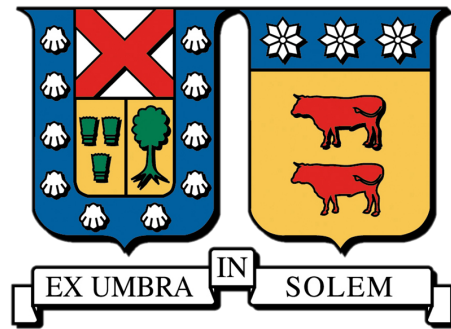


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AMBIENTAL



EVALUACIÓN DE LA SENSIBILIDAD CRUZADA EN
SENSORES NDIR DE CONCENTRACIÓN DE GASES DE
EFECTO INVERNADERO EMITIDOS EN UNA
PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES

JOAQUÍN FRANCISCO GALLARDO AVENDAÑO

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL QUÍMICO

Guía: Dr. Luis Bergh
Co-referentes: Dr. Santiago García
MSc. Fernanda Jahn

NOVIEMBRE-2025



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): Memoria o trabajo de título Tesis de Postgrado

Título del trabajo: Evaluación de la sensibilidad cruzada en sensores NDIR de concentración de gases de efecto invernadero emitidos en una planta de tratamiento de aguas residuales.

Nombre del candidato(a): Joaquín Francisco Gallardo Avendaño

Carrera / Grado: Ingeniería civil química

Campus: Casa Central

Departamento: Ingeniería Química y Ambiental

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Luis Bergh Olivares en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente

DEJO CONSTANCIA que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (**embargo**) por (**marcar una opción**):

6 meses 12 meses 2 años 3 años 5 años 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: _28-11-25 **Firma:**

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 28/11/25 **Firma:**

Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.

Resumen

El presente trabajo evalúa la sensibilidad cruzada en sensores NDIR de gases de efecto invernadero (CO_2 y CH_4), un fenómeno que distorsiona las mediciones de concentración en mezclas de gases emitidos por plantas de tratamiento de aguas residuales. El objetivo general fue evaluar el comportamiento de estos sensores y proponer un modelo de corrección lineal para mejorar la precisión de los datos recopilados. Se implementó un sistema de medición con una unidad de control Arduino, sensores de gas comerciales y una cámara sellada para la medición de concentración de gases. Se logró determinar un factor de corrección para la medición de CH_4 en presencia de CO_2 , obteniendo un valor de

$$-0,0701 \pm 0,0015$$

El factor de corrección resultó ser estadísticamente significativo y demostró no tener falta de ajuste según un análisis ANOVA. Por otro lado se concluyó que con un sensor de alta calidad como lo es el Senseair K33, no es necesario realizar una corrección posterior a las mediciones, ya que el propio sensor incluye filtros los cuales son muy eficientes para evitar este fenómeno. Con ambos sensores y el factor obtenido es posible corregir las mediciones del sensor de baja calidad de manera que las mediciones se vuelven muy precisas, arreglando así la interferencia existente entre los dos gases. Por otro lado, se concluyó que es necesario la instalación de sensores de alta calidad si es que se quiere realizar una campaña de monitoreo de emisiones de gases de efecto invernadero en una PTAR, ya que de esa manera se aseguran mediciones correctas sin la posibilidad de desviaciones importantes debido a interferencia.

Tabla de Contenidos

1	Introducción	1
1.1	Contexto general	1
1.1.1	¿Qué es una planta de tratamiento de aguas residuales?	1
1.1.2	Contaminantes principales en aguas residuales	1
1.1.3	Las PTAR como foco de emisiones de GEI	3
1.2	Proceso de tratamiento de aguas residuales	4
1.2.1	Línea de agua	4
1.2.2	Línea de Lodos	8
1.3	Métodos de cuantificación de GEI	10
1.3.1	Método de Factores de Emisión (IPCC)	10
1.3.2	Método de Modelación (MCM y ML)	10
1.3.3	Método de Monitoreo Directo (<i>Field Monitoring</i>)	11
1.4	Motivación	11
1.5	Contexto global: Emisiones de GEI en PTAR	12
1.6	Desafíos en la Cuantificación de Emisiones	12
1.7	Problema específico	13
2	Objetivos y Alcances	14
2.1	Objetivo General	14
2.2	Objetivos Específicos	14
3	Marco Teórico	15
3.1	Tratamiento de aguas residuales	15
3.2	Procesos Generadores de GEI en PTAR	16
3.3	Principio de Funcionamiento de Sensores NDIR	17
3.4	Sensibilidad cruzada	18
3.5	Corrección de la Sensibilidad Cruzada	18
3.6	Corrección en este trabajo	19

3.7	Alternativas para corregir	20
4	Materiales y Métodos	22
4.1	Recolección de datos	22
4.2	Conexión de los sensores	23
4.3	Diseño de experimentos	24
5	Resultados	26
5.1	Datos obtenidos	26
5.2	Análisis de datos	27
5.3	Discusión	28
6	Conclusiones y Recomendaciones	31
	Referencias	33

Lista de Tablas

4.1	Sensores de gas a utilizar y sus especificaciones	23
5.1	Resultados de la medición de sensores de gases.	26
5.2	Corrección utilizando factor calculado	28

Lista de Figuras

1.1	Procesos generales del nitrógeno en una PTAR (Metcalf & Eddy Inc. et al., 2014)	3
1.2	Ejemplo de configuración A2O (Song et al., 2020)	6
1.3	Ejemplo de configuración SBR (Metcalf & Eddy Inc. et al., 2014)	7
1.4	Procesamiento de lodos en PTAR (Metcalf & Eddy Inc. et al., 2014)	8
3.1	Diagrama sensor NDIR	18
4.1	Instalación para medición de concentraciones	23
5.1	Residuos modelo corrección CH ₄	27
5.2	Gabinete de captación de gases	30

Capítulo 1

Introducción

1.1 Contexto general

1.1.1 ¿Qué es una planta de tratamiento de aguas residuales?

Las aguas residuales se definen como la combinación de los desechos líquidos o aguas portadoras de residuos, provenientes de residencias, establecimientos comerciales, instituciones e instalaciones industriales, a las que se pueden sumar, eventualmente, aguas subterráneas, aguas superficiales o aguas lluvias. La recolección y tratamiento de estas aguas es uno de los pilares fundamentales de la salud pública y la protección ambiental.

El propósito principal de una Planta de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) es acelerar los procesos naturales de purificación del agua en un entorno controlado y contenido. Si se descargaran sin tratar, los contaminantes presentes en ellas agotarían el oxígeno disuelto de los cuerpos de agua receptores (ríos, lagos, océanos), provocando la muerte de la vida acuática, generando olores y propagando enfermedades hídricas (Nguyen et al., 2020).

En un contexto de creciente escasez hídrica y urbanización acelerada, la necesidad de un tratamiento efectivo de las aguas residuales se ha intensificado. En Chile, por ejemplo, la escasez hídrica es un problema estructural, lo que impulsa el desarrollo y la optimización de las PTAR no solo como un sistema de saneamiento, sino como una potencial fuente de agua recuperada para usos no potables, como el riego agrícola o industrial. Este impulso hacia la reutilización exige estándares de tratamiento cada vez más estrictos.

1.1.2 Contaminantes principales en aguas residuales

Las aguas residuales son una mezcla heterogénea compleja. Para diseñar un tratamiento efectivo y entender la generación de subproductos, como los Gases de Efecto Invernadero (GEI), es crucial

caracterizar los contaminantes a remover. Los principales constituyentes de interés en las aguas residuales municipales son:

- **Materia Orgánica:** compuesta por proteínas, carbohidratos, grasas y otros compuestos de origen biológico o industrial. Su presencia es problemática ya que su descomposición microbiana en los cuerpos de agua consume oxígeno disuelto. Se caracteriza con dos parámetros principales, DBO y DQO:
 - **Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO):** mide la cantidad de oxígeno disuelto requerido por los microorganismos para oxidar biológicamente la materia orgánica en un tiempo determinado (usualmente 5 días, DBO_5). Es el indicador clave de la carga contaminante biodegradable.
 - **Demanda Química de Oxígeno (DQO):** mide la cantidad total de materia oxidable (biodegradable y no biodegradable) usando un oxidante químico fuerte.

La relación DBO/DQO indica la tratabilidad biológica del agua.

- **Sólidos:** se clasifican en Sólidos Totales (ST), que a su vez se dividen en Sólidos Disueltos Totales (SDT) y Sólidos Suspendidos Totales (SST). Los SST son la fracción que puede removerse por medios físicos como la sedimentación. Una fracción de los SST es materia orgánica, cuantificada como Sólidos Suspendidos Volátiles (SSV), que representa la biomasa microbiana y la materia orgánica particulada.
- **Nitrógeno:** presente en formas orgánicas e inorgánicas. El Nitrógeno Total Kjeldahl (TKN) representa la suma del nitrógeno orgánico y el amonio. El amonio (NH_4^+) es la forma inorgánica predominante en el agua residual cruda. Los procesos de tratamiento lo convierten en nitrito (NO_2^-) y nitrato (NO_3^-) (Campins-Falco et al., 2008).

En la Figura 1.1 se observa el ciclo del nitrógeno general en una PTAR.

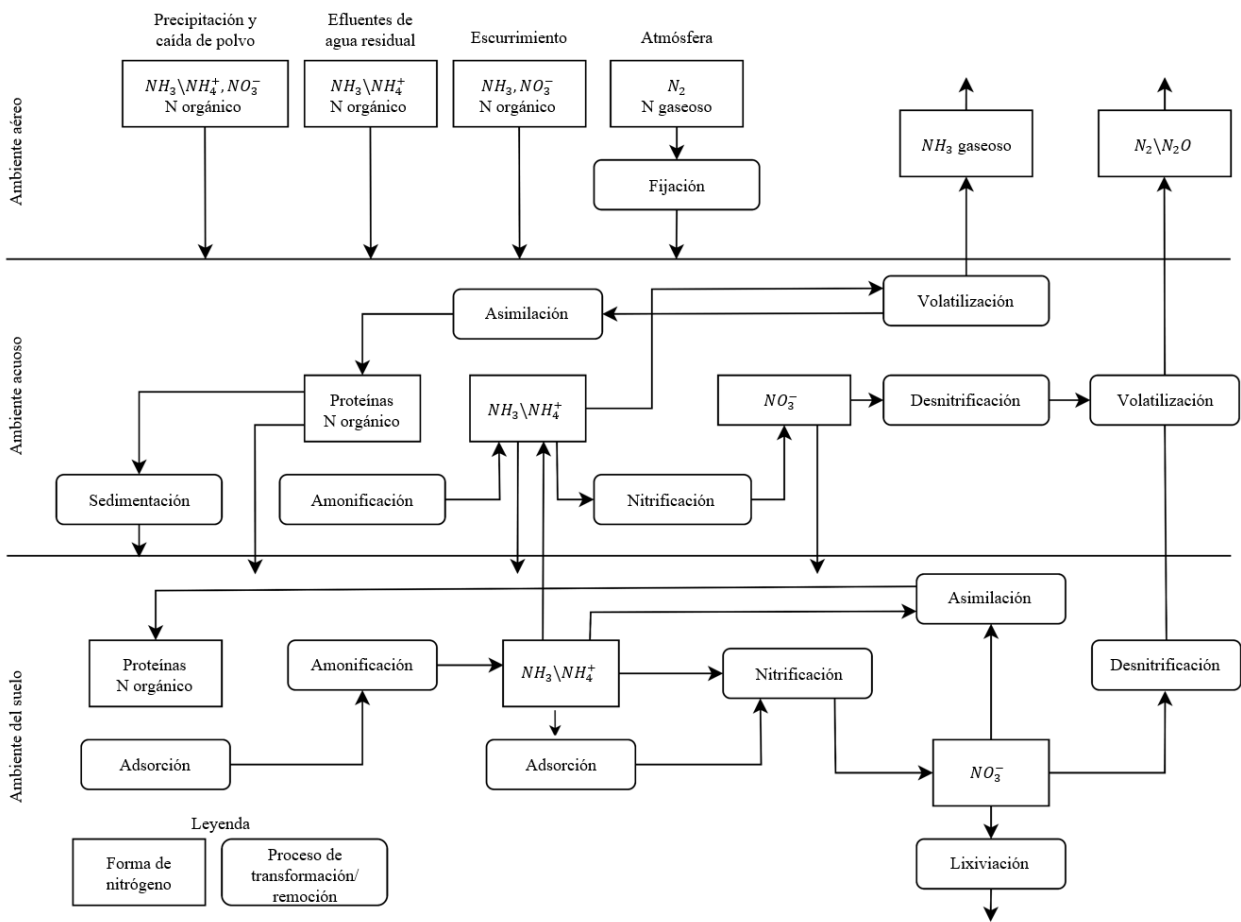


Figura 1.1: Procesos generales del nitrógeno en una PTAR (Metcalf & Eddy Inc. et al., 2014)

- Fósforo: presente como ortofosfato (PO_4^{3-}), polifosfatos y fósforo orgánico.
- Patógenos: microorganismos causantes de enfermedades, incluyendo bacterias (como E. coli), virus y protozoos.
- Contaminantes Emergentes y Tóxicos: incluyen metales pesados, pesticidas, productos farmacéuticos y otros compuestos químicos que pueden ser tóxicos para la vida acuática o humana, aunque su remoción no siempre es el objetivo primario de las PTAR convencionales.

1.1.3 Las PTAR como foco de emisiones de GEI

Históricamente, el éxito de una PTAR se medía casi exclusivamente por la calidad de su efluente. Sin embargo, en las últimas décadas, ha surgido una preocupación creciente por el impacto ambiental secundario de estas instalaciones: su contribución a las emisiones de gases de efecto invernadero

(GEI). Las PTAR son ahora reconocidas como fuentes antropogénicas significativas de dióxido de carbono (CO_2), metano (CH_4) y, de manera crítica, óxido nitroso (N_2O).

Mientras que el CO_2 es el GEI más abundante, el CH_4 y el N_2O son mucho más potentes. Las emisiones de N_2O son particularmente problemáticas, ya que se estima que pueden ser responsables de más del 50% de la huella de carbono total de una PTAR que implementa eliminación biológica de nitrógeno (BNR). A nivel global, se estima que el sector del tratamiento de aguas residuales es responsable de aproximadamente el 2% de las emisiones de carbono globales (Huang et al., 2024).

Por lo tanto, las PTAR modernas enfrentan un desafío complejo: deben cumplir con estándares de efluente cada vez más estrictos (especialmente para nutrientes como el nitrógeno), pero los mismos procesos biológicos implementados para remover el nitrógeno (nitrificación y desnitrificación) son las principales fuentes de emisión de N_2O . Esta dualidad hace que la cuantificación precisa y el monitoreo fiable de estas emisiones sean un primer paso esencial para desarrollar estrategias de mitigación efectivas.

1.2 Proceso de tratamiento de aguas residuales

Para entender dónde y cómo se generan los GEI, es esencial primero comprender el flujo de procesos en una PTAR convencional. El proceso de tratamiento de aguas residuales se encuentra explicado de manera detallada en el libro de Metcalf & Eddy Inc. et al. (2014).

En resumen, el tratamiento se divide en dos corrientes principales: la línea de agua, que procesa el agua residual hasta convertirla en un efluente apto para su descarga o reutilización, y la línea de lodos, que gestiona los sólidos removidos durante el proceso.

1.2.1 Línea de agua

Pre-tratamiento

El pre-tratamiento o tratamiento preliminar tiene como objetivo remover los materiales gruesos, pesados o flotantes que podrían dañar equipos mecánicos (bombas, aireadores) o interferir con los procesos posteriores. Incluye:

- **Desbaste:** consiste en pasar el agua a través de pantallas o rejillas (finas o gruesas) para retener sólidos de gran tamaño como plásticos, trapos, maderas y otros desechos voluminosos que podrían obstruir tuberías o dañar bombas.
- **Desarenado:** el agua fluye a través de "desarenadores" (canales o tanques aireados) donde se reduce la velocidad del flujo para permitir que los sólidos inorgánicos pesados (arena, grava, cáscaras de huevo) sedimenten por gravedad, mientras la materia orgánica más ligera

permanece en suspensión. Esto previene la abrasión en equipos mecánicos y la acumulación de inertes en los reactores biológicos.

- Desengrasado: remoción de aceites y grasas, que son menos densos que el agua y flotan en la superficie.

Tratamiento primario

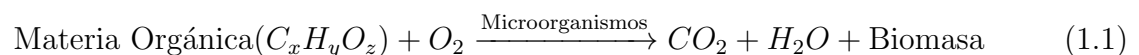
Tras el pre-tratamiento, el agua fluye hacia los sedimentadores primarios (también llamados clarificadores primarios). Estos son grandes tanques, usualmente circulares o rectangulares, donde el agua permanece en condiciones de quietud (baja velocidad de flujo) durante varias horas. Durante este tiempo, la gravedad actúa sobre los sólidos suspendidos (SST) que son más densos que el agua, haciéndolos decantar hacia el fondo. Esta masa de sólidos acumulada se denomina lodo primario y es bombeada fuera para su tratamiento en la línea de lodos. La sedimentación primaria puede remover entre el 50% y 70% de los SST y entre el 30% y 40% de la DBO de la corriente de agua de proceso.

Tratamiento secundario (biológico)

Esta es la etapa principal y más compleja de la PTAR, diseñada para eliminar la materia orgánica disuelta y coloidal (que no sedimentó en el primario) y los nutrientes (N y P). El método más común es el de Lodos Activados (CAS, en inglés *Conventional Activated Sludge*).

El principio del CAS es cultivar un consorcio microbiano denso (el "lodo activado" o "licor de mezcla", medido como Sólidos Suspendidos Volátiles del Licor de Mezcla, SSVLM) en un reactor biológico o tanque de aeración. Este consorcio microbiano utiliza los contaminantes orgánicos disueltos como "alimento" para su crecimiento y respiración. Se suministra oxígeno (generalmente mediante difusores de aire) para mantener la actividad aeróbica. Posteriormente, el licor de mezcla pasa a un sedimentador secundario, donde la biomasa se separa del agua tratada. Una gran parte de esta biomasa (lodo) se recircula al inicio del reactor biológico (Recirculación de Lodos Activados, RAS) para mantener una alta concentración de microorganismos. El exceso de biomasa producido (Lodo Activado de Purga, WAS) se retira del sistema para su tratamiento en la línea de lodos.

1. Remoción de Materia Orgánica (DBO/DQO): En presencia de oxígeno (condiciones aeróbicas), los microorganismos heterótrofos oxidan la materia orgánica para obtener energía, produciendo CO_2 , agua y nueva biomasa (más lodo):



Este es el proceso fundamental de tratamiento del agua y la principal fuente de CO_2 biogénico.

2. Eliminación Biológica de Nitrógeno (BNR): la remoción de nitrógeno es un proceso biológico más complejo que requiere dos etapas distintas, realizadas por dos tipos diferentes de bacterias en ambientes opuestos:

(a) Nitrificación (aeróbica): ocurre en la zona oxigenada del reactor. Es un proceso autótrofo (los microorganismos obtienen carbono del CO_2 o el bicarbonato) en dos pasos:

- Amonio-oxidación: bacterias Amonio-Oxidantes (AOB), como Nitrosomonas, oxidan el amonio a nitrito: $2\text{NH}_4^+ + 3\text{O}_2 \rightarrow 2\text{NO}_2^- + 4\text{H}^+ + 2\text{H}_2\text{O}$
- Nitrito-oxidación: bacterias Nitrito-Oxidantes (NOB), como Nitrospira o Nitrobacter, oxidan el nitrito a nitrato: $2\text{NO}_2^- + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{NO}_3^-$ El resultado neto es la conversión del amonio, el cual es tóxico para los peces en nitrato, siendo este menos tóxico, pero aún un nutriente.

(b) b) Desnitrificación (anóxica): ocurre en una zona anóxica (sin oxígeno disuelto, pero con presencia de nitrato). Microorganismos heterótrofos facultativos (que pueden respirar O_2 o NO_3^-) utilizan la materia orgánica del agua residual (DBO) como fuente de carbono y el nitrato (producido en la nitrificación) como aceptor de electrones, liberando N_2 , gas inerte y no contaminante, a la atmósfera: $\text{NO}_3^- + \text{Materia Orgánica} \rightarrow \text{NO}_2^- \rightarrow \text{NO} \rightarrow \text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{N}_2 + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$

Para lograr ambas etapas, las PTAR que incluyen la eliminación biológica de nitrógeno deben tener configuraciones que incluyan zonas óxicas y anóxicas. Ejemplos de estas configuraciones, relevantes para la generación de GEI, incluyen:

- A2O (anaeróbica/anóxica/oxica): el agua fluye secuencialmente a través de un tanque anaerobio, un tanque anóxico (para desnitrificación, recibiendo nitrato recirculado desde la zona óxica) y un tanque óxico (para remoción de DBO y nitrificación). Se puede observar un diagrama de un proceso así en la Figura 1.2.

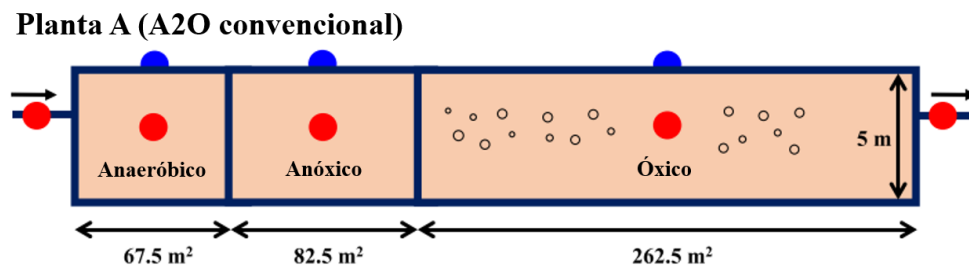


Figura 1.2: Ejemplo de configuración A2O (Song et al., 2020)

- SBR (*Sequencing Batch Reactor*): todo el tratamiento ocurre en un solo tanque, pero en ciclos de tiempo. Se alternan fases de reacción aeróbica (con aeración, para nitrificar y remover DBO) y reacción anóxica (solo mezcla, sin aeración, para desnitrificar). En la Figura 1.3 se observa un ejemplo de operación con ciclos de aireación.

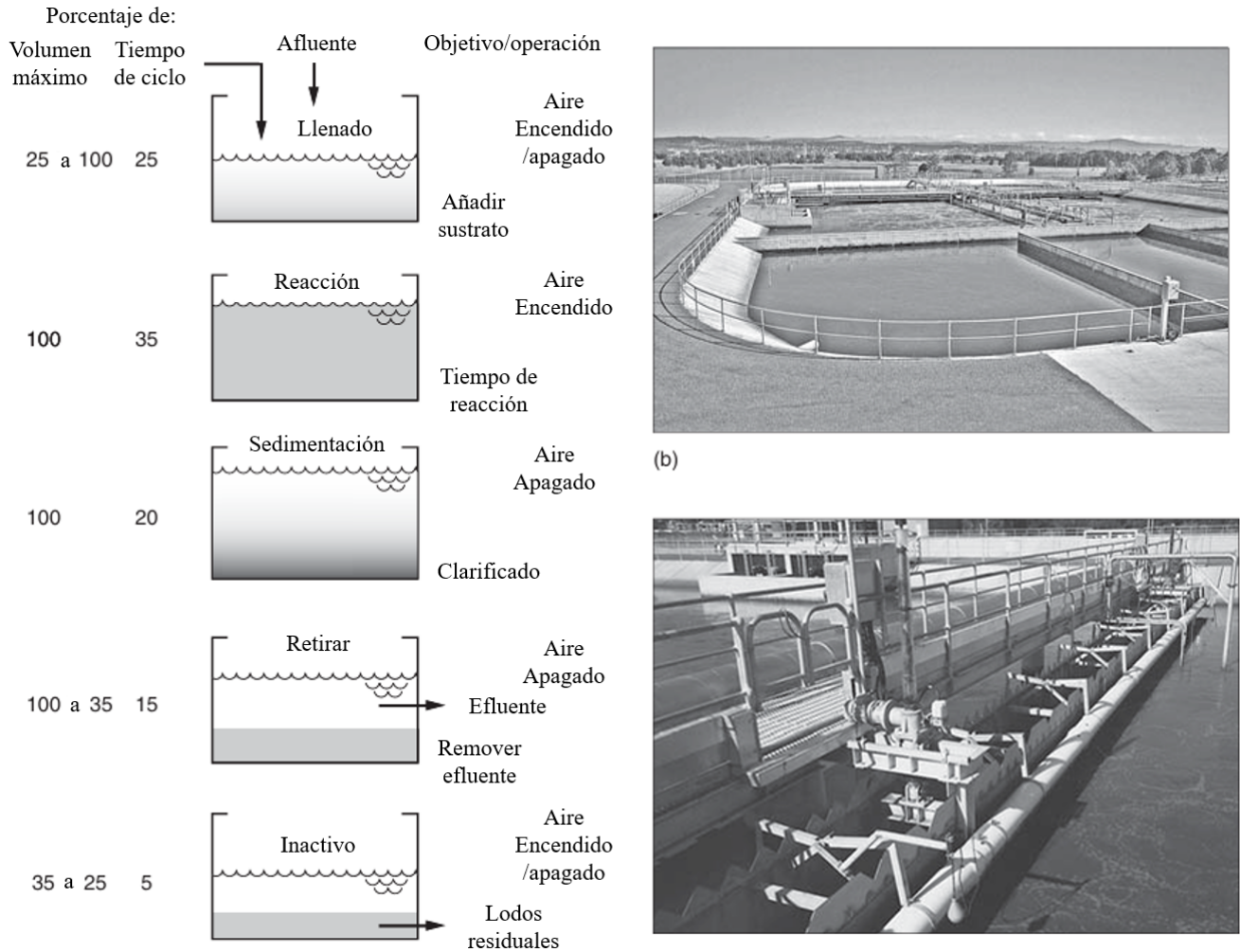


Figura 1.3: Ejemplo de configuración SBR (Metcalf & Eddy Inc. et al., 2014)

Tratamiento terciario

Tras una etapa simple de sedimentación secundaria, donde la biomasa se separa del agua tratada, el efluente puede pasar a un tratamiento terciario para maximizar su calidad, especialmente si se destina a reutilización. Esto incluye:

- Filtración: remoción de los últimos sólidos suspendidos finos que no sedimentaron.
- Desinfección: Eliminación de patógenos residuales, comúnmente mediante cloración (adición de hipoclorito) o radiación ultravioleta (UV).

1.2.2 Línea de Lodos

El tratamiento del agua genera grandes volúmenes de lodo (primario y secundario), que es una suspensión acuosa de sólidos orgánicos e inorgánicos. La línea de lodos tiene como objetivo reducir su volumen, estabilizar la materia orgánica (para reducir olores y patógenos) y prepararlo para su disposición final.

En la Figura 1.4 se puede ver el proceso general del tratamiento en la línea de lodos para diferentes tipos de PTAR.

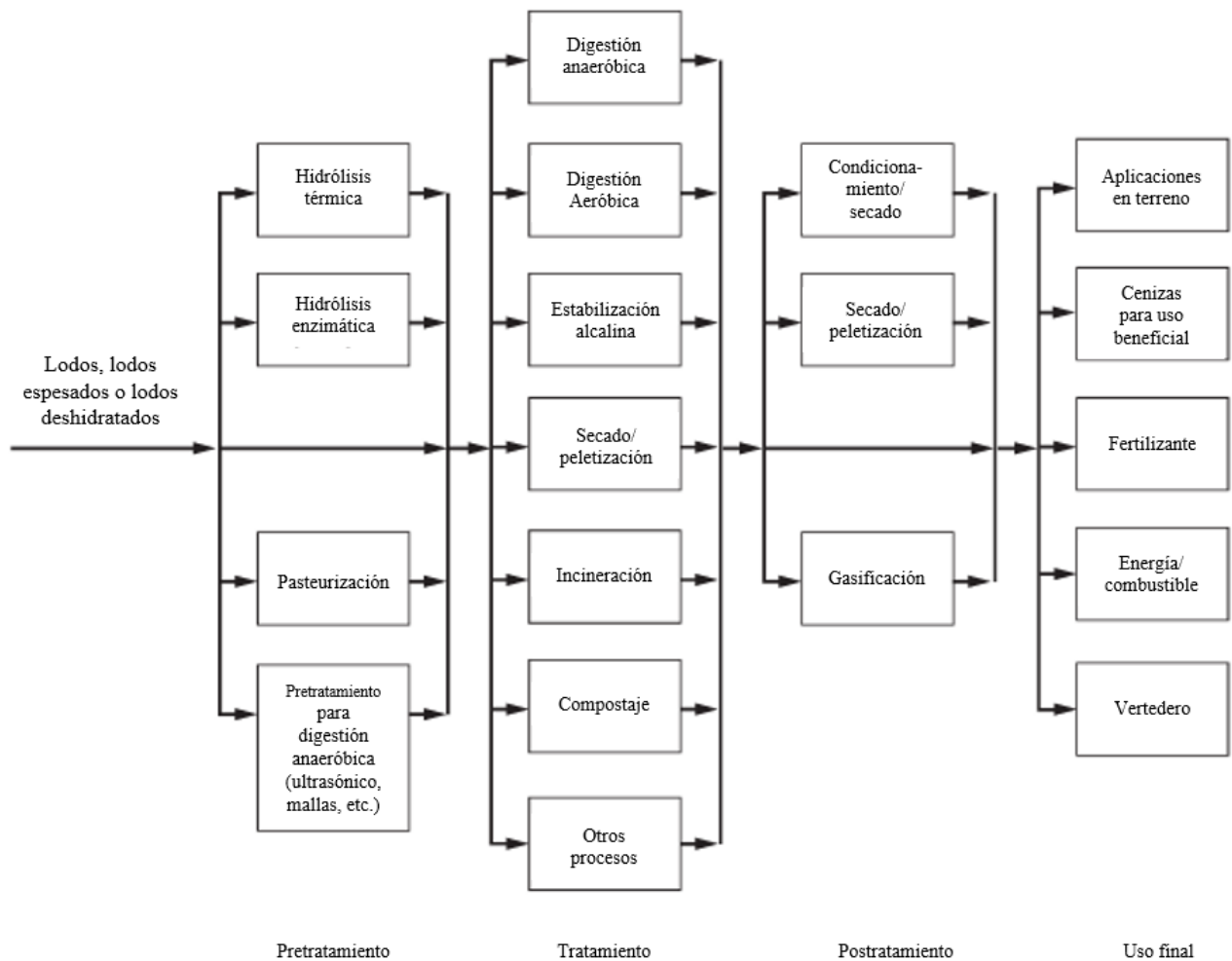


Figura 1.4: Procesamiento de lodos en PTAR (Metcalf & Eddy Inc. et al., 2014)

Espesamiento

El lodo combinado tiene un alto contenido de agua (95-99%). El espesamiento (por gravedad o medios mecánicos como flotación o centrifugación) es un primer paso para reducir el volumen, eliminando parte del agua libre.

Estabilización

Este es el proceso central de la línea de lodos y su foco principal de emisiones de GEI.

- **Digestión Anaerobia (DA):** es el proceso más común para estabilizar lodos en PTAR medianas y grandes. El lodo se introduce en un gran reactor sellado (digestor), en ausencia de oxígeno y a temperatura controlada (usualmente 35-40°C) durante 15-30 días. Aquí ocurre una compleja descomposición biológica en cuatro etapas:
 1. **Hidrólisis:** enzimas extracelulares rompen las macromoléculas orgánicas complejas (proteínas, lípidos, polisacáridos) en compuestos solubles más simples (aminoácidos, ácidos grasos, azúcares).
 2. **Acidogénesis (o fermentación):** bacterias fermentativas convierten estos compuestos solubles en una mezcla de Ácidos Grasos Volátiles (AGV) (como acético, propiónico, butírico), alcoholes, CO₂ e hidrógeno (H₂).
 3. **Acetogénesis:** bacterias acetogénicas convierten los AGV de cadena larga y alcoholes en acetato, H₂ y CO₂.
 4. **Metanogénesis:** Arqueas completan el proceso. Existen dos grupos principales:
 - (a) **Metanógenas acetoclásticas:** convierten acetato en CH₄ y CO₂.
 - (b) **Metanógenas hidrogenotróficas:** combinan H₂ (como donador de electrones) y CO₂ (como aceptor) para producir CH₄. El producto final es un biogás (compuesto principalmente por 60-70% de CH₄ y 30-40% de CO₂) y un lodo estabilizado llamado digestato.
- **Digestión Aerobia:** el lodo se airea en un tanque abierto durante un período prolongado. Los microorganismos consumen la materia orgánica y, una vez agotada, entran en fase de respiración endógena, consumiendo su propia biomasa. Este proceso consume mucha energía (aeración) y produce CH₄ como GEI principal.

Deshidratación y disposición final

El lodo estabilizado (digestato) aún contiene mucha agua. Se deshidrata mecánicamente (usando centrifugas, filtros prensa o tornillos) para convertirlo en un biosólido. Este biosólido final se transporta para su disposición final, que puede ser la aplicación agrícola (como mejorador de suelos), el compostaje, la incineración o el depósito en rellenos sanitarios.

1.3 Métodos de cuantificación de GEI

Dada la alta variabilidad de las emisiones, especialmente de N_2O , su cuantificación precisa es un desafío. Los métodos para estimar o medir las emisiones de GEI de las PTAR se dividen en tres categorías principales:

1.3.1 Método de Factores de Emisión (IPCC)

Este enfoque, propuesto por el Panel Intergubernamental sobre el Cambio Climático (IPCC), es el método más simple. Consiste en multiplicar datos de actividad (e.g., cantidad de nitrógeno que entra a la planta, cantidad de DBO removida) por factores de emisión (FE) estandarizados. (Huang et al., 2024)

- Ventajas: es un método sencillo, de bajo costo, y útil para realizar inventarios nacionales o regionales y comparaciones a gran escala.
- Desventajas: su principal inconveniente es la alta incertidumbre y la falta de especificidad. Los FE son promedios generales que no capturan la especificidad del proceso, las condiciones operativas, ni la variabilidad temporal/estacional. Numerosos estudios de monitoreo directo han reportado FE que difieren en órdenes de magnitud de los valores por defecto del IPCC.

1.3.2 Método de Modelación (MCM y ML)

Este enfoque utiliza modelos matemáticos para simular los procesos biológicos y químicos dentro de la PTAR y predecir las emisiones resultantes.

Modelos Mecanísticos (MCM): se basan en el conocimiento fundamental de los procesos. Los Modelos de Lodos Activados (ASM) se han extendido para incluir las rutas de producción de GEI. Por ejemplo, el modelo ASM2d- N_2O (Massara et al., 2018) integra las tres rutas biológicas de producción de N_2O (AOB-hidroxilamina, AOB-desnitrificación y HD-incompleta). Szelag et al. (2023) utiliza un MCM (ASM2d- N_2O) como un modelo de referencia para verificar y validar la lógica de los modelos de *machine learning*.

Modelos de Machine Learning (ML): son modelos basados en datos que no requieren un conocimiento profundo de los mecanismos subyacentes. Utilizan algoritmos como *Random Forest* (RF), Redes Neuronales de Aprendizaje Profundo (DNN), *Long Short-Term Memory* (LSTM), XGboost o Máquinas de Vectores de Soporte (SVM) para encontrar correlaciones complejas entre los parámetros operativos de la planta (variables de entrada, como OD, T, NH_4^+ , caudal) y las emisiones de GEI (variable de salida) (Song et al., 2020).

- Ventajas: permiten simular escenarios, optimizar operaciones y capturar relaciones complejas no lineales.
- Desventajas: ambos enfoques son altamente dependientes de la disponibilidad y calidad de los datos para su calibración y validación . Los MCM requieren una calibración extensa y los modelos de ML necesitan grandes conjuntos de datos de entrenamiento para ser fiables.

1.3.3 Método de Monitoreo Directo (*Field Monitoring*)

Este método implica la medición física de las concentraciones de gases en los puntos de emisión y la medición del caudal de gas (*off-gas*) para calcular el flujo másico (tasa de emisión). Se puede realizar de forma discontinua (toma de muestras en bolsas y análisis posterior en laboratorio, comúnmente por Cromatografía de Gases) o de forma continua/semicontinua (*online*) utilizando sensores instalados in situ, como los sensores NDIR.

- Ventajas: es el método estándar que proporciona los datos más precisos y específicos del sitio. Es indispensable para la calibración de los modelos MCM y ML.
- Desventajas: es costoso, complejo, y la variabilidad es un desafío. Estudios de monitoreo a corto plazo (por ejemplo, días o semanas) pueden ser engañosos, ya que no capturan eventos esporádicos de alta emisión o variaciones estacionales. Vasilaki et al. (2019) y Huang et al. (2024) han demostrado que las campañas de monitoreo a corto plazo (1 mes) tienden a subestimar significativamente las emisiones anuales en comparación con las campañas a largo plazo (1 año), que son esenciales para capturar la variabilidad estacional.

La necesidad de un monitoreo a largo plazo, fiable y rentable para capturar la verdadera dinámica de las emisiones de GEI ha impulsado la adopción de sensores en línea como los NDIR. Sin embargo, para que estos datos a largo plazo sean válidos, la precisión del sensor es fundamental. Un error sistemático en el sensor, como el causado por la sensibilidad cruzada, invalidaría los datos recopilados. Por lo tanto, comprender, cuantificar y corregir este fenómeno, es un paso crítico y necesario para permitir un monitoreo de GEI preciso y fiable en las PTAR.

1.4 Motivación

Como Chile es un país que sufre de problemas de sequía y escases hídrica, se buscan maneras para poder reducir la necesidad de este recurso, por ejemplo aumentando el reuso del agua en procesos donde este pueda aplicarse (Superintendencia de Servicios Sanitarios, 2022).

Una de las maneras comunes de atacar este objetivo es el desarrollo de plantas de tratamiento de aguas residuales, ya sea tanto para aguas municipales o industriales. El problema es que con esto surge un nuevo foco de emisiones de gases de efecto invernadero (GEI). Los principales GEI emitidos en estas plantas son CO_2 , CH_4 y N_2O . Las emisiones en de GEI totales en Chile el año 2022 fueron compuestas por un 49% CO_2 , 30% CH_4 , 10% N_2O y 11% de gases fluorados. (Ministerio del Medio Ambiente, 2025).

Este problema es uno de los intereses de la empresa Ainwater, la cual se enfoca en aplicar herramientas de inteligencia artificial en tecnologías del agua.

1.5 Contexto global: Emisiones de GEI en PTAR

El tratamiento de aguas residuales es fundamental para la protección de la salud pública y los ecosistemas, pero su operación conlleva un impacto ambiental creciente en términos de emisiones de gases de efecto invernadero. Las PTAR son reconocidas como fuentes antropogénicas significativas de GEI, principalmente CO_2 , CH_4 y N_2O . El N_2O , en particular, ha generado gran preocupación debido a su elevado potencial de calentamiento global (PCG), aproximadamente 273 veces superior al del CO_2 en un horizonte de 100 años, y su papel en la depleción de la capa de ozono. Las emisiones directas de N_2O pueden incrementar la huella de carbono operacional de una PTAR hasta en un 80%, representando a menudo más del 50% del total de emisiones de GEI de la planta. A nivel global, se estima que el sector de tratamiento de aguas residuales contribuye con alrededor del 2% de las emisiones totales de carbono, y se proyecta un aumento significativo en la producción de aguas residuales en las próximas décadas, lo que intensificará este impacto si no se toman medidas. El CH_4 , aunque emitido en menor medida que el CO_2 en procesos aeróbicos, también es un potente GEI, con un PCG de aproximadamente 28 veces el del CO_2 . La mitigación de estas emisiones es, por tanto, crucial para avanzar hacia la sostenibilidad del sector y cumplir con los objetivos globales de neutralidad de carbono (Huang et al., 2024).

1.6 Desafíos en la Cuantificación de Emisiones

La gestión efectiva de las emisiones de GEI en las PTAR requiere, en primer lugar, una cuantificación precisa. Actualmente, existen diversos métodos para estimar estas emisiones, cada uno con sus propias ventajas y limitaciones. El método de factores de emisión (FE), promovido por el IPCC, es relativamente simple y económico, pero a menudo carece de especificidad local y tecnológica, lo que puede llevar a incertidumbres significativas y subestimaciones o sobreestimaciones. De hecho, se ha reportado que los FE del IPCC pueden diferir considerablemente de los valores medidos in situ. La modelación matemática mecanística, tanto en estado estacionario como dinámica, permite

simular los procesos y estimar las emisiones bajo diferentes escenarios operativos, pero requiere un conocimiento profundo de los mecanismos de generación y transformación de contaminantes, así como una calibración exhaustiva con datos específicos de la planta. El monitoreo directo en campo ofrece la posibilidad de obtener datos más precisos y específicos del sitio, utilizando técnicas como la cromatografía de gases, para muestras fuera de sitio, o analizadores infrarrojos y sensores, para mediciones en línea (Huang et al., 2024).

Sin embargo, el monitoreo directo puede ser costoso, requiere instrumentación especializada y personal capacitado, y la representatividad de los resultados depende fuertemente de la duración y frecuencia del muestreo, así como de la cobertura espacial de las fuentes de emisión. Dentro de las tecnologías de monitoreo directo, los sensores infrarrojos no dispersivos (NDIR) han ganado popularidad por su balance entre costo, precisión y robustez para ciertos gases como CO_2 y CH_4 . No obstante, estos sensores no están exentos de desafíos, siendo la sensibilidad cruzada entre gases con bandas de absorción superpuestas uno de los problemas críticos que pueden comprometer la exactitud de las mediciones. Este trabajo se enfoca precisamente en evaluar y corregir este fenómeno en sensores NDIR para CO_2 y CH_4 en el contexto de las PTAR.

1.7 Problema específico

La empresa trabajará en conjunto con plantas de tratamiento en el país, y además de recopilar los datos estándar del proceso, se realizarán instalaciones de sensores de tipo NDIR, los cuales utilizan emisiones infrarrojas para determinar la concentración de cierto gas.

Esto trae consigo un problema conocido como sensibilidad cruzada, el cual es un fenómeno que ocurre al tratar de medir la concentración de un gas en presencia de otros (Sun et al., 2023).

En este trabajo se va a explorar este fenómeno a fondo para poder concluir acerca de su importancia y de que medidas se deben tomar antes de realizar otros análisis con los datos obtenidos.

Capítulo 2

Objetivos y Alcances

2.1 Objetivo General

Evaluar el comportamiento de sensores de gases NDIR instalados en plantas de tratamiento de aguas residuales al medir la concentración de CO_2 , CH_4 y H_2O en la mezcla de gases de efecto invernadero emitidos.

2.2 Objetivos Específicos

1. Investigar estado del arte en la determinación del efecto de la sensibilidad cruzada de gases. Entender por qué ocurre en sensores NDIR para gases de efecto invernadero y cómo se puede corregir.
2. Realizar un diseño experimental con gases de prueba para poder modelar la sensibilidad cruzada en los sensores.
3. Correlacionar las mediciones obtenidas comparando concentraciones reales con la obtenida con sensores NDIR.

Capítulo 3

Marco Teórico

3.1 Tratamiento de aguas residuales

La evolución en el monitoreo de N_2O en las PTAR ha sido notable en las últimas décadas, pasando de métodos teóricos a técnicas avanzadas de medición directa en sistemas a escala real. Inicialmente, las emisiones se estimaban mediante factores de emisión (*Emission Factors*, EF) calculados de forma teórica, lo que frecuentemente resultaba en una subestimación significativa de su impacto ambiental. Este enfoque fue paulatinamente reemplazado por campañas de monitoreo directo, lo que permitió recopilar datos más precisos sobre la dinámica de las emisiones y los factores que las condicionan.

Los estudios recientes han mostrado que la duración de los monitoreos es crucial para capturar la variabilidad temporal, particularmente la asociada a los cambios estacionales. Los monitoreos de largo plazo, que abarcan al menos un año, son esenciales para identificar patrones estacionales que influyen en la formación de N_2O y para obtener un panorama más representativo de las emisiones a escala real. En contraste, los monitoreos de corto plazo suelen ofrecer datos limitados y, en ocasiones, subestiman las emisiones reales debido a su incapacidad de reflejar fluctuaciones a largo plazo.

El desarrollo de herramientas y técnicas avanzadas ha enriquecido el entendimiento de los procesos involucrados en la producción de N_2O . La integración de datos operativos y mediciones de N_2O se ha logrado mediante modelos mecanísticos, análisis estadístico multivariado y técnicas de minería de datos. Estos enfoques permiten identificar relaciones complejas entre variables operativas y las emisiones, proporcionando una base para optimizar los procesos y mitigar las emisiones.

La creciente preocupación por el impacto ambiental de las PTAR ha llevado a priorizar el desarrollo de estrategias de mitigación de emisiones de N_2O , como por ejemplo perfeccionar los procesos actuales, o probar alternativas, como el proceso anammox (Morales et al., 2015). Estas estrategias buscan optimizar las condiciones operativas y reducir las emisiones asociadas. A pesar

de los avances logrados, persisten desafíos importantes. Estos desarrollos no solo mejoran la comprensión de las emisiones de N_2O , sino que también fortalecen la capacidad de las PTAR para mitigar su impacto ambiental (Vasilaki et al., 2019).

3.2 Procesos Generadores de GEI en PTAR

Las emisiones de GEI (CO_2 , CH_4 , N_2O) en las PTAR se originan en diversas etapas y procesos, tanto en la línea de agua como en la línea de lodos.

El CO_2 se produce principalmente por la respiración microbiana durante la degradación aeróbica de la materia orgánica. Aunque mayoritariamente de origen biogénico (derivado de la biomasa), una fracción del carbono en las aguas residuales puede ser de origen fósil (proveniente de productos industriales o detergentes), lo que implica una contribución neta a las emisiones antropogénicas. El rango típico de emisión de CO_2 va hasta los 10000 ppm.

El CH_4 se genera bajo condiciones estrictamente anaeróbicas, siendo las fuentes principales los sistemas de alcantarillado (si se vuelven sépticos), los decantadores primarios con tiempos de retención largos, y especialmente, los digestores anaerobios de lodos. También pueden ocurrir emisiones fugitivas de CH_4 en unidades con aireación insuficiente o zonas muertas de los reactores aireados. El rango típico de emisión de CH_4 en los reactores biológicos va hasta los 1000 ppm, y normalmente ocurre por fugas en zonas de mala aireación.

El N_2O se asocia fundamentalmente a los procesos biológicos de eliminación de nitrógeno (BNR), específicamente durante la nitrificación y la desnitrificación. Se han identificado múltiples rutas biológicas para la producción de N_2O (Vasilaki et al., 2019):

- La oxidación de hidroxilamina (NH_2OH), un intermediario de la nitrificación por bacterias amonioxidantes (AOB).
- La desnitrificación por nitrificantes (*Nitrifier Denitrification*), donde AOB reducen nitrito (NO_2^-) a N_2O bajo condiciones de bajo oxígeno disuelto (OD).
- La desnitrificación heterotrófica, donde bacterias heterótrofas reducen nitrato (NO_3^-) o nitrito a N_2 gas, siendo el N_2O un intermediario que puede acumularse si la reducción final a N_2 es incompleta.

Además, existen rutas abióticas que involucran reacciones químicas de intermediarios nitrogenados como la hidroxilamina. La emisión de N_2O es altamente variable y sensible a múltiples factores operativos y ambientales, incluyendo bajos niveles de OD, altas concentraciones de amonio (NH_4^+) o nitrito, baja relación C/N (o DQO/N) para la desnitrificación, pH, temperatura, condiciones transitorias (como en reactores SBR) y cambios bruscos en el proceso. La configuración específica

de la PTAR (A2O, SBR, MBR, OD) también influye significativamente en los perfiles de emisión. Por ejemplo, los reactores SBR, debido a sus ciclos alternantes de fases anóxicas y aeróbicas, a menudo reportan mayores emisiones de N_2O comparados con procesos de flujo continuo, mientras que los sistemas de zanja de oxidación (OD) tienden a mostrar emisiones más bajas. El rango típico de emisión de N_2O va hasta los 1000 ppm (Song et al., 2020).

3.3 Principio de Funcionamiento de Sensores NDIR

La tecnología de Infrarrojo No Dispersivo (NDIR) es un método espectroscópico ampliamente utilizado para la detección y cuantificación de gases. Su principio se basa en la Ley de Lambert-Beer, que establece que la atenuación de la radiación electromagnética al pasar a través de un medio absorbente es proporcional a la concentración del analito absorbente y a la longitud del camino óptico. La relación matemática es $I_t = I_0 \cdot e^{-kCL}$, donde I_t es la intensidad de la luz transmitida, I_0 es la intensidad incidente, k es el coeficiente de absorción molar específico del gas a una longitud de onda dada, C es la concentración del gas, y L es la longitud del camino óptico. La absorbancia (A), definida como $A = -\ln(I_t/I_0)$ o $A = kCL$, es directamente proporcional a la concentración del gas. Un sensor NDIR típico consta de una fuente de radiación infrarroja (IR), una cámara o celda de muestra por donde fluye el gas, un filtro óptico de paso de banda estrecho, y un detector de IR sensible. La fuente IR, a menudo un filamento caliente o un emisor de estado sólido, genera radiación en un amplio rango del espectro infrarrojo. Esta radiación atraviesa la cámara de muestra, donde el gas objetivo absorbe energía en sus longitudes de onda características. El filtro óptico está diseñado para permitir el paso únicamente de la radiación en una banda estrecha centrada en una de las principales bandas de absorción del gas de interés, bloqueando otras longitudes de onda. El detector, que puede ser piroeléctrico, termopila o fotodetector (PbSe), mide la intensidad de la radiación IR que lo alcanza después de pasar por el filtro. La concentración del gas se determina comparando la intensidad medida (I_t) con una referencia, que puede ser la intensidad medida con un gas no absorbente, como N_2 en la cámara (I_0), o la señal de un canal de referencia paralelo que utiliza un filtro en una longitud de onda donde ningún gas presente absorbe. Este último enfoque (doble longitud de onda o doble haz) ayuda a compensar derivas en la fuente de luz o ensuciamiento de las ventanas ópticas. Las ventajas de la tecnología NDIR incluyen una respuesta relativamente rápida, buena selectividad para muchos gases, larga vida útil, robustez y un costo generalmente inferior al de técnicas más complejas como la cromatografía de gases o la espectroscopía láser (Sun et al., 2023).

En la Figura 3.1 se observa el mecanismo de funcionamiento de un sensor NDIR estándar.

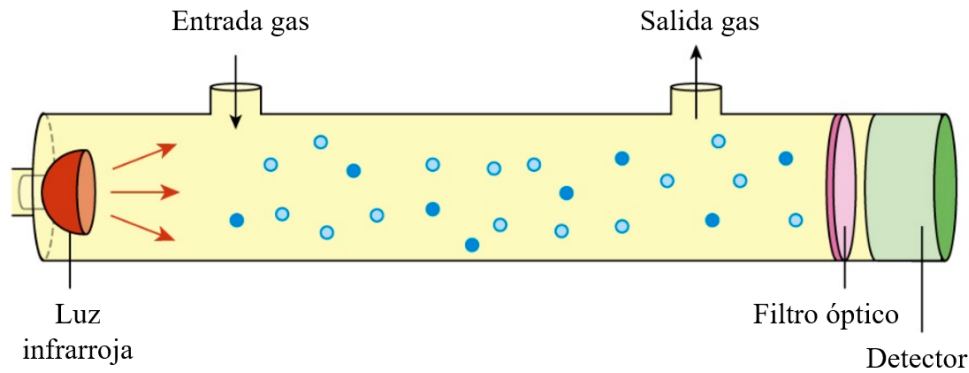


Figura 3.1: Diagrama sensor NDIR

3.4 Sensibilidad cruzada

La sensibilidad cruzada se entiende como el fenómeno en el que se distorsionan las mediciones de los sensores de concentración en presencia de una mezcla. Los sensores NDIR funcionan comúnmente en una cámara donde se bombea el gas a medir. En esta cámara ocurre lo mencionado anteriormente. Se emite luz infrarroja, cruzando la cámara de muestra hacia el sensor, esta luz pasa por el filtro que elimina las frecuencias del espectro que no absorbe el gas para el que está diseñado, por lo que la concentración del gas se determina según que tan intensa o tenue sea la emisión que le llega.

En general, los gases son muy afines para absorber las emisiones del espectro infrarrojo, por lo que es común que, en una mezcla de gases, la concentración del gas para que el sensor fue diseñado se entregue diferente a la real.

Yang et al. (2023) menciona que el uso de sensores NDIR de bajo costo puede inducir aun más error debido al uso de fuentes de luz infrarroja de calidad comercial y la falta de filtros especializados.

3.5 Corrección de la Sensibilidad Cruzada

Para corregir el efecto de la sensibilidad cruzada, es necesario establecer un modelo matemático que describa la relación entre la señal medida y las concentraciones reales de los gases presentes. Un enfoque común se basa en la suposición de que la absorbancia total medida en un canal específico del sensor es la suma lineal de las absorbancias debidas a cada uno de los gases presentes en la mezcla. Así, para un sistema con dos gases, A (objetivo) y B (interferente), la absorbancia medida en el canal A (A_{total}) y en el canal B (B_{total}) se puede expresar como: $A_{total} = f_A(C_A) + \Gamma_{BA}(C_B)$ $B_{total} = \Gamma_{AB}(C_A) + f_B(C_B)$ donde $f_A(C_A)$ y $f_B(C_B)$ son las respuestas (absorbancia) del canal A al

gas A y del canal B al gas B, respectivamente (idealmente relacionadas con la curva de calibración), y $\Gamma_{BA}(C_B)$ y $\Gamma_{AB}(C_A)$ son las funciones de interferencia, que representan la absorbancia medida en el canal A debida a la presencia del gas B, y viceversa. Sun et al. (2012) propusieron determinar experimentalmente estas funciones de interferencia exponiendo el sensor a concentraciones variables de cada gas puro y midiendo la respuesta en todos los canales. En muchos casos, especialmente si las concentraciones no son extremadamente altas o la absorción no está saturada, estas funciones de interferencia pueden aproximarse razonablemente bien mediante una relación lineal. Por ejemplo, $\Gamma_{BA}(Y) \approx b_{BA} \cdot Y + a_{BA}$, donde Y es la absorbancia pura del gas B, b_{BA} es el coeficiente de respuesta cruzada (pendiente) y a_{BA} es un término de intercepción (offset). El coeficiente b_{BA} cuantifica principalmente el efecto del solapamiento espectral, mientras que a_{BA} puede reflejar otros efectos instrumentales. Una vez determinadas experimentalmente todas las funciones de interferencia lineales, se obtiene un sistema de ecuaciones. Para el caso de tres gases (CO_2 , CO , NO) analizado por Sun et al. (2012), el sistema es:

- $X + (b_{\text{CO} \rightarrow \text{CO}_2} Y + a_{\text{CO} \rightarrow \text{CO}_2}) + (b_{\text{NO} \rightarrow \text{CO}_2} Z + a_{\text{NO} \rightarrow \text{CO}_2}) = A_{\text{total}, \text{CO}_2}$
- $(b_{\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO}} X + a_{\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO}}) + Y + (b_{\text{NO} \rightarrow \text{CO}} Z + a_{\text{NO} \rightarrow \text{CO}}) = B_{\text{total}, \text{CO}}$
- $(b_{\text{CO}_2 \rightarrow \text{NO}} X + a_{\text{CO}_2 \rightarrow \text{NO}}) + (b_{\text{CO} \rightarrow \text{NO}} Y + a_{\text{CO} \rightarrow \text{NO}}) + Z = C_{\text{total}, \text{NO}}$

Donde X, Y, Z son las absorbancias puras (desconocidas) de CO_2 , CO y NO , y A_{total} , B_{total} , C_{total} son las absorbancias medidas en cada canal. Resolviendo este sistema, se obtienen las absorbancias puras X, Y, Z, las cuales pueden ser convertidas a concentraciones utilizando las curvas de calibración individuales de cada gas.

3.6 Corrección en este trabajo

El modelo propuesto en este trabajo que se observa en las Ecuaciones 3.1 y 3.2 representa una simplificación del enfoque de Sun et al. (2012).

En lugar de corregir la absorbancia, corrige directamente la diferencia (ΔC) entre la concentración medida y la real, asumiendo que esta diferencia es linealmente proporcional a la concentración del gas interferente. Esta aproximación puede ser válida si la curva de calibración es aproximadamente lineal en el rango de operación. La validez de esta linealidad en la corrección de concentración debe ser evaluada experimentalmente, como se realiza en este estudio. Los resultados de Sun et al. (2012) sugieren que la aproximación lineal para la interferencia en absorbancia fue adecuada para el fenómeno.

$$\Delta C_{\text{CO}_2} = a \cdot C_{\text{CH}_4} \quad (3.1)$$

$$\Delta C_{CH_4} = b \cdot C_{CO_2} \quad (3.2)$$

Donde:

- $\Delta C_{CO_2/CH_4}$: Diferencia entre la medición de concentración del sensor y la concentración real.
- a, b: Factor de corrección para cada gas.
- C_{CH_4} : Concentración de CH_4 .
- C_{CO_2} : Concentración de CO_2 .

3.7 Alternativas para corregir

Además del modelado lineal basado en funciones de interferencia, existen otras estrategias para abordar la sensibilidad cruzada en sensores NDIR.

- Método de Eliminación Diferencial: Propuesto recientemente por Sun et al. (2023), este método utiliza una configuración con dos fuentes de luz de banda ancha y múltiples detectores (o un detector con múltiples caminos ópticos) ubicados a diferentes distancias de las fuentes. Las fuentes operan de forma alterna. En lugar de medir la absorbancia directamente, se calcula una respuesta del sensor (SR) definida como el logaritmo natural del cociente de las señales de dos detectores bajo la iluminación de una de las fuentes. Por ejemplo, $SR_1 = \ln(U_1/U_3)$ cuando la fuente 1 está encendida, y $SR_2 = \ln(U_2/U_4)$ cuando la fuente 2 está encendida (donde U_i es la señal del detector i). Teóricamente, este cálculo diferencial elimina la dependencia de la intensidad absoluta de la fuente de luz (I_0), así como la influencia de factores ambientales comunes como la temperatura o la humedad que afectarían a ambos detectores de manera similar. Resolviendo un sistema de ecuaciones derivado de la Ley de Lambert-Beer modificada para esta configuración, es posible determinar las concentraciones de múltiples gases a partir de las respuestas medidas. Este método requiere una calibración inicial para construir el modelo C-SR, y puede necesitar correcciones si las fuentes no son perfectamente colimadas o si hay pérdidas ópticas dependientes del camino. Sus ventajas potenciales incluyen una mayor robustez frente a derivas instrumentales y condiciones ambientales cambiantes.
- Mejoras en el Hardware: La forma más directa de mitigar la sensibilidad cruzada es mejorar el diseño del propio sensor. El uso de filtros ópticos de muy alta calidad, con bandas de paso extremadamente estrechas, minimiza la cantidad de radiación interferente que llega al detector. Sensores de gama alta, como el Senseair K33 evaluado en este trabajo, incorporan filtros

superiores comparados con modelos de menor costo, explicando su menor susceptibilidad a la interferencia. Otras mejoras pueden incluir el uso de fuentes de luz más estables o con espectros optimizados, detectores con respuestas espectrales más selectivas, o diseños ópticos que mejoren la colimación del haz.

- **Calibración Multivariante y Machine Learning:** En lugar de tratar de aislar la señal de cada gas, estos enfoques aceptan la interferencia y la modelan. Se calibra el sistema exponiéndolo a mezclas conocidas de gases y registrando la respuesta completa del sensor (o conjunto de sensores/canales). Luego, se utilizan algoritmos matemáticos para encontrar una relación entre el vector de respuestas del sensor y el vector de concentraciones reales. Métodos como Regresión de Mínimos Cuadrados Parciales (PLS) o técnicas de *Machine Learning* (ML) como Redes Neuronales Artificiales (ANN), Máquinas de Vectores de Soporte (SVM), o modelos de *Deep Learning* son capaces de aprender patrones complejos, incluyendo las interacciones no lineales y los efectos de interferencia, directamente de los datos de calibración. Estos métodos pueden ser muy potentes pero requieren un conjunto de datos de calibración representativo y suficiente.

Capítulo 4

Materiales y Métodos

4.1 Recolección de datos

Los datos de concentración de gas se obtienen utilizando una cámara de medición cilíndrica, diseñada para esta aplicación, la cual posee 40 cm de longitud y 15 cm de diámetro. La estructura detallada de este dispositivo se presenta en la Figura 4.1.

El protocolo de muestreo comienza conectando la cámara a un cilindro de gas mediante una manguera flexible y un regulador de flujo adecuado para el gas de prueba. La medición inicia con una fase de purga, donde se hace fluir el gas a través de la cámara, manteniendo abiertas las válvulas de entrada y salida durante 30 segundos. Este procedimiento asegura el desplazamiento completo del aire atmosférico residual por arrastre.

Una vez purgada la cámara, se procede al confinamiento de la muestra. Para ello, se cierra lentamente la válvula de salida mientras se reduce de forma simultánea el flujo de entrada. Esta operación controlada garantiza que la concentración de gas dentro de la cámara sea representativa de la concentración en el cilindro original. Finalmente, se cierra la válvula de entrada, aislando la muestra de gas.

Tras el sellado, se inicia la recopilación de datos. Para permitir un análisis de la varianza de los sensores, cada medición se registra durante un período de 1 minuto.



Figura 4.1: Instalación para medición de concentraciones

Los sensores que se utilizan para medir las concentraciones de gases están recopilados en la Tabla 4.1.

Tabla 4.1: Sensores de gas a utilizar y sus especificaciones

Modelo sensor	Gases	Rango	Dimensiones [mm]	Protocolo de comunicación/output	Voltaje
Senseair K33	CO ₂	0 – 10000 ppm	33.9x43x26	UART (<i>modbus, faststream</i>)	6-8.5VDC
ELT Sensor CH4-K100	CH ₄	0 – 5000 ppm	47x15x10	Análogo	12VDC

4.2 Conexión de los sensores

Debido a las diferencias de comunicación entre los sensores es necesario utilizar dos microcontroladores distintos para asegurar el funcionamiento óptimo de ambos sensores. Para el sensor K33 se utiliza una placa Arduino Mega, ya que esta placa es capaz de comunicarse mediante UART mientras se mantiene una conexión USB a un computador. Para el sensor CH4-K100 se utiliza una placa Arduino Uno, ya que la conexión análoga es muy simple en esta placa.

La alimentación del sistema completo proviene de una única fuente de poder, un adaptador de corriente AC que suministra 12VDC con una capacidad de 2A. Este voltaje se distribuye para energizar directamente las placas de desarrollo Arduino a través de sus conectores de alimentación

DC, así como el sensor de metano, cuyo rango de operación es compatible con esta tensión. Para el sensor Senseair K33, que requiere un voltaje de operación inferior (entre 6V y 8.5V), se interpuso un convertidor DC-DC tipo *step-down* basado en el chip LM2596. Este módulo se ajustó con un multímetro para proporcionar una salida estable de aproximadamente 7.5V, la cual se conectó al pin de alimentación principal del sensor. Se estableció una tierra común (GND) para todos los componentes para asegurar una referencia de voltaje consistente en todo el circuito.

La integración de los sensores con la unidad de control Arduino se realizó de acuerdo a las características específicas de cada uno. Para el sensor CH4-K100, se optó por la simplicidad de su salida de voltaje analógico. Su pin ‘AOUT’, que entrega una señal entre 0.5V y 4.5V, fue conectado directamente al pin de entrada analógica A0 del Arduino para su posterior digitalización y conversión a unidades de Partes Por Millón (PPM). Según la ficha técnica del sensor, el voltaje de salida es directamente proporcional a la concentración, la cual va desde 0 a 5000 ppm.

Por otro lado, el sensor K33 es de mejor calidad que el sensor CH4-K100, lo que significa que este tiene procesadores internos los cuales ya realizan la conversión de la medición a ppm, por lo que lo único que hay que hacer al conectarlo es leer la memoria interna de este para obtener los valores detectados.

La lectura de esta memoria interna se implementa utilizando el protocolo de comunicación digital *Modbus RTU*. El Arduino Mega, conectado al sensor a través de su puerto serie UART, asume el rol de "maestro" *Modbus*. Mediante la biblioteca *ModbusMaster.h*, el microcontrolador sondea activamente al sensor cada 5 segundos. Específicamente, se envía una solicitud para leer el registro de entrada en la dirección 0x0003. Esta dirección de registro es donde el sensor K33 almacena el valor de 16 bits que corresponde directamente a la concentración de CO₂ en PPM, ya procesada internamente por el sensor.

4.3 Diseño de experimentos

Debido a la disponibilidad tanto de gases como de sensores se decide realizar un diseño factorial donde se analicen los puntos máximos y mínimos de la concentración de las emisiones típicas de una PTAR. Esto se considera válido ya que, como se menciona en Sun et al. (2012), la interferencia por sensibilidad cruzada es un fenómeno que puede considerarse lineal.

Como los gases a analizar por los sensores son CH₄ y CO₂, se decide realizar un diseño factorial donde se realizan mediciones de cuatro puntos de concentración de la mezcla CH₄/CO₂, los cuales son:

- $C(\text{CH}_4) = 0, C(\text{CO}_2) = 0$
- $C(\text{CH}_4) = 1000, C(\text{CO}_2) = 0$

- $C(\text{CH}_4) = 0$, $C(\text{CO}_2) = 10000$
- $C(\text{CH}_4) = 1000$, $C(\text{CO}_2) = 10000$

Los gases fueron pedidos por Ainwater a la empresa Indura. Cada mezcla gaseosa viene en N_2 ya que este es un gas inerte que además no interactúa con la luz infrarroja que utilizan los sensores. Los cilindros cuentan con certificación acerca de la concentración de cada gas de la mezcla.

Capítulo 5

Resultados

5.1 Datos obtenidos

En la tabla 5.1 se pueden observar las mediciones de concentración obtenidas por cada sensor en cada caso. Se realizaron 4 repeticiones en la medición para cada punto, realizando así un total de 16 mediciones.

Tabla 5.1: Resultados de la medición de sensores de gases.

CO₂, ppm	CH₄, ppm	CO₂_sens, ppm	CH₄_sens, ppm
0	0	3	30
0	0	3	45
0	0	3	36
0	0	3	39
10000	0	10000	700
10000	0	10009	706
10000	0	10002	704
10000	0	10000	699
0	1000	7	1018
0	1000	8	1017
0	1000	6	1002
0	1000	7	1008
10000	1000	10010	1701
10000	1000	10009	1694
10000	1000	10008	1709
10000	1000	10004	1697

5.2 Análisis de datos

Los sensores miden cada 5 segundos, y se dejó funcionar por 1 minuto para cada repetición, por lo que se puede calcular la varianza de las mediciones. Luego de analizar estos datos se obtiene que la varianza de las mediciones del sensor de CH₄ son 307 ppm² y por lo tanto la desviación estándar son aproximadamente 18 ppm.

Con esto se estima el parámetro del modelo mencionado en la ecuación 3.2, minimizando la sumatoria de los residuos al cuadrado.

$$\Delta C_{CH_4} = b \cdot C_{CO_2} \quad (5.1)$$

Con los datos disponibles se obtiene que el valor del parámetro de corrección es de:

$$-0,0701 \pm 0,0015$$

Donde 0,0015 corresponde al intervalo de confiabilidad al 95% de probabilidad, por lo que se concluye que el parámetro es significativo.

Los residuos del modelo se ven centrados en 0 y aleatorios, como se observa en la Figura 5.1

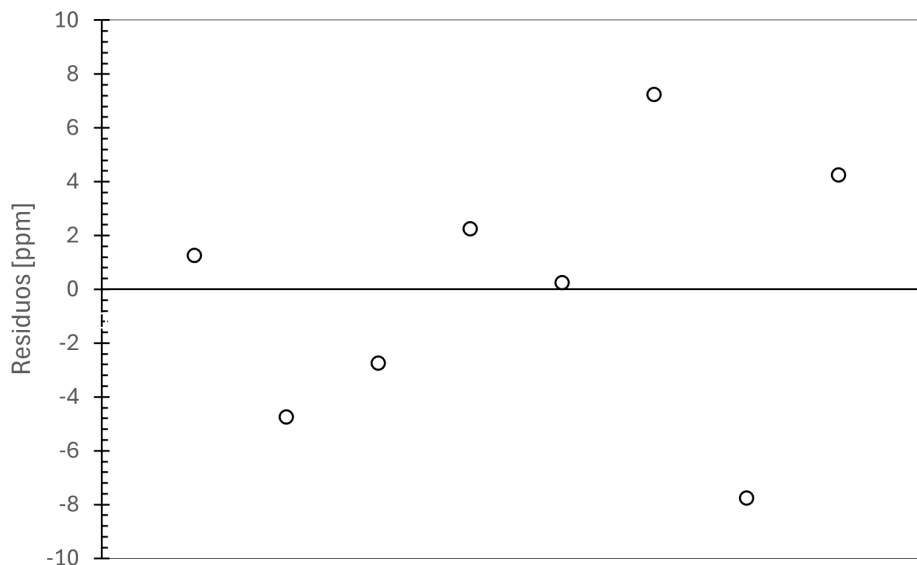


Figura 5.1: Residuos modelo corrección CH₄

Para validar el modelo de corrección se realiza ANOVA utilizando el error de medición del sensor como el error puro, para estimar esto, se calcula la varianza de las mediciones donde la concentración de CO₂ es 10000 ppm.

La varianza obtenida de aquí es de 8,2 ppm², mientras que la varianza de los residuos son 23,9

ppm². Con esta información se puede realizar el análisis de varianza, obteniéndose una varianza para la falta de ajuste de 35,7 ppm². Con esto se calculan los valores de F, obteniéndose un valor calculado de 4,36 y un valor crítico de 9,11; confirmando que no hay falta de ajuste.

Por otro lado, al realizar la modelación para la sensibilidad cruzada detectada en el sensor de CO₂ se obtiene que el factor de corrección es de

$$-0.0074 \pm 0.0079$$

Esto se debe a que la varianza de las mediciones es de 90 ppm², lo que causa que el intervalo de confianza del factor de corrección pase por el 0, haciendo que este sea no significativo.

Finalmente, se pueden corregir las mediciones del sensor de CH₄ utilizando directamente las mediciones del sensor de CO₂, ya que según los resultados obtenidos, estas mediciones son confiables, por lo que se pueden utilizar directamente aplicando el factor de corrección.

Las mediciones obtenidas se pueden observar en la Tabla 5.2

Tabla 5.2: Corrección utilizando factor calculado

CO ₂ , ppm	CH ₄ (real), ppm	CH ₄ (medido), ppm	CH ₄ (corregido), ppm
10000	0	700	-1
10009	0	706	4
10002	0	704	3
10000	0	699	-2
10010	1000	1701	999
10009	1000	1694	992
10008	1000	1709	1007
10004	1000	1697	995

5.3 Discusión

Los resultados obtenidos en este trabajo confirman el efecto de la sensibilidad cruzada del sensor NDIR de bajo costo para CH₄ (ELT Sensor CH4-K100) ante la presencia de CO₂. La magnitud del error inducido, del orden de +700 ppm (aproximadamente 70% de error) en la lectura de CH₄ con una concentración real de 0 ppm CH₄ y 10000 ppm de CO₂, es sustancial y demuestra la necesidad de corrección para obtener mediciones fiables en entornos como las PTAR, donde el CO₂ es a menudo el gas mayoritario. El modelo de corrección lineal desarrollado ($\Delta C_{CH_4} \approx -0.0701 \cdot C_{CO_2}$) resulta ser estadísticamente significativo y sin falta de ajuste según el análisis ANOVA, validando su aplicabilidad dentro del rango experimental estudiado. Si bien una comparación cuantitativa directa con otros trabajos es limitada por la escasez de coeficientes específicos $CO_2 \rightarrow CH_4$ en la literatura, la magnitud de la interferencia observada concuerda cualitativamente con la problemática general

de solapamiento espectral en NDIR multigas descrita por (Sun et al., 2012) para otros pares de gases. Por el contrario, la ausencia de interferencia significativa del CH_4 sobre el sensor de CO_2 de mayor calidad (Senseair K33) resalta la importancia de la calidad de los componentes ópticos, como los filtros, para minimizar este fenómeno, una observación consistente con la literatura.

Este estudio se centra en la interferencia entre CO_2 y CH_4 . Sin embargo, las emisiones de las PTAR también contienen óxido nitroso (N_2O), un GEI muy potente, y vapor de agua (H_2O), un conocido interferente en la espectroscopía infrarroja, que debido a la naturaleza del proceso, se suele arrastrar en el proceso de aireado. Ignorar la presencia de N_2O impide una evaluación completa de la huella de carbono. Además, la interferencia del H_2O , si no es compensada por el sensor o eliminada mediante pretratamiento de la muestra, podría introducir errores adicionales en mediciones de campo.

En caso de la instalación realizada por Ainwater en las PTAR seleccionadas para el estudio, el sistema utiliza una cúpula flotante para la captación de los gases emitidos en la superficie del reactor biológico. Estos gases son conducidos mediante mangueras hasta un gabinete de análisis situado en una pasarela adyacente. En la Figura 5.2 se observa este gabinete, donde se tiene un sistema de captura de humedad para así proteger los sensores y asegurar también que la humedad no produzca sensibilidad cruzada.



Figura 5.2: Gabinete de captación de gases

Capítulo 6

Conclusiones y Recomendaciones

Como conclusión principal, se tiene que el fenómeno de la sensibilidad cruzada existe entre los gases CH_4 y CO_2 , por lo que si se quiere monitorizar la concentración de estos en una planta de tratamiento de aguas residuales es necesario realizar algún tipo de corrección para obtener una medida precisa.

Por otro lado, se puede concluir que un sensor de buena calidad es suficiente para evitar este fenómeno, ya que el sensor K33 no presenta interferencia con la presencia de otros gases, debido a que al ser de mejor calidad, cuenta con filtros internos que evitan que se confundan las diferentes concentraciones de gases, especialmente en las concentraciones típicas que se emiten en las PTAR, ya que el CH_4 se puede considerar como una emisión menor, teniendo como concentración máxima 1000 ppm.

Se observa claramente la sensibilidad cruzada en el sensor de bajo costo de CH_4 debido a que este no cuenta con filtros al emitir la luz infrarroja, por lo que es susceptible a la interferencia, y además en las emisiones típicas de una PTAR, se tiene que la concentración de CO_2 es muy superior a la de CH_4 , lo que también explica los problemas de interferencia, ya que la cantidad de CO_2 presente absorbe una cantidad importante de luz infrarroja, causando la desviación.

Como trabajo futuro, se recomienda ampliar el alcance experimental para incluir el N_2O , dada su relevancia como GEI en PTAR. Esto implicaría incorporar un sensor NDIR específico para N_2O , se recomendaría en este caso utilizar el sensor multigas K96 de Senseair. Sería valioso caracterizar la sensibilidad cruzada de los sensores de CO_2 y CH_4 frente a N_2O , así como la del sensor de N_2O frente a los otros gases (CO_2 , CH_4). Con estos datos, se podría desarrollar un modelo de corrección multigas más completo, extendiendo el enfoque del sistema de ecuaciones lineales o explorando métodos de calibración multivariante o de machine learning. Adicionalmente, se debería evaluar cuantitativamente la eficacia de la trampa de condensado existente y, si es necesario, investigar la implementación de sistemas de secado de muestra más eficientes para mitigar de forma más robusta la interferencia del vapor de agua en aplicaciones de monitoreo continuo en PTAR. Por otro lado,

también se recomienda incluir un sensor de temperatura, ya que esta variable puede afectar las mediciones de concentración, y es una variable que cambia a largo plazo debido a la estacionalidad del proceso de tratamiento de aguas.

Finalmente, se recomienda la implementación de sensores de calidad mediana a alta en las PTAR para evitar este tipo de problemas, especialmente si se planea realizar campañas de monitoreo de emisiones, y, en el caso de que se utilicen sensores de bajo costo, estudiar el comportamiento de la interferencia posible que puedan sufrir estos en los rango de emisión de gases típicos de una planta de este tipo.

Referencias

- Campins-Falco, P., Meseguer-Lloret, S., Climent-Santamaria, T., and Molins-Legua, C. (2008). A microscale kjeldahl nitrogen determination for environmental waters. *Talanta*, 75(4):1123–1126.
- Huang, L., Li, H., and Li, Y. (2024). Greenhouse gas accounting methodologies for wastewater treatment plants: A review. *Journal of Cleaner Production*, 448.
- Massara, T. M., Solís, B., Guisasola, A., Katsou, E., and Baeza, J. A. (2018). Development of an asm2d-n2o model to describe nitrous oxide emissions in municipal wwtps under dynamic conditions. *Chemical Engineering Journal*, 335:185–196.
- Metcalf & Eddy Inc., Tchobanoglous, G., Stensel, H. D., Tsuchihashi, R., and Burton, F. (2014). *Wastewater Engineering: Treatment and Resource Recovery*. McGraw-Hill Education, New York, NY, fifth edition.
- Ministerio del Medio Ambiente (2025). Tendencia nacional - sistema nacional de inventarios de gases de efecto invernadero. Disponible en: <https://snichile.mma.gob.cl/resultados-principales/>. Consultado el 21 de noviembre de 2025.
- Morales, N., Ángeles Val del Río, Vázquez-Padín, J. R., Méndez, R., Mosquera-Corral, A., and Campos, J. L. (2015). Integration of the anammox process to the rejection water and main stream lines of wwtps. *Chemosphere*, 140:99–105. Wastewater-Energy Nexus: Towards Sustainable Wastewater Reclamation.
- Nguyen, T. K., Ngo, H. H., Guo, W. S., Chang, S. W., Nguyen, D. D., Nghiem, L. D., and Nguyen, T. V. (2020). A critical review on life cycle assessment and plant-wide models towards emission control strategies for greenhouse gas from wastewater treatment plants. *Journal of Environmental Management*, 264.
- Song, M. J., Choi, S., Bae, W. B., Lee, J., Han, H., Kim, D. D., Kwon, M., Myung, J., Kim, Y. M., and Yoon, S. (2020). Identification of primary effecters of n2o emissions from full-scale biological nitrogen removal systems using random forest approach. *Water Research*, 184.

- Sun, Q., Liu, T., Yu, X., and Huang, M. (2023). Non-interference ndir detection method for mixed gases based on differential elimination. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 390.
- Sun, Y. W., Zeng, Y., Liu, W. Q., Xie, P. H., Chan, K. L., Li, X. X., Wang, S. M., and Huang, S. H. (2012). Cross-interference correction and simultaneous multi-gas analysis based on infrared absorption. *Chinese Physics B*, 21.
- Superintendencia de Servicios Sanitarios (2022). Informe de gestión del sector sanitario. Disponible en: <https://www.siss.gob.cl/589/w3-article-19432.html>. Consultado el 30 de junio de 2024.
- Szelag, B., Zaborowska, E., and Makinia, J. (2023). An algorithm for selecting a machine learning method for predicting nitrous oxide emissions in municipal wastewater treatment plants. *Journal of Water Process Engineering*, 54.
- Vasilaki, V., Massara, T. M., Stanchev, P., Fatone, F., and Katsou, E. (2019). A decade of nitrous oxide monitoring in full-scale wastewater treatment processes: A critical review. *Water Research*, 161:392–412.
- Yang, Y., Jiang, J., Zeng, J., Chen, Z., Zhu, X., and Shi, Y. (2023). CH₄, C₂H₆, and CO₂ multi-gas sensing based on portable mid-infrared spectroscopy and PCA-BP algorithm. *Sensors*, 23(3):1413.