

Caso de cliente

Como unos modelos inteligentes ayudaron a optimizar el tratamiento de aguas residuales industriales



v1 2025CC003

Puntos clave del caso:

- Bayer quería reducir la dosificación de productos químicos y la eliminación de lodos modificando su proceso de tratamiento de aguas residuales en Amberes
- Para la evaluación virtual de la tecnología se utilizó una combinación inteligente de los modelos dinámicos y de CFD de AM-Team
- Se utilizaron modelos calibrados con datos de laboratorio para predecir el rendimiento a escala real
- El virtual piloting sustituyó las costosas pruebas piloto in situ, con una fracción del tiempo y del coste
- Los cambios de proceso se implementaron con éxito a escala real
- Se obtuvieron beneficios significativos en costes y en sostenibilidad:
 - -40 % de dosificación de NaOH
 - -35 % de producción de lodos (con un ahorro de varios cientos de toneladas de productos químicos al año)

Autores:



Roberta Muoio, ir.,
Senior Simulation Engineer,
AM-Team



Bart Peeters, Dr. ir.,
Sr Expert Wastewater Treatment,
Bayer



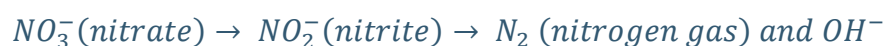
Wim Audenaert, Dr. ir.,
CEO & Co-founder,
AM-Team

Introducción y planteamiento del problema

La empresa de ciencias de la vida Bayer ofrece productos y servicios en los ámbitos de la salud y la agricultura. A 31 de diciembre de 2024, el Grupo Bayer estaba formado por 291 sociedades consolidadas en 80 países.

En su planta de Amberes (Bélgica), Bayer trata cada año 2 millones de m³ de aguas residuales. La planta de tratamiento (figura 1) consta principalmente de una balsa de biodegradación con 3 compartimentos consecutivos (con condiciones anóxicas/aerobias/aerobias), decantadores y una unidad de flotación por aire disuelto. Bayer estaba evaluando una modificación del proceso con potencial para reducir de forma significativa las necesidades de dosificación de productos químicos y la eliminación de lodos del proceso de tratamiento. De tener éxito, daría lugar a un importante ahorro en costes operativos y a mejoras en sostenibilidad.

El tratamiento de aguas residuales industriales se caracteriza normalmente por una mezcla compleja de corrientes de entrada que deben tratarse. Una de esas corrientes en la planta de Amberes es muy ácida y siempre se había neutralizado por completo mediante la dosificación de hidróxido de sodio (sosa cáustica) antes de entrar en el proceso biológico. Bayer estaba investigando si esta corrección del pH era imprescindible, ya que el proceso de tratamiento biológico podría encargarse por sí mismo de la neutralización. Como muestra la ecuación 1, el proceso de eliminación biológica de nitrógeno produce de forma inherente hidróxido (OH⁻), lo que eleva automáticamente el pH.



Ecuación 1: La eliminación biológica de nitrógeno se basa en la desnitrificación, en la que las bacterias convierten el nitrato del agua residual (NO_3^-) en nitrógeno gas inocuo (N_2) que se libera al aire. El hidróxido producido en ese proceso eleva automáticamente el pH.

Además, recurrir a la autoneutralización reduciría el pH global de todo el tratamiento biológico, evitando así una formación considerable de lodos y los costes de eliminación asociados derivados de la precipitación de carbonato de calcio (CaCO_3). Esto se debe a que, a un pH más bajo ($<7,4$), el equilibrio entre $\text{CO}_2 \leftrightarrow \text{HCO}_3^- \leftrightarrow \text{CO}_3^{2-}$ se desplaza hacia HCO_3^- , evitando la precipitación de Ca^{2+} con CO_3^{2-} .

Los ensayos a escala de laboratorio realizados en el laboratorio de Bayer ya en 2022 demostraron esta capacidad de autoneutralización, pero aún quedaba pendiente su traslado a condiciones dinámicas a escala real (es decir, el paso de un tratamiento discontinuo a uno continuo). AM-Team ayudó a Bayer a trasladar los conocimientos obtenidos a escala de laboratorio a la operación a escala real mediante pruebas virtuales de viabilidad a escala real y el diseño basado en modelos de la propia modificación del proceso.

Características principales del sistema

- Planta de tratamiento de aguas residuales industriales (fangos activos convencionales)
- Líneas de tratamiento con compartimentos anóxicos y aerobios, seguidas de decantadores secundarios
- Aireación con oxígeno puro
- Tratamiento de una corriente ácida rica en nitratos (pH 2,0) y de 7 otras corrientes de aguas residuales industriales

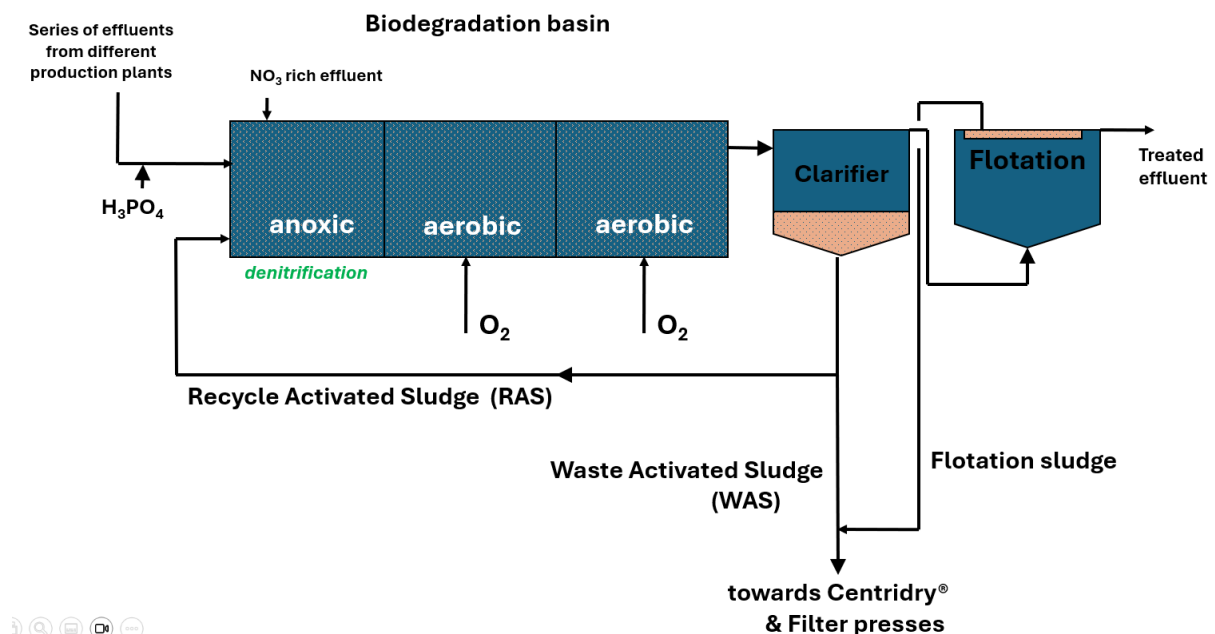


Figura 1: La planta de tratamiento de aguas residuales de Bayer en Amberes (Bélgica)

Solución y objetivos

Bayer recurrió a la cartera específica de modelos de plantas de tratamiento de AM-Team para apoyar las fases de planificación y de diseño:

- En la fase de planificación, centrada en la evaluación y selección de conceptos de proceso, el virtual piloting ofrece una libertad de ensayo prácticamente sin precedentes y un ahorro considerable de costes y de tiempo frente a las pruebas piloto in situ convencionales.

- En la fase de diseño, centrada en la implementación del concepto de proceso, el diseño basado en modelos garantiza el máximo rendimiento y eficiencia del proceso antes de la construcción.

Los objetivos de este proyecto eran:

1. evaluar la viabilidad de la modificación del proceso a escala real: trasladar los ensayos de Bayer a escala de laboratorio a condiciones de escala real utilizando un modelo dinámico de la planta a escala real. Las preguntas clave eran:
 1. ¿Puede evitarse o minimizarse la neutralización de la corriente ácida y seguirían el pH de equilibrio y la alcalinidad resultantes creando condiciones viables para el proceso de tratamiento biológico?
 2. ¿Puede evitarse la precipitación de CaCO_3 y reducir así los costes de eliminación de lodos?
2. determinar el diseño óptimo del proceso: asegurar que la mejora pueda implementarse con éxito utilizando un modelo detallado de simulación 3D que tenga en cuenta los factores críticos del proceso. Las preguntas clave eran:

¿Cómo diseñar el sistema de mezcla para minimizar la toxicidad local en el proceso biológico debida al bajo pH de la corriente no neutralizada? (los intensos ensayos de Bayer a escala de laboratorio habían revelado el impacto negativo de una mezcla no óptima de la corriente ácida en la balsa de biodegradación sobre las fracciones de microorganismos vivos y muertos)

“Knowing which model to apply when is what we like to call a ‘model-fit-for-purpose’ approach. A smart combination of models can dramatically increase the impact and business case of modelling. In this case, a combination of dynamic modelling with CFD proved to be highly effective.”

«Saber qué modelo aplicar en cada momento es lo que nos gusta llamar un enfoque ‘model-fit-for-purpose’. Una combinación inteligente de modelos puede aumentar enormemente el impacto y el business case de la modelización. En este caso, una combinación de modelización dinámica con CFD resultó muy eficaz.»

- Roberta Muoio, ir., Senior Simulation Engineer,
AM-Team



Enfoque

AM-Team recurrió a su caja de herramientas de modelos adaptados a los procesos de tratamiento. En este caso se utilizaron un modelo dinámico de planta y un modelo CFD 3D del proceso de tratamiento:

- El modelo dinámico de planta incluía cinéticas químicas y biológicas y, por tanto, podía predecir la conversión biológica, el equilibrio del pH y la precipitación de CaCO_3 en las condiciones dinámicas de la planta a escala real. Este modelo se utilizó para el virtual piloting y las pruebas de viabilidad.
- El modelo CFD del biorreactor simuló el sistema íntegramente en 3D y tuvo en cuenta los elementos críticos de diseño y la mezcla de las distintas corrientes. La geometría real del sistema e incluso la rotación de los agitadores pudieron incorporarse con facilidad. Este modelo se utilizó para el diseño de detalle.

Ambos modelos se emplearon, por tanto, para responder a preguntas distintas relacionadas con la planificación y el diseño. Con ambos modelos se ensayaron y compararon multitud de escenarios 'what-if'.

“The virtual scale-up of our batch results from the lab to our continuously-operated wastewater treatment plant was extremely important for our project. Once the models exist you have all flexibility to gain new insights. It is fascinating to see how your plant will operate at new conditions before these new conditions are actually in place! Compared to old-school ‘real-live piloting’ you can test much more with the ‘virtual piloting’ - and in a much more convenient way - which makes it an amazing optimization tool!”

«El escalado virtual de nuestros resultados discontinuos de laboratorio a nuestra planta de tratamiento de aguas residuales de operación continua fue enormemente importante para nuestro proyecto. Una vez que los modelos existen, se tiene toda la flexibilidad para obtener nuevos conocimientos. ¡Es fascinante ver cómo va a funcionar tu planta en condiciones nuevas antes de que esas condiciones existan realmente! Comparado con el 'real-live piloting' de siempre, con el 'virtual piloting' se puede ensayar mucho más —y de una forma mucho más cómoda—, lo que lo convierte en una herramienta de optimización extraordinaria.»

- Bart Peeters, Dr. ir., Senior Expert Wastewater Treatment, Bayer



Resultados y conclusiones

Modelo a escala de laboratorio: calibración a partir de los datos de ensayo disponibles

Bayer ya había realizado ensayos de desnitrificación a escala de laboratorio de la modificación del proceso (figura 2a), dosificando ácido clorhídrico para compensar el aumento del pH durante la desnitrificación y mantener así el pH neutro en el biorreactor. El rendimiento de la desnitrificación biológica, el pH y la precipitación de CaCO_3 se monitorizaron a lo largo de los distintos ensayos. Para calibrar el modelo dinámico, los ensayos a escala de laboratorio se reprodujeron con el modelo (figura 2b). De este modo, el modelo pudo calibrarse para el lodo biológico específico de la planta de tratamiento de aguas residuales de Bayer utilizando los datos ya disponibles (figura 2c). En el modelo se incluyeron las cinéticas biológicas, la aireación, las distintas fracciones de carbono, la capacidad tampón y las reacciones de precipitación.

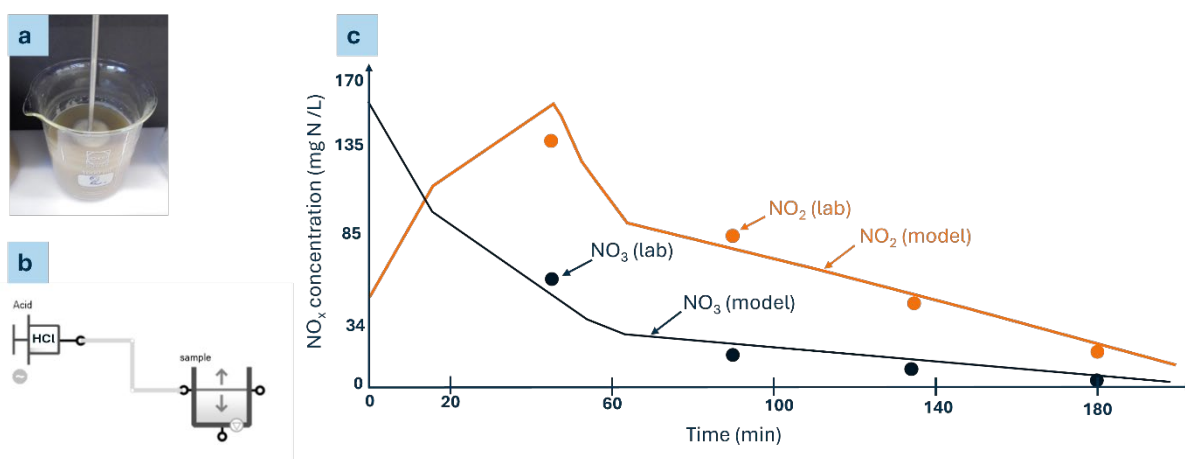


Figura 2: Los ensayos reales de desnitrificación a escala de laboratorio realizados por Bayer (a) se reprodujeron con un modelo virtual a escala de laboratorio (b) para preparar el modelo para la evaluación virtual a escala real; se compararon los perfiles dinámicos de las especies de nitrógeno (c) y del pH

Construcción y validación del modelo a escala real

Tras la calibración satisfactoria a escala de laboratorio, se configuró el modelo de la planta de tratamiento de aguas residuales a escala real (figura 3a). Se utilizaron los parámetros biológicos calibrados obtenidos en la modelización a escala de laboratorio, mientras que se aplicaron la disposición de la planta, los volúmenes, los caudales y la dinámica del influente reales de la escala real. Así, a partir de los datos a escala de laboratorio, se obtuvo un modelo calibrado de la planta a escala real. Como muestra la figura 3a (derecha), también se tuvo en cuenta el decantador secundario, lo que permitió una predicción realista de la dinámica de los fangos activos de la planta a escala real.

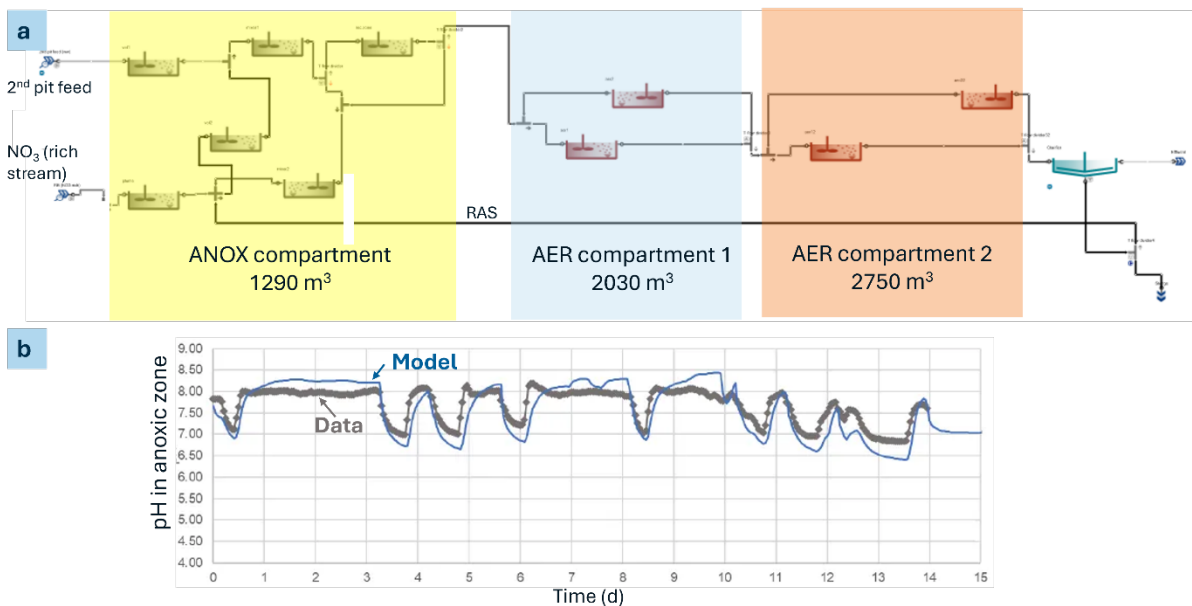


Figura 3: El modelo de la planta a escala real de Bayer (a) incluía las corrientes de influente reales, los ajustes operativos, los volúmenes de los reactores y el decantador. La validación del modelo con datos a escala real mostró una predicción satisfactoria de la dinámica del pH.

Para validar el modelo a escala real, primero se reprodujo con el modelo la operación normal (con la preneutralización habitual de la corriente ácida desde pH 1,6 hasta 6,2). La figura 3b muestra la dinámica del pH en el compartimento anóxico durante un periodo de 15 días. Durante la operación normal, el pH solía fluctuar en torno a 7,5. El modelo predecía adecuadamente la dinámica del pH tanto en la zona anóxica como en el efluente final (los resultados de este último no se muestran).

Pruebas virtuales 'what-if' a escala real

El modelo podía utilizarse ahora para realizar ensayos de escenarios 'what-if' imposibles de llevar a cabo en la planta real a escala real. Estos escenarios revelarían la viabilidad del cambio de proceso a escala real. Se ejecutaron tres escenarios distintos en los que la corriente ácida se introducía directamente en la zona anóxica neutralizada solo parcialmente hasta pH 2 y pH 1,85, frente a la operación normal (es decir, neutralización completa hasta pH 6,2). Uno de los escenarios incluía además un sistema de aireación alternativo, con aireación convencional junto a la inyección de oxígeno puro existente, y su impacto resultante en el pH de operación.

La figura 4 muestra el resumen y la comparación de todos los escenarios en cuanto al pH y la alcalinidad resultantes en el interior del biorreactor. Incluso con un agua residual parcialmente neutralizada a pH 1,85 (escenario 3), se esperaba que el pH resultante tanto de la zona anóxica como del efluente se mantuviera muy por encima de 6,5, valor considerado aceptable para la biología. Además, la alcalinidad se mantuvo por encima de niveles razonables, de modo que seguían dándose condiciones favorables.

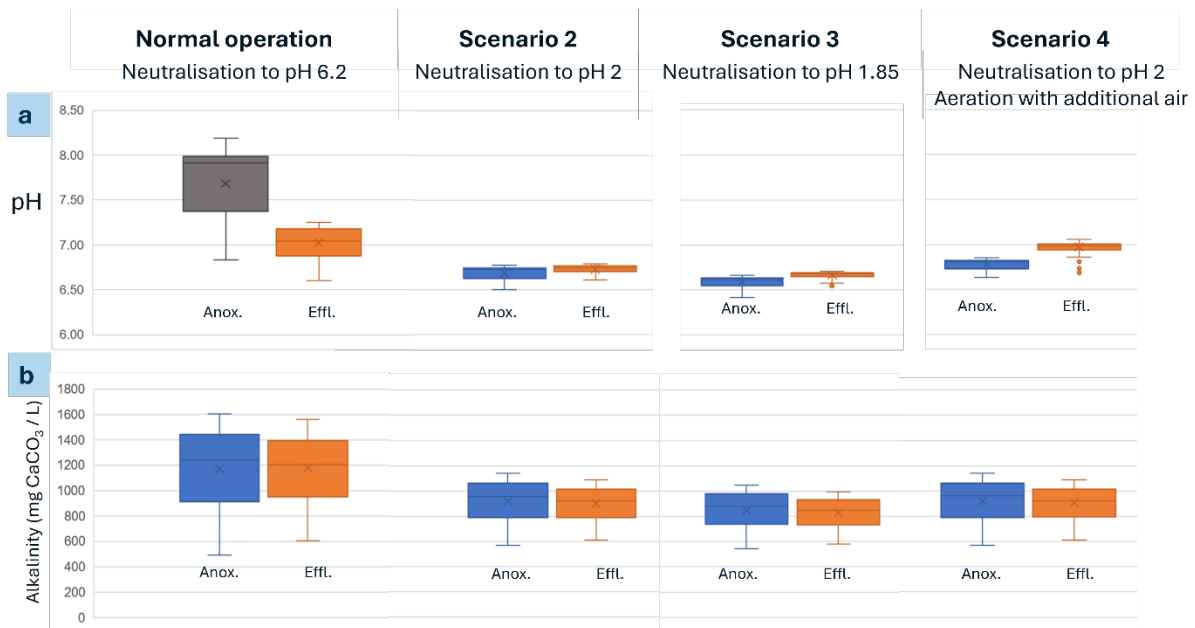


Figura 4: Frente a la operación normal, la introducción directa de la corriente ácida con un grado de neutralización notablemente reducido hace bajar el pH en el biorreactor, especialmente en la zona anóxica (a); no obstante, el pH se estabiliza en niveles aceptables (>6,5) en todos los escenarios gracias a la capacidad de autoneutralización de la zona anóxica. La alcalinidad también disminuye, pero se mantiene en niveles aceptables.

Las simulaciones del modelo revelaron un impacto significativo en los costes de eliminación de lodos: debido a la operación a un pH más bajo y a la consiguiente mayor solubilidad del CaCO₃, se esperaba que la masa de CaCO₃ en el lodo purgado descendiera de 3 kg/m³ de lodo a niveles despreciables.

Como resultado de las pruebas de viabilidad a escala real, Bayer decidió abordar de inmediato la implementación a escala real.

“The use of models to reduce or replace onsite piloting is what we refer to as ‘virtual piloting’. It leads to significant cost and time savings, while virtual testing freedom is nearly unlimited. Virtual piloting is possible as we combine years of modelling experience with high-quality models.”

«El uso de modelos para reducir o sustituir las pruebas piloto in situ es lo que denominamos ‘virtual piloting’. Conlleva un ahorro significativo de costes y de tiempo, mientras que la libertad de ensayo virtual es prácticamente ilimitada. El virtual piloting es posible porque combinamos años de experiencia en modelización con modelos de alta calidad.»

- Roberta Muoio, ir., Senior Simulation Engineer, AM-Team



Implementación y operación a escala real

Aunque las pruebas virtuales de viabilidad fueron positivas desde el punto de vista del proceso, todavía era necesario diseñar el sistema de mezcla real a escala real. En esta fase de diseño, AM-Team aplicó un modelo CFD 3D que permitió evaluar en detalle la ubicación de los dispositivos de mezcla.

La clave del éxito de la implementación estaba en mezclar rápidamente la corriente ácida (premezclada con otra agua residual neutra hasta un pH de aproximadamente 4,5) con el volumen principal del tanque anóxico, con el fin de minimizar la 'toxicidad local por pH bajo' (minimizar el tiempo de contacto de los microorganismos con un pH tóxico). Los ensayos discontinuos de Bayer ya habían revelado una posible toxicidad en condiciones de mezcla no óptimas. Dada su experiencia con las unidades Ventoxal (Air Liquide), Bayer consideró estos dispositivos una forma innovadora de introducir el agua residual ácida en el compartimento biológico y, por ello, las unidades Ventoxal se incluyeron en los cálculos de CFD.

Se simularon y compararon 5 escenarios con distintas ubicaciones de las unidades Ventoxal en función del volumen previsto del 'penacho de pH bajo' causado por la introducción de la corriente ácida (figura 5a). El objetivo era minimizar ese volumen.

Aunque quedó claro que el dispositivo de mezcla Ventoxal podía acelerar notablemente la mezcla frente al diseño inicial con entrada por tubería ('current design'), era posible una optimización adicional montando la unidad verticalmente en una de las paredes del reactor, inyectando así con un cierto ángulo en dirección opuesta a la salida (figura 5b). Este diseño, denominado en adelante 'design 5', dio lugar a un riesgo de toxicidad mínimo y a una mezcla superior (figura 5c).

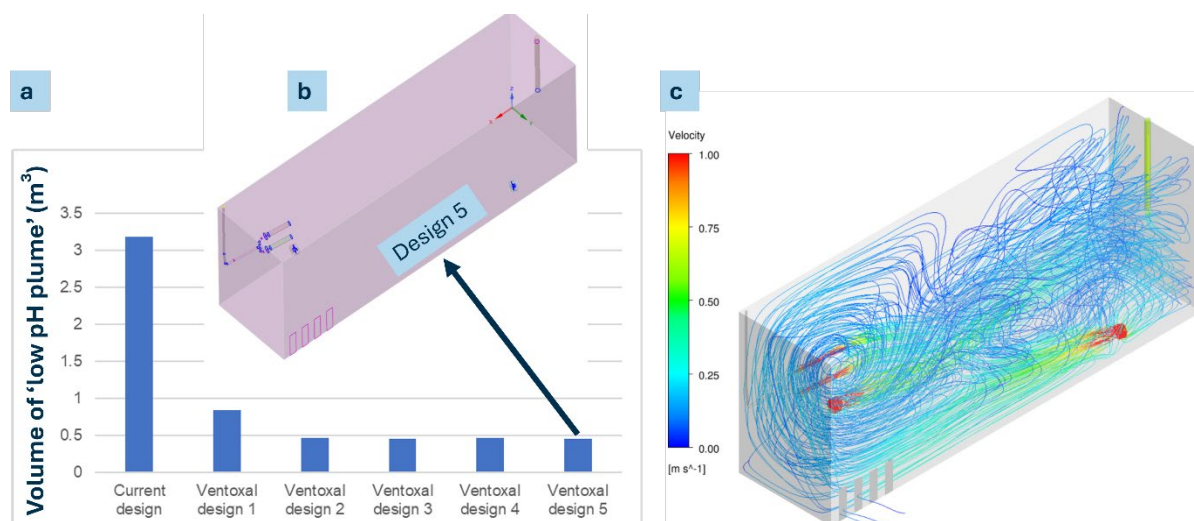


Figura 5: Introducir la corriente ácida en el tanque anóxico mediante una unidad de mezcla rápida (Ventoxal) resultó crítico (a). Frente a la introducción convencional por tubería ('current design'), la mezcla rápida redujo drásticamente el volumen del 'penacho de pH bajo'. Montar la unidad de mezcla verticalmente en la pared lateral, con una ligera inclinación (design 5; b), dio lugar a la mezcla más rápida (c).

Como resultado, Bayer llevó a cabo la implementación in situ del 'design 5' (figura 6) en el compartimento anóxico de su balsa de biodegradación.



Figura 6: Las unidades de mezcla Ventoxal se colocaron conforme al escenario CFD más favorable. Se esperaba que este diseño, con una disposición vertical específica de las unidades de mezcla, generase una toxicidad por pH bajo mínima.

"Let's be honest, to finally take the plunge to implement the idea of self-neutralizing nitric acid wastewater was not straightforward at all. It was a bit 'tricky' as we say, since dealing with living organisms at risk for the lower pH conditions. Partly thanks to the low-pH plume modelling of AM-Team we were confident that the real-live implementation would be a success"

«Seamos sinceros: dar por fin el paso de implementar la idea de un agua residual con ácido nítrico autoneutralizante no fue en absoluto sencillo. Fue algo 'tricky', como decimos nosotros, porque se trabaja con organismos vivos expuestos al riesgo de unas condiciones de pH más bajas. En parte gracias a la modelización del penacho de pH bajo de AM-Team, teníamos la confianza de que la implementación real sería un éxito.»



Bayer comenzó a operar el sistema reconfigurado en octubre de 2024, reduciendo de forma gradual la neutralización de la corriente ácida. En abril de 2025, el pH de entrada había descendido ya a 2,2, lo que dio lugar a un pH en la zona anóxica (figura 7a) de alrededor de 6,9. Esto coincidía perfectamente con las predicciones de la evaluación virtual de viabilidad (véase más arriba).

También se hizo visible el descenso significativo de la fracción inorgánica del lodo (causada por la precipitación de CaCO_3) (figura 7b), con una caída del 45 % al 12 %. Al evitarse la precipitación de CaCO_3 , de mayor densidad, la sedimentabilidad del lodo empeoró, aunque se mantuvo dentro de niveles aceptables.

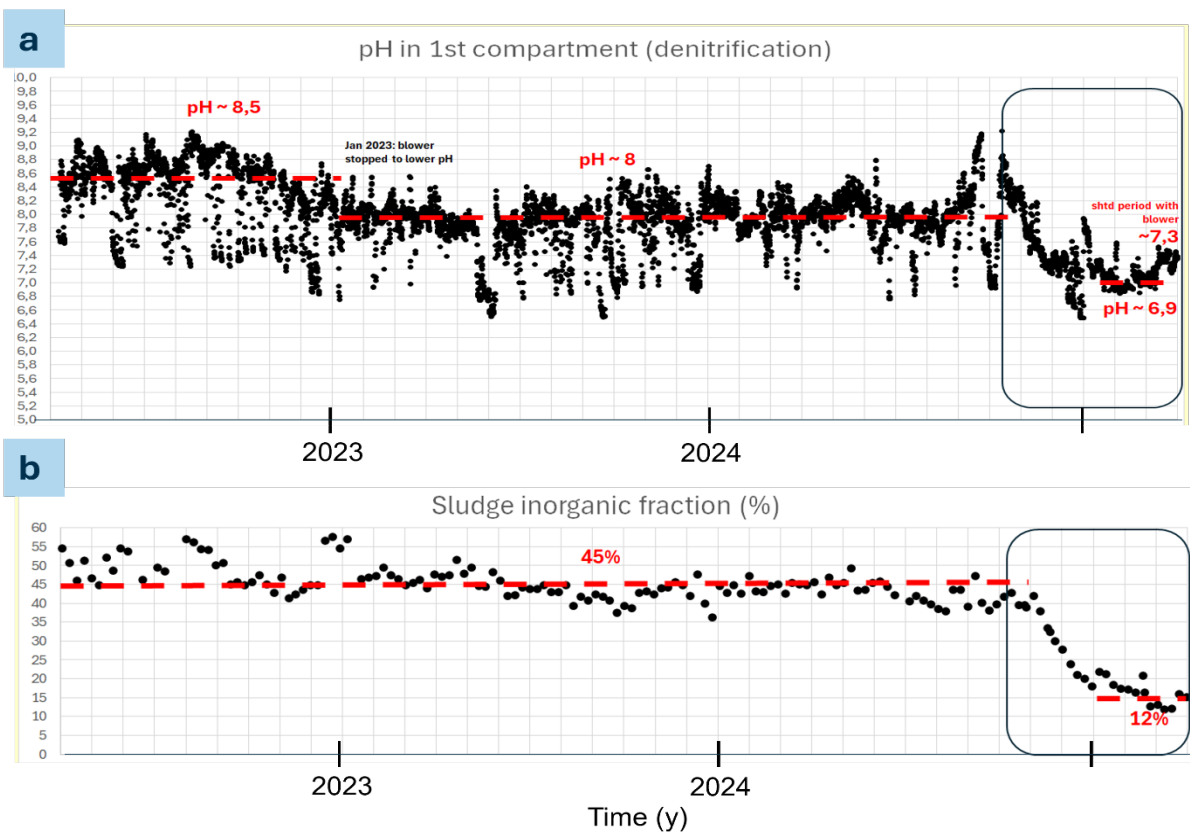


Figura 7: El proceso actualizado está en operación desde octubre de 2024, con una reducción gradual de la neutralización de la corriente ácida de alimentación. El cambio está siendo muy satisfactorio: el pH de operación se sitúa en los niveles predichos por el modelo, los costes de eliminación de lodos descenden notablemente y se ahorra una cantidad significativa de sosa cáustica externa.

Conclusión e impacto

Bayer pudo acelerar drásticamente en Amberes la evaluación y la implementación de un proceso a escala real mediante una combinación inteligente de modelos:

- Virtual piloting en lugar de pruebas piloto físicas in situ
 - Calibrado con datos reales a escala de laboratorio, un modelo dinámico de la planta a escala real pudo sustituir por completo unas pruebas piloto in situ costosas y extensas. Además del ahorro de costes y de tiempo asociado, pudo evaluarse multitud de escenarios, lo que ofrece una libertad de ensayo prácticamente ilimitada frente a las pruebas piloto físicas. Esto último aportó una confianza adicional considerable.
- Diseño de proceso basado en modelos
 - Se utilizó un modelo CFD detallado para diseñar de forma óptima el sistema de mezcla, esencial para la modificación del proceso. El posible impacto negativo de la toxicidad local por pH bajo sobre el tratamiento biológico pudo reducirse al mínimo absoluto. El mejor escenario de diseño se implementó meticulosamente en la práctica.

La experiencia de proceso y el conocimiento experto de Bayer, combinados con las capacidades de modelización de AM-Team, dieron lugar a una actualización de proceso innovadora y satisfactoria, con beneficios significativos en costes y sostenibilidad asociados a la eliminación de lodos y al uso de productos químicos: (i) la corriente de agua residual ácida solo se neutraliza parcialmente ahora, lo que reduce las necesidades de NaOH para la neutralización en un 40 %, y (ii) la generación de lodos en el tratamiento de aguas residuales se redujo un 35 %, con un enorme efecto en los costes de gestión de lodos (incluida una reducción de los aditivos de deshidratación de varios cientos de toneladas de productos químicos al año).

Agradecimientos

Waterleau contribuyó a la investigación a escala de laboratorio de Bayer y Air Liquide aportó orientación experta sobre la tecnología Ventoxal. Bayer y AM-Team desean agradecer a ambas partes su contribución al proyecto en su conjunto.

Publicado por:

AM-Team BV

Sint-Pietersnieuwstraat 11

9000 Gante (BE)

+32 480 64 70 76

info@am-team.com

www.am-team.com

Número de documento: 2025CC003

Versión: 1

Acerca de AM-Team:

AM-Team ofrece servicios de modelización y datos y soluciones de gemelo digital únicos en el mundo para diseñar, optimizar y digitalizar de forma inteligente plantas municipales e industriales de tratamiento de agua y aguas residuales. La empresa ha trabajado en más de 150 emplazamientos de 4 continentes. AM-Team trabaja directamente con operadores de agua y colabora además con ingenierías, empresas de software y proveedores de tecnología.

Soporte: dirija cualquier pregunta relacionada con este documento a info@am-team.com o a su persona de contacto en AM-Team.

Salvo cambios y errores. La información contenida en este documento puede modificarse en el transcurso del desarrollo posterior de los productos/servicios.

© AM-Team 2025 Todos los derechos reservados