [10].
- Fusión Dempster-Shafer [63, 119]: Introduce la noción de asignar credibilidad y plausibilidad a posibles hipótesis de medición, junto con la regla de combinación necesaria para fusionarlas [60].
- Fusión Ponderada [66, 110]: Genera una señal fusionada por la ponderación y combinación de las salidas desde múltiples sensores [67].
- Fusión por lógica difusa [43, 93]: Es una técnica de fusión que utiliza una función de membresía, para escalar y combinar datos específicos de entrada, con el fin de producir una salida fusionada [116].
- Fusión por redes neuronales [24, 133]: Se utiliza redes neuronales por su habilidad para combinar información en tiempo real, con la capacidad de reaprendizaje autónomo (si es necesario). Entrenar una red neuronal para aplicaciones de fusión envuelve el proceso de ajustar los pesos y evaluar las funciones de activación de las numerosas interconexiones entre las capas de entrada y salida [116].

2.5. Support Vector Machines

Dentro del área de *Machine Learning* el concepto de *Clasificación* representa una sus principales aplicaciones. El objetivo de clasificación es construir un modelo (o una regla de decisión) basado en datos de entrenamiento para predecir (o asignar una clase) muestras independientes de datos para los cuales su clase es desconocida [97]. Cuando existen solamente dos clases, el problema se conoce como clasificación binaria, y en caso de tener más clases el problema se convierte en una clasificación multi-clase.

En este sentido, el clasificador denominado Support Vector Machines (SVMs) sobresale por su robustez, eficiencia y desempeño en generalización [72]. Adicionalmente, los SVMs han sido usados para aplicaciones relacionadas a regresión, detección de novedades, data mining, visión por computador y bio-informática [13, 15, 76]. Originalmente fue diseñado para clasificación binaria, aunque muchos enfoques extienden su uso a problemas multi-clase

y su formalización matemática se explica en [2]. El propósito de los SVMs es minimizar el error de clasificación a través de la búsqueda del hiperplano óptimo que maximiza el margen hacia los datos que se encuentran más cercanos [25]. Estos puntos más cercanos que son utilizados para definir el margen al hiperplano separador son los llamados *vectores de soporte*. Un ejemplo de clasificación binaria en donde los datos de entrenamiento son linealmente separables (mutuamente excluyentes) es mostrado en Figura 2.4.

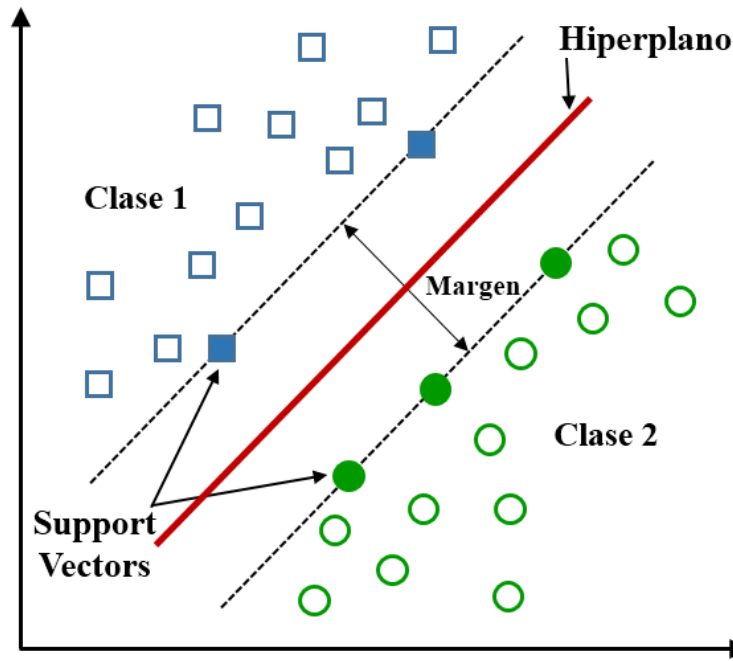


Figura 2.4: Clasificación binaria a través del hiperplano calculado por SVMs. Adaptado de [25].

Los SVMs pueden ser también usados para clasificación no-lineal cuando los datos de entrenamiento no son linealmente separables. En este caso, y a través de la inclusión de funciones *kernel* (por ejemplo: lineal, polinomial, Gaussiano, sigmoideal), los datos de entrenamiento son mapeados en un espacio dimensional superior en donde la separabilidad lineal sea posible. Esto viene siendo equivalente a clasificación no-lineal en el espacio original [122]. Un ejemplo de un hiperplano de separación en un espacio de dimensión superior para clasificación binaria es mostrado en la Figura 2.5.

En la práctica, el entrenamiento del SVM involucra la selección de la función *kernel* y la sintonización de dos hiperparámetros: *BoxConstraint* y *KernelScale* [77]. Por un lado, *BoxConstraint* controla el *trade-off* entre el ancho del margen y los errores de entrenamiento [15]. En caso de *KernelScale*, el cual depende de la función *kernel* escogida, controla la flexibilidad del clasificador SVM para ajustarse a los datos [13].

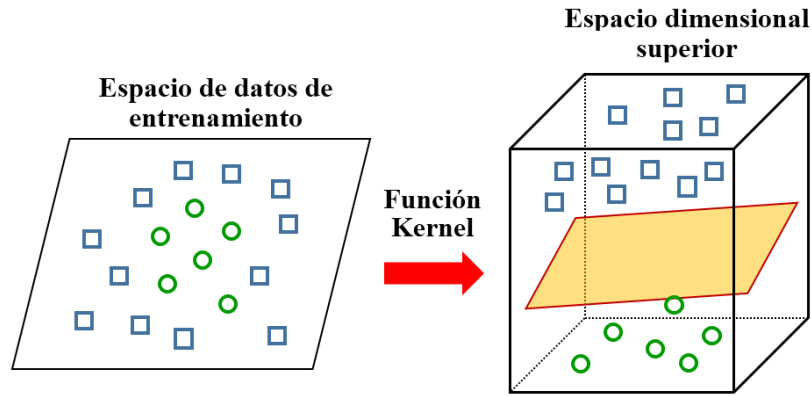


Figura 2.5: Clasificación no-lineal utilizando funciones *kernel*, lo que permite separar las clases en un espacio dimensional de orden mayor.

2.5.1. Evaluación del desempeño del clasificador

La evaluación del desempeño del clasificador está basado en los conceptos de Matriz de Confusión, (%)Exactitud, y (%)Error. En la Tabla 2.3 se ilustra una matriz de confusión que ejemplifica el problema de clasificación binaria propuesto en este trabajo de Tesis.

- TP (Verdaderos Positivos) : Degradación de amonio correctamente clasificado.
- TN (Verdaderos Negativos) : Término de fase correctamente clasificado.
- FP (Falsos Positivos): Degradación de amonio incorrectamente clasificado.
- FN (Falsos Negativos): Término de fase incorrectamente clasificado.

Tabla 2.3: Matriz de confusión para clasificación binaria.

	Degradación de amonio (clasificador)	Término de fase (clasificador)
Degradación de amonio (desde los datos)	TP	FP
Término de fase (desde los datos)	FN	TN

Los indicadores (%)Exactitud y (%)Error están definidos in las Ec. 2.3 y Ec. 2.4, respectivamente.

$$(\%)Exactitud = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN} \quad (2.3)$$

$$(\%)Error = \frac{FP + FN}{TP + TN + FP + FN} \quad (2.4)$$

Debido al hecho de tener datos desbalanceados (ambas clases no están equitativamente representadas en la base de datos), se incluyen dos indicadores de desempeño: Sensibilidad (Ec. 2.5) y Especificidad (Ec. 2.6).

$$\text{Sensibilidad} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}} \quad (2.5)$$

$$\text{Especificidad} = \frac{\text{TN}}{\text{TN} + \text{FP}} \quad (2.6)$$

De este modo, el desempeño del clasificador se vuelve un compromiso entre estas dos medidas de desempeño adicionales, ya que un incremento en la Sensibilidad, involucra una disminución en la Especificidad y viceversa [80].

Con respecto al área de BNR, la importancia de obtener FN o FP no es lo mismo, porque un FN implica mantener la fase aeróbica activa a pesar de que se tiene degradación completa de amonio. En el otro caso, un FP implica terminar la fase aeróbica a pesar de que el amonio no ha sido completamente degradado. Por lo tanto, el indicador Especificidad es más importante y es estrictamente necesario que su valor sea igual a 1 ($\text{FP} = 0$).

2.6. Estimación y pronóstico de estados

El problema de estimación de estados es un tópico de interés en el área de la ingeniería por sus innumerables aplicaciones prácticas. Para este tipo de problemas, se dispone de datos medidos en línea, que son utilizados en conjunto con conocimiento fenomenológico del proceso para generar estimaciones de una variable de estado de interés, la cual por lo general no puede ser directamente medida por sensores [86]. Estos estados pueden ser estimados a través de un marco teórico Bayesiano resolviendo un problema de filtrado, que corresponde a calcular de manera recursiva la función de densidad de probabilidad (PDF, por sus siglas en inglés) *a posteriori* del estado para cada tiempo de muestreo, condicionado a la secuencia de datos medidos [115].

Para el caso de pronóstico, éste revela ser una herramienta muy conveniente en los procedimientos de mantenimiento en la industria, ya que permite mejorar la seguridad, programar acciones de mantenimiento junto con reducir sus costos y sus tiempos [39]. Pronóstico puede ser entendido como el resultado del procedimiento en donde a través de múltiples predicciones basadas en un modelo de la variable de estado de interés (o en este caso un indicador de falla), se describe su evolución en el tiempo con el propósito de estimar la vida útil remanente de un determinado componente o subsistema [85].

2.6.1. Estimación de estados Bayesiana

Para definir el problema de estimación de estados Bayesiana, se considera un modelo en tiempo discreto (llamado también modelo de proceso) que caracteriza la evolución del vector de estado $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n_x}$, descrito por Ec.2.7:

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{f}_k(x_{k-1}, \omega_{k-1}) \quad (2.7)$$

Con $k \in \mathbb{N}$ (instantes de tiempo), y en donde \mathbf{f} es generalmente una función no lineal dependiente del vector de estado \mathbf{x} y de un vector de ruidos de proceso $\omega \in \mathbb{R}^{n_\omega}$ i.i.d. (independiente e idénticamente distribuidos).

Se considera además el vector de mediciones $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{n_z}$, el cual está relacionado al vector de estados \mathbf{x} y de un vector de ruidos de medición $\nu \in \mathbb{R}^{n_\nu}$ i.i.d., a través de una función posiblemente no lineal \mathbf{h} , según Ec. 2.8:

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{h}_k(x_k, \nu_k) \quad (2.8)$$

En lo particular, el problema de estimación de estados tiene como objetivo obtener información acerca de \mathbf{x}_k basado en el modelo de evolución de estado (Ec.2.7) y en el conjunto de mediciones $\mathbf{z}_{1:k} = \{\mathbf{z}_i, i = 1, \dots, k\}$, dado por el modelo de medición (o modelo de observación) definido en Ec. 2.8. De este modo, se requiere construir la PDF $p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k})$. Se asume que la PDF inicial del vector de estados (PDF *a priori*) $p(\mathbf{x}_0 | \mathbf{z}_0) = p(\mathbf{x}_0)$ está disponible. Entonces, en principio, la PDF $p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k})$ puede ser obtenida de manera recursiva, en dos etapas: predicción y actualización.

Suponiendo que la PDF $p(\mathbf{x}_{k-1} | \mathbf{z}_{1:k-1})$ en tiempo $k-1$ está disponible. Entonces, la etapa de predicción implica usar el modelo de proceso para obtener la PDF *a priori* del estado en el tiempo k , a través de la ecuación de Chapman-Kolmogorov:

$$p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k-1}) = \int p(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}) p(\mathbf{x}_{k-1} | \mathbf{z}_{1:k-1}) d\mathbf{x}_{k-1} \quad (2.9)$$

Es importante mencionar que en Ec. 2.9, se ha utilizado $p(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{z}_{1:k-1}) = p(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1})$, ya que Ec. 2.7 describe un proceso de Markov de orden 1. Y en donde, $p(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1})$ está definido por el modelo de la Ec. 2.7 y el ruido ω_{k-1} .

Para la etapa de actualización, se utiliza la medición \mathbf{z}_k disponible en el tiempo k para actualizar la PDF *a priori* a través de la regla de Bayes:

$$p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k}) = \frac{p(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k) p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k-1})}{p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{1:k-1})} \quad (2.10)$$

En donde la constante de normalización (Ec. 2.11) depende de la función de verosimilitud $p(\mathbf{z}_k|\mathbf{x}_k)$ definida por el modelo de la Ec. 2.8 y el ruido ν_k .

$$p(\mathbf{z}_k|\mathbf{z}_{1:k-1}) = \int p(\mathbf{z}_k|\mathbf{x}_k)p(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k-1})d\mathbf{x}_k \quad (2.11)$$

En la etapa de actualización, la medición \mathbf{z}_k es utilizada para modificar la PDF *a priori* con el motivo de obtener la PDF *a posteriori* del vector de estados actual.

Las relaciones de recurrencia de Ec. 2.9 y Ec. 2.10 forman la base de la solución óptima Bayesiana. Esta propagación recursiva de la PDF *a posteriori* es solo una solución conceptual, que en general, no puede ser determinada de manera analítica. Para mayor información revisar [8, 38, 86].

2.6.2. Filtro de Partículas

El Filtro de Partículas (PF, por sus siglas en inglés) es una metodología que se utiliza para aproximar la solución óptima Bayesiana, cuando es sumamente difícil poder encontrar la solución analítica.

El PF es una técnica para implementar un filtro Bayesiano recursivo a través de simulaciones de Monte Carlo (MC). La idea principal es representar la PDF *a posteriori* requerida, mediante un conjunto de muestras aleatorias con pesos asociados, y de este modo, calcular estimaciones basadas en esas muestras y pesos.

Se presenta a continuación el algoritmo para PF llamado *Sequential Importance Sampling* (SIS). Este algoritmo hace uso de una PDF *de importancia* $q(\cdot)$, la que se utiliza para representar otra PDF que no puede ser exactamente calculada, que en este caso viene siendo la PDF *a posteriori* actual que se requiere encontrar. Por lo tanto, las muestras son extraídas desde la PDF *de importancia* en vez de la PDF actual.

Sea $\{\mathbf{x}_k^i, i = 1, \dots, N_s\}$ las partículas con los pesos asociados $\{\mathbf{w}_k^i, i = 1, \dots, N_s\}$, en donde N_s es el número de partículas. Sea además \mathbf{x}_k el vector de estados en el tiempo k . Los pesos son normalizados de acuerdo a $\sum_{i=1}^{N_s} \mathbf{w}_k^i = 1$. De este modo, la PDF *a posteriori* en tiempo k puede ser aproximada por Ec. 2.12, y en donde $\delta(\cdot)$ es la función delta de Dirac.

$$p(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k}) \approx \sum_{i=1}^{N_s} \mathbf{w}_k^i \delta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^i) \quad (2.12)$$

Donde la actualización de los pesos está dado por la Ec. 2.13

$$\mathbf{w}_k^i = \mathbf{w}_{k-1}^i \frac{p(\mathbf{z}_k|\mathbf{x}_k^i)p(\mathbf{x}_k^i|\mathbf{x}_{k-1}^i)}{q(\mathbf{x}_k^i|\mathbf{x}_{0:k-1}^i, \mathbf{z}_{1:k})} \quad (2.13)$$

Se puede ver que cuando $N_s \rightarrow \infty$, la aproximación dada por Ec. 2.12 converge a la PDF *a posteriori* real $p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k})$. Para mayor información revisar [8, 38, 85, 86].

2.6.3. Evolución artificial de parámetros

Los modelos de proceso generalmente consideran parámetros que son conocidos y que son invariantes en el tiempo. Pero en caso contrario, cuando existen parámetros desconocidos, o que son variantes en el tiempo, o que presentan errores paramétricos, estos pueden perjudicar el desempeño del PF en estimación. Para sobrellevar estos problemas se puede recurrir al concepto de Evolución Artificial [68]. Esta metodología considera el aumento del vector de estados, tratando al parámetro como un estado adicional que se modela como una *random walk* con varianza pequeña [21]. Entonces el modelo de proceso (aumentado) que será utilizado por el PF puede ser escrito como:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_k &= \mathbf{f}(x_{k-1}, \theta_{k-1}, \omega_{k-1}) \\ \theta_k &= \theta_{k-1} + \eta_{k-1} \end{aligned} \quad (2.14)$$

2.6.4. Pronóstico basado en Filtro de Partículas

En el área de Pronóstico y Manejo de Salud (PHM, por sus siglas en inglés), el concepto de pronóstico se puede entender esencialmente como la generación de predicciones en el largo plazo para un indicador de falla, hecho con el propósito de estimar la vida útil remanente (RUL, por sus siglas en inglés) de un componente en falla [85]. Esta idea se puede extrapolar a sistemas de tratamiento de aguas en donde se realizan predicciones del producto que se está degradando, hasta el momento en que su degradación es completa, lo que se puede entender como el fin de fase (análogo a RUL).

Para la implementación de algoritmos de pronóstico basados en PF se requiere de un procedimiento para propagar la incertidumbre asociada a la actual estimación de la PDF del estado a través del tiempo, considerando que no hay nuevas observaciones (mediciones) disponibles [84, 91]. De este modo, la propagación de la incertidumbre asociada a los estados es desarrollada a través de p -pasos (o instantes de tiempo), mediante el uso del modelo de proceso no lineal definido para utilizarlo en esta etapa. Estas predicciones usan la población actual de partículas como condición inicial, y funciones *kernel* para caracterizar la incertidumbre asociada a cada transición de estado, como se muestra en Ec. 2.15.

$$\hat{p}(\mathbf{x}_{t+k} | \hat{\mathbf{x}}_{1:t+k-1}) \approx \sum_{i=1}^{N_s} \mathbf{w}_{t+k-1}^i K(\mathbf{x}_{t+k} - \mathbf{E}[\mathbf{x}_{t+k}^i | \hat{\mathbf{x}}_{t+k-1}^i]) \quad (2.15)$$

Donde $K(\cdot)$ es una función *kernel*, la cual puede ser el ruido utilizado en la ecuación de proceso o una versión escalada del *kernel* de Epanechnikov [65, 85]. Además, se incluye el

uso del concepto de regularización (inspirado en el Filtro de Partículas Regularizado, ver [81]) para caracterizar la PDF del vector de estados predicha, a través de la posición de las partículas en vez de sus pesos (como se hace en estimación con PF). Como resultado, esta PDF predicha en el instante de tiempo $k + p$ está siempre representada por N_s partículas $\hat{\mathbf{x}}_{k+p}^{i*} = \hat{\mathbf{x}}_{k+p}^i + h_{opt} \cdot D_{k+p} \cdot \varepsilon^i$, con $i = 1, \dots, N_s$, donde h_{opt} es el ancho óptimo del *kernel* $K(\cdot)$, D_{k+p} es la raíz cuadrada de la covarianza empírica del estado predicho en $k + p$, y ε^i son muestras de acuerdo a $\varepsilon^i \sim K(\cdot)$ (para más detalles, ver [85]).

La PDF predicha resultante contiene información crítica relacionada con el estado (y en caso de PHM, con la falla) sobre el tiempo. Una forma de representar esta información es a través del cálculo de estadísticos tales como la probabilidad de falla en algún instante de tiempo futuro, que en PHM se denomina *End of Life* PDF (y que para tratamiento de aguas lo podríamos llamar PDF *de fin de fase*), la cual puede ser calculada mediante la medida de probabilidad definida en [3] (Ec. 2.16).

$$P(F_k) = P(F_k | H_{k_p:k-1})P(H_{k_p:k-1}), \quad \forall k > k_p \quad (2.16)$$

Donde $P(F_k)$ corresponde a la probabilidad de que el sistema falle (o que el proceso termine) en el instante de tiempo k . $P(F_k | H_{k_p:k-1})$ corresponde a la probabilidad de fallar en el instante de tiempo k , dado que el sistema ha estado sano desde el instante k_p hasta el instante k . $P(H_{k_p:k-1})$ es la probabilidad de que el sistema haya estado sano, desde el instante k_p hasta el instante de tiempo k . Y k_p corresponde al instante en que se inicia el pronóstico.

De acuerdo a esto, un estadístico comúnmente usado, que toma en cuenta el riesgo de falla se denomina $JITP_{\gamma\%}$ (Just in Time Point), que corresponde al instante de tiempo k , en el cual la probabilidad acumulada es $\gamma\%$ (ver Ec. 2.17).

$$JITP_{\gamma\%} = \arg \min_k (P\{EOL \leq k\} \geq \gamma\%) \quad (2.17)$$

Hay que tener en cuenta que la condición de falla (cuando el sistema colapsa, o cuando el proceso de degradación de algún producto termina) se incluye en la forma de “valor umbral”, por el cual el estado predicho debe cruzar. Y este umbral es determinado a través de datos históricos o conocimiento empírico.

2.6.5. Lazos de Corrección Externos

Los lazos de corrección externos (OFCL, por sus siglas en inglés) cumplen un rol fundamental en la estructura de los algoritmos de pronóstico, ya que son capaces de incrementar la precisión y exactitud de las estimaciones de RUL [83]. Típicamente, los OFCL miden la capacidad de predicción del modelo de proceso, a través del análisis de errores de predicción en el corto plazo, mejorando de este modo el desempeño de los algoritmos de pronóstico, a través de la modificación de la estructura del modelo que es utilizado durante la etapa de

filtrado [84, 111] o mediante la actualización de los hiperparámetros que definen los ruidos de proceso u observación [83].

Capítulo 3

Simulación de BNR a través de ciclos consecutivos de operación en un SBR

Una condición importante para favorecer la nitrificación parcial en el tiempo, es poder tener mayor cantidad de AOB activas en vez de NOB en el interior del SBR, o dicho de otro modo, generar el llamado “lavado de las NOB” (minimizar la población de NOB). Siempre apuntando a mejorar el rendimiento del proceso, el objetivo entonces es lograr un lavado de las NOB en el menor tiempo posible. Para llevar esto a cabo, se propone estudiar el comportamiento en el largo plazo de BNR en un SBR combinando 2 estrategias revisadas en literatura: nitrificación parcial y estimación del término de fase aeróbica. La idea de esto es poder comprender qué tan crítica es la dependencia entre el momento en que se corta la fase aeróbica (una correcta o incorrecta estimación del término de fase), y el rendimiento total de la BNR en el largo plazo (o través de ciclos de operación consecutivos).

3.1. Consideraciones generales de la simulación de BNR en un SBR

Una consideración inicial, y que implica un cambio en el paradigma actual de cómo se analiza la operación de BNR en SBR, es analizar la dinámica de las poblaciones de AOB y NOB como “eventos discretos”, en los que cada instante de tiempo corresponde a un ciclo del operación del SBR, y los valores de AOB y NOB corresponden a condiciones finales en el SBR. Ya que una de las necesidades en BNR es mantener estable en el largo plazo una cantidad máxima de AOB y una mínima de NOB, para así disminuir los tiempos y los costos de operación del SBR. Por lo tanto, para efectuar este estudio, se implementó una metodología que consiste en simular múltiples realizaciones de ciclos de operación consecutivos bajo el mismo umbral de término de fase. Para esto se utilizó un modelo ASM1 modificado (detalles del modelo en Anexo A1) que fue implementado en el entorno Simulink de Matlab® con la finalidad de poder contar con una plataforma flexible que permita la simulación de múltiples ciclos de operación del SBR para realizar BNR en modo de nitrificación parcial. Por lo tanto, la ejecución de las simulaciones considera:

- 1) Valores fijos de pH y DO (variables controladas), para todos los ciclos simulados, dentro de todas las realizaciones generadas. Simulando de este modo la condición de nitrificación parcial en el reactor.
- 2) El primer ciclo de operación incluye condiciones iniciales previamente establecidas, las condiciones iniciales de los ciclos consecutivos dependen de las condiciones finales del ciclo previo. Aunque esto último no es igual para toda las variables de estado, ya que se plantea que para todos los ciclos, el agua residual que ingresa al reactor, siempre tienen las mismas concentraciones de amonio, nitrito y nitrato.
- 3) Para cada ciclo simulado existe una purga de lodos, considerando una edad de lodo¹ igual a 15 días.
- 4) Para cada simulación se almacenan las condiciones finales de los estados y los tiempos de duración de cada fase.
- 5) La condición inicial del primer ciclo de operación será en base a datos de laboratorio, en conjunto con información recopilada de la experiencia del personal técnico encargado de los experimentos y toma de datos.
- 6) Se evalúan 3 niveles distintos de amonio de entrada (500, 600 y 700 mg N/L).
- 7) Se consideran 10 términos de fase distintos:
 - a) Amonio² = 2, 3, 4, 5 y 6 mg N/L
 - b) $0 \leq \text{Amonio} \leq 1$ mg N/L (al cual se le dio el nombre de "Threshold")
 - c) Delays = 0.25, 0.5, 0.75 y 1 hora.
- 8) Se consideran 2 casos (que de ahora en adelante serán llamados Caso 1 y Caso 2) de condiciones iniciales X_{AOB} para el ciclo inicial (en el Caso 2, la población de X_{AOB} corresponde a la mitad con respecto al Caso 1), para estudiar su impacto en la eficiencia del proceso en el largo plazo.
- 9) En cada término de ciclo se registran las condiciones finales del vector de estados junto con los tiempos de duración de las fases.
- 10) El número total de ciclos consecutivos a ejecutar, será dependiente del instante en que los perfiles de las concentraciones de AOB y NOB finales alcancen condiciones estacionarias.
- 11) Para la fase aeróbica se calcula el consumo de oxígeno a través del OUR.
- 12) El término de la fase anóxica se genera a partir de la condición de nitrito + nitrato ≈ 0 .
- 13) Se consideran las métricas: *Valor en Estado Estacionario* (VEE) y *Ciclos de Estabilización* (CE). Para este caso particular, el VEE se define como el valor que alcanza la variable registrada en el largo plazo, y que se mantiene acotado dentro de un rango establecido. Y CE se define como la cantidad de ciclos de operación en que la variable registrada, alcanza un 5% del VEE.

¹ Tiempo promedio en que los microorganismos permanecen en el sistema de tratamiento de aguas [88]. Es un parámetro que se considera dentro del diseño, operación y control de BNR [40].

² Valores permitidos de concentración de amonio para descarga de aguas residuales según norma chilena [33].

El detalle del Caso 1 y Caso 2 se muestran en las Tablas 3.1 y 3.2 respectivamente. En la Figura 3.1 se muestra un esquema que resume lo explicado anteriormente en 2), 3). En la Figura 3.2 se muestra un esquema que resume lo explicado anteriormente en 7), y 9).

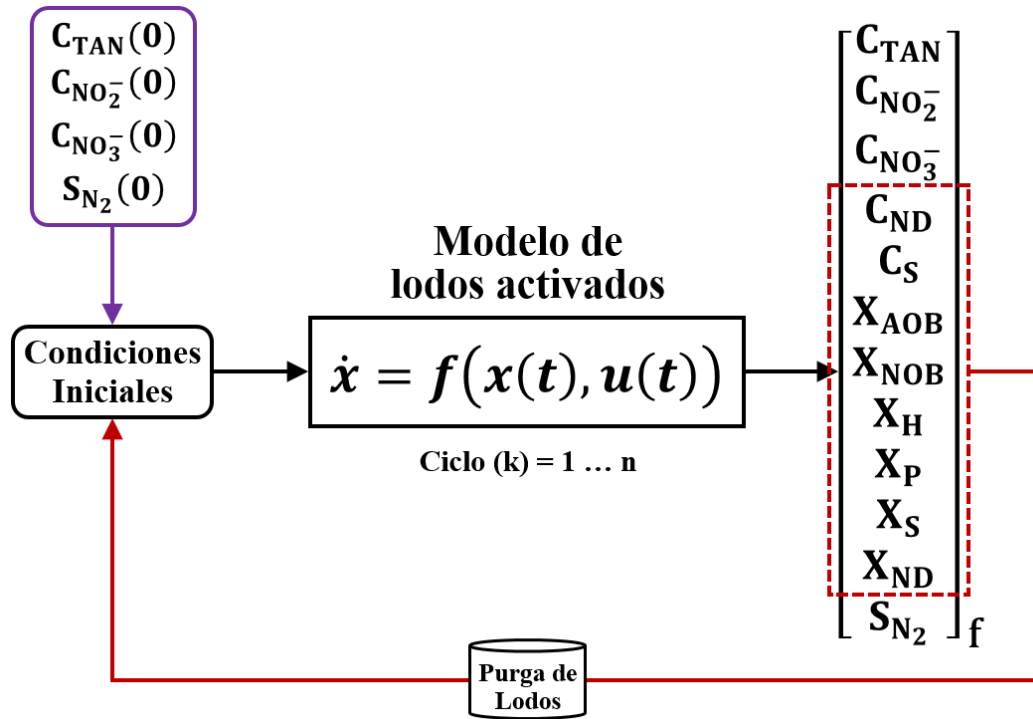


Figura 3.1: Esquema que muestra las condiciones iniciales con las cuales se simula la operación del SBR. En cada ciclo el valor de $C_{TAN}(0)$, $C_{NO_2^-}(0)$, $C_{NO_3^-}(0)$ y $S_{N_2}(0)$ son fijos. En cambio para las otras variables de estado, a partir del ciclo k (con $k > 1$), las condiciones iniciales son iguales a las condiciones finales del ciclo $k - 1$ menos la purga de lodos.

Tabla 3.1: Condiciones Iniciales Caso 1.

C_{TAN}	[500, 600, 700]	mg N L ⁻¹
$C_{NO_2^-}$	0	mg N L ⁻¹
$C_{NO_3^-}$	0	mg N L ⁻¹
C_{ND}	0	mg N L ⁻¹
C_S	0	mg COD L ⁻¹
X_{AOB}	332	mg COD L ⁻¹
X_{NOB}	43	mg COD L ⁻¹
X_H	2334	mg COD L ⁻¹
X_P	220	mg COD L ⁻¹
X_S	0	mg COD L ⁻¹
X_{ND}	0	mg N L ⁻¹
S_{N_2}	0	mg N L ⁻¹

Tabla 3.2: Condiciones Iniciales Caso 2.

C_{TAN}	[500, 600, 700]	mg N L ⁻¹
$C_{NO_2^-}$	0	mg N L ⁻¹
$C_{NO_3^-}$	0	mg N L ⁻¹
C_{ND}	0	mg N L ⁻¹
C_S	0	mg COD L ⁻¹
X_{AOB}	166	mg COD L ⁻¹
X_{NOB}	43	mg COD L ⁻¹
X_H	2334	mg COD L ⁻¹
X_P	220	mg COD L ⁻¹
X_S	0	mg COD L ⁻¹
X_{ND}	0	mg N L ⁻¹
S_{N_2}	0	mg N L ⁻¹

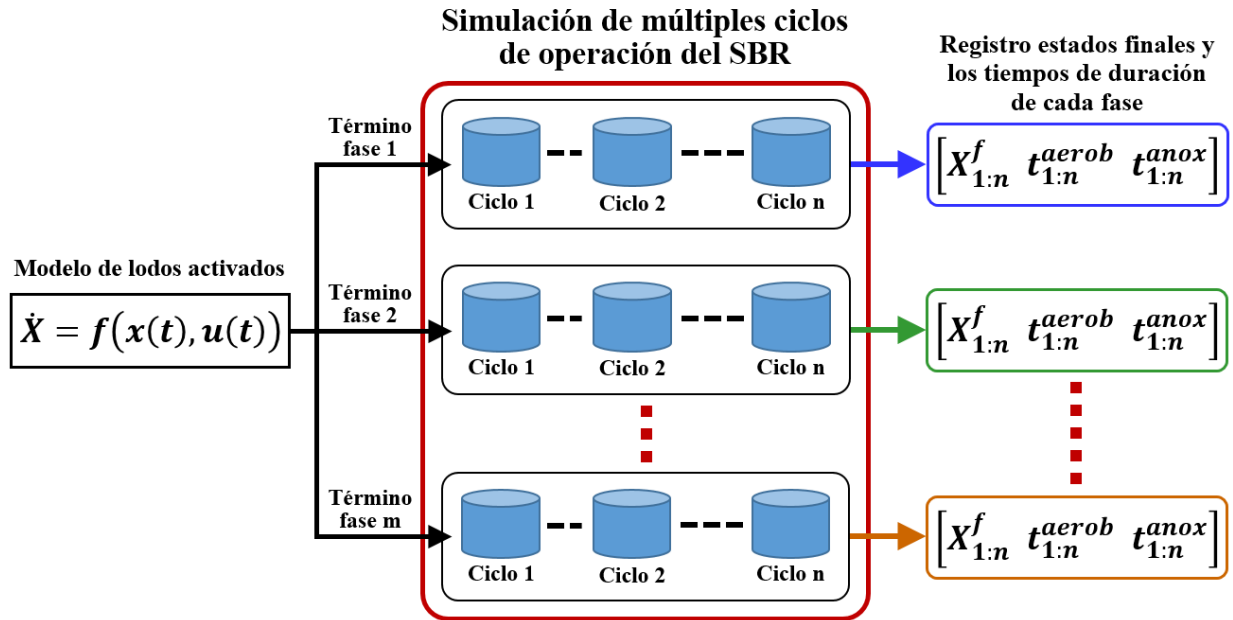


Figura 3.2: Esquema que ejemplifica el algoritmo de simulación propuesto. Se utiliza un ASM para simular ciclos consecutivos en un SBR. Además, se define un término fijo para las fases aeróbicas y al término de cada ciclo, almacena la condición final de la concentración de AOB/NOB, junto con la duración de la fase aeróbica y anóxica.

3.2. Resultados simulaciones

Las simulaciones fueron realizadas en un computador con procesador Intel® Core™ i7-4790 CPU @ 3.60 GHz. La implementación del modelo, la programación de la rutina de simulación de múltiples ciclos de operación del SBR, su ejecución y respaldo de los datos se desarrolló íntegramente en el software Matlab® 2014a, utilizando para esto su entorno Simulink® y el solver ode45 (Dormand-Prince).

Los resultados de las simulaciones realizadas se ordenan a través de dos tipos de tablas y en gráficos. Una de las tablas muestra los VEE alcanzados por cada una de las variables de estado analizadas. La otra tabla de datos muestra los CE en los cuales las variables alcanzan el estado estacionario. Por simplicidad se muestran en este capítulo solamente los resultados de los Casos 1 y 2 a entrada de amonio 500 mg/L. En la Tablas 3.3 y 3.4 se ordenan los VEE y CE para el caso 1, y en las Tablas 3.5 y 3.6 se ordenan los VEE y CE para el caso 2. En las Figuras 3.3 y 3.4 se muestran las gráficas correspondientes de las variables analizadas (para una mejor visualización de los gráficos, no se muestran todas las condiciones de término simuladas). Los otros resultados (amonio de entrada 600 y 700 mg/L, Caso 1 y 2) se muestran en el Anexo A2.

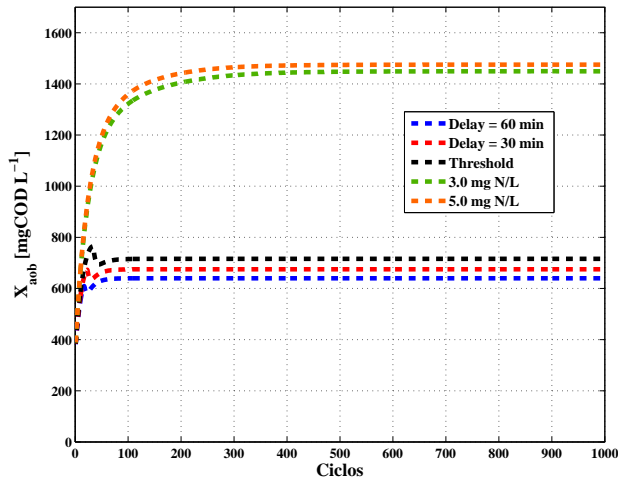
Tabla 3.3: VEE Caso 1 para entrada de amonio 500 mg N/L.

	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	640.0	190.0	9.7	6.7	16.5	3346.8
Delay 0.75 [h]	657.0	194.8	9.2	6.7	15.9	3317.4
Delay 0.5 [h]	675.2	199.9	8.7	6.6	15.4	3286.3
Delay 0.25 [h]	694.8	205.3	8.2	6.6	14.8	3253.3
Threshold	716.0	211.2	7.7	6.5	14.2	3218.3
Amonio 2.0 [mg N/L]	1420.2	0.2	3.1	3.9	7.0	2213.6
Amonio 3.0 [mg N/L]	1449.3	0.1	2.9	3.8	6.8	2195.9
Amonio 4.0 [mg N/L]	1464.8	0.0	2.8	3.8	6.7	2184.5
Amonio 5.0 [mg N/L]	1475.2	0.0	2.8	3.8	6.6	2175.3
Amonio 6.0 [mg N/L]	1483.0	0.0	2.7	3.8	6.5	2167.1

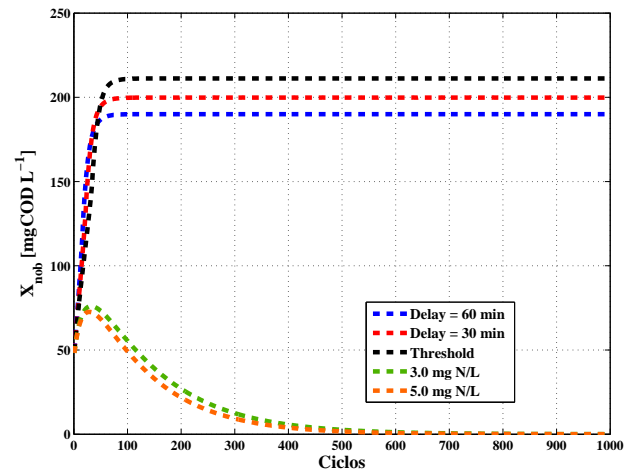
X_{AOB} y X_{NOB} [mg N/L]; T_{Aerob} , T_{Anox} y T_{Ciclo} [h]; **OUR** [mg N/(L · h)].

Tabla 3.4: CE de las variables analizadas Caso 1 para entrada de amonio 500 mg N/L.

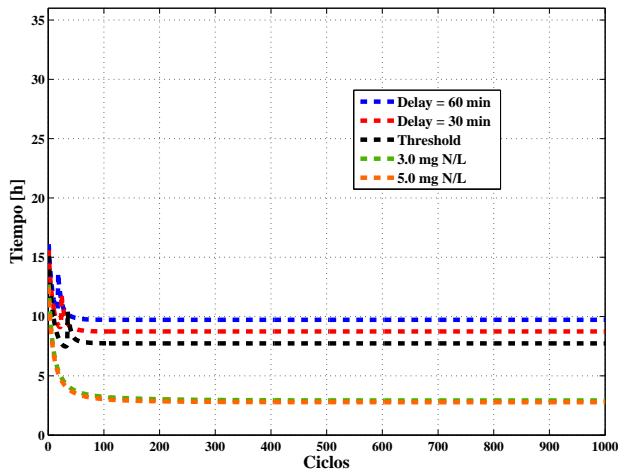
	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	55	57	56	34	50	22
Delay 0.75 [h]	57	59	58	35	52	25
Delay 0.5 [h]	60	62	61	38	55	29
Delay 0.25 [h]	63	67	66	42	59	34
Threshold	66	72	70	47	63	41
Amonio 2.0 [mg N/L]	379	998	419	359	389	329
Amonio 3.0 [mg N/L]	307	998	332	289	311	264
Amonio 4.0 [mg N/L]	284	998	306	266	285	241
Amonio 5.0 [mg N/L]	270	998	290	252	270	227
Amonio 6.0 [mg N/L]	262	998	284	242	262	220



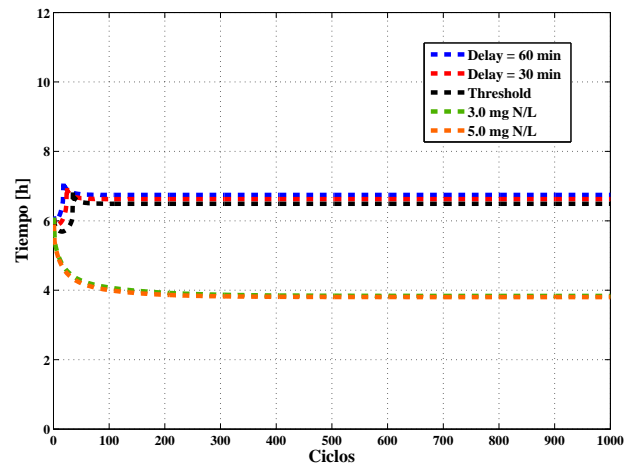
(a) Bacterias Amonio-Oxidantes



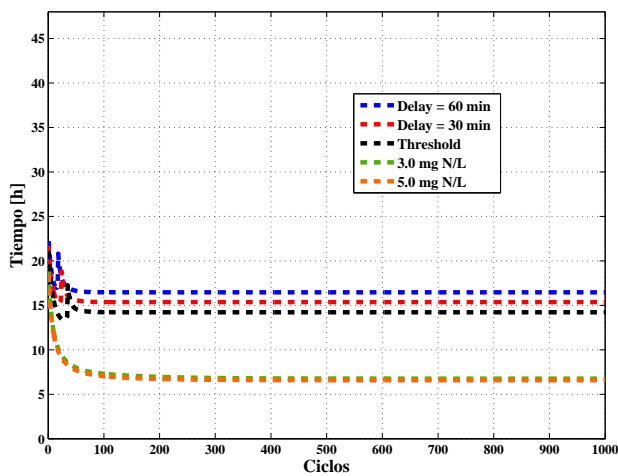
(b) Bacterias Nitrito-Oxidantes



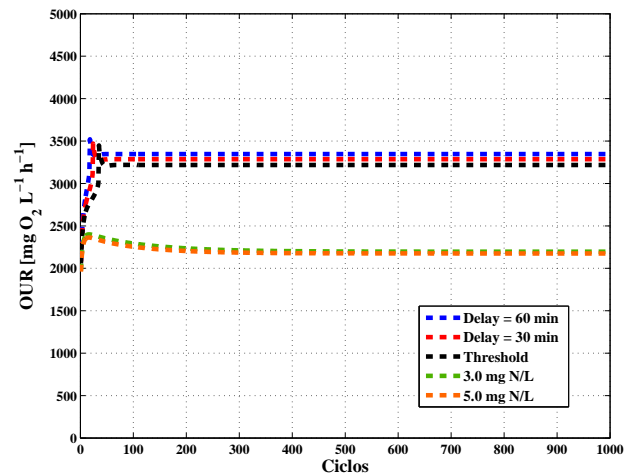
(c) Duración fases aeróbicas



(d) Duración fases anóxicas



(e) Duración ciclos SBR



(f) Oxygen Uptake Rate

Figura 3.3: Gráficos de los resultados para el Caso 1, y con concentración de amonio inicial de 500 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.

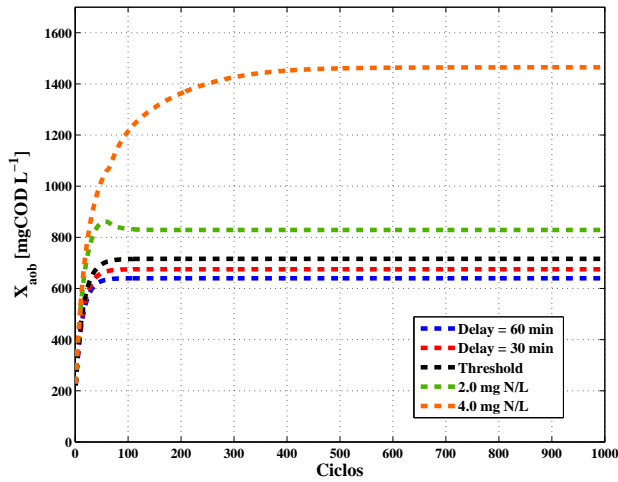
Tabla 3.5: VEE Caso 2 para entrada de amonio 500 mg N/L.

	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	640.0	190.0	9.7	6.7	16.5	3346.8
Delay 0.75 [h]	657.0	194.8	9.2	6.7	15.9	3317.4
Delay 0.5 [h]	675.2	199.9	8.7	6.6	15.4	3286.3
Delay 0.25 [h]	694.8	205.3	8.2	6.6	14.8	3253.3
Threshold	716.0	211.2	7.7	6.5	14.2	3218.3
Amonio 2.0 [mg N/L]	828.8	242.2	5.5	6.1	11.7	3041.7
Amonio 3.0 [mg N/L]	1449.3	0.2	2.9	3.8	6.8	2196.0
Amonio 4.0 [mg N/L]	1464.7	0.1	2.8	3.8	6.7	2184.5
Amonio 5.0 [mg N/L]	1475.2	0.1	2.8	3.8	6.6	2175.3
Amonio 6.0 [mg N/L]	1483.0	0.1	2.7	3.8	6.5	2167.1

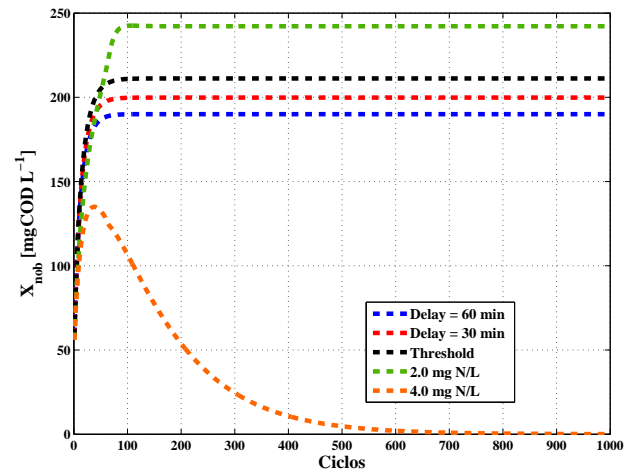
X_{AOB} y X_{NOB} [mg N/L]; T_{Aerob} , T_{Anox} y T_{Ciclo} [h]; **OUR** [mg N/(L · h)].

Tabla 3.6: CE de las variables analizadas Caso 2 para entrada de amonio 500 mg N/L.

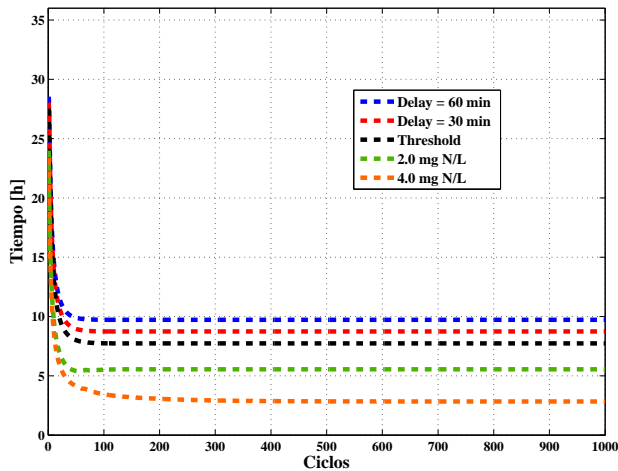
	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	57	57	58	35	52	10
Delay 0.75 [h]	60	60	61	37	55	9
Delay 0.5 [h]	62	62	64	39	57	8
Delay 0.25 [h]	65	65	67	42	60	7
Threshold	68	68	70	44	63	6
Amonio 2.0 [mg N/L]	86	82	91	65	66	66
Amonio 3.0 [mg N/L]	438	998	463	421	441	395
Amonio 4.0 [mg N/L]	387	998	410	370	389	345
Amonio 5.0 [mg N/L]	362	998	382	345	363	320
Amonio 6.0 [mg N/L]	347	998	369	328	347	305



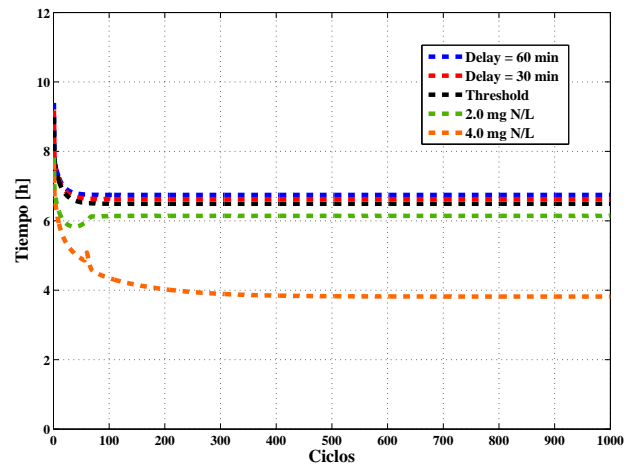
(a) Bacterias Amonio-Oxidantes



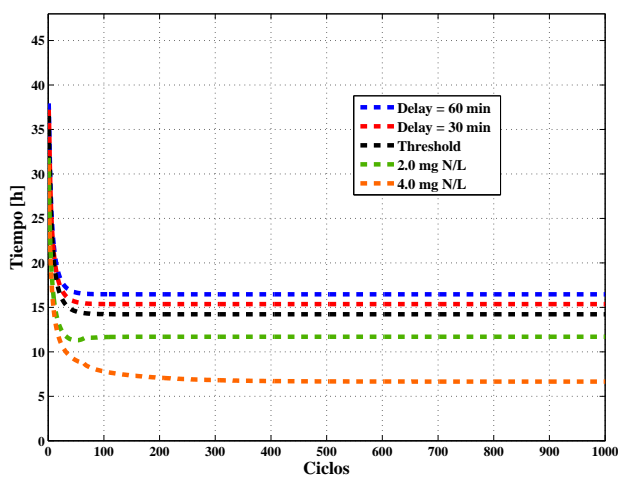
(b) Bacterias Nitrito-Oxidantes



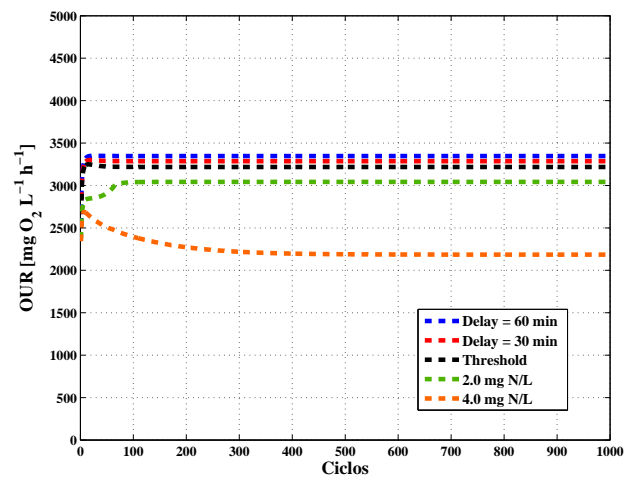
(c) Duración fases aeróbicas



(d) Duración fases anóxicas



(e) Duración ciclos SBR



(f) Oxygen Uptake Rate

Figura 3.4: Gráficos de los resultados para el Caso 2, y con concentración de amonio inicial de 500 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.

3.3. Discusión

El objetivo de las simulaciones es analizar el impacto que tiene el término de la fase aeróbica sobre la eficiencia del proceso de BNR en el largo plazo. Además, las simulaciones incluyen la operación del reactor bajo nitrificación parcial, el cual por diversos estudios, ha demostrado que logra reducir tiempos y costos de operación, pero y según los resultados de las simulaciones, es ineficiente en el largo plazo cuando la fase aeróbica se termina de manera posterior a la degradación completa del amonio (o dicho de otro modo, cuando existe un retardo en el término de la fase, considerando término de fase ideal $amonio = 0$).

3.3.1. Análisis variables en estado estacionario

De los resultados se desprenden varios aspectos interesantes. El primero va de la mano directamente a que si el término de fase cae dentro del rango de concentración de amonio entre 2.0 a 6.0 mg N/L, y la concentración de amonio de entrada es mayor de 500 mg/L, es posible alcanzar crecimientos mayores al 300 % (con respecto a la condición inicial) de las X_{AOB} y un lavado completo de las X_{NOB} . Por el lado contrario, en caso de tener retardos en el término de fase, se tiene crecimiento levemente mayores al 100 % (con respecto a la condición inicial) en las X_{AOB} , y no pudiendo obtener un lavado de las X_{NOB} (en efecto hay crecimiento de estas bacterias). Por consiguiente, y como se puede ver en los gráficos y tablas del presente capítulo y en los anexos, se demuestra que al tener una alta concentración de X_{AOB} y un lavado de X_{NOB} se acortan los tiempos de operación tanto en las fases aeróbicas como anóxicas, y el consumo de oxígeno (OUR) disminuye mejorando la eficiencia de BNR.

Otro resultado interesante es que independiente del caso que se tenga (diferentes $X_{AOB}(0)$), las variables de estado (y los tiempos de las fases) alcanzan prácticamente el mismo estado estacionario para una misma condición de concentración de amonio de entrada. Esto abre la posibilidad de “controlar” la población de bacterias del proceso de BNR (y lo que va directamente relacionado con la eficiencia del proceso), utilizando como “variables manipuladas” la condición de término fase y que el proceso de BNR sea operado bajo nitrificación parcial.

3.3.2. Análisis ciclos de estabilización

Como se mencionó anteriormente, las variables de estado llegan al mismo valor en estado estacionario, a pesar de tener condiciones iniciales de X_{AOB} distintas. Si analizamos este hecho desde el punto de vista de los ciclos de estabilización existen diferencias. De manera general, una mayor concentración inicial de X_{AOB} para cuando el término de fase cae dentro del rango de concentración de amonio entre 2.0 a 6.0 mg N/L, genera una convergencia más rápida de esta variable de estado y por consiguiente de los tiempos de duración de las fases. Y de manera contraria, la convergencia de las X_{NOB} es más lenta bajo las mismas condiciones. Otro punto relevante de la velocidad de convergencia va asociado al amonio de entrada, mientras más aumenta la concentración de amonio en el instante inicial, más rápido las variables convergen al estado estacionario.

Capítulo 4

Estimación en línea del término de la fase aeróbica en un SBR basado en extracción de características y clasificadores SVM

4.1. Problemas evidenciados en la estimación del término de la fase aeróbica de la base de datos

Una de las primeras propuestas para la estimación del término de la fase aeróbica, basado en *bending points* extraídos desde las variables manipuladas, se desarrolla en [5] (cuya base de datos generada, es la que se utiliza en este trabajo de Tesis). En gran parte de los ciclos registrados en la base de datos, se tuvo una estimación correcta del término de fase aeróbica. Sin embargo, existen variados ciclos en los que una fuerte caída (bajo un 20 %) en el perfil de %AVO fue observado, pero debido a perturbaciones en el desempeño del controlador (incertidumbre del sensor y/o a la naturaleza no-lineal y variante en el tiempo del proceso de nitrificación), el consumo de carbonato no se mantiene constante. Esto se traduce en que la estrategia desarrollada en [5] pierde precisión en la estimación del término de la fase aeróbica. En la Figura 4.1 se muestra un ejemplo de lo expuesto anteriormente, en donde se registra un retardo de aproximadamente 1 hora con respecto al término real de la fase aeróbica.

Debido a esta problemática es que se hace necesario proponer estrategias que se antepongan (o que logren ser robustas) frente a las perturbaciones que van apareciendo en el corto y largo plazo en el proceso de BNR.

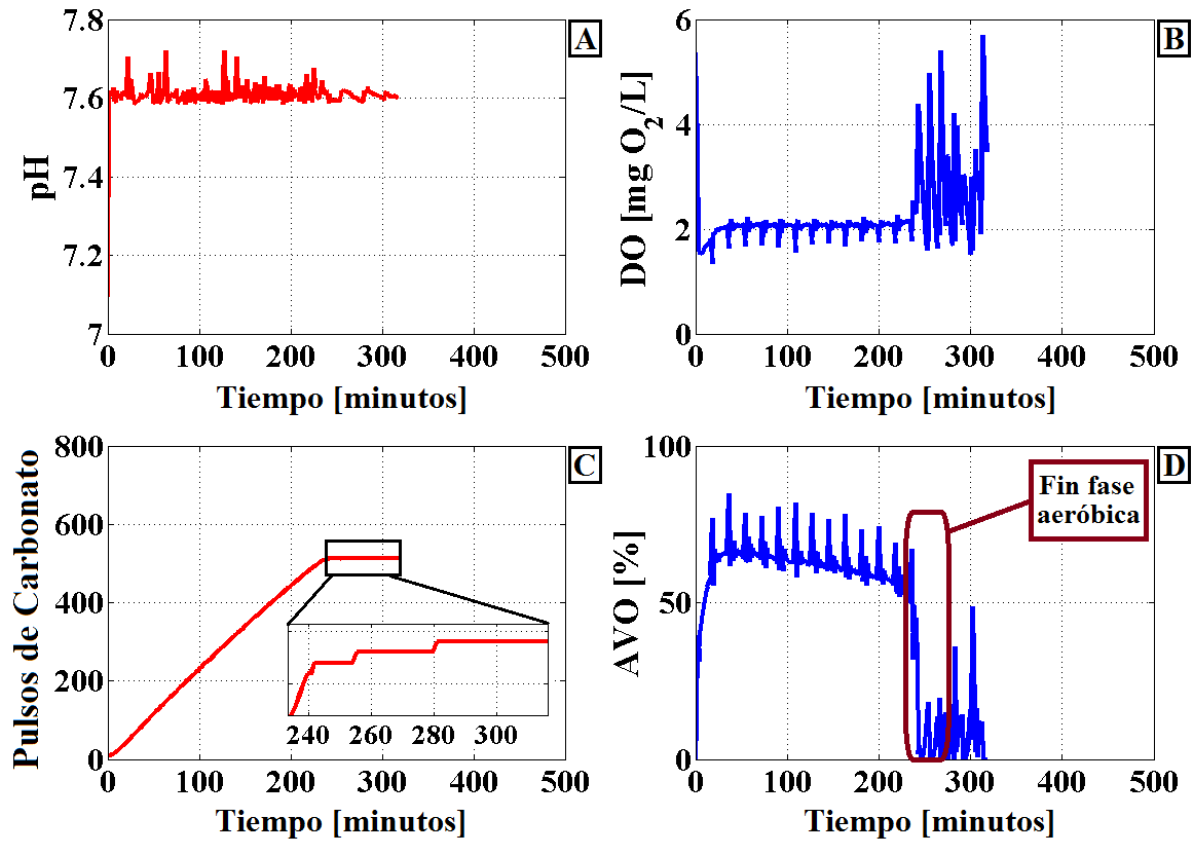


Figura 4.1: Ciclo en el cual las perturbaciones en el controlador no permitieron tener una tendencia constante de los pulsos de carbonato (C), a pesar de tener un %AVO menor a 20 % (D), lo que resulta en una estimación poco precisa del término de la fase aeróbica.

4.2. Extracción de características sobre las variables manipuladas

De los experimentos realizados en la planta piloto (Figura 4.1), se observa que las variables manipuladas de los controladores de pH y DO exhiben patrones interesantes. Para el pH, el consumo de carbonato siempre decae a lo largo de la fase aeróbica. En cuanto a la variable manipulada del DO, ésta muestra oscilaciones después de la interrupción de la aireación (corte de 33 segundos, cada 15 minutos). Tomando esto en cuenta, dos características fueron definidas (extraídas) para el desarrollo de este trabajo:

- i) Pulses Rate (P_R): La cantidad de pulsos de carbonato inyectados en el reactor dentro de una ventana de tiempo definida. La expresión para P_R se muestra en la Eq. 4.1.

$$P_R = \sum \text{Pulsos de Carbonato}_{[\text{ventana de tiempo}]} \quad (4.1)$$

- ii) Power of the signal %AVO ($P_{\%AVO}$): El promedio de la densidad espectral de potencia empírica (PSD, por sus siglas en inglés), calculada sobre una ventana de tiempo de n

muestras. La $P_{\%AVO}$ es calculada como se muestra en Eq. 4.2, donde $X_{\%AVO}(\omega)$ es la señal de $\%AVO$ en el dominio de la frecuencia, y n corresponde al número total de sus componentes de frecuencia discretos.

$$P_{\%AVO} = \frac{1}{n} \sum |X_{\%AVO}(\omega)|^2 \quad (4.2)$$

El “tamaño” (n) de la ventana de tiempo fue elegido maximizando la correlación entre las características extraídas y la degradación de amonio. De acuerdo a esto, se seleccionó una ventana de 11 minutos, la cual siempre es iniciada en el momento en que la aireación es interrumpida (como se dice anteriormente, estas interrupciones ocurren cada 15 minutos). En la Figura 4.2 se muestra un ejemplo de las variables manipuladas, la ventana de tiempo definida, y las características extraídas.

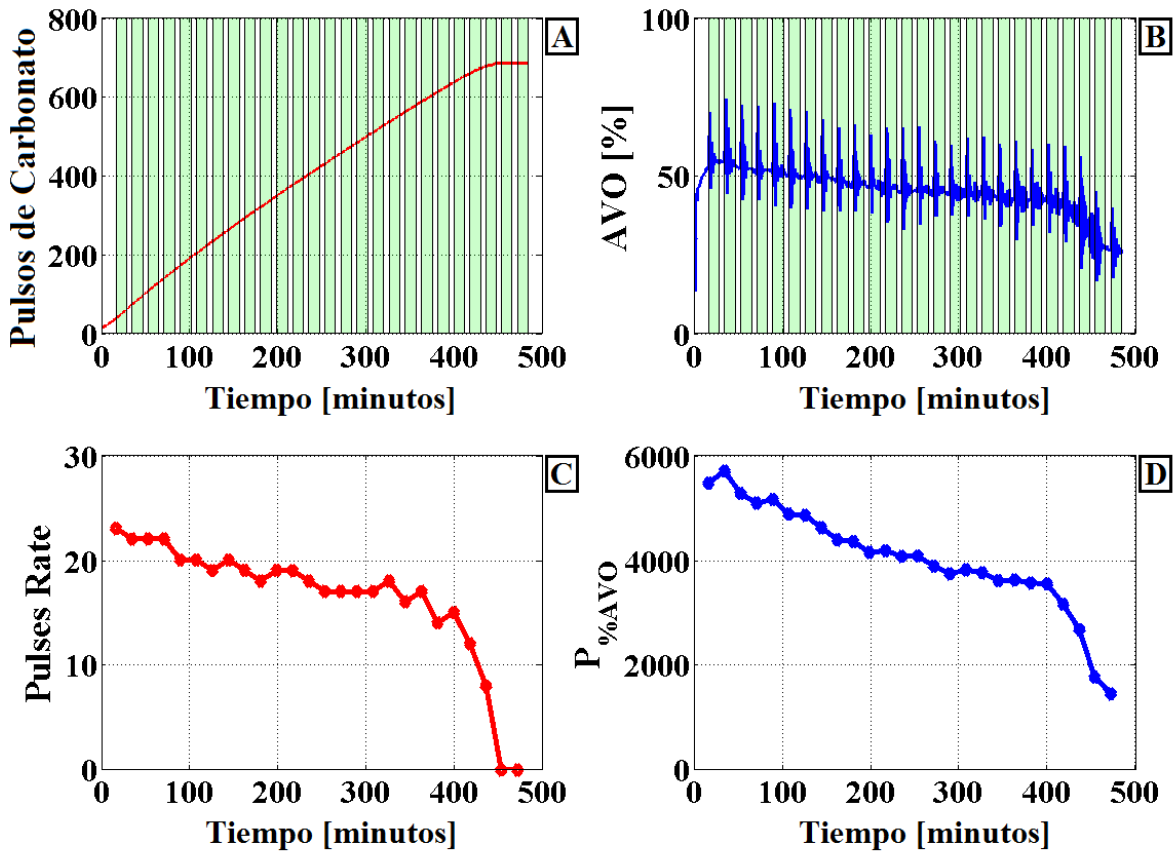


Figura 4.2: Característica P_R (C) extraída de los pulsos de carbonato (A), y característica $P_{\%AVO}$ (D) extraída de $\%AVO$ (B). En verde, y sobre los gráficos de las variables manipuladas (A-B), se observa la ventana de tiempo usada para calcular las características.

4.3. Estimación del término de la fase aeróbica como problema de clasificación binaria

Se propone re-definir el problema de estimación del término de fase aeróbica como un problema de clasificación binaria, en donde, una clase corresponde al estado de *degradación de amonio*, y la otra clase corresponde al estado de *degradación completa de amonio*. En la Figura 4.3, se representa un ejemplo del comportamiento de las características de cuatro fases aeróbicas diferentes (ciclos 182, 285, 293, 354) en el plano $P_R - P_{\%AVO}$, en donde se muestra que en el estado de *degradación de amonio* (puntos azules) las características se encuentran lejos del origen de este plano, en cambio en el estado de *degradación completa de amonio* (puntos rojos), las características se encuentran cerca del origen y de los ejes. Por lo tanto, desde este nuevo punto de vista, la estrategia a desarrollar ahora consiste en el entrenamiento y prueba de un clasificador SVM para encontrar la mejor frontera de decisión entre estas dos clases.

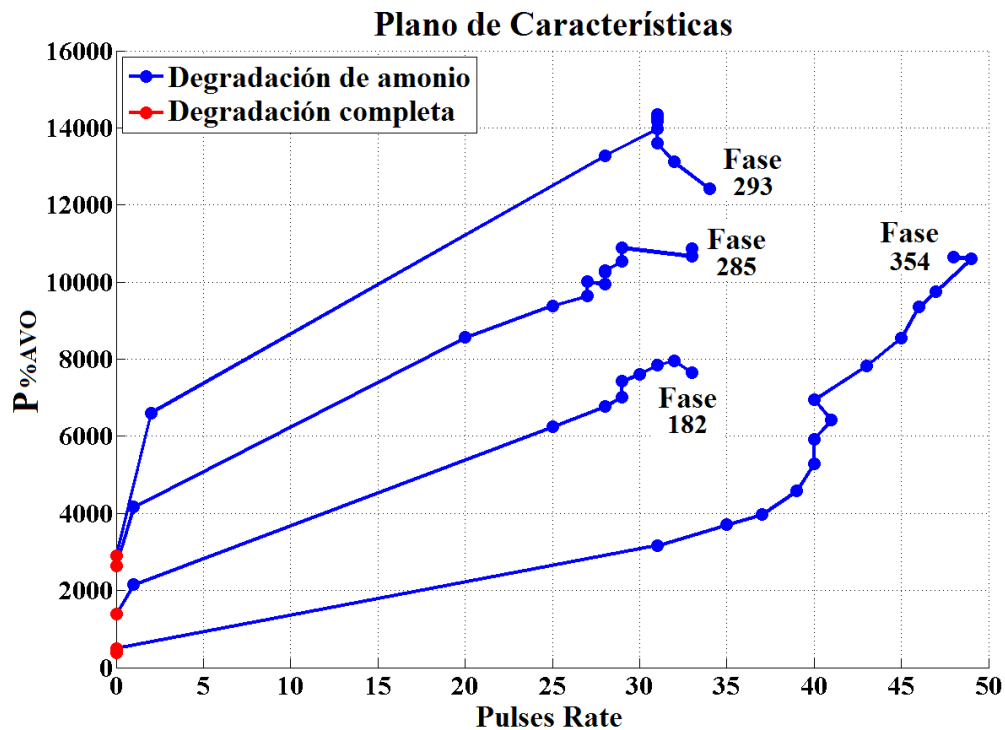


Figura 4.3: Ejemplo de la tendencia seguida por las características en el plano $P_R - P_{\%AVO}$. Los puntos azules representan las características pertenecientes a la clase de degradación de amonio, mientras que los puntos rojos representan a la clase de degradación completa de amonio.

4.3.1. Clasificador SVM: entrenamiento y prueba

Los siguientes pasos son considerados para desarrollar el clasificador SVM (resumido en la Figura 4.4).

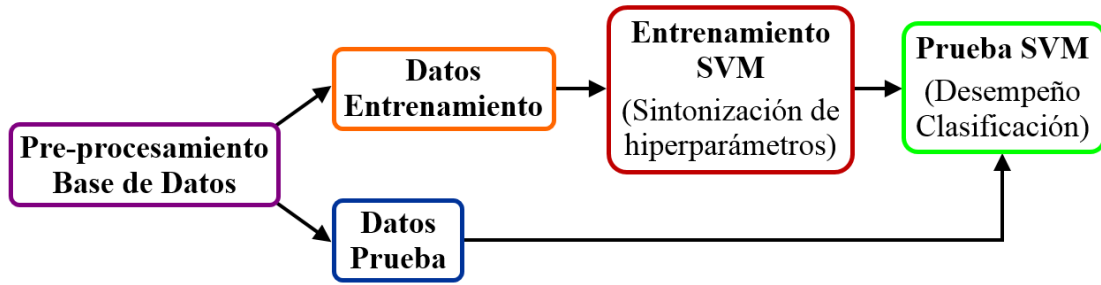


Figura 4.4: Pasos para el entrenamiento y prueba del clasificador SVM.

- I) **Preprocesamiento de la base de datos:** Todos los ciclos SBR incompletos son eliminados, las características son extraídas y las etiquetas de cada clase son asignadas (*estado de degradación de amonio* y *estado de degradación completa de amonio*).
- II) **Datos de entrenamiento:** Corresponde al 80 % de la base de datos, y es utilizada para entrenar el clasificador SVM con el fin de encontrar la frontera de decisión óptima. En la Figura 4.5 todos los datos del conjunto de datos de entrenamiento son graficados en el plano de características, donde las clases son representadas en dos áreas bien definidas, pero no linealmente separables.
- III) **Datos de prueba:** El restante 20 % de la base de datos es utilizada para probar el clasificador SVM previamente entrenado, con el fin de evaluar su exactitud en la clasificación [76].
- IV) **Entrenamiento del SVM:** Para esta etapa se selecciona un *kernel* Gaussiano debido a que tiene una mejor exactitud de clasificación en relación a otras funciones *kernel* [56]. El entrenamiento se lleva a cabo en el software Matlab a través del comando *fitcsvm*, de acuerdo al procedimiento descrito en [77], en donde los hiperparámetros *BoxConstraint* y *KernelScale* son sintonizados para maximizar la clasificación, basado en el error de clasificación calculado dentro del procedimiento de validación cruzada [56].
- V) **Prueba del SVM:** En esta etapa, se revisa el desempeño del clasificador utilizando la base de datos de prueba.

4.3.2. Resultados del entrenamiento y prueba del clasificador SVM

Los hiperparámetros *BoxConstraint* y *KernelScale* del clasificador SVM con *kernel* Gaussiano fueron sintonizados en la etapa de entrenamiento, sus valores son detallados en la Tabla 4.1. Estos hiperparámetros permitieron encontrar una frontera de decisión óptima para discriminar entre las dos clases del problema de estimación del término de fase aeróbica. En la Figura 4.6, se visualiza la frontera de decisión encontrada (en verde), junto con las clases previamente definidas.

El primer paso para evaluar el desempeño del clasificador es a través de la aplicación

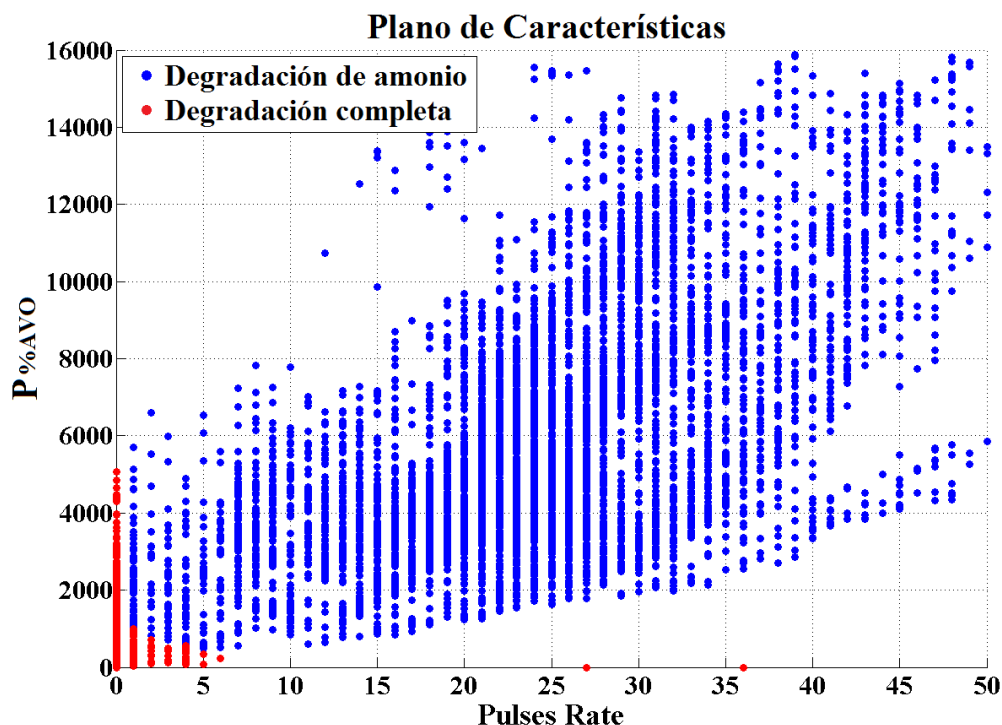


Figura 4.5: Conjunto de datos de entrenamiento en el plano de características. La clase de degradación de amonio (puntos azules) y la clase de degradación completa (puntos rojos) forman dos zonas bien definidas, pero no linealmente separables.

Tabla 4.1: Hiperparámetros sintonizados del clasificador SVM.

KernelScale	BoxConstraint
176.14	33656

del clasificador sobre los datos de entrenamiento, con su respectiva matriz de confusión y la evaluación de las respectivas medidas de desempeño (sensibilidad y especificidad). Los resultados obtenidos en este primer paso, son mostrados en la Tabla 4.2.

Para prevenir el sobre-entrenamiento del clasificador (baja capacidad de clasificar datos que no pertenezcan a la base de datos de entrenamiento), se hace un segundo paso de evaluación, que corresponde a la aplicación del clasificador sobre los datos de prueba. Los resultados de su desempeño se entregan en la Tabla 4.3.

4.3.3. Mejoras en la estimación del término de la fase aeróbica con respecto a metodología previa

Una forma de evaluar mejoras con respecto a la metodología previa [5], es en base a la reducción total del tiempo de operación en las fases aeróbicas, y esto se hace comparando

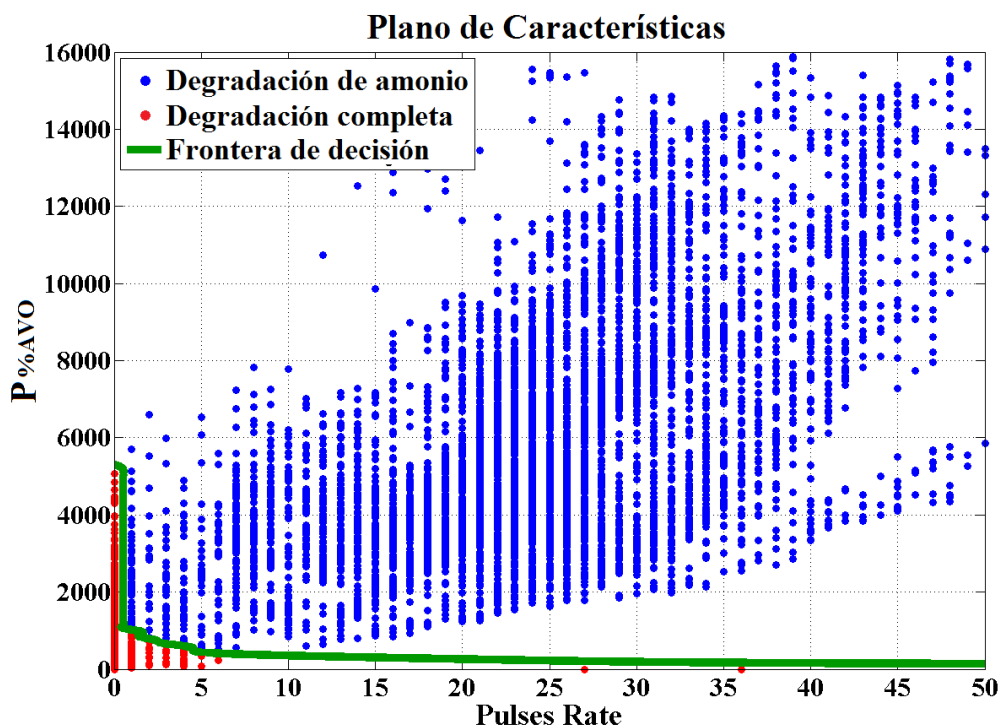


Figura 4.6: En verde, se muestra la frontera de decisión óptima que permite discriminar entre las clases de degradación de amonio y degradación completa de amonio.

Tabla 4.2: Matriz de confusión y medidas de desempeño del clasificador con datos de entrenamiento.

	Degradación de amonio (clasificado)	Término de fase (clasificado)
Degradación de amonio (datos entrenamiento)	6496	0
Término de fase (datos entrenamiento)	0	729
Clasificaciones correctas: 7225	Exactitud: 100 %	
Clasificaciones erróneas: 0	Error: 0 %	
Sensibilidad (%) = 100	Especificidad (%) = 100	

la suma de los tiempos de duración de todas las fases aeróbicas de la base de datos, contra la suma de los tiempos obtenidos con la metodología propuesta. Los tiempos calculados corresponden a 3041.7 horas y 2812.8 horas respectivamente. Esto corresponde a un 7.52 % de reducción en los tiempos de operación del reactor.

Para tener un mejor entendimiento de la reducción de los tiempos de operación, se elaboró

Tabla 4.3: Matriz de confusión y medidas de desempeño del clasificador con datos de prueba.

	Degradación de amonio (clasificado)	Término de fase (clasificado)
Degradación de amonio (datos prueba)	1624	0
Término de fase (datos prueba)	0	182
Clasificaciones correctas: 1806		Exactitud: 100 %
Clasificaciones erróneas: 0		Error: 0 %
Sensibilidad (%) = 100		Especificidad (%) = 100

un histograma con de la reducción de los tiempos con respecto a cada fase aeróbica utilizada (Figura 4.7), lo que refleja que la mayor parte de las fases aeróbicas tuvieron una reducción de aproximadamente 20 minutos, aunque también para otras fases aeróbicas se consiguieron reducciones de tiempo de alrededor de 60 minutos o incluso 120 minutos.

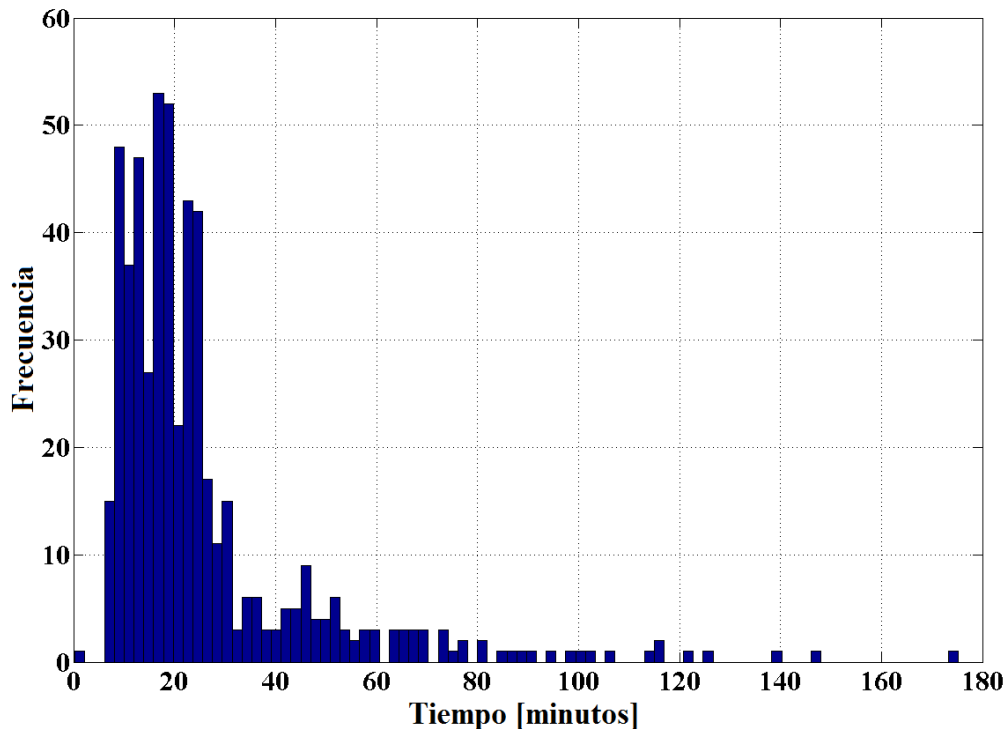


Figura 4.7: Histograma que representa las diferencias entre los tiempos de duración de cada fase aeróbica perteneciente a la base de datos, y de sus respectivos tiempos de duración estimados con la metodología propuesta.

4.4. Discusión de resultados

Para el uso de clasificadores (y en este caso SVMs), es esencial una correcta extracción/selección de características para obtener una mayor separabilidad de las clases, y con esto obtener mejoras en el desempeño del clasificador. Para el caso abordado, se tiene la ventaja de incorporar más información (extracción de características), con respecto a otras estrategias encontradas en literatura, que buscan patrones directamente desde la señal medida por los sensores (*bending points*), las que a su vez presentan restricciones según las condiciones de operación escogidas (baja concentración de amonio, exceso de aireación, niveles de temperatura) [92].

4.4.1. Desempeño clasificador SVM

La elección del clasificador SVM para este trabajo pasó primariamente por dos temas: El primero, por su prestigio en lo que respecta a clasificación binaria (expuestos en el Capítulo 2). El segundo, por ser conceptualmente fácil de entender para alguien que no esté ligado al área de *Machine Learning*. Y a la luz de los resultados obtenidos, se confirma como una elección correcta.

Los resultados de la Tabla 4.2 son relevantes dado que se obtuvo un 100 % de exactitud. Todas las clases fueron correctamente clasificadas (los 6496 casos de degradación de amonio, y 729 casos de degradación completa). En otras palabras, se tuvo una correcta estimación del término de fase aeróbica para todos los ciclos SBR pertenecientes a los datos de entrenamiento. Del mismo modo, se obtuvo un 100 % en las medidas de desempeño de sensibilidad y especificidad.

Los resultados de la Tabla 4.3 muestran que del mismo modo se obtuvo un 100 % de exactitud, 0 % de error, 100 % de sensibilidad y 100 % de especificidad en clasificación utilizando la base de datos de prueba, validando de este modo la metodología propuesta para estimar el término de la fase aeróbica.

Generalmente, en muchos casos el desempeño del clasificador disminuye cuando se prueba el clasificador con datos desconocidos. Y en caso de que su desempeño no alcance un estándar requerido, es necesario aplicar cambios al procedimiento, los que pueden ser: re-entrenamiento utilizando la misma base de datos de entrenamiento, re-entrenamiento utilizando una base de datos de entrenamiento diferente, cambiar la estructura del clasificador, y/o añadir nuevas características. Pero para el caso particular de este trabajo de Tesis, la metodología propuesta fue capaz de obtener un 100 % de exactitud a pesar de los inconvenientes operacionales propios del proceso de nitrificación, tales como cambios en el set-point del controlador de pH (de 7.5 a 8.5), o desajuste del controlador en lazo cerrado de pH/DO en el largo plazo (meses).

Por otro lado, los datos desbalanceados tienden a sobreajustar el clasificador respecto a la clase mayoritaria, incrementando clasificaciones incorrectas para las muestras de la clase minoritaria [80]. Para este caso, la base de datos utilizada tiene un desbalance de 9:1 (*degradación de amonio vs degradación completa*), y aún así, el clasificador SVM logró sobreponerse

obteniendo 100 % de exactitud, 100 % de sensibilidad, y 100 % de especificidad en las etapas de entrenamiento y prueba.

4.4.2. Mejoras en la estimación del término de fase

Los resultados muestran que la metodología propuesta no requiere de una ventana de tiempo fijo para asegurar el término de la nitrificación (ventana de 30 minutos propuesta en [5]). Además muestra evidencia de que es capaz de sobreponerse a casos complejos donde se consiguió una reducción de tiempo mayor a 30 minutos.

Capítulo 5

Estimación y pronóstico de amonio en la fase aeróbica de un ciclo SBR operando en nitrificación parcial para BNR

En el Capítulo 4 se planteó un método para estimar en línea el término de la fase aeróbica a través del monitoreo de variables secundarias. Como resultado, el operador solamente tiene conocimiento de dos “estados” para el proceso: uno es cuando el sistema está degradando amonio, y el otro es cuando el amonio ya fue removido. Ante estos escenarios el operador (o el sistema de control) queda restringido simplemente a detectar este “cambio de estado” para así cambiar de fase y proseguir con el ciclo.

Ahora, si suponemos el caso en que el operador tiene herramientas que le permitan monitorear en línea la concentración de amonio, y más aún, que pueda pronosticar el tiempo en que durará las fases aeróbicas en el reactor. Le estaremos dando entonces mayor poder de decisión, ya que aparte de poder realizar los cambios de fase de manera precisa (y con esto reduciendo costos energéticos), se podrá también proyectar la cantidad de agua tratada por día, con el fin de poder adaptar sus políticas de operación para aumentar la eficiencia de la planta de tratamiento de aguas.

5.1. Metodología propuesta

De acuerdo a lo expuesto en la Sección 2, la estimación y pronóstico de estados basados en PF requiere de un modelo en espacio de estados de la variable a estimar, junto con una ecuación de observación, que corresponde a un modelo dinámico de las mediciones en línea de sensores instalados. En caso de no contar con sensores que midan directamente la variable de interés, se puede recurrir a una *Característica* para tener una “variable medida en línea” que esté directamente correlacionada con la variable a estimar. Esta *Característica* se puede obtener a través Extracción de Características, y en caso de ser necesario, se utiliza Fusión de Características. Por lo tanto, a través de algoritmos basados en PF es posible obtener

estimaciones y pronóstico de la variable de interés. En la Figura 5.1 se muestra un resumen de la metodología para generar estimación en línea del amonio y pronóstico del término de fase aeróbica en un SBR.

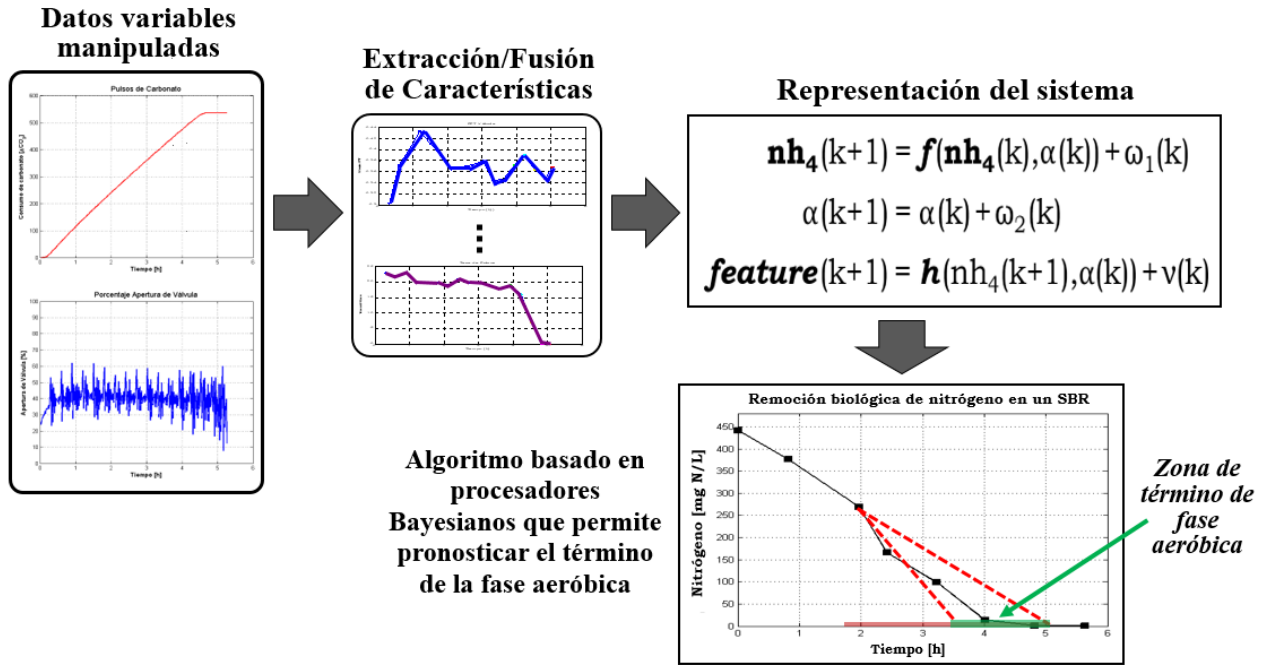


Figura 5.1: Esquema metodología estimación y pronóstico en línea. El PF utiliza los datos provenientes del modelo de proceso y de las observaciones para generar estimación/pronóstico de la variable de interés.

5.1.1. Modelamiento en espacios de estados: representación del sistema

Debido a que la degradación de amonio en un SBR es un proceso complejo (no linealidades, incertidumbres y sistema variante en el tiempo), es entonces que los modelos de proceso y observación pasan a ser funciones no lineales, estocásticas y en tiempo discreto que presentan la estructura de la Ec. 5.1.

$$\mathbf{amonio}(k+1) = \mathbf{f}(\mathbf{amonio}(k), \alpha(k)) + \omega_1(k)$$

$$\alpha(k+1) = \alpha(k) + \omega_2(k) \quad (5.1)$$

$$\mathbf{Caracteristica}(k+1) = \mathbf{h}(\mathbf{amonio}(k+1), \alpha(k)) + \nu(k)$$

5.1.2. Modelamiento en espacio de estados: Modelo empírico de la dinámica del amonio en la fase aeróbica

Dentro de las consideraciones utilizadas para modelar la concentración de amonio en el reactor, se cuenta en primer lugar que en las plantas de tratamiento de aguas, existe una estimación de la concentración de amonio en el agua residual que ingresa al reactor. Dicho de otro modo, el amonio en el “tiempo 0” es conocido. Por lo tanto, para disminuir la complejidad del modelo de proceso, el amonio siempre se trabaja normalizado con respecto a su valor inicial. En segundo lugar, el amonio (y consecuentemente el amonio normalizado) en el reactor siempre se comporta como una función monótona decreciente, que tendrá un rango entre [0,1]. En tercer lugar, el modelo que represente la dinámica del amonio, no debe tener un número considerable de parámetros. Ya que al tener muchos parámetros, el modelo quedará “sintonizado” a un ciclo en particular (y probablemente a ciclos consecutivos de operación, pero acotado al corto plazo). Y lo importante es que el modelo de proceso se adapte a las condiciones del reactor en el corto y largo plazo.

Con estas consideraciones, y utilizando herramientas de ajustes de curvas (*Curve Fitting Tool* de Matlab®), el modelo en tiempo continuo ($x(t)$) encontrado que representa la dinámica del amonio en el reactor se define en Ec. 5.2.

$$\dot{x}(t) = 2.5 \cdot \alpha \cdot t^{1.5} \cdot x(t) \quad (5.2)$$

Un ejemplo de los datos de amonio medidos en laboratorio (utilizando un ciclo de “entrenamiento”), versus el modelo continuo previamente definido en Ec.5.2 se muestra en la Figura 5.2, del cual se obtiene un valor RMSE (Root Mean Square Error) de 0.0388.

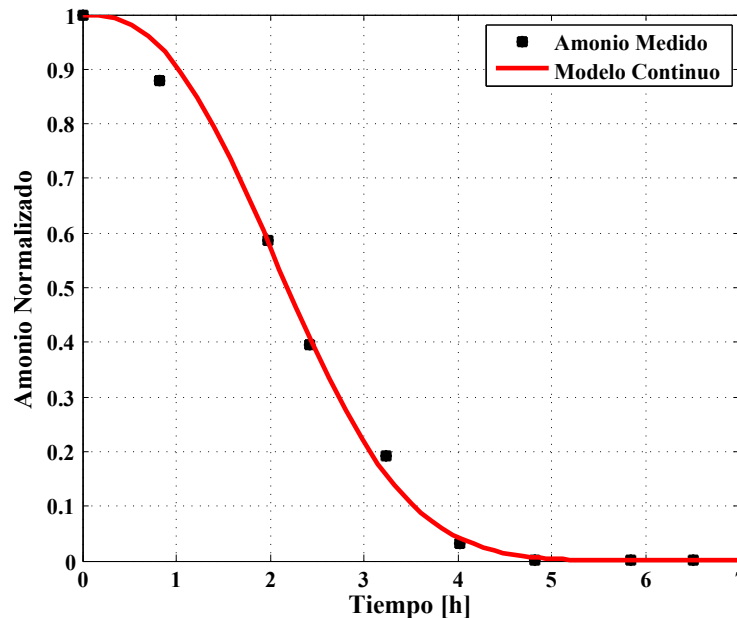


Figura 5.2: Modelo amonio normalizado en tiempo continuo, versus datos de amonio medidos en línea.

Finalmente, la representación del modelo del amonio en tiempo discreto fue calculado a partir de lo expuesto en [105], y queda definido por la Ec. 5.3, con T_S siendo el tiempo de muestreo y α es un parámetro desconocido que se requiere para explicar las variaciones de las poblaciones bacterianas en el corto y largo plazo.

$$\mathbf{amonio}(k+1) = \mathbf{e}^{(-\alpha(k) \cdot T_S^{2.5} \cdot ((k+1)^{2.5} - k^{2.5}))} \cdot \mathbf{amonio}(k) + \omega_1(k) \quad (5.3)$$

En donde el amonio en el instante $k+1$ es igual a una función no lineal del amonio en tiempo k y de un parámetro desconocido que intenta explicar las variaciones de las poblaciones bacterianas. Por esto es que el modelo de proceso cuenta de dos estados, en el cual el primero corresponde al amonio, y el segundo es un “estado artificial” (concepto de evolución artificial). Si el sistema es observable, el PF podrá estimar ambos estados a medida que se van iterando las secuencias de predicción-actualización.

5.1.3. Modelamiento en espacio de estados: Ecuación de observación

De manera análoga al modelo de proceso, se buscó una *Característica* correlacionada con la degradación de amonio, que tenga un rango entre [0,1] y que sea una función monótona decreciente. Para cumplir con las consideraciones planteadas, se define una nueva *Característica* a partir de la variable manipulada Pulsos de Carbonato, debido a que ésta presenta una tendencia mucho más definida que la variable %AVO en la mayor parte de los ciclos SBR analizados. La definición y ecuación de esta nueva *Característica* se muestra a continuación.

Pulses Rate Function (P_{RF}): Se define como la división entre la sumatoria de pulsos de carbonato dentro de la ventana de tiempo previamente definida y la sumatoria total de pulsos que se van generando a medida que se ejecuta el ciclo, siendo todo esto elevado a la potencia de 0.2 (Ec. 5.4).

$$P_{RN} = \left(\frac{\sum \text{Pulsos de Carbonato}_{[Ventana \text{ de tiempo}]}}{\sum \text{Pulsos de Carbonato}_{[Ciclo]}} \right)^{0.2} \quad (5.4)$$

Para la Ecuación de Observación se considera que la *Característica* P_{RN} debe ser función tanto del amonio como del parámetro α definido para la ecuación de proceso. Por consiguiente, y a través del uso de herramientas de ajuste de curvas, la ecuación que modela la dinámica de la *Característica* se presenta en Ec.5.5.

$$\begin{aligned} \mathbf{Característica}(k+1) &= 0.4094 \cdot \mathbf{e}^{((\alpha(k))^{0.5} \cdot \mathbf{amonio}(k+1))} - (\alpha(k))^{0.2} \\ &\cdot \mathbf{e}^{(-138.7 \cdot \mathbf{amonio}(k+1))} + (\alpha(k))^{0.7} \\ &\cdot \mathbf{e}^{(\mathbf{amonio}(k+1))^{12}} + \nu(k) \end{aligned} \quad (5.5)$$

Finalmente, un ejemplo de los datos de P_{RN} versus el modelo definido en Ec. 5.5 se muestra en la Figura 5.3. Como métrica de error, se obtiene un valor RMSE de 0.01095 entre ambas curvas.

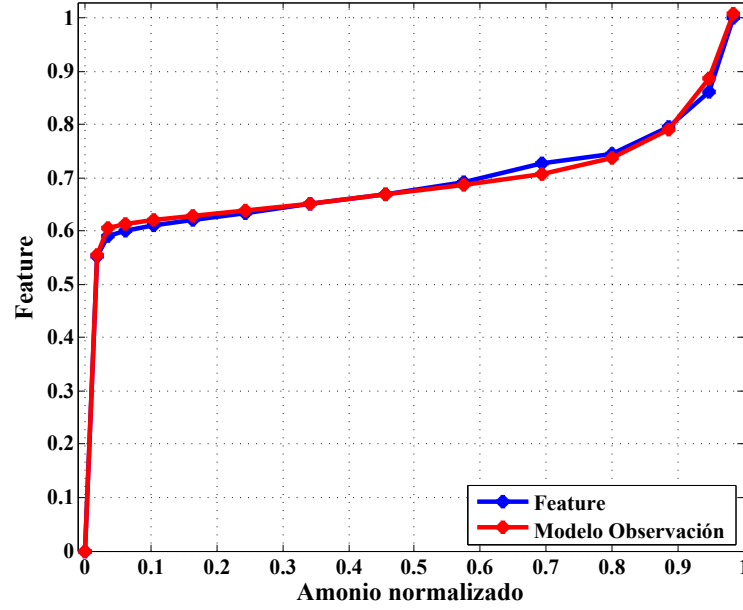


Figura 5.3: Modelo *Característica*.

5.1.4. Modelo en espacio de estados para estimación y pronóstico basado en Filtro de Partículas

A modo de resumir lo expuesto a lo largo del capítulo, el modelo en espacio de estado discreto, que finalmente se utiliza en conjunto con algoritmos de estimación y pronóstico basados en PF se expone en Ec. 5.6.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{amonio}(k+1) &= \mathbf{e}^{(-\alpha(k) \cdot T_s^{2.5} \cdot ((k+1)^{2.5} - k^{2.5}))} \cdot \mathbf{amonio}(k) + \omega_1(k) \\
 \alpha(k+1) &= \alpha(k) + \omega_2(k)
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{Característica}(k+1) &= 0.4094 \cdot \mathbf{e}^{((\alpha(k))^{0.5} \cdot \mathbf{amonio}(k+1))} - (\alpha(k))^{0.2} \\
 &\quad \cdot \mathbf{e}^{(-138.7 \cdot \mathbf{amonio}(k+1))} + (\alpha(k))^{0.7} \\
 &\quad \cdot \mathbf{e}^{(\mathbf{amonio}(k+1))^{12}} + \nu(k)
 \end{aligned}$$

5.1.5. Parámetros del Filtro de Partículas para estimación

El PF fue implementado utilizando los parámetros descritos a continuación:

- Número de partículas = 1000.
- Ruido de proceso $\omega_1 \sim \mathcal{N}(0, 0.000324)$
- Ruido de proceso $\omega_2 \sim \mathcal{N}(0, 0.0016)$
- Ruido de observación $\nu \sim \mathcal{N}(0, 0.0016)$
- Condición inicial $\text{amonio}(0) \sim \mathcal{U}(0.99, 1)$
- Condición inicial $\alpha(0) \sim \mathcal{U}(0.07, 0.15)$
- Se añaden 2 OFCL que actúan sobre $\omega_1(k)$ y $\omega_2(k)$ cuando el amonio estimado sea menor o igual a 0.8. Por lo que una vez activados los ruidos de proceso quedan:
 - $\omega_1 \sim \mathcal{N}(0, 3.24e - 06)$
 - $\omega_2 \sim \mathcal{N}(0, 1.6e - 05)$
- Los estadísticos que son considerados para la estimación son: valor esperado e intervalo de confianza de 95%.

5.1.6. Consideraciones para la etapa de pronóstico basado en Filtro de Partículas

- El pronóstico comienza una vez que el amonio estimado es igual o menor 0.7 mg N/L.
- Para la representación de la incertidumbre en la etapa de pronóstico, se considera el uso de regularización con una versión escalada del *kernel* de Epanechnikov (Visto en Sección 2).
- El término del pronóstico (que para este caso se denomina EoP: End of Phase) se considera cuando se alcance un **JITP_{0.95}** (En lo que respecta a degradación de amonio, hay que asegurar su máxima degradación).

5.2. Resultados

5.2.1. Resultados Estimación

Se eligieron 3 ciclos de operación SBR de la base de datos, cada uno de estos ciclos contiene datos de laboratorio de la concentración de amonio en el reactor, y como se mencionó en el Capítulo 2, el tiempo de muestreo de estos datos experimentales es de aproximadamente 1 hora.

Una característica importante de los ciclos seleccionados es que tienen una separación temporal de mínimo de 45 días. Se identifican como: Ciclo 3 (ejecutado el 12-09-2011), Ciclo 16 (ejecutado el 22-11-2011) y el Ciclo 22 (ejecutado el 06-01-2012). Utilizando el PF con los parámetros definidos, se obtuvieron los gráficos de la estimación del amonio, de α (parámetro artificial) y de la salida filtrada (*Característica*), que se observan en las Figuras 5.4, 5.5 y 5.6.

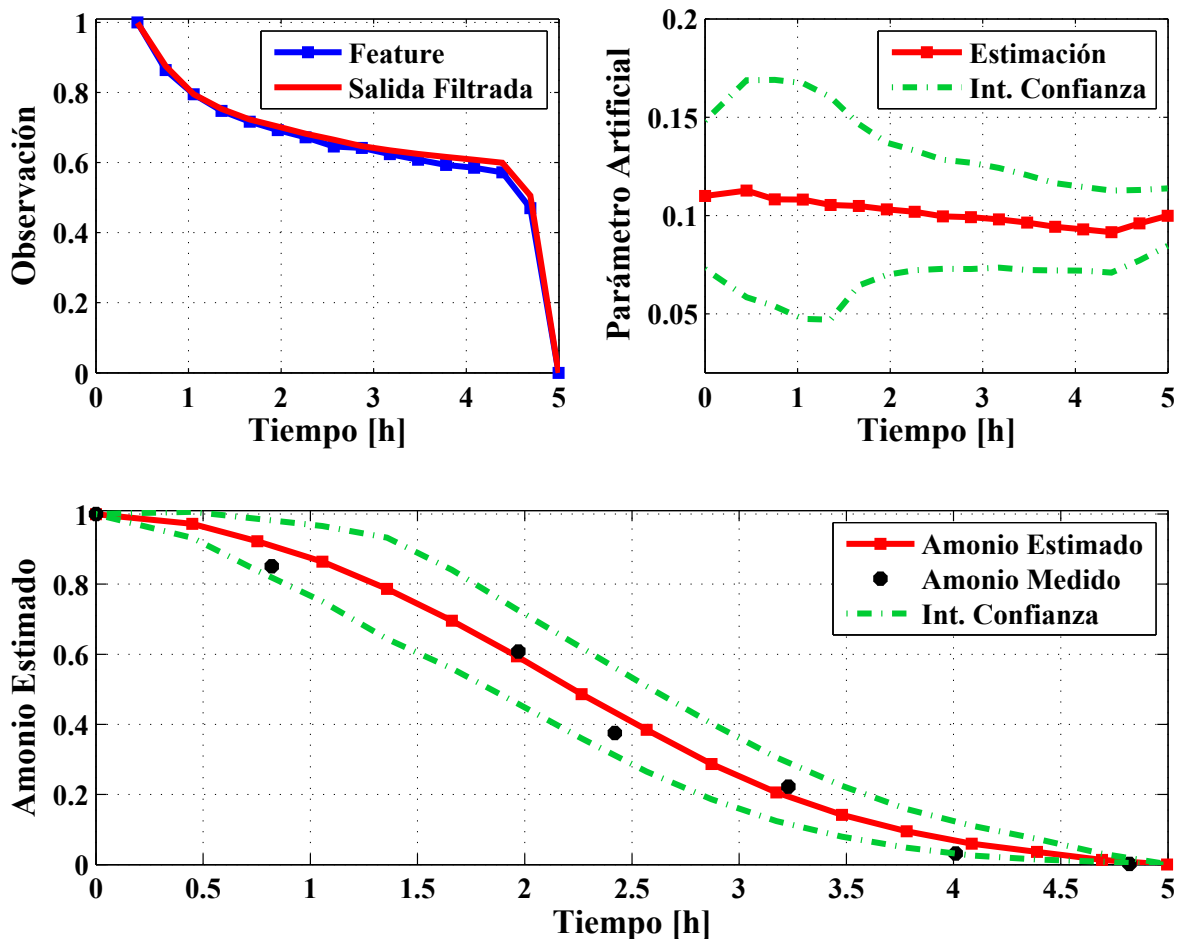


Figura 5.4: Gráficos estimación Ciclo 3: Observación (*Característica*), Parámetro artificial y concentración de amonio.

Como se observa en la Figura 5.4, el PF logra generar una estimación de la concentración de amonio acorde al modelo de proceso y a las observaciones de la *Característica*. El valor RMSE entre los datos experimentales y los datos estimados de amonio es igual a 0.0373. Además, el intervalo de confianza calculado, logra capturar los datos reales en su totalidad. En cuanto a la observación estimada, el valor RMSE entre la *Característica* observada y la salida filtrada es igual a 0.0163.

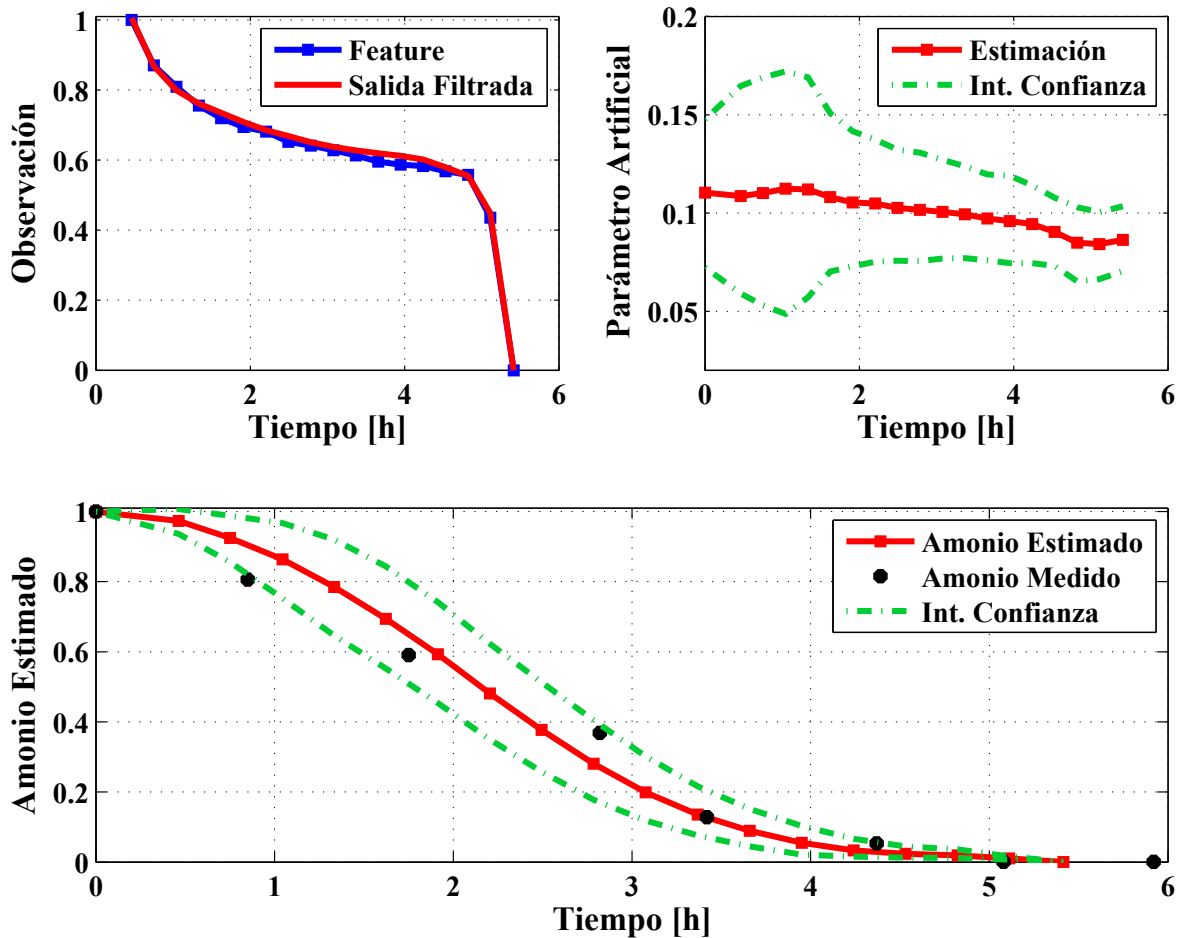


Figura 5.5: Gráficos estimación Ciclo 16: Observación (*Característica*), Parámetro artificial y concentración de amonio.

Con respecto al Ciclo 16 (Figura 5.5), el valor RMSE obtenido entre los datos experimentales y los datos estimados de la concentración de amonio es igual a 0.0586. Además, el intervalo de confianza calculado no logra capturar el 100 % de los datos reales (dato del plano amonio vs tiempo (0.85;0.81) queda fuera del intervalo de confianza). En cuanto a la observación estimada, el valor RMSE entre la *Característica* observada y la salida filtrada es igual a 0.0140.

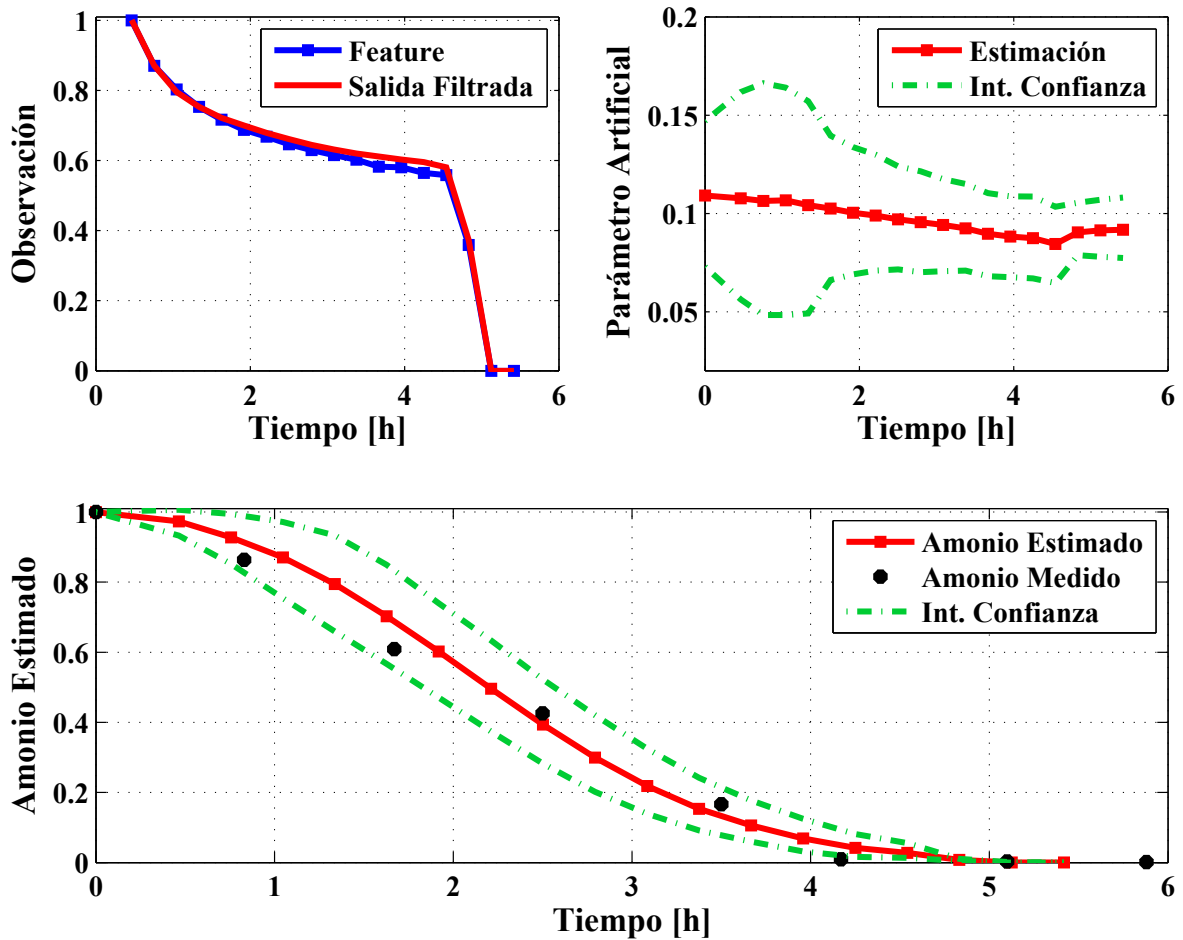


Figura 5.6: Gráficos estimación Ciclo 22: Observación (*Característica*), Parámetro artificial y concentración de amonio.

Para el Ciclo 22 (Figura 5.6), el valor RMSE entre los datos experimentales y los datos estimados de la concentración de amonio es igual a 0.0397. Además, el intervalo de confianza calculado no logra capturar el 100 % de los datos reales (dato del plano amonio vs tiempo (4.17;0.01) queda fuera del intervalo de confianza). En cuanto a la observación estimada, el valor RMSE entre la *Característica* observada y la salida filtrada es igual a 0.0175.

5.2.2. Resultados Pronóstico

A modo de probar la funcionalidad del esquema de pronóstico propuesto, se escogieron los mismos 3 ciclos SBR utilizados anteriormente en la propuesta de estimación. A partir de lo mencionado, se generó pronóstico del EoP en el reactor utilizando un esquema basado en PF a partir de las consideraciones previamente definidas. Los resultados obtenidos se muestran en las Figuras 5.7, 5.8 y 5.9.

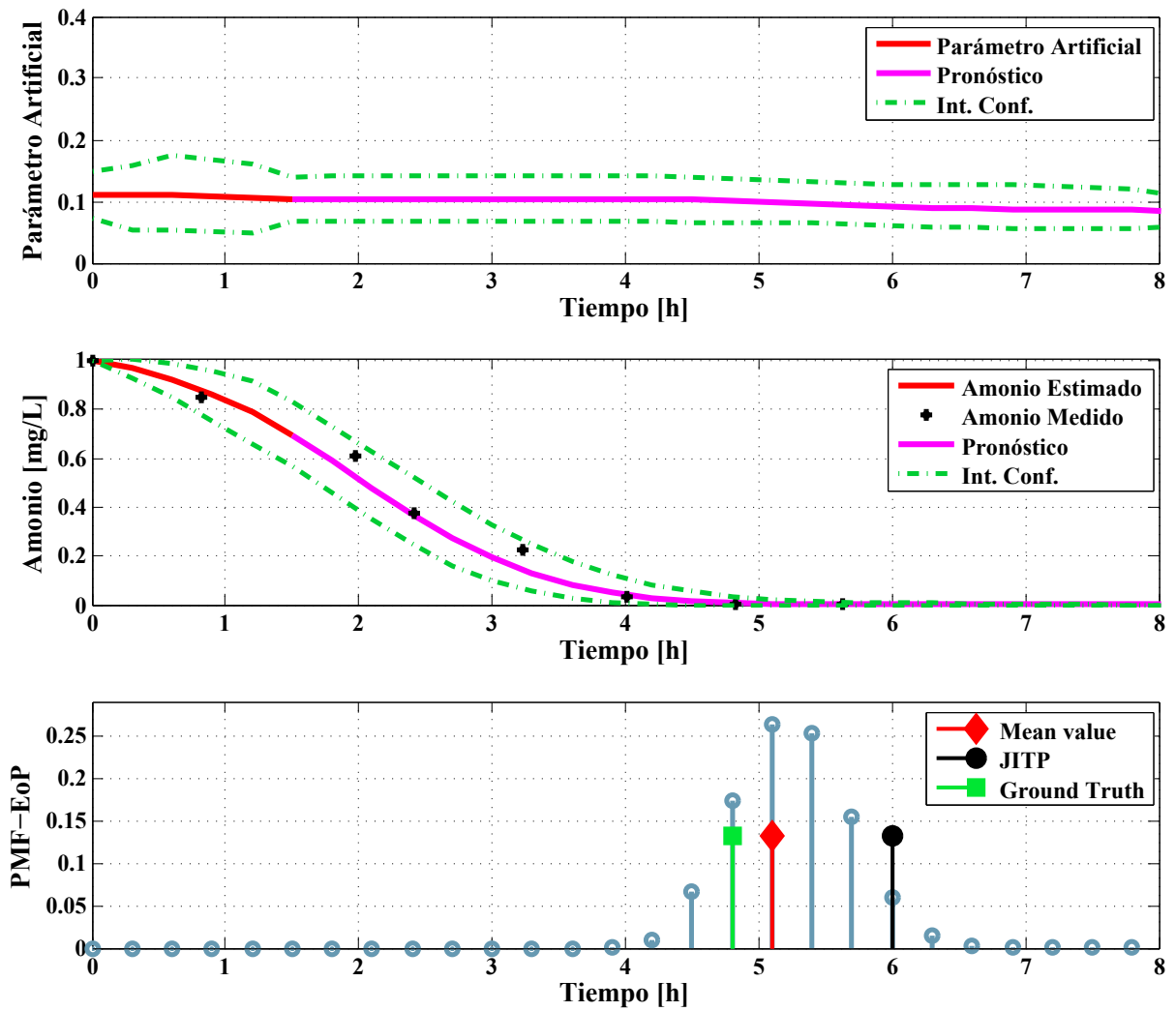


Figura 5.7: Gráficos de los resultados del algoritmo de pronóstico para el Ciclo 3. Se incluyen los gráficos del parámetro artificial, concentración de amonio en el reactor y PMF-EoP.

En la Figura 5.7 se observa que el *ground truth* de EoP es 4.8 [h], mientras que el valor medio calculado a partir de la PMF-EoP (PMF: Probability Mass Function) es de 5.1 [h] y el $JITP_{0.95}$ es igual a 6 [h]. Además se calculó un valor RMSE igual a 0.0417 entre la estimación/pronóstico y los datos de laboratorio. En cuanto al intervalo de confianza, éste logra envolver los datos reales en su totalidad.

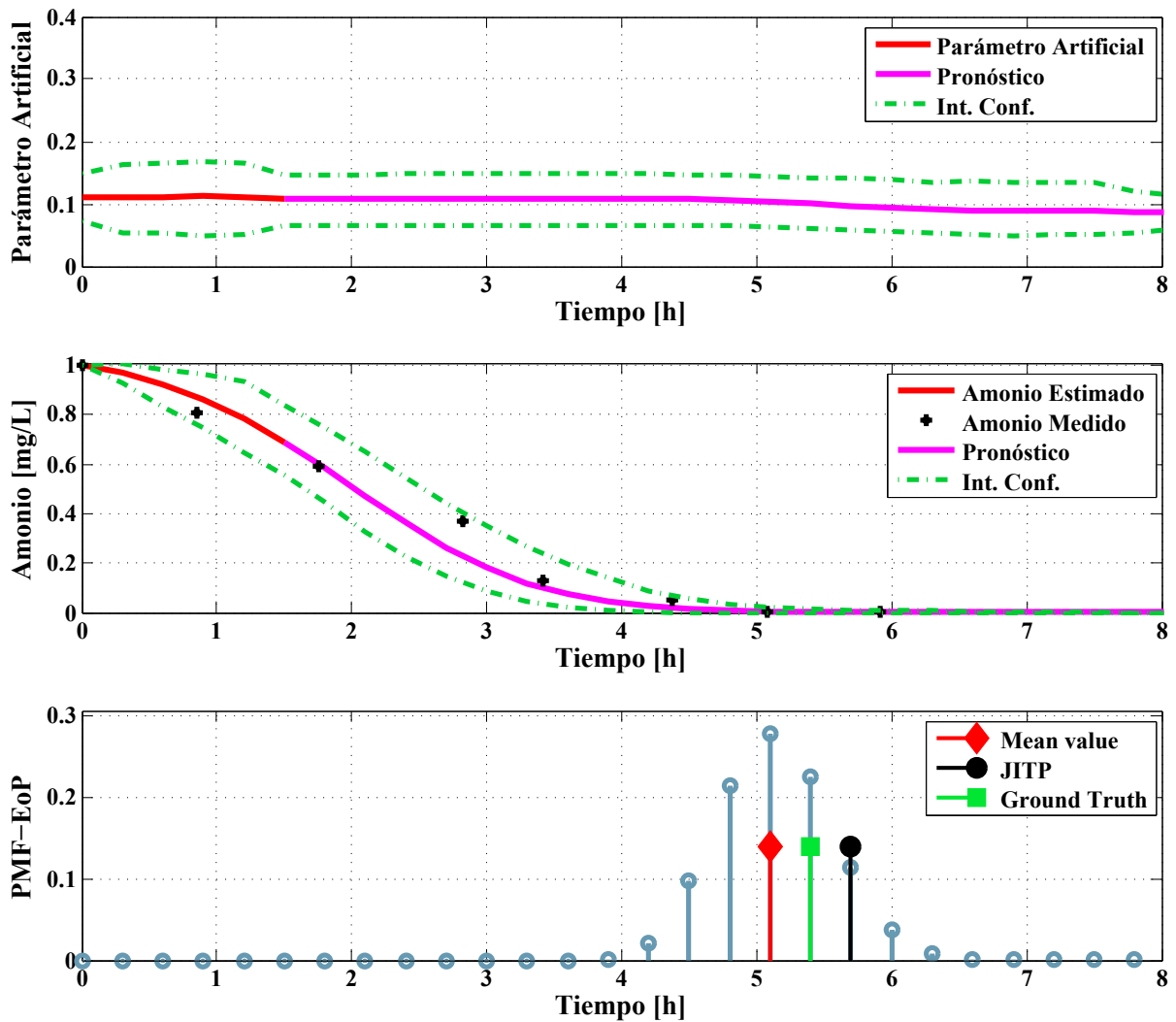


Figura 5.8: Gráficos de los resultados del algoritmo de pronóstico para el Ciclo 16. Se incluyen los gráficos del parámetro artificial, concentración de amonio en el reactor y PMF-EoP.

Para la Figura 5.8 el *ground truth* del EoP es 5.4 [h]. El valor medio calculado a partir de la PMF-EoP es de 5.1 [h] y el $JITP_{0.95}$ es igual a 5.7 [h]. El valor RMSE entre la estimación/-pronóstico y los datos de laboratorio es igual a 0.0543. Y el intervalo de confianza calculado logra envolver los datos reales en su totalidad.

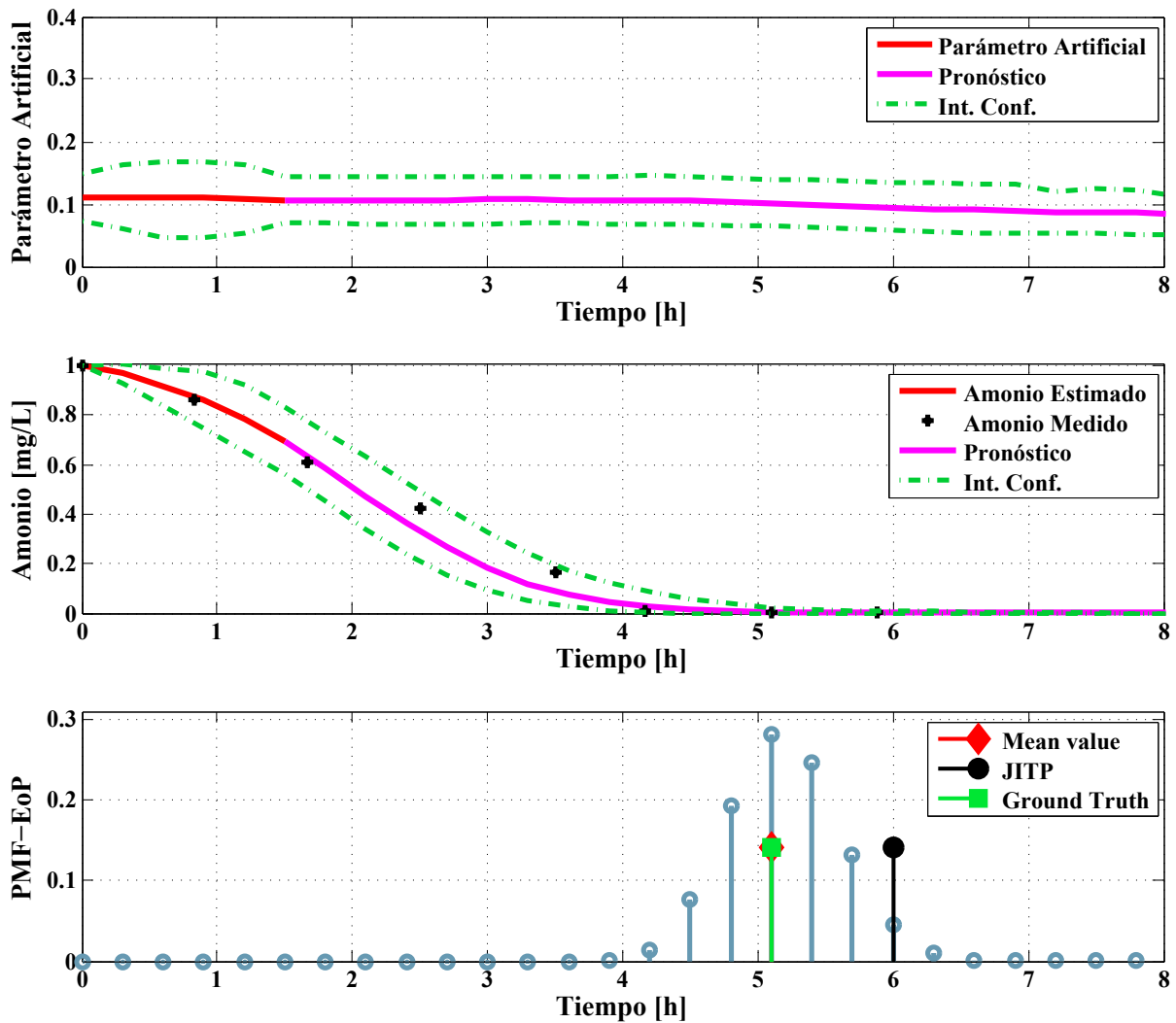


Figura 5.9: Gráficos de los resultados del algoritmo de pronóstico para el Ciclo 22. Se incluyen los gráficos del parámetro artificial, concentración de amonio en el reactor y PMF-EoP.

Y para la Figura 5.9 el *ground truth* del EoP es de 5.1 [h]. El valor medio calculado a partir de la PMF-EoP es de 5.1 [h] y un $JITP_{0.95}$ igual a 6 [h]. El valor RMSE entre la estimación/pronóstico y los datos de laboratorio es igual a 0.0431. Y el intervalo de confianza calculado logra envolver los datos reales en su totalidad.

5.3. Discusión

Como se ha comentado anteriormente, en lo que respecta a estimación de estados para el proceso de BNR, las redes neuronales y los modelos neuro-difusos han sido el motor que ha impulsado esta área. Sin embargo siguen existiendo brechas importantes que requieren de propuestas novedosas. Dentro de estas brechas se pueden nombrar la falta de modelos más

simples (o más intuitivos) para los estados que requieren ser estimados.

Del mismo modo, los enfoques propuestos deben poder adaptarse a las características variantes en el tiempo, no-linealidades e incertidumbres inherentes de la BNR. Ante esto, las herramientas de filtrado Bayesiano pueden ser una interesante alternativa que permita acortar las brechas mencionadas, ya que proporciona la teoría necesaria para trabajar con modelos no lineales, variantes en el tiempo y con ruidos de modelado/medición no Gaussianos.

Además, la estimación de estados resulta de gran ayuda para la operación (y a los operadores) del proceso de BNR, ya que les permite tener un monitoreo en línea de las variables críticas, y por consiguiente, tomar decisiones en el momento. Esta utilidad también abre una nueva brecha, que corresponde a tener conocimiento (o un “monitoreo”) de las variables críticas en el futuro, o dicho de otro modo, proyectar el vector de estados hacia el futuro con el fin de pronosticar los tiempos en que la BNR finaliza. Esto puede permitir planificar de manera más eficiente los litros de agua tratada por día en las plantas de tratamiento de aguas, y/o poder ser incorporados en los algoritmos que elaboran el diseño de estas plantas.

5.3.1. Análisis modelos de proceso y observación

El modelo empírico obtenido para la concentración de amonio en el reactor (modelo de proceso) cumple con ser simple en el sentido de estar compuesto por 1 solo parámetro, el cual permite explicar las características no-lineales y variantes en el tiempo de las poblaciones bacterianas. Como métrica para medir el error de modelado se utilizó el valor RMSE. Para este caso, valor obtenido del modelo, con los datos de entrenamiento fue de 0.0388.

Con respecto al modelo de observación, este modelo logra representar la tendencia de la *Característica* observada a partir de una estructura un poco más compleja (suma de dos exponenciales y cuatro parámetros). Pero como el comportamiento de la *Característica* también depende del comportamiento de las bacterias, fue posible representar el modelo de observación como una función no-lineal dependiente del amonio y del parámetro α . Con esto el modelo de observación, puede adaptarse a los cambios en el largo plazo inherentes al proceso de BNR. Al igual que para el caso del modelo de proceso, se utilizó la métrica RMSE para medir el error de modelado, el cual fue de 0.01095.

5.3.2. Análisis resultados de estimación de amonio

Los resultados mostraron que el algoritmo de estimación basado en PF logra ajustarse a la tendencia de los datos de amonio obtenidos de manera experimental. El valor RMSE calculado para los 3 ciclos de prueba, tanto en la estimación de amonio, como para la salida filtrada, logra ser del mismo orden que el obtenido por el método de ajuste de curvas utilizado con el ciclo de prueba (ver resumen valores RMSE estimación de amonio en Tabla 5.1 y para la salida filtrada 5.2). Esto demuestra que el método de estimación propuesto logra adaptarse a las características no-lineales y variantes en el tiempo del proceso de BNR.

Tabla 5.1: Valores RMSE obtenidos de la estimación amonio en el reactor versus datos de laboratorio.

	Ciclo de prueba	Ciclo 3	Ciclo 16	Ciclo 22
RMSE	0.0388	0.0373	0.0586	0.0397

Tabla 5.2: Valores RMSE obtenidos de la salida filtrada versus observaciones.

	Ciclo de prueba	Ciclo 3	Ciclo 16	Ciclo 22
RMSE	0.01095	0.0163	0.0140	0.0175

La elección de los ruidos de proceso y de observación, junto con la inclusión de los OFCL, forman un pilar fundamental para un correcto desempeño del filtrado, ya que permitieron al PF obtener una PDF del estado que representa a los datos obtenidos por laboratorio. Ya que en los 3 ciclos de prueba, el intervalo de confianza logra capturar prácticamente todos los datos de laboratorio.

Por su parte, la inclusión del parámetro artificial α también resultó ser crucial en la adaptación del filtro a los cambios del proceso de BNR. Este parámetro permitió que el amonio estimado se ajustara a los datos de laboratorio, y que del mismo modo, la salida filtrada se ajustara a la *Característica* observada. Esto queda demostrado por los valores RMSE resumidos en las Tablas 5.1 y 5.2, en los cuales, los valores obtenidos en la etapa de prueba del filtro, se mantienen en el mismo orden que el valor obtenido en la etapa de entrenamiento.

Finalmente, es importante mencionar que los datos experimentales tienen un tiempo de muestreo de aproximadamente 1 hora, lo que hace que se tengan pocos datos para cada ciclo. Por lo que, para un trabajo futuro, sería importante realizar experimentos en donde se tengan datos de laboratorio con tiempo de muestreo menor, para así buscar una estructura que mejore la precisión del modelo de proceso. De manera análoga a los datos de sensores (los cuales tienen un tiempo de muestreo de 1 minuto), se puede disminuir el tiempo de muestreo, con el fin de buscar mejorar la extracción/fusión de características para así obtener modelos de observación más precisos.

5.3.3. Análisis resultados del pronóstico del término de fase aeróbica

Con respecto al pronóstico del EoP, los resultados muestran que la PMF de la EoP logra caracterizar el término de fase de los ciclos de prueba, a pesar de las características variantes en el tiempo del proceso de BNR. Ya que se propuso un $JITP_{0.95}$ como término del algoritmo de pronóstico, y para los 3 ciclos de prueba el valor *ground truth* del EoP estuvo dentro del intervalo de confianza (95%).

La estimación y posterior pronóstico también se ajustó a los datos de laboratorio, ya que el intervalo de confianza calculado a partir de la PDF vector de estados logra capturar en su totalidad a los datos experimentales. Lo que da a entender que la elección del modelo de proceso, y el método que proyecta la incertidumbre en el tiempo fueron los adecuados para el problema planteado. Una forma de medir esto es a través del valor RMSE entre la estimación pronóstico versus los datos experimentales, en la Tabla 5.3 se resumen estos valores, y al igual que para el caso de estimación, los valores obtenidos se encuentran dentro del mismo orden de magnitud que el valor RMSE obtenido para el ajuste del modelo de proceso en la etapa de entrenamiento.

Tabla 5.3: Valores RMSE obtenidos de la estimación/pronóstico del amonio en el reactor versus datos de laboratorio.

	Ciclo de prueba	Ciclo 3	Ciclo 16	Ciclo 22
RMSE	0.0388	0.0417	0.0543	0.0431

Es importante mencionar también que una de las características de la proyección de la incertidumbre en los algoritmos de pronóstico, es que ésta va aumentando en cada instante de tiempo. Para el caso del problema planteado la incertidumbre no aumenta, sino que va disminuyendo a medida que el valor de la concentración de amonio estimada tiende a cero. Esto principalmente se debe a la estructura del modelo y a la acción del OFCL, que permiten acotar la incertidumbre en pocos instantes de tiempo.

Finalmente, y del mismo modo como se mencionó en el análisis de resultados para estimación, sería interesante analizar un cambio en el tiempo de muestreo de los sensores, ya que se podrían obtener *Características* con una ventana de tiempo menor, lo que permitiría tener una PMF distribuida sobre un mayor número de masas de probabilidad, con el fin de mejorar los cálculos de los estadísticos asociados a esta PMF y por ende, mejorar los resultados del pronóstico del EoP.

Capítulo 6

Conclusiones

Dentro de la revisión bibliográfica (Capítulo 1), un número relevante de estudios recientes proponen estrategias para mejorar el desempeño de la fase de nitrificación en SBRs. La estrategia de *bending points* es la más usada para determinar la duración de la fase aeróbica cuando no existe control en lazo cerrado de pH y DO. Sin embargo, el control en lazo cerrado de pH y DO parece ser más adecuado para lograr nitrificación parcial. En base a esto es que las futuras investigaciones se deben enfocar en integrar de manera apropiada las herramientas de estimación de estados, inteligencia artificial, modelos de lodos activados y modelos basados en datos para predecir el comportamiento dinámico de los procesos de BNR en el corto y largo plazo.

Con respecto a las simulaciones generadas en el Capítulo 3, se desprende que para mejorar la eficiencia del proceso de BNR en SBRs operando bajo nitrificación parcial, es completamente necesario poder contar con una estrategia de término de fase aeróbica que no genere retardos una vez que se determine de forma segura la condición de $0 \leq a_{monio} < norma_{ambiental\ local}$. Estas mejoras son estables en el largo plazo y constituyen el aumento de la población de X_{AOB} y el lavado de X_{NOB} , lo que implica un menor consumo de oxígeno y una menor duración de las fases aeróbica/anóxica (ciclos más cortos).

En cuanto a la estrategia de estimación del término de la fase aeróbica propuesta en el Capítulo 4. Las características extraídas (Pulses Rate and Power of the signal %AVO) mostraron ser fundamentales para obtener patrones representativos del punto de término de la fase aeróbica. Esto a pesar de los cambios en las condiciones de operación del reactor y de las características no-lineales y variantes en el tiempo del proceso de nitrificación. Desde el punto de vista de clasificación binaria, las características seleccionadas siempre permitieron tener una separabilidad entre las clases definidas en este trabajo. De acuerdo a los resultados de la clasificación, un 100 % de exactitud fueron obtenidos, tanto para la base de datos de entrenamiento como para la de prueba, validando de este modo, las características seleccionadas y el desempeño de la etapa de entrenamiento. El uso de esta metodología, en comparación con trabajos previos permitieron una reducción total de los tiempos de las fases aeróbicas de aproximadamente 7.52 % (correspondiente a 9.54 días). La mayoría de los tiempos de duración de las fases aeróbicas en la base de datos analizada, tuvo una reducción de los tiempos de alrededor de 20 minutos, aunque también hay casos en donde se obtuvo una reducción de

tiempo mayores a 60 minutos.

En el Capítulo 5 se propuso un algoritmo de estimación del amonio en el reactor y pronóstico del término de fase aeróbica basado en PF. Los modelos de proceso y observación propuestos (etapa de entrenamiento) logran ajustarse adecuadamente a los datos experimentales (valor RMSE 0.0388) y la feature medida respectivamente (valor RMSE 0.01095). En cuanto a la estimación del amonio en el reactor (etapa de prueba), el algoritmo basado en PF fue capaz de adaptarse a las características variantes en el tiempo del proceso de BNR, gracias a la inclusión del parámetro artificial α y a los OFCL. La PDF *a posteriori* del vector de estados calculada para cada instante de tiempo por el procesador Bayesiano, logra representar adecuadamente los datos experimentales del amonio. Esto se puede observar a través de dos de sus estadísticos: el valor medio, el cual representa la tendencia de los datos experimentales de amonio (cuyo valor RMSE para los 3 ciclos de prueba se encuentra en el mismo orden de magnitud que el valor RMSE obtenido por el ajuste de curvas en la etapa de entrenamiento), y el intervalo de confianza del 95 % (el cual logra capturar prácticamente en su totalidad los datos experimentales de amonio para los 3 ciclos de prueba). Junto con la estimación del amonio, se propuso también un algoritmo de pronóstico del término de la fase aeróbica basado en PF. Al igual que el algoritmo de estimación, el algoritmo de pronóstico logra adaptarse a las características no-lineales y variantes en el tiempo. Los resultados muestran que la PMF de la EoP logra capturar el valor *ground truth* para los 3 ciclos de prueba.

6.1. Trabajo Futuro

Se propone como trabajo futuro en cuanto a simulaciones se trata, la incorporación de incertidumbre en algunas variables críticas del proceso, por ejemplo pH, DO, condición inicial de concentración de amonio y población de bacterias X_{AOB}/X_{NOB} , por nombrar algunos. Aunque esto implica tener que gastar mucho más tiempo de cómputo, permitiría obtener resultados más representativos de las no-linealidades e incertidumbres del proceso de BNR.

Con respecto a la estimación en línea del término de la fase aeróbica, se propone estudiar la influencia de la metodología propuesta en este trabajo de Tesis sobre el desempeño de la nitrificación parcial en SBRs en el largo plazo. También se propone implementar esta estrategia en sistemas (nitrificación-desnitrificación o nitrificación parcial) donde otro tipo de variables deben ser monitoreadas para estimar el término de la fase aeróbica.

En relación con los algoritmos de estimación y pronóstico, se propone realizar nuevos experimentos para extraer datos de concentración de amonio, con el fin de obtener modelos de procesos más precisos. Del mismo modo, revisar el tiempo de muestreo de los sensores, con el fin de mejorar el tiempo de muestreo de las *Características* extraídas, y de este modo, poder mejorar los resultados de estimación en línea del amonio y pronóstico del EoP.

Anexos

A1. Modelo de nitrificación-desnitrificación

Tabla A1: Variables de Estado

C_{TAN}	Concentración de amonio	mg N L ⁻¹
$C_{\text{NO}_2^-}$	Concentración de nitrito	mg N L ⁻¹
$C_{\text{NO}_3^-}$	Concentración de nitrato	mg N L ⁻¹
C_{ND}	Nitrógeno orgánico soluble biodegradable	mg N L ⁻¹
C_{S}	Materia orgánica fácilmente biodegradable	mg COD L ⁻¹
X_{AOB}	Concentración de bacterias amonio-oxidantes	mg COD L ⁻¹
X_{NOB}	Concentración de bacterias nitrito-oxidantes	mg COD L ⁻¹
X_{H}	Concentración de bacterias heterotróficas	mg COD L ⁻¹
X_{P}	Productos inertes	mg COD L ⁻¹
X_{S}	Materia orgánica lentamente biodegradable	mg COD L ⁻¹
X_{ND}	Nitrógeno orgánico particulado biodegradable	mg N L ⁻¹
S_{N_2}	Nitrógeno gaseoso liberado por desnitrificación	mg N L ⁻¹

Tabla A2: Parámetros relacionados a las AOB

Símbolo	Valor	Nombre	Unidad	Referencias
$K_{\text{DO,AOB}}$	0.99	Constante de saturación concentración de oxígeno para AOB	mg O ₂ L ⁻¹	[30]
$K_{\text{S,AOB}}$	0.3	Constante de saturación para AOB	mg NH ₃ – NL ⁻¹	[30]
$K_{\text{IS,AOB}}$	540	Inhibición por sustrato para AOB	mg NH ₃ – NL ⁻¹	[123]
Y_{A}	0.2	Constante de rendimiento AOB	g COD g ⁻¹ N	[123]

Tabla A3: Parámetros relacionados a las NOB

Símbolo	Valor	Nombre	Unidad	Referencias
$K_{DO,NOB}$	1.4	Constante de saturación concentración de oxígeno para NOB	mg O ₂ L ⁻¹	[30]
$K_{S,NOB}$	2.2e-4	Constante de saturación para NOB	mg HNO ₂ – NL ⁻¹	[30]
$K_{IS,NOB}$	0.260	Inhibición por sustrato para NOB	mg HNO ₂ – NL ⁻¹	[123]
Y_N	0.06	Constante de rendimiento NOB	g COD g ⁻¹ N	[123]

Tabla A4: Parámetros relacionados a las bacterias heterotróficas

Símbolo	Valor	Nombre	Unidad	Referencias
$K_{O,H}$	0.2	Constante de afinidad para S _{O2}	mg O ₂ L ⁻¹	[52]
$K_{S,H}$	4	Constante de afinidad para S _S	mg COD L ⁻¹	[52]
Y_H	0.67	Constante de rendimiento para bacterias heterotróficas	g COD g ⁻¹ COD	[52]

Tabla A5: Otros parámetros

Símbolo	Valor	Nombre	Unidad	Referencias
k_a	0.003	Tasa de amonificación	L mg ⁻¹ COD h ⁻¹	[52]
k_h	0.13	Tasa específica máxima de hidrólisis	g COD g ⁻¹ COD h ⁻¹	[52]
k_X	0.03	Constante de afinidad para X _S	g COD g ⁻¹ COD	[52]
i_{XB}	0.086	Contenido de nitrógeno de X _A , X _N , X _H	g N g ⁻¹ COD	[52]
i_{XP}	0.06	Contenido de nitrógeno de X _P	g N g ⁻¹ COD	[52]
f_P	0.08	Fracción de biomasa que conduce a X _P	g COD g ⁻¹ COD	[52]
$\eta_{NO_3 \rightarrow NO_2}$	0.18	Factor de corrección	[]	[37]
$\eta_{NO_2 \rightarrow N_2}$	0.78	Factor de corrección	[]	[37]
K_{NO_2}	0.9	Constante de saturación para el nitrito	mg NO ₂ – NL ⁻¹	[37]
K_{NO_3}	1.4	Constante de saturación para el nitrato	mg NO ₃ – NL ⁻¹	[37]

Tabla A6: Constantes de ionización

Constante de ionización para el amonio	Constante de ionización para el ácido nitroso
$K_a = e^{(6334/(273+T))}$	$K_n = e^{(-2300/(273+T))}$

Tabla A7: Tasa específica máxima de crecimiento [h⁻¹]

AOB	$\mu_{\max, \text{AOB}} = \frac{1.28 \times 10^{12} \cdot e^{(-8183/(273+T))}}{1 + ((2.05 \times 10^{-9})/10^{-\text{pH}}) + (10^{-\text{pH}}/(1.66 \times 10^{-7}))} \cdot \frac{1}{24}$
NOB	$\mu_{\max, \text{NOB}} = \frac{6.69 \times 10^7 \cdot e^{(-5295/(273+T))}}{1 + ((2.05 \times 10^{-9})/10^{-\text{pH}}) + (10^{-\text{pH}}/(1.66 \times 10^{-7}))} \cdot \frac{1}{24}$
Heterotróficas	$\mu_{\max, \text{H}} = 6 \cdot (1.07)^{(T-20)} \cdot \frac{1}{24}$

Tabla A8: Tasa de decaimiento [h⁻¹] [59]

AOB	NOB	Heterotróficas
$b_A = \frac{1.651 \times 10^{11} \cdot e^{(\frac{-8183}{273+T})}}{24}$	$b_N = \frac{8.626 \times 10^6 \cdot e^{(\frac{-5295}{273+T})}}{24}$	$b_H = \frac{0.4 \cdot (1.07)^{(T-20)}}{24}$

Tabla A9: Concentraciones amoniaco y óxido nitroso [mg · N/L] [59]

Concentración de NH₃ – N	Concentración de HNO₂ – N
$C_{\text{NH}_3} = \frac{C_{\text{TAN}} \cdot 10^{\text{pH}}}{K_a + 10^{\text{pH}}} \cdot \frac{17}{14}$	$C_{\text{HNO}_2} = \frac{C_{\text{NO}_2^-}}{1 + K_n \cdot 10^{\text{pH}}} \cdot \frac{47}{14}$

Tabla A10: Procesos cinéticos

Procesos	Ecuaciones
1. Crecimiento aeróbico de X_{AOB}	$\mu_{\max,AOB} \cdot \frac{C_{NH_3}}{K_{S,AOB} + C_{NH_3} + \left(\frac{C_{NH_3}^2}{K_{IS,AOB}}\right)} \cdot \left(\frac{C_{DO}}{K_{DO,AOB} + C_{DO}}\right) \cdot X_{AOB}$
2. Crecimiento aeróbico de X_{NOB}	$\mu_{\max,NOB} \cdot \frac{C_{HNO_2}}{K_{S,NOB} + C_{HNO_2} + \left(\frac{C_{HNO_2}^2}{K_{IS,NOB}}\right)} \cdot \left(\frac{C_{DO}}{K_{DO,NOB} + C_{DO}}\right) \cdot X_{NOB}$
3. Crecimiento aeróbico de X_H	$\mu_{\max,H} \cdot \left(\frac{C_{DO}}{K_{O,H} + C_{DO}}\right) \cdot \left(\frac{C_S}{K_{S,H} + C_S}\right) \cdot X_H$
4. Decaimiento de X_{AOB}	$b_A \cdot X_{AOB}$
5. Decaimiento de X_{NOB}	$b_N \cdot X_{NOB}$
6. Decaimiento de X_H	$b_H \cdot X_H$
7. Amonificación de S_{ND}	$k_a \cdot C_{ND} \cdot X_H$
8. Hidrólisis de X_S	$k_h \cdot \frac{X_S}{K_X + X_S/X_H} \cdot \frac{C_{DO}}{K_{O,H} + C_{DO}}$
9. Hidrólisis de X_{ND}	$k_h \cdot \frac{X_{ND}}{K_X + X_S/X_H} \cdot \frac{C_{DO}}{K_{O,H} + C_{DO}}$
10. Reducción de nitrato a nitrito	$\mu_{\max,H} \cdot \left(\frac{C_S}{K_{S,H} + C_S}\right) \cdot \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + C_{DO}}\right) \cdot \left(\frac{C_{NO_3}}{K_{NO_3} + C_{NO_3}}\right) \cdot \eta_{NO_3 \rightarrow NO_2} \cdot X_H$
11. Reducción de nitrito a nitrógeno gas	$\mu_{\max,H} \cdot \left(\frac{C_S}{K_{S,H} + C_S}\right) \cdot \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + C_{DO}}\right) \cdot \left(\frac{C_{NO_2}}{K_{NO_2} + C_{NO_2}}\right) \cdot \eta_{NO_2 \rightarrow N_2} \cdot X_H$

Tabla A11: Cálculo OUR (Oxygen Uptake Rate)

$$OUR = \frac{(3.43 - Y_A)}{Y_A} \cdot \mathbf{proc}_1 + \frac{(1.14 - Y_N)}{Y_N} \cdot \mathbf{proc}_2 + \frac{(1 - Y_H)}{Y_H} \cdot \mathbf{proc}_3$$

Matriz estequiométrica de parámetros

j	Componente →	i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
	Proceso ↓		C_{TAN}	$C_{NO_2^-}$	$C_{NO_3^-}$	C_{ND}	C_S	X_{AOB}	X_{NOB}	X_H	X_P	X_S	X_{ND}	S_{N_2}
1	Crecimiento aeróbico de X_{AOB}		$\frac{1}{Y_A} - i_{XB}$	$\frac{1}{Y_A}$				1						
2	Crecimiento aeróbico de X_{NOB}		$-i_{XB}$	$-\frac{1}{Y_N} - i_{XB}$	$\frac{1}{Y_N}$				1					
3	Crecimiento aeróbico de X_H		$-i_{XB}$				$-\frac{1}{Y_H}$			1				
4	Decaimiento de X_{AOB}							-1			f_p	$1 - f_p$	$i_{XB} - f_p \cdot i_{XP}$	
5	Decaimiento de X_{NOB}								-1		f_p	$1 - f_p$	$i_{XB} - f_p \cdot i_{XP}$	
6	Decaimiento de X_H									-1	f_p	$1 - f_p$	$i_{XB} - f_p \cdot i_{XP}$	
7	Amonificación de S_{ND}		1			-1								
8	Hidrólisis de X_S						1					-1		
9	Hidrólisis de X_{ND}					1							-1	
10	Reducción de nitrato a nitrito			$\frac{1 - Y_H}{1.14 \cdot Y_H}$	$-\frac{1 - Y_H}{1.14 \cdot Y_H}$		$-\frac{1}{Y_H}$			1				
11	Reducción de nitrito a nitrógeno gas			$-\frac{1 - Y_H}{1.71 \cdot Y_H}$			$-\frac{1}{Y_H}$			1				$\frac{1 - Y_H}{1.71 \cdot Y_H}$

Llamando α_i^j al j-ésimo elemento del i-ésimo estado del proceso, y ρ al j-ésimo proceso cinético. Entonces, las doce ecuaciones de estado se forman a partir de la expresión:

$$\dot{x}_i = \sum_{j=1}^{11} \alpha_i^j \cdot \rho_j \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 12$$

A2. Resultados simulación (continuación)

Caso 1, Amonio de entrada 600 [mg/L]

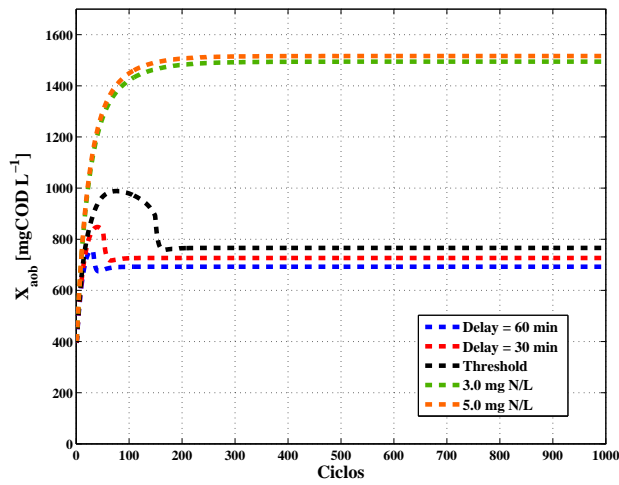
Tabla A12: VEE Caso 1 para entrada de amonio 600 mg N/L.

	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	692.6	205.0	10.1	7.8	17.9	3933.5
Delay 0.75 [h]	709.1	209.6	9.6	7.8	17.4	3901.3
Delay 0.5 [h]	726.9	214.6	9.1	7.7	16.8	3867.6
Delay 0.25 [h]	745.7	219.8	8.6	7.6	16.3	3832.0
Threshold	766.0	225.4	8.2	7.6	15.7	3794.4
Amonio 2.0 [mg N/L]	1469.8	0.0	3.5	4.6	8.0	2649.9
Amonio 3.0 [mg N/L]	1494.5	0.0	3.3	4.5	7.9	2632.7
Amonio 4.0 [mg N/L]	1507.6	0.0	3.2	4.5	7.8	2621.5
Amonio 5.0 [mg N/L]	1516.5	0.0	3.2	4.5	7.7	2612.5
Amonio 6.0 [mg N/L]	1523.2	0.0	3.1	4.5	7.6	2604.5

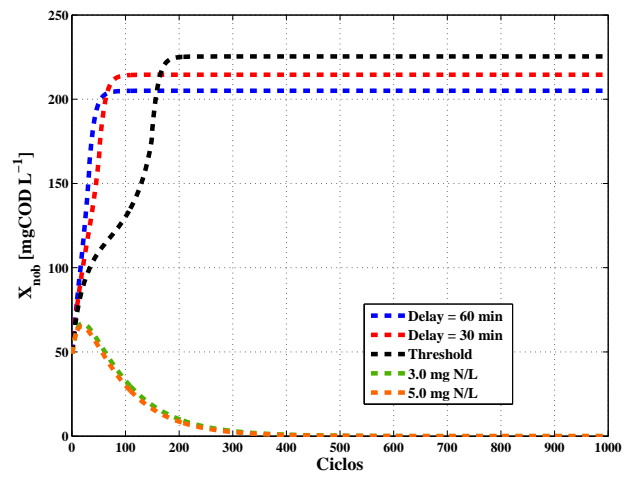
X_{AOB} y X_{NOB} [mg N/L]; T_{Aerob} , T_{Anox} y T_{Ciclo} [h]; **OUR** [mg N/(L · h)].

Tabla A13: CE de las variables analizadas Caso 1 para entrada de amonio 600 mg N/L.

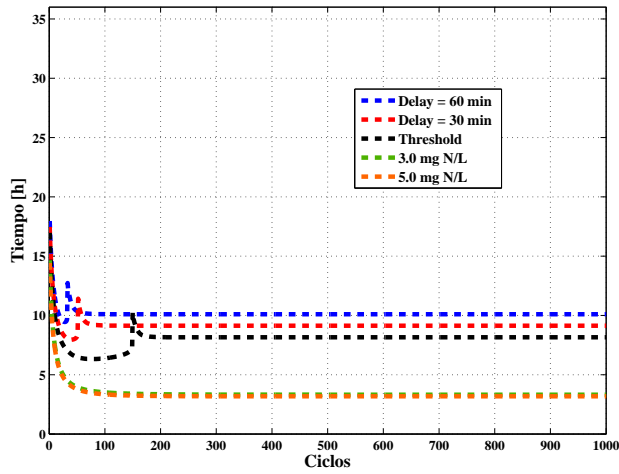
	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	59	63	61	43	56	39
Delay 0.75 [h]	65	70	68	49	63	47
Delay 0.5 [h]	74	82	78	60	73	59
Delay 0.25 [h]	83	105	100	82	95	83
Threshold	158	181	176	158	171	158
Amonio 2.0 [mg N/L]	211	998	235	192	213	172
Amonio 3.0 [mg N/L]	189	998	205	171	188	153
Amonio 4.0 [mg N/L]	182	998	197	163	180	144
Amonio 5.0 [mg N/L]	177	998	190	159	174	139
Amonio 6.0 [mg N/L]	174	998	188	155	171	136



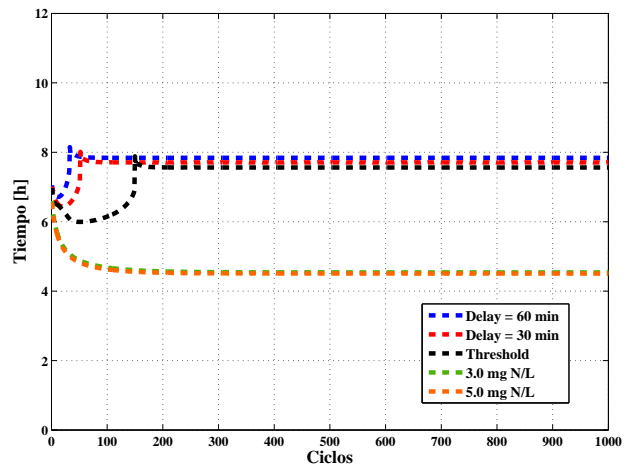
(a) Bacterias Amonio-Oxidantes



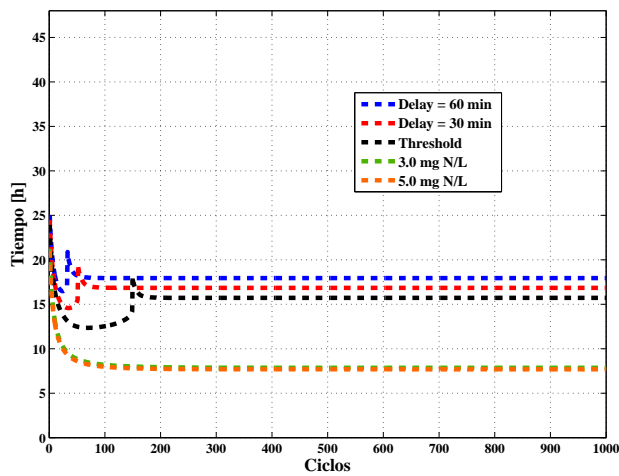
(b) Bacterias Nitrito-Oxidantes



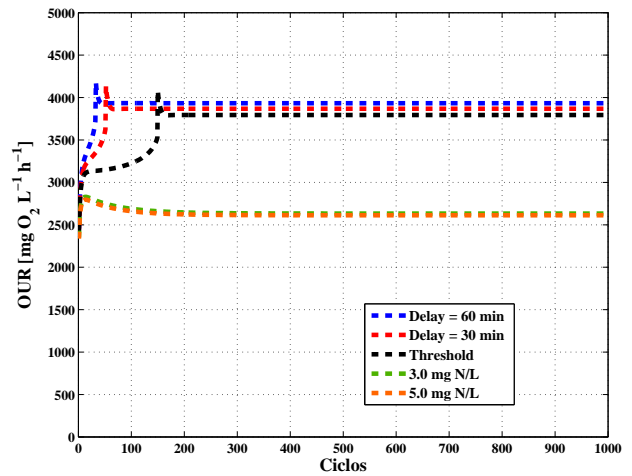
(c) Duración fases aeróbicas



(d) Duración fases anóxicas



(e) Duración ciclos SBR



(f) Oxygen Uptake Rate

Figura 1: Gráficos de los resultados para el Caso 1, y con concentración de amonio inicial de 600 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.

Caso 1, Amonio de entrada 700 [mg/L]

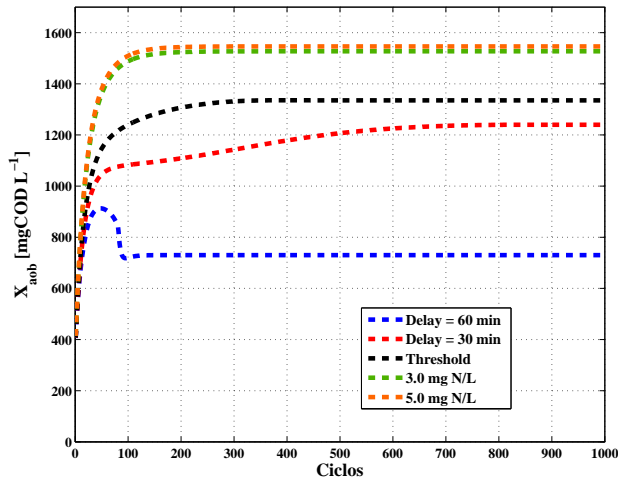
Tabla A14: VEE Caso 1 para entrada de amonio 700 mg N/L.

	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	730.1	215.8	10.7	9.0	19.6	4524.6
Delay 0.75 [h]	746.1	220.2	10.2	8.9	19.1	4490.4
Delay 0.5 [h]	1239.8	1.9	6.1	5.5	11.7	3251.5
Delay 0.25 [h]	1285.3	0.1	5.7	5.5	11.2	3220.6
Threshold	1335.2	0.0	5.2	5.4	10.7	3190.3
Amonio 2.0 [mg N/L]	1505.9	0.0	3.9	5.3	9.1	3086.1
Amonio 3.0 [mg N/L]	1527.3	0.0	3.7	5.2	9.0	3069.3
Amonio 4.0 [mg N/L]	1538.7	0.0	3.6	5.2	8.9	3058.3
Amonio 5.0 [mg N/L]	1546.2	0.0	3.6	5.2	8.8	3049.3
Amonio 6.0 [mg N/L]	1552.0	0.0	3.5	5.2	8.7	3041.4

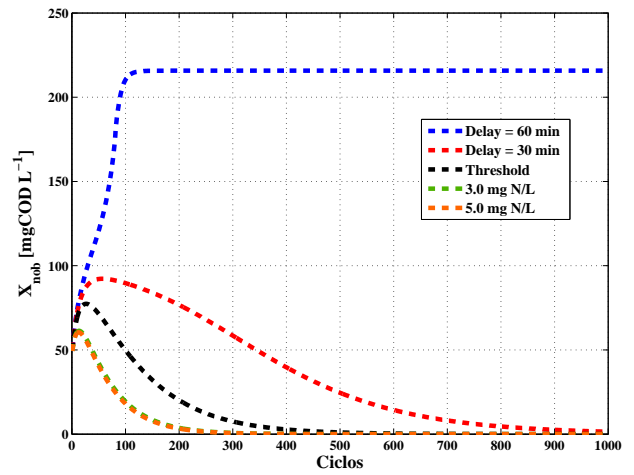
X_{AOB} y X_{NOB} [mg N/L]; T_{Aerob} , T_{Anox} y T_{Ciclo} [h]; **OUR** [mg N/(L · h)].

Tabla A15: CE de las variables analizadas Caso 1 para entrada de amonio 700 mg N/L.

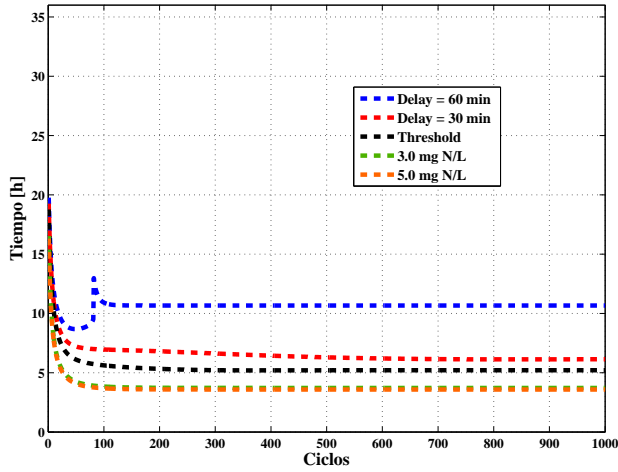
	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	106	109	109	90	104	89
Delay 0.75 [h]	160	163	163	144	158	143
Delay 0.5 [h]	616	998	612	631	621	593
Delay 0.25 [h]	337	998	336	349	341	321
Threshold	247	998	247	249	248	227
Amonio 2.0 [mg N/L]	145	998	160	126	143	110
Amonio 3.0 [mg N/L]	136	998	148	117	133	102
Amonio 4.0 [mg N/L]	133	998	143	114	129	98
Amonio 5.0 [mg N/L]	131	998	140	112	127	96
Amonio 6.0 [mg N/L]	130	998	140	110	125	94



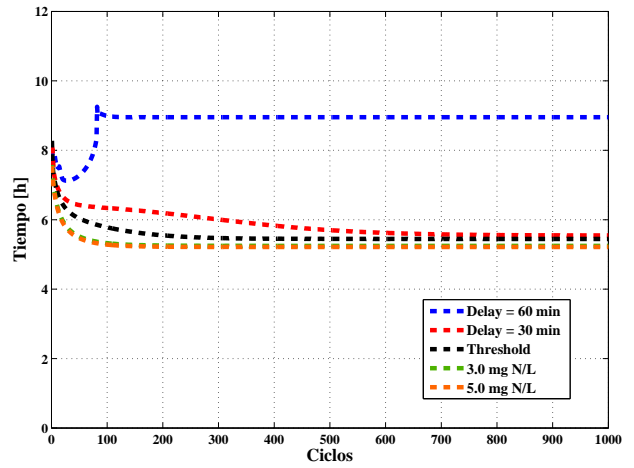
(a) Bacterias Amonio-Oxidantes



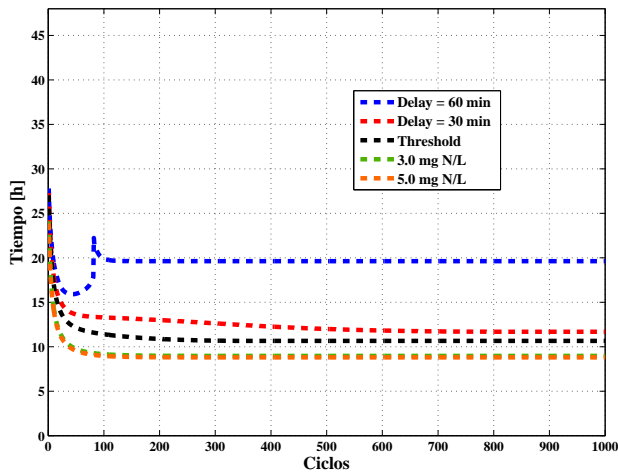
(b) Bacterias Nitrito-Oxidantes



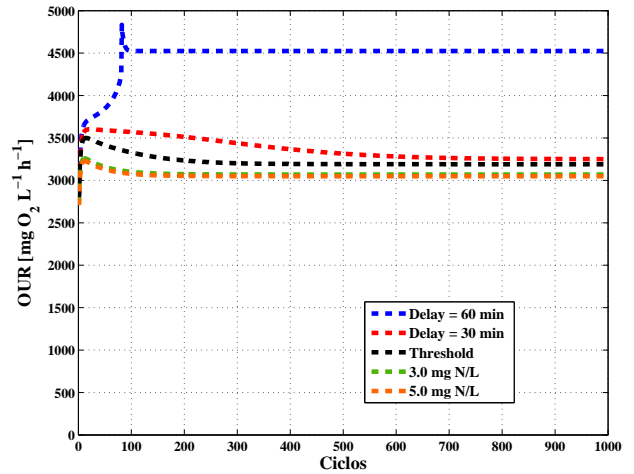
(c) Duración fases aeróbicas



(d) Duración fases anóxicas



(e) Duración ciclos SBR



(f) Oxygen Uptake Rate

Figura 2: Gráficos de los resultados para el Caso 1, y con concentración de amonio inicial de 700 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.

Caso 2, Amonio de entrada 600 [mg/L]

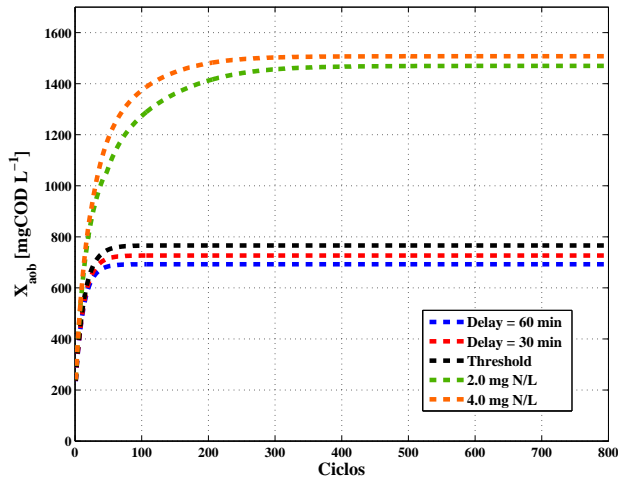
Tabla A16: VEE Caso 2 para entrada de amonio 600 mg N/L.

	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	692.6	205.0	10.1	7.8	17.9	3933.5
Delay 0.75 [h]	709.1	209.6	9.6	7.8	17.4	3901.3
Delay 0.5 [h]	726.9	214.6	9.1	7.7	16.8	3867.6
Delay 0.25 [h]	745.7	219.8	8.6	7.6	16.3	3832.0
Threshold	766.0	225.4	8.2	7.6	15.7	3794.4
Amonio 2.0 [mg N/L]	1469.7	0.1	3.5	4.6	8.0	2650.0
Amonio 3.0 [mg N/L]	1494.4	0.0	3.3	4.5	7.9	2632.7
Amonio 4.0 [mg N/L]	1507.6	0.0	3.2	4.5	7.8	2621.6
Amonio 5.0 [mg N/L]	1516.5	0.0	3.2	4.5	7.7	2612.5
Amonio 6.0 [mg N/L]	1523.2	0.0	3.1	4.5	7.6	2604.5

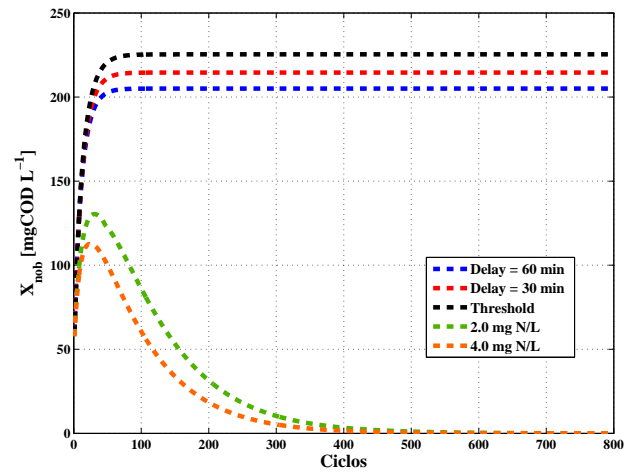
X_{AOB} y X_{NOB} [mg N/L]; T_{Aerob} , T_{Anox} y T_{Ciclo} [h]; OUR [mg N/(L · h)].

Tabla A17: CE de las variables analizadas Caso 2 para entrada de amonio 600 mg N/L.

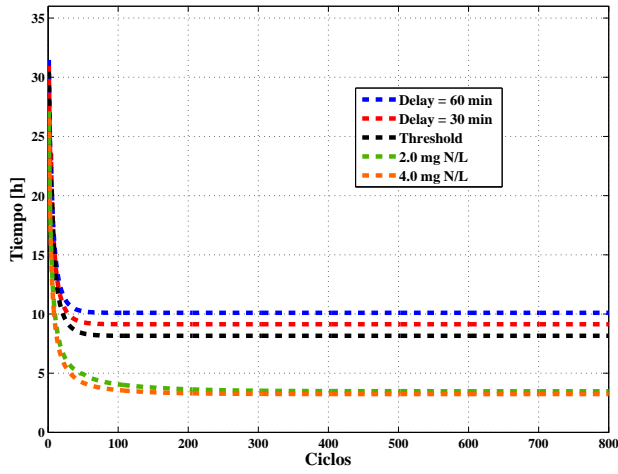
	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	52	52	53	33	48	7
Delay 0.75 [h]	54	54	55	35	50	6
Delay 0.5 [h]	56	56	58	37	52	6
Delay 0.25 [h]	58	58	60	38	54	6
Threshold	61	61	63	41	56	16
Amonio 2.0 [mg N/L]	294	798	318	275	296	256
Amonio 3.0 [mg N/L]	250	798	266	232	249	215
Amonio 4.0 [mg N/L]	236	798	251	219	234	200
Amonio 5.0 [mg N/L]	228	798	241	210	225	192
Amonio 6.0 [mg N/L]	223	798	237	204	220	187



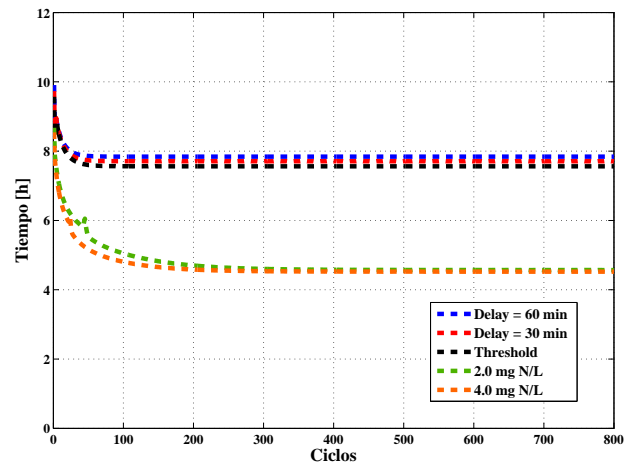
(a) Bacterias Amonio-Oxidantes



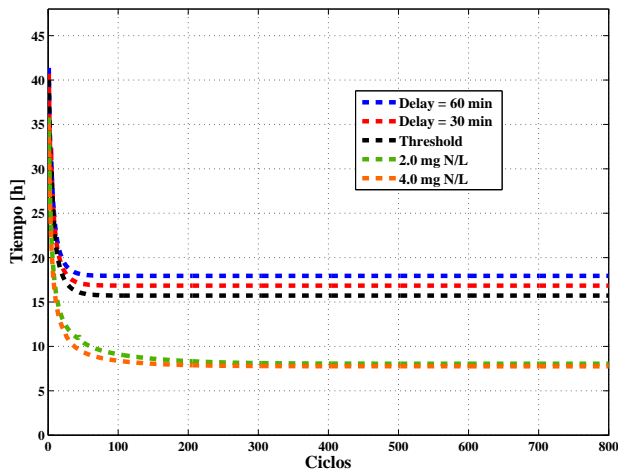
(b) Bacterias Nitrito-Oxidantes



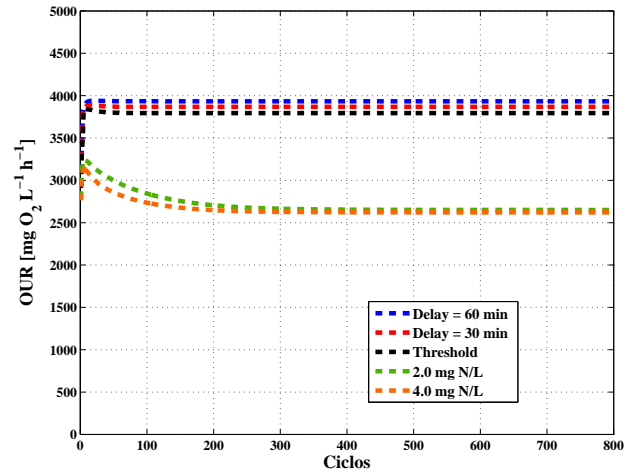
(c) Duración fases aeróbicas



(d) Duración fases anóxicas



(e) Duración ciclos SBR



(f) Oxygen Uptake Rate

Figura 3: Gráficos de los resultados para el Caso 2, y con concentración de amonio inicial de 600 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.

Caso 2, Amonio de entrada 700 [mg/L]

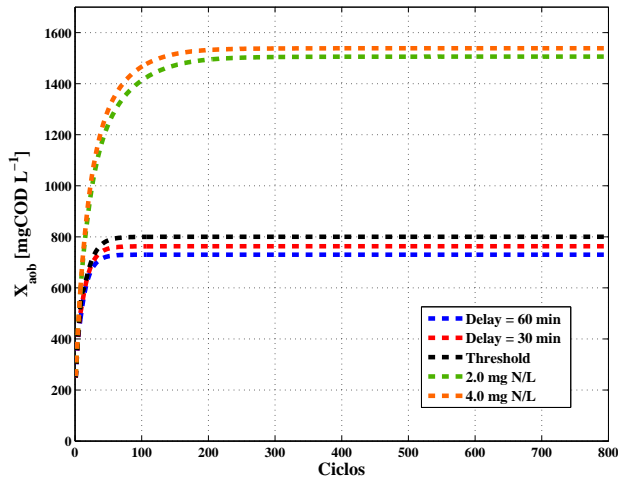
Tabla A18: VEE Caso 2 para entrada de amonio 700 mg N/L.

	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	730.1	215.8	10.7	9.0	19.6	4524.6
Delay 0.75 [h]	746.1	220.2	10.2	8.9	19.1	4490.4
Delay 0.5 [h]	763.0	224.9	9.7	8.8	18.5	4454.5
Delay 0.25 [h]	780.9	229.8	9.2	8.7	18.0	4417.0
Threshold	800.1	235.1	8.7	8.7	17.4	4377.6
Amonio 2.0 [mg N/L]	1505.9	0.0	3.9	5.3	9.1	3086.1
Amonio 3.0 [mg N/L]	1527.3	0.0	3.7	5.2	9.0	3069.3
Amonio 4.0 [mg N/L]	1538.6	0.0	3.6	5.2	8.9	3058.3
Amonio 5.0 [mg N/L]	1546.3	0.0	3.6	5.2	8.8	3049.3
Amonio 6.0 [mg N/L]	1552.0	0.0	3.5	5.2	8.7	3041.4

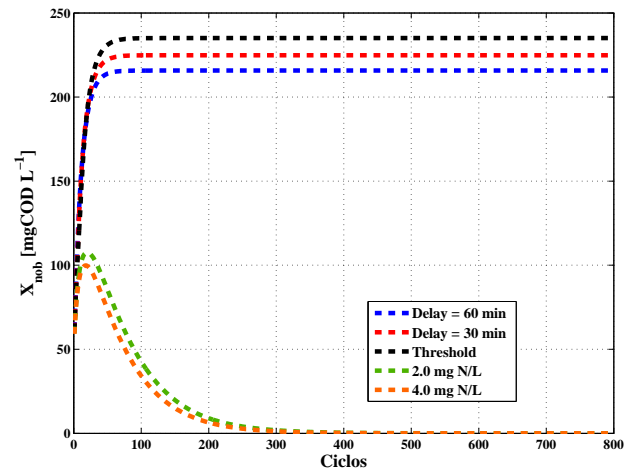
X_{AOB} y X_{NOB} [mg N/L]; T_{Aerob} , T_{Anox} y T_{Ciclo} [h]; OUR [mg N/(L · h)].

Tabla A19: CE de las variables analizadas Caso 2 para entrada de amonio 700 mg N/L.

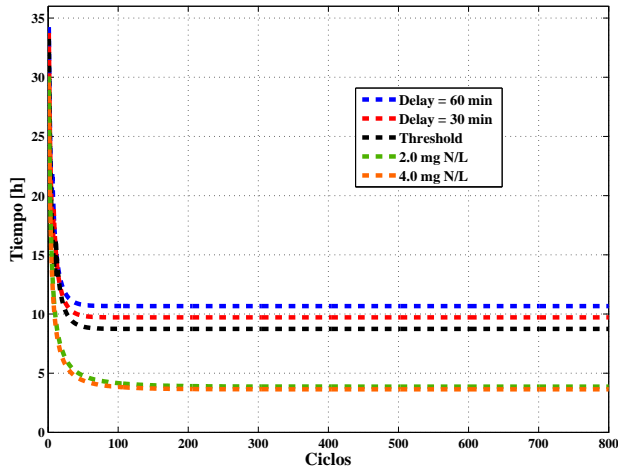
	X_{AOB}	X_{NOB}	T_{Aerob}	T_{Anox}	T_{Ciclo}	OUR
Delay 1.0 [h]	49	49	50	32	45	9
Delay 0.75 [h]	50	50	52	33	47	12
Delay 0.5 [h]	52	52	54	35	48	15
Delay 0.25 [h]	54	54	57	37	51	18
Threshold	57	57	60	39	53	22
Amonio 2.0 [mg N/L]	188	798	204	170	187	156
Amonio 3.0 [mg N/L]	172	798	184	154	169	141
Amonio 4.0 [mg N/L]	166	798	176	149	162	135
Amonio 5.0 [mg N/L]	163	798	173	145	159	131
Amonio 6.0 [mg N/L]	160	798	170	142	156	129



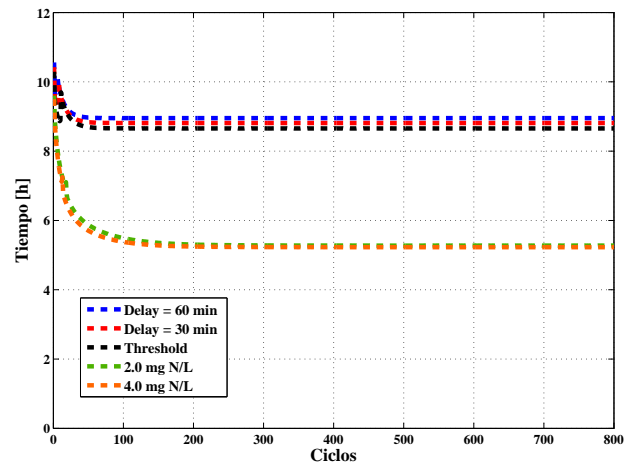
(a) Bacterias Amonio-Oxidantes



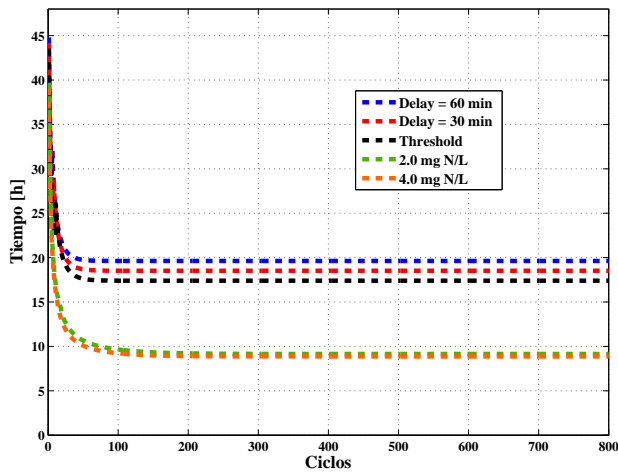
(b) Bacterias Nitrito-Oxidantes



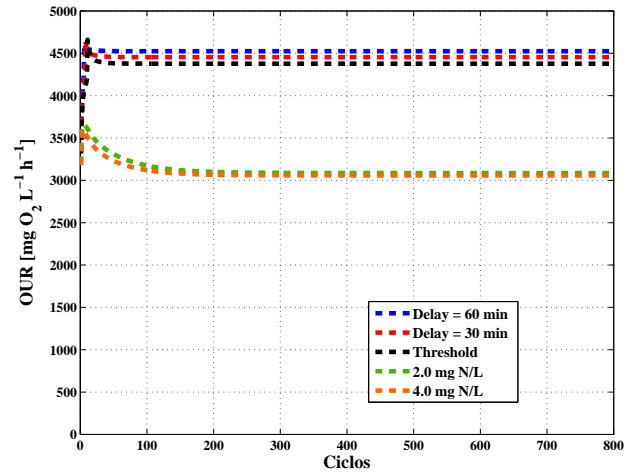
(c) Duración fases aeróbicas



(d) Duración fases anóxicas



(e) Duración ciclos SBR



(f) Oxygen Uptake Rate

Figura 4: Gráficos de los resultados para el Caso 2, y con concentración de amonio inicial de 700 mg/L obtenidos por la simulación de ciclos SBR consecutivos.

Bibliografía

- [1] W A Abdulhafiz and A Khamis. Bayesian approach to multisensor data fusion with Pre- and Post-Filtering. In *2013 10th IEEE International Conference on Networking, Sensing and Control (ICNSC)*, pages 373–378, 2013.
- [2] S Abe. *Support Vector Machines for Pattern Classification*. Advances in Computer Vision and Pattern Recognition. Springer London, 2010.
- [3] D E Acuña and M E Orchard. Particle-filtering-based failure prognosis via sigma-points: Application to Lithium-Ion battery State-of-Charge monitoring. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 85:827–848, 2017.
- [4] A Ansari, S Gill, and F Khan. Eutrophication: Threat to Aquatic Ecosystems. In Abid Ansari, Sarvajeet Gill, Guy Lanza, and Walter Rast, editors, *Eutrophication: causes, consequences and control*, chapter 7, pages 143–170. Springer Netherlands, 2011.
- [5] C Antileo, H Medina, C Bornhardt, C Muñoz, F Jaramillo, and J Proal. Actuators monitoring system for real-time control of nitrification–denitrification via nitrite on long term operation. *Chemical Engineering Journal*, 223(0):467–478, may 2013.
- [6] C Antileo, A Werner, G Ciudad, C Muñoz, C Bornhardt, D Jeison, and H Urrutia. Novel operational strategy for partial nitrification to nitrite in a sequencing batch rotating disk reactor. *Biochemical Engineering Journal*, 32(2):69–78, nov 2006.
- [7] S Arik, T Huang, W K Lai, and Q Liu. *Neural Information Processing: 22nd International Conference, ICONIP 2015, November 9-12, 2015, Proceedings*. Number parte 4 in Lecture Notes in Computer Science. Springer International Publishing, 2015.
- [8] M S Arulampalam, S Maskell, N Gordon, and T Clapp. A tutorial on particle filters for online nonlinear/non-Gaussian Bayesian tracking. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 50(2):174–188, 2002.
- [9] S N Ashrafzadeh and Z Khorasani. Ammonia removal from aqueous solutions using hollow-fiber membrane contactors. *Chemical Engineering Journal*, 162(1):242–249, aug 2010.
- [10] O A Ayodeji and M E Mahroo. Multi-sensor data fusion application for cargo screening - A Bayesian approach. In *2010 2nd International Conference on Computer Technology*

and Development, pages 545–549, nov 2010.

- [11] W Bae, S Baek, J Chung, and Y Lee. Optimal operational factors for nitrite accumulation in batch reactors. *Biodegradation*, 12(5):359–366, 2001.
- [12] T Bayes. An Essay towards solving a Problem in the Doctrine of Chances. *Philosophical Transactions*, 53, 1763.
- [13] A Ben-Hur, C S Ong, S Sonnenburg, B Schölkopf, and G Rätsch. Support Vector Machines and Kernels for Computational Biology. *PLoS Computational Biology*, 4(10):1–10, oct 2008.
- [14] N Bernet, P Dangcong, J.-P. Delgenès, and R Moletta. Nitrification of low oxygen concentration in biofilm reactor. *Journal of Environmental Engineering*, 127(3):266–272, 2001.
- [15] C M Bishop. *Pattern recognition and machine learning*. Springer-Verlag New York, 2006.
- [16] R Blackburne, Z Yuan, and J Keller. Demonstration of nitrogen removal via nitrite in a sequencing batch reactor treating domestic wastewater. *Water Research*, 42(8–9):2166–2176, apr 2008.
- [17] A Bleakie and D Djurdjanovic. Feature extraction, condition monitoring, and fault modeling in semiconductor manufacturing systems. *Computers in Industry*, 64(3):203–213, apr 2013.
- [18] K M Boaventura, N Roqueiro, M A Z Coelho, and O Q F Araújo. State observers for a biological wastewater nitrogen removal process in a sequential batch reactor. *Bioresource Technology*, 79(1):1–14, aug 2001.
- [19] H Boström, S Andler, M Brohede, R Johansson, E Karlsson, J Van Laere, L Niklasson, M Nilsson, A Persson, and T Ziemke. On the definition of information fusion as a field of research. Technical report, 2007.
- [20] D Brockmann and E Morgenroth. Evaluating operating conditions for outcompeting nitrite oxidizers and maintaining partial nitrification in biofilm systems using biofilm modeling and Monte Carlo filtering. *Water Research*, 44(6):1995–2009, mar 2010.
- [21] O Cappé, S.J. Godsill, and E. Moulines. An overview of existing methods and recent advances in sequential Monte Carlo. *Proceedings of the IEEE*, 95(5):1–21, 2007.
- [22] J Carrera, J A Baeza, T Vicent, and J Lafuente. Biological nitrogen removal of high-strength ammonium industrial wastewater with two-sludge system. *Water Research*, 37(17):4211–4221, oct 2003.
- [23] M Casellas, C Dagot, and M Baudu. Set up and assessment of a control strategy in a SBR in order to enhance nitrogen and phosphorus removal. *Process Biochemistry*, 41(9):1994–2001, sep 2006.

- [24] N-B Chang and K Bai. *Multisensor Data Fusion and Machine Learning for Environmental Remote Sensing*. CRC Press, 2018.
- [25] F Chen, B Tang, and R Chen. A novel fault diagnosis model for gearbox based on wavelet support vector machine with immune genetic algorithm. *Measurement*, 46(1):220–232, jan 2013.
- [26] H Chen, S Liu, F Yang, Y Xue, and T Wang. The development of simultaneous partial nitrification, ANAMMOX and denitrification (SNAD) process in a single reactor for nitrogen removal. *Bioresource Technology*, 100(4):1548–1554, feb 2009.
- [27] J Chen and K-C Liu. On-line batch process monitoring using dynamic PCA and dynamic PLS models. *Chemical Engineering Science*, 57(1):63–75, jan 2002.
- [28] K Cierkens, S Plano, L Benedetti, S Weijers, J Jonge, and I Nopens. Impact of influent data frequency and model structure on the quality of WWTP model calibration and uncertainty. *Water Science & Technology*, 65(2):233–242, jan 2012.
- [29] Ö Çinar, H Hasar, and C Kinaci. Modeling of submerged membrane bioreactor treating cheese whey wastewater by artificial neural network. *Journal of Biotechnology*, 123(2):204–209, may 2006.
- [30] G Ciudad, R González, C Bornhardt, and C Antileo. Modes of operation and pH control as enhancement factors for partial nitrification with oxygen transport limitation. *Water Research*, 41(20):4621–4629, dec 2007.
- [31] G Civelekoglu, A Perendeci, N Yigit, and M Kitis. Modeling Carbon and Nitrogen Removal in an Industrial Wastewater Treatment Plant Using an Adaptive Network-Based Fuzzy Inference System. *CLEAN – Soil, Air, Water*, 35(6):617–625, 2007.
- [32] J Claros, J Serralta, A Seco, J Ferrer, and D Aguado. Real-time control strategy for nitrogen removal via nitrite in a SHARON reactor using pH and ORP sensors. *Process Biochemistry*, 47(10):1510–1515, oct 2012.
- [33] Comisión Nacional del Medio Ambiente. Normas Ambientales dictadas bajo la Ley de Bases del Medio Ambiente N^o 19.300, 2003.
- [34] A Cosenza, G Mannina, P A Vanrolleghem, and M B Neumann. Variance-based sensitivity analysis for wastewater treatment plant modelling. *Science of The Total Environment*, 470–471(0):1068–1077, feb 2014.
- [35] D Cvetkovic, E Übeyli, and I Cosic. Wavelet transform feature extraction from human PPG, ECG, and EEG signal responses to ELF PEMF exposures: A pilot study. *Digital Signal Processing*, 18(5):861–874, sep 2008.
- [36] R R Deshpande and E Heinzle. On-line oxygen uptake rate and culture viability measurement of animal cell culture using microplates with integrated oxygen sensors. *Biotechnology Letters*, 26(9):763–767, 2004.

- [37] J Dosta, A Galí, T Benabdallah El-Hadj, S Macé, and J Mata-Álvarez. Operation and model description of a sequencing batch reactor treating reject water for biological nitrogen removal via nitrite. *Bioresource Technology*, 98(11):2065–2075, aug 2007.
- [38] A Doucet, S Godsill, and C Andrieu. On Sequential Monte Carlo Sampling Methods for Bayesian Filtering. *Statistics and Computing*, 10(3):197–208, 2000.
- [39] O Dragomir, R Gouriveau, F Dragomir, E Minca, and N Zerhouni. Review of prognostic problem in condition-based maintenance. In IFAC and in collaboration with the IEEE Control Systems Society, editors, *European Control Conference, ECC'09.*, volume sur CD ROM, pages 1585–1592, Budapest, Hungary, 2009.
- [40] G A Ekama. The role and control of sludge age in biological nutrient removal activated sludge systems. *Water Science and Technology*, 61(7):1645–1652, 2010.
- [41] F Fernandes, D.D. Lopes, C.V. Andreoli, and S.M.C.P. da Silva. Assessment of sludge treatment and disposal alternatives. In C.V. Andreoli, M von Sperling, and F Fernandes, editors, *Sludge treatment and disposal*, page 244. IWA publishing, 2007.
- [42] J Ferrer, A Seco, J Serralta, J Ribes, J Manga, E Asensi, J J Morenilla, and F Llavador. DESASS: A software tool for designing, simulating and optimising WWTPs. *Environmental Modelling & Software*, 23(1):19–26, jan 2008.
- [43] A S Gad. A fuzzy logic-based multisensor data fusion for Maritime Surveillance - Real data testing. In *2009 National Radio Science Conference*, pages 1–10, 2009.
- [44] K V Gernaey, M C M van Loosdrecht, M Henze, M Lind, and S B Jørgensen. Activated sludge wastewater treatment plant modelling and simulation: state of the art. *Environmental Modelling & Software*, 19(9):763–783, sep 2004.
- [45] S Grieu, F Thiery, A Traoré, T Nguyen, M Barreau, and M Polit. KSOM and MLP neural networks for on-line estimating the efficiency of an activated sludge process. *Chemical Engineering Journal*, 116(1):1–11, feb 2006.
- [46] J Guo, Y Peng, H Huang, S Wang, S Ge, J Zhang, and Z Wang. Short- and long-term effects of temperature on partial nitrification in a sequencing batch reactor treating domestic wastewater. *Journal of Hazardous Materials*, 179(1–3):471–479, jul 2010.
- [47] J Guo, S Wang, H Huang, Y Peng, S Ge, C Wu, and Z Sun. Efficient and integrated start-up strategy for partial nitrification to nitrite treating low C/N domestic wastewater. *Water Science and Technology*, 60(12):3243–3251, 2009.
- [48] J Guo, L Zhang, W Chen, F Ma, H Liu, and Y Tian. The regulation and control strategies of a sequencing batch reactor for simultaneous nitrification and denitrification at different temperatures. *Bioresource Technology*, 133(0):59–67, apr 2013.
- [49] H Haimi, M Mulas, F Corona, and R Vahala. Data-derived soft-sensors for biological wastewater treatment plants: An overview. *Environmental Modelling & Software*, 47(0):88–107, sep 2013.

- [50] D Hall. *Mathematical Techniques in Multisensor Data Fusion*. Artech House, Inc., Norwood, MA, USA, 1992.
- [51] H-G Han and J-F Qiao. Prediction of activated sludge bulking based on a self-organizing RBF neural network. *Journal of Process Control*, 22(6):1103–1112, jul 2012.
- [52] M Henze, W Gujer, T Mino, and M van Loosdrecht. *Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. IWA Publishing, 2000.
- [53] B Holenda, E Domokos, Á Rédey, and J Fazakas. Dissolved oxygen control of the activated sludge wastewater treatment process using model predictive control. *Computers & Chemical Engineering*, 32(6):1270–1278, jun 2008.
- [54] S H Hong, M W Lee, D S Lee, and J M Park. Monitoring of sequencing batch reactor for nitrogen and phosphorus removal using neural networks. *Biochemical Engineering Journal*, 35(3):365–370, aug 2007.
- [55] M Huang, J Wan, Y Ma, W Li, X Sun, and Y Wan. A fast predicting neural fuzzy model for on-line estimation of nutrient dynamics in an anoxic/oxic process. *Bioresource Technology*, 101(6):1642–1651, mar 2010.
- [56] K H Hui, M H Lim, M S Leong, and S M Al-Obaidi. Dempster-Shafer evidence theory for multi-bearing faults diagnosis. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 57:160–170, jan 2017.
- [57] C Huiliñir, R Romero, C Muñoz, C Bornhardt, M Roeckel, and C Antileo. Dynamic modeling of partial nitrification in a rotating disk biofilm reactor: Calibration, validation and simulation. *Biochemical Engineering Journal*, 52(1):7–18, oct 2010.
- [58] P Ingildsen, U Jeppsson, and G Olsson. Dissolved oxygen controller based on on-line measurements of ammonium combining feed-forward and feedback. *Water Science & Technology*, 45(4):453–460, 2002.
- [59] I Jubany, J Carrera, J Lafuente, and J A Baeza. Start-up of a nitrification system with automatic control to treat highly concentrated ammonium wastewater: Experimental results and modeling. *Chemical Engineering Journal*, 144(3):407–419, nov 2008.
- [60] B Khaleghi, A Khamis, F Karray, and S Razavi. Multisensor data fusion: A review of the state-of-the-art. *Information Fusion*, 14(1):28–44, jan 2013.
- [61] Y S Kim, M H Kim, and C K Yoo. A new statistical framework for parameter subset selection and optimal parameter estimation in the activated sludge model. *Journal of Hazardous Materials*, 183(1–3):441–447, nov 2010.
- [62] J Kocijan and N Hvala. Sequencing batch-reactor control using Gaussian-process models. *Bioresource Technology*, 137(0):340–348, jun 2013.
- [63] D Koks and S Challa. An introduction to Bayesian and Dempster-Shafer data fusion. Technical report, Defence Science and Technology Organisation Salisbury (Australia)

Systems Sciences Lab, 2003.

- [64] D S Lee, J M Park, and P A Vanrolleghem. Adaptive multiscale principal component analysis for on-line monitoring of a sequencing batch reactor. *Journal of Biotechnology*, 116(2):195–210, mar 2005.
- [65] C P Ley and M E Orchard. Chi-squared smoothed adaptive particle-filtering based prognosis. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 82:148–165, 2017.
- [66] S Li and S Zhang. A congeneric multi-sensor data fusion algorithm and its fault-tolerance. In *2010 International Conference on Computer Application and System Modeling (ICCASM 2010)*, volume 1, pages V1–339–V1–342, oct 2010.
- [67] M Liggins, D Hall, and J Llinas. *Handbook of multisensor data fusion: theory and practice*. CRC press, 2008.
- [68] J Liu and M West. Combined Parameter and State Estimation in Simulation-Based Filtering BT - Sequential Monte Carlo Methods in Practice. pages 197–223. Springer New York, New York, NY, 2001.
- [69] E Liwarska-Bizukojc and R Biernacki. Identification of the most sensitive parameters in the activated sludge model implemented in BioWin software. *Bioresource Technology*, 101(19):7278–7285, oct 2010.
- [70] L Luccarini, E Porrà, A Spagni, P Ratini, S Grilli, S Longhi, and G Bortone. Soft sensors for control of nitrogen and phosphorus removal from wastewaters by neural networks. *Water Science and Technology*, 45(4-5):101–107, 2002.
- [71] I Machón, H López, J Rodríguez-Iglesias, E Marañón, and I Vázquez. Simulation of a coke wastewater nitrification process using a feed-forward neuronal net. *Environmental Modelling & Software*, 22(9):1382–1387, sep 2007.
- [72] V N Mandhala, V Sujatha, and B R Devi. Scene classification using support vector machines. In *2014 IEEE International Conference on Advanced Communications, Control and Computing Technologies*, pages 1807–1810, may 2014.
- [73] S Marsili-Libelli. Control of SBR switching by fuzzy pattern recognition. *Water Research*, 40(5):1095–1107, mar 2006.
- [74] S Marsili-Libelli, A Spagni, and R Susini. Intelligent monitoring system for long-term control of sequencing batch reactors. *Water Science and Technology*, 57(3):431–438, 2008.
- [75] F Mastrogiovanni, A Sgorbissa, and R Zaccaria. A Distributed Architecture for Symbolic Data Fusion. In *Proceedings of the 20th International Joint Conference on Artificial Intelligence, IJCAI’07*, pages 2153–2158, San Francisco, CA, USA, 2007. Morgan Kaufmann Publishers Inc.
- [76] P Mather and B Tso. *Classification Methods for Remotely Sensed Data, Second Edition*.

Environmental engineering. CRC Press, 2 edition, 2016.

- [77] Mathworks. *Statistics and Machine Learning Toolbox™ User's Guide*. The MathWorks, Inc., 2015.
- [78] H B Mitchell. Bayesian Inference. In *Data Fusion: Concepts and Ideas*, page 346. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2 edition, 2012.
- [79] C Muñoz, D Rojas, O Candia, L Azocar, C Bornhardt, and C Antileo. Supervisory control system to enhance partial nitrification in an activated sludge reactor. *Chemical Engineering Journal*, 145(3):453–460, jan 2009.
- [80] R Muscat, M Mahfouf, A Zughrat, Y Y Yang, S Thornton, A V Khondabi, and S Sourtanos. Hierarchical Fuzzy Support Vector Machine (SVM) for Rail Data Classification. *IFAC Proceedings Volumes*, 47(3):10652–10657, 2014.
- [81] C Musso, N Oudjane, and F Le Gland. Improving regularised particle filters. In *Sequential Monte Carlo methods in practice*, pages 247–271. Springer, 2001.
- [82] A Nuhoglu, B Keskinler, and E Yildiz. Mathematical modelling of the activated sludge process - The Erzincan case. *Process Biochemistry*, 40(7):2467–2473, 2005.
- [83] M Orchard, G Kacprzyński, K Goebel, B Saha, and G Vachtsevanos. Advances in uncertainty representation and management for particle filtering applied to prognostics. *2008 International Conference on Prognostics and Health Management*, pages 1–6, 2008.
- [84] M Orchard, F Tobar, and G Vachtsevanos. Outer feedback correction loops in particle filtering-based prognostic algorithms: Statistical performance comparison. *Studies in Informatics and Control*, 18(4):295–304, 2009.
- [85] M Orchard and G Vachtsevanos. A particle-filtering approach for on-line fault diagnosis and failure prognosis. *Transactions of the Institute of Measurement and Control*, 31(3-4):221–246, jun 2009.
- [86] H R B Orlande, M J Colaço, G S Dulikravich, F L V Vianna, W B Da Silva, H M Da Fonseca, and O Fudym. Kalman and Particle filters. *METTI V-Thermal Measurements and Inverse Techniques*, 2011.
- [87] V Pambrun, E Paul, and M Spérandio. Control and modelling of partial nitrification of effluents with high ammonia concentrations in sequencing batch reactor. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 47(3):323–329, mar 2008.
- [88] T. M. Pankratz. *Environmental Engineering Dictionary and Directory*. Lewis Publishers, Boca Raton, FL, 2001.
- [89] S Patsios. *A Study of Membrane Bioreactors for Wastewater Treatment and Water Reclamation*. PhD thesis, Aristotle University of Thessaloniki, 2011.

- [90] J Pauer and M Auer. Formulation and testing of a novel river nitrification model. *Ecological Modelling*, 220(6):857–866, mar 2009.
- [91] D A Pola, H F Navarrete, M E Orchard, R S Rabié, M A Cerda, B E Olivares, J F Silva, P A Espinoza, and A Pérez. Particle-Filtering-Based Discharge Time Prognosis for Lithium-Ion Batteries With a Statistical Characterization of Use Profiles. *IEEE Transactions on Reliability*, 64(2):710–720, 2015.
- [92] K M Poo, J H Im, B H Jun, J R Kim, L S Hwang, K S Choi, and C W Kim. Full-cyclic control strategy of SBR for nitrogen removal in strong wastewater using common sensors. *Water Science and Technology*, 53(4-5):151–160, 2006.
- [93] J R Raol. *Multi-Sensor Data Fusion with MATLAB*. CRC Press, Inc., Boca Raton, FL, USA, 1st edition, 2009.
- [94] J M Richardson and K A Marsh. Fusion of Multisensor Data. *Int. J. Rob. Res.*, 7(6):78–96, 1988.
- [95] D Rodríguez, N Pino, and G Peñuela. Monitoring the removal of nitrogen by applying a nitrification–denitrification process in a Sequencing Batch Reactor (SBR). *Bioresource Technology*, 102(3):2316–2321, feb 2011.
- [96] D Rodríguez, O Ramírez, and G Peñuela. Behavior of nitrifying and denitrifying bacteria in a sequencing batch reactor for the removal of ammoniacal nitrogen and organic matter. *Desalination*, 273(2–3):447–452, jun 2011.
- [97] D Ruan, G Chen, E E Kerre, and G Wets. *Intelligent Data Mining: Techniques and Applications*. Studies in Computational Intelligence. Springer Berlin Heidelberg, 2005.
- [98] M V Ruano, J Ribes, A Seco, and J Ferrer. Low cost-sensors as a real alternative to on-line nitrogen analysers in continuous systems. *Water Science and Technology*, 60(12):3261–3268, 2009.
- [99] M V Ruano, J Ribes, A Seco, and J Ferrer. An advanced control strategy for biological nutrient removal in continuous systems based on pH and ORP sensors. *Chemical Engineering Journal*, 183(0):212–221, feb 2012.
- [100] B Samanta and K R Al-Balushi. Artificial Neural Network Based Fault Diagnostics of Rolling Element Bearings using Time-Domain Features. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 17(2):317–328, mar 2003.
- [101] J Z Sasiadek. Sensor fusion. *Annual Reviews in Control*, 26(2):203–228, 2002.
- [102] R Sedlak. *Phosphorus and nitrogen removal from municipal wastewater: principles and practice*. CRC Press, 2nd edition, 1991.
- [103] E Sejdić, I Djurović, and Ji Jiang. Time–frequency feature representation using energy concentration: An overview of recent advances. *Digital Signal Processing*, 19(1):153–183, jan 2009.

- [104] S Sharifi, S Murthy, I Takács, and A Massoudieh. Probabilistic parameter estimation of activated sludge processes using Markov Chain Monte Carlo. *Water Research*, 50(0):254–266, mar 2014.
- [105] H Shiobara and N Hori. Numerical exact discrete-time-model of linear time-varying systems. In *2008 International Conference on Control, Automation and Systems*, pages 2314–2318, oct 2008.
- [106] M Singh and R K Srivastava. Sequencing batch reactor technology for biological wastewater treatment: a review. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 6(1):3–13, 2011.
- [107] B Sinha and A Annachhatre. Partial nitrification - Operational parameters and microorganisms involved. *Reviews in Environmental Science and Biotechnology*, 6(4):285–313, 2007.
- [108] O Smart, H Firpi, and G Vachtsevanos. Genetic Programming of Conventional Features to Detect Seizure Precursors. *Engineering applications of artificial intelligence*, 20(8):1070–1085, dec 2007.
- [109] A Steinberg, C Bowman, and F White. Revisions to the JDL data fusion model. volume 3719, pages 430–441, 1999.
- [110] W Sung, J Chen, and C Hsiao. Data fusion for PT100 temperature sensing system heating control model. *Measurement*, 52(0):94–101, jun 2014.
- [111] C Tampier, A Pérez, F Jaramillo, V Quintero, M Orchard, and J Silva. Lithium-Ion Battery End-of-Discharge Time Estimation and Prognosis based on Bayesian Algorithms and Outer Feedback Correction Loops: A Comparative Analysis. In *Annual Conference of the Prognostics and Health Management Society 2015*, page 14, 2015.
- [112] C-J Tang, P Zheng, S Ding, and H-F Lu. Enhanced nitrogen removal from ammonium-rich wastewater containing high organic contents by coupling with novel high-rate ANAMMOX granules addition. *Chemical Engineering Journal*, 240(0):454–461, mar 2014.
- [113] A.-C. Texier and J Gomez. Simultaneous nitrification and p-cresol oxidation in a nitrifying sequencing batch reactor. *Water Research*, 41(2):315–322, jan 2007.
- [114] A Traoré, S Grieu, S Puig, L Corominas, F Thiery, M Polit, and J Colprim. Fuzzy control of dissolved oxygen in a sequencing batch reactor pilot plant. *Chemical Engineering Journal*, 111(1):13–19, jul 2005.
- [115] A Tulsyan, R B Gopaluni, and S R Khare. Particle filtering without tears: A primer for beginners. *Computers & Chemical Engineering*, 95(Supplement C):130–145, 2016.
- [116] G Vachtsevanos, F Lewis, M Roemer, A Hess, and B Wu. *Intelligent Fault Diagnosis and Prognosis for Engineering Systems*. Georgia Institute of Technology, United States, 2007.

- [117] S W H Van Hulle, H J P Vandeweyer, B D Meesschaert, P A Vanrolleghem, P Dejans, and A Dumoulin. Engineering aspects and practical application of autotrophic nitrogen removal from nitrogen rich streams. *Chemical Engineering Journal*, 162(1):1–20, aug 2010.
- [118] G Walton. Survey of literature relating to infant methemoglobinemia due to nitrate-contaminated water. *American journal of public health*, 41(8 Pt 1):986–996, 1951.
- [119] Y Wang, F Chu, Y He, and D Guo. Multisensor data fusion for automotive engine fault diagnosis. *Tsinghua Science and Technology*, 9(3):262–265, 2004.
- [120] Z Wang, S Bian, M Lei, C Zhao, Y Liu, and Z Zhao. Feature extraction and classification of load dynamic characteristics based on lifting wavelet packet transform in power system load modeling. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 62(0):353–363, nov 2014.
- [121] D Wei, X Xue, L Yan, M Sun, G Zhang, L Shi, and B Du. Effect of influent ammonium concentration on the shift of full nitrification to partial nitrification in a sequencing batch reactor at ambient temperature. *Chemical Engineering Journal*, 235(0):19–26, jan 2014.
- [122] A Widodo and B-S Yang. Support vector machine in machine condition monitoring and fault diagnosis. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 21(6):2560–2574, aug 2007.
- [123] U Wiesmann. Biological nitrogen removal from wastewater. In *Biotechnics/Wastewater SE - 5*, volume 51 of *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology*, pages 113–154. Springer Berlin Heidelberg, 1994.
- [124] U Wiesmann, S Choi, and E Dombrowski. *Fundamentals of Biological Wastewater Treatment*. Wiley-VCH, Weinheim, 2007.
- [125] P Wilderer, R L Irvine, and M C Goronszy. *Sequencing Batch Reactor Technology*. IWA Publishing, London, UK, 2001.
- [126] C Wu, Z Chen, X Liu, and Y Peng. Nitrification–denitrification via nitrite in SBR using real-time control strategy when treating domestic wastewater. *Biochemical Engineering Journal*, 36(2):87–92, sep 2007.
- [127] J Yan and Y Y Hu. Partial nitrification to nitrite for treating ammonium-rich organic wastewater by immobilized biomass system. *Bioresourc Technology*, 100(8):2341–2347, apr 2009.
- [128] Q Yang, S Gu, Y Peng, S Wang, and X Liu. Progress in the Development of Control Strategies for the SBR Process. *CLEAN – Soil, Air, Water*, 38(8):732–749, 2010.
- [129] C Yoo, I Lee, and P Vanrolleghem. On-Line Adaptive and Nonlinear Process Monitoring of a Pilot-Scale Sequencing Batch Reactor. *Environmental Monitoring and Assessment*, 119(1-3):349–366, 2006.

- [130] L Zanetti, N Frison, E Nota, M Tomizioli, D Bolzonella, and F Fatone. Progress in real-time control applied to biological nitrogen removal from wastewater . A short-review. *Desalination*, 286(0):1–7, feb 2012.
- [131] J Zarei. Induction motors bearing fault detection using pattern recognition techniques. *Expert Systems with Applications*, 39(1):68–73, jan 2012.
- [132] W Zeng, Y Zhang, L Li, Y-Z Peng, and S-Y Wang. Control and optimization of nitrifying communities for nitritation from domestic wastewater at room temperatures. *Enzyme and Microbial Technology*, 45(3):226–232, sep 2009.
- [133] J Zhang. Improved on-line process fault diagnosis through information fusion in multiple neural networks. *Computers & Chemical Engineering*, 30(3):558–571, jan 2006.