

Universidad Complutense de Madrid

Universidad Nacional de Educación a Distancia



Máster en Ingeniería de Sistemas y Control

MODELADO FÍSICO Y BASADO EN AGENTES DE FANGOS ACTIVOS

Memoria presentada por

José Molina Sáez

Bajo la dirección de

Alfonso Urquía Moraleda

Curso Académico 2014/2015

Junio 2015

Proyecto Fin de Máster
Master en Ingeniería de Sistemas y Control

MODELADO FÍSICO Y BASADO EN AGENTES DE FANGOS ACTIVOS

Proyecto tipo B

Proyecto específico propuesto por el alumno

Memoria presentada por

José Molina Sáez

Bajo la dirección de

Alfonso Urquía Moraleda

Autorización

Autorizamos a la Universidad Complutense y a la UNED a difundir y utilizar con fines académicos, no comerciales y mencionando expresamente a sus autores, tanto la memoria de este Trabajo Fin de Máster, como el código, la documentación y/o el prototipo desarrollado.

Firmado: José Molina Sáez

A handwritten signature in blue ink, reading "José Molina Sáez", written over a horizontal line.

Firma del alumno

RESUMEN

El objetivo principal de este trabajo es modelar un sistema biológico concreto utilizando dos técnicas de modelado computacional: el modelado físico y el modelado basado en agentes.

El sistema biológico de estudio es una simplificación de los procesos biológicos utilizados para el tratamiento de aguas residuales y es descrito mediante modelos matemáticos (ASMx) desarrollados por la asociación internacional del agua (IWA).

Utilizamos Dymola (modelado físico) y NetLogo (modelado basado en agentes) como entornos de modelado para construir las librerías debido a sus características técnicas y facilidad de uso.

El uso de estas formas de modelado nos permite abordar el sistema biológico de estudio desde un punto de vista macroscópico (crecimiento, decaimiento, hidrólisis biomasa) y desde un punto de vista microscópico (alimentación, reproducción, muerte y descomposición de bacterias).

Los resultados obtenidos son cualitativamente y cuantitativamente semejantes pero aparecen ciertas diferencias debidas a la naturaleza discreta de las bacterias (vida-muerte y reproducción-duplicación). Por tanto, ambas formas de modelado son idóneas para describir y simular el sistema biológico de estudio.

Modelica, como lenguaje de modelado, permite una definición modular y flexible del sistema biológico de estudio, pero la resolución de los sistemas DAE resultantes requiere una mayor capacidad de cálculo y la aplicación de técnicas de resolución-simulación complejas que nada tienen que ver con la simplicidad de NetLogo.

Palabras clave

Modelado físico, modelado basado en agentes, fangos activos, Modelica, Dymola, NetLogo.

ABSTRACT

The main objective of this work is to model a particular biological system using two computational modeling techniques: physical modeling and agent-based modeling.

The particular biological system is a simplification of biological processes used to treat wastewater and is described using mathematical models (ASM_X) developed by the International Water Association (IWA).

We use Dymola (physical modeling) and NetLogo (agent-based modeling) as modeling environment tools in order to build the libraries because of its technical characteristics and easy using.

The use of these forms of modeling allows us to address the particular biological system from a macroscopic view (growth, decay, biomass hydrolysis) and from a microscopic point of view (feeding, reproduction, death and bacteria decomposition).

The results are qualitatively and quantitatively similar but some differences occur due to the discrete nature of the bacteria (life-death reproduction-duplication). Therefore, both forms of modeling are suitable for describing and simulating the particular biological system.

Modelica, as model language, allows a modular and flexible construction of the particular biological system, but the resolution of the resulting DAE system requires computing power and lots of techniques for solving complex resolution-simulation equation systems are much more complicated than NetLogo.

Keywords

Physic modeling, system dynamics, agent-based, activated sludge, Modelica, Dymola, NetLogo

ÍNDICE

CAPÍTULO 1.	INTRODUCCIÓN, OBJETIVOS Y ESTRUCTURA	1
1.1	Introducción.....	1
1.2	Objetivos	3
1.3	Estructura de la memoria del Proyecto	4
CAPÍTULO 2.	METODOLOGÍAS Y HERRAMIENTAS DE MODELADO	7
2.1	Introducción.....	7
2.2	Metodologías	7
2.2.1	Modelado físico	7
2.2.2	Modelado basado en agentes	8
2.2.3	Comparación.....	10
2.3	Lenguajes, protocolos y entornos de modelado	11
2.3.1	Lenguaje de modelado físico Modelica	11
2.3.1.1	Entorno de modelado Dymola	13
2.3.1.2	Entorno de modelado OpenModelica.....	16
2.3.2	Protocolo ODD de descripción de modelos basados en agentes	16
2.3.2.1	Entorno de modelado NetLogo	18
2.3.2.2	Entorno de modelado MASON.....	20
2.4	Conclusiones	21
CAPÍTULO 3.	SISTEMA BIOLÓGICO DE ESTUDIO.....	23
3.1	Introducción.....	23
3.2	Sistemas de fangos activos ASMI	23
3.3	Herramientas actuales específicas.....	30
3.3.1	Librería Modelica WasteWater.....	30
3.3.2	Programa de simulación DESSAS.....	32
3.4	Sistema simplificado de estudio	34
3.5	Conclusiones	38
CAPÍTULO 4.	LIBRERÍA MODELICA FANGOSACTIVOS.....	39
4.1	Introducción.....	39
4.2	Estructura	39

Índice

4.3	Documentación librería.....	46
4.4	Validación	46
4.4.1	Reactores aislados.....	47
4.4.1.1	Modelo de crecimiento	47
4.4.1.2	Modelo de crecimiento-decaimiento	47
4.4.1.3	Modelo de crecimiento-decaimiento-inhibición.....	48
4.4.1.4	Modelo de crecimiento-decaimiento-inhibición-hidrolisis.....	49
4.4.1.5	Modelo ASM1 simplificado.....	50
4.4.2	Reactores no aislados.....	51
4.4.2.1	Modelo ASM1 simplificado con entrada de sustrato variable y oxígeno fijado	52
4.4.2.2	Modelo ASM1 simplificado con entrada contante de sustrato y entrada de oxígeno variable.....	54
4.5	Conclusiones	55
 CAPÍTULO 5. MODELO NETLOGO FANGOSACTIVOS		57
5.1	Introducción.....	57
5.2	Estructura	58
5.2.1	Mundo	58
5.2.2	Interfaz gráfico	59
5.2.3	Programación.....	63
5.3	Validacion	65
5.3.1	Modelo sin muerte.....	66
5.3.2	Modelo con muerte sin hidrólisis.....	68
5.3.3	Modelo con muerte e hidrólisis.....	70
5.4	Documentación librería.....	72
5.5	Conclusiones	72
 CAPÍTULO 6. COMPARACIÓN RESULTADOS		73
6.1	Introducción.....	73
6.2	Ajustes de parámetros NetLogo	73
6.3	Discusión cualitativa.....	78
6.4	Discusión cuantitativa	79
6.5	Discusión programación.....	80
6.6	Conclusión.....	81
 CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS.....		83

7.1	Introducción.....	83
7.2	Conclusiones	83
7.3	Líneas de trabajo futuras.....	84
	BIBLIOGRAFÍA.....	85
	SÍMBOLOS UTILIZADOS.....	89
	ANEXO A. CODIGO MODELICA.....	91
	ANEXO B. CODIGO NETLOGO	147

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2-1: Relación sistema objetivo y modelo basado en agentes.....	9
Figura 3-1: Librería WasteWater. Modelo ASM1.Examples.SmallPlant.....	32
Figura 3-2: Ejemplo de planta simulada con DESASS basada en BNRM1.....	34
Figura 4-1: Paquete Modelica fangosactivos.....	39
Figura 4-2: Modelado sistema biológico simplificado Modelica.....	45
Figura 4-3: Simulación Dymola reactor aislado con crecimiento.....	47
Figura 4-4: Simulación Dymola reactor aislado con crecimiento-decaimiento.....	48
Figura 4-5: Simulación Dymola reactor aislado con crecimiento-decaimiento-inhibición.....	49
Figura 4-6: Simulación Dymola reactor aislado con crecimiento-decaimiento-inhibición-hidrólisis.....	50
Figura 4-7: Simulación Dymola reactor ASM1 simplificado.....	51
Figura 4-8: Esquema de modelo asm1Simplificado_incSsPerioico_O2cte.....	52
Figura 4-9: Simulación de modelo asm1Simplificado_incSsPerioico_O2cte oxígeno bajo.....	53
Figura 4-10: Simulación de modelo asm1Simplificado_incSsPerioico_O2cte oxígeno alto.....	53
Figura 4-11: Esquema de modelo asm1Simplificado_incSsCte_O2Periodico.....	54
Figura 4-12: Simulación de modelo asm1Simplificado_incSsCte_O2Periodico.....	55
Figura 5-1: Mundo programa fangosactivos NetLogo.....	59
Figura 5-2: Pantalla de visualización y configuración NetLogo.....	60
Figura 5-3: Parámetros iniciales modelo sin muerte NetLogo.....	66
Figura 5-4: Gráficos modelo sin muerte NetLogo.....	67
Figura 5-5: Resultados modelo sin muerte NetLogo.....	67
Figura 5-6: Parámetros iniciales modelo con muerte sin hidrólisis NetLogo.....	68
Figura 5-7: Gráficos modelo con muerte sin hidrólisis NetLogo.....	69
Figura 5-8: Resultados modelo con muerte sin hidrólisis NetLogo.....	69
Figura 5-9: Parámetros iniciales modelo con muerte e hidrólisis NetLogo.....	70
Figura 5-10: Gráficos modelo sin muerte NetLogo.....	71
Figura 5-11: Resultados modelo sin muerte NetLogo.....	71
Figura 6-1: Discusión Asm1Simplificado. Configuración y valores iniciales modelo Modelica.....	74
Figura 6-2: Discusión Asm1Simplificado. Configuración y valores iniciales modelo NetLogo.....	75
Figura 6-3: Discusión Asm1Simplificado velocidad específica crecimiento biomasa.....	76
Figura 6-4: Discusión Asm1Simplificado velocidad de concentración biomasa 1.....	76

Índice de figuras

Figura 6-5: Discusión Asm1 Simplificado velocidad de concentración biomasa 2.	77
Figura 6-6: Discusión Asm1 Simplificado rendimiento biomasa.	77
Figura 6-7: Discusión Asm1 Simplificado concentraciones.	78
Figura 6-8: Discusión Asm1 Simplificado. Cualitativo Ss.	79
Figura 6-9: Discusión Asm1 Simplificado. Cualitativo O2.	79
Figura 6-10: Discusión Asm1 Simplificado. Cualitativo NO.	80
Figura 6-11: Discusión Asm1 Simplificado. Cualitativo Biomasa y bacterias.	80

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2-1: Los siete elementos del protocolo ODD.....	17
Tabla 3-1: Tabla en notación matricial ASM1.....	26
Tabla 3-2: Valores por defecto de los parámetros ASM1	28
Tabla 3-3: Tabla referencia sistema simplificado de estudio simplificado	36
Tabla 3-4: Sistema de ecuaciones del sistema biológico de estudio	37

Capítulo 1. Introducción, objetivos y estructura

1.1 Introducción

Es indudable que el agua es uno de los recursos naturales más importantes. El gran aumento de la población y la mejora en la calidad de vida del ser humano han hecho que el consumo de agua dulce se haya incrementado notablemente.

Ya que el agua es un recurso limitado, es necesario diseñar técnicas que optimicen su aprovechamiento. Un ejemplo de esto es el tratamiento de aguas residuales que permite la reutilización de aguas residuales para usos agrícolas o para mantenimiento de caudales ecológicos en ríos.

El tratamiento de aguas residuales es realizado en estaciones depuradoras de aguas residuales (EDAR) y consiste en someter el agua residual entrante a una serie de procesos que describimos a continuación:

- Tratamientos físicos o primarios. Estos consisten fundamentalmente en separar elementos en suspensión, flotación o arrastre del agua residual. Algunos de estos tratamientos son: desbaste, desarenado, desengrasado, decantación, etc.
- Tratamientos biológicos o secundarios. Estos consisten en eliminar materia orgánica en suspensión utilizando bacterias. Alguno de esos tratamientos son: fangos activos, aireación prolongada, lechos bacterianos, biodiscos, etc. Posteriormente se separan las bacterias del agua mediante decantación (llamada decantación secundaria).
- Tratamientos físico-químicos o terciarios. Estos consisten en el uso de compuestos químicos (cloro) u otros tales como rayos UV para la eliminación de virus o gérmenes.

Los costes energéticos de los tratamientos, la calidad del agua resultante del proceso, el tratamiento de los microorganismos sobrantes utilizados en los procesos biológicos (incineración y repostaje), etc. hacen necesaria la

Introducción

construcción de herramientas que permitan la simulación y control de este tipo de instalaciones.

En nuestro caso vamos a centrarnos en un tratamiento biológico denominado “fangos activos”. Lo que hace es reproducir de forma artificial los mismos procesos de autodepuración que ocurren en ríos y lagos. Fundamentalmente consiste en el desarrollo de un cultivo bacteriano disperso en forma de flóculo en un reactor agitado, aireado y alimentado de forma continua con material orgánico disuelto en el agua residual entrante.

La asociación internacional del agua (IWA-International Water Association) desarrolló una serie de modelos matemáticos (ASMx) que describen los procesos que tienen lugar en un cultivo bacteriano disperso dentro de un reactor agitado, aireado y alimentado de forma continua con material orgánico disuelto en el agua residual.

Aunque existen herramientas informáticas diseñadas para la configuración y simulación de estaciones depuradoras de aguas residuales y que se basan en los modelos ASMx (Activated Sludge Model x), su objetivo no es el de explorar con detalle las diferentes configuraciones de procesos que pueden llevarse a cabo dentro de un reactor o tanque. Están orientadas al diseño de plantas de tratamientos de residuos, por lo que se centran en la conexión y parametrización global de diferentes tipos de reactores, decantadores, espesadores, etc.

Como parte de la necesidad de simular y controlar el comportamiento de una EDAR, nosotros vamos a centrarnos en el modelado y simulación de los procesos que pueden darse dentro de un reactor según una simplificación del modelo ASM1 (que es el más básico de los desarrollados por la asociación internacional del agua).

El hecho de utilizar dos diferentes metodologías nos va a permitir afrontar el modelado de este sistema biológico desde dos puntos de vista muy diferentes. Por un lado, el modelado físico nos permite ver el sistema como un conjunto de elementos (bacterias, sólidos suspendidos, sustancias disueltas) y

procesos (basados en ecuaciones diferenciales) interconectados. Mientras que el modelado basado en agentes nos permite ver el sistema como la interacción de las bacterias con el medio que las rodea a través de acciones (reglas simples) de éstas (moverse, comer, reproducirse, etc.).

El análisis comparativo (mediante las simulaciones) entre “procesos del modelado físico”, “acciones del modelado basado en agentes” y resultados empíricos puede ayudar a una mejor comprensión y ajuste de los propios “procesos del modelado físico” y “acciones de modelado basado en agentes”.

Además, tanto la diferenciación entre masa biológica y número de bacterias como la forma de programar la muerte e hidrólisis descritas en el modelado basado en agentes del sistema de estudio pueden permitir mejorar el modelado físico del sistema de estudio (ajustándose más a la realidad).

Desarrollaremos diferentes librerías con el objetivo de modelar y simular, desde diferentes paradigmas de modelado (físico y basado en agentes), el comportamiento de estos sistemas de fangos activos (modelo ASM1 simplificado). Para ello utilizaremos los entornos de modelado Dymola y NetLogo.

La librería Modelica diseñada, permitirá componer configuraciones más complejas a partir de los modelos creados.

Las herramientas desarrolladas permitirán alcanzar una mejor comprensión de los diferentes procesos que pueden darse dentro de un reactor y los elementos involucrados en estos procesos.

1.2 Objetivos

Los objetivos de este trabajo son:

- Describir en qué consiste el modelo ASM1 que modela el comportamiento de un sistema de fangos activos. Este modelo es utilizado como base de la simulación biológica de plantas de depuración de aguas residuales.
- Describir herramientas de diseño y simulación de estaciones de aguas residuales basadas en los modelos ASM (ASM1, ASM2d, etc.)

Estructura de la memoria del Proyecto

- Describir un modelo matemático simplificado de sistema ASM1 que nos permita identificar y caracterizar los diferentes elementos (sustancias, partículas, bacterias) y los procesos en los que intervienen para tenerlos en cuenta a la hora de desarrollar los modelos.
- Desarrollar una librería programada en Modelica que permita construir diferentes configuraciones reactores de una forma gráfica y modular. Y que permita la composición del modelo ASM1 simplificado.
- Desarrollar un modelo en NetLogo que permita diferentes parametrizaciones asociadas al modelo ASM1 simplificado.
- Validar las librerías desarrolladas y discutir las similitudes y diferencias encontradas a nivel de programación y resultados.
- Discutir las ventajas e inconvenientes de la utilización de las librerías desarrolladas y proponer posibles mejoras de los desarrollos.

1.3 Estructura de la memoria del Proyecto

La memoria se ha estructurado en 7 capítulos y dos anexos que pasamos a describir:

- Capítulo 1. Indicamos cuáles son los objetivos del trabajo y cuál es la estructura del documento.
- Capítulo 2. Explicamos las dos metodologías de desarrollo que vamos a aplicar y las herramientas informáticas que vamos a utilizar para generar las librerías.
- Capítulo 3. Describimos el sistema biológico en el que nos basamos, algunas herramientas académicas y/o comerciales que utilizan este sistema como base de modelado y, por último, planteamos nuestro sistema biológico de estudio.
- Capítulo 4. Mostramos la estructura de la librería Modelica programada, así como las validaciones realizadas.

- Capítulo 5. Mostramos la estructura del modelo NetLogo programado, así como las validaciones realizadas.
- Capítulo 6. Realizamos una comparación cuantitativa y cualitativa de los resultados obtenidos y haremos comentarios sobre la programación realizada en de ambas herramientas.
- Capítulo 7. Presentamos las conclusiones y los posibles trabajos futuros.
- Anexo A. Documentación de la librería “fangosactivos” generada a través de Dymola 6.1
- Anexo B. Código fuente modelo “fangosactivos” NetLogo.

Esta memoria incluirá un CD que contendrá:

- Documento en formato pdf de la memoria.
- Fichero “fangosactivos.mo” que contiene librería Modelica desarrollada.
- Fichero “fangosactivos.nlogo” con modelo NetLogo desarrollado.

Capítulo 2. Metodologías y herramientas de modelado

2.1 Introducción

En este capítulo describimos las metodologías que vamos a aplicar a la hora de diseñar las librerías de los Capítulos 4 y 5. A continuación, detallaremos las herramientas de desarrollo, basadas en las metodologías descritas, que vamos a utilizar.

2.2 Metodologías

Toda metodología de modelado trata representar y simular diferentes sistemas (reales o teóricos).

A continuación, vamos a describir dos metodologías concretas: modelado físico y modelado basado en agentes.

2.2.1 Modelado físico

Esta metodología de modelado se basa en descomponer el sistema físico de estudio en diferentes sistemas interconectados. Este proceso de descomposición puede repetirse más de una vez. El modelo completo del sistema se obtiene combinando los modelos de los subsistemas con las relaciones existentes entre ellos (Åström, K.J., Elmqvist, H., Mattsson, S.E., 1998).

Cada modelo puede representar un sistema de naturaleza muy distinta al resto de modelos. El comportamiento del modelo se basa en las relaciones existentes entre las variables observables del subsistema que representa, por lo que suele describirse mediante un conjunto de ecuaciones diferenciales (DAE continuas o continuo-discretas).

Por tanto, para poder llevar a cabo esta metodología debemos ser capaces de:

- Describir y caracterizar cada modelo asociado a los subsistemas de forma aislada.

- Describir y caracterizar relaciones entre modelos asociados a subsistemas.
- Desarrollar estructuras jerárquicas de modelos. Un modelo podrá estar formado, a su vez, por otros modelos relacionados.

Las capacidades de esta metodología nos van a permitir aprovechar y reutilizar estos modelos como parte del modelado de otros sistemas físicos o como parte del modelado de otros subsistemas físicos del sistema estudiado.

2.2.2 Modelado basado en agentes

Esta metodología de modelado se basa en la identificación y caracterización de los elementos que realizan acciones dentro de un sistema físico. A estos elementos se les llama agentes. Se estudian las metas de los agentes, las interacciones entre agentes y las interacciones de estos con el resto del sistema.

Por este motivo los componentes básicos del sistema real están explícita e individualmente representados en el modelo (EDMONDS, B., MOSS, S. & DAVIDSSON, P., 2001).

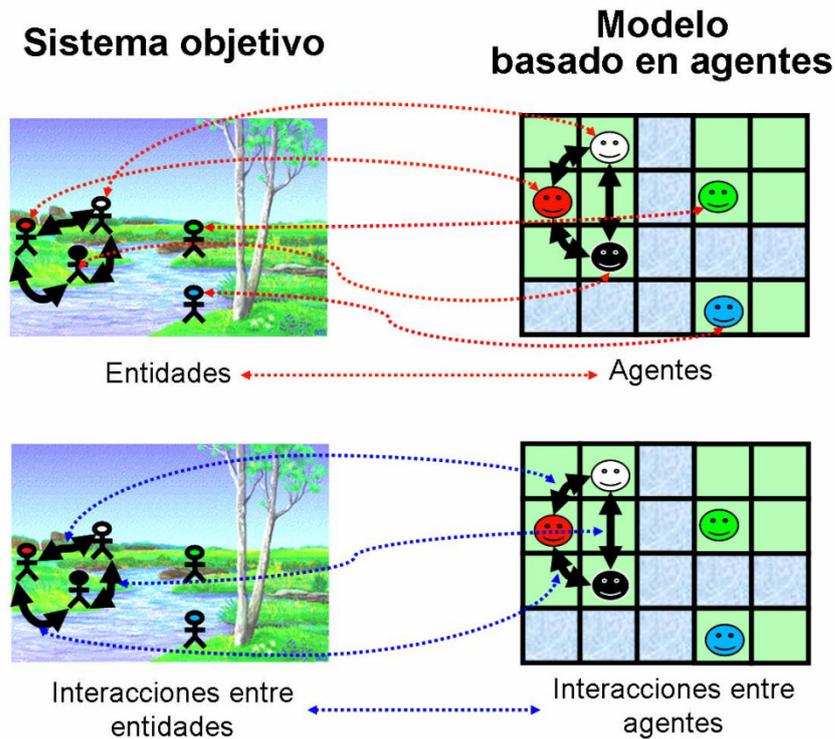


Figura 2-1: Relación sistema objetivo y modelo basado en agentes.

Izquierdo, Luis R. et al, 2008.

Los sistemas basados en agentes se caracterizan por contener diferentes agentes que son, en mayor o menor grado, autónomos, heterogéneos e independientes y que generalmente son capaces de interactuar entre sí y con su entorno (Torsun, 1995).

Uno de los puntos fundamentales de la simulación basada en agentes es el concepto de emergencia. Los fenómenos emergentes son patrones macroscópicos que surgen a partir de las interacciones descentralizadas de componentes individuales más simples (Holland, J. H., 1998). Lo que caracteriza a estos fenómenos emergentes es que su presencia o aparición no resulta evidente a partir de una descripción del sistema consistente en la especificación del comportamiento de sus componentes individuales y de las reglas de interacción entre ellos (Gilbert & Terna, 2000; Gilbert, 2002; Squazzoni, 2008).

Por tanto, para poder llevar a cabo esta metodología debemos ser capaces de identificar y caracterizar:

- Los agentes. Estos son elementos activos del sistema de estudio. Se deben identificar sus metas y objetivos. Estos elementos

activos son los que realizan acciones dentro del sistema de estudio. Pueden variar su comportamiento y estructura para poder alcanzar sus metas y objetivos.

- Variables de entorno. Estos son elementos pasivos del sistema de estudio. Son elementos que no realizan acciones sobre otros elementos del sistema.
- Interacciones entre agentes. Pueden producirse relaciones de depredación, simbiosis, etc. Entre agentes de tipos similares o diferentes. Por ejemplo: zorros<->concejos, hidrólisis bacterias.
- Interacciones entre agentes y variables de entorno. En muchos casos los agentes consumen/afectan diferentes elementos pasivos del entorno en el que se encuentran en las acciones que realizan. Por ejemplo: consumo de oxígeno, aumento de temperatura.

2.2.3 Comparación

La principal diferencia de estas dos metodologías radica en la forma de abstraer el sistema físico de estudio.

Por un lado, el modelado físico se centra más en la descripción macroscópica de los procesos desarrollados en un sistema físico. Para ello utiliza variables observables de las que obtiene, normalmente, relaciones descritas mediante ecuaciones algebraicas, ecuaciones diferenciales y eventos.

Por otro lado, el modelado basado en agentes se centra más en la descripción de los procesos que los individuos o agentes del sistema realizan. Estos procesos son procesos a nivel microscópico en el sentido de que son realizados por cada individuo o agente. No se describen de manera explícita los procesos macroscópicos que son el resultado de todas las interacciones entre los individuos.

Podemos decir que la simulación basada en agentes simula actores y los deja interactuar para crear la película, mientras que el modelado físico simula el guion de la película directamente (Izquierdo, Luis R. et al, 2008).

Debido a esa forma de abstracción, la posibilidad de modularización del sistema no puede llevarse a cabo al mismo nivel en las dos metodologías. En la metodología basada en agentes ya se parte de los componentes o elementos básicos.

De hecho en muchos casos, los agentes definidos en la metodología basada en agentes pueden no ser observables de forma directa, y por tanto, no se tienen directamente en cuenta modelos basados en modelado físico. Un ejemplo sería el de las bacterias o virus. No se tiene una medida exacta de la cantidad de bacterias o virus (que serían los agentes), pero se tienen medidas indirectas de la masa de las bacterias (biomasa).

2.3 Lenguajes, protocolos y entornos de modelado

A continuación vamos a describir las herramientas de modelado que vamos a utilizar. Estas herramientas utilizan un lenguaje de modelado estandarizado o se intentan utilizar protocolos para unificar la forma de describir los sistemas que tratan de emular.

2.3.1 Lenguaje de modelado físico Modelica

En 1996, con el objetivo de unificar todos los lenguajes de modelado físico existentes en las décadas de los 80 y 90, se inicia el desarrollo de un lenguaje que agrupe las técnicas e ideas utilizadas por estos lenguajes. En septiembre de 1997 se publica la primera versión (1.0) de Modelica.

Modelica es un lenguaje abierto de modelado de sistemas complejos multi-dominio. Permite el modelado sistemas mecánicos, eléctricos, hidráulicos u otra tipología de sistemas y sus combinaciones.

La característica principal de Modelica es que es un lenguaje:

- Modular y orientado a objetos. El diseño modular de diferentes clases permite desarrollar modelos complejos a partir de otros más sencillos.
- Acausal. De esta forma se evita la definición explícita de la causalidad computacional.

En general los sistemas físicos continuos son representados mediante modelos DAE-híbridos. El tratamiento en Modelica de los llamados eventos permite modelar sistemas de este tipo.

Como lenguaje de modelado orientado a objetos cumple una serie de principios cuya esencia está basada en la metodología de modelado físico. Esto se traduce en las siguientes características:

- Desarrollo modular. Se modela por separado cada parte del sistema y, posteriormente, se conectan los diferentes modelos, replicando la estructura del sistema físico.
- Estructura jerárquica. Un modelo puede estar compuesto por otros modelos conectados entre sí y así sucesivamente.
- Utilización de clases de modelos. Ciertas propiedades y procesos de un conjunto de modelos que solo varían en la parametrización pueden agruparse en clases.
- Utilización de herencia de clases. Es posible añadir nuevas propiedades, añadir nuevos procesos o incluso modificar procesos ya definidos partiendo de modelos ya existentes.
- Encapsulado de información. Sólo una parte de la información del modelo será accesible desde el exterior, a través de interfaces bien definidas.
- Clasificación de variables de interfaces de conexión entre modelos. Las variables de la interfaz pueden agruparse en conectores, con el fin de facilitar la descripción de su conexión. Las variables de los conectores se clasifican en:
 - Across. Estas valen lo mismo en el punto de conexión.
 - Through o Flow. Su suma vale cero en el punto de conexión.

Los modelos orientados a objetos descritos en Modelica son traducidos por el entorno de modelado en un modelo plano, con toda la estructura y

herencia eliminada. Este modelo plano es un sistema de ecuaciones algebraico diferencial (DAE) híbrido, que puede incluir discontinuidades, estructura variable y eventos (Urquía Moraleda, A., & Martín Villalba, C., 2011).

Actualmente Modelica tiene el soporte de Modelica Association (Modelica Association, 2014) que también coordina el desarrollo una librería estándar (MSL: Modelica Standard Library) con gran cantidad de modelos de uso común en los diversos campos de la ingeniería (componentes electrónicos, sistemas mecánicos, etc.). La última versión de la MSL publicada (3.2.1) nos permite reutilizar algunos de sus elementos y paquetes para explotar la capacidad de reutilización de modelos.

Describimos, a continuación dos entornos de modelado bastantes utilizados en el ámbito educativo: Dymola y OpenModelica.

2.3.1.1 Entorno de modelado Dymola

Dymola es un entorno de modelado, basado en Modelica, de carácter comercial desarrollado por Hilding Elmqvist y Dag Brück. La última versión comercializada, Dymola 2014 FD01, soporta la versión 3.2 del lenguaje Modelica. Dymola está disponible como paquete independiente o integrado en el software CATIA, ampliando las capacidades de diseño y prototipado industrial. También presenta posibilidades de interconexión con otros paquetes de cálculo matemático y simulación como MATLAB.

Los entornos de modelado ayudan a la implementación de los modelos, a la organización y gestión de las librerías, a la simulación de los modelos (compilación, resolución de ecuaciones, etc.) y al estudio y análisis de los resultados.

Otras capacidades interesantes de Dymola son:

- Modelado intuitivo. Dispone de un editor gráfico que permite asociar iconos a modelos (pantalla de iconos) y crear modelos mediante la composición de otros modelos (pantalla de esquema) simplemente arrastrándolos.

- Generación automática de documentación. Permite la generación automática de la documentación de las librerías o los componentes que se desarrollan en formato HTML.
- Interacción con Simulink. Permite la exportación de modelos para su uso con la herramienta Simulink de MATLAB.

Como se ha comentado anteriormente, Dymola genera, a partir de los modelos orientados a objetos descritos en Modelica, un modelo plano con toda la estructura y herencia eliminada. Este modelo plano es un sistema de ecuaciones algebraico diferencial (DAE) híbrido, que puede incluir discontinuidades, estructura variable y eventos. Dymola es capaz de manipular el modelo plano utilizando una serie de técnicas que comentamos a continuación:

- Clasificación de variables del modelo según el instante de evaluación. El sistema reconoce dos clases de variables:
 - Conocidas: constantes y parámetros del modelo, entradas globales al modelo y variables que aparecen derivadas (variables de estado).
 - Desconocidas o incógnitas: variables auxiliares utilizadas para representar derivadas de variables y resto de variables.
- Comprobación de singularidad estructural. Si el sistema cumple con las dos propiedades siguientes se dice que es no singular:
 - El número de incógnitas y de ecuaciones son iguales.
 - Cada incógnita puede emparejarse con una ecuación en la que aparezca y con la cual no se haya emparejado otra.
- Asignación causalidad computacional (partición). La asignación de la causalidad computacional es la decisión de qué relación debe emplearse para calcular cada incógnita (Urquía Moraleda, A., & Martín Villalba, C., 2011). Existen multitud de algoritmos de causalización. Los algoritmos más utilizados son variantes del

algoritmo de Tarjan (que es de orden lineal respecto del sistema de DAE). Estos parten de la matriz de incidencia (matriz de elementos booleanos que indica que incógnitas aparecen en cada ecuación. Las columnas representan incógnitas y las filas ecuaciones) y mediante permutaciones de filas o columnas transforman esta matriz en una matriz triangular inferior por bloques (BLT).

- Reducción del índice del modelo. Si calculamos la BTL de un sistema singular con el mismo número de ecuaciones e incógnitas llegaremos a un punto en que no se dispone de ecuación para calcular una incógnita y en el cual una ecuación es redundante. Se dice entonces que el problema es estructuralmente singular o que tiene índice superior. El índice de un modelo es una medida que relaciona las restricciones existentes entre las ecuaciones (F.E. Cellier y E. Kofman). En estos al algoritmo de Pantelides permite determinar el conjunto de ligaduras cuyas derivadas deben ser incluidas dentro del sistema para reducir el índice del modelo a 1.
- Tratamiento de lazos algebraicos. Dado un sistema no singular, es bastante probable que su BLT posea bloques diagonales no escalares. A estos bloques diagonales no escalares se les denomina lazos algebraicos. Existen varias técnicas de resolución de estos lazos algebraicos:
 - Método de Gauss. Es un método de manipulación simbólica utilizado para la resolución de sistemas lineales.
 - Método de iteración de Newton. Es un método numérico utilizado para la resolución de sistemas no lineales.
 - Técnica tearing (o rasgadura) de los lazos algebraicos no lineales. Es una simple técnica que permite reducir grandes sistemas lineales.

Aunque la última versión de Dymola fue publicada en mayo de 2015, el departamento de Informática y Automática (DIA) de la UNED tiene licencia de

uso de la versión de Dymola 6.1 publicada en el 2007, esta versión soporta la versión 2.2.1 del lenguaje Modelica.

Esta es la herramienta que vamos a utilizar para desarrollar la librería Modelica.

2.3.1.2 Entorno de modelado OpenModelica

OpenModelica (OM) es un entorno de modelado y simulación basado en Modelica. Cabe destacar que es de código abierto y gratuito, disponiendo de un desarrollo constante soportado por la organización sin ánimo de lucro Open Source Modelica Consortium (OSMC). En marzo de 2015 se publicó la última versión 1.9.2 (Web oficial OpenModelica).

Otras capacidades interesantes de este entorno son:

- Modelado intuitivo. Dispone de un editor gráfico que permite asociar iconos a modelos (pantalla de iconos) y crear modelos mediante la composición de otros modelos (pantalla de esquema) simplemente arrastrándolos.
- Incluye un plugin de Eclipse para desarrolladores avanzados.

2.3.2 Protocolo ODD de descripción de modelos basados en agentes

Existe una amplia variedad de herramientas utilizadas para el modelado basado en agentes: NetLogo, Swarm, Repast, Mason, Cormas, etc.

Al contrario que en los lenguajes de modelado físico (lenguajes de modelado orientado a objetos), no existe un lenguaje estándar definido.

Disponer de un protocolo normalizado para expresar modelos de simulación puede ayudar a promover su formulación rigurosa, así como a facilitar las revisiones y las comparaciones entre modelos. En 2006 un numeroso equipo de investigadores del dominio de sistemas socio-ecológicos propusieron el protocolo ODD (Overview, Design concepts and Details) para estandarizar la publicación de descripciones de modelos basados en agentes (Grimm et al.

2006). Este protocolo fue revisado y ampliado por los mismos autores (Grimm et al. 2010). Este protocolo no es más que una “plantilla documental” lo suficientemente abierta y flexible como para que cada investigador pueda expresar su propio trabajo.

En la siguiente tabla se describen los diferentes elementos del protocolo:

	Elements of the original ODD protocol (Grimm et al. 2006)	Elements of the updated ODD protocol
Over view	1. Purpose	1. Purpose
	2. State variables and scales	2. Entities, state variables, and scales
	3. Process overview and scheduling	3. Process overview and scheduling
Design concepts	4. Design concepts <ul style="list-style-type: none"> • Emergence • Adaptation • Fitness • Prediction • Sensing • Interaction • Stochasticity • Collectives • Observation 	4. Design concepts <ul style="list-style-type: none"> • Basic principles • Emergence • Adaptation • Objectives • Learning • Prediction • Sensing • Interaction • Stochasticity • Collectives • Observation
Detail s	5. Initialization	5. Initialization
	6. Input	6. Input data
	7. Submodels	7. Submodels

Tabla 2-1: Los siete elementos del protocolo ODD.

Grimm et al., 2010.

En <http://www.ufz.de/index.php?de=10466> puede encontrarse la principal fuente de información al respecto, junto con una plantilla en inglés para ayudar en la utilización del protocolo. En esta misma ubicación URL, los autores solicitan que si se usa el protocolo se debe hacer referencia según la siguiente formulación: “La descripción del modelo sigue el protocolo ODD (Overview, Design concepts, Details) según Grimm et al. (2006; 2010).”

Los objetivos principales del ODD son hacer descripciones de los modelos más comprensibles y completos, y así hacer que los ABMs (Agent Based Model) estén menos sujetos a la crítica por no ser reproducibles.

Describimos, a continuación, dos entornos de modelado utilizados en la metodología de modelado basada en agentes: NetLogo y MASON.

2.3.2.1 Entorno de modelado NetLogo

Es un entorno de modelado programable para la simulación de los fenómenos naturales y sociales. Fue escrito por Uri Wilensky en 1999 y ha estado en continuo desarrollo desde entonces en el Centro de aprendizaje conectado y modelado basado en computadoras (Web oficial NetLogo).

Está orientado modelar sistemas complejos con una gran cantidad de individuos que operan de forma independiente. Esto hace que sea posible explorar la conexión entre el comportamiento a nivel microscópico de los individuos y los patrones a nivel macroscópico que emergen de su interacción.

Tiene una extensa documentación y tutoriales. También viene con una biblioteca de modelos, que pueden ser utilizados y modificados. Estas simulaciones abordan las áreas de contenido en las ciencias naturales y sociales, incluyendo la biología y la medicina, la física y la química, matemáticas y ciencias de la computación, y la economía y la psicología social. (Web oficial NetLogo)

Esta herramienta se divide en tres áreas principales:

- Área de interacción con el usuario. Aquí se pueden definir elementos gráficos, casillas, deslizadores, botones que permiten al usuario introducir los parámetros de la simulación, visualizar los resultados e interactuar con el sistema. Además se define el entorno (mundo o tablero) en el que los agentes se van a ubicar, indicando el número de casillas, la extensión del mundo y casillas.
- Área de documentación. Está destinada a explicar al usuario todo lo referente a la simulación diseñada. Se utiliza un lenguaje propio muy básico.
- Área de programación. Está destinada a las tareas propias de programación.

Las capacidades más destacadas de este entorno son:

- Escrito en Java. Esto permite la ejecución de diferentes sistemas operativos y la seguridad de obtener los mismos resultados.
- Dispone de un lenguaje propio que permite definir variables de entorno, agentes, variables asociadas a agentes fácilmente. Dispone de primitivas que permiten crear, eliminar y transformar agentes.
- Permite definir gráficamente tanto el entorno de los agentes (mundo o tablero) como un área de interacción con el usuario de forma que este puedan indicar parámetros iniciales, visualizar gráficas de forma sencilla e interactuar con las simulaciones. Puede realizar consultas (consola de observación) para obtener información de la simulación, incluso realizar modificaciones durante la simulación.
- Incorpora una herramienta de automatización para la repetición de simulaciones, incluso con cambios de parámetros iniciales, y para la exportación de resultados en formato CSV.
- Incorpora un modelador de sistemas dinámicos. Esta herramienta te permite definir diagramas en las que se indican las relaciones entre las poblaciones de los agentes. A partir de estos diagramas se genera código NetLogo que puede ser ejecutado y visualizado desde la solapa de ejecución.
- Puede alimentar una herramienta participativa de simulación llamada HubNet. A través del uso de ordenadores en red o dispositivos de mano tales como Texas Instruments calculadoras gráficas, cada alumno puede controlar un agente en una simulación.
- Visualización 2D y 3D de los agentes.

Por todas estas razones, hemos optado por utilizar este entorno de modelado para crear la librería del sistema simplificado ASM1 que está

programada siguiendo el modelado basado en agentes. La versión de NetLogo que vamos a utilizar es la 5.1.0 (extensión API versión: 5.0)

2.3.2.2 Entorno de modelado MASON

Es un conjunto de bibliotecas escritas en lenguaje Java, especializadas en la construcción de modelos de simulación altamente eficientes para sistemas de acontecimientos discretos con gran cantidad de agentes. Se trata de una iniciativa conjunta entre el Laboratorio de Computación Evolucionaria (ECLab) y el Centro de Complejidad Social, de la Universidad George Mason (USA) (Web oficial MASON).

El modelado, la visualización de datos y la extracción de datos para estudios estadísticos se realizan programando en java. Para ello, las clases programadas heredan de clases definidas en librerías específicas de MASON.

Tiene una extensa documentación (Sean Luke, 2014) y tutoriales. También viene con una amplia colección de simulaciones pre-escritos que se pueden utilizar y modificar.

Las capacidades más destacadas de este entorno son:

- Escrito en Java. Esto permite la ejecución de diferentes sistemas operativos y la seguridad de obtener los mismos resultados. Además, permite disponer de toda la potencia de un lenguaje orientado a objetos.
- Rápido, portátil y de pequeño tamaño. Las librerías ocupan muy poco tamaño y están diseñadas para una ejecución eficiente.
- Los modelos son completamente independientes de la visualización y extracción de datos.
- Los modelos pueden ser simulados en diferentes contenedores (HTTP, aplicaciones Java, etc.)
- Visualización 2D y 3D.

- Puede generar instantáneas de las visualizaciones, QuickTime películas, gráficos y salidas de datos.

2.4 Conclusiones

En este capítulo hemos tratado de explicar en qué consisten las metodologías de modelado que vamos a utilizar a la hora de modelar el sistema biológico de estudio descrito en el Capítulo 3.

También hemos realizado una pequeña descripción del lenguaje de modelado físico Modelica, el protocolo ODD y algunos entornos de modelado existentes.

El entorno de modelado que vamos a utilizar para construir la librería Modelica (modelado físico) es Dymola. El entorno de modelado que vamos a utilizar para construir el modelo basado en agentes es NetLogo.

Capítulo 3. Sistema biológico de estudio

3.1 Introducción

En este capítulo vamos a describir el modelo ASM1 indicado en el Capítulo 1. A continuación hablaremos de herramientas disponibles para uso educativo y comercial basadas en el modelo ASM1 y posteriores (ASM2d, ASM3...). Por último, definiremos el sistema que vamos a utilizar de base para la creación de las librerías de los Capítulos 4 y 5.

3.2 Sistemas de fangos activos ASM1

El tratamiento biológico denominado “fangos activos” consiste en el desarrollo de un cultivo bacteriano disperso en forma de floculo en un reactor agitado, aireado y alimentado de forma continua con material orgánico disuelto en el agua residual entrante (Llavador Colomer, Fernando, 2001).

De forma esquemática, los dos tipos de bacterias que son descritas en el modelo ASM1 son: autótrofas (se alimentan de amonio y utilizan oxígeno para la oxidación) y heterótrofas (se alimentan directamente de materia orgánica de absorción rápida y pueden utilizar O_2 o nitratos y nitritos (NO) para los procesos de oxidación). Los procesos que tienen lugar dentro del reactor y que son tenidos en cuenta en el modelo ASM1 se pueden clasificar en 4 tipos:

- Procesos de crecimiento de bacterias/biomasa. Las bacterias pueden crecer y reproducirse si existe materia orgánica de absorción rápida (base de carbono) o amonio (NH_4+NH_3) que puedan asimilar utilizando O_2 (**crecimiento aeróbico**) o nitratos-nitritos (NO) (**crecimiento anóxico**) como oxidantes. Este proceso produce un aumento en la biomasa, pero no indica el número de bacterias activas o vivas creadas. Las ecuaciones utilizadas corresponden a cinéticas de Monod. En el caso de las bacterias heterótrofas, sí se produce un consumo de amonio, pero éste no se tiene en cuenta dentro de las ecuaciones de crecimiento de estas bacterias.

- Procesos de decaimiento de bacterias/biomasa. Las bacterias mueren o consumen energía debido a otros procesos y esto se traduce en una pérdida constante de biomasa (masa de las bacterias). Parte de la masa de las bacterias muertas es tratada como compuestos orgánicos de alto peso molecular (materia orgánica lentamente biodegradable) y otra parte como materia inerte en suspensión (que no puede ser asimilada por las bacterias vivas). Este proceso produce una disminución en la biomasa, pero no indica el número de bacterias que dejan de ser activas (muerte bacteriana). Las ecuaciones utilizadas corresponden a cinéticas de primer orden.
- Procesos de hidrólisis. Muchos compuestos orgánicos o nitrogenados de alto peso molecular, en forma de coloides o de partículas sólidas en suspensión, no pueden ser directamente asimilados por las bacterias (se les denomina como materia orgánica lentamente biodegradable). Por ese motivo es necesaria una etapa previa de ruptura que es llevada a cabo por enzimas extracelulares. Se puede hablar también de hidrólisis aeróbica o anóxica, pero no afecta a la concentración de los oxidantes. Las ecuaciones utilizadas corresponden a cinéticas de Monod.
- Procesos de amonificación de nitrógeno orgánico soluble. Ciertas bacterias realizan procesos de amonificación que transforman el nitrógeno orgánico disuelto en amonio. Las ecuaciones utilizadas corresponden a cinéticas de primer orden.

De forma general, las principales características del modelo ASM son:

- Notación matricial para la descripción matemática del sistema.
- Estandarización de símbolos. La existencia de diferentes notaciones y símbolos de los anteriores modelos suponía una dificultad añadida.

- Utilización de DQO (demanda química de oxígeno) en lugar de DBO (demanda biológica de oxígeno) como unidad de concentración de la biomasa y materia orgánica.

El modelo ASM1 fue publicado en 1987 y tiene como propósito simular la degradación de la materia orgánica así como la nitrificación (crecimiento bacterias autótrofas en condiciones aeróbicas) y desnitrificación (crecimiento bacterias heterótrofas en condiciones anóxicas) de los procesos de fangos activos. En 1995, se publicó el modelo ASM2 que suma la eliminación de fósforo porque se estima que el proceso metabólico de acumulación interna es importante; y en el año de 1999, se modifica ASM1 en ASM3 y el ASM2 en ASM2d.

A continuación mostramos la tabla del modelo ASM1 y la comentamos:

Component	\rightarrow	i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Process Rate, ρ_i [ML ⁻³ T ⁻¹]
j	Process	\downarrow	S_I	S_S	X_I	X_S	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	$-i_{XB}$	S_{NH}	X_{ND}	S_{ALK}	
1	Aerobic growth of heterotrophs		$\frac{1}{Y_H}$				1			$\frac{1 - Y_H}{Y_H}$						$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$
2	Anoxic growth of heterotrophs		$\frac{1}{Y_H}$				1			$\frac{1 - Y_H}{2.86 Y_H}$						$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_g X_{B,H}$
3	Aerobic growth of autotrophs							1		$\frac{4.57}{Y_A} + 1$						$\hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$
4	'Decay' of heterotrophs								β							$b_H X_{B,H}$
5	'Decay' of autotrophs								β							$b_A X_{B,A}$
6	Ammonification of soluble organic nitrogen															$k_{d,ND} X_{B,H}$
7	'Hydrolysis' of entrapped organics															$k_b \frac{X_S / X_{B,H}}{K_X + (X_S / X_{B,H})} \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) X_{B,H}$
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen															$\rho_7 (X_{ND} / X_S)$
Observed Conversion Rates [ML ⁻³ T ⁻¹]			$\eta_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$													
Stoichiometric Parameters:			$\eta_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$													
Heterotrophic yield: Y_H			Soluble inert organic matter [M(COD)-3]													
Autotrophic yield: Y_A			Readily biodegradable substrate [M(COD)-3]													
Fraction of biomass yielding particulate products: β			Particulate inert organic matter [M(COD)-3]													
Mass N/Mass COD in biomass: i_{XB}			Slowly biodegradable substrate [M(COD)-3]													
Mass N/Mass COD in products from biomass: i_{XP}			Active heterotrophic biomass [M(COD)-3]													
			Active autotrophic biomass [M(COD)-3]													
			Particulate products arising from biomass decay [M(COD)-3]													
			Oxygen (negative COD) [M(-COD)-3]													
			Nitrate and nitrite nitrogen [M(N)-3]													
			Soluble biodegradable organic nitrogen [M(N)-3]													
			Particulate biodegradable organic nitrogen [M(N)-3]													
			Alkalinity - Molar units													
			Kinetic Parameters:													
			Heterotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO}, b_H$													
			Autotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A$													
			Correction factor for anoxic growth of heterotrophs: η_g													
			Ammonification: k_b													
			Hydrolysis: k_b, K_X													
			Correction factor for anoxic hydrolysis: η_h													

Tabla 3-1: Tabla en notación matricial ASM1.

Ulf Jeppsson, 1996.

El modelo cuenta con:

- 13 componentes en total: 7 disueltos y 6 de partículas:

- S_I . Sustancias disueltas no biodegradables.
- S_S . Sustancias disueltas rápidamente biodegradables.
- X_I . Partículas o sustancias en suspensión no biodegradables.
- X_S . Partículas o sustancias en suspensión lentamente biodegradables.
- $X_{B,H}$. Biomasa activa compuesta por bacterias heterótrofas.
- $X_{B,A}$. Biomasa activa compuesta por bacterias autótrofas.
- X_p . Partículas o sustancias en suspensión no biodegradables que provienen de proceso de decaimiento de bacterias.
- S_O . Oxígeno disuelto.
- S_{NO} . Nitratos y nitritos disueltos.
- S_{NH} . Amonio disuelto.
- S_{ND} . Nitrógeno orgánico biodegradable disuelto proveniente de procesos de amonificación.
- X_{ND} . Partículas de nitrógeno orgánico biodegradable proveniente de proceso de decaimiento de bacterias.
- S_{ALK} . Alcalinidad. No afecta a ningún proceso en el modelo, pero se calcula para ver su valor teórico. En el sistema real sí afecta este parámetro pero se suele tener controlado.
- 9 procesos: 3 de crecimiento, 2 de decaimiento y 4 de hidrólisis:
 - Procesos de crecimiento basados en funciones de cinética de Monod:
 - Crecimiento aerobio de bacterias heterótrofas.
 - Crecimiento anóxico de bacterias heterótrofas.
 - Crecimiento aerobio de bacterias autótrofas.
 - Procesos de decaimiento basados en funciones de cinética de primer orden:

Sistemas de fangos activos ASM1

- Decaimiento bacterias heterótrofas.
- Decaimiento bacterias autótrofas.
- Procesos de hidrólisis basados en funciones de cinética de Monod:
 - Hidrólisis de la materia orgánica.
 - Hidrólisis del nitrógeno orgánico biodegradable disuelto proveniente de procesos de amonificación.
- Procesos de amonificación basados en funciones de cinética de primer orden:
 - Amonificación de partículas de nitrógeno orgánico biodegradable proveniente de proceso de decaimiento de bacterias.

Las constantes utilizadas en la tabla de componentes y procesos han sido calculadas y ajustadas mediante procedimientos empíricos. Los parámetros utilizados vienen indicados en la siguiente tabla para un pH neutro:

IAWQ model parameters	symbol	unit	20 °C	10 °C	literature
<i>Stoichiometric parameters</i>					
Heterotrophic yield	Y_H	g cell COD formed (g COD oxidized) ⁻¹	0.67	0.67	0.38-0.75
Autotrophic yield	Y_A	g cell COD formed (g N oxidized) ⁻¹	0.24	0.24	0.07-0.28
Fraction of biomass yielding particulate products	f_p	dimensionless	0.08	0.08	–
Mass N/mass COD in biomass	i_{XB}	g N (g COD) ⁻¹ in biomass	0.086	0.086	–
Mass N/mass COD in products from biomass	i_{XP}	g N (gCOD) ⁻¹ in endogenous mass	0.06	0.06	–
<i>Kinetic parameters</i>					
Heterotrophic max. specific growth rate	$\hat{\mu}_H$	day ⁻¹	6.0	3.0	0.6-13.2
Heterotrophic decay rate	b_H	day ⁻¹	0.62	0.20	0.05-1.6
Half-saturation coefficient (hsc) for heterotrophs	K_S	g COD m ⁻³	20	20	5-225
Oxygen hsc for heterotrophs	$K_{O,H}$	g O ₂ m ⁻³	0.20	0.20	0.01-0.20
Nitrate hsc for denitrifying heterotrophs	K_{NO}	g NO ₃ -N m ⁻³	0.50	0.50	0.1-0.5
Autotrophic max. specific growth rate	$\hat{\mu}_A$	day ⁻¹	0.80	0.30	0.2-1.0
Autotrophic decay rate	b_A	day ⁻¹	0.20	0.10	0.05-0.2
Oxygen hsc for autotrophs	$K_{O,A}$	g O ₂ m ⁻³	0.4	0.4	0.4-2.0
Ammonia hsc for autotrophs	K_{NH}	g NH ₃ -N m ⁻³	1.0	1.0	–
Correction factor for anoxic growth of heterotrophs	η_g	dimensionless	0.8	0.8	0.6-1.0
Ammonification rate	k_a	m ³ (g COD day) ⁻¹	0.08	0.04	–
Max. specific hydrolysis rate	k_h	g slowly biodeg. COD (g cell COD day) ⁻¹	3.0	1.0	–
Hsc for hydrolysis of slowly biodeg. substrate	K_X	g slowly biodeg. COD (g cell COD) ⁻¹	0.03	0.01	–
Correction factor for anoxic hydrolysis	η_h	dimensionless	0.4	0.4	–

Tabla 3-2: Valores por defecto de los parámetros ASM1.

Ulf Jeppsson, 1996.

Cierto número de hipótesis deben ser hechas para que el modelo sea útil en la práctica. Algunas son a nivel físico y otras a nivel matemático. Pasamos a enumerarlas:

- El sistema opera a temperatura constante.
- El pH es constante y cercano a pH neutro.
- Se asume que los coeficientes de las expresiones son constantes. Éstas dependen de la naturaleza del agua residual y debe modificarse si ésta cambia.
- Los efectos en la limitación de nitrógeno y otros nutrientes inorgánicos no han sido considerados.
- Los factores de corrección para la desnitrificación son constantes para un tipo de agua residual concreto.
- Los coeficientes de nitrificación se toman como constantes.
- La biomasa heterótrofa es homogénea y no sufre cambios en la diversidad de las especies con el tiempo. Esto significa que los efectos de los gradientes de concentración de sustrato, la configuración del reactor, las características de sedimentación de lodos, etc... no se consideran.
- La captura de materia sólida en suspensión es instantánea.
- La hidrólisis de materia orgánica y nitrogenada van emparejadas y ocurren de forma instantánea con tasas idénticas.
- El tipo de aceptador de electrones no afecta a la pérdida de biomasa activa por decaimiento o por coeficiente de rendimiento de producción de biomasa de heterótrofos.

3.3 Herramientas actuales específicas

Existen diversas herramientas que permiten el modelado y simulación de plantas de tratamiento de aguas residuales que utilizan como base los modelos ASM.

En concreto vamos a describir:

- Una librería modélica construida para este fin. Esta nos va a permitir modelar y simular plantas de aguas residuales y añadir nuevos elementos de modelado.
- Un software específico diseñado para la configuración de plantas de aguas residuales.

3.3.1 Librería Modelica WasteWater

Esta librería contiene tres modelos de lodos activados de diferente complejidad (ASM1, ASM2d and ASM3) junto con los componentes esenciales utilizados en plantas de tratamiento de aguas residuales (Gerald Reichl, 2003).

La librería se estructura en una serie de paquetes. Describimos los más significativos:

- Paquete ASM1. Este paquete todo lo necesario para componer plantas de tratamiento de aguas residuales utilizando el modelo ASM1.
- Paquete ASM2. Este paquete todo lo necesario para componer plantas de tratamiento de aguas residuales utilizando el modelo ASM2.
- Paquete ASM3 Este paquete todo lo necesario para componer plantas de tratamiento de aguas residuales utilizando el modelo ASM1.

Estos paquetes contienen elementos que permiten:

- Diferentes configuraciones de tanques donde se producen proceso de lodos/fangos activos.

- Conexión entre tanques: divisores y mezcladores.
- Introducción/regulación/extracción de diferentes componentes existentes en los tanques: Fuentes de agua residual, aireadores, bombas, salidas de agua al exterior, salidas de material biológico (reactores de estabilización materia orgánica)
- Sensores: Sensores de oxígeno, DQO, etc.
- Clarificadores o decantadores primarios. Su objetivo es separar los sólidos en suspensión antes de pasar el agua residual de entrada a los tanques.
- Clarificadores o decantadores secundarios. Su objetivo es tratar el efluente proveniente de los tanques y separar el lodo activo (biomasa) del resto del agua residual tratada. Se incluyen numerosos modelos de clarificadores secundarios.

Mostramos el esquema un modelo de la propia librería que representa una planta sencilla (ASM1.Examples.SmallPlant). El esquema contiene:

- Un origen de aguas residuales (WWSource) que regula la entrada de agua en la planta.
- Tres tanques donde se producen procesos de nitrificación y desnitrificación que utilizan modelo ASM1 (tank1, tank2, tank3).
- Un decantador secundario que permite separar la materia biológica del agua tratada (Settler).
- Seis sensores de sensores de medición de concentración en la salida de los tanques y decantador.
- Dos aireadores conectados a los tanques (blower1, blower2). Uno de ellos está regulado por un lazo de control (tank3→sensor_O2→lazo de control →blower2).
- Dos elementos de interconexión entre tanques: mixer, divider.
- Tres elementos de introducción y extracción. Bombas (recycle, return, WasteP..).

- Dos elementos de salida. Salida de agua al exterior (Effluent) y salida de material biológico (WasteSlu...).

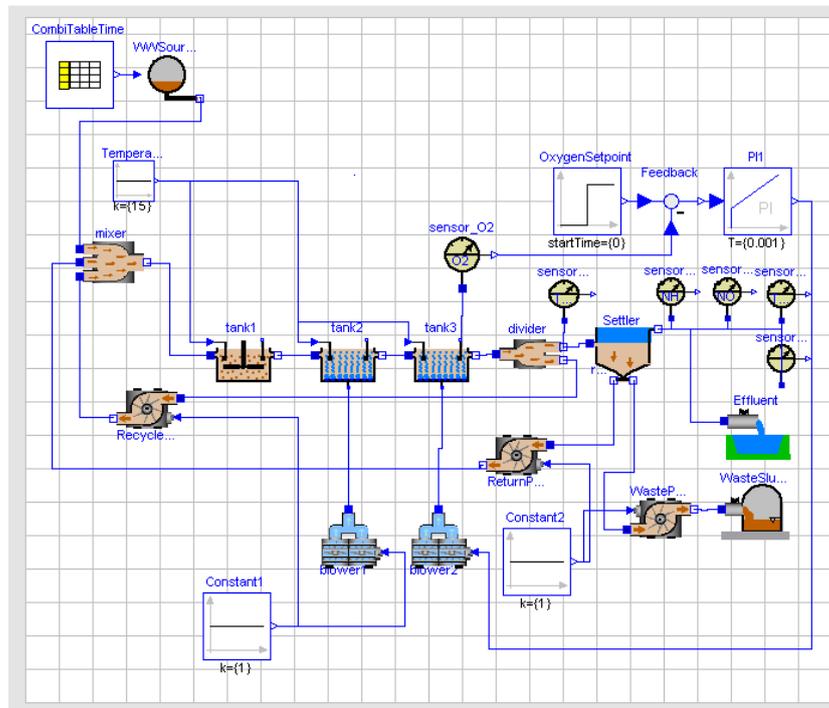


Figura 3-1: Librería WasteWater. Modelo ASM1.Examples.SmallPlant.

3.3.2 Programa de simulación DESSAS

DESASS (Design and Simulation of Activated Sludge Systems) es un simulador de estaciones depuradoras de aguas residuales urbanas configurado bajo Windows, diseñado y optimizado para la investigación de los procesos de eliminación de materia orgánica y nutrientes, y enfocado para el entrenamiento de personal y para propósitos educativos (Ferrer J., Seco A., Serralta J., Ribes J., Manga J., Asensi E., Morenilla J.J. y Llavador F., 2008).

El programa tiene implementado un algoritmo de modelación matemática basado en un modelo biológico general, desarrollado por el propio grupo de investigación, denominado BNRM1 (Biological Nutrient Removal Model No.1), que permite la simulación de todas las operaciones básicas de una EDAR. Incluye además la posibilidad de considerar los procesos biológicos que tienen

lugar en los decantadores y espesadores junto con los procesos de sedimentación y compresión del fango. En este modelo, los procesos en los que intervienen DQO, nitrógeno y fosforo están basados en los procesos indicados en el modelo ASM2d (A Seco, J Ribes, J Serralta, J Ferrer, 2004. Henze et al., 1999).

Algunas de las características más importantes son:

- Simula una gran variedad de configuraciones de plantas permitiendo fijar los volúmenes, caudales y concentraciones que van desde plantas de experimentación (piloto), hasta plantas de gran tamaño.
- Permite la simulación dinámica de variaciones de cargas (variación de carga diurna, eliminación de lodos en exceso, relaciones de recirculación).
- Posibilidad de simular los procesos de sedimentación en los decantadores y espesadores, además de los procesos biológicos que se pueden producir en ellos.
- Diseño de los sistemas de aireación, mediante tres tipos de maquinarias (Difusores y soplantes, Turbinas, Venturi).
- Contiene un módulo de control de las concentraciones de oxígeno, amonio y nitrato en sistemas de fangos activados basado en lógica difusa.

Mostramos un ejemplo de una planta según modelo BNRM1:

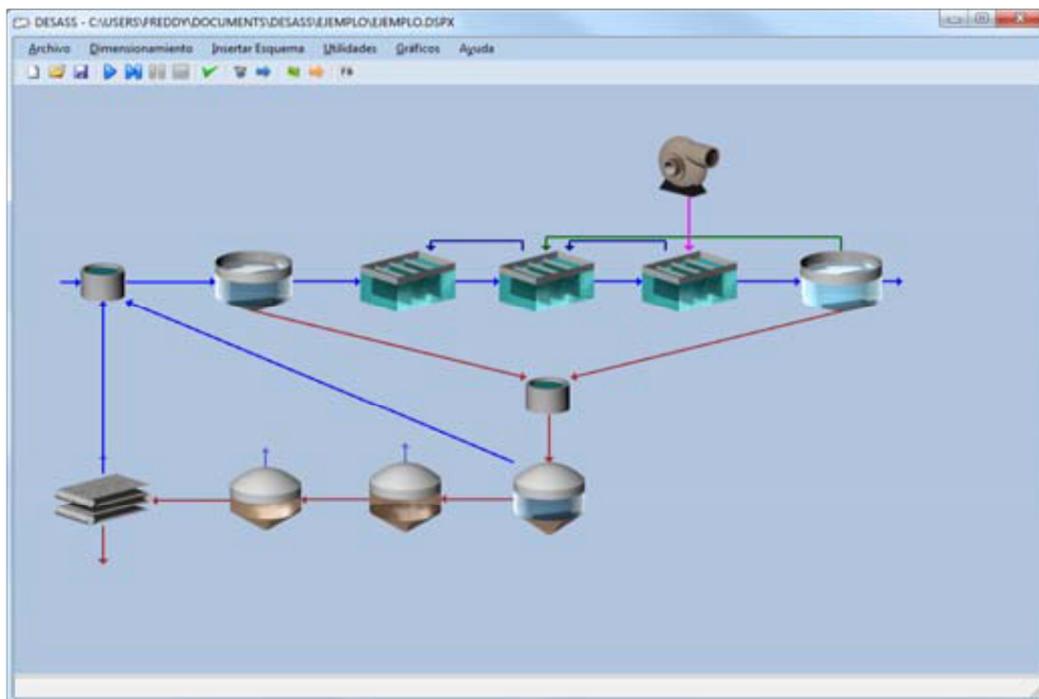


Figura 3-2: Ejemplo de planta simulada con DESASS basada en BNRM1.

Ferrer J., Seco A., Serralta J., Ribes J., Manga J., Asensi E., Morenilla J.J. y Llavador F., 2008.

3.4 Sistema simplificado de estudio

En la sección 3.1 se ha descrito de manera, bastante esquemática, el modelo ASM1. Queda patente la complejidad del sistema y es evidente que el estudio completo de este modelo queda fuera del alcance de este trabajo.

Pero lo visto nos va a permitir tener una serie de conceptos claros y una serie de datos de referencia (tasas de crecimiento, coeficientes, etc.) de forma que nuestro sistema de estudio estará respaldado a nivel teórico y empírico, y podremos discutir las simulaciones con datos cercanos a la realidad.

Reduciremos el modelo ASM1 para que podamos llegar a un sistema más simple que nos permita realizar comparaciones entre las dos formas de modelado computacional propuestas (modelado y simulación). Para ello nos centraremos en el estudio de la población de organismos heterótrofos y en como eso afecta a los consumos de sustrato orgánico, oxígeno y NO (nitratos-nitritos).

El comportamiento general de sistema no va a ser muy diferente del ASM1, ya que las bacterias heterótrofas son las que más contribuyen al consumo

de material orgánico, no se controlan los niveles de NO, y la existencia de amonio no se tiene en cuenta en los procesos de crecimiento de estas bacterias (aunque se indica un consumo del mismo)

Por tanto, los procesos internos implicados que vamos a tratar son:

- Crecimiento aerobio heterótrofos
- Crecimiento anóxico heterótrofos
- Decaimiento heterótrofos
- Hidrólisis materia orgánica procedente de decaimiento de heterótrofos

Y los componentes a estudiar son:

- S_S . Sustancias disueltas rápidamente biodegradables.
- X_S . Partículas o sustancias en suspensión lentamente biodegradables.
- $X_{B,H}$. Biomasa activa compuesta por bacterias heterótrofas.
- X_P . Partículas o sustancias en suspensión no biodegradables que provienen de proceso de decaimiento de bacterias
- S_O . Oxígeno disuelto
- S_{NO} . Nitratos y nitritos disueltos

Si trasladamos lo indicado a la tabla ASM1 (Tabla 3-1: Tabla en notación matricial ASM1) tendríamos que el sistema se reduce a las filas y columnas resaltadas a continuación:

$\rho_1 = \hat{\mu}_H \frac{S}{K_s + S} \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} X_{B,H}$ <p>Proceso de crecimiento sustrato-oxidante. Cinética Monod</p>
$\rho_2 = \hat{\mu}_H \eta_g \frac{S}{K_s + S} \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} X_{B,H}$ <p>Proceso de crecimiento sustrato-oxidante-inhibidor (oxidante). Cinética Monod</p>
$\rho_4 = b_H X_{B,H}$ <p>Proceso de decaimiento. Cinética primer orden</p>
$\rho_7 = k_h \frac{X_S / X_{B,H}}{K_X + X_S / X_{B,H}} \left[\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} + \eta_h \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right] X_{B,H}$ <p>Dos subprocesos de hidrolisis: hidrólisis (oxidante) e hidrolisis (oxidante)-inhibición (oxidante). Cinética Monod.</p>
$\frac{dS_S}{dt} = -\frac{1}{Y_H} (\rho_1 + \rho_2) + \rho_7$
$\frac{dX_S}{dt} = (1 - f_p) \rho_4 - \rho_7$
$\frac{dX_{B,H}}{dt} = \rho_1 + \rho_2 - \rho_4$
$\frac{dS_O}{dt} = -\frac{1 - Y_H}{Y_H} \rho_1$
$\frac{dS_{NO}}{dt} = -\frac{1 - Y_H}{2.86 Y_H} \rho_1$

Tabla 3-4: Sistema de ecuaciones del sistema biológico de estudio.

Conclusiones

Las constantes utilizadas va a ser las indicadas en la tabla (Tabla 3-2: Valores por defecto de los parámetros ASM1), para 20 °C. **La única excepción es que la unidad temporal utilizada será la diez minutil (todas las constantes de tiempo serán divididas por 144)**. De esta forma podremos comparar las simulaciones obtenidas de las dos librerías programadas utilizando valores de parámetros no demasiado pequeños.

3.5 Conclusiones

En este capítulo hemos descrito el modelo ASM1 en base a sistema de ecuaciones diferenciales expuesto en la tabla. Este modelo, junto con el resto de modelos ASM, sirve de base para el desarrollo de herramientas de simulación de plantas de aguas residuales.

Se han enumerado varias librerías y/o programas específicos que permiten realizar simulaciones de plantas de aguas residuales completas.

El programa de simulación DESSAS, no permite crear nuevos modelos de tanques, solo permite parametrizar los ya definidos. La librería Modelica WasteWater sí lo permite, pero no suministra elementos que permitan diseñar estos modelos como composición de otros submodelos (los modelos de tanque ASM1.nitri y ASM1.deni son atómicos)

Por ultimo, se ha definido de manera clara el sistema biológico utilizado como base para la construcción de las librerías de los Capítulos 4 y 5.

Capítulo 4. Librería Modelica FangosActivos

4.1 Introducción

Es este capítulo vamos a describir con detalle la estructura del paquete desarrollado utilizando el entorno de modelado Dymola.

Para ello se ha aplicado la metodología de modelado físico descrita en el capítulo 2 al sistema biológico de estudio especificado en el capítulo anterior.

4.2 Estructura

El software desarrollado aprovecha las características de herencia y modularidad que proporciona Modelica. Además, a cada clase/modelo se le asocia un icono representativo. En otros casos, los modelos son definidos de forma gráfica en forma de diagramas.

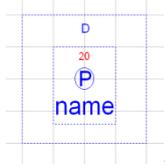


Figura 4-1: Paquete Modelica fangosactivos.

Por este motivo el software sigue una estructura jerárquica de paquetes que pasamos a describir:

- Unidades. Contiene diferentes tipos que representan unidades de medida genérica. Estos son:
 - Concentración (sus unidades pueden ser COD o g(N)/m^3).
 - Velocidad de concentración (respecto a unidad de tiempo: 10 minutas).
- Conectores. Este paquete contiene conectores que relacionan sustancias y organismos con los procesos en los que están involucrados. Estas sustancias y organismos pueden proceder del mismo reactor o del exterior. Es importante remarcar que dentro de un reactor las conexiones siempre empiezan en elementos y que las conexiones de exterior siempre empiezan en los reactores. Se definen dos tipos de enlaces:
 - Enlaces que conectan elementos con procesos (todo dentro de un reactor). El icono que representa esta clase es: .
 - Enlaces que conectan cada una de las entradas/salidas de reactores con el exterior. El icono que representa esta clase es: .
- Elementos. Este paquete contiene diferentes modelos que representan las sustancias y organismos existentes en el interior de un reactor. Se definen diferentes tipos de elementos que heredan del modelo parcial “concentración”. A continuación procedemos a enumerarlos:
 - Sustancias disueltas. En el icono que representa esta clase se indica en rojo la cantidad inicial que se utiliza si es necesaria

(*fixed=false*). El icono que representa esta clase es:

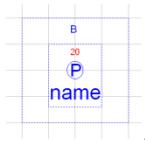


- Sustancias o partículas en suspensión. En el icono que representa esta clase se indica en rojo la cantidad inicial que se utiliza si es necesaria (*fixed=false*). El icono que representa



esta clase es:

- Biomasa o masa bacterias. En el icono que representa esta clase se indica en rojo la cantidad inicial que se utiliza si es necesaria (*fixed=false*). El icono que representa esta clase es:



- Procesos. Este paquete contiene diferentes modelos que representan procesos atómicos que pueden producirse en el interior de un reactor. Los parámetros por defecto de estos procesos son los indicados en la Tabla 3-2: Valores por defecto de los parámetros ASM1 para 20 °C, teniendo en cuenta que la unidad temporal será la diez minutal (las contantes cinéticas que incluyan tiempo se dividirán por 144). Se define diferentes tipos de procesos que heredan del modelo parcial “proceso”. A continuación procedemos a enumerarlos:

- Procesos de crecimiento. Existe una subdivisión que diferencia la naturaleza cinética básica utilizada. En este caso solo se han implementado modelos que utilizan expresiones cinéticas basadas en la ecuación de Monod. Los procesos de crecimiento implementados y que están incluidos en el subpaquete “monod” son:

- Crecimiento de biomasa utilizando un sustrato y un oxidante.
- Crecimiento de biomasa utilizando un sustrato, un oxidante y un inhibidor del oxidante.
- Procesos de decaimiento. Existe una subdivisión que diferencia la naturaleza cinética básica utilizada. En este caso solo se han implementado modelos que utilizan expresiones cinéticas basadas en ecuaciones de primer orden. Los procesos de crecimiento implementados y que están incluidos en el subpaquete “primerorden” son:
 - Decaimiento de biomasa.
 - Decaimiento de biomasa y transformación de esta en dos elementos nuevos (sustancias en suspensión).
- Procesos de hidrólisis. Existe una subdivisión que diferencia la naturaleza cinética básica utilizada. En este caso solo se han implementado modelos que utilizan expresiones cinéticas basadas en la ecuación de Monod. Los procesos de crecimiento implementados y que están incluidos en el subpaquete “monod” son:
 - Hidrólisis de un producto en suspensión con un oxidante, realizada por un elemento de biomasa y que da resultado un incremento en otro elemento en suspensión.
 - Hidrólisis de un producto en suspensión con un oxidante y un inhibidor del oxidante (otro oxidante), realizada por un elemento de biomasa y que da resultado un incremento en otro elemento en suspensión.

- Procesos externos. Este paquete contiene modelos que corresponden a procesos que afectan al comportamiento de los reactores. Pueden introducir o extraer elementos de un reactor. Se define diferentes tipos de procesos que heredan del modelo parcial “concentracionExterna”. Los procesos externos definidos son:
 - Concentración constante. Este proceso permite mantener la concentración indicada de un reactor siempre constante. Simula un regulador que fija la concentración.
 - Velocidad de concentración constante. Este proceso permite mantener la velocidad de concentración indicada de un reactor siempre constante. Simula una entrada a velocidad de concentración constante a lo largo del tiempo.
 - Concentración periódica. Este proceso permite mantener la concentración indicada de un reactor siempre a un nivel que varía de forma periódica en el tiempo. Simula un regulador que fija la concentración en cada momento.
 - Velocidad de concentración periódica. Este proceso permite mantener la velocidad de concentración indicada de un reactor siempre constante. Simula una entrada a velocidad de concentración que varía de forma periódica en el tiempo.
- Reactores. Este paquete contiene modelos de reactores con configuraciones diferentes de procesos (diferentes tipos, parametrizaciones, etc.). Las diferentes reactores configurados con:
 - Reactor con un elemento sustrato, un elemento oxidante, un elemento biomasa y un proceso de crecimiento. Además se incluyen conectores que permiten interactuar con el exterior u otros tanques.
 - Reactor con un elemento sustrato, un elemento oxidante, un elemento biomasa, un proceso de crecimiento y un proceso de decaimiento. Además se incluyen conectores que permiten interactuar con el exterior u otros tanques.

- Reactor con un elemento sustrato, dos elementos oxidantes, un elemento biomasa, un proceso de crecimiento, un proceso de crecimiento con inhibición y un proceso de decaimiento. Además se incluyen conectores que permiten interactuar con el exterior u otros tanques.
- Reactor con un elemento sustrato, dos elementos oxidantes, dos elementos en suspensión, un elemento biomasa, un proceso de crecimiento, un proceso de crecimiento con inhibición, un proceso de decaimiento con producción de elementos en suspensión, un proceso de hidrólisis. Además se incluyen conectores que permiten interactuar con el exterior u otros tanques. Este tipo de reactor es el reactor cuyo comportamiento se ajusta al modelo biológico simplificado explicado en el capítulo 3.
- Reactor con un elemento sustrato, dos elementos oxidantes, dos elementos en suspensión, un elemento biomasa, un proceso de crecimiento, un proceso de crecimiento con inhibición, un proceso de decaimiento con producción de elementos en suspensión, un proceso de hidrólisis y un proceso de hidrólisis con inhibición. Además se incluyen conectores que permiten interactuar con el exterior u otros tanques. **Este tipo de reactor es el reactor cuyo comportamiento se ajusta al modelo biológico simplificado explicado en el Capítulo 3.**
- Interconexión entre reactores. Se definen clases que permiten conectar varios tanques. Solo se ha definido una sola clase, pero sería sencillo definir clases que unan más de dos reactores. La clase definida es:
 - Interconexión entre dos reactores. Esta clase indica la dirección y velocidad de concentración que pasa de un tanque

a otro. Los valores negativos indican extracción y los valores positivos indican introducción de elementos de concentración.

- Validaciones. Este paquete contiene diferentes modelos que incluyen reactores aislados y reactores no aislados.
- ComparacionesNetLogo. Este paquete contiene diferentes modelos utilizados para comparar datos con la aplicación desarrollada en NetLogo.
- Pruebas. Este paquete contiene modelos complejos con diferentes conexiones entre tanques y/o fuentes externas periódicas. De esta forma queremos hacer notar que esta librería nos va a permitir diseñar de forma muy simple diferentes configuraciones de planta de gestión de aguas residuales.

Veamos a continuación la configuración más compleja de reactor (*asm1Simplificado*) que es, precisamente, la que modela el sistema biológico de estudio simplificado propuesto en el capítulo 3:

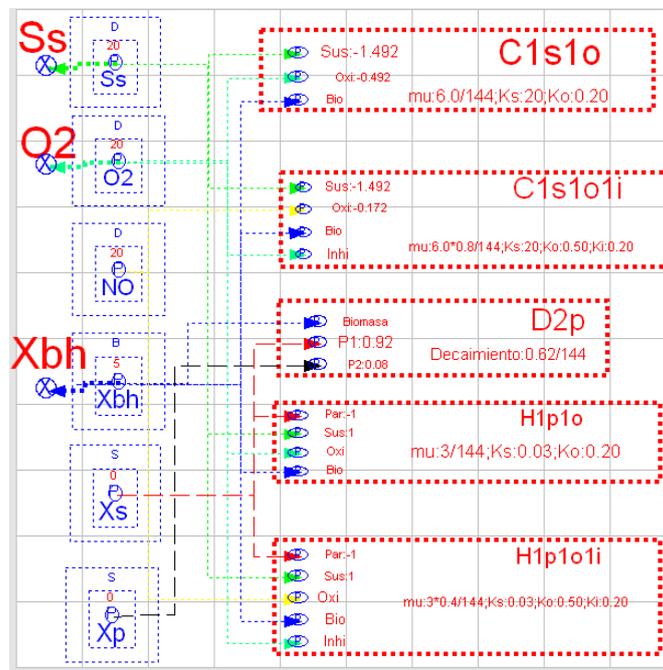


Figura 4-2: Modelado sistema biológico simplificado Modelica.

En este caso pueden diferenciarse claramente los elementos presentes dentro del reactor, los procesos en los que cada uno de ellos está involucrado y los conectores a procesos externos u otros reactores. Los procesos vienen identificados por cajas rojas y etiquetas Cxxxx (crecimiento), Dxxxx (decaimiento), Hxxxx (hidrolisis).

4.3 Documentación librería

Dymola permite generar documentación relativa al código programado de forma automática. El formato de esta documentación generada es HTML. Previamente es necesario introducir los comentarios y explicaciones necesarias dentro del código para que esta documentación sea de utilidad.

En la documentación se encuentran las explicaciones de cada uno de los paquetes, de las clases y de los parámetros asociados a las mismas.

4.4 Validación

Las validaciones que hemos realizado se ajustan a los resultados teóricos esperados.

Se han realizado validaciones acumulativas de procesos. Esto quiere decir que hemos partimos de una validación de un reactor con un solo proceso y hemos ido añadiendo y validando un nuevo reactor, con el proceso del anterior reactor y un proceso nuevo.

Aunque el objetivo inicial de esta librería es el de componer diferentes configuraciones de reactores, también se han incluido una serie de validaciones que corresponden a la conexión de estos reactores con fuentes externas. Se han incluido para mostrar que la librería también puede usarse para configurar estaciones de aguas residuales de manera simple.

Se ha definido un paquete en el que se han diseñado diferentes configuraciones de reactores y que mostramos a continuación:

4.4.1 Reactores aislados

Es este apartado vamos a comprobar, mediante simulaciones de los modelos diseñados, que los resultados son los esperados a nivel teórico.

Para ello mostraremos las gráficas temporales asociadas a las concentraciones de sustrato rápidamente biodegradable (S_s), oxígeno (O_2), nitritos y nitratos (NO) y biomasa (X_{bh}). La unidad de tiempo es la 10 minutal y las concentraciones tienen como unidad la DQO, excepto para NO que es $g(N)/m^3$.

4.4.1.1 Modelo de crecimiento

En la siguiente gráfica se ha simulado el modelo: “*fangosactivos.validaciones.reactoresAislados.crecimiento*” con los valores iniciales mostrados:

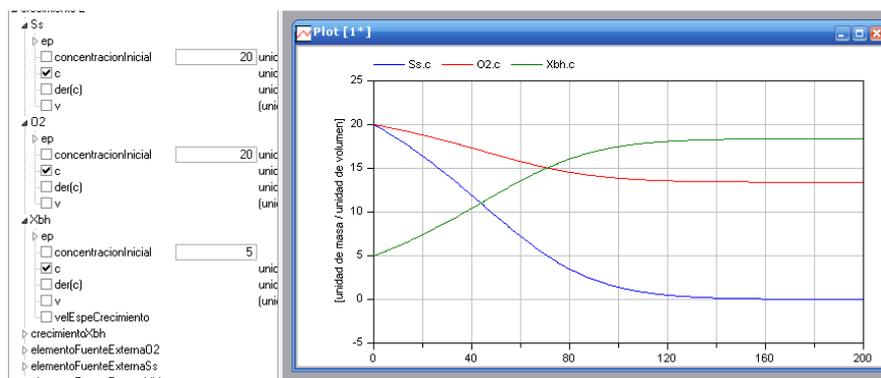


Figura 4-3: Simulación Dymola reactor aislado con crecimiento.

Aparece crecimiento de tipo exponencial en la gráfica de concentraciones. El comportamiento de las concentraciones se ajusta a las relaciones estequiométricas entre sustrato (S_s), oxidante (O_2) y biomasa (X_{bh})

4.4.1.2 Modelo de crecimiento-decaimiento

En la siguiente gráfica se ha simulado el modelo: “*fangosactivos.validaciones.reactoresAislados.crecimientoDecaimiento*” con los valores iniciales mostrados:

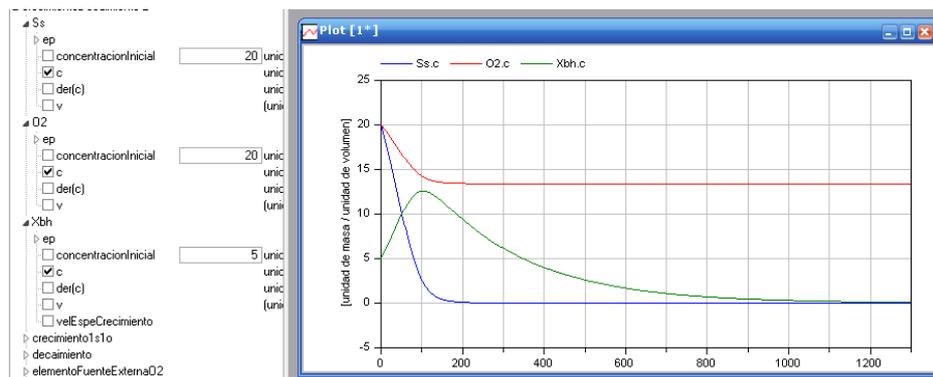


Figura 4-4: Simulación Dymola reactor aislado con crecimiento-decaimiento.

Aparece crecimiento y decrecimiento de tipo exponencial en la gráfica de concentraciones asociada a la concentración de biomasa (Xbh). Se aprecia que el comportamiento de las concentraciones de sustrato Ss y oxidante O2 se ajusta a las relaciones estequiométricas.

Las concentraciones de sustrato Ss y oxidante O₂ se mantienen constantes una vez que la concentración de sustrato Ss se hace cero. Esto es algo esperado, ya que solo hay un proceso de crecimiento de biomasa que afecta a al sustrato y al oxidante indicados y si el sustrato es cero el proceso de crecimiento se detiene.

4.4.1.3 Modelo de crecimiento-decaimiento-inhibición

En la siguiente gráfica se ha simulado el modelo: “*fangosactivos.validaciones.reactoresAislados.crecimientoDecaimientoInhibicion*” con los valores iniciales mostrados:

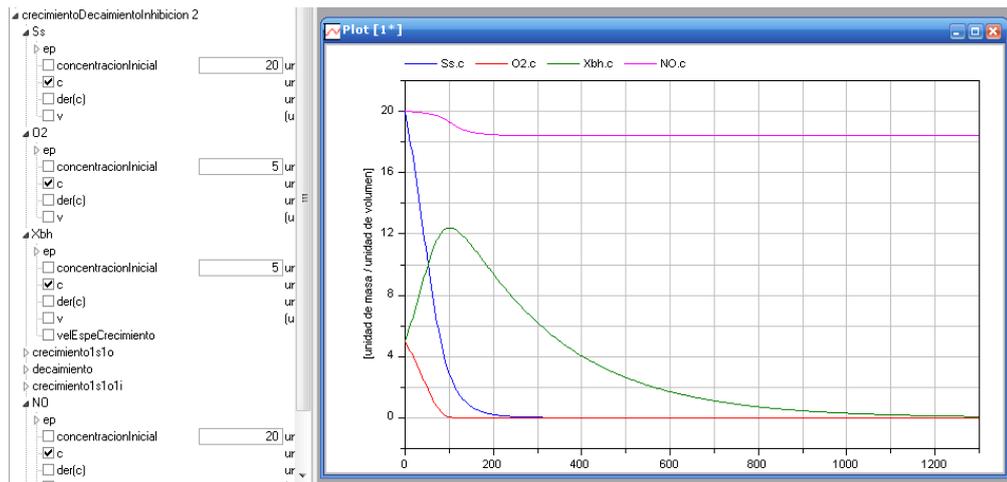


Figura 4-5: Simulación Dymola reactor aislado con crecimiento-decaimiento-inhibición.

Aparece crecimiento y decrecimiento de tipo exponencial en la gráfica de concentraciones asociada a la concentración de biomasa (Xbh). El comportamiento de las concentraciones de sustrato Ss y oxidantes O₂ y NO se ajusta a las relaciones estequiométricas.

Se aprecia que la concentración de O₂ decrece rápidamente y que cuando se aproxima a cero la concentración de NO comienza a decrecer mucho más rápidamente. Esto se debe a los dos procesos de crecimiento existentes. El segundo proceso utiliza NO como oxidante y O₂ como inhibidor. Esto se ajusta a lo esperado.

Una vez que la concentración de sustrato Ss y se hace cero las concentraciones de O₂ y NO permanecen constantes. Esto se ajusta a lo esperado.

4.4.1.4 Modelo de crecimiento-decaimiento-inhibición-hidrolisis

En la siguiente gráfica se ha simulado el modelo: “fangosactivos.validaciones.reactoresAislados.crecimientodecaimientoInhibicionHidrolisis” con los valores iniciales mostrados:

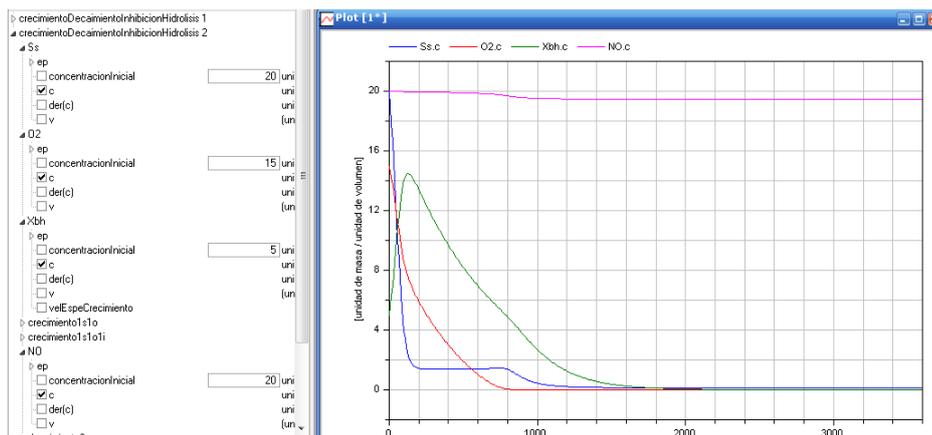


Figura 4-6: Simulación Dymola reactor aislado con crecimiento-decaimiento-inhibición-hidrólisis.

Aparece crecimiento y decrecimiento de tipo exponencial en la gráfica de concentraciones asociada a la concentración de biomasa (Xbh). El comportamiento de las concentraciones de sustrato Ss y oxidantes O₂ y NO se ajusta a las relaciones estequiométricas.

Se aprecia que la concentración de O₂ decrece rápidamente y que cuando se aproxima a cero la concentración de NO comienza a decrecer mucho más rápidamente. Esto se debe a los dos procesos de crecimiento existentes. El segundo proceso utiliza NO como oxidante y O₂ como inhibidor. Esto se ajusta a lo esperado.

La concentración de sustrato permanece casi constante durante dos periodos de tiempo $t=(200,600)$ y $t=(1600,\infty)$. Además, aparece un pequeño incremento de esta en $t=700$ y no se hace cero (queda una concentración Ss residual). Estos son, claramente, los efectos de la hidrólisis.

4.4.1.5 Modelo ASM1 simplificado

En la siguiente gráfica se ha simulado el modelo: “*fangosactivos.validaciones.reactoresAislados.asm1Simplificado*” con los valores iniciales mostrados:

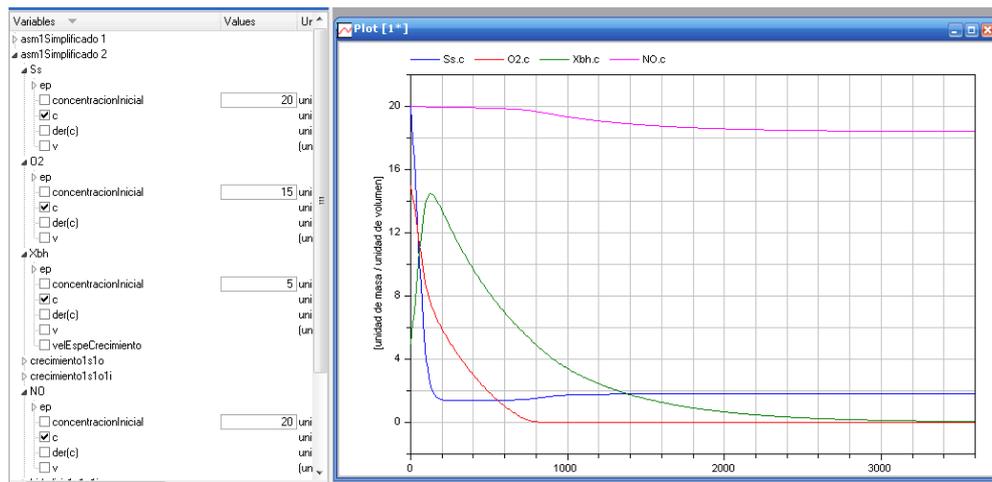


Figura 4-7: Simulación Dymola reactor ASM1 simplificado.

Aparece crecimiento y decrecimiento de tipo exponencial en la gráfica de concentraciones asociada a la concentración de biomasa (Xbh). El comportamiento de las concentraciones de sustrato Ss y oxidantes O₂ y NO se ajusta a las relaciones estequiométricas.

Se aprecia que la concentración de O₂ decrece rápidamente y que cuando se aproxima a cero la concentración de NO comienza a decrecer mucho más rápidamente. Esto se debe a los dos procesos de crecimiento existentes. El segundo proceso utiliza NO como oxidante y O₂ como inhibidor. Esto se ajusta a lo esperado.

La concentración de sustrato permanece casi constante durante un tiempo $t=(200,600)$ y $t=(1400, \infty)$. Además, aparece un pequeño incremento de esta en $t=700$ y no se hace cero (queda una concentración Ss residual). Estos son, claramente, los efectos de la hidrólisis. En este caso se aprecian un poco mejor que en el caso anterior.

4.4.2 Reactores no aislados

Es este apartado vamos a comprobar, mediante simulaciones de los modelos diseñados, que los resultados son los esperados a nivel teórico.

Para ello mostraremos las gráficas asociadas a las concentraciones de cada uno de los elementos significativos del reactor. La unidad de tiempo es la

10 minatural y las concentraciones tienen como unidad la DQO, excepto para NO que es g(N)/m^3 .

4.4.2.1 Modelo ASM1 simplificado con entrada de sustrato variable y oxígeno fijado

En la siguiente gráfica se ha simulado el modelo “fangosactivos.validaciones.reactoresNoAislados.asm1Simplificado_incSsPeriodico_O2cte” que tiene el siguiente esquema:

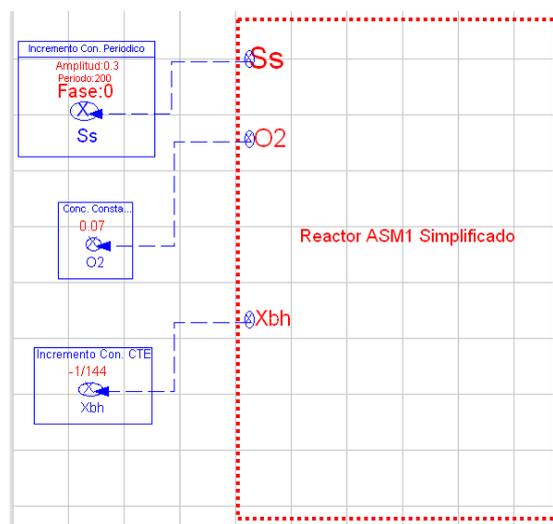


Figura 4-8: Esquema de modelo asm1Simplificado_incSsPeriodico_O2cte.

Esto significa que se mantiene constante el nivel de oxígeno dentro del reactor y que se produce entrada de sustrato con variaciones periódicas.

Vamos a presentar dos resultados. El primero con la concentración de oxígeno a 0.007 y la otra al 30.

Resultado 1:

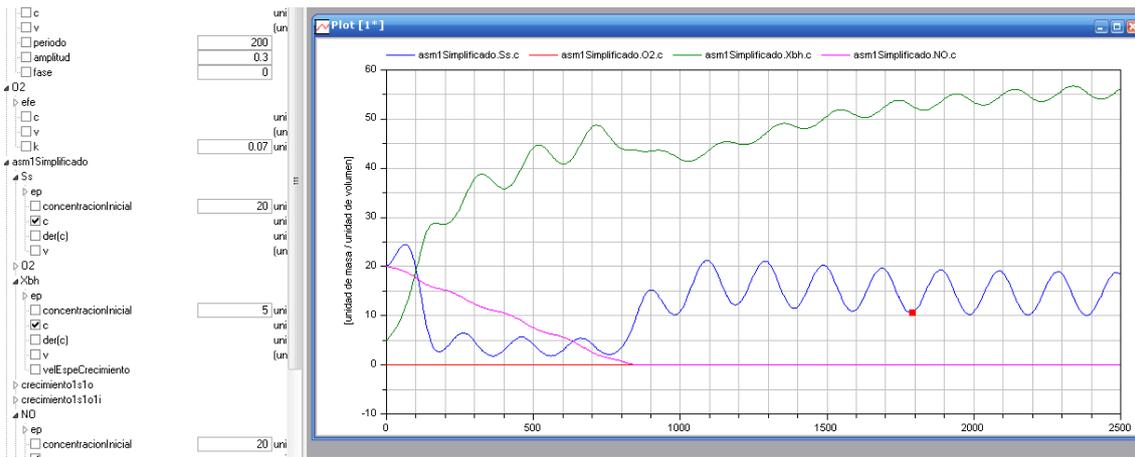


Figura 4-9: Simulación de modelo asm1Simplificado_incSsPerioico_O2cte oxígeno bajo.

Se aprecian variaciones de la concentración de biomasa periódicas que tienden a crecer cuando se producen aumentos en la concentración del sustrato, aunque se producen con cierto retraso.

Además, se observa el cambio de amplitud en la concentración de biomasa al acabarse el oxidante NO y solo disponer de O₂.

Resultado 2:

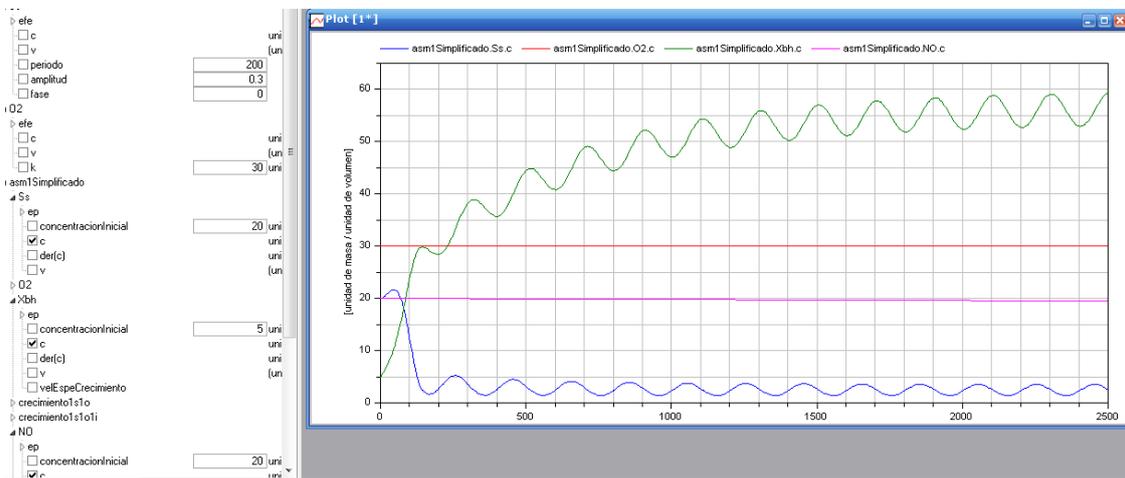


Figura 4-10: Simulación de modelo asm1Simplificado_incSsPerioico_O2cte oxígeno alto.

Se aprecian variaciones de la concentración de biomasa periódicas que tienden a crecer cuando se producen aumentos en la concentración del sustrato aunque se producen con cierto retraso.

Además, se observa que no hay cambio de amplitud en la concentración de biomasa ya que al existir bastante oxígeno, el proceso de crecimiento debido a NO es casi imperceptible.

4.4.2.2 Modelo ASM1 simplificado con entrada contante de sustrato y entrada de oxígeno variable

En la siguiente gráfica se ha simulado el modelo “fangosactivos.validaciones.reactoresNoAislados.asm1Simplificado_incSsCte_O2Periodico” que tiene el siguiente esquema:

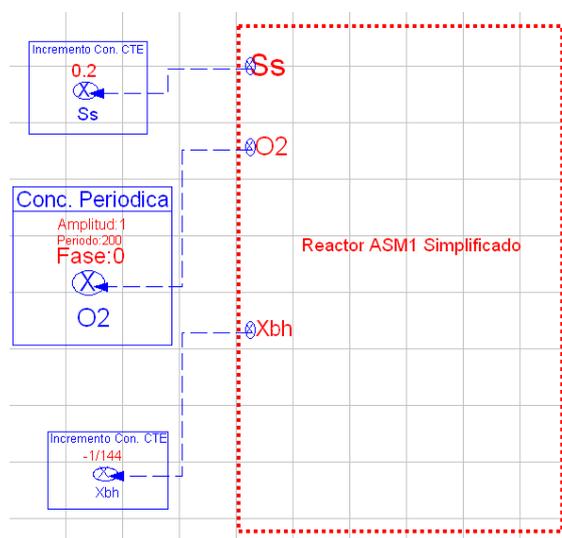


Figura 4-11: Esquema de modelo asm1Simplificado_incSsCte_O2Periodico.

Esto significa que se varía el nivel concentración de oxígeno dentro del reactor de forma periódica y que se produce entrada de sustrato de forma constante. Los resultados obtenidos son:

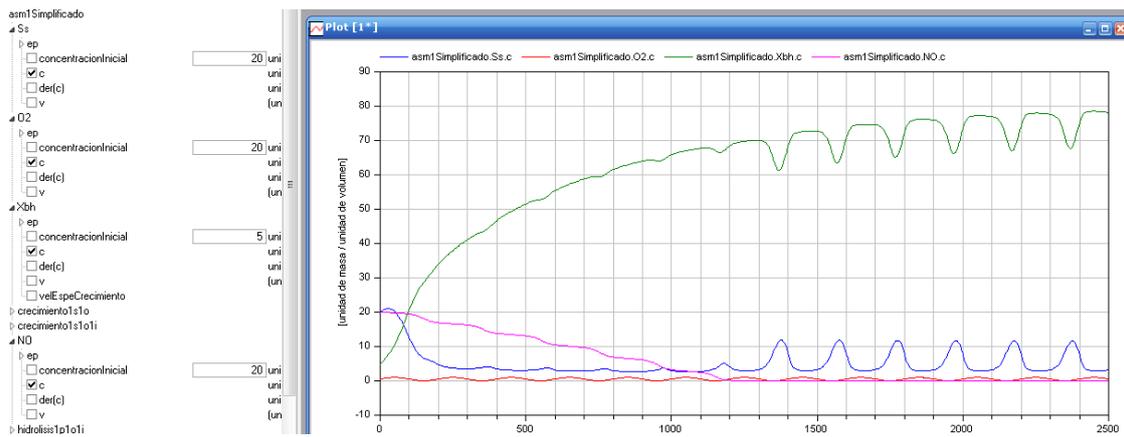


Figura 4-12: Simulación de modelo asm1Simplificado_incSsCte_O2Periodico.

Se aprecian incrementos de la concentración de biomasa periódicos que tienden a crecer cuando se producen aumentos en la concentración del oxígeno, aunque se producen con cierto retraso.

Además, se observa el cambio de amplitud en la concentración de biomasa al acabarse el oxidante NO y solo disponer de O₂.

4.5 Conclusiones

En este capítulo se ha descrito la estructura de la librería Dymola llamada “fangosactivos”. Se han dado ejemplos de uso y se han realizado diversas validaciones.

Esta librería no solo se concibe para la configuración de reactores. Según hemos visto podemos incluso componer clases más complejas que involucren varios reactores y procesos externos. Por ese motivo hay paquetes que incluyen procesos externos y enlaces entre reactores y se han incorporado ejemplos de su uso.

Capítulo 5. Modelo NetLogo FangosActivos

5.1 Introducción

Es este capítulo vamos a describir con detalle la estructura del programa desarrollado utilizando la herramienta NetLogo.

Para ello se ha aplicado la metodología de modelado basado en agentes descrita en el capítulo 2 al sistema biológico de estudio especificado en el capítulo anterior.

Las características de este modelado hacen que tengamos en cuenta los diferentes procesos que una bacteria va a realizar, pero no vamos a utilizar directamente las relaciones (a nivel de ecuaciones diferenciales) que se utilizan en el modelo ASM1 simplificado. Sí que vamos a tener en cuenta los parámetros estequiométricos utilizados a la hora de realizar pruebas. Como escala temporal se va a utilizar la diez minutil que es apropiada para ver el crecimiento real de bacterias y puede ser utilizada para comparaciones temporales con las simulaciones de la librería homóloga de Modelica.

Recordamos que el objetivo es simular el comportamiento de los elementos existentes en el interior de un reactor.

Los procesos representados aquí son los que una bacteria realiza:

1. Movimiento (realizado por agitación). Por simplificación vamos a suponer que lo hace la bacteria sin gasto de energía.
2. Alimentación-crecimiento. La bacteria genera energía a partir de un sustrato+oxidante $[Ss+O_2]$ o sustrato+oxidante:inhibidor $[Ss+NO:O_2]$ (siguiendo ecuaciones estequiométricas Tabla 3-2: Valores por defecto de los parámetros ASM1, fila 1 y 2). Se produce gasto de energía para realizar este proceso. La bacteria posee una energía intrínseca (de estructura) y otra que utiliza para la absorción y síntesis de alimentos. La suma de las dos es la asociada a la biomasa.

3. Reproducción. Cuando la bacteria alcanza un nivel de energía se duplica.
4. Hidrolisis-descomposición. Cuando el nivel de energía de la bacteria no es suficiente para poder alimentarse se entiende que ésta no puede reproducirse y pasa a estar muerta (Santos Peñas, Matilde, 2012). En ese caso, la bacteria está programada para descomponerse pasados un número de ticks (ciclos de tiempo 10 minutales).

5.2 Estructura

La programación de la herramienta NetLogo conlleva realizar tres tareas diferenciadas. La primera es definir el mundo donde los agentes van a residir, la segunda es definir un interfaz gráfico que permita realizar las parametrizaciones, condiciones iniciales, iniciar las simulaciones y observar los resultados de la simulación en forma de gráficas y valores numéricos. Vamos, por tanto a describir cada una de estas tareas.

5.2.1 Mundo

La configuración del mundo (tablero de parcelas) donde se realiza la simulación es la siguiente:

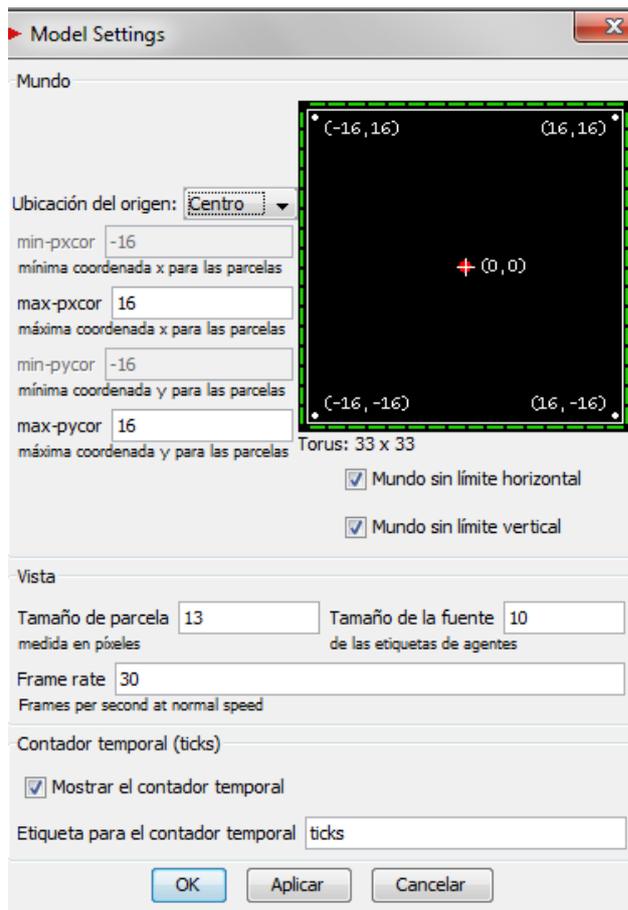


Figura 5-1: Mundo programa fangosactivos NetLogo.

5.2.2 Interfaz gráfico

Veamos la pantalla de configuración de parámetros de inicio parámetros de procesos y observación de datos:

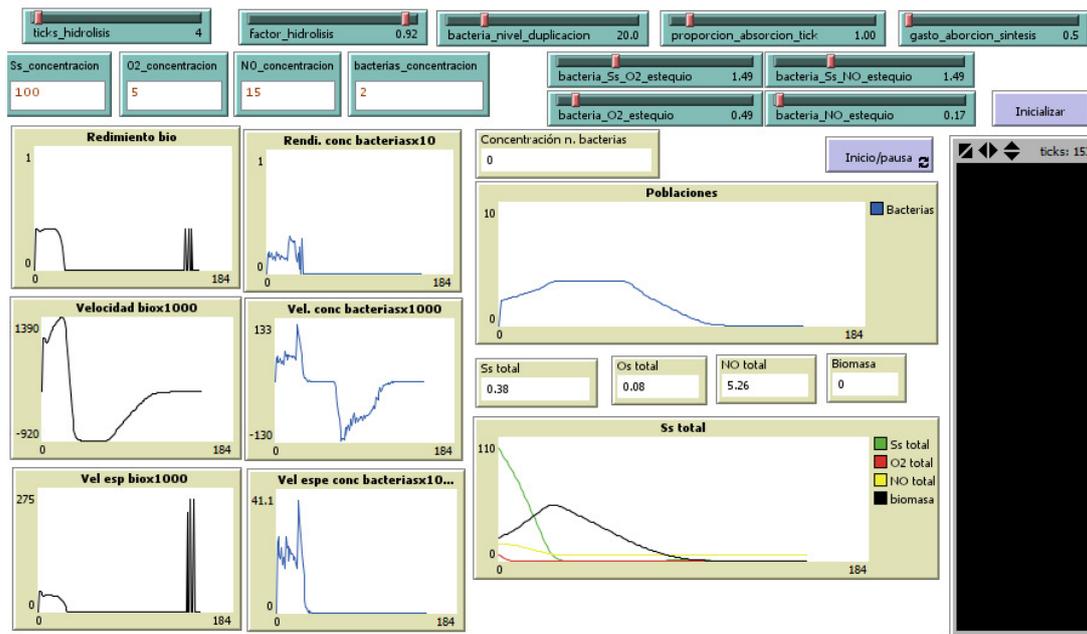


Figura 5-2: Pantalla de visualización y configuración NetLogo.

La estructura de la pantalla es:

Pantalla de configuración y visualización de datos. Esta pantalla tiene varias zonas que describo a continuación de izquierda a derecha y de arriba a abajo:

Cajas azules de concentraciones iniciales:

- **Ss_concentracion**. Variable que indica concentración inicial S_s .
- **O2_concentracion**. Variable que indica concentración inicial O_2 .
- **NO_concentracion**. Variable que indica concentración inicial de NO.
- **bacterias_concentracion**. Variable que indica inicial concentración número de bacterias.

Deslizadores azules de parámetros de procesos:

- **ticks_hidrolisis**. Variable que indica tiempo necesario para que una bacteria se descomponga debido a hidrolisis.

- **factor_hidrolisis**. Variable que indica la cantidad de sustrato S_s en la que se transforma una unidad de energía de una bacteria muerta “hidrolizada”.
- **bacteria_nivel_duplicacion**. Variable que indica nivel de energía de la bacteria para duplicación de bacteria
- **proporcion_absorcion_tick**. Variable que indica la proporción de productor y energía que es consumida en cada tick. Indica que proporción de S_s+O_2 o S_s+NO se absorbe y sintetiza en cada tick, junto con la proporción de energía usada para ello.
- **gasto_aborcion_sintesis**. Nivel de energía utilizado para absorber/sintetizar. Si la bacteria no alcanza ese nivel no puede alimentarse, ni reproducirse y la damos por “muerta”.
- **bacteria_Ss_O2_estequio**. Variable que indica la proporción estequiométrica se S_s utilizada para síntesis de energía utilizando O_2 . Se utiliza tanto para la absorción como para la síntesis.
- **bacteria_Ss_NO_estequio**. Variable que indica la proporción estequiométrica se S_s utilizada para síntesis de energía utilizando NO . Se utiliza tanto para la absorción como para la síntesis.
- **bacteria_O2_estequio**. Variable que indica la proporción estequiométrica se O_2 utilizada para síntesis de energía utilizando S_s . Se utiliza tanto para la absorción como para la síntesis.
- **bacteria_NO_estequio**. Variable que indica la proporción estequiométrica se NO utilizada para síntesis de energía utilizando S_s . Se utiliza tanto para la absorción como para la síntesis.
- **gasto_aborcion_sintesis**. Nivel de energía utilizado para absorber/sintetizar. Si la bacteria no alcanza ese nivel no puede alimentarse, ni reproducirse y la damos por “muerta”.
- Botón “Inicializar”. Inicialización de valores iniciales indicados en programa. (llamada a procedimiento “setup”)

Gráficas de observación temporales:

- Rendimiento biomasa (energía) bacterias heterótrofas por unidad de materia rápidamente biodegradable (**plot rendimiento_tick_bio**)
- Rendimiento número bacterias heterótrofas por unidad de materia rápidamente biodegradable por 10 (**plot rendimiento_tick_c**)
- Velocidad crecimiento concentración biomasa de bacterias heterótrofas por 1000 (**plot velocidad_tick_bio * 1000**)
- Velocidad crecimiento concentración número de bacterias heterótrofas por 1000 (**plot rendimiento_tick_c * 1000**)
- Velocidad específica concentración crecimiento biomasa de bacterias heterótrofas (**plot velocidadespe_tick_bio * 1000**)
- Velocidad específica crecimiento concentración número de bacterias heterótrofas (**plot velocidadespe_tick_c * 1000**)
- Tablero con posicionamiento de bacterias y color mostrando el estado de las mismas.
- Caja gris con concentración número de bacterias (**count bacterias / numero_parcelas**)
- Botón “Inicio/pausa”
- Gráfica temporal de evolución de concentración número de bacterias vivas (**plot cantidadVivaBac / numero_parcelas**)
- Cajas grises de concentración de S_S , biomasa ($X_{B,H}$), S_O , S_{NO} ($Ss_total / numero_parcelas$, $O2_total / numero_parcelas$, $NO_total / numero_parcelas$, $Biomasa_total / numero_parcelas$)
- Gráfica temporal de evolución de S_S , biomasa ($X_{B,H}$), S_O , S_{NO} (plot $Ss_total / numero_parcelas$, plot $O2_total / numero_parcelas$, plot $NO_total / numero_parcelas$, plot $Biomasa_total / numero_parcelas$)

5.2.3 Programación

La estructura del programa es la siguiente:

Parcelas (patches) del mundo o tablero. No es necesario crearlas, ya que el sistema las crea por defecto. Tienen asociadas varias variables que indican cantidades (la suma de todas estas cantidades dividida por el número de casillas indicarán las concentraciones):

- **Ss**. Variable que indica cantidad Ss almacenada en la parcela.
- **O2**. Variable que indica cantidad O₂ almacenada en la parcela.
- **NO**. Variable que indica cantidad NO almacenada en la parcela.

Tipos de agentes:

- Bacterias (bacterias). Se declara una raza llamada bacteria. (**breed [bacterias bacteria]**). Tienen asociadas varias variables de estado:
 - **reservaSs**. Variable que indica cantidad Ss almacenada en la bacteria.
 - **reservaO2**. Variable que indica cantidad O₂ almacenada en la bacteria.
 - **reservaNO**. Variable que indica cantidad NO almacenada en la bacteria.
 - **energiaBac**. Variable que indica cantidad energía almacenada en la bacteria.
 - **energiaMinEstructura**. Variable que indica cantidad energía almacenada en la bacteria que no puede ser utilizada para la alimentación.

Variables globales utilizadas para cálculos estadísticos:

- **numero_parcelas**. Variable que indica número de parcelas definidas.

- **Ss_total**. Variable que indica acumulado de Ss total de todas las parcelas y absorbido sin sintetizar en el interior de las bacterias.
- **O2_total**. Variable que indica acumulado de O2 total de todas las parcelas y absorbido sin sintetizar en el interior de las bacterias.
- **NO_total**. Variable que indica acumulado de Ss total de todas las parcelas y absorbido sin sintetizar en el interior de las bacterias.
- **Biomasa_total**. Variable que indica acumulado de la energía de todas las bacterias.
- **cantidadVivaBac**. Variable que indica cantidad de bacterias vivas (suficiente energía como para poder absorber y sintetizar).
- **Rendimiento_tick_bio**. Variable que indica rendimiento en cada ciclo de tiempo (ΔSs)/(Δ biomasa). Solo tiene sentido cuando hay crecimiento de biomasa, en otro caso su valor es cero.
- **Velocidad_tick_bio**. Variable que indica velocidad en cada ciclo de tiempo (Δ biomasa)/10min.
- **Velocidadespe_tick_bio**. Variable que indica velocidad específica en cada ciclo de tiempo (Δ biomasa)/biomasa/10min. Solo tiene sentido cuando hay crecimiento de biomasa, en otro caso su valor es cero.
- **Rendimiento_tick_c**. Variable que indica rendimiento en cada ciclo de tiempo (ΔSs)/(Δ n. Bacterias vivas). Solo tiene sentido cuando hay crecimiento de número de bacterias vivas, en otro caso su valor es cero.
- **Velocidad_tick_c**. Variable que indica velocidad en cada ciclo de tiempo (Δ n. Bacterias vivas)/10min.
- **Velocidadespe_tick_c**. Variable que indica velocidad específica en cada ciclo de tiempo (Δ n. bacterias)/ (n. bacterias vivas) /10min.

Solo tiene sentido cuando hay crecimiento de numero de bacterias vivas, en otro caso su valor es cero.

Procedimientos:

- **Movimiento_bacteria**. Procedimiento que permite a una bacteria realizar movimiento aleatorio
- **Alimentacion_bacteria**. Procedimiento que permite realizar proceso de absorción de nutrientes y asimilación de los mismos en forma de energía. Conlleva un gasto de energía. La mayor parte de las decisiones se toman en cuenta utilizando parámetros de entrada.
- **reproduccion_bacteria**. Procedimiento que permite que una bacteria se duplique cuando supera cierto nivel de energía.
- **hidrolosis_bacteria**. Procedimiento que permite que una bacteria muerta se descomponga.
- **setup**. Procedimiento de inicialización de sistema. Es invocada desde botón “Inicializar”. Se inicializan las parcelas relleno sus las variables de estado con valores definidos a nivel global. Se crean una cantidad de bacterias indicadas a nivel global y se inicializan la posición y la energía de la bacteria utilizando funciones aleatorias.
- **go**. Procedimiento de puesta en marcha del sistema. Es invocada desde botón “Inicio/pausa” que realiza una llamada continuada a este procedimiento hasta que se indica la finalización del mismo dentro de este procedimiento ([stop]). En cada llamada se realiza llamada [ask] que permite que cada bacteria realice un movimiento (llamada a movimiento_bacteria), se alimente (llamada a alimentación_bacteria con parámetros) y se reproduzca (llamada a reproducción_bacteria), además de realizar cálculos estadísticos.

5.3 Validacion

Las validaciones de han realizado en base a los resultados teóricos esperados.

Se han realizado validaciones acumulativas de procesos. Esto quiere decir que vamos haciendo experimentos dejando constantes de procesos o concentraciones de sustancias que no deseamos tener en cuenta a cero.

Para mostrar las gráficas de concentraciones con mayor detalle vamos a utilizar el programa R (versión 3.2.0) ya que NetLogo no proporciona escalado en los ejes de una manera apropiada. La unidad de tiempo es la 10 minutal y las concentraciones tienen como unidad la DQO, excepto para NO que es g(N)/m³.

Se ha definido un paquete en que se han diseñado diferentes configuraciones de reactores y que mostramos a continuación:

5.3.1 Modelo sin muerte

Para ello ponemos a cero el parámetro “gasto_absorcion_sintesis”, de forma que no hay “muerte” bacteriana. Los parámetros iniciales de los que partimos son:

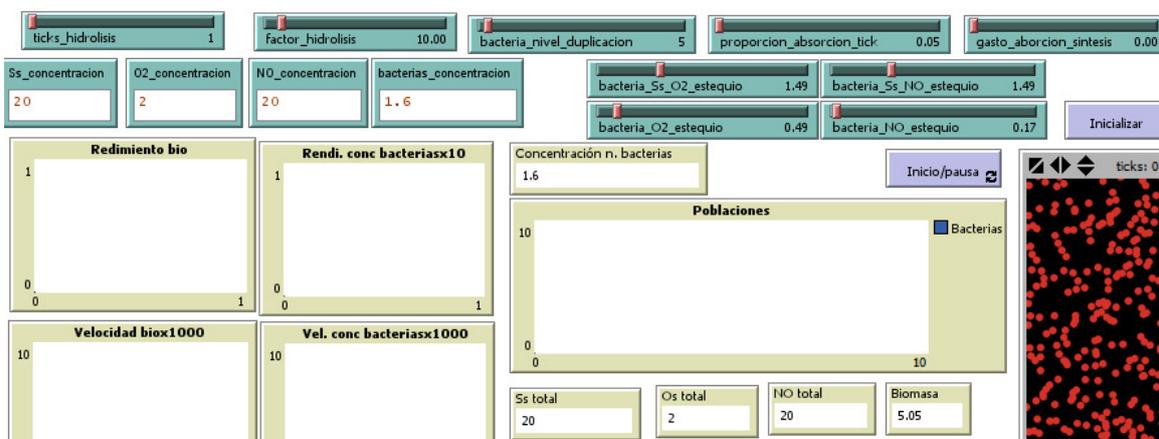


Figura 5-3: Parámetros iniciales modelo sin muerte NetLogo.

La pantalla de gráficos que muestra NetLogo es:

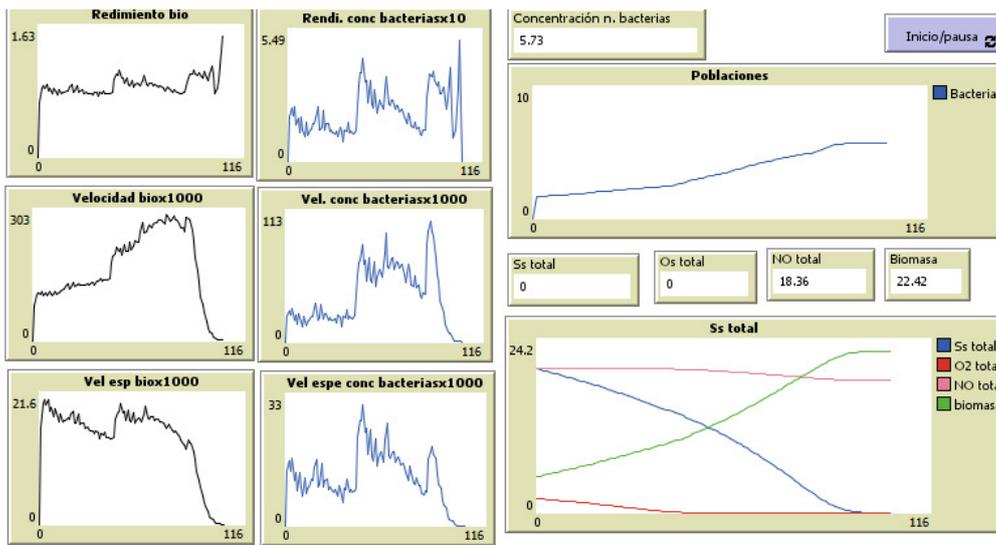


Figura 5-4: Gráficos modelo sin muerte NetLogo.

Los resultados a nivel de concentraciones son:

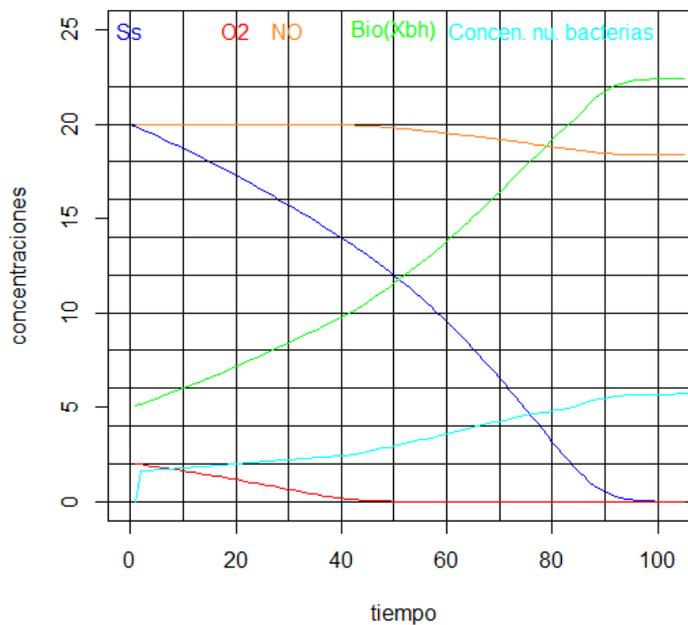


Figura 5-5: Resultados modelo sin muerte NetLogo.

Se observa un crecimiento de tipo exponencial en la gráfica de concentraciones asociada a la concentración de biomasa (Xbh) y concentración de número de bacterias que llega al equilibrio cuando el sustrato (Ss) se acaba.

También se observa que la concentración el oxidante NO empieza a decrecer casi en el momento en el que la concentración del oxidante O2 es próxima a cero. Estas observaciones son coherentes con la función “alimentacion_bacteria” definida en NetLogo.

5.3.2 Modelo con muerte sin hidrólisis

Para ello, le damos un valor positivo al parámetro “gasto_absorcion_sintesis”, de forma que hay “muerte” bacteriana. Y además, ponemos a cero el parámetro “factor_hidrolisis”. Los parámetros iniciales de los que partimos son:

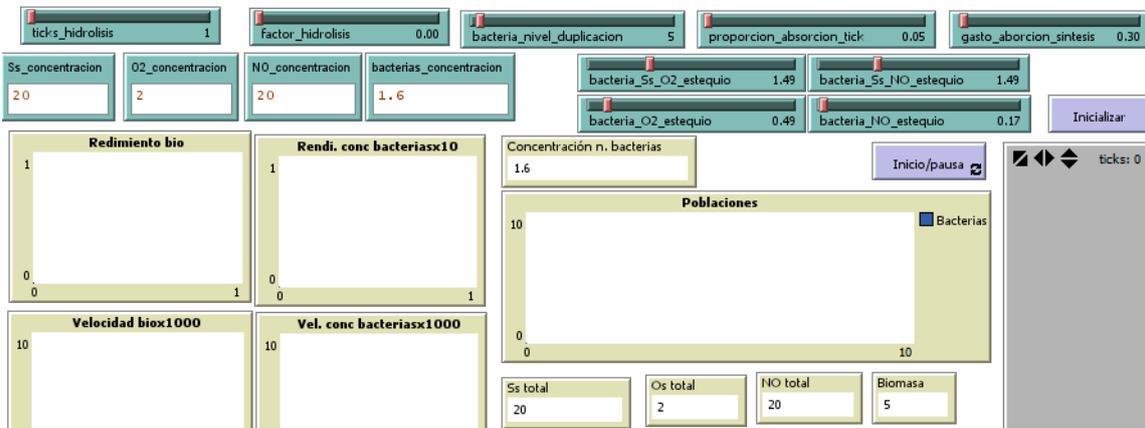


Figura 5-6: Parámetros iniciales modelo con muerte sin hidrólisis NetLogo.

La pantalla de gráficos que muestra NetLogo es:

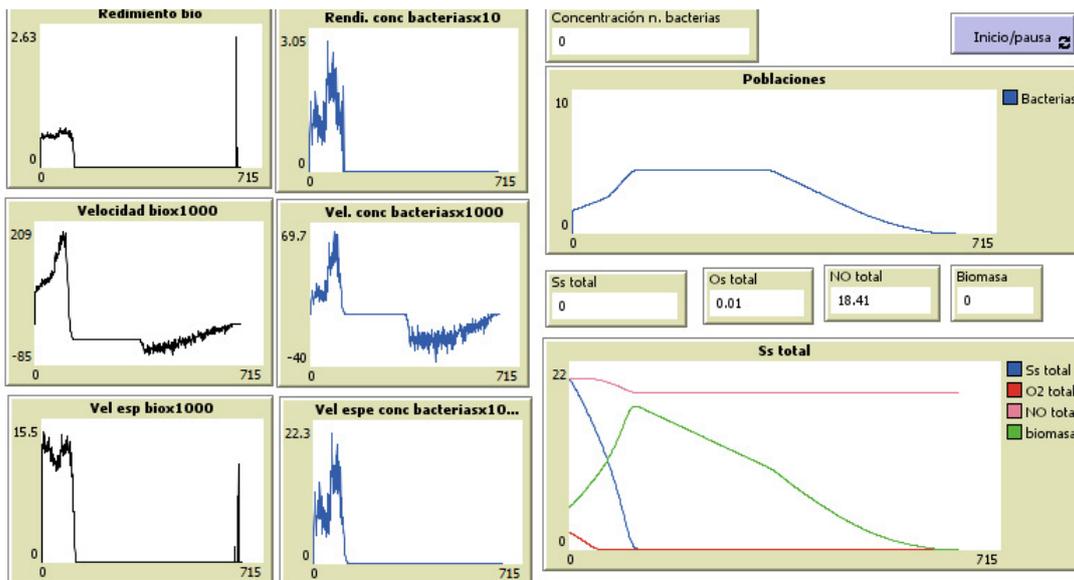


Figura 5-7: Gráficos modelo con muerte sin hidrólisis NetLogo.

Los resultados a nivel de concentraciones son:

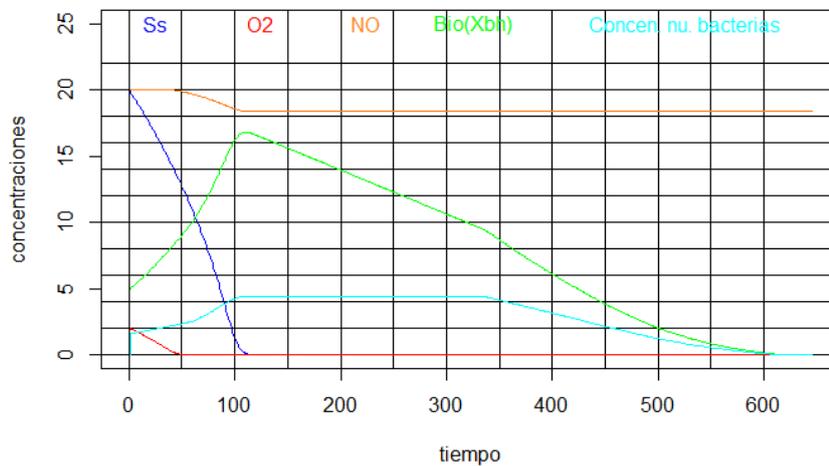


Figura 5-8: Resultados modelo con muerte sin hidrólisis NetLogo.

Se observa un crecimiento-decrecimiento de tipo exponencial en la gráfica de concentraciones asociada a la concentración de biomasa (Xbh) y de concentración de número de bacterias. Si es cierto, que la concentración del número de bacterias permanece constante durante $t=(100,350)$ que corresponde a una etapa de en la que las bacterias empiezan a perder energía-biomasa debido a que ya no hay sustrato). Se observa que la etapa de decrecimiento de la

concentración de biomasa comienza cuando la concentración de sustrato Ss llega a cero. Estas observaciones son coherentes con la función “alimentacion_bacteria” definida en NetLogo.

La concentración de NO empieza a decrecer cuando la concentración de O₂ es muy cercana a cero. La concentración de NO deja de decrecer cuando el sustrato Ss llega a cero. Estas observaciones son coherentes con la función “alimentacion_bacteria” definida en NetLogo.

5.3.3 Modelo con muerte e hidrólisis

Para ello, le damos un valor positivo al parámetro “gasto_absorcion_sintesis”, de forma que hay “muerte” bacteriana. Además, damos un valor positivo al parámetro “factor_hidrolisis” para que se active el proceso de hidrólisis. Los parámetros iniciales de los que partimos son:

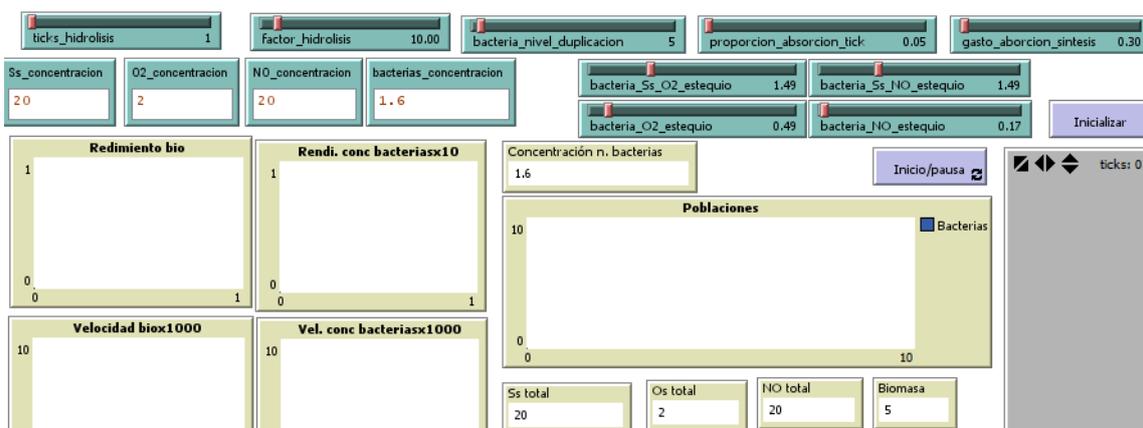


Figura 5-9: Parámetros iniciales modelo con muerte e hidrólisis NetLogo.

La pantalla de gráficos que muestra NetLogo es:

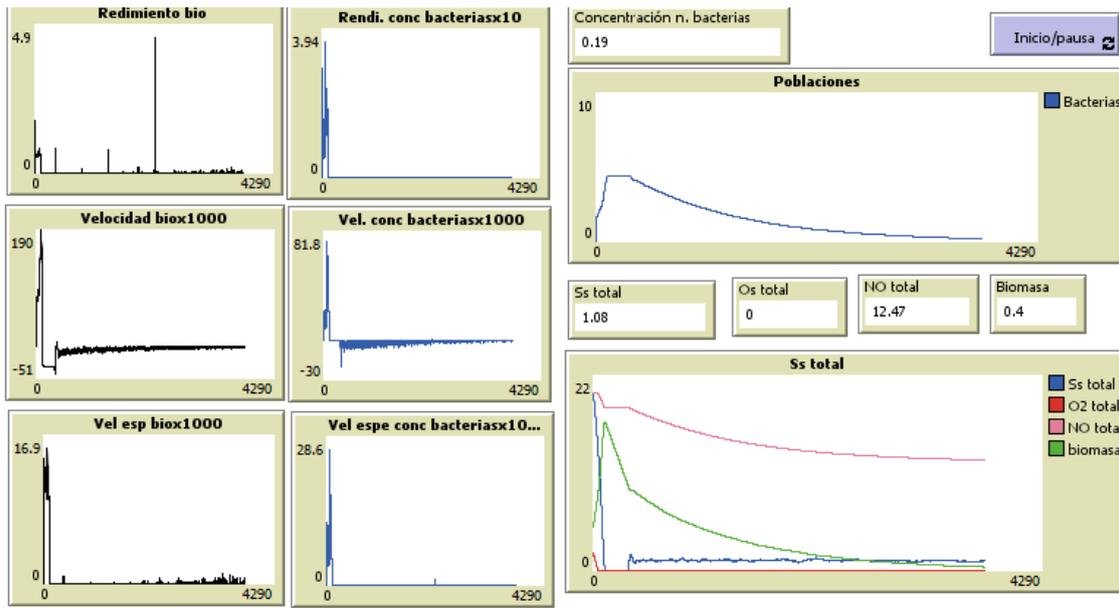


Figura 5-10: Gráficos modelo sin muerte NetLogo.

Los resultados a nivel de concentraciones son:

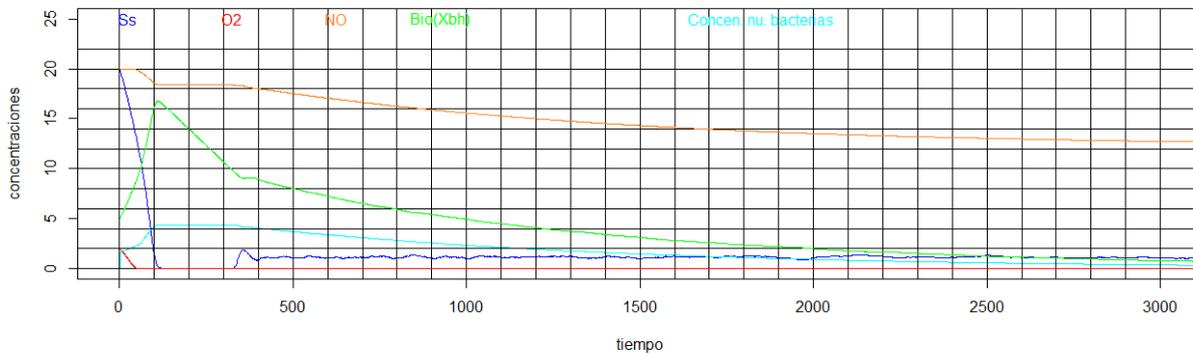


Figura 5-11: Resultados modelo sin muerte NetLogo.

Se observa un crecimiento-decrecimiento de tipo exponencial en la gráfica de concentraciones asociada a la concentración de biomasa (Xbh) y de concentración de número de bacterias. Si es cierto, que la concentración del número de bacterias permanece constante durante $t=(100,350)$ que corresponde a una etapa de en la que las bacterias empiezan a perder energía-biomasa debido a que ya no hay sustrato). Se observa que la etapa de decrecimiento de la concentración de biomasa comienza cuando la concentración de sustrato Ss llega a cero.

Las concentración de NO empieza a decrecer cuando la concentración de O₂ es casi cero. La concentración de NO deja de decrecer (constante) cuando el sustrato Ss llega a cero pero vuelve a decrecer cuando se produce muerte bacteriana (concentración de número de bacterias) con un pequeño retraso (debido a que debe pasar un tiempo “ticks_hidrolisis” para que se produzca descomposición o hidrólisis). Estas observaciones son coherentes con la función “alimentacion_bacteria” y “hidrolisis_bacteria” definida en NetLogo.

Se advierte que el sustrato Ss no tiende a un valor estable mayor que cero mientras que la concentración de bacterias y la de biomasa siguen decreciendo hasta valer cero.

5.4 Documentación librería

NetLogo permite incorporar documentación relativa al código programado. El formato de esta documentación generada es un formato propio. También se incorporarán comentarios y explicaciones necesarias dentro del código para que tanto la documentación propia como los comentarios del código sean de utilidad.

5.5 Conclusiones

En este capítulo se ha descrito la estructura del programa NetLogo llamada “fangosactivos”.

La forma de utilizar este programa es parametrizar y establecer valores iniciales cada vez que se desea realizar una simulación. Existe una herramienta dentro del entorno NetLogo (Analizador de comportamiento) que permite almacenar “experimentos”, es decir, guardar dentro del mismo programa “fangosactivos” las diferentes pruebas que deseamos guardar.

Este programa solo se concibe para la configuración de reactores. No se han incorporado mecanismos para interactuar con el exterior debido a la naturaleza de esta herramienta.

Capítulo 6. Comparación resultados

6.1 Introducción

En este capítulo pretendemos, por un lado, comparar a nivel cualitativo y cuantitativo, las concentraciones de Ss (sustrato rápidamente biodegradable), O₂, NO y biomasa, así como los valores de rendimiento de la biomasa respecto al sustrato, velocidad específica de la biomasa y velocidad de la biomasa. Por otro lado realizaremos una serie de comentarios a nivel de construcción de librerías.

Para ello, vamos a ajustar los parámetros del programa NetLogo con el objetivo de ajustar, en la medida de lo posible, los valores cuantitativos de las concentraciones. Como estamos midiendo en la misma escala de tiempo (10 min) podemos comparar de forma sencilla los resultados.

Los modelos de la librería Modelica “*fangosactivos*” que van a ser utilizados son los que aparecen en el paquete “*fangosactivos.NetLogo*”

6.2 Ajustes de parámetros NetLogo

El modelo Modelica “asm1Simplificado” perteneciente al paquete “fangosactivos.NetLogo” que vamos a comparar es el siguiente:

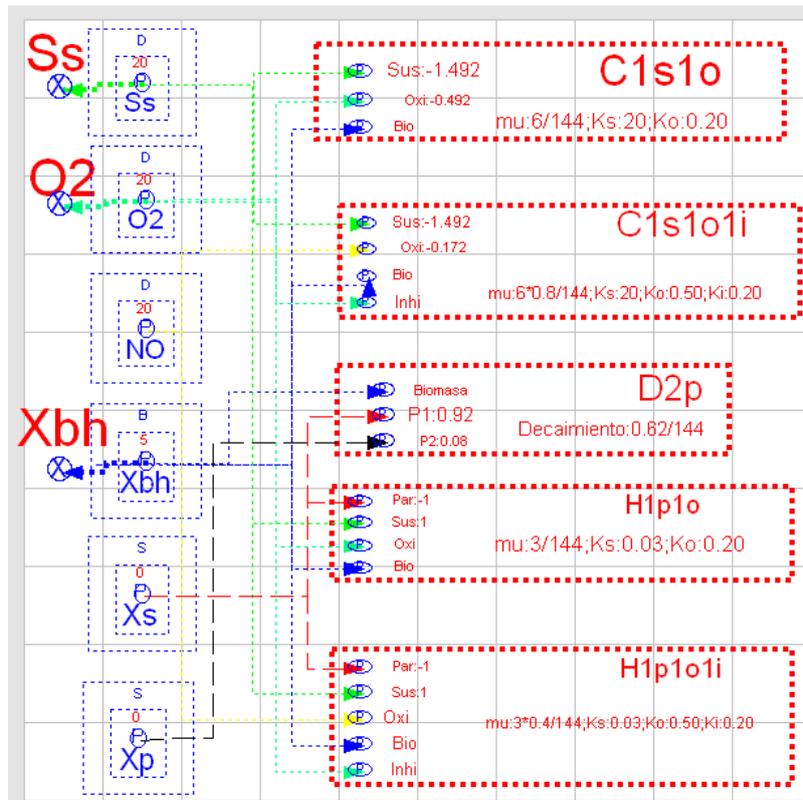


Figura 6-1: Discusión Asm1Simplificado. Configuración y valores iniciales modelo Modelica.

Tras realizar diferentes pruebas variando los parámetros del programa NetLogo se llega a la conclusión de que:

- Existe una relación clara entre la velocidad específica del sistema Modelica con las variables NetLogo “gasto_aborcion_sintesis” y “proporcion_aborcion_tick”.
- Existe una relación clara entre el rendimiento definido en el sistema Modelica y las variables estequiométricas del sistema NetLogo (“bacteria_Ss_O2_estequio”, “bacteria_O2_estequio”, “bacteria_Ss_NO_estequio”, “bacteria_NO_estequio”)

- Partiendo de unas concentraciones de SS, O₂, NO y biomasa (X_{bh}) muy próximas podemos ajustar también la velocidad de crecimiento/decrecimiento de la biomasa.

Para las concentraciones iniciales comunes:

- Ss. Concentración de sustrato rápidamente biodegradable: 20 (unidad de masa / unidad de volumen ≡ DQO) .
- O₂. Concentración de oxidante O₂: 20 (unidad de masa / unidad de volumen ≡ -DQO).
- NO. Concentración de oxidante NO: 20 (unidad de masa / unidad de volumen ≡ g(N)/m³).
- X_{bh} o biomasa. Concentración de bacterias heterótrofas: 5 (unidad de masa / unidad de volumen ≡ DQO)

Hemos ajustado y llegado a una configuración concreta en el modelo NetLogo:

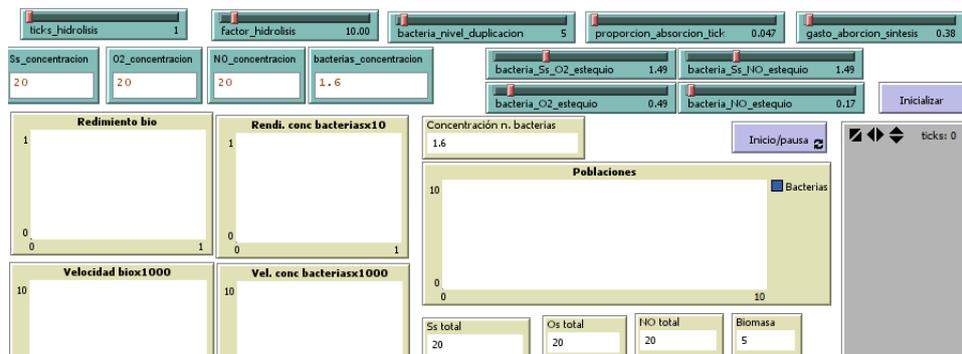


Figura 6-2: Discusión Asm1Simplificado. Configuración y valores iniciales modelo NetLogo.

Veamos las gráficas comparativas de velocidad, velocidad específica y rendimiento de crecimiento de bacterias (respecto al sustrato) asociadas a la configuración indicada:

- Velocidad específica de crecimiento de la biomasa. Viene dada por la

expresión: $\frac{dX_{B,H}}{dt} / X_{B,H}$, siempre para valores positivos de la derivada.

La gráficas de esta variable en cada simulación son las siguientes:

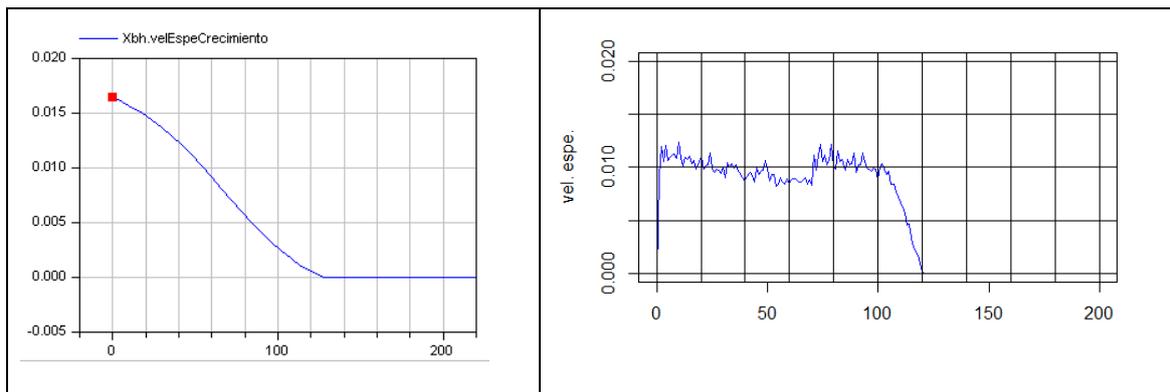


Figura 6-3: Discusión Asm1Simplificado velocidad específica crecimiento biomasa.

Los valores medios a nivel cuantitativo son bastante próximos. A partir de $t \approx 110$ los valores de hace cero.

- Velocidad de crecimiento de la biomasa. La gráficas de esta variable en cada simulación son las siguientes:

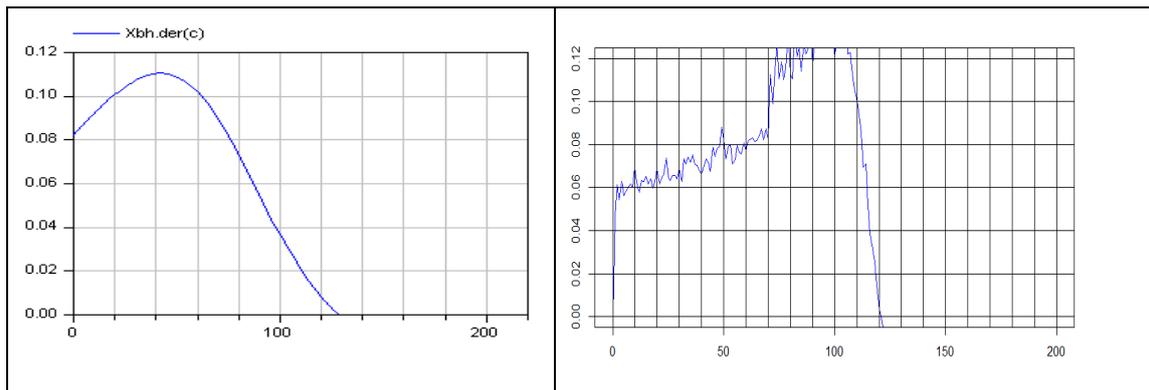


Figura 6-4: Discusión Asm1Simplificado velocidad de concentración biomasa 1.

Los valores medios a nivel cuantitativo son próximos A partir de $t \approx 110$ los valores de hace cero. Veamos la evolución de esta variable durante un periodo más largo:

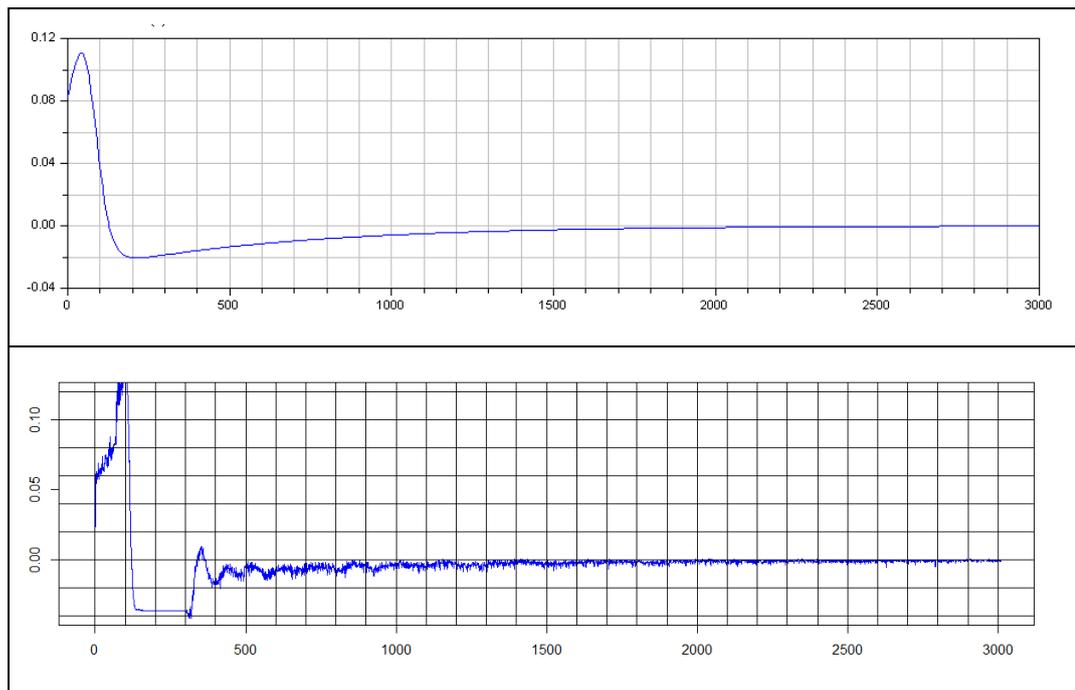


Figura 6-5: Discusión Asm1Simplificado velocidad de concentración biomasa 2.

En este caso sí se aprecia un comportamiento cualitativo parecido.

- Rendimiento de la biomasa. Viene dado por la expresión: $\frac{dX_{B,H}}{dS_S/dt}$,

siempre para valores positivos de ambas derivadas. La gráficas de esta variable en cada simulación son las siguientes:

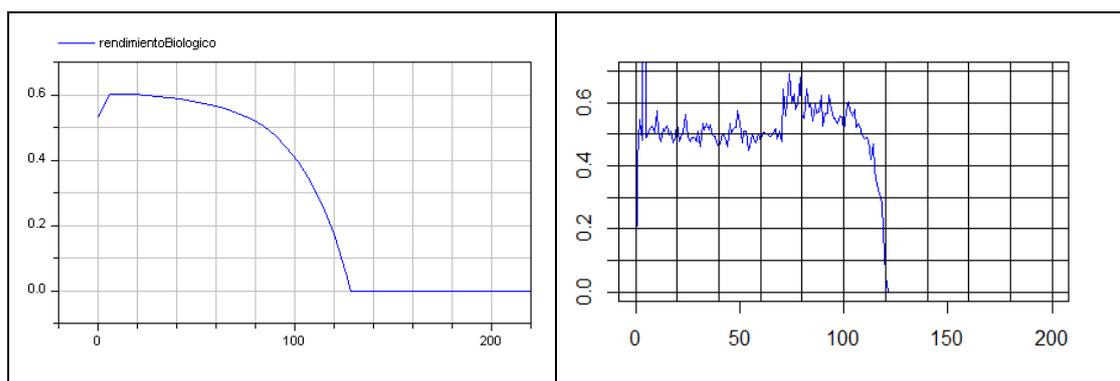


Figura 6-6: Discusión Asm1Simplificado rendimiento biomasa.

Los valores medios a nivel cuantitativo son próximos A partir de $t \approx 110$ los valores de hace cero. A nivel cualitativo sí guardan cierto parecido.

6.3 Discusión cualitativa

A continuación vamos a comentar las gráficas resultantes a nivel cualitativo:

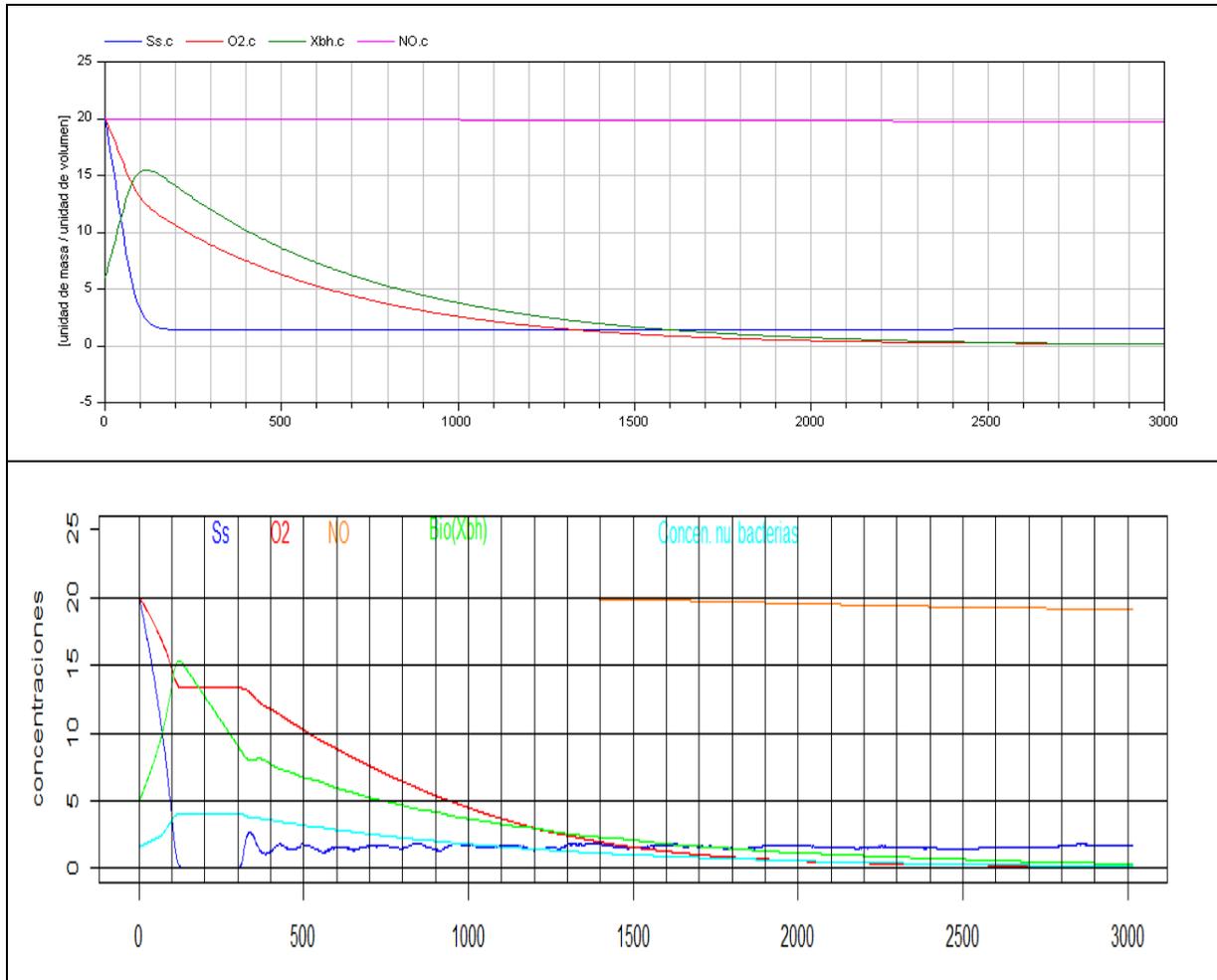


Figura 6-7: Discusión Asm1Simplificado concentraciones.

El comportamiento de Ss, O₂, NO y la biomasa es muy parecido. La diferencia radica en que los procesos de hidrólisis se producen de diferente modo. Esto hace que aparezcan intervalos en los que la concentración de oxígeno y de sustrato son constantes [$t \approx (100, 200)$].

Los procesos de “muerte bacteriana” y de “reproducción-duplicación” son procesos discretos (en el sentido de que se producen cambios bruscos) y produce fluctuaciones en el resto de concentraciones, siendo más evidente en la concentración de sustrato (Ss).

Si disminuimos los valores de los parámetros “factor_hidrolisis” y “bacteria_nivel_duplicacion” se pueden atenuar las fluctuaciones y disminuir la anchura de los intervalos en los que el oxígeno y de sustrato son constantes.

6.4 Discusión cuantitativa

A continuación vamos a mostrar gráficas comparativas de cada una de las concentraciones. Los resultados hablan por sí solos y son sorprendentemente semejantes cuantitativamente hablando.

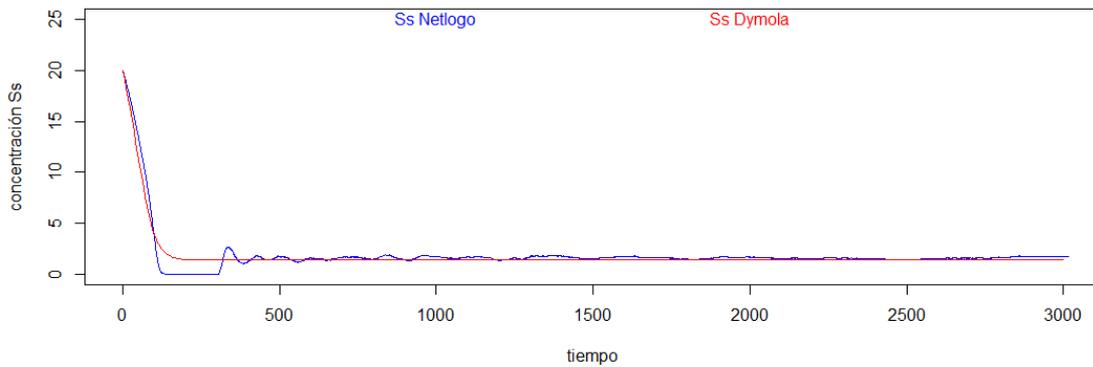


Figura 6-8: Discusión Asm1Simplificado. Cualitativo Ss.

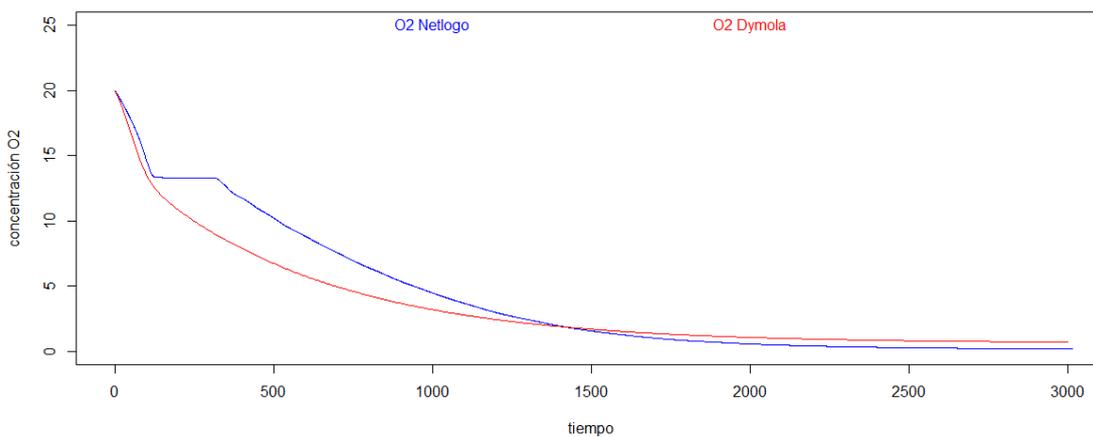


Figura 6-9: Discusión Asm1Simplificado. Cualitativo O₂.

Discusión programación

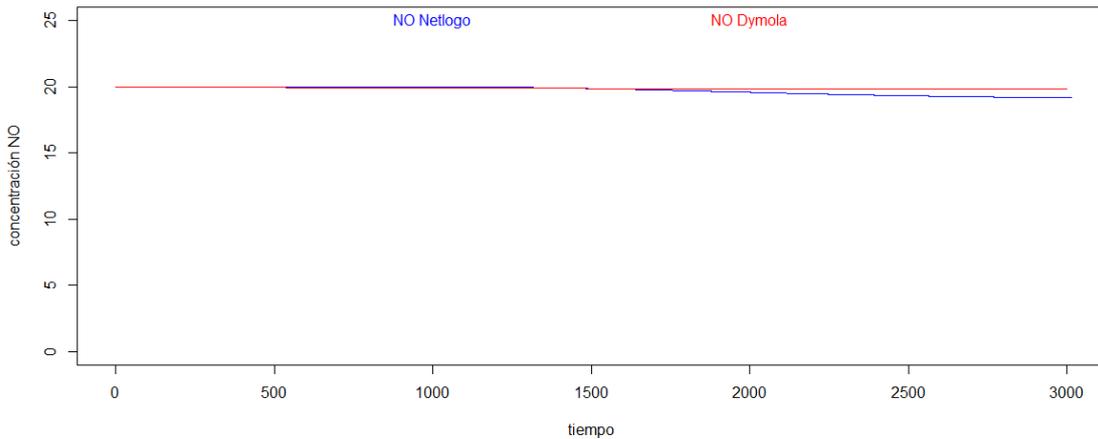


Figura 6-10: Discusión Asm1Simplificado. Cualitativo NO.

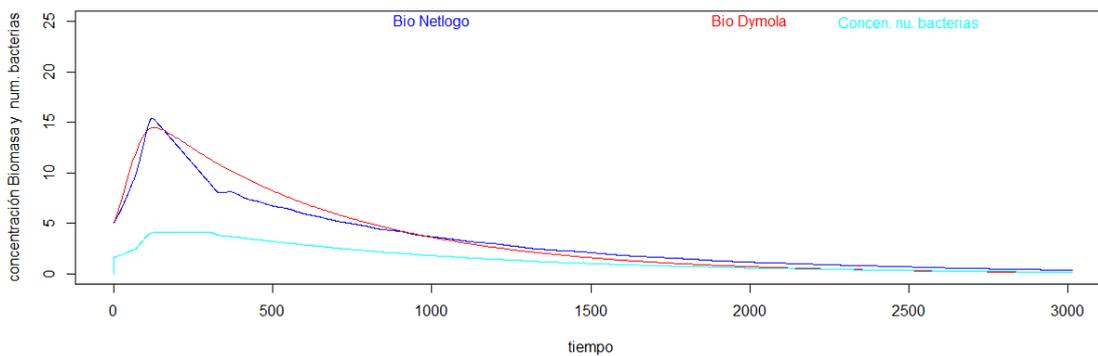


Figura 6-11: Discusión Asm1Simplificado. Cualitativo Biomasa y bacterias.

Las gráficas cuantitativas dan resultados muy parecidos en periodos de 3000 unidades de tiempo (10 minutos), es decir, 500 horas o casi 21 días. La concentración de oxígeno es la que más difiere en $t=(250,750)$ pero puede minimizarse sin disminuir los valores de los parámetros “factor_hidrolisis” y “bacteria_nivel_duplicacion”.

6.5 Discusión programación

Como se ha podido comprobar en la descripción de la librería Modelica, ésta permite la composición de diferentes configuraciones de reactores de una

forma gráfica, incluyo el diseño de estaciones de aguas residuales de una forma gráfica (mediante el uso de esquemas). Esta característica la hace perfecta para el uso académico e incluso profesional. La posibilidad de incluir nuevos procesos, procesos externos, etc. de forma modular e independiente hace que su uso general en el campo de la biología sea de gran utilidad.

Por otro lado, el modelo NetLogo nos permite de forma muy intuitiva programar procesos sencillos y visualizar los resultados fácilmente. Pero se echan en falta herramientas gráficas que permitan el diseño de forma más sencilla. La posibilidad de añadir nuevos elementos a nivel de programación es bastante más tediosa y complicada.

6.6 Conclusión

Tras un ajuste previo de los parámetros de los modelos partiendo de unas condiciones iniciales idénticas hemos podido confirmar que las simulaciones son muy semejantes tanto a nivel cualitativo como cuantitativo.

Las simulaciones realizadas con Dymola son más sensibles y predicen de una forma más suave el comportamiento de las concentraciones afectadas por los procesos de hidrólisis.

Ambos tipos de simulación predicen los efectos de la hidrólisis de forma muy parecida pero en el caso de NetLogo se producen situaciones estacionarias o fluctuaciones relacionadas con la naturaleza discreta de los procesos de muerte y de crecimiento.

El modelo basado en NetLogo permite un seguimiento de la concentración del número de bacterias. Incluso de la energía-biomasa de cada una de ellas. Este tipo de información puede ser muy útil a la hora de establecer el nivel de madurez de las bacterias e incluso puede tenerse en cuenta en algoritmos de control como un parámetro más.

Si resulta curioso que el desarrollo matemático y técnicas de resolución en el que está basado el programa escrito en Dymola es bastante complejo, mientras que el procedimiento más complejo de comportamiento de una bacteria utilizado en el programa descrito en NetLogo (`alimentacion_bacteria`) no pasa de

Conclusión

90 líneas de código (fácilmente entendible por alguien con conocimientos básicos de programación).

Capítulo 7. Conclusiones y trabajos futuros

7.1 Introducción

En este capítulo se presentan las principales conclusiones alcanzadas y se proponen trabajos futuros.

7.2 Conclusiones

Los dos objetivos más importantes de este trabajo consistían en elaborar dos librerías capaces de simular un entorno biológico concreto y discutir las similitudes y diferencias encontradas tanto a nivel de programación como a nivel de resultados.

Para ello hemos llevado a cabo las siguientes tareas:

- Describir en qué consiste el modelo ASM1 que modela el comportamiento de un sistema de fangos activos.
- Describir herramientas de diseño y simulación de estaciones de aguas residuales basadas en los modelos ASM (ASM1, ASM2d, etc.)
- Describir un modelo matemático simplificado de sistema ASM1 que nos ha permitido partir de una base de modelado para construir las librerías deseadas.
- Desarrollar una librería programada en Modelica que permita construir diferentes configuraciones de reactores de una forma gráfica y modular.
- Desarrollar un modelo programado en NetLogo que permita diferentes parametrizaciones asociadas al modelo ASM1 simplificado.
- Validar las librerías desarrolladas y discutir las similitudes y diferencias encontradas a nivel de programación y resultados

En general podemos pensar que el uso combinado de las dos metodologías de modelado puede ser una forma eficaz de avanzar en el conocimiento del sistema de estudio que se desea modelar y simular.

En concreto, en el sistema biológico estudiado no se han observado diferencias sustanciales. Pero, si es cierto que surge la idea de incorporar las bacterias, vistas como elementos de naturaleza discreta, dentro del propio modelado físico del sistema biológico de estudio con el objetivo de obtener un modelo que se ajuste aún más a la realidad.

7.3 Líneas de trabajo futuras

El propósito de este trabajo no es el de desarrollar unas librerías complejas. Pero sí sería interesante ampliar las existentes incluyendo componentes nitrogenados, bacterias autótrofas, incluso modelos más complicados como ASM2d, ASM3, etc., de forma que se puedan seguir comparando y extrayendo conclusiones sobre las diferencias encontradas en las distintas pruebas. Esto nos podría permitir diferenciar patrones macroscópicos que no son explicados por comportamientos microscópicos (emergencias).

Las características de Modelica nos van a permitir realizar las ampliaciones indicadas de una forma mucho más modular, ordenada y jerárquica. En el caso del programa NetLogo esta tarea parece más complicada pero sí que puede ampliarse el sistema con diferentes tipos de bacterias e incluir procesos que emulen la entrada y salida de biomasa, sustrato, oxígeno, etc.

Debido a las características de Modelica, quedaría abierta la posibilidad de diseñar sistemas de control que puedan ser incluidos como parte de la librería Modelica.

Bibliografía

- A Seco, J Ribes, J Serralta, J Ferrer, 2004: Water Science and Technology
- Åström, K.J., Elmqvist, H., Mattsson, S.E., 1998: Evolution of continuous-time modeling and simulation. The 12th European Simulation Multiconference, ESM'98, June 16--19, 1998, Manchester, UK.
- Edmonds, B., Moss, S. & Davidsson, P., 2001: «The Use of Models - making MABS actually work». In, Multi-Agent-Based Simulation, Lecture Notes in Artificial Intelligence 1979, pp. 15-32. Berlin: Springer-Verlag.
- Elmqvist, H., Cellier, F. E. & Otter, M., 1995. Inline integration: a new mixed symbolic/numeric approach for solving differential-algebraic equation systems, in 'ESM'95, SCS European Simulation MultiConference', Prague, Czech Republic.
- Ferrer J., Seco A., Serralta J., Ribes J., Manga J., Asensi E., Morenilla J.J. y Llavador F., 2008. DESASS: a software tool for designing, simulating and optimising WWTPs. *Environmental Modelling and Software*, 23, 19–26.
- Ferrer J., Seco A., Serralta J., Ribes J., Manga J., Asensi E., Morenilla J.J., y Llavador F., 2005. DESASS: una herramienta informática para el diseño, simulación y optimización de EDARs. *Tecnología del Agua*, 258, 66-72.
- F.E. Cellier y E. Kofman, 2006. *Continuous System Simulation*. Capítulo 7. Springer Science & Business Media, 2006.
- Gerald Reichl, 2003. WasteWater - a Library for Modeling and Simulation of Wastewater Treatment Plants in Modelica. Proceedings of the 3rd International Modelica Conference, Linköping, November 3-4, 2003.
- Grimm et al., 2006: Grimm V, Berger U, Bastiansen F, Eliassen S, Ginot V, Giske J, Goss-Custard J, Grand T, Heinz S K, Huse G, Huth A, Jepsen J U, Jørgensen C, Mooij W M, Müller B, Pe'er G, Piou C, Railsback S F, Robbins A M, Robbins M M, Rossmanith E, Rüger N, Strand E, Souissi S, Stillman R A, Vabø R, Visser U and DeAngelis D L (2006). A standard protocol for

describing individual-based and agent-based models. *Ecological Modelling* 198 (1-2), 115-126.

- Grimm et al., 2010: Grimm V, Berger U, DeAngelis DL, Polhill G, Giske J, Railsback SF. 2010. The ODD protocol: a review and first update. *Ecological Modelling* 221: 2760-2768.
- Holland, J. H., 1998: *Emergence. From chaos to order*. Reading, MA: Addison-Wesley.
- Izquierdo, Luis R. et al, 2008. Modelado de sistemas complejos mediante simulación basada en agentes y mediante dinámica de sistemas. *Empiria. Revista de Metodología de Ciencias Sociales* 16: 85–112.
- Llavador Colomer, Fernando, 2001. *Modelos matemáticos de sistemas acuáticos dinámicos*. Universidad de Alicante. Servicio de publicaciones.
- Santos Peñas, Matilde, 2012. Crecimiento de microorganismos. Máster en Ingeniería de Sistemas y de Control. Tema 6. Asignatura: Bio-Sistemas. Departamento de Arquitectura de Computadores y Automática. Facultad de Informática Universidad Complutense de Madrid.
- Torsun, I. S., 1995: *Foundations of Intelligent Knowledge-based Systems*. New York: Academic Press.
- Sean Luke, 2014. *Multiagent Simulation And the MASON Library*. Department of Computer Science. George Mason University.
- Ulf Jeppsson, 1996. *Modelling aspects of wastewater treatment processes*. Lund Institute of Technology, Dept. of Industrial Electrical Eng. and Automation.
- Urquía Moraleda, A., & Martín Villalba, C., 2011. *Modelado orientado a objetos y simulación de sistemas físicos*. Madrid: Dpto. Informática y Automática, ETS Ingeniería Informática, UNED.
- Web oficial Dymola. <http://www.3ds.com/products-services/catia/products/dymola>

- Web oficial MASON. <http://cs.gmu.edu/~eclab/projects/mason/>
- Web oficial modélica. Herramientas Modelica. <https://www.modelica.org/tools>
- Web oficial NetLogo. <https://ccl.northwestern.edu/NetLogo/docs/>
- Web oficial OpenModelica. <https://openmodelica.org/index.php>

Símbolos utilizados

Esta tabla contiene los símbolos empleados en el proyecto indicando su significado y las unidades en caso de que las tuviera. Los diferentes símbolos con el mismo significado, que son utilizados en las librerías desarrolladas, son agrupados.

Símbolo	Significado	Unidades
DQO	La demanda química de oxígeno DQO (COD Chemical Oxygen Demand). Parámetro que mide la cantidad de sustancias susceptibles de ser oxidadas por medios químicos que hay disueltas o en suspensión en una muestra líquida. Se utiliza para medir el grado de contaminación y se expresa en miligramos de oxígeno diatómico por litro (mg(O ₂)/l)	g(O ₂)/m ³
S _I	Concentración de sustancias disueltas no biodegradables.	DQO
S _S Sustrato (rápidamente biodegradable)	Concentración de sustancias disueltas rápidamente biodegradables.	DQO
X _I	Concentración de partículas o sustancias en suspensión no biodegradables.	DQO
X _S	Concentración de partículas o sustancias en suspensión lentamente biodegradables.	DQO
X _{B,H} Biomasa	Concentración de biomasa activa compuesta por bacterias heterótrofas.	DQO
X _{B,A}	Concentración de biomasa activa compuesta por bacterias autótrofas.	DQO
X _P	Concentración de partículas o sustancias en suspensión no biodegradables que provienen de proceso de decaimiento de bacterias.	DQO
S _O O ₂	Concentración de oxígeno disuelto.	-DQO
S _{NO} NO	Concentración de nitratos y nitritos disueltos.	g(N)/m ³
S _{NH}	Concentración de amonio disuelto.	g(N)/m ³
S _{ND}	Concentración de nitrógeno orgánico biodegradable disuelto proveniente de procesos de amonificación.	g(N)/m ³

Símbolos utilizados

X_{ND}	Concentración de partículas de nitrógeno orgánico biodegradable proveniente de proceso de decaimiento de bacterias.	$g(N)/m^3$
S_{ALK}	Alcalinidad.	Unidades molares
Unidad de tiempo	Medida de tiempo	10 minutal
Tick	Medida de tiempo	10 minutal
Unidad de concentración	Medida de concentración	Se refiere a la propia de cada concentración. Es la indicada en las filas anteriores
Velocidad específica (de crecimiento biomasa)	$\frac{dX_{B,H}/dt}{X_{B,H}}$ <p>Siempre para valores positivos de la derivada.</p>	$(Unidad\ de\ tiempo)^{-1}$
Rendimiento de la biomasa	$\frac{dX_{B,H}/dt}{dS_S/dt}$ <p>Siempre para valores positivos de ambas derivadas</p>	DQO biomasa generada/DQO sustrato consumido

Anexo A. Código Modelica

En este anexo listamos el código fuente utilizado para librería Dymola (fangosactivos.mo):

fangosactivos

Procesos y elementos reactor fangos activos

Information

Paquete fangos activos

Este paquete permite diferentes configuraciones de reactores. Está dividido es:

- Procesos
 - Procesos de crecimiento
 - Procesos de decaimiento
 - Procesos de hidrolisis
- Elementos
 - Disueltos
 - En suspensión
 - Biomasa
- Enlaces
 - Enlaces entre elementos-->procesos
 - Enlaces entre fuentes externas-->reactores
- Reactores
 - Con procesos de crecimiento
 - Con procesos de crecimiento y decaimiento
 - Con procesos de crecimiento, decaimiento e inhibidores
 - Con procesos de crecimiento, decaimiento, inhibidores e hidrolisis
- Fuentes externas
 - Fuentes externas que fijan concentración constante
 - Fuentes externas que incremento/decremento de concentración constante
 - Fuentes externas que fijan concentración periódica
- Pruebas
 - Reactores sin entradas y salidas
 - Reactores con entradas y salidas

Este paquete puede ser ampliado con nuevos procesos y se pueden crear reactores con multitud de elementos de todo tipo y multitud de procesos.

Package Content

Name	Description
 unidades	Contiene tipos que representas unidades de medida
 conectores	Paquete con conectores que permiten relacionar elementos con procesos
 elementos	Elementos que intervienen en procesos biológicos
 procesos	Procesos biológicos
 reactores	Paquete de reactores compuestos por procesos y elementos
 procesosExternos	Paquete de procesos externos que relacionan reactores
 interconexionReactores	Paquete de definición de modelos que pueden conectar

	reactores
 validaciones	Paquete de validaciones
 netlogo	Paquete para realizar comparación con NetLogo
 pruebas	Paquete de pruebas

[fangosactivos.unidades](#)

Contiene tipos que representas unidades de medida

Package Content

Name	Description
Concentracion	Tipo que indica concentración
VelocidadCon	Tipo que indica velocidad de concentración

[fangosactivos.unidades.Concentracion](#)

Tipo que indica concentración

Parameters

Type	Name	Default	Description
	displayUnit	"con"	

Modelica definition

```
type Concentracion =Real (
```

```
final quantity="Concentración",  
final unit="unidad de masa / unidad de volumen",  
displayUnit="con") "Tipo que indica concentración";
```

fangosactivos.unidades.VelocidadCon

Tipo que indica velocidad de concentración

Parameters

Type	Name	Default	Description
	displayUnit	"vcon"	

Modelica definition

```
type VelocidadCon = Real (  
  final quantity="Velocidad de concentración",  
  final unit="(unidad de masa / unidad de volumen) / unidad de  
  tiempo",  
  displayUnit="vcon") "Tipo que indica velocidad de concentración";
```

fangosactivos.conectores

Paquete con conectores que permiten relacionar elementos con procesos

Package Content

Name	Description
 elementoProceso	Relación entre un elemento y un proceso
 reactorExterior	Relación que puede conectar un reactor y el exterior

fangosactivos.conectores.elementoProceso

Relación entre un elemento y un proceso

Contents

Type	Name	Description
Concentracion	c	[unidad de masa / unidad de volumen]
flow VelocidadCon	v	[(unidad de masa / unidad de volumen) / unidad de tiempo]

Modelica definition

```
connector elementoProceso "Relación entre un elemento y un proceso"
  fangosactivos.unidades.Concentracion c;
  flow fangosactivos.unidades.VelocidadCon v;
end elementoProceso;
```

fangosactivos.conectores.reactorexterior

Relación que puede conectar un reactor y el exterior

Contents

Type	Name	Description
Concentracion	c	[unidad de masa / unidad de volumen]
flow VelocidadCon	v	[(unidad de masa / unidad de volumen) / unidad de tiempo]

Modelica definition

```
connector reactorExterior
  "Relación que puede conectar un reactor y el exterior"
  fangosactivos.unidades.Concentracion c;
  flow fangosactivos.unidades.VelocidadCon v;
end reactorExterior;
```

[fangosactivos](#).elementos

Elementos que intervienen en procesos biológicos

Package Content

Name	Description
------	-------------

▸ concentracion	Elemento de concentracion
▸ disuelto	Elemento de concentración disuelto en medio liquido
▸ suspension	Elemento de concentración suspendido en medio liquido (partículas)
▸ biomasa	Elemento de concentración de biomasa en medio liquido (bacterias en suspensión)

fangosactivos.elementos.concentracion



Elemento de concentracion

B

Parameters

Type	Name	Default	Description
Concentracion	concentracionInicial	20	Concentración inicial [unidad de masa / unidad de volumen]

Connectors

Type	Name	Description
elementoProceso	ep	Conector con procesos

Modelica definition

```

partial model concentracion "Elemento de concentracion"
  fangosactivos.conectores.elementoProceso ep "Conector con procesos";

  parameter fangosactivos.unidades.Concentracion concentracionInicial=
    20 "Concentración
    inicial";

  fangosactivos.unidades.Concentracion c (

```

```

        start=concentracionInicial, fixed=false)
    "Concentración de elemento tratado";
    fangosactivos.unidades.VelocidadCon v
    "Velocidad concentración elemento tratado";

equation
    // Enlaces
    ep.c = c;
    ep.v = - v;

    // Ecuacion base
    v = der(c);

end concentracion;

```

[fangosactivos.elementos.disuelto](#)



Elemento de concentración disuelto en medio liquido

B

Parameters

Type	Name	Default	Description
Concentracion	concentracionInicial	20	Concentración inicial [unidad de masa / unidad de volumen]

Connectors

Type	Name	Description
elementoProceso	ep	Conector con procesos

Modelica definition

```
model disuelto "Elemento de concentración disuelto en medio liquido"
  extends concentracion;
end disuelto;
```

[fangosactivos.elementos.suspension](#)



Elemento de concentración suspendido en medio liquido (partículas)

B

Parameters

Type	Name	Default	Description
Concentracion	concentracionInicial	20	Concentración inicial [unidad de masa / unidad de volumen]

Connectors

Type	Name	Description
elementoProceso	ep	Conector con procesos

Modelica definition

```
model suspension
  "Elemento de concentración suspendido en medio liquido (partículas)"
  extends concentracion;
end suspension;
```

[fangosactivos.elementos.biomasa](#)

Elemento de concentración de biomasa en medio líquido (bacterias en suspensión)



B

Parameters

Type	Name	Default	Description
Concentracion	concentracionInicial	20	Concentración inicial [unidad de masa / unidad de volumen]

Connectors

Type	Name	Description
elementoProceso	ep	Conector con procesos

Modelica definition

```
model biomasa
  "Elemento de concentración de biomasa en medio líquido (bacterias en
  suspensión)"
  extends concentracion;
```

```

Real velEspeCrecimiento "Velocidad específica crecimiento Xbh";

equation
  // Calculo velocidad específica de crecimiento
  if v > 0 then
    velEspeCrecimiento = v/c;
  else
    velEspeCrecimiento = 0;
  end if;

end biomasa;

```

fangosactivos.procesos

Procesos biológicos

Package Content

Name	Description
proceso	Proceso general que involucra coconcentraciones
 crecimiento	Paquete procesos crecimiento biomasa
 decaimiento	Paquete procesos decaimiento biomasa
 hidrolisis	Paquete de procesos de hidólisis

fangosactivos.procesos.proceso

Proceso general que involucra coconcentraciones

Modelica definition

```

partial model proceso
  "Proceso general que involucra coconcentraciones"
end proceso;

```

[fangosactivos.procesos.crecimiento](#)

Paquete procesos crecimiento biomasa

Package Content

Name	Description
 monod	Procesos crecimiento basados cinética monod

[fangosactivos.procesos.crecimiento.monod](#)

Procesos crecimiento basados cinética monod

Package Content

Name	Description
 crecimiento1s1o	Proceso crecimiento biomasa con uns sustrato y un oxidante

 crecimiento1s1o1i	Proceso crecimiento biomasa con uns sustrato y un oxidante y un inhibidor
---	---

[fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimi](#)  *ento1s1o*****

Proceso crecimiento biomasa con uns sustrato y un oxidante

⋮

Parameters

Type	Name	Default	Description
Real	mu	6.0/144	Velocidad específica máxima
Real	Ks	20	Constante semisaturación sustrato
Real	Ko	0.20	Constante semisaturación oxidante
Real	esteSus	-1.492	Coefficiente estequimetrico sustrato
Real	esteOxi	-0.492	Coefficiente estequimetrico oxidante
Real	esteBio	1	Coefficiente estequimetrico biomasa

Connectors

Type	Name	Description
elementoProceso	elementoProcesoSus	
elementoProceso	elementoProcesoOxi	

elementoProceso	elementoProcesoBio	
---------------------------------	--------------------	--

Modelica definition

```

model crecimiento1s1o
  "Proceso crecimiento biomasa con uns sustrato y un oxidante"
  extends proceso;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoSus;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoOxi;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoBio;

  parameter Real mu = 6.0/144 "Velocidad específica máxima";
  parameter Real Ks = 20 "Constante semisaturación sustrato";
  parameter Real Ko = 0.20 "Constante semisaturación oxidante";

  parameter Real esteSus = -1.492 "Coeficiente estequimetrico
sustrato";
  parameter Real esteOxi = -0.492 "Coeficiente estequimetrico
oxidante";
  parameter Real esteBio = 1 "Coeficiente estequimetrico biomasa";

  Real ro "Variable que indica tasa de proceso de crecimiento";

  fangosactivos.unidades.Concentracion sus "Concentración sustrato";
  fangosactivos.unidades.Concentracion oxi "Concentración oxidante";
  fangosactivos.unidades.Concentracion bio "Concentración biomasa";

  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vSus "Velocidad concentración
sustrato";
  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vOxi "Velocidad concentración
oxidante";
  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vBio "Velocidad concentración
biomasa";

equation
  // Enlaces

```

```

elementoProcesoSus.c = sus;
elementoProcesoSus.v = vSus;
elementoProcesoOxi.c = oxi;
elementoProcesoOxi.v = vOxi;
elementoProcesoBio.c = bio;
elementoProcesoBio.v = vBio;

// Ecuaciones base
ro = mu * sus / (Ks + sus) * oxi / (Ko + oxi) * bio;
vSus = esteSus * ro;
vOxi = esteOxi * ro;
vBio = esteBio * ro;

end crecimiento1s1o1;

```

**[fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimi](#)
[ento1s1o1i](#)**



Proceso crecimiento biomasa con un sustrato y un oxidante y un inhibidor



Parameters

Type	Name	Default	Description
Real	mu	6.0*0.8/144	Velocidad específica máxima
Real	Ks	20	Constante semisaturación sustrato
Real	Ko	0.50	Constante semisaturación oxidante
Real	Ki	0.20	Constante semisaturación inhibidor
Real	esteSus	-1.492	Coefficiente estequimetrico sustrato
Real	esteOxi	-0.492	Coefficiente estequimetrico oxidante
Real	esteBio	1	Coefficiente estequimetrico biomasa

Connectors

Type	Name	Description
elementoProceso	elementoProcesoSus	
elementoProceso	elementoProcesoOxi	
elementoProceso	elementoProcesoBio	
elementoProceso	elementoProcesoInhi	

Modelica definition

```

model crecimientoIsloli
  "Proceso crecimiento biomasa con un sustrato y un oxidante y un
  inhibidor"
  extends proceso;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoSus;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoOxi;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoBio;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoInhi;

  parameter Real mu = 6.0*0.8/144 "Velocidad específica máxima";
  parameter Real Ks = 20 "Constante semisaturación sustrato";
  parameter Real Ko = 0.50 "Constante semisaturación oxidante";
  parameter Real Ki = 0.20 "Constante semisaturación inhibidor";

  parameter Real esteSus = -1.492 "Coeficiente estequimetrico
  sustrato";

```

```

parameter Real esteOxi = -0.492 "Coeficiente estequimetrico
oxidante";
parameter Real esteBio = 1 "Coeficiente estequimetrico biomasa";

Real ro "Variable que indica tasa de proceso de crecimiento";

fangosactivos.unidades.Concentracion sus "Concentración sustrato";
fangosactivos.unidades.Concentracion oxi "Concentración oxidante";
fangosactivos.unidades.Concentracion bio "Concentración biomasa";
fangosactivos.unidades.Concentracion inhi "Concentración inhibidor";

fangosactivos.unidades.VelocidadCon vSus "Velocidad concentración
sustrato";
fangosactivos.unidades.VelocidadCon vOxi "Velocidad concentración
oxidante";
fangosactivos.unidades.VelocidadCon vBio "Velocidad concentración
biomasa";
fangosactivos.unidades.VelocidadCon vInhi "Velocidad Concentración
inhibidor";

equation
  // Enlaces
  elementoProcesoSus.c = sus;
  elementoProcesoSus.v = vSus;
  elementoProcesoOxi.c = oxi;
  elementoProcesoOxi.v = vOxi;
  elementoProcesoBio.c = bio;
  elementoProcesoBio.v = vBio;
  elementoProcesoInhi.c = inhi;
  elementoProcesoInhi.v = vInhi;

  // Ecuaciones base
  ro = mu * sus / (Ks + sus) * Ki/ (Ki + inhi) * oxi/ (Ko + oxi) *
bio;
  vSus = esteSus * ro;
  vOxi = esteOxi * ro;
  vBio = esteBio * ro;
  vInhi = 0;

end crecimiento1sloli;

```

fangosactivos.procesos.decaimiento

Paquete procesos decaimiento biomasa

Package Content

Name	Description

 primerorden	Procesos decaimiento de primerorden
---	-------------------------------------

[fangosactivos.procesos.decaimiento.primerorden](#)

Procesos decaimiento de primerorden

Package Content

Name	Description
 decaimiento	Proceso decaimiento biomasa de primer orden
 decaimiento2p	Proceso decaimiento biomasa primer orden con transformacion en dos productos

[fangosactivos.procesos.decaimiento.primerorden.d](#) 
ecaimiento

Proceso decaimiento biomasa de primer orden

▪

Parameters

Type	Name	Default	Description
Real	b	0.62/144	Tasa decaimiento

Connectors

Type	Name	Description
elementoProceso	elementoProcesoBio	

Modelica definition

```

model decaimiento "Proceso decaimiento biomasa de primer orden"
  extends proceso;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoBio;

  parameter Real b = 0.62/144 "Tasa decaimiento";

  Real ro "Variable que indica tasa de proceso de crecimiento";

  fangosactivos.unidades.Concentracion bio "Concentración biomasa";

  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vBio "Velocidad concentración
biomasa";

equation
  // Enlaces
  elementoProcesoBio.c = bio;
  elementoProcesoBio.v = vBio;

  // Ecuaciones base
  ro = b * bio;
  vBio = - ro;

end decaimiento;

```

[fangosactivos.procesos.decaimiento.primerorden.d](#)



ecaimiento2p

Proceso decaimiento biomasa primer orden con transformacion en dos productos

⋮

Parameters

Type	Name	Default	Description
Real	b	0.62/144	Constante decaimiento
Real	esteR1	0.92	Coefficiente estequimetrico producto resultante 1
Real	esteR2	0.08	Coefficiente estequimetrico producto resultante 2
Real	esteBio	-1	Coefficiente estequimetrico biomasa

Connectors

Type	Name	Description
elementoProceso	elementoResultante1	Uno de los elementos en los que se transforma biomasa decaida

elementoProceso	elementoResultante2	Uno de los elementos en los que se transforma biomasa decaida
elementoProceso	elementoProcesoBio	

Modelica definition

```

model decaimiento2p
  "Proceso decaimiento biomasa primer orden con transformacion en dos productos"
  extends proceso;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoResultante1
    "Uno de los elementos en los que se transforma biomasa decaida";
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoResultante2
    "Uno de los elementos en los que se transforma biomasa decaida";
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoBio;

  parameter Real b = 0.62/144 "Constante decaimiento";

  parameter Real esteR1 = 0.92
    "Coeficiente estequimetrico producto resultante 1";
  parameter Real esteR2 = 0.08
    "Coeficiente estequimetrico producto resultante 2";
  parameter Real esteBio = -1 "Coeficiente estequimetrico biomasa";

  Real ro "Variable que indica tasa de proceso de decaimiento";

  fangosactivos.unidades.Concentracion r1 "Concentración producto resultante 1";
  fangosactivos.unidades.Concentracion r2 "Concentración producto resultante 2";
  fangosactivos.unidades.Concentracion bio "Concentración biomasa";

  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vR1
    "Velocidad concentración producto resultante 1";
  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vR2
    "Velocidad concentración producto resultante 2";
  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vBio "Velocidad concentración biomasa";

equation
  // Enlaces
  elementoResultante1.c = r1;
  elementoResultante1.v = vR1;
  elementoResultante2.c = r2;
  elementoResultante2.v = vR2;
  elementoProcesoBio.c = bio;
  elementoProcesoBio.v = vBio;

  // Ecuaciones base
  ro = b * bio;
  vR1 = esteR1 * ro;
  vR2 = esteR2 * ro;
  vBio = esteBio * ro;

```

```
end decaimiento2p;
```

[fangosactivos.procesos.hidrolisis](#)

Paquete de procesos de hidólisis

Package Content

Name	Description
 monod	Paquete de procesos de hidrolisis basados en cinética de monod

[fangosactivos.procesos.hidrolisis.monod](#)

Paquete de procesos de hidrolisis basados en cinética de monod

Package Content

Name	Description
------	-------------

 hidrolisis1p1o	Proceso hidrolisis elemento en suspension realizada por biomada con un oxidante
 hidrolisis1p1o1i	Proceso hidrolisis elemento en suspension realizada por biomada con un oxidante y un inhibidor

[fangosactivos.procesos.hidrolisis.monod.hidrolisis1p1o](#)



Proceso hidrolisis elemento en suspension realizada por biomada con un oxidante



Parameters

Type	Name	Default	Description
Real	mu	3/144	Velocidad específica máxima
Real	Ks	0.03	Constante semisaturación particula en suspension
Real	Ko	0.20	Constante semisaturación oxidante
Real	esteSus	1	Coficiente estequimetrico sustrato
Real	estePar	-1	Coficiente estequimetrico particula en suspension

Connectors

Type	Name	Description
elementoProceso	elementoProcesoPar	

elementoProceso	elementoProcesoSus	
elementoProceso	elementoProcesoOxi	
elementoProceso	elementoProcesoBio	

Modelica definition

```

model hidrolisis1plo
  "Proceso hidrolisis elemento en suspension realizada por biomada con
  un oxidante"
  extends proceso;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoPar;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoSus;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoOxi;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoBio;

  parameter Real mu = 3/144 "Velocidad específica máxima";
  parameter Real Ks = 0.03 "Constante semisaturación particula en
  suspension";
  parameter Real Ko = 0.20 "Constante semisaturación oxidante";

  parameter Real esteSus = 1 "Coeficiente estequimetrico sustrato";
  parameter Real estePar = -1
    "Coeficiente estequimetrico particula en suspension";

  Real ro "Variable que indica tasa de proceso de crecimiento";

  fangosactivos.unidades.Concentracion sus "Concentración sustrato";
  fangosactivos.unidades.Concentracion oxi "Concentración oxidante";
  fangosactivos.unidades.Concentracion bio "Concentración biomasa";
  fangosactivos.unidades.Concentracion par
    "Concentración particula en suspension";

```

```

fangosactivos.unidades.VelocidadCon vSus "Velocidad concentración
sustrato";
fangosactivos.unidades.VelocidadCon vOxi "Velocidad concentración
oxidante";
fangosactivos.unidades.VelocidadCon vBio "Velocidad concentración
biomasa";
fangosactivos.unidades.VelocidadCon vPar
"Velocidad concentración partícula en suspensión";

equation
  // Enlaces
  elementoProcesoSus.c = sus;
  elementoProcesoSus.v = vSus;
  elementoProcesoOxi.c = oxi;
  elementoProcesoOxi.v = vOxi;
  elementoProcesoBio.c = bio;
  elementoProcesoBio.v = vBio;
  elementoProcesoPar.c = par;
  elementoProcesoPar.v = vPar;

  // Ecuaciones base
  ro = mu * (par/bio) / (Ks + (par/bio)) * oxi / (Ko + oxi) * bio;
  vSus = esteSus * ro;
  vOxi = 0;
  vBio = 0;
  vPar = estePar * ro;

end hidrolisis1p1o;

```

fangosactivos.procesos.hidrolisis.monod.hidrolisis



1p1o1i

Proceso hidrolisis elemento en suspensión realizada por biomada con un oxidante y un inhibidor



Parameters

Type	Name	Default	Description
Real	mu	3*0.4/144	Velocidad específica máxima
Real	Ks	0.03	Constante semisaturación partícula en suspensión

Real	Ko	0.20	Constante semisaturación oxidante
Real	Ki	0.20	Constante semisaturación inhibidor
Real	esteSus	1	Coefficiente estequimetrico sustrato
Real	estePar	-1	Coefficiente estequimetrico particula en suspension

Connectors

Type	Name	Description
elementoProceso	elementoProcesoPar	
elementoProceso	elementoProcesoSus	
elementoProceso	elementoProcesoOxi	
elementoProceso	elementoProcesoBio	
elementoProceso	elementoProcesoInhi	

Modelica definition

```

model hidrolisis1p1oli
  "Proceso hidrolisis elemento en suspension realizada por biomada con
  un oxidante y un inhibidor"
  extends proceso;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoPar;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoSus;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoOxi;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoBio;
  fangosactivos.conectores.elementoProceso elementoProcesoInhi;

  parameter Real mu = 3*0.4/144 "Velocidad específica máxima";
  parameter Real Ks = 0.03 "Constante semisaturación partícula en
  suspension";
  parameter Real Ko = 0.20 "Constante semisaturación oxidante";
  parameter Real Ki = 0.20 "Constante semisaturación inhibidor";

  parameter Real esteSus = 1 "Coeficiente estequimetrico sustrato";
  parameter Real estePar = -1
    "Coeficiente estequimetrico partícula en suspension";

  Real ro "Variable que indica tasa de proceso de crecimiento";

  fangosactivos.unidades.Concentracion sus "Concentración sustrato";
  fangosactivos.unidades.Concentracion oxi "Concentración oxidante";
  fangosactivos.unidades.Concentracion bio "Concentración biomasa";
  fangosactivos.unidades.Concentracion par
    "Concentración partícula en suspension";
  fangosactivos.unidades.Concentracion inhi "Concentración inhibidor";

  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vSus "Velocidad concentración
  sustrato";
  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vOxi "Velocidad concentración
  oxidante";
  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vBio "Velocidad concentración
  biomasa";
  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vPar
    "Velocidad concentración partícula en suspension";
  fangosactivos.unidades.VelocidadCon vInhi "Velocidad Concentración
  inhibidor";

equation
  // Enlaces
  elementoProcesoSus.c = sus;
  elementoProcesoSus.v = vSus;
  elementoProcesoOxi.c = oxi;
  elementoProcesoOxi.v = vOxi;
  elementoProcesoBio.c = bio;
  elementoProcesoBio.v = vBio;
  elementoProcesoPar.c = par;
  elementoProcesoPar.v = vPar;
  elementoProcesoInhi.c = inhi;
  elementoProcesoInhi.v = vInhi;

  // Ecuaciones base
  ro = mu * (par/bio) / (Ks + (par/bio)) * Ki / (Ki + inhi) * oxi /
  (Ko + oxi) * bio;
  vSus = esteSus * ro;

```

```
vOxi = 0;  
vBio = 0;  
vPar = estePar * ro;  
vInhi = 0;  
  
end hidrolisis1plo1i;
```

fangosactivos.reactores

Paquete de reactores compuestos por procesos y elementos

Package Content

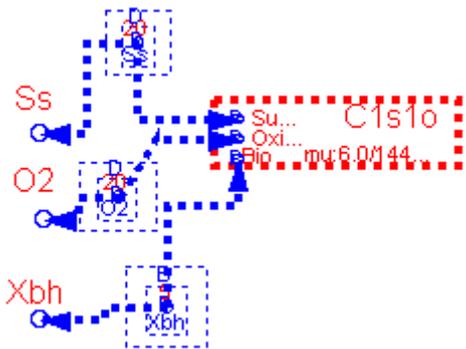
Name	Description
 crecimiento	Reactor con procesos crecimiento
 crecimientoDecaimiento	Reactor con procesos de crecimiento-decaimiento
 crecimientoDecaimientoInhibicion	Reactor con procesos de crecimiento-decaimiento-inhibidores

 crecimientoDecaimientoInhibicionHidrolisis	Reactor con procesos de crecimiento-decaimiento-inhibicion-hidrolisis
 asm1Simplificado	Reactor con procesos de descritos en modelos ASM1 simplificado

fangosactivos.reactores.crecimiento



Reactor con procesos crecimiento



Connectors

Type	Name	Description
reactorExterior	elementoFuenteExternaO2	
reactorExterior	elementoFuenteExternaSs	
reactorExterior	elementoFuenteExternaXbh	

Modelica definition

```

model crecimiento "Reactor con procesos crecimiento"
  elementos.disuelto Ss "Sustrato rapidamente biodegradable";
  elementos.disuelto O2 "Oxígeno disuelto";
  elementos.biomasa Xbh(concentracionInicial=5) "Heterotrofos";
  fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimiento1s1o
  crecimientoXbh
  "Crecimiento heterotrofos";
  fangosactivos.conectores.reactorexterior elementoFuenteExternaO2;

```

```

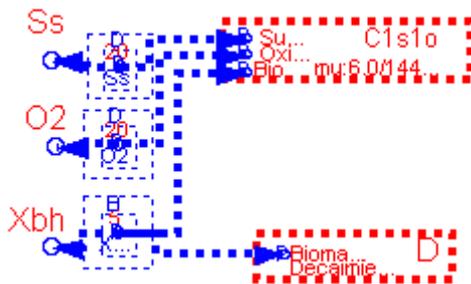
fangosactivos.conectores.reactorExterior elementoFuenteExternaSs;
fangosactivos.conectores.reactorExterior elementoFuenteExternaXbh;
equation
  connect (Ss.ep, crecimientoXbh.elementoProcesoSus);
  connect (O2.ep, crecimientoXbh.elementoProcesoOxi);
  connect (Xbh.ep, crecimientoXbh.elementoProcesoBio);
  connect (Ss.ep, elementoFuenteExternaSs);
  connect (O2.ep, elementoFuenteExternaO2);
  connect (Xbh.ep, elementoFuenteExternaXbh);
end crecimiento;

```

fangosactivos.reactores.crecimientoDecaimiento



Reactor con procesos de crecimiento-decaimiento



Connectors

Type	Name	Description

reactorExterior	elementoFuenteExternaO2	
reactorExterior	elementoFuenteExternaSs	
reactorExterior	elementoFuenteExternaXbh	

Modelica definition

```

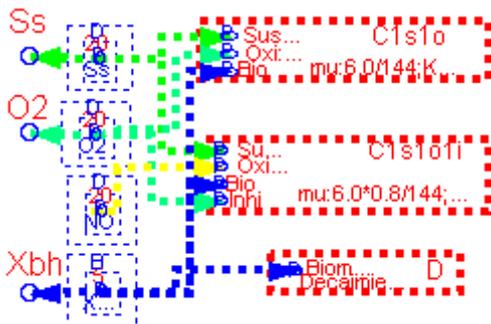
model crecimientoDecaimiento
  "Reactor con procesos de crecimiento-decaimiento"
  elementos.disuelto Ss "Sustrato rapidamente biodegradable";
  elementos.disuelto O2 "Oxigeno disuelto";
  elementos.biomasa Xbh(concentracionInicial=5) "Heterotrofos";
  fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimientolslo
  crecimientoolslo;
  fangosactivos.procesos.decaimiento.primerorden.decaimiento
  decaimiento;
  fangosactivos.conectores.reactorexterior elementoFuenteExternaO2;
  fangosactivos.conectores.reactorexterior elementoFuenteExternaSs;
  fangosactivos.conectores.reactorexterior elementoFuenteExternaXbh;
equation
  connect(Ss.ep, crecimientoolslo.elementoProcesoSus);
  connect(O2.ep, crecimientoolslo.elementoProcesoOxi);
  connect(Xbh.ep, crecimientoolslo.elementoProcesoBio);
  connect(Xbh.ep, decaimiento.elementoProcesoBio);
  connect(Ss.ep, elementoFuenteExternaSs);
  connect(O2.ep, elementoFuenteExternaO2);
  connect(Xbh.ep, elementoFuenteExternaXbh);
end crecimientoDecaimiento;

```

[fangosactivos.reactores.crecimientoDecaimientoInhibicion](#)



Reactor con procesos de crecimiento-decaimiento-inhibidores



Connectors

Type	Name	Description
reactorExterior	elementoFuenteExternaO2	
reactorExterior	elementoFuenteExternaSs	
reactorExterior	elementoFuenteExternaXbh	

Modelica definition

```

model crecimientoDecaimientoInhibicion
  "Reactor con procesos de crecimiento-decaimiento-inhibidores"
  elementos.disuelto Ss "Sustrato rapidamente biodegradable";
  elementos.disuelto O2 "Oxígeno disuelto";
  elementos.biomasa Xbh (concentracionInicial=5) "Heterotrofos";
  fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimientolslo
  crecimientoolslo;
  fangosactivos.procesos.decaimiento.primerorden.decaimiento
  decaimiento;
  fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimientolslo1i
  crecimientoolslo1i (
    Ko=0.50,
    esteOxi=-0.492,
    mu=6.0*0.8/144);
  elementos.disuelto NO "Oxígeno disuelto";
  fangosactivos.conectores.reactorexterior elementoFuenteExternaO2;
  fangosactivos.conectores.reactorexterior elementoFuenteExternaSs;
  fangosactivos.conectores.reactorexterior elementoFuenteExternaXbh;
equation

```

```

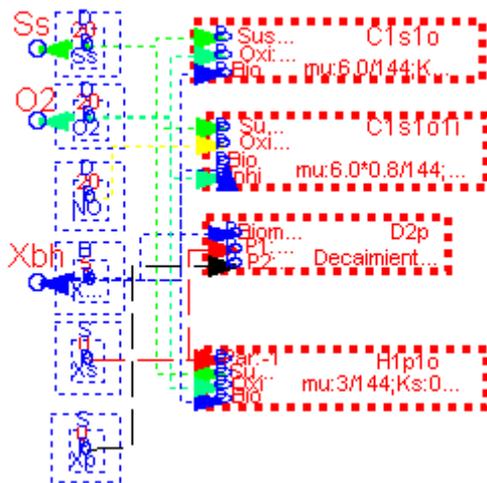
connect (Ss.ep, crecimiento1slo.elementoProcesoSus);
connect (Ss.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoSus);
connect (O2.ep, crecimiento1slo.elementoProcesoOxi);
connect (O2.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoInhi);
connect (NO.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoOxi);
connect (Xbh.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoBio);
connect (Xbh.ep, decaimiento.elementoProcesoBio);
connect (Ss.ep, elementoFuenteExternaSs);
connect (O2.ep, elementoFuenteExternaO2);
connect (Xbh.ep, elementoFuenteExternaXbh);
connect (Xbh.ep, crecimiento1slo.elementoProcesoBio);
end crecimientoDecaimientoInhibicion;

```

fangosactivos.reactores.crecimientoDecaimientoInhibicionHidrolisis



Reactor con procesos de crecimiento-decaimiento-inhibicion-hidrolisis



Connectors

Type	Name	Description
reactorExterior	elementoFuenteExternaO2	
reactorExterior	elementoFuenteExternaSs	
reactorExterior	elementoFuenteExternaXbh	

Modelica definition

```

model crecimientoDecaimientoInhibicionHidrolisis
  "Reactor con procesos de crecimiento-decaimiento-inhibicion-
  hidrolisis"
  elementos.disuelto Ss "Sustrato rapidamente biodegradable";
  elementos.disuelto O2 "Oxígeno disuelto";
  elementos.biomasa Xbh(concentracionInicial=5) "Heterotrofos";
  fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimientolslo
  crecimientoolslo;
  fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimientolsloli
  crecimientoolsloli(
    Ko=0.50,
    esteOxi=-0.172,
    mu=6.0*0.8/144);
  elementos.disuelto NO "Oxígeno disuelto";
  procesos.decaimiento.primerorden.decaimiento2p decaimiento2p;
  procesos.hidrolisis.monod.hidrolisislplo hidrolisislplo;
  fangosactivos.conectores.reactorExterior elementoFuenteExternaO2;
  fangosactivos.conectores.reactorExterior elementoFuenteExternaSs;
  fangosactivos.conectores.reactorExterior elementoFuenteExternaXbh;
  elementos.suspension Xs(concentracionInicial=0);
  elementos.suspension Xp(concentracionInicial=0);
equation
  connect(Ss.ep, crecimientoolslo.elementoProcesoSus);
  connect(Ss.ep, crecimientoolsloli.elementoProcesoSus);
  connect(O2.ep, crecimientoolslo.elementoProcesoOxi);
  connect(O2.ep, crecimientoolsloli.elementoProcesoInhi);
  connect(NO.ep, crecimientoolsloli.elementoProcesoOxi);
  connect(Xbh.ep, crecimientoolslo.elementoProcesoBio);
  connect(Xbh.ep, crecimientoolsloli.elementoProcesoBio);
  connect(Xbh.ep, decaimiento2p.elementoProcesoBio);
  connect(Xbh.ep, hidrolisislplo.elementoProcesoBio);
  connect(Ss.ep, hidrolisislplo.elementoProcesoSus);
  connect(O2.ep, hidrolisislplo.elementoProcesoOxi);
  connect(Ss.ep, elementoFuenteExternaSs);
  connect(O2.ep, elementoFuenteExternaO2);
  connect(Xbh.ep, elementoFuenteExternaXbh);

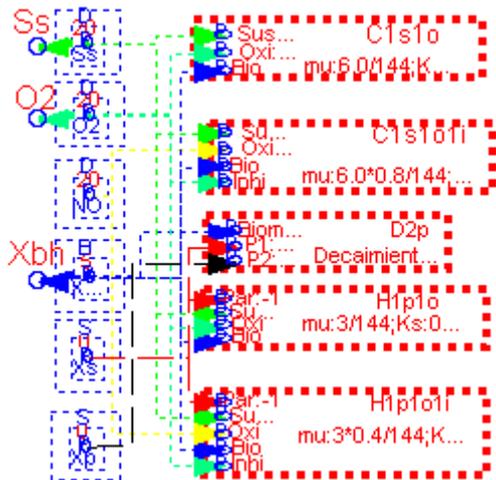
```

```
connect(Xs.ep, decaimiento2p.elementoResultante1);
connect(Xs.ep, hidrolisis1plo.elementoProcesoPar);
connect(Xp.ep, decaimiento2p.elementoResultante2);
end crecimientoDecaimientoInhibicionHidrolisis;
```

[fangosactivos.reactores.asm1Simplificado](#)



Reactor con procesos de descritos en modelos ASM1 simplificado



Connectors

Type	Name	Description
reactorExterior	elementoFuenteExternaO2	
reactorExterior	elementoFuenteExternaSs	
reactorExterior	elementoFuenteExternaXbh	

Modelica definition

```
model asm1Simplificado
  "Reactor con procesos de descritos en modelos ASM1 simplificado"
  elementos.disuelto Ss "Sustrato rapidamente biodegradable";
  elementos.disuelto O2 "Oxígeno disuelto";
  elementos.biomasa Xbh(concentracionInicial=5) "Heterotrofos";
  fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimientolslo
  crecimientoolslo;
  fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimientolslo1i
  crecimientoolslo1i(
    Ko=0.50,
```

Anexo A. Código Modelica

```
esteOxi=-0.172,  
mu=6.0*0.8/144);  
elementos.disuelto NO "Oxígeno disuelto";  
procesos.hidrolisis.monod.hidrolisis1plo1i hidrolisis1plo1i(  
  Ko=0.50,  
  Ki=0.20,  
  mu=3*0.4/144);  
procesos.decaimiento.primerorden.decaimiento2p decaimiento2p;  
procesos.hidrolisis.monod.hidrolisis1plo hidrolisis1plo;  
fangosactivos.conectores.reactorExterior elementoFuenteExternaO2;  
fangosactivos.conectores.reactorExterior elementoFuenteExternaSs;  
fangosactivos.conectores.reactorExterior elementoFuenteExternaXbh;  
elementos.suspension Xs(concentracionInicial=0);  
elementos.suspension Xp(concentracionInicial=0);  
equation  
  connect(Ss.ep, crecimiento1slo.elementoProcesoSus);  
  connect(Ss.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoSus);  
  connect(O2.ep, crecimiento1slo.elementoProcesoOxi);  
  connect(O2.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoInhi);  
  connect(NO.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoOxi);  
  connect(Xbh.ep, crecimiento1slo.elementoProcesoBio);  
  connect(Xbh.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoBio);  
  connect(Xbh.ep, decaimiento2p.elementoProcesoBio);  
  connect(Xbh.ep, hidrolisis1plo.elementoProcesoBio);  
  connect(Xbh.ep, hidrolisis1plo1i.elementoProcesoBio);  
  connect(Ss.ep, hidrolisis1plo.elementoProcesoSus);  
  connect(Ss.ep, hidrolisis1plo1i.elementoProcesoSus);  
  connect(O2.ep, hidrolisis1plo.elementoProcesoOxi);  
  connect(O2.ep, hidrolisis1plo1i.elementoProcesoInhi);  
  connect(NO.ep, hidrolisis1plo1i.elementoProcesoOxi);  
  connect(Ss.ep, elementoFuenteExternaSs);  
  connect(O2.ep, elementoFuenteExternaO2);  
  connect(Xbh.ep, elementoFuenteExternaXbh);  
  connect(Xs.ep, decaimiento2p.elementoResultante1);  
  connect(Xs.ep, hidrolisis1plo.elementoProcesoPar);  
  connect(Xs.ep, hidrolisis1plo1i.elementoProcesoPar);  
  connect(Xp.ep, decaimiento2p.elementoResultante2);  
end asmlSimplificado;
```

fangosactivos.procesosExternos

Paquete de procesos externos que relacionan reactores

Package Content

Name	Description
concentracionExterna	Elemento de concentracion externa
concentracionConstante	Fuente de concentración constante
velocidadConConstante	Fuente de velocidad de concentración constante
concentracionPeriodica	Fuente de concentración periodica
velocidadConPeriodica	Fuente de velocidad de concentración periodica

fangosactivos.procesosExternos.concentracionExterna



Elemento de concentracion externa

◦

Connectors

Type	Name	Description
reactorExterior	efe	

Modelica definition

```
partial model concentracionExterna
  "Elemento de concentracion externa"
  fangosactivos.conectores.reactorExterior efe;

  fangosactivos.unidades.Concentracion c "Concentración de elemento
tratado";
  fangosactivos.unidades.VelocidadCon v
  "Velocidad concentración elemento tratado";

equation
  // Enlaces
  efe.c = c;
  efe.v = v;

end concentracionExterna;
```

[fangosactivos.procesosExternos.concentracionCon](#)

stante



Fuente de concentración constante

◦

Parameters

Type	Name	Default	Description
------	------	---------	-------------

Concentracion	k	1	Concentracion constante [unidad de masa / unidad de volumen]
-------------------------------	---	---	--

Connectors

Type	Name	Description
reactorExterior	efe	

Modelica definition

```

model concentracionConstante "Fuente de concentración constante"
  extends concentracionExterna;

  parameter fangosactivos.unidades.Concentracion k=
    1 "Concentracion constante";

equation
  // Ecuacion base
  c = k;

end concentracionConstante;

```

[fangosactivos.procesosExternos.velocidadConCon](#) **stante**



Fuente de velocidad de concentración constante

•

Parameters

Type	Name	Default	Description
Concentracion	k	-1	Concentracion constante [unidad de masa / unidad de volumen]

Connectors

Type	Name	Description
reactorExterior	efe	

Modelica definition

```
model velocidadConConstante
  "Fuente de velocidad de concentración constante"
  extends concentracionExterna;

  parameter fangosactivos.unidades.Concentracion k=
    -1 "Concentracion constante";

equation
  // Ecuacion base
  v = k;

end velocidadConConstante;
```

[fangosactivos.procesosExternos.concentracionPeriodica](#)



Fuente de concentración periódica

•

Parameters

Type	Name	Default	Description
Real	periodo	1	Periodo en unidades de tiempo
Real	amplitud	1	Máximo valor de concentración
Real	fase	0	Fase en radianes

Connectors

Type	Name	Description
reactorExterior	efe	

Modelica definition

```

model concentracionPeriodica "Fuente de concentración periodica"
  extends concentracionExterna;

  parameter Real periodo = 1 "Periodo en unidades de tiempo";
  parameter Real amplitud= 1 "Máximo valor de concentración";
  parameter Real fase = 0 "Fase en radianes";

equation
  // Ecuacion base
  c = amplitud/2*(1 + Modelica.Math.sin(fase +
  2*Modelica.Constants.pi*time/periodo));

end concentracionPeriodica;

```

[fangosactivos.procesosExternos.velocidadConPeriodica](#)



Fuente de velocidad de concentración periodica

•

Parameters

Type	Name	Default	Description
Real	periodo	1	Periodo en unidades de tiempo
Real	amplitud	1	Máximo valor de concentración
Real	fase	0	Fase en radianes

Connectors

Type	Name	Description
reactorExterior	efe	

Modelica definition

```

model velocidadConPeriodica
  "Fuente de velocidad de concentración periodica"
  extends concentracionExterna;

  parameter Real periodo = 1 "Periodo en unidades de tiempo";
  parameter Real amplitud= 1 "Máximo valor de concentración";
  parameter Real fase = 0 "Fase en radianes";

equation

```

```
// Ecuacion base
v = amplitud/2*(1+Modelica.Math.sin(fase +
2*Modelica.Constants.pi*time/periodo));

end velocidadConPeriodica;
```

fangosactivos.interconexionReactores

Paquete de definición de modelos que pueden conectar reactores

Package Content

Name	Description
 conexion2Reactores	Clase que permite conectar dos reactores

fangosactivos.interconexionReactores.conexion2Reactores



Clase que permite conectar dos reactores

• •

Parameters

Type	Name	Default	Description
Real	r1	-1	Proporción entrada/salida tanque 1
Real	r2	1	Proporción entrada/salida tanque 2

Connectors

Type	Name	Description
------	------	-------------

reactorExterior	efe1	
reactorExterior	efe2	

Modelica definition

```

model conexion2Reactores "Clase que permite conectar dos reactores"
  fangosactivos.conectores.reactorexterior efe1;
  fangosactivos.conectores.reactorexterior efe2;

  fangosactivos.unidades.VelocidadCon v1
    "Vel. concentración de elemento tratado reactor 1";
  fangosactivos.unidades.VelocidadCon v2
    "Vel. concentración de elemento tratado reactor 2";

  parameter Real r1 = -1 "Proporcion entrada/salida tanque 1";
  parameter Real r2 = 1 "Proporcion entrada/salida tanque 2";

equation
  // Enlaces
  efe1.v = v1;
  efe2.v = v2;

  // Ecuacion base
  v1 = r1;
  v2 = r2;

end conexion2Reactores;

```

fangosactivos.validaciones**Paquete de validaciones****Package Content**

Name	Description
<input type="checkbox"/> reactoresAislados	Pruebas de reactores sin entradas ni salidas
<input type="checkbox"/> reactoresNoAislados	Pruebas de reactores con entradas y salidas

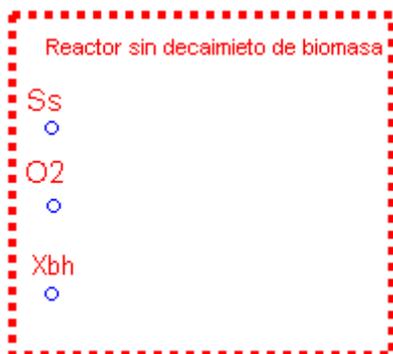
fangosactivos.validaciones.reactoresAislados**Pruebas de reactores sin entradas ni salidas****Package Content**

Name	Description
crecimiento	Modelo de crecimiento sin entradas ni salidas
crecimientoDecaimiento	Modelo de crecimiento-decaimiento sin entradas ni salidas
crecimientoDecaimientoInhibicion	Modelo de crecimiento-decaimiento-inhibicion sin entradas ni salidas
crecimientoDecaimientoInhibicionHidrolisis	Modelo de crecimiento-decaimiento-inhibicion-hidrolisis sin entradas ni salidas
asm1Simplificado	Modelo asm1Simplificado sin entradas ni salidas

	salidas
--	---------

[fangosactivos.validaciones.reactoresAislados.crecimiento](#)

Modelo de crecimiento sin entradas ni salidas

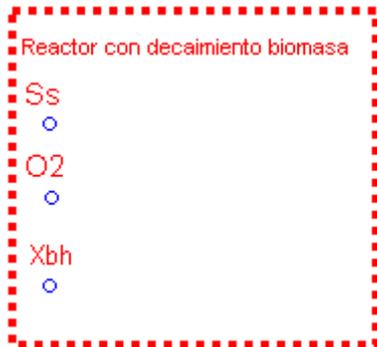


Modelica definition

```
model crecimiento "Modelo de crecimiento sin entradas ni salidas"  
  reactores.crecimiento crecimiento;  
end crecimiento;
```

[fangosactivos.validaciones.reactoresAislados.crecimientoD](#) [ecaimiento](#)

Modelo de crecimiento-decaimiento sin entradas ni salidas

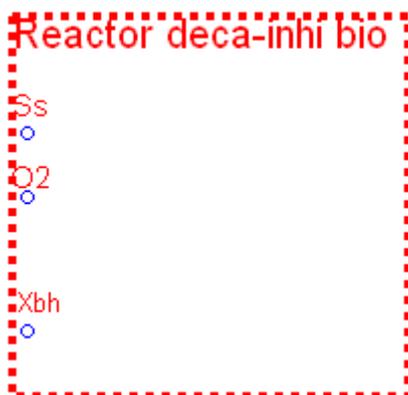


Modelica definition

```
model crecimientoDecaimiento
  "Modelo de crecimiento-decaimiento sin entradas ni salidas"
  reactores.crecimientoDecaimiento crecimientoDecaimiento;
end crecimientoDecaimiento;
```

[fangosactivos.validaciones.reactoresAislados.crecimientoD](#) [ecaimientoInhibicion](#)

Modelo de crecimiento-decaimiento-inhibicion sin entradas ni salidas



Modelica definition

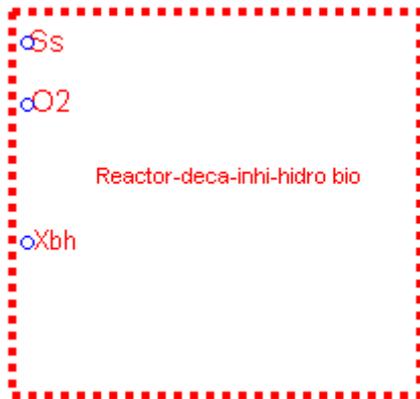
```
model crecimientoDecaimientoInhibicion
  "Modelo de crecimiento-decaimiento-inhibicion sin entradas ni salidas"
  fangosactivos.reactores.crecimientoDecaimientoInhibicion

```

```
    crecimientoDecaimientoInhibidor;  
end crecimientoDecaimientoInhibicion;
```

fangosactivos.validaciones.reactoresAislados.crecimientoD ecaimientoInhibicionHidrolisis

Modelo de crecimiento-decaimiento-inhibicion-hidrolisis sin entradas ni salidas

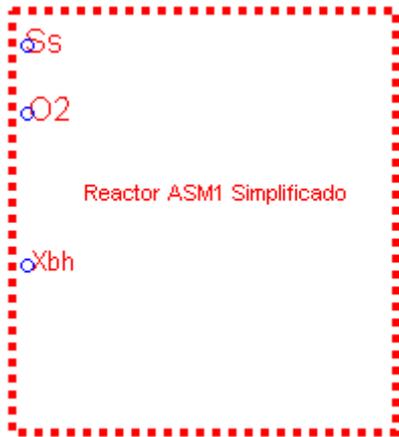


Modelica definition

```
model crecimientoDecaimientoInhibicionHidrolisis  
  "Modelo de crecimiento-decaimiento-inhibicion-hidrolisis sin  
  entradas ni salidas"  
  fangosactivos.reactores.crecimientoDecaimientoInhibicionHidrolisis  
    crecimientoDecaimientoInhibidorHidrolisis;  
end crecimientoDecaimientoInhibicionHidrolisis;
```

[fangosactivos.validaciones.reactoresAislados.asm1Simplificado](#)

Modelo asm1Simplificado sin entradas ni salidas



Modelica definition

```
model asm1Simplificado
  "Modelo asm1Simplificado sin entradas ni salidas"
  reactores.asm1Simplificado asm1Simplificado;
end asm1Simplificado;
```

[fangosactivos.validaciones.reactoresNoAislados](#)

Pruebas de reactores con entradas y salidas

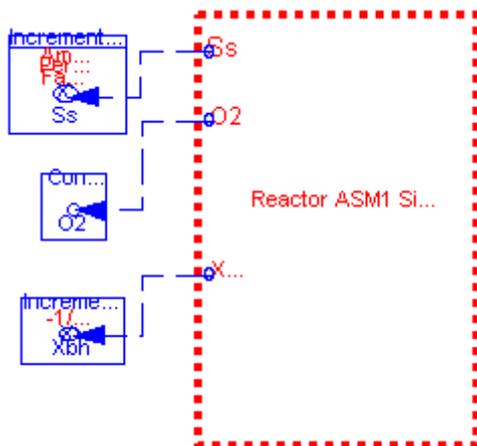
Package Content

Name	Description
asm1Simplificado_incSsPerioico_O2cte	Modelo de reactor asm1Simplificado con entrada periodica de sustato y oxígeno fijado a cierto nivel
asm1Simplificado_incSsCte_O2Periodico	Modelo de reactor asm1Simplificado con entrada periodica de sustato y oxígeno

	modificado periodicamente
--	---------------------------

[fangosactivos.validaciones.reactoresNoAislados.asm1Simplificado_incSsPerioico_O2cte](#)

Modelo de reactor asm1Simplificado con entrada periodica de sustato y oxígeno fijado a cierno nivel



Modelica definition

```
model asm1Simplificado_incSsPerioico_O2cte
  "Modelo de reactor asm1Simplificado con entrada periodica de sustato
  y oxígeno fijado a cierno nivel"
```

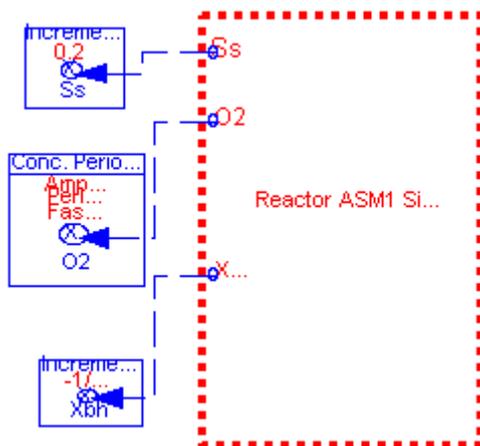
```

fangosactivos.procesosExternos.velocidadConPeriodica
Ss(amplitud=0.3, periodo
  =200);
fangosactivos.procesosExternos.concentracionConstante O2(k=0.07);
reactores.asm1Simplificado asm1Simplificado;
procesosExternos.velocidadConConstante Xbh(k=-1/144);
equation
connect(asm1Simplificado.elementoFuenteExternaSs, Ss.efe);
connect(asm1Simplificado.elementoFuenteExternaO2, O2.efe);
connect(asm1Simplificado.elementoFuenteExternaXbh, Xbh.efe);
end asm1Simplificado_incSsPerioico_O2cte;

```

fangosactivos.validaciones.reactoresNoAislados.asm1Simplificado_incSsCte_O2Periodico

Modelo de reactor asm1Simplificado con entrada periodica de sustato y oxígeno modificado periódicamente



Modelica definition

```

model asm1Simplificado_incSsCte_O2Periodico
  "Modelo de reactor asm1Simplificado con entrada periodica de sustato
  y oxígeno modificado periódicamente"

  reactores.asm1Simplificado asm1Simplificado;
  procesosExternos.velocidadConConstante Xbh(k=-1/144);
  procesosExternos.concentracionPeriodica O2(
    fase=0,
    periodo=200,
    amplitud=1);
  procesosExternos.velocidadConConstante Ss(k=0.2);
equation
connect(asm1Simplificado.elementoFuenteExternaXbh, Xbh.efe);
connect(asm1Simplificado.elementoFuenteExternaO2, O2.efe);
connect(asm1Simplificado.elementoFuenteExternaSs, Ss.efe);
end asm1Simplificado_incSsCte_O2Periodico;

```

fangosactivos.NetLogo

Paquete para realizar comparación con NetLogo

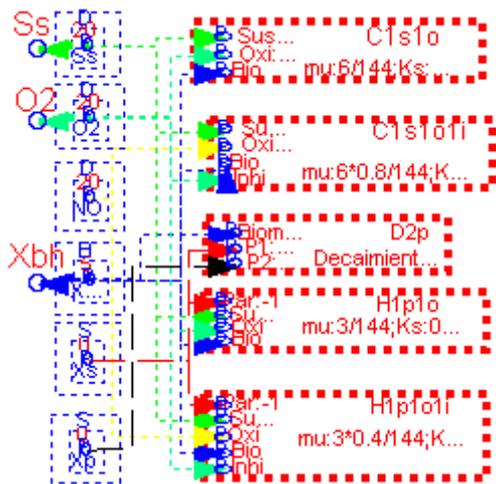
Package Content

Name	Description
 asm1Simplificado	Reactor con procesos de descritos en modelos ASM1 simplificado preparado para compraciones con programa homologo en NetLogo

fangosactivos.netlogo.asm1Simplificado

Reactor con procesos de descritos en modelos ASM1 simplificado
preparado para compraciones con programa homologo en NetLogo





Connectors

Type	Name	Description
reactorExterior	elementoFuenteExternaO2	
reactorExterior	elementoFuenteExternaSs	
reactorExterior	elementoFuenteExternaXbh	

Modelica definition

```

model asmlSimplificado
  "Reactor con procesos de descritos en modelos ASM1 simplificado
  preparado para compraciones con programa homologa en NetLogo"
  elementos.disuelto Ss "Sustrato rapidamente biodegradable";
  elementos.disuelto O2 "Oxígeno disuelto";
  elementos.biomasa Xbh(concentracionInicial=5) "Heterotrofos";
  fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimientolslo
  crecimientoolslo(
    mu=6/144);
  fangosactivos.procesos.crecimiento.monod.crecimientolslo1i
  crecimientoolslo1i(
    Ko=0.50,
    esteOxi=-0.172,
    mu=6*0.8/144);
  elementos.disuelto NO "Oxígeno disuelto";
  procesos.hidrolisis.monod.hidrolisis1plo1i hidrolisis1plo1i(
    Ko=0.50,
    Ki=0.20,
    mu=3*0.4/144);
  procesos.decaimiento.primerorden.decaimiento2p
  decaimiento2p(b=0.62/144);
  procesos.hidrolisis.monod.hidrolisis1plo hidrolisis1plo(mu=3/144);
  fangosactivos.conectores.reactorexterior elementoFuenteExternaO2;

```

Anexo A. Código Modelica

```
fangosactivos.conectores.reactorExterior elementoFuenteExternaSs;  
fangosactivos.conectores.reactorExterior elementoFuenteExternaXbh;  
elementos.suspension Xs (concentracionInicial=0);  
elementos.suspension Xp (concentracionInicial=0);  
  
Real rendimientoBiologico "Rendimiento Xbh";  
equation  
  
  // calculo rendimiento biológico Xbh  
  if Xbh.v > 0 and Ss.v < 0 then  
    rendimientoBiologico = - Xbh.v/Ss.v;  
  else  
    rendimientoBiologico = 0;  
  end if;  
  
  connect (Ss.ep, crecimiento1slo.elementoProcesoSus);  
  connect (Ss.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoSus);  
  connect (O2.ep, crecimiento1slo.elementoProcesoOxi);  
  connect (O2.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoInhi);  
  connect (NO.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoOxi);  
  connect (Xbh.ep, crecimiento1slo.elementoProcesoBio);  
  connect (Xbh.ep, crecimiento1sloli.elementoProcesoBio);  
  connect (Xbh.ep, decaimiento2p.elementoProcesoBio);  
  connect (Xbh.ep, hidrolisis1plo.elementoProcesoBio);  
  connect (Xbh.ep, hidrolisis1ploli.elementoProcesoBio);  
  connect (Ss.ep, hidrolisis1plo.elementoProcesoSus);  
  connect (Ss.ep, hidrolisis1ploli.elementoProcesoSus);  
  connect (O2.ep, hidrolisis1plo.elementoProcesoOxi);  
  connect (O2.ep, hidrolisis1ploli.elementoProcesoInhi);  
  connect (NO.ep, hidrolisis1ploli.elementoProcesoOxi);  
  connect (Ss.ep, elementoFuenteExternaSs);  
  connect (O2.ep, elementoFuenteExternaO2);  
  connect (Xbh.ep, elementoFuenteExternaXbh);  
  connect (Xs.ep, decaimiento2p.elementoResultante1);  
  connect (Xs.ep, hidrolisis1plo.elementoProcesoPar);  
  connect (Xs.ep, hidrolisis1ploli.elementoProcesoPar);  
  connect (Xp.ep, decaimiento2p.elementoResultante2);  
end asmlSimplificado;
```

[fangosactivos.pruebas](#)

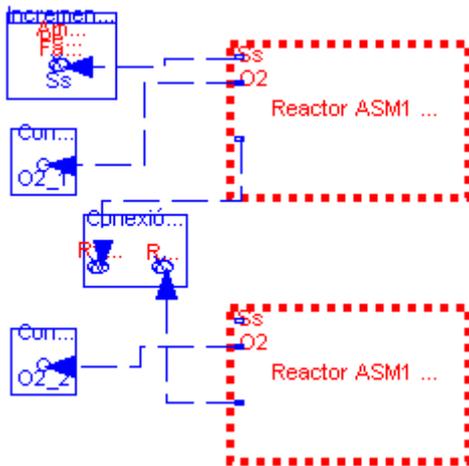
Paquete de pruebas

Package Content

Name	Description
conexionTanques	Prueba de conexión entre tanques

[fangosactivos.pruebas.conexionTanques](#)

Prueba de conexión entre tanques



Modelica definition

```

model conexionTanques "Prueba de conexión entre tanques"
  interconexionReactores.conexion2Reactores conexion2Reactores (r1=-
0.025, r2=
  0.025);
  procesosExternos.velocidadConPeriodica Ss (periodo=200,
amplitud=0.3);
  procesosExternos.concentracionConstante O2_1 (k=0.1);
  procesosExternos.concentracionConstante O2_2 (k=0.1);
  reactores.asmlSimplificado asmlSimplificado;
  reactores.asmlSimplificado asmlSimplificado1;
equation

```

Anexo A. Código Modelica

```
connect(asm1Simplificado.elementoFuenteExternaSs, Ss.efe);
connect(asm1Simplificado.elementoFuenteExternaO2, O2_1.efe);
connect(asm1Simplificado.elementoFuenteExternaXbh,
conexion2Reactores.efe1);
connect(asm1Simplificado1.elementoFuenteExternaO2, O2_2.efe);
connect(asm1Simplificado1.elementoFuenteExternaXbh,
conexion2Reactores.efe2);
end conexionTanques;
```

Anexo B. Código NetLogo

En este capítulo listamos el código fuente utilizado para programa NetLogo (fangosactivos.netlogo):

;; VARIABLES GLOBALES

```
globals [numero_parcelas Ss_total O2_total NO_total Biomasa_total cantidadVivaBac rendimiento_tick_bio
velocidad_tick_bio velocidadespe_tick_bio rendimiento_tick_c velocidad_tick_c velocidadespe_tick_c]

breed [bacterias bacteria]

bacterias-own [reservaSs reservaO2 reservaNO energiaBac energiaMinEstructura tiempoMuerte]

patches-own [Ss O2 NO]
```

;; FUNCION QUE INDICA SI BACTERIA ESTA MUERTA

```
to-report bacteriaMuerta [p_energia p_min_estructura p_nivel_mini_trans]

  report p_energia - p_min_estructura < p_nivel_mini_trans;

end
```

;; PROCEDIMIENTO USADO POR BACTERIAS PARA MOVERSE

```
to movimiento_bacteria

  rt random-float 360

  fd 1

end
```

;; PROCEDIMIENTO USADO POR BACTERIA PARA ALIMENTARSE Y CRECER

```
to alimentacion_bacteria [p_bacteria_Ss_O2_absorcion p_bacteria_O2_absorcion p_bacteria_Ss_NO_absorcion
p_bacteria_NO_absorcion p_transformacionO2 p_transformacionNO p_nivel_mini_trans]

  if not bacteriaMuerta energiaBac energiaMinEstructura p_nivel_mini_trans [

    ;; energia consumida en la absorcion

    set energiaBac energiaBac - p_nivel_mini_trans / 2

    ifelse O2 > 0 [

      ;; absorcion Ss-O2

      if reservaSs < p_bacteria_Ss_O2_absorcion [ ;; Obtengo Ss si me hace falta

        ifelse Ss >= p_bacteria_Ss_O2_absorcion [

          set reservaSs reservaSs + p_bacteria_Ss_O2_absorcion
```

Anexo B. Código NetLogo

```
    set Ss Ss - p_bacteria_Ss_O2_ absorcion
  ][
    set reservaSs reservaSs + Ss
    set Ss 0
  ]
]

;; absorcion O2
if reservaO2 < p_bacteria_O2_ absorcion [ ;; Obtengo O2 si me hace falta
  ifelse O2 >= p_bacteria_O2_ absorcion [
    set reservaO2 reservaO2 + p_bacteria_O2_ absorcion
    set O2 O2 - p_bacteria_O2_ absorcion
  ][
    set reservaO2 reservaO2 + O2
    set O2 0
  ]
]

;; Sintesis energiaDuplicacion con O2
if reservaSs >= p_bacteria_Ss_O2_ absorcion and reservaO2 >= p_bacteria_O2_ absorcion [
  set color red
  set energiaBac energiaBac + p_transformacionO2
  set reservaSs reservaSs - p_bacteria_Ss_O2_ absorcion
  set reservaO2 reservaO2 - p_bacteria_O2_ absorcion

  ;; energia consumida en la sistesis
  set energiaBac energiaBac - p_nivel_mini_trans / 2
]
]
```

```

] [

;; absorcion Ss-NO
if reservaSs < p_bacteria_Ss_NO_absorcion [ ;; Obtengo Ss si me hace falta
  ifelse Ss >= p_bacteria_Ss_NO_absorcion [
    set reservaSs reservaSs + p_bacteria_Ss_NO_absorcion
    set Ss Ss - p_bacteria_Ss_NO_absorcion
  ] [
    set reservaSs reservaSs + Ss
    set Ss 0
  ]
]

;; absorcion NO2
if reservaNO < p_bacteria_NO_absorcion [ ;; Obtengo NO si me hace falta
  ifelse NO >= p_bacteria_NO_absorcion [
    set reservaNO reservaNO + p_bacteria_NO_absorcion
    set NO NO - p_bacteria_NO_absorcion
  ] [
    set reservaNO reservaNO + NO
    set NO 0
  ]
]

;; Sintesis energiaDuplicacion con NO
if reservaSs >= p_bacteria_Ss_NO_absorcion and reservaNO >= p_bacteria_NO_absorcion [
  set color yellow
  set energiaBac energiaBac + p_transformacionNO
  set reservaSs reservaSs - p_bacteria_Ss_NO_absorcion
  set reservaNO reservaNO - p_bacteria_NO_absorcion

  ;; energia consumida en la sistesis
  set energiaBac energiaBac - p_nivel_mini_trans / 2
]

]

```

Anexo B. Código NetLogo

```
]

if bacteriaMuerta energiaBac energiaMinEstructura p_nivel_mini_trans [
  set color brown
]

end

;; PROCEDIMIENTO USADO POR BACTERIAS PARA REPRODUCIRSE
to reproduccion_bacteria [p_bacteria_energiaBacDuplicacion]

  if energiaBac > p_bacteria_energiaBacDuplicacion [
    set energiaBac round (energiaBac / 2)
    hatch 1 [ rt random-float 360 fd 1 ]
  ]

end

;; PROCEDIMIENTO USADO POR BACTERIA PRA HIDROLISIS-DESCOMPOSICION SI ESTA MUERTA
to hidrolisis_bacteria

  if tiempoMuerte = 0 [set tiempoMuerte ticks]
  if ticks - tiempoMuerte > ticks_hidrolisis [

    ;; Devuelvo a parcela los nutrientes mas el factor por la energia que le queda
    set Ss Ss + reservaSs + energiaBac * factor_hidrolisis
    set O2 O2 + reservaO2
```

```

    set NO NO + reservaNO

    die

]
end

;; PROCEDIMIENTO PARA RESETAR Y PONER PARAMETROS Y VALORES INICIALES
to setup
  clear-all

  set numero_parcelas count patches

  set Biomasa_total 0

  ask patches [
    set Ss Ss_concentracion
    set O2 O2_concentracion
    set NO NO_concentracion
  ]

  ;; Bacterias
  set-default-shape bacterias "circle"
  create-bacterias bacterias_concentracion * numero_parcelas ;; creo bacterias
  [
    set color red
    set size 0.5
    set energiaMinEstructura bacteria_nivel_duplicacion / 4
    set energiaBac energiaMinEstructura + (random-float 1) * (bacteria_nivel_duplicacion - energiaMinEstructura)
    setxy random-xcor random-ycor
    set Biomasa_total Biomasa_total + energiaBac
  ]

  ;; Obtengo totalizados
  set Ss_total 0

```

Anexo B. Código NetLogo

```
set O2_total 0
set NO_total 0
ask patches [
  set Ss_total Ss_total + Ss
  set O2_total O2_total + O2
  set NO_total NO_total + NO
]

;; Pongo a cero el tiempo
reset-ticks
end

;; PROCEDIMIENTO DE EJECUCION PERIODICA (CADA TICK)

to go
  ;; Declaracion variables auxiliares para estadísticas
  let cantidadVivaBacAnt count bacterias with [not bacteriaMuerta energiaBac energiaMinEstructura
(gasto_absorcion_sintesis * proporcion_absorcion_tick)]
  let Biomasa_totalAnt Biomasa_total
  let cantidadSsAnterior Ss_total

  set Biomasa_total 0

  ask bacterias [
    ;; Movimiento bacteria
    movimiento_bacteria

    ;; Alimentación bacteria
    alimentacion_bacteria bacteria_Ss_O2_estequio * proporcion_absorcion_tick
```

```

    bacteria_O2_estequio * proporcion_aborcion_tick
    bacteria_Ss_NO_estequio * proporcion_aborcion_tick
    bacteria_NO_estequio * proporcion_aborcion_tick
    1 * proporcion_aborcion_tick
    1 * proporcion_aborcion_tick
    gasto_aborcion_sintesis * proporcion_aborcion_tick

;; Calculo variables de observacion
set Biomasa_total Biomasa_total + energiaBac

;; Reproducción bacteria
reproduccion_bacteria bacteria_nivel_duplicacion

;; Hidrolisis bacterias
    if bacteriaMuerta energiaBac energiaMinEstructura (gasto_aborcion_sintesis * proporcion_aborcion_tick)
[hidrolisis_bacteria]
]

;; Calculo de variables de observacion
set Ss_total 0
set O2_total 0
set NO_total 0
ask patches [
    set Ss_total Ss_total + Ss
    set O2_total O2_total + O2
    set NO_total NO_total + NO
]
set cantidadVivaBac count bacterias with [not bacteriaMuerta energiaBac energiaMinEstructura
(gasto_aborcion_sintesis * proporcion_aborcion_tick)]

;; Datos graficas
ifelse cantidadSsAnterior - Ss_total > 0
[ set rendimiento_tick_c (cantidadVivaBac - cantidadVivaBacAnt) / (cantidadSsAnterior - Ss_total)
  set rendimiento_tick_bio (Biomasa_total - Biomasa_totalAnt) / (cantidadSsAnterior - Ss_total)]
[set rendimiento_tick_c 0
  set rendimiento_tick_bio 0]

set velocidad_tick_c (cantidadVivaBac - cantidadVivaBacAnt) / numero_parcelas
set velocidad_tick_bio (Biomasa_total - Biomasa_totalAnt) / numero_parcelas

```

Anexo B. Código NetLogo

```
ifelse cantidadVivaBac > 0
[set velocidadespe_tick_c 1 - cantidadVivaBacAnt / cantidadVivaBac]
[set velocidadespe_tick_c 0]
ifelse Biomasa_total > 0
[set velocidadespe_tick_bio 1 - Biomasa_totalAnt / Biomasa_total]
[set velocidadespe_tick_bio 0]
if cantidadVivaBac < cantidadVivaBacAnt [
  set rendimiento_tick_c 0
  set velocidadespe_tick_c 0
]
if Biomasa_total < Biomasa_totalAnt [
  set rendimiento_tick_bio 0
  set velocidadespe_tick_bio 0
]

;; Guardo valores de referencia anteriores
set cantidadVivaBacAnt cantidadVivaBac
set cantidadSsAnterior Ss_total
set Biomasa_totalAnt Biomasa_total

;; Condiciones de parada
if cantidadVivaBac = 0 or
  (gasto_aborcion_sintesis = 0 and
    (Ss_total = 0 or (O2_total = 0 and NO_total = 0))
  ) [stop]
```

Anexo B. Código NetLogo

```
;;if ticks = 500 [stop] ;; parada de seguridad

;; Nuevo ciclo de tiempo
tick

end
```