

UNIVERSIDAD DE NAVARRA

ESCUELA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES

SAN SEBASTIÁN



**NUEVA METODOLOGÍA DE MODELADO  
MATEMÁTICO INTEGRAL DE LAS EDAR**

**MEMORIA**

que para optar al Grado de Doctor por la Universidad de Navarra  
presenta

**PALOMA GRAU GUMBAU**

bajo la supervisión de:

Eduardo Ayesa Iturrate

San Sebastián, mayo de 2007

**Servicio de Publicaciones de la Universidad de Navarra**

**ISBN 84-8081-141-2**



*A mis padres*

*Por encima de las diferencias que las distinguen,  
hay una especial y profunda semejanza entre ciencia y fe  
en aquella tensión de continua búsqueda que anima a las dos...*

Juan Pablo II a los investigadores



# ***AGRADECIMIENTOS***

---

Al terminar esta tesis, no puedo dejar de mirar atrás y recordar el trayecto seguido hasta llegar aquí. En todos los recuerdos que me vienen a la cabeza aparecéis vosotros, que con vuestra ayuda, apoyo y amistad habéis sido decisivos en este trabajo. A algunos os conozco desde siempre. A muchos otros, he tenido la suerte de conocerlos durante estos años y quiero agradecerlos de forma especial vuestra buena acogida y el haber conseguido que siempre me haya sentido como en casa.

En primer lugar quiero agradecer a Eduardo Ayesa la confianza depositada en mí para llevar a cabo este trabajo, su implicación y su valiosa ayuda. Muchísimas gracias por todo lo que tanto profesional como humanamente, has aportado en mi formación durante estos años.

A Alejo Avello y Jose María Bastero por haberme dado la oportunidad de realizar esta tesis doctoral en el CEIT.

A Carlos Bastero por su confianza en mí dándome la oportunidad de realizar una tarea docente en la Escuela de Ingenieros de San Sebastián. Ha sido y está siendo una experiencia irrepetible de la que cada día aprendo algo distinto. Muchas gracias por tu apoyo y tus consejos durante estos años.

A los investigadores del departamento de Ingeniería Medioambiental. A Luis Larrea por darme la oportunidad de empezar en el departamento, por su disponibilidad a resolverme cualquier duda y por sus visitas ocasionales al despacho amenizando algunos momentos. A Ion Irizar por enseñarme qué es la perfección en el trabajo, por su ayuda en muchos aspectos de esta tesis y por todas sus conversaciones auténticas que siempre me hacen pensar. A Luis Sancho por responderme siempre a todas mis preguntas filosóficas acerca del mundo de las bacterias. A Antonio Salterain por su ayuda cuando la he necesitado y todos sus sabios consejos. A Jaime Luis García de las Heras por sus palabras de ánimo. Por supuesto, también quiero agradecer a Jaime González y Bixen del Barrio su buena acogida desde el primer día que llegué.

A Mónica de Gracia por su colaboración y ayuda en esta tesis. También quiero agradecerle su amistad desde el primer momento y el haber estado ahí siempre

que la he necesitado durante estos años. El haber recorrido este camino de forma paralela ha hecho que muchos momentos, sobretodo los de más agobio, tuvieran su lado divertido. Gracias por todo. También quiero agradecer a Sergio Beltrán su colaboración en este trabajo y el haber estado siempre dispuesto a ayudarme cuando lo he necesitado.

A todos mis compañeros en el departamento. Especialmente quiero agradecer su amistad y apoyo siempre que he recurrido a ellos a Esti, Jairo, Cristina, Claudia Saioa S., Enrique, Garbiñe, Leire y Janelcy. Especialmente a Janelcy quiero agradecerle sus palabras de ánimo y su ayuda en estos últimos meses. Por supuesto, también quiero agradecer a Jon, Teresa, Maite, Saioa A., Elena y Alain su buena disposición para cualquier cosa. Especialmente a Alain, le agradezco el haberme resuelto siempre mis problemillas con el WEST y a Jon, su ayuda con la asignatura de Química. No me olvido de Maria Elena Hidalgo a quien le agradezco toda su ayuda y dedicación en mis inicios en el mundo de los modelos matemáticos.

Agradezco la aportación del Consorcio de Aguas Bilbao-Bizcaia, a las empresas MSI, S. Coop. y Cadagua S.A. y al Gobierno Vasco su aportación en el proyecto realizado en el marco de esta tesis. Un agradecimiento especial a Jose Mari Sagarna y Joaquin Suescun.

I would like to thank Peter Vanrolleghem my staying at Ghent University, from which I have very good memories, and his collaboration and help in this work. Thanks to Usama Zaher for his collaboration during those days.

En estas páginas, también quiero acordarme de todos mis alumn@s desde la promoción XLI hasta la promoción XLVI. Especialmente quiero dar las gracias a mis asesoradas, y a todos aquell@s que durante estos años me han brindado su confianza y amistad. Vosotros habéis sido una de las mejores partes y más divertidas de todos estos años, y los que muchas veces me habéis animado a seguir con este trabajo.

A todo el personal de la Escuela de Ingenieros por su disponibilidad y su trato increíble. Especialmente quiero agradecer a l@s profesor@s Aitizber López, Paz Morer, Menchu Blanco, M<sup>a</sup>Jesús Álvarez y D. Francisco José Marín, toda su ayuda y sus consejos acerca de la docencia. Muchas gracias.

A Mariajo, Valen, Ane, Elena e Inés. Con vosotras he vivido muy buenos momentos y recuerdos inolvidables durante todos estos años. Aunque nuestras circunstancias han ido cambiando en este tiempo, hemos seguido manteniendo nuestra amistad y eso es lo que cuenta. A todas quiero daros las gracias por ser

tan buenas amigas. Por supuesto, también quiero agradecer a Itziar, Maite, Sergio y Arantza su amistad sincera desde el principio y el haberme integrado tan bien en las costumbres vascas, y navarras claro. A mi profe de inglés y amiga Rousmary, thanks for everything.

Finalmente quiero dar las gracias a mi familia. A Mercedes, Germán y Bea el haber estado dispuestos a ayudarme en cualquier momento. Por supuesto a Rosa, Vicente y Alicia. A mi hermana Rosa quiero darle las gracias por haber estado siempre ahí y por todos sus consejos, que siempre han sido acertados. Sabes que en esta tesis tú has tenido mucho que ver. A mi hermana Alicia quiero agradecerle sus palabras de ánimo en todo momento, su optimismo y alegría y sus visitillas veraniegas que han sido las mejores.

A mis padres. Gracias por vuestra confianza en mí desde el principio y vuestro apoyo incondicional en las decisiones que he tomado. Nunca voy a poder devolveros todo lo que habéis hecho por mí, y porque os lo debo todo, a vosotros os dedico esta tesis con todo mi cariño.

Por último quiero dar las gracias de forma muy especial a Diego. Tú has estado conmigo cada día y me has dado mucha fuerza para llegar hasta aquí con tu ayuda y tu paciencia infinita. Muchas gracias porque durante este año y medio (casi) que estamos casados, todos los días, incluso los difíciles, has sabido hacerme reír. Eres el mejor.





# ÍNDICE

---

|                                                                                                              |             |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|
| <b>AGRADECIMIENTOS.....</b>                                                                                  | <b>I</b>    |
| <b>ÍNDICE.....</b>                                                                                           | <b>V</b>    |
| <b>ÍNDICE DE FIGURAS .....</b>                                                                               | <b>XI</b>   |
| <b>ÍNDICE DE TABLAS .....</b>                                                                                | <b>XV</b>   |
| <b>RESUMEN.....</b>                                                                                          | <b>XVII</b> |
| <b>INTRODUCCIÓN.....</b>                                                                                     | <b>1</b>    |
| 0.1    Planteamiento del problema .....                                                                      | 1           |
| 0.2    Objetivos de la Tesis .....                                                                           | 3           |
| 0.3    Contenido de la Memoria .....                                                                         | 4           |
| <b>REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.....</b>                                                                           | <b>7</b>    |
| 1.1    Introducción.....                                                                                     | 7           |
| 1.2    Procesos bioquímicos, químicos y físico-químicos que tienen lugar en una EDAR urbana.....             | 8           |
| 1.2.1    Procesos bioquímicos .....                                                                          | 8           |
| 1.2.1.1    Biodegradación de materia orgánica .....                                                          | 9           |
| 1.2.1.2    Oxidación del nitrógeno .....                                                                     | 13          |
| 1.2.1.3    Captación y liberación biológica del fósforo inorgánico.....                                      | 15          |
| 1.2.2    Equilibrios químicos .....                                                                          | 16          |
| 1.2.3    Transferencias líquido-gas.....                                                                     | 17          |
| 1.3    Tecnologías empleadas en EDAR urbanas.....                                                            | 18          |
| 1.3.1    Tecnologías empleadas en el tratamiento primario.....                                               | 18          |
| 1.3.2    Tecnologías empleadas en el tratamiento secundario .....                                            | 19          |
| 1.3.2.1    Tecnología de fangos activados para la eliminación de materia orgánica .....                      | 20          |
| 1.3.2.2    Tecnología de fangos activados para la eliminación de materia orgánica y nitrógeno.....           | 21          |
| 1.3.2.3    Tecnología de fangos activados para la eliminación de materia orgánica, nitrógeno y fósforo ..... | 23          |
| 1.3.3    Tecnologías de tratamiento de los fangos producidos en la EDAR.....                                 | 24          |
| 1.3.3.1    Tecnologías de espesamiento de fangos.....                                                        | 25          |
| 1.3.3.2    Tecnologías de digestión de fangos.....                                                           | 26          |
| 1.4    Modelado matemático de los procesos que tienen lugar en una EDAR .....                                | 28          |

|                                                                |                                                                                                                      |           |
|----------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 1.4.1                                                          | Modelado matemático en el tratamiento de aguas residuales .....                                                      | 30        |
| 1.4.1.1                                                        | Formato y notación empleada en los modelos matemáticos de sistemas de fangos activados (ASM) de la IWA .....         | 33        |
| 1.4.1.2                                                        | Modelo del sistema de fangos activados para la eliminación de materia orgánica y nitrógeno ASM1 .....                | 35        |
| 1.4.1.3                                                        | Modelo del sistema de fangos activados para la eliminación de materia orgánica, nitrógeno y fósforo ASM2/ASM2d ..... | 37        |
| 1.4.1.4                                                        | Modelo del sistema de fangos activados para la eliminación de materia orgánica y nitrógeno ASM3 .....                | 39        |
| 1.4.2                                                          | Modelado matemático en la digestión anaerobia de fangos.....                                                         | 41        |
| 1.4.3                                                          | Modelo de digestión anaerobia ADM1 .....                                                                             | 43        |
| 1.5                                                            | Modelado integral de EDAR .....                                                                                      | 45        |
| 1.5.1                                                          | Interfaces entre modelos estándar .....                                                                              | 46        |
| 1.5.1.1                                                        | Interfaces ASM1-ADM1 propuestos por Copp et al. 2003 .....                                                           | 46        |
| 1.5.1.2                                                        | Interfaces CBIM .....                                                                                                | 52        |
| 1.5.2                                                          | Modelo único .....                                                                                                   | 53        |
| 1.5.2.1                                                        | Modelo general BioWin .....                                                                                          | 54        |
| 1.5.2.2                                                        | Modelo biológico BNRM1 .....                                                                                         | 55        |
| 1.6                                                            | Conclusiones .....                                                                                                   | 55        |
| <b>METODOLOGÍA PWM PARA EL MODELADO INTEGRAL DE EDAR .....</b> |                                                                                                                      | <b>59</b> |
| 2.1                                                            | Introducción.....                                                                                                    | 59        |
| 2.2                                                            | Descripción de la Metodología PWM .....                                                                              | 61        |
| 2.3                                                            | Lista Global de Transformaciones (LT) .....                                                                          | 62        |
| 2.3.1                                                          | Continuidad de masa y carga en la definición de la estequiometría .....                                              | 64        |
| 2.3.1.1                                                        | Descripción de los componentes .....                                                                                 | 64        |
| 2.3.1.2                                                        | Ecuación de continuidad en las transformaciones.....                                                                 | 74        |
| 2.3.2                                                          | Términos de activación e inhibición incluidos en las ecuaciones cinéticas .....                                      | 75        |
| 2.3.2.1                                                        | Términos de activación/inhibición en función de las condiciones ambientales.....                                     | 75        |
| 2.3.2.2                                                        | Términos de activación correspondientes a componentes fuente-sumidero .....                                          | 77        |
| 2.3.2.3                                                        | Términos de inhibición por pH .....                                                                                  | 78        |
| 2.3.3                                                          | Descripción de las transformaciones en base a su estequiometría y cinética .....                                     | 81        |
| 2.3.3.1                                                        | Transformaciones bioquímicas .....                                                                                   | 82        |
| 2.3.3.2                                                        | Transformaciones químicas.....                                                                                       | 101       |
| 2.3.3.3                                                        | Transformaciones fisico-químicas .....                                                                               | 102       |
| 2.3.3.4                                                        | Parámetros estequiométricos y cinéticos utilizados en las transformaciones .....                                     | 104       |
| 2.4                                                            | Procedimiento sistemático para la construcción de Modelos Integrales de EDAR .....                                   | 113       |
| 2.4.1                                                          | Construcción del Modelo de Transformaciones de Planta (PTM).....                                                     | 113       |
| 2.4.1.1                                                        | Selección de los Procesos Biológicos .....                                                                           | 114       |

|         |                                                                                                          |     |
|---------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 2.4.1.2 | Selección de las poblaciones activas de bacterias requeridas para describir los Procesos Biológicos..... | 114 |
| 2.4.1.3 | Selección de las transformaciones bioquímicas asociadas las poblaciones activas de bacterias.....        | 115 |
| 2.4.1.4 | Incorporación de las transformaciones de equilibrios ácido-base y líquido-gas .....                      | 117 |
| 2.4.2   | Construcción de los Modelos de Proceso Unitario (UPM).....                                               | 121 |
| 2.5     | Construcción de los Modelos Integrales de EDAR (PWM).....                                                | 123 |
| 2.6     | Análisis estequiométrico basado en el Vector de Componentes de Planta (PCV) .....                        | 123 |
| 2.7     | Conclusiones .....                                                                                       | 124 |

## **APLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA PWM AL CASO DE ESTUDIO BSM2** .....125

|         |                                                                                                                                 |     |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 3.1     | Introducción.....                                                                                                               | 126 |
| 3.2     | Descripción de la EDAR BSM2 .....                                                                                               | 127 |
| 3.3     | Construcción del modelo integral de EDAR BSM2 (BSM2 PWM) .....                                                                  | 128 |
| 3.3.1   | Construcción del Modelo de Transformaciones de Planta.....                                                                      | 128 |
| 3.3.2   | Construcción de los Modelos de Proceso Unitario .....                                                                           | 131 |
| 3.3.2.1 | Modelo de Proceso Unitario Reactor Biológico.....                                                                               | 132 |
| 3.3.2.2 | Modelo de Proceso Unitario Decantador primario.....                                                                             | 138 |
| 3.3.2.3 | Modelo de Proceso Unitario de decantador secundario .....                                                                       | 139 |
| 3.3.2.4 | Modelos de Proceso Unitario espesador y separador sólido-líquido<br>140                                                         |     |
| 3.3.2.5 | Descripción de las interfaces entre el PCV y las variables compuestas $X_T$ y $S_T$ .....                                       | 141 |
| 3.3.3   | Obtención del modelo integral de EDAR BSM2 PWM .....                                                                            | 144 |
| 3.4     | Validación del modelo BSM2 PWM.....                                                                                             | 144 |
| 3.4.1   | Implantación del modelo BSM2 PWM en la plataforma de simulación WEST .....                                                      | 144 |
| 3.4.1.1 | Creación de la categoría de Modelos Integrales de EDAR (PWM) ..<br>.....                                                        | 145 |
| 3.4.1.2 | Construcción del modelo de EDAR BSM2 PWM en la plataforma de simulación WEST.....                                               | 145 |
| 3.4.2   | Evaluación por simulación del modelo BSM2 PWM.....                                                                              | 146 |
| 3.4.2.1 | Validación del BSM2 PWM en los procesos de eliminación de materia orgánica y nitrógeno en condiciones aerobias y anóxicas ..... | 146 |
| 3.4.2.2 | Validación del modelo BSM2 PWM en el proceso de digestión anaerobia .....                                                       | 148 |
| 3.5     | Análisis comparativo de las diferentes propuestas de modelado integral de EDAR .....                                            | 149 |
| 3.5.1   | Comparación del BSM2 PWM con el Modelo Bioquímico Único.....                                                                    | 150 |
| 3.5.2   | Comparación del BSM2 PWM con interfaces ASM1-ADM1 .....                                                                         | 150 |
| 3.5.2.1 | Comparación con las interfaces propuestos por Copp <i>et al.</i> , 2003....<br>.....                                            | 151 |
| 3.5.2.2 | Comparación con las interfaces CBIM ASM1-ADM1 .....                                                                             | 153 |

|                                                                        |                                                                                                         |     |
|------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 3.6                                                                    | Conclusiones .....                                                                                      | 156 |
| <b>METODOLOGÍA DE CARACTERIZACIÓN AUTOMÁTICA DEL INFLUENTE.....159</b> |                                                                                                         |     |
| 4.1                                                                    | Introducción.....                                                                                       | 159 |
| 4.2                                                                    | Fundamentos: Relación entre medidas analíticas y componentes del modelo.<br>.....                       | 161 |
| 4.3                                                                    | Caracterización del influente .....                                                                     | 165 |
| 4.3.1                                                                  | Parámetros de estimación .....                                                                          | 166 |
| 4.3.2                                                                  | Restricciones consideradas .....                                                                        | 167 |
| 4.3.3                                                                  | Parámetros y variables de información.....                                                              | 169 |
| 4.3.4                                                                  | Criterio de resolución .....                                                                            | 169 |
| 4.3.5                                                                  | Método de minimización de la función objetivo .....                                                     | 172 |
| 4.4                                                                    | Caso de aplicación: Caracterización del agua residual influente a la EDAR de Galindo-Bilbao.....        | 174 |
| 4.4.1                                                                  | Parámetros y variables de información.....                                                              | 175 |
| 4.4.2                                                                  | Definición de los parámetros de la función objetivo .....                                               | 178 |
| 4.4.3                                                                  | Resultados obtenidos .....                                                                              | 179 |
| 4.4.4                                                                  | Caracterización del influente para modelos de fangos activados convencionales (ASM1 y ASM2).....        | 183 |
| 4.4.4.1                                                                | Caracterización del vector de componentes del ASM1.....                                                 | 183 |
| 4.4.4.2                                                                | Caracterización del vector de componentes del ASM2.....                                                 | 185 |
| 4.5                                                                    | Conclusiones .....                                                                                      | 186 |
| <b>OPTIMIZACIÓN DE LA OPERACIÓN DE LA EDAR DE GALINDO .....189</b>     |                                                                                                         |     |
| 5.1                                                                    | Introducción.....                                                                                       | 190 |
| 5.2                                                                    | Descripción de la EDAR de Galindo.....                                                                  | 191 |
| 5.2.1                                                                  | Configuración de la EDAR de Galindo .....                                                               | 192 |
| 5.2.1.1                                                                | Configuración de la línea de aguas.....                                                                 | 192 |
| 5.2.1.2                                                                | Configuración de la línea de fangos.....                                                                | 194 |
| 5.2.2                                                                  | Sistema SCADA convencional.....                                                                         | 195 |
| 5.2.3                                                                  | Sistema SCADA supervisor.....                                                                           | 195 |
| 5.3                                                                    | Modelo de la línea de aguas de la EDAR de Galindo.....                                                  | 197 |
| 5.3.1                                                                  | Construcción del Modelo LAguas Galindo PWM.....                                                         | 197 |
| 5.3.1.1                                                                | Construcción del Modelo de Transformaciones de Planta (PTM) ....<br>.....                               | 198 |
| 5.3.1.2                                                                | Construcción de los Modelos de Proceso Unitario (UPM) .....                                             | 199 |
| 5.3.1.3                                                                | Construcción del modelo LAguas Galindo PWM.....                                                         | 199 |
| 5.3.2                                                                  | Verificación del modelo de la línea de aguas de la EDAR de Galindo.....                                 | 201 |
| 5.3.2.1                                                                | Estudios previos de calibración del modelo ASM1 en la EDAR de Galindo .....                             | 201 |
| 5.3.2.2                                                                | Verificación del modelo LAguas Galindo PWM .....                                                        | 203 |
| 5.4                                                                    | Diseño de una estrategia de operación óptima y control en la línea de aguas de la EDAR de Galindo ..... | 206 |
| 5.4.1                                                                  | Estrategia óptima de operación en la EDAR de Galindo.....                                               | 207 |
| 5.4.2                                                                  | Descripción de la estrategia de control avanzado .....                                                  | 208 |

|                                                                                              |                                                                                                                                       |            |
|----------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 5.4.2.1                                                                                      | Control de amonio efluente .....                                                                                                      | 209        |
| 5.4.2.2                                                                                      | Control del proceso de desnitrificación.....                                                                                          | 211        |
| 5.4.2.3                                                                                      | Control de la masa de sólidos en los reactores .....                                                                                  | 211        |
| 5.4.3                                                                                        | Calibración de los controladores.....                                                                                                 | 213        |
| 5.4.3.1                                                                                      | Caracterización del proceso en lazo abierto .....                                                                                     | 213        |
| 5.4.3.2                                                                                      | Sintonización de los parámetros del controlador.....                                                                                  | 217        |
| 5.4.4                                                                                        | Verificación por simulación de la estrategia de control avanzado.....                                                                 | 218        |
| 5.4.5                                                                                        | Implantación y validación experimental en la EDAR real de Galindo de la estrategia de control avanzado .....                          | 222        |
| 5.5                                                                                          | Exploración de la operación integrada en la EDAR de Galindo.....                                                                      | 227        |
| 5.5.1                                                                                        | Exploración de la operación de la EDAR de Galindo con digestión anaerobia de fangos.....                                              | 228        |
| 5.5.1.1                                                                                      | Configuración de la EDAR de Galindo con digestión anaerobia de fangos .....                                                           | 228        |
| 5.5.1.2                                                                                      | Construcción del modelo integral de EDAR de Galindo con digestión anaerobia LAguas+LFangos1 Galindo PWM.....                          | 229        |
| 5.5.1.3                                                                                      | Resultados obtenidos en la exploración .....                                                                                          | 233        |
| 5.5.2                                                                                        | Exploración de la operación de la EDAR con digestión anaerobia de fangos y tratamiento de sobrenadantes procedentes de digestor ..... | 239        |
| 5.5.2.1                                                                                      | Configuración de la EDAR de Galindo con digestión anaerobia de fangos y tratamiento de sobrenadantes.....                             | 239        |
| 5.5.2.2                                                                                      | Construcción del modelo integral con digestión anaerobia y procesos Sharon-Anammox LAguas+LFangos2 Galindo PWM .....                  | 240        |
| 5.5.2.3                                                                                      | Resultados obtenidos en la exploración .....                                                                                          | 243        |
| 5.6                                                                                          | Conclusiones .....                                                                                                                    | 248        |
| <b>CONCLUSIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN.....</b>                                   |                                                                                                                                       | <b>251</b> |
| 6.1                                                                                          | Conclusiones .....                                                                                                                    | 251        |
| 6.2                                                                                          | Futuras líneas de investigación.....                                                                                                  | 255        |
| <b>REFERENCIAS .....</b>                                                                     |                                                                                                                                       | <b>257</b> |
| <b>ANEXO A. CÁLCULO DE PARÁMETROS QUÍMICOS Y FÍSICO-QUÍMICOS .....</b>                       |                                                                                                                                       | <b>269</b> |
| A.1                                                                                          | Cálculo de las constantes de los equilibrios químicos .....                                                                           | 269        |
| A.2                                                                                          | Cálculo de las constantes de Henry .....                                                                                              | 270        |
| A.3                                                                                          | Cálculo de la presión de vapor de equilibrio del agua .....                                                                           | 271        |
| A.4                                                                                          | Cálculo de los coeficientes de transferencia líquido-Gas .....                                                                        | 271        |
| <b>ANEXO B. ESTEQUIOMETRÍA, CINÉTICAS Y PARÁMETROS EMPLEADOS EN EL MODELO BSM2 PWM .....</b> |                                                                                                                                       | <b>273</b> |
| B.1                                                                                          | Modelo de transformaciones de Planta (PTM) y Vector de Componentes de Planta (PCV).....                                               | 273        |
| B.2                                                                                          | Variables de operación y definición del influente en el Modelo BSM2 PWM .....                                                         | 281        |

|                                                                                                   |                                                                                                                |            |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| B.3                                                                                               | Párametros estequiométricos y cinéticos empleados en el PTM del modelo BSM2 PWM .....                          | 283        |
| B.4                                                                                               | Párametros empleados en el transporte de masa de los modelos de proceso unitario (MPU).....                    | 287        |
| <b>ANEXO C. CONSTRUCCIÓN DE LAS INTERFACES CBIM ASM1-ADM1 ...</b>                                 |                                                                                                                | <b>289</b> |
| C.1                                                                                               | Procedimiento de construcción de interfaces CBIM .....                                                         | 289        |
| C.2                                                                                               | Construcción deL interfaz CBIM ASM1→ADM1 .....                                                                 | 294        |
| C.3                                                                                               | Construcción del Interfaz CBIM ADM1→ASM1 .....                                                                 | 300        |
| <b>ANEXO D. MODELOS DE DECANTACIÓN EMPLEADOS EN EL MODELO BSM2 PWM .....</b>                      |                                                                                                                | <b>305</b> |
| D.1                                                                                               | Modelo de decantación primaria Otterphol and Freud .....                                                       | 305        |
| D.2                                                                                               | Modelo de capas para la decantación secundaria .....                                                           | 310        |
| <b>ANEXO E. ESTEQUIOMETRÍA, CINÉTICAS Y PARÁMETROS EMPLEADOS EN LOS MODELOS GALINDO PWM .....</b> |                                                                                                                | <b>315</b> |
| E.1                                                                                               | Modelo de transformaciones de Planta (PTM) y Vector de Componentes (PCV) en el Modelo LAguas Galindo PWM ..... | 315        |
| E.2                                                                                               | Caracterización del influente en el Modelo LAguas Galindo PWM .....                                            | 322        |
| E.3                                                                                               | Estequiometría y Cinéticas de las transformaciones incorporadas en el modelo LAguas+LFangos1 Galindo PWM ..... | 323        |
| E.4                                                                                               | Estequiometría y Cinéticas de las transformaciones incorporadas en el modelo LAguas+LFangos2 Galindo PWM ..... | 327        |
| E.5                                                                                               | Párametros estequiométricos y cinéticos empleados en el PTM de los modelos Galindo PWM .....                   | 328        |
| <b>ANEXO F. ARTÍCULOS CIENTÍFICOS GENERADOS .....</b>                                             |                                                                                                                | <b>333</b> |

# ÍNDICE DE FIGURAS

---

|                                                                                                                                              |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Figura 1.1. Esquema del proceso de biodegradación de materia orgánica en condiciones aerobias y anaerobias propuesto en Gijzen. (2001) ..... | 10  |
| Figura 1.2. Esquema de la tecnología de fangos activados convencional .....                                                                  | 21  |
| Figura 1.3. Esquema de la tecnología de fangos activados contacto-estabilización .....                                                       | 21  |
| Figura 1.4. Esquema de la tecnología de fangos activados DN .....                                                                            | 22  |
| Figura 1.5. Esquema de la tecnología Bardenpho .....                                                                                         | 22  |
| Figura 1.6. Esquema de la tecnología de alimentación escalonada .....                                                                        | 22  |
| Figura 1.7. Esquema del sistema de fangos activados RDN .....                                                                                | 23  |
| Figura 1.8. Esquema de la tecnología A2/O .....                                                                                              | 24  |
| Figura 1.9. Esquema de la tecnología UCT .....                                                                                               | 24  |
| Figura 1.10. Esquema de las líneas de aguas y fangos en una EDAR .....                                                                       | 25  |
| Figura 1.11. Componentes y transformaciones del modelo ASM1 .....                                                                            | 35  |
| Figura 1.12. Componentes y transformaciones del modelo ASM2d .....                                                                           | 38  |
| Figura 1.13. Componentes y transformaciones del modelo ASM3 .....                                                                            | 40  |
| Figura 1.14. Componentes y transformaciones del modelo ADM1 .....                                                                            | 44  |
| Figura 1.15. Conversión de la DQO .....                                                                                                      | 47  |
| Figura 1.16. Conversión del TKN .....                                                                                                        | 47  |
| Figura 1.17. Esquema del paso A de la interfaz ASM1 $\rightarrow$ ADM1 .....                                                                 | 48  |
| Figura 1.18. Esquema del paso B de la interfaz ASM1 $\rightarrow$ ADM1 .....                                                                 | 49  |
| Figura 1.19. Esquema del paso C de la interfaz ASM1 $\rightarrow$ ADM1 .....                                                                 | 49  |
| Figura 1.20. Esquema del paso D del transformador ASM1 $\rightarrow$ ADM1 .....                                                              | 50  |
| Figura 1.21. Transformación de la DQO en ADM1 $\rightarrow$ ASM1 .....                                                                       | 51  |
| Figura 1.22. Transformación del N en ASM1 $\rightarrow$ ADM1 .....                                                                           | 51  |
| Figura 1.23. Esquema de las matrices de Petersen en las interfaces CBIM .....                                                                | 52  |
| Figura 2.1. Librería de Transformaciones LT .....                                                                                            | 63  |
| Figura 2.2. Término de inhibición de la acidogénesis y acetogénesis .....                                                                    | 79  |
| Figura 2.3. Término de inhibición por pH de la actividad de las Nitrosomonas .....                                                           | 80  |
| Figura 2.4. Actividad biológica de las bacterias $X_{bh}$ en condiciones aerobias .....                                                      | 117 |
| Figura 2.5. Actividad biológica de las bacterias $X_{bh}$ en condiciones anóxicas .....                                                      | 118 |
| Figura 2.6. Actividad biológica de las bacterias $X_{pao}$ en condiciones aerobias .....                                                     | 118 |
| Figura 2.7. Actividad biológica de las bacterias $X_{su}$ .....                                                                              | 118 |
| Figura 2.8. Actividad biológica de las bacterias $X_{aa}$ .....                                                                              | 119 |
| Figura 2.9. Actividad biológica de las bacterias $X_{fa}$ .....                                                                              | 119 |
| Figura 2.10. Actividad biológica de las bacterias $X_{c4}$ .....                                                                             | 119 |
| Figura 2.11. Esquema del procedimiento de construcción de PTM .....                                                                          | 120 |
| Figura 2.12. Interfaz entre dos Modelos de Proceso Unitario mediante el PCV .....                                                            | 121 |
| Figura 3.1. Esquema de la EDAR BSM2 .....                                                                                                    | 127 |
| Figura 3.2. Transformaciones seleccionadas en la construcción del PTM .....                                                                  | 130 |
| Figura 3.3. Esquema del Reactor Biológico cerrado .....                                                                                      | 132 |
| Figura 3.4. Esquema del Reactor Biológico abierto .....                                                                                      | 136 |



|                                                                                                                                                                       |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Figura 3.5. Esquema del modelo Otterpohl-Freud.....                                                                                                                   | 138 |
| Figura 3.6. Esquema del espesador y separador sólido-líquido.....                                                                                                     | 140 |
| Figura 3.7. Conversión de PCV a $S_T$ .....                                                                                                                           | 142 |
| Figura 3.8. Conversión de PCV a $X_T$ .....                                                                                                                           | 142 |
| Figura 3.9. Esquema de la EDAR BSM2 en la plataforma de simulación WEST.....                                                                                          | 145 |
| Figura 3.10. Sustrato soluble y particulado obtenido con los modelos ASMI y BSM2PWM.....                                                                              | 147 |
| Figura 3.11. $N-NH_x$ y $N-NO_x$ obtenido con los modelos ASMI y BSM2 PWM.....                                                                                        | 148 |
| Figura 3.12. Esquema del modelo integral de EDAR BSM2 con interfaces.....                                                                                             | 151 |
| Figura 3.13. $N$ soluble efluente y $Q_{CH_4}$ en el digestor anaerobio.....                                                                                          | 152 |
| Figura 3.14. Concentración de $S_{su}$ a la salida del interfaz ASMI $\rightarrow$ ADMI.....                                                                          | 155 |
| Figura 3.15. $S_{IC}$ a la salida del interfaz ASMI $\rightarrow$ ADMI.....                                                                                           | 155 |
| Figura 3.16. $S_{h+}$ a la salida del interfaz ASMI $\rightarrow$ ADMI.....                                                                                           | 155 |
| Figura 4.1. Esquema del algoritmo de optimización.....                                                                                                                | 173 |
| Figura 4.2. Fraccionamiento de la DQO total en el modelo ASMI.....                                                                                                    | 184 |
| Figura 4.3. Fraccionamiento de la DQO total en base a LT.....                                                                                                         | 184 |
| Figura 5.1. Vista panorámica de la EDAR de Galindo (Bilbao).....                                                                                                      | 191 |
| Figura 5.2. Esquema de una de las líneas del tratamiento biológico.....                                                                                               | 193 |
| Figura 5.3. Esquema de la línea de fangos de la EDAR de Galindo.....                                                                                                  | 194 |
| Figura 5.4. Esquema de la estructura jerárquica de control que incluye un sistema supervisor.....                                                                     | 196 |
| Figura 5.5. Interfaz del SCADA supervisor.....                                                                                                                        | 196 |
| Figura 5.6. Transformaciones seleccionadas en el modelo LA Galindo PWM.....                                                                                           | 200 |
| Figura 5.7. Purga de sólidos adicional en el decantador secundario.....                                                                                               | 203 |
| Figura 5.8. Ajuste de SS en la zona DN con los modelos ASMI y LAguas Galindo PWM.....                                                                                 | 204 |
| Figura 5.9. Ajuste de la concentración de $N-NO_x$ en la zona DN.....                                                                                                 | 205 |
| Figura 5.10. Ajuste de $N-NH_4$ en el efluente con los modelos ASMI y Galindo PWM.....                                                                                | 205 |
| Figura 5.11. Lazo supervisor de $N-NH_4$ medio efluente.....                                                                                                          | 210 |
| Figura 5.12. Lazo supervisor del potencial de desnitrificación.....                                                                                                   | 211 |
| Figura 5.13. Lazo de control de la masa de sólidos en el sistema.....                                                                                                 | 212 |
| Figura 5.14. Modelo estático del proceso.....                                                                                                                         | 214 |
| Figura 5.15. Modelo estático del proceso.....                                                                                                                         | 214 |
| Figura 5.16. Respuesta de la concentración de $N-NO_3$ ante una entrada.....                                                                                          | 215 |
| Figura 5.17. Respuesta de la concentración de $N-NH_4$ ante una entrada.....                                                                                          | 216 |
| Figura 5.18. Respuesta del $NH_4$ efluente ante cambios escalón en el valor de OD.....                                                                                | 216 |
| Figura 5.19. Respuesta del $NH_4$ efluente y Masa de sólidos ante cambios escalón en el valor de OD y $Q_{purga}$ respectivamente.....                                | 217 |
| Figura 5.20. Influyente horario utilizado en el estudio por simulación.....                                                                                           | 219 |
| Figura 5.21. Simulación de la concentración de SST en la zon DN y producción de fangos cuando la EDAR es operada con y sin estrategias de control avanzado.....       | 221 |
| Figura 5.22. Concentración de $NH_4$ efluente y consumo de aire en el primer reactor aerobio cuando la EDAR es operada con y sin estrategias de control avanzado..... | 222 |
| Figura 5.23. Concentración de $NH_4$ efluente y valor de referencia de OD durante la validación experimental.....                                                     | 223 |

|                                                                                                                                                                             |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Figura 5.24. Masa de sólidos en la EDAR y setpoint del Caudal de purga durante la validación experimental.....                                                              | 224 |
| Figura 5.25. $N\text{-NO}_3$ en le reactor D y valor de referencia de caudal de recirculación interna durante la validación experimental.....                               | 225 |
| Figura 5.26. OD disuelto y Caudal de aire durante el período de validación experimental.....                                                                                | 225 |
| Figura 5.27. Configuración de la EDAR de Galindo con digestión anaerobia.....                                                                                               | 228 |
| Figura 5.28. Esquema de las transformaciones seleccionadas en el modelo <i>LAguas+LFangos1 Galindo PWM</i> .....                                                            | 232 |
| Figura 5.29. Resultados obtenidos por simulación del incremento en la concentración de $N\text{-NH}_4$ con la incorporación del digestor de fangos.....                     | 234 |
| Figura 5.30. $N\text{-NH}_4$ medio (24 h) en el efluente obtenido por simulación cuando se incorpora la línea de fangos con digestor anaerobio.....                         | 234 |
| Figura 5.31. Consumo de aire en el primer reactor aireado (N1) obtenido por simulación cuando se incorpora la línea de fangos digestor anaerobio.....                       | 235 |
| Figura 5.32. $N\text{-NO}_3$ en el efluente obtenido por simulación cuando se incorpora la línea de fangos con digestor anaerobio.....                                      | 235 |
| Figura 5.33. Caudal de recirculación interna obtenido por simulación cuando se incorpora el retorno de la línea de fangos con digestor anaerobio.....                       | 236 |
| Figura 5.34. Predicción por simulación de la generación de fangos en la EDAR con y sin digestor de fangos.....                                                              | 237 |
| Figura 5.35. Predicción por simulación del caudal de metano obtenido en el digestor anaerobio.....                                                                          | 237 |
| Figura 5.36. Configuración de la EDAR de Galindo ampliada con la línea de fangos y procesos Sharon-Anammox.....                                                             | 240 |
| Figura 5.37. Esquema de las transformaciones seleccionadas en el modelo <i>LAguas+LFangos2 Galindo PWM</i> .....                                                            | 242 |
| Figura 5.38. Resultados obtenidos por simulación de la concentración de $N\text{-NH}_4$ y $N\text{-NO}_2$ en el digestor anaerobio y en los reactores Sharon y Anammox..... | 245 |
| Figura 5.39. Resultados obtenidos por simulación del OD y consumo de $kLa$ en el reactor Sharon.....                                                                        | 246 |
| Figura 5.40. Incremento en la concentración de $N\text{-NH}_4$ obtenido por simulación con la incorporación del digestor de fangos y tratamientos de sobrenadantes.....     | 246 |
| Figura 5.41. $N\text{-NH}_4$ y $N\text{-NO}_3$ obtenidos por simulación en el efluente cuando se consideran los procesos Sharon-Anammox.....                                | 247 |



# **ÍNDICE DE TABLAS**

---

|                                                                                                                            |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Tabla 2.1. Componentes disueltos .....                                                                                     | 66  |
| Tabla 2.2. Componentes particulados y gaseosos.....                                                                        | 67  |
| Tabla 2.3. Compuestos de referencia.....                                                                                   | 69  |
| Tabla 2.4. Factores de conversión de componentes disueltos.....                                                            | 72  |
| Tabla 2.5. Factores de conversión de componentes particulados y gaseosos .....                                             | 73  |
| Tabla 2.6. Coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero .....                                          | 74  |
| Tabla 2.7. Crecimiento de $X_h$ en condiciones aerobias.....                                                               | 84  |
| Tabla 2.8. Eliminación de Fósforo en condiciones aerobias.....                                                             | 86  |
| Tabla 2.9. Nitrificación en dos etapas .....                                                                               | 88  |
| Tabla 2.10. Crecimiento anóxico de $X_h$ con $S_{no3-}$ .....                                                              | 90  |
| Tabla 2.11. Crecimiento anóxico de $X_h$ con $S_{no2-}$ .....                                                              | 91  |
| Tabla 2.12. Actividad de las bacterias $X_{pao}$ en condiciones anóxicas .....                                             | 92  |
| Tabla 2.13. Crecimiento de las bacterias Anammox .....                                                                     | 92  |
| Tabla 2.14. Acidogénesis o fermentación ácida .....                                                                        | 94  |
| Tabla 2.15. Acetogénesis.....                                                                                              | 95  |
| Tabla 2.16. Metanogénesis .....                                                                                            | 95  |
| Tabla 2.17. Desaparición de las poblaciones de bacterias .....                                                             | 97  |
| Tabla 2.18. Desaparición de los productos almacenados en $X_{pao}$ .....                                                   | 98  |
| Tabla 2.19. Desintegración de los componentes complejos .....                                                              | 99  |
| Tabla 2.20. Hidrólisis de componentes particulados .....                                                                   | 100 |
| Tabla 2.21. Equilibrios ácido-base .....                                                                                   | 101 |
| Tabla 2.22. Transferencias líquido-gas.....                                                                                | 103 |
| Tabla 2.23. Precipitación y redisolución del fósforo .....                                                                 | 104 |
| Tabla 2.24. Parámetros estequiométricos correspondientes a fraccionamientos .....                                          | 105 |
| Tabla 2.25. Parámetros estequiométricos correspondientes a rendimientos de crecimiento de las bacterias .....              | 106 |
| Tabla 2.26. Velocidades máximas específicas de consumo de sustrato .....                                                   | 107 |
| Tabla 2.27. Velocidades de desaparición de biomasa.....                                                                    | 108 |
| Tabla 2.28. Constantes de saturación en el consumo de sustrato .....                                                       | 109 |
| Tabla 2.29. Constantes de activación e inhibición.....                                                                     | 110 |
| Tabla 2.30. Constantes de desintegración e hidrólisis .....                                                                | 110 |
| Tabla 2.31. Constantes cinéticas de equilibrios químicos .....                                                             | 109 |
| Tabla 2.32. Constantes de equilibrio químicos.....                                                                         | 111 |
| Tabla 2.33. Constantes de velocidad de transferencia líquido-gas .....                                                     | 111 |
| Tabla 2.34. Constantes de Henry.....                                                                                       | 112 |
| Tabla 2.35. Coeficientes de difusividad .....                                                                              | 112 |
| Tabla 2.36. Relación entre Procesos Biológicos y poblaciones activas de microorganismos.....                               | 115 |
| Tabla 2.37. Relación entre la actividad de las poblaciones de bacterias y las transformaciones consideradas en la LT ..... | 116 |

|                                                                                                                                       |     |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Tabla 3.1. Características físicas de la EDAR BSM2.....                                                                               | 127 |
| Tabla 3.2. Composición atmosférica seca y Humedad relativa.....                                                                       | 137 |
| Tabla 4.1. Relación entre medidas analíticas un componentes del modelo.....                                                           | 162 |
| Tabla 4.2. Parámetros de estimación correspondientes a concentraciones.....                                                           | 166 |
| Tabla 4.3. Parámetros de estimación correspondientes a fracciones másicas.....                                                        | 166 |
| Tabla 4.4. Parámetros de estimación correspondientes.....                                                                             | 167 |
| Tabla 4.5. Restricciones correspondientes a equilibrios químicos.....                                                                 | 168 |
| Tabla 4.6. Restricciones correspondientes a las fracciones másicas y coeficientes de desintegración.....                              | 168 |
| Tabla 4.7. Restricciones correspondientes las composiciones másicas de $X_{c1}$ y $X_{c2}$ .....                                      | 168 |
| Tabla 4.8. Medidas analíticas realizadas en los años 92/93.....                                                                       | 175 |
| Tabla 4.9. Estimación inicial correspondiente a concentraciones y fracciones másicas.....                                             | 177 |
| Tabla 4.10. Estimación inicial correspondiente a fraccionamientos de $X_{c1}$ y $X_{c2}$ .....                                        | 178 |
| Tabla 4.11. Errores relativos de las medidas analíticas realizadas en la caracterización del agua influente a la EDAR de Galindo..... | 178 |
| Tabla 4.12. Parámetros de estimación obtenidos.....                                                                                   | 180 |
| Tabla 4.13. Comparación entre medidas reales y estimadas.....                                                                         | 181 |
| Tabla 4.14. Caracterización del vector de componentes del modelo ASM1.....                                                            | 183 |
| Tabla 4.15. Caracterización del vector de componentes del modelo ASM2.....                                                            | 185 |
| Tabla 5.1. Caudales y contaminación de entrada a la EDAR de Galindo.....                                                              | 192 |
| Tabla 5.2. Calidad del efluente requerida en la EDAR de Galindo.....                                                                  | 192 |
| Tabla 5.3. Elementos incluidos en la decantación primaria.....                                                                        | 193 |
| Tabla 5.4. Dimensiones físicas de la EDAR de Galindo.....                                                                             | 194 |
| Tabla 5.5. Características de los elementos de la línea de fangos.....                                                                | 195 |
| Tabla 5.6. Coeficientes del modelo ASM1 obtenidos en la primera calibración.....                                                      | 202 |
| Tabla 5.7. Valor de las variables de operación en la estrategia de operación convencional.....                                        | 220 |
| Tabla 5.8. Valor de las variables de operación en la estrategia de operación avanzada.....                                            | 220 |
| Tabla 5.9. Valor de las variables de operación en la estrategia de operación avanzada en la validación experimental.....              | 223 |
| Tabla 5.9. Resultados obtenidos en los cuatro estudios por simulación.....                                                            | 238 |

# *RESUMEN*

---

Tras una revisión del potencial y las limitaciones de los principales modelos matemáticos existentes para describir de manera conjunta los procesos unitarios de las Estaciones Depuradoras de Aguas Residuales (EDAR), la presente tesis desarrolla una nueva metodología de modelado. Esta metodología permite la construcción sistemática y rigurosa de modelos integrales de planta capaces de reproducir las mutuas interrelaciones entre los diferentes elementos de las líneas de aguas y fangos, garantizando en todo momento la continuidad de masa elemental y carga.

La nueva metodología desarrollada, denominada metodología PWM (Plant Wide Modelling) está basada en la utilización de una lista genérica de transformaciones de las que se eligen las más adecuadas para los procesos que tienen lugar en cada EDAR objeto de estudio. La definición de los componentes en sus fracciones másicas elementales permite garantizar la continuidad de masa y carga en cada transformación y a lo largo de toda la planta.

La definición de los componentes en base a sus fracciones másicas ha sido utilizada para el desarrollo de un algoritmo para la caracterización automática del influente. Este algoritmo ha sido empleado con éxito en la caracterización del agua residual influente de la EDAR de Galindo (Bilbao).

La metodología PWM propuesta ha sido utilizada para la construcción de un modelo integral para un caso de estudio estándar (BSM2). El modelo obtenido ha sido verificado en diferentes escenarios de simulación. Posteriormente se ha llevado a cabo un análisis comparativo entre la utilización del modelo de EDAR obtenido frente a otras propuestas de modelado integral existentes en la bibliografía.

Se ha construido un modelo integral para la EDAR Galindo-Bilbao de acuerdo con la metodología PWM. El modelo obtenido ha sido utilizado en la validación de una estrategia de control automático en la línea de aguas de la EDAR. Posteriormente se ha llevado a cabo una exploración de la operación de la EDAR en escenarios hipotéticos que consideran de forma conjunta líneas de aguas y fangos.

La exposición finaliza con el capítulo dedicado a las conclusiones del estudio realizado, la bibliografía utilizada y una serie de anexos que proporcionan información adicional a la incluida en la memoria.

# CAPÍTULO 0

## INTRODUCCIÓN

---

### 0.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

El modelado matemático y la simulación numérica de los diferentes procesos unitarios que forman parte de las EDAR (Estación Depuradora de Aguas Residuales) han demostrado en los últimos años ser herramientas de gran potencial en el diseño, operación y control de las EDAR. Son cada día más numerosas las empresas de ingeniería que diseñan sus tecnologías de tratamiento de aguas o fangos utilizando la ayuda de aplicaciones informáticas de simulación capaces de explorar el comportamiento dinámico del proceso ante diferentes condiciones de operación. En este sentido, es importante destacar las tareas del CEIT en este campo durante los últimos años en los que se han desarrollado diferentes versiones de simuladores dinámicos para el proceso de fangos activados. Estos simuladores están siendo aplicados en la actualidad por Universidades y empresas de ingeniería, tanto como herramienta de diseño de nuevas plantas (Rivas and Ayesa, 1997; Rivas *et al.*, 2001; Suescun *et al.*, 1994) como para optimizar su operación (Ayesa *et al.*, 1998; Ayesa *et al.*, 2001; Galarza *et al.*, 2001a).

Sin embargo, la utilización de modelos matemáticos como herramienta de apoyo en la optimización de la operación de las EDAR reales presenta algunas dificultades tanto en el desarrollo de estos modelos como en su posterior



utilización. Por un lado, el modelado matemático de cada uno de los procesos unitarios (ejemplo: reactores de fangos activados, decantadores, espesadores, digestores, filtros, etc.) ha estado generalmente orientado a describir específicamente los principales mecanismos de cada uno de los elementos por separado. Este planteamiento, aunque ha dado lugar a un gran número de modelos matemáticos y aplicaciones informáticas, presenta limitaciones para analizar dinámicamente la planta en su globalidad. Debe tenerse en cuenta, que una EDAR real, a diferencia de los procesos individuales, es un sistema en el que muchos de los elementos unitarios están interrelacionados entre sí y las actuaciones sobre uno de ellos tienen repercusión sobre los restantes. En este sentido, por ejemplo, es especialmente relevante para la explotación de las EDAR el efecto de los retornos líquidos de la línea de fangos sobre el funcionamiento y eficiencia de los tratamientos biológicos de la línea de aguas. Por otro lado, la utilización eficiente de los simuladores de operación de EDAR requiere de un modelo matemático adecuadamente calibrado y que prediga de forma realista el comportamiento dinámico de la EDAR estudiada. Dentro de la calibración, uno de los aspectos más decisivos y que entraña mayor dificultad es la caracterización del influente.

Por lo tanto, una evaluación del comportamiento global de la EDAR para establecer criterios de diseño y operación óptimos, requiere de modelos que consideren el comportamiento dinámico de todos los procesos unitarios integrados en esta EDAR. Sin embargo, la obtención de modelos integrales que garanticen la continuidad de la masa y carga no es una tarea sencilla, principalmente por dos motivos:

En primer lugar, debido a la diferente descripción de los procesos bioquímicos en los modelos de proceso unitario existentes en la actualidad. Debe tenerse en cuenta que en la construcción de un modelo válido siempre debe conjugarse que el modelo sea lo suficiente descriptivo para reproducir los procesos de forma realista y que el modelo describa estos procesos de la forma más sencilla posible. En la actualidad, este doble requisito ha desembocado en la existencia de una amplia variedad de modelos matemáticos con diferentes grados de complejidad y transformaciones muy diferentes en función de las características de los procesos a reproducir y de los objetivos de modelado.

En segundo lugar, debido a que tradicionalmente los componentes de los modelos no se han expresado mediante su contenidos en masa elemental sino mediante la *Demanda Química de Oxígeno* (DQO) y sus contenidos en N, P, C, etc., dependiendo de los requisitos del modelo. El hecho de que los

componentes se expresen mediante una medida analítica y no en base a su masa y composición elemental, aunque simplifica en muchos casos la descripción de las transformaciones, implica un grado de incertidumbre sobre la cantidad de masa elemental y carga que dificulta el análisis de la continuidad de masa en las transformaciones internas del modelo y en la conexión entre modelos de diferentes procesos unitarios.

Como soluciones para la obtención de modelos integrales de EDAR, hasta el momento se han propuesto dos alternativas diferentes. La primera de ellas, está basada en un *Modelo Único* que incluye todos los componentes y transformaciones necesarios para reproducir el comportamiento de todos los elementos de proceso unitario incluidos en la EDAR. La segunda alternativa propone la construcción de *Interfaces* específicos entre los modelos estándar más conocidos y empleados.

En base a esta problemática y combinando diferentes aspectos de las dos propuestas existentes, en esta tesis se propone una nueva metodología de modelado integral de EDAR. Los principios en los que se basa esta metodología permiten, además de la construcción de modelos integrales de EDAR, una garantía de continuidad y seguimiento exhaustivo de la masa elemental y carga a lo largo de modelo facilitando además el problema de la caracterización del influente.

Los principales objetivos de esta tesis se detallan a continuación.

## 0.2 OBJETIVOS DE LA TESIS

El principal objetivo de esta tesis consiste en el desarrollo de una nueva metodología de modelado integral de EDAR, incluyendo las líneas de agua y fangos, que permita obtener modelos matemáticos capaces de reproducir el comportamiento dinámico del sistema en su conjunto y garantizando en todo momento la continuidad de masa elemental y carga.

Este objetivo global puede desglosarse en los siguientes objetivos parciales:

- Desarrollar un procedimiento sistemático para la construcción de modelos integrales de EDAR.
- Desarrollar un algoritmo de caracterización automática del influente

- Verificar la metodología desarrollada utilizando dos casos de estudio:
  - Evaluación el comportamiento dinámico del modelos en el escenario de simulación estándar BSM2 (*Benchmark Simulation N°2*).
  - Optimización de la operación de la EDAR de Galindo, Bilbao mediante estrategias de control automático y exploración de posibles alternativas de tratamientos de fangos.

### 0.3 CONTENIDO DE LA MEMORIA

El contenido de la Tesis está distribuido en 6 capítulos. A continuación se describe el contenido de cada uno de ellos.

En el **Capítulo 1** se describen los fundamentos de los procesos bioquímicos que tienen lugar en una EDAR que incluye tratamientos de aguas residuales y fangos y las tecnologías más utilizadas en la actualidad. A continuación se describen los modelos matemáticos más comunes empleados para describir estas tecnologías. Finalmente, se sintetizan las soluciones propuestas hasta el momento para construir modelos integrales de EDAR.

En el **Capítulo 2** se presenta la metodología de modelado integral de EDAR propuesta en esta tesis. En primer lugar, se describe la lista de transformaciones utilizada como base para la construcción de cualquier modelo integral. Posteriormente, se detalla el procedimiento sistemático a seguir para la construcción de modelos integrales de EDAR.

En el **Capítulo 3** se construye un modelo integral para la EDAR BSM2 (*Benchmark Simulation Model n°2*) de acuerdo con la metodología de modelado integral propuesta en esta tesis. Posteriormente, el modelo obtenido se valida en diferentes escenarios de simulación y finalmente se realiza un análisis comparativo entre esta metodología y otras propuestas de modelado integral de EDAR.

En el **Capítulo 4** se describe una metodología de caracterización automática del agua residual o fango influente. En primer lugar se exponen los fundamentos de esta metodología. En segundo lugar se propone un algoritmo de optimización a partir del cual se va a llevar a cabo la caracterización del influente. Finalmente,

se lleva a cabo como ejemplo, la caracterización del agua residual influente a la EDAR de Galindo-Bilbao.

En el **Capítulo 5** se construye un modelo integral para la EDAR de Galindo, Bilbao. Se verifica el comportamiento del modelo obtenido en la línea de aguas de la EDAR. En base al modelo obtenido, en primer lugar se estudia la operación óptima en la línea de aguas de la EDAR de Galindo mediante la implantación de una estrategia de control avanzado. Este estudio, se lleva a cabo inicialmente por simulación y posteriormente, la estrategia de operación óptima se valida experimentalmente en la EDAR real. En segundo lugar, se lleva a cabo una exploración de la operación de la EDAR de Galindo cuando se consideran de forma conjunta las líneas de aguas residuales y fangos. Para esta exploración, el modelo de EDAR construido previamente se amplía de acuerdo con los nuevos procesos considerados. En esta exploración se analizan los efectos que tendrían los procesos de digestión anaerobia y Sharon-Anammox en el comportamiento global de la EDAR.

Finalmente, en el **Capítulo 6** se enumeran las conclusiones derivadas de los resultados obtenidos en esta tesis y se proponen futuras líneas de investigación.

#### ANEXOS

- A. Cálculo de parámetros químicos y físico-químicos
- B. Estequiometría, cinéticas y parámetros empleados en el modelo BSM2 PWM
- C. Construcción de las interfaces CBIM ASM1-ADM1
- D. Modelos de decantación empleados en el modelo BSM2 PWM
- E. Estequiometría, cinéticas y parámetros empleados en los modelos Galindo PWM
- F. Artículos científicos generados



# *CAPÍTULO 1*

## ***REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA***

---

### **1.1 INTRODUCCIÓN**

Desde que en los inicios del siglo XX se pusieron en marcha las primeras EDAR urbanas ha habido una larga evolución tanto en su diseño como en su operación. Así, a lo largo de los años, las configuraciones que han ido adoptando las EDAR y las tecnologías que han ido incluyendo han permitido una eliminación más eficiente de la contaminación (materia orgánica, nutrientes, tratamiento de los fangos producidos, etc.), acorde con las restricciones impuestas por los organismos gubernamentales.

De forma paralela al desarrollo de nuevas tecnologías y configuraciones en las EDAR, los esfuerzos por parte de la comunidad científica para obtener modelos matemáticos que describan el comportamiento estacionario y dinámico de las EDAR han sido continuos. También en el campo del modelado matemático de EDAR ha existido un continuo avance debido a los progresos obtenidos en el conocimiento de la microbiología, a las nuevas tecnologías de EDAR propuestas y a las mejoras computacionales alcanzadas a lo largo de los años. Así, en la actualidad existen un gran número de plataformas de simulación en el mercado que permiten estudiar de forma estacionaria o dinámica distintas posibilidades en el diseño, operación y control de las EDAR.

En este capítulo, y de acuerdo con el objetivo de esta tesis, se describen los siguientes puntos principales.

En primer lugar, se exponen brevemente los principales procesos bioquímicos, químicos y físico-químicos que tienen lugar en una EDAR urbana tanto en el tratamiento de aguas residuales como en el de fangos.

En segundo lugar se presentan las tecnologías más comúnmente empleadas en las EDAR urbanas tanto para el tratamiento de aguas residuales como el de fangos.

En tercer lugar se describen los modelos matemáticos dinámicos más conocidos y empleados para describir estas tecnologías.

Finalmente, se expone la problemática actual en el modelado matemático de EDAR que incluyen diferentes tecnologías, y las soluciones propuestas hasta el momento.

## **1.2 PROCESOS BIOQUÍMICOS, QUÍMICOS Y FÍSICO-QUÍMICOS QUE TIENEN LUGAR EN UNA EDAR URBANA**

### **1.2.1 Procesos bioquímicos**

Los procesos bioquímicos que tienen lugar en la depuración de las aguas residuales urbanas y en el tratamiento de los fangos obtenidos, están basados en una serie de reacciones llevadas a cabo por distintas poblaciones de bacterias. Estas reacciones, que pueden darse en rangos de temperaturas entre 0 y 40°C (mesófilo) o entre 40 y 60 °C (termófilo), están catalizadas por una serie de enzimas suministrados por las bacterias, que permiten que su velocidad sea aceptable a temperaturas muy por debajo de las requeridas en ausencia de estos catalizadores.

De forma general, las reacciones bioquímicas pueden dividirse en intra o extracelulares dependiendo de si éstas se dan en el interior o fuera de las paredes celulares de las bacterias.

Las reacciones extracelulares, conocidas como reacciones de hidrólisis, consisten en una ruptura de enlaces químicos en medio acuoso. Mediante estas reacciones, la complejidad de los componentes orgánicos en un agua residual o fango queda reducida hasta un punto en el cual éstos pueden ser asimilados por las bacterias a través de la membrana celular.

Las reacciones intracelulares consisten en una serie de reacciones de tipo oxidación-reducción (metabolismo) a partir de las cuales se obtiene una cantidad de energía (catabolismo) y materia celular (anabolismo). Estas reacciones por tanto, implican una transferencia de electrones desde un donador de electrones, que suele entenderse como el alimento disponible, a un aceptor de electrones. Aunque comúnmente este donador de electrones consiste en materia orgánica, con algunos tipos de bacterias la materia inorgánica reducida (amonio, sulfuros, hidrógeno molecular, etc.) puede utilizarse como donador de electrones y por tanto como fuente de energía.

Las poblaciones de bacterias capaces de oxidar materia orgánica para la obtención de energía reciben el nombre de bacterias heterótrofas mientras que aquellas capaces de oxidar la materia inorgánica se denominan autótrofas. Dentro de esta clasificación general, existen poblaciones más específicas cuyo metabolismo está asociado a determinados compuestos orgánicos o inorgánicos y en condiciones ambientales determinadas. Así, en el metabolismo de las poblaciones de bacterias activas en condiciones aerobias, el oxígeno actúa como aceptor de electrones reduciéndose mientras que los donadores de electrones orgánicos o inorgánicos quedan oxidados. En ausencia de oxígeno o en condiciones anaerobias, otros compuestos como nitratos, sulfatos, dióxido de carbono, etc., pueden actuar como aceptores de electrones.

A continuación se presentan los procesos bioquímicos más relevantes que tienen lugar en una EDAR urbana, describiendo las reacciones redox que incluyen estos procesos y las características más importantes de las poblaciones de bacterias que los llevan a cabo.

#### **1.2.1.1 Biodegradación de materia orgánica**

La materia orgánica presente en un agua residual está constituida principalmente por carbohidratos, proteínas o lípidos, o en su forma hidrolizada, azúcares, aminoácidos y ácidos grasos de cadena larga (LCFA).



Mientras que los azúcares, aminoácidos y LCFA son utilizados directamente por las bacterias heterótrofas como fuente de energía, la biodegradación de carbohidratos, proteínas y lípidos requiere de una hidrólisis previa mediante la cual se da una solubilización enzimática de la materia orgánica particulada. Éste es un proceso lento y se considera muchas veces como el paso limitante en la degradación de materia orgánica.

En la biodegradación de la materia orgánica, las reacciones bioquímicas que tienen lugar dependen del compuesto que actúe como aceptor de electrones y como consecuencia, de las estrategias metabólicas seguidas por las bacterias (Gijzen, 2001). Si la biodegradación se da en condiciones aerobias, donde el oxígeno actúa como aceptor de electrones, la materia orgánica queda totalmente oxidada o mineralizada obteniendo como productos finales dióxido de carbono y agua. En condiciones anaerobias sin embargo, también pueden darse transformaciones de fermentación en las que el mismo compuesto en parte se oxida y en parte se reduce sin necesidad de aceptores de electrones. En la Figura 1.1 se representa de forma esquemática los productos obtenidos en la degradación de la materia orgánica en función del aceptor de electrones.

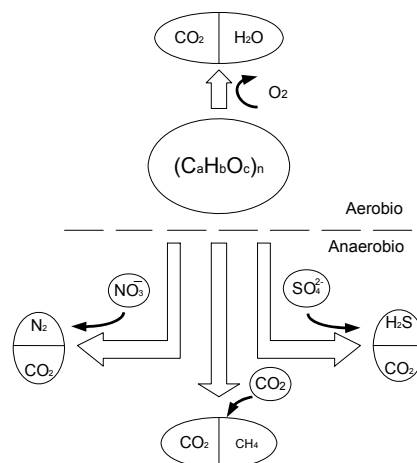
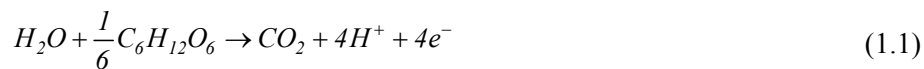


Figura 1.1. Esquema del proceso de biodegradación de materia orgánica en condiciones aerobias y anaerobias propuesto en Gijzen. (2001)

- *Biodegradación o mineralización de materia orgánica en condiciones aerobias*

En condiciones aerobias, los azúcares, aminoácidos y ácidos grasos de cadena larga son oxidados completamente a dióxido de carbono y agua. Concretamente en el caso de los aminoácidos, éstos sufren previamente a su oxidación a dióxido de carbono y agua, una desaminación o amonificación, a partir de la cual su contenido en nitrógeno en forma de grupo amina queda liberado al medio en forma de amoníaco/amonio (Sawyer *et al.*, 1994). A modo de ejemplo, las siguientes reacciones muestran la oxidación de materia orgánica representada por la fórmula molecular de la glucosa y la consecuente reducción del oxígeno.



Las poblaciones de bacterias que llevan a cabo estas reacciones de oxidación reciben comúnmente el nombre general de heterótrofas aerobias. El rango de temperaturas en el que estas bacterias permanecen activas abarca desde los 10 hasta los 60 °C, incluyéndose dentro del grupo de las mesofílicas si permanecen activas entre 10 y 40°C, o dentro de las termofílicas si lo hacen entre 40 y 60°C. Las poblaciones de bacterias heterótrofas aerobias presentan cierta sensibilidad al pH, aunque ésta es mucho menos acentuada que en el caso de las bacterias autótrofas o heterótrofas anaerobias. En el tratamiento de aguas residuales, en el que normalmente el pH suele estar comprendido entre los valores 7-8, no se observa ninguna variación en la actividad de las bacterias. Sin embargo, en tratamientos de fangos en condiciones aerobias, en los que las variaciones de pH pueden ser mucho más acentuadas, se observa una disminución considerable de la actividad de las bacterias cuando se alcanzan valores de pH alrededor de 5 (Mavinic and Koers, 1982).

- *Biodegradación de materia orgánica en condiciones anaerobias*

Tal y como se ha mencionado anteriormente, las condiciones anaerobias están caracterizadas por la ausencia de oxígeno molecular, y por tanto, otros compuestos actúan como aceptores de electrones. Específicamente cuando los aceptores de electrones son nitritos (NO<sub>2</sub><sup>-</sup>) o nitratos (NO<sub>3</sub><sup>-</sup>), la biodegradación de materia orgánica se lleva a cabo por una población de bacterias llamadas

facultativas capaces de oxidar la materia orgánica en presencia de oxígeno, o en presencia de nitritos y nitratos (condiciones anóxicas), indistintamente. En condiciones anóxicas, la biodegradación de materia orgánica se lleva a cabo mediante una oxidación completa o mineralización de ésta y los nitratos quedan reducidos a nitrógeno molecular ( $N_2$ ) siguiendo la siguiente ruta.



Finalmente, la degradación anaerobia de materia orgánica es un proceso algo más complejo en el que la materia orgánica sufre transformaciones tanto de fermentación como de oxidación, y en el que están involucradas distintas poblaciones de bacterias que actúan de forma más selectiva.

Generalmente, el proceso de degradación anaerobia incluye una acidificación de los productos solubles como azúcares, aminoácidos y ácidos grasos de cadena larga y una posterior conversión de los productos obtenidos a metano (metanogénesis). La acidificación, a su vez, se divide en los procesos llamados acidogénesis o fermentación y acetogénesis.

La acidogénesis consiste en una serie de reacciones de fermentación que se dan sin ningún aceptor o donador de electrones externo (Gujer and Zehnder, 1983). En estas reacciones, los azúcares y aminoácidos se degradan a compuestos más simples tales como ácido acético, propiónico y butírico. En el caso de los aminoácidos, y al igual que en condiciones aerobias, la desaminación o amonificación en la cual el N se libera al medio en forma de amonio/amoniaco se da previamente a la fermentación.

En la acetogénesis se da la oxidación de los ácidos grasos de cadena larga y de los ácidos grasos volátiles con más de dos carbonos obtenidos en esta oxidación y en la acidogénesis. Las poblaciones de bacterias que llevan a cabo esta oxidación son las acetogénicas y los productos obtenidos son ácido acético e hidrógeno molecular ( $H_2$ ) gas. A continuación se muestran las oxidaciones de los ácidos butírico y propiónico:



Tal y como se observa en las ecuaciones (1.4) y (1.5), la acetogénesis no es siempre termodinámicamente favorable, y como requerimiento, exige mantener

la concentración de  $H_2$  en valores bajos. Esto se consigue mediante la relación sintrófica que existe entre las bacterias acetogénicas y las metanogénicas hidrogenófilas, las cuales consumen este  $H_2$ .

Finalmente, la metanogénesis es la etapa en la que se obtiene como producto final el metano. Este proceso es llevado a cabo por dos poblaciones de bacterias conocidas como acetoclastas (*Methanotrix* y *Methanosarcina*) e hidrogenófilas. Las primeras producen aproximadamente un 75% del metano total obtenido por medio de la descarboxilación del acetato (1.6). Las segundas combinan  $H_2$  y  $CO_2$  para formar el 25% restante (1.7). Estas segundas permiten mantener concentraciones de  $H_2$  bajas en el reactor de forma que las transformaciones llevadas a cabo por las acetogénicas sean termodinámicamente favorables.



De forma general, la energía libre liberada en las transformaciones de oxidación-reducción en condiciones anaerobias es mucho menor que la liberada en condiciones aerobias, lo que se traduce en un menor rendimiento en la obtención de materia celular en estas condiciones.

El efecto del pH en la degradación de materia orgánica en condiciones anaerobias es algo más significativo que en condiciones aerobias. Así, para el caso de las bacterias acidogénicas se ha observado que, aunque a valores de pH entre 6 y 7, no se observa ninguna variación en la actividad de éstas, la velocidad de crecimiento disminuye notoriamente a valores de pH 8 (25%) y 5 (55%) (Horiuchi *et al.*, 2002). Sin embargo, la población de bacterias metanogénicas son las que presentan una mayor sensibilidad ante variaciones de pH. Así, estas bacterias únicamente permanecen activas en un rango de pH entre 6.4 y 7.8 (Grady *et al.*, 1999).

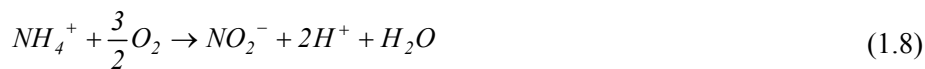
### 1.2.1.2 Oxidación del nitrógeno

El nitrógeno presente en un agua residual se encuentra mayoritariamente en forma de nitrógeno amoniacal ( $NH_4^+$ ) y nitrógeno contenido en proteínas y aminoácidos, que tal y como se ha mencionado anteriormente, sufre una amonificación previa a la oxidación de los aminoácidos.

El nitrógeno amoniacal presente en un agua residual puede actuar como donador de electrones en presencia de poblaciones de bacterias autótrofas. Estas bacterias, mediante la oxidación del nitrógeno amoniacal en condiciones aerobias o anaerobias, y a partir del carbono inorgánico del medio obtienen energía suficiente para su metabolismo.

- *Oxidación del nitrógeno en condiciones aerobias*

La oxidación en condiciones aerobias del  $\text{NH}_4^+$  es conocida como proceso de nitrificación. El proceso de nitrificación se da en dos etapas consecutivas llevadas a cabo por las bacterias *Nitrosomonas*, que oxidan el  $\text{NH}_4^+$  a  $\text{NO}_2^-$ , y *Nitrobacter*, que oxidan el  $\text{NO}_2^-$  a  $\text{NO}_3^-$ . Las dos reacciones de oxidación se muestran a continuación:



En condiciones de temperatura ambiente (10-20°C), a la que suele darse el proceso de eliminación de N en un agua residual, la velocidad de crecimiento de las *Nitrobacter* es casi el doble que la de las *Nitrosomonas* (Wett and Rauch, 2003) y por tanto, la concentración de  $\text{NO}_2^-$  en EDAR urbanas toma valores próximos a cero. Por el contrario, a temperaturas altas (30-40°C), es la población de *Nitrosomonas* la que presenta una mayor velocidad de crecimiento y puesto que la segunda etapa es la limitante, se favorece la nitrificación parcial del  $\text{NH}_4^+$  a  $\text{NO}_2^-$  (Hellings *et al.*, 1999). Estas diferencias en las velocidades de las dos reacciones de oxidación dependiendo del intervalo de temperaturas, permite, tal y como se detallará en el siguiente Apartado, que el proceso de nitrificación pueda utilizarse para la eliminación del nitrógeno amoniacal en aguas de muy diferentes características como pueden ser las aguas residuales urbanas o las aguas sobrenadantes procedentes del digestor anaerobio.

Las poblaciones de bacterias *Nitrosomonas* y *Nitrobacter* presentan un comportamiento mucho más sensible ante variaciones de pH que las bacterias heterótrofas aerobias o facultativas (Henze *et al.*, 1997). Así, las bacterias *Nitrosomonas* presentan un comportamiento óptimo a un valor de pH de 8,1 y las *Nitrobacter* a valores de 7,9. En valores de pH por debajo de 6,5 y por

encima de 9 la nitrificación está completamente inhibida (Grunditz and Dalhammar, 2001).

- *Oxidación del nitrógeno en condiciones anaerobias*

Finalmente, en condiciones anaerobias, la oxidación del  $\text{NH}_4^+$  a nitrógeno molecular ( $\text{N}_2$ ) puede darse, mediante un proceso llamado Anammox, empleando los nitritos como aceptor de electrones (Hao et al., 2002).

La transformación de oxidación-reducción se muestra a continuación:



Las poblaciones de bacterias que llevan a cabo este proceso fueron identificadas por primera vez en (Mulder *et al.*, 1995) y recibieron el nombre de *Brocadia Anammoxidans*. En la actualidad se han detectado otras poblaciones capaces de llevar a cabo esta oxidación (*Scalindua brodae*, *Scalindua wagneri*, etc.)

Las poblaciones de bacterias conocidas comúnmente como bacterias Anammox requieren condiciones estrictamente anaerobias y se caracterizan por obtener rendimientos en la obtención de materia celular muy inferiores a otras poblaciones de bacterias.

### 1.2.1.3 Captación y liberación biológica del fósforo inorgánico

Gran parte del fósforo presente en un agua residual se encuentra en forma de ortofosfatos, polifosfatos o formando parte de compuestos orgánicos.

Dentro de las poblaciones de bacterias heterótrofas, existe una población específica de bacterias comúnmente conocidas como bacterias PAO (*Phosphate Accumulating Organisms*) que tienen la capacidad de, de forma alterna, liberar fósforo al medio en forma de ortofosfatos y almacenarlo en forma de polifosfatos en el interior de las paredes celulares.

En las bacterias PAO, la liberación de fósforo desde el interior de las paredes celulares en forma de ortofosfatos, lleva asociada una liberación de energía que las bacterias emplean para captar ácidos grasos volátiles (VFA) del medio y almacenarlo en el interior de sus paredes celulares en forma de poli-hidroxi-alcanoatos (PHA). Este proceso de liberación del fósforo, aunque puede darse en cualquier condición ambiental, se observa mayoritariamente en condiciones anaerobias.

Por otro lado, en condiciones aerobias o anóxicas, las bacterias PAO llevan a cabo la oxidación del PHA almacenado en su interior. La energía obtenida en esta oxidación es empleada por estas bacterias para capturar el fósforo del medio en forma de ortofosfatos en cantidades superiores a las necesarias para la síntesis celular, reponiendo así las reservas de polifosfatos.

La actividad de las bacterias PAO se da en condiciones de temperatura mesófilas y presenta cierta sensibilidad ante variaciones de pH, tanto en la liberación de fosfatos, como en su crecimiento en condiciones aerobias y anóxicas. Así, aunque la velocidad a la que se da la liberación de fosfatos a partir de la captación de VFA no se ve alterada ante variaciones de pH, la relación fósforo liberado/VFA captado varía desde 0,24 hasta 0,73 gP/ gDQO entre pH de 5,5 hasta 8,5 (Smolders *et al.*, 1995a). Por otro lado, se ha observado que valores de pH superiores o inferiores a un valor óptimo de 7,4, provocan una disminución en el crecimiento y captación de ortofosfatos de las bacterias acumuladoras de fósforo (Filipe *et al.*, 2001b).

### 1.2.2 Equilibrios químicos

En aguas residuales o fangos, existen ciertos compuestos capaces de conferirles una capacidad de amortiguamiento que les previene de variaciones bruscas de pH durante el transcurso de los procesos bioquímicos. Estos compuestos son ácidos o bases débiles, que mediante una serie de equilibrios químicos establecidos con sus respectivas parejas ácido/base, permiten mantener el agua residual en valores cercanos a pH neutro, siempre y cuando la aparición o desaparición de ácidos ó  $H^+$  en el medio no sea demasiado acentuada.

El principal responsable de la capacidad de amortiguamiento en un agua residual es el equilibrio que se establece entre los distintos compuestos que constituyen el carbono inorgánico:



Otros compuestos ácido/base débiles que establecen equilibrios en el agua residual o fango son los correspondientes al nitrógeno y fósforo inorgánico:



Finalmente los ácidos valérico (1.22), butírico (1.18), propiónico (1.19) y acético (1.20) conocidos comúnmente como VFA, aunque en menor medida, también establecen equilibrios ácido-base en aguas residuales y fangos.



### 1.2.3 Transferencias líquido-gas

Algunos de los compuestos empleados como reactivos, u obtenidos como productos en las reacciones bioquímicas y químicas detalladas anteriormente, se encuentran en fase gaseosa a la temperatura y presión a la que se dan estas reacciones. Por este motivo, entre estos compuestos en su fase disuelta y gaseosa se da una transferencia gobernada por la solubilidad de cada compuesto gaseoso en la fase líquida.

En concreto los compuestos gaseosos que intervienen, en su fase disuelta, en las reacciones químicas y bioquímicas son: O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> y NH<sub>3</sub>.



## 1.3 TECNOLOGÍAS EMPLEADAS EN EDAR URBANAS

En una EDAR urbana, tanto el agua residual como los fangos producidos son sometidos a una serie de tratamientos de modo que, a partir de los procesos bioquímicos detallados anteriormente y otros procesos físicos que se detallan a continuación, el agua residual reduce su carga contaminante y el fango queda estabilizado.

Los tratamientos más frecuentes que se incluyen en una EDAR son el tratamiento primario y secundario, el tratamiento de los fangos producidos y ocasionalmente el tratamiento terciario. Éste último consiste en la aplicación de tratamientos físicos (filtración), químicos (procesos de absorción, oxidación, abrasión y ozonización) y/o biológicos, a fin de obtener una mejor calidad del agua tratada.

### 1.3.1 Tecnologías empleadas en el tratamiento primario

El objetivo principal del tratamiento primario es la separación por medios físicos de los sólidos en suspensión no retenidos en el pretratamiento. También dentro del tratamiento primario se incluyen todos aquellos tratamientos físico-químicos permiten que las partículas coloidales formen flóculos de gran tamaño mejorando en gran medida su decantabilidad.

Las tecnologías empleadas en el tratamiento primario se describen brevemente a continuación:

- *Decantación*

Un decantador consiste en un depósito rectangular o circular, en cuyo fondo se depositan los fangos cuando la velocidad ascensional del agua es inferior a la velocidad de caída de las partículas.

Los decantadores primarios presentan de forma general geometrías rectangulares o circulares y pueden incluir sistemas de extracción de fangos estáticos o dinámicos. En un decantador primario la concentración de sólidos suspendidos se reduce en un 50-70 %.

- *Coagulación-floculación*

Mediante la coagulación-floculación se consigue una desestabilización de las partículas coloidales que permite su aglomeración en flóculos y posterior decantación.

En la coagulación, mediante la adición de coagulantes, se consigue una desestabilización de las partículas coloidales por medio de la neutralización de sus cargas eléctricas. Posteriormente, en la floculación se da la aglomeración de las partículas descargadas de forma que éstas puedan ser eliminadas por medio de decantación, flotación etc.

- *Flotación*

La flotación permite la eliminación de sólidos en suspensión con una densidad próxima a la del agua, así como de aceites y grasas.

Las tecnologías de flotación pueden ser naturales o provocadas. En esta última se da una fijación artificial de burbujas de aire o de gas sobre las partículas a eliminar. Esta fijación puede conseguirse mediante distintas técnicas: aireación a presión atmosférica, flotación por aire disuelto o flotación por vacío.

### **1.3.2 Tecnologías empleadas en el tratamiento secundario**

En una EDAR, el tratamiento secundario tiene como objetivo la eliminación de materia orgánica y nutrientes (nitrógeno y fósforo), de acuerdo con las restricciones impuestas en el medio receptor. Aunque dentro del tratamiento secundario pueden darse tratamientos físico-químicos, el tratamiento más común en EDAR de aguas residuales urbanas es el biológico.

El tratamiento biológico consiste en potenciar una serie de reacciones de oxidación-reducción (Apartado 1.2.1) por las cuales una población de heterogénea de bacterias presentes en el agua residual, utilizan los contaminantes como fuente de energía y nutrientes para su mantenimiento y biosíntesis.

Aunque el tratamiento biológico puede llevarse a cabo mediante distintas tecnologías (fangos activados, biopelícula, biodiscos, etc.), la más empleada en las EDAR, es la tecnología de fangos activados.

Esta tecnología está constituida por uno o varios reactores biológicos, en los que la materia orgánica y nutrientes presentes en el agua residual en contacto con un

fango activado formado por una mezcla de bacterias y materia orgánica, sufren algunas de las transformaciones de hidrólisis y oxidación-reducción detalladas en el Apartado 1.2.1.

La tecnología de fangos activados fue propuesta a principios del siglo XX como tratamiento para la eliminación de materia orgánica en las aguas residuales, en cuanto se descubrió la capacidad que poseían las poblaciones de bacteria heterótrofas de degradar la materia orgánica (Arden and Lockett, 1914). Desde ese momento y hasta la actualidad, se han propuesto diversas configuraciones que basadas en esta tecnología, y de acuerdo con los requerimientos cada vez más estrictos en la depuración de las aguas residuales, permiten mayores rendimientos en la eliminación de materia orgánica y la eliminación adicional de nutrientes (nitrógeno y fósforo) hasta concentraciones aceptables en el cauce receptor.

A continuación se presentan algunas de las configuraciones más comunes en la eliminación de materia orgánica, en la eliminación de materia orgánica y nitrógeno y en la eliminación de materia orgánica, nitrógeno y fósforo.

### **1.3.2.1 Tecnología de fangos activados para la eliminación de materia orgánica**

La tecnología de fangos activados convencional para la eliminación de materia orgánica, representada en la Figura 1.2, consiste en mantener en un reactor aireado una cantidad de fango en suspensión. En este reactor se encuentran poblaciones de bacterias heterótrofas que a partir del oxígeno suministrado, metabolizan la materia orgánica presente en el agua residual. Posteriormente, en un tanque de sedimentación o decantador, las poblaciones de bacterias son transportadas al fondo del decantador por gravedad y recirculadas al reactor. El agua depurada y libre de materia en suspensión, sale del decantador por la parte superior y es vertida al cauce receptor.

Una variante de la configuración convencional representada en la Figura 1.2, es la tecnología con reaireación de fango llamada tecnología de contacto-estabilización, y que fue propuesta por primera vez por Ullrich and Smith, (1951). En esta tecnología se incorpora una zona de reaireación del fango procedente del decantador secundario. Con esta zona de reaireación, se favorece la respiración endógena del fango activado de forma que éste queda estabilizado y se regenera su capacidad de almacenar materia orgánica en cuanto entre en contacto con el agua residual influente. El sistema de contacto-estabilización

permite reducir el flujo de sólidos en el decantador (Thompson *et al.*, 1989) y obtener un fango activado con buenas propiedades de sedimentabilidad.

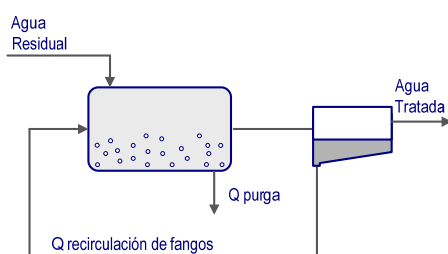


Figura 1.2. Esquema de la tecnología de fangos activados convencional

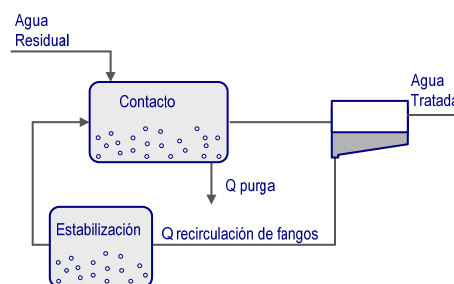


Figura 1.3. Esquema de la tecnología de fangos activados contacto-estabilización

### 1.3.2.2 Tecnología de fangos activados para la eliminación de materia orgánica y nitrógeno

Las tecnologías de fangos activados más comúnmente utilizadas en la eliminación de materia orgánica y nitrógeno están constituidas por, al menos, dos reactores separados en los que manteniendo condiciones aerobias y anóxicas se dan los procesos de nitrificación y desnitrificación.

La primera tecnología de pre-desnitrificación fue propuesta por Ludzack and Ettinger, (1962) y estaba constituida por un primer reactor anóxico conectado parcialmente a un segundo aerobio. En el reactor aerobio se daba prioritariamente una nitrificación y los nitratos obtenidos eran empleados en el reactor anóxico, donde se daba mayoritariamente la oxidación de materia orgánica en condiciones anóxicas. Los dos reactores se encontraban parcialmente conectados de forma que los nitratos producidos en el reactor aerobio podían ser utilizados como aceptores de electrones en la zona anóxica.

Posteriormente, debido a la imprecisión en el aporte de nitratos en la zona anóxica, y por tanto, la baja eficiencia en la desnitrificación, Barnard, (1973) propuso una nueva tecnología en la que el agua a tratar entraba en la zona anóxica totalmente separada de la zona aerobia, y el aporte de nitratos necesario en la desnitrificación se llevaba a cabo mediante una recirculación procedente de la zona aerobia. Esta configuración se conoce en la actualidad como A/O o DN se muestra en la Figura 1.4.

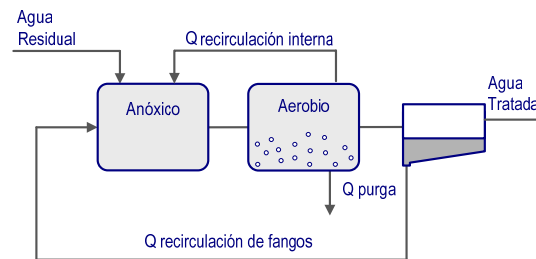


Figura 1.4. Esquema de la tecnología de fangos activados DN

Además de la tecnología de pre-desnitrificación mostrada en la Figura 1.4, también se existen tecnologías de post-desnitrificación, en las que la zona anóxica se sitúa detrás del reactor aerobio.

En la actualidad, en base a las diferentes tecnologías de pre-desnitrificación y post-desnitrificación, se han desarrollado otras tecnologías, que aunque presentan mayor complejidad, permiten una eliminación más eficiente del nitrógeno. Por ejemplo, la tecnología Bardenpho que combina tecnologías de pre y post-desnitrificación, o tecnologías de alimentación escalonada compuestas por varias tecnologías DN en serie (Ayesa *et al.*, 1998).

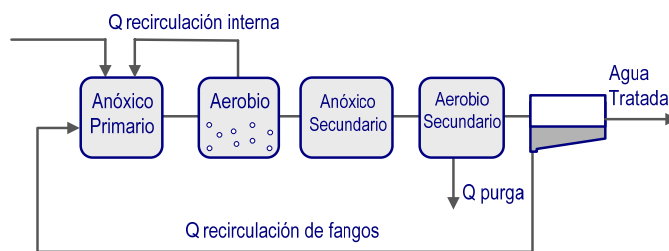


Figura 1.5. Esquema de la tecnología Bardenpho

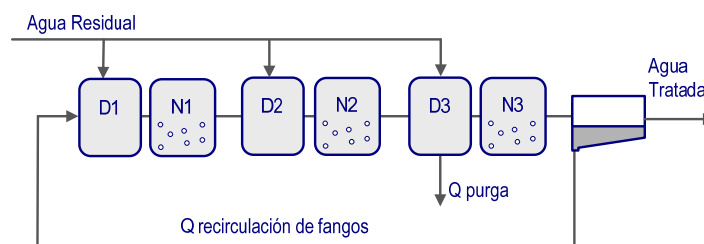


Figura 1.6. Esquema de la tecnología de alimentación escalonada

Finalmente, debe indicarse que el concepto de contacto-estabilización propuesto en tecnologías de fangos activados para la eliminación de materia orgánica puede ser empleado también en tecnologías de eliminación de materia orgánica y nitrógeno. Así, la tecnología conocida como RDN (Figura 1.7) está constituida por un reactor D donde tiene lugar la desnitrificación, un reactor N donde se da la nitrificación, un decantador secundario donde se da una separación del agua tratada y el fango activado, y un reactor de estabilización o regeneración R.

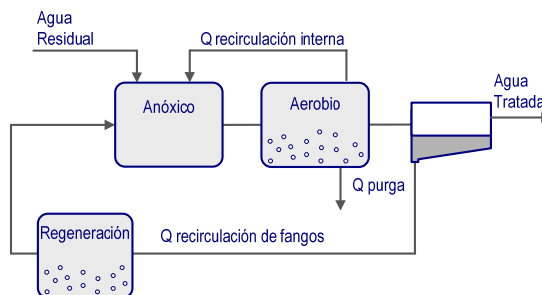


Figura 1.7. Esquema del sistema de fangos activados RDN

La tecnología RDN frente a la DN convencional, presenta algunas ventajas como mejor sedimentabilidad del fango (de la Sota, 1995), permite disminuir el caudal de recirculación interna de la zona aerobia a la anóxica debido al aporte de nitratos procedente del reactor de regeneración, se obtienen SRT más altos que mejoran la nitrificación, etc.

### 1.3.2.3 Tecnología de fangos activados para la eliminación de materia orgánica, nitrógeno y fósforo

La eliminación biológica del fósforo, observada al someter el licor mixto a condiciones anaerobias y aerobias de forma alterna (Apartado 1.2.1.3), provocó el surgimiento de la tecnología Phoredox (Barnard, 1975). Esta tecnología consiste en una modificación de la tecnología Bardenpho en la que se incorpora un reactor anaerobio previo al primer reactor anóxico. Posteriormente, la tecnología Phoredox fue modificada por la A2/O en la que se eliminó el segundo reactor anóxico, debido a su ineficiencia, y se aumentó el tamaño del primero (Figura 1.8).

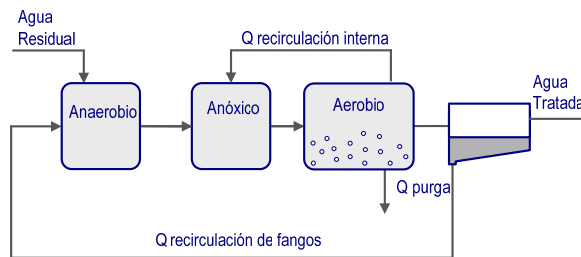


Figura 1.8. Esquema de la tecnología A2/O

Sin embargo, en la tecnología Phoredox modificada, la presencia de nitratos en la recirculación del fango a la zona anaerobia disminuía en gran medida la eficiencia en la eliminación biológica del fósforo. Por este motivo, a finales de los 70, la Universidad de Cape Town propuso la tecnología UCT en la que el fango recirculado se introduce en el reactor anóxico desde donde parte del licor de mezcla se recircula a la zona anaerobia (Figura 1.9).

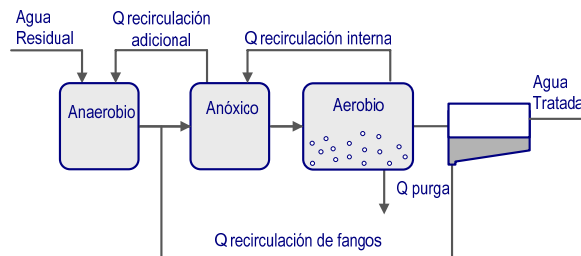


Figura 1.9. Esquema de la tecnología UCT

### 1.3.3 Tecnologías de tratamiento de los fangos producidos en la EDAR

Los fangos que se producen en una EDAR proceden de la decantación primaria y del tratamiento biológico del cual se extrae un caudal de purga, bien de los reactores de fangos activados, bien del fango espesado en el decantador secundario. Generalmente, la línea de fangos de una EDAR incluye en primer lugar una unidad de espesamiento. Posteriormente, el fango espesado puede ser tratado mediante tecnologías de digestión aerobia o anaerobia, en reactores de compostaje o bien pueden ser incinerados directamente. Tanto de la unidad de espesamiento, como del digestor aerobio/anaerobio en caso de que lo hubiera, el sobrenadante extraído se retorna a cabeza de planta (Figura 1.10). Finalmente,

los subproductos obtenidos en digestores, compostadores o incineradoras pueden ser aplicados para la mejora de suelos o transportados a vertedero.

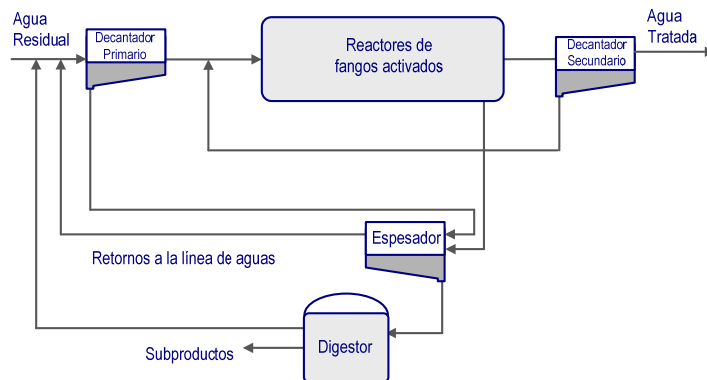


Figura 1.10. Esquema de las líneas de aguas y fangos en una EDAR

A continuación se describen brevemente las tecnologías empleadas de forma más común tanto en el espesamiento del fango como en la digestión de los fangos.

### 1.3.3.1 Tecnologías de espesamiento de fangos

Las tecnologías de espesamiento tienen como objetivo la reducción del volumen de fangos por disminución parcial de su humedad y aumento de la concentración de sólidos. Las tecnologías más habituales en el espesamiento del fango son el espesamiento por gravedad y el espesamiento por flotación.

La tecnología de espesamiento por gravedad, actúa de forma similar a los tanques de sedimentación o decantadores. Así, el fango diluido se conduce a un tanque donde sedimenta y se compacta. El fango espesado se extrae desde el fondo del tanque y el sobrenadante clarificado se retorna a la entrada del tratamiento biológico.

En la tecnología de espesamiento por flotación la separación sólido-líquido se consigue introduciendo burbujas finas de gas, generalmente aire, en la fase líquida. Las burbujas se adhieren a las partículas y la fuerza ascendente del conjunto partícula-burbuja provoca que ésta ascienda hasta la superficie y pueda ser retirada por rasquetas superficiales. La tecnología más utilizada en las EDAR es la flotación por aire disuelto mediante presurización. La producción de aire en esta tecnología consiste básicamente en disolver aire en un líquido



bajo una presión de varias atmósferas y proceder a continuación a la liberación de la presión hasta el nivel atmosférico.

### **1.3.3.2 Tecnologías de digestión de fangos**

Las tecnologías de digestión o estabilización del fango, están constituidas básicamente por un reactor llamado digestor que presenta tiempos de residencia muy altos (en comparación con los de fangos activados) y en el que se lleva a cabo el proceso de biodegradación de la materia orgánica presente en el fango.

Las tecnologías de digestión de fangos presentan algunas diferencias en su operación y rendimiento dependiendo de si los digestores de fangos están sometidos a condiciones aerobias o anaerobias o si la biodegradación se lleva a cabo en un rango de temperaturas mesófilo o termófilo. A continuación se presentan las características más importantes en cada uno de los casos.

#### **1.3.3.2.1 Tecnologías de digestión anaerobia**

La tecnología más empleada en la actualidad en la estabilización biológica de los fangos producidos en las EDAR, está constituida por un digestor que presenta condiciones anaerobias y en el que el fango se mantiene en un rango de temperaturas mesófilo.

Algunas de las ventajas que presenta frente a otras tecnologías de estabilización son la producción de energía en forma de metano, la reducción en un 30-50% del volumen de fango final y su sencilla operación. Sin embargo, la biodegradación de materia orgánica llevada a cabo en digestores anaerobios mesófilos, presenta algunos inconvenientes como los problemas de formación de espumas en el digestor, la baja eficiencia en destrucción de sólidos frente a la capacidad de solubilización en condiciones aerobias y la incapacidad de higienización del fango para su uso en suelos.

Respecto a la producción de biogás en un digestor anaerobio, ésta se relaciona directamente con la cantidad de sólidos volátiles (SV) eliminados. Esta producción de gas es específica para cada sustancia orgánica en el digestor y la cantidad producida será función de la temperatura, el HRT, la carga de SV de entrada y de la composición del sustrato que entra en el digestor. El biogás generado está compuesto principalmente por metano y dióxido de carbono, además de otros gases como nitrógeno, hidrógeno y sulfuro de hidrógeno. Si la digestión se produce completamente, lo habitual es encontrar un porcentaje de

CH<sub>4</sub> del 65-70% en volumen y un 30-35% de CO<sub>2</sub> respecto del volumen total del gas producido. El gas producido por un digestor tiene un valor energético medio de 25 MJ/m<sup>3</sup> por lo que en muchas ocasiones es utilizado para producción de energía mediante cogeneración.

La digestión anaerobia termófila se empezó a utilizar como alternativa para mejorar los inconvenientes que presenta la digestión anaerobia mesófila. Ésta ha mostrado algunas ventajas con respecto a su predecesora tales como una mayor eficiencia en la destrucción de sólidos, una menor presencia de espumas, una mejor separación sólido-líquido, mejor deshidratabilidad (aunque en torno a este punto existe una gran controversia), y una mayor eficiencia en la destrucción de organismos patógenos (Ahring, 1994). Sin embargo, el uso de la digestión anaerobia termófila ha sido limitado por algunas desventajas, tales como la pobre calidad del sobrenadante con elevadas concentraciones de amonio, materia orgánica disuelta y ácidos grasos volátiles, y la inestabilidad en su operación. Operando el digestor anaerobio termófilo en determinadas condiciones sería posible higienizar con él el fango por lo que tiene un gran potencial.

#### 1.3.3.2.2 Tecnologías de digestión aerobia

En la tecnología de digestión del fango aerobia termófila, (ATAD) la materia orgánica presente en el fango queda biodegradada mediante la actividad de un conjunto de bacterias capaces de actuar en rangos de temperaturas termófilos.

En esta tecnología, parte de la energía liberada por la degradación se usa para formar nuevo material celular, pero la mayoría es liberada en forma de calor. Los valores típicos de producción biológica de calor reportados se encuentran en el rango de 14.19 a 14.65 kJ/kg O<sub>2</sub> (Andrews and Kambu, 1969). Los requerimientos de oxígeno varían, pero normalmente se estiman 1.42 kg O<sub>2</sub>/kg de sólido suspendido volátil (SSV) eliminado. En la digestión aerobia termófila autoterma, el calor liberado por el proceso biológico de digestión aerobia es la mayor fuente de calor utilizada para lograr la temperatura de operación deseada.

## 1.4 MODELADO MATEMÁTICO DE LOS PROCESOS QUE TIENEN LUGAR EN UNA EDAR

Los procesos bioquímicos, químicos o físico-químicos que tienen lugar en las EDAR, al igual que cualquier proceso en la naturaleza (mecánico, eléctrico etc.), pueden ser descritos mediante modelos matemáticos.

La utilización de modelos matemáticos en el diseño, operación y control de EDAR es una práctica cada vez más habitual entre la comunidad científica y las ingenierías. Esta mayor utilización se debe fundamentalmente a que las configuraciones de las EDAR son cada vez más complejas y a la progresiva estandarización y validación de los modelos matemáticos en este campo. Finalmente, el incremento de la capacidad de cálculo de los computadores y el desarrollo de nuevas plataformas de simulación dinámica ha permitido ampliar notablemente el número de los usuarios potenciales de estas nuevas técnicas (Ayesa *et al.*, 2001; Ayesa y Larrea, 2005).

Generalmente el modelado matemático de EDAR es una tarea que implica un conocimiento avanzado tanto de los procesos que se desean describir, como de las tecnologías donde se dan estos procesos, y debe llevarse a cabo mediante un procedimiento sistemático (Murthy *et al.*, 1990).

### 1 Definición de las especificaciones del proceso

En modelos de EDAR, estas especificaciones deben incluir la información referente a los procesos a describir, equipos utilizados (tipos y tamaño), configuración de la EDAR, variables de operación, etc.

### 2 Objetivos del modelo

Previamente a la construcción de cualquier modelo, debe definirse cuáles van ser los objetivos de éste. Dentro de estos objetivos debe tenerse en cuenta el ámbito en el cual el modelo va a ser utilizado, el alcance y la exactitud que debe tener, etc. Así, un modelo matemático de EDAR tendrá una estructura diferente si éste ha sido construido para el diseño óptimo de las EDAR, para el estudio de posibles estrategias de operación o control, con finalidad educativa, etc. Además el alcance y la precisión del modelo deben ser los adecuados de forma que por un lado, el modelo reproduzca el proceso con exactitud, y por otro, que la consideración de detalles insignificantes o excesiva precisión pueden llevar a limitaciones computacionales que dificulten la utilización de los modelos.

### 3 Selección del tipo de modelo

En la actualidad, existe una amplia variedad de modelos matemáticos. La elección de uno u otro, dependerá en gran parte de los objetivos del modelo a desarrollar. Algunas clasificaciones más comunes de los modelos matemáticos se citan a continuación.

- Modelos reduccionistas u holísticos: Los modelos reduccionistas tienden a incluir el mayor número de detalles posibles mientras que los modelos holísticos están basados en una serie de parámetros globales y principios generales.
- Modelos internos o externos: Los modelos internos (o mecanicistas) describen la respuesta del sistema ante una entrada en base al conocimiento científico y de ingeniería que se posee sobre los fenómenos físicos, químicos y biológicos que tienen lugar en el proceso. Por el contrario, los modelos externos (o modelos de entrada/salida, caja negra o empíricos), están basados en relaciones empíricas entre la entrada y la salida. En la práctica, los modelos matemáticos de EDAR suelen ser una combinación de modelos empíricos y mecanicistas (Carstensen, 1994) . Por ejemplo, la velocidad de crecimiento de las bacterias suele describirse de forma empírica en los modelos, sin embargo, los balances de masa e hidráulicos suelen reproducirse de forma mecanicista.
- Modelos dinámicos o estacionarios: En esta clasificación se distinguen los modelos que varían o no con el tiempo. Así, mientras que los modelos estacionarios reproducen el comportamiento del proceso en estado estacionario, los dinámicos tienen en cuenta las respuestas variables en el tiempo de un proceso. Aunque en la actualidad tanto los modelos estacionarios como los dinámicos se emplean de forma general, dentro del campo de la ingeniería, los modelos estacionarios han sido acogidos con una mayor aceptación que los dinámicos. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que aunque los modelos estacionarios son de gran utilidad en el diseño de EDAR, no son adecuados para describir su operación en la que la EDAR está sometida a diferentes perturbaciones variables en el tiempo.
- Modelos determinísticos o estocásticos: Los modelos estocásticos son aquellos modelos en los que la salida final no se conoce con certeza pero puede representarse mediante propiedades asociadas a distribuciones de probabilidad. En los modelos determinísticos sin embargo, las salidas del

modelo son conocidas con precisión por el estado actual y las futuras entradas externas al modelo.

#### 4 Construcción del modelo

La construcción de un modelo debe ir precedida de una caracterización del proceso a reproducir. Esta caracterización consiste en determinar una serie de axiomas en base al conocimiento sobre los mecanismos que tienen lugar en ese proceso y que deben desembocar en un conjunto de ecuaciones matemáticas, base de cualquier modelo. Estas ecuaciones matemáticas considerarán tanto la conservación de masa y energía como los mecanismos físicos químicos y biológicos que tienen lugar en el proceso.

#### 5 Verificación y validación del modelo

Como último paso, el modelo obtenido debe ser verificado y validado por simulación en diferentes escenarios. La validación (5) y construcción (4) del modelo son dos pasos estrechamente relacionados en la tarea de modelado ya que las predicciones del modelo deben ser coherentes con los axiomas propuestos y deben reproducir el comportamiento real del proceso.

Tal y como se describirá a continuación, desde sus inicios, los modelos matemáticos de EDAR propuestos se han centrado en las distintas tecnologías existentes en la depuración de aguas o tratamiento de fangos (Apartado 1.3) incluyendo la descripción de los principales procesos bioquímicos, químicos o físico-químicos relevantes, y la descripción del transporte de masa.

A continuación se describen los modelos matemáticos de las tecnologías más comunes en una EDAR que incluye el tratamiento de aguas residuales y fangos.

### ***1.4.1 Modelado matemático en el tratamiento de aguas residuales***

Los primeros modelos matemáticos en el tratamiento de aguas residuales surgieron en los años 50 con el objetivo de describir el sistema de fangos activados de eliminación de materia orgánica, y desde entonces, han sufrido una larga evolución.

Así, en los primeros modelos dinámicos que describían la oxidación de materia orgánica del agua residual (Goodman and Englade, 1974), se consideraba que la eliminación de materia orgánica podía reproducirse dinámicamente únicamente

mediante dos variables de estado (sustrato y biomasa) y con cinéticas de primer orden. Posteriormente, la saturación de la capacidad de degradación del sustrato por parte de las bacterias fue incluida considerando un comportamiento de tipo Monod (Lawrence and McCarty, 1970) y a partir de ese momento, empezaron a surgir propuestas de modelado algo más estructuradas (McKinney and Ooten, 1969):

- El licor de mezcla puede dividirse en tres fracciones de sólidos volátiles: activa, endógena-inerte e inerte
- Existe una relación entre la masa de sustrato utilizada y la masa de bacterias
- Debido a la respiración endógena, se da una acumulación de sólidos de tipo endógeno-inerte
- Existe una relación entre la demanda de oxígeno y las bacterias sintetizadas y las desaparecidas debido a la respiración endógena
- Existe una acumulación de sólidos inertes debido a la presencia de éstos en el influente

Un factor importante en el desarrollo de estos modelos dinámicos fue el incremento de las posibilidades computacionales a partir de 1970. Esto permitió la resolución numérica de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales y por tanto la verificación y posterior validación de los modelos propuestos.

Algunos de los trabajos más importantes concernientes al desarrollo de los modelos matemáticos dinámicos para el proceso de fangos activados fueron llevados a cabo en la Universidad de Cape Town, en la República de Sudáfrica. Así, en base a la propuesta desarrollada en McKinney and Ooten, (1969), y teniendo en cuenta las cinéticas de tipo Monod, Marais and Ekama (1976), desarrollaron un modelo aerobio estacionario, a partir del cual surgió posteriormente un modelo dinámico. En este modelo, la materia orgánica influente se dividía en tres fracciones: biodegradable, particulada no biodegradable y soluble no biodegradable. Además, la Demanda Biológica de Oxígeno (DBO) se rechazó como parámetro de definición de la materia orgánica sustituyendo éste por la capacidad donadora de electrones que presenta la materia orgánica y que se expresa como DQO (Demanda Química de Oxígeno). En este modelo además, se sugirió que el nitrógeno influente debía dividirse en cuatro fracciones: soluble no biodegradable, particulado no biodegradable, orgánico biodegradable y amonio libre. Para la conversión de

amonio a nitratos, se siguió la cinética de Monod tal y como se propone en Downing *et al.*, (1964).

Progresivamente, el modelo de Marais-Ekama, evolucionó hasta un modelo dinámico (Dold *et al.*, 1980; Ekama and Marais, 1979) que incluía también el proceso de desnitrificación. En este modelo, además se incluían dos importantes novedades. En primer lugar, y de acuerdo con los resultados experimentales, la materia orgánica biodegradable se dividió en fácilmente y lentamente biodegradable. En segundo lugar, se planteó el concepto de lisis-regeneración como una forma de reproducir las diferentes reacciones que tienen lugar en la desaparición de las bacterias. Según este planteamiento, la materia obtenida en la desaparición de las bacterias se divide en una fracción inerte y sustrato lentamente biodegradable. Posteriormente, Van Haandel *et al.*, (1981) mostró que la división de la materia orgánica y el planteamiento de lisis-regeneración podía integrarse de forma consistente con las transformaciones respectivas al nitrógeno.

En base a los resultados obtenidos, en 1983 la IAWPRC (Internacional Association on Water Pollution Research and Control), estableció un grupo de trabajo para promover el desarrollo y facilitar la aplicación de modelos matemáticos en el diseño y operación de EDAR. El primer objetivo consistía en una revisión de los modelos existentes hasta la fecha y el segundo, en la construcción de un modelo que, de la manera más simplificada posible, fuera capaz de reproducir los procesos de oxidación de materia orgánica en condiciones aerobias, nitrificación y desnitrificación. El resultado de este trabajo fue publicado en 1987 (Henze *et al.*, 1987) como *Activated Sludge Model n°1* (ASM1).

La publicación del modelo ASM1 supuso, no sólo la aparición de un modelo matemático capaz de reproducir la eliminación de materia orgánica y nitrógeno en sistemas de fangos activados, sino la aparición de una guía estándar para la caracterización del agua residual y el desarrollo de códigos de computación. Especialmente la notación matricial empleada en este modelo facilitó la comunicación entre grupos de investigación, permitió discusiones esenciales en el modelado bioquímico, y fue la base a partir de la cual se desarrollaron modelos más complejos en los que se consideraban transformaciones y componentes adicionales. El formato y notación propuestos se presentan a continuación.

### 1.4.1.1 Formato y notación empleada en los modelos matemáticos de sistemas de fangos activados (ASM) de la IWA

El formato matricial propuesto en el modelo ASM1 expresa de manera compacta las reacciones bioquímicas que tienen lugar en el sistema descrito utilizando una matriz de estequiometría y un vector de cinéticas, que facilitan la comprensión del modelo y el seguimiento de las interacciones entre los componentes. En el modelado dinámico de los procesos bioquímicos, físico-químicos o químicos, los compuestos que intervienen en éstos se reducen a un número determinado de componentes  $x_i$ , que se agrupan dentro del vector  $\mathbf{x}$ , y las múltiples reacciones que se producen, se describen mediante un conjunto de transformaciones.

$$\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n\}^T$$

La matriz de estequiometría  $\mathbf{E}$  en cada modelo está constituida por una serie de columnas asociadas a los componentes considerados y un número de filas asociadas a las transformaciones. El índice  $i$  se asigna a cada componente y el índice  $j$  se asigna a cada transformación.

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{i1} & \dots & v_{n1} \\ v_{12} & v_{22} & \dots & v_{i2} & \dots & v_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ v_{1j} & v_{2j} & \dots & v_{ij} & \dots & v_{nj} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ v_{1m} & v_{2m} & \dots & v_{im} & \dots & v_{nm} \end{bmatrix}$$

La estequiometría de las transformaciones se define mediante los coeficientes estequiométricos,  $v_{ij}$ , los cuales establecen las relaciones de masa entre los componentes  $i$  consumidos o generados en cada una de las transformaciones  $j$  individuales.

Además, cada transformación  $j$  también viene definida por su velocidad de reacción  $\rho_j$ , que depende de uno o varios componentes y de los parámetros cinéticos, cuya función es cuantificar, reducir o limitar la influencia de las concentraciones de los componentes en la cinética de las reacciones. El vector de cinéticas  $\mathbf{p}$  engloba las velocidades de todas las transformaciones:



$$\boldsymbol{\rho} = \{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_j, \dots, \rho_m\}^T$$

Las ecuaciones diferenciales que describen las derivadas temporales de los componentes del modelo debido a las transformaciones bioquímicas, se obtiene multiplicando la matriz de estequiometría por el vector de cinéticas.

$$\dot{\mathbf{x}}_{(b)} = \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\rho} \quad (1.21)$$

$$\text{Siendo } \dot{\mathbf{x}}_{(b)} = \left\{ \frac{dx_1}{dt}, \frac{dx_2}{dt}, \dots, \frac{dx_i}{dt}, \dots, \frac{dx_{n-1}}{dt}, \frac{dx_n}{dt} \right\}^T$$

Es decir, la velocidad de aparición o desaparición de un componente  $x_i$  en las transformaciones bioquímicas [ $M_i L^{-3} T^{-1}$ ] se obtiene a partir de la siguiente expresión:

$$\dot{x}_{i(b)} = \sum_j v_{ij} \cdot \rho_j \quad (1.22)$$

En cada transformación  $j$  de la matriz de estequiometría debe seleccionarse un componente  $x_k$  cuyo coeficiente estequiométrico  $v_{kj}$  es adimensional y de valor  $v_{kj} = +1$  ó  $-1$ . Los coeficientes estequiométricos del resto de componentes  $x_i$  tienen como dimensión  $UE_i/UE_k$ , donde  $UE_k$  es la unidad estequiométrica del componente  $x_k$  en el cual se ha basado la estequiometría de la transformación.

Tradicionalmente, la descripción de los componentes orgánicos en los modelos matemáticos se basa en unidades de DQO y en las fracciones  $i_C$ ,  $i_N$ , e  $i_P$  que representan la cantidad de carbono, nitrógeno y fósforo respectivamente por unidad de DQO. Estas fracciones se incluirán o no en los modelos dependiendo de la conservación másica elemental que se considere en éstos.

Con respecto a la descripción del transporte de masa, en los modelos que se describen a continuación se ha considerado que los reactores donde tienen lugar los procesos biológicos presentan un comportamiento de reactores de mezcla completa donde la concentración de cada componente es uniforme en todo el volumen que ocupa reactor. Los balances de materia alrededor del volumen de control considerado se representan de forma general mediante la siguiente ecuación.

$$\text{Acumulación} = \text{Entrada} - \text{Salida} + \text{Transformación} \quad (1.23)$$

Los términos de entrada y salida son los términos de transporte y dependen de las características físicas del sistema modelado. El término de transformación coincide con la masa del componente que aparece o desaparece en cada transformación y que viene dado por la Ecuación (1.22).

#### 1.4.1.2 Modelo del sistema de fangos activados para la eliminación de materia orgánica y nitrógeno ASM1

Tal y como se ha mencionado anteriormente, el modelo ASM1 surgió como respuesta ante la necesidad de un modelo matemático dinámico que reprodujera la eliminación de materia orgánica y nitrógeno en sistemas de fangos activados que presentaban configuraciones como las descritas en el Apartado 1.3.2.2.

Este modelo está desarrollado de acuerdo al formato propuesto en el Apartado 1.4.1.1, e incorpora todas las transformaciones y componentes necesarios para describir la hidrólisis, la biodegradación de la materia orgánica en condiciones aerobias y anóxicas (desnitrificación) y el proceso de nitrificación en el que nitrógeno amoniacal es oxidado a nitratos. En la Figura 1.11 se muestra un esquema de los componentes y transformaciones que se consideran en el modelo ASM1.

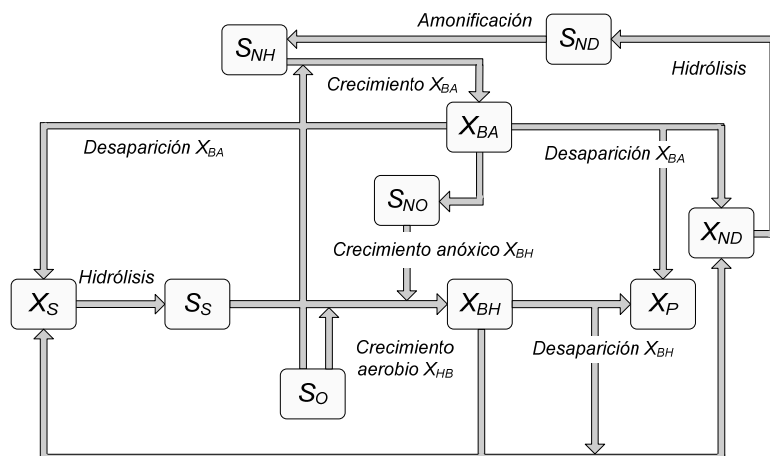


Figura 1.11. Componentes y transformaciones del modelo ASM1

Tal y como se observa en la Figura 1.11, la materia orgánica soluble y particulada está representada por los componentes  $S_S$  y  $X_S$  respectivamente. A partir del componente  $S_S$  se da el crecimiento de las bacterias heterótrofas ( $X_{BH}$ ) en condiciones aerobias y anóxicas. El componente  $X_{BA}$  representa a las

poblaciones de bacterias autótrofas que, de forma simplificada, oxidan completamente y en un solo paso el nitrógeno amoniacal ( $S_{NH}$ ) a nitratos ( $S_{NO}$ ). Tanto la desaparición de las bacterias  $X_{BH}$  y  $X_{BA}$  se describe mediante el concepto lisis-regeneración propuesto en Dold *et al.*, (1980) en el que los componentes obtenidos en la desaparición de las bacterias son  $X_S$  y materia inerte representada por el componente  $X_p$ . Además, el modelo ASM1 considera los componentes  $S_I$  y  $X_I$  que representan a la materia orgánica no biodegradable en el influente del agua residual.

La unidad de medida en la que se expresan las concentraciones de estos componentes en el modelo ASM1 es la Demanda Química de Oxígeno (DQO), ya que ésta es una medida analítica habitual, y proporciona un nexo común entre los equivalentes de electrones en el sustrato orgánico, la cantidad de biomasa generada y en el oxígeno utilizado (Gaudy and Gaudy, 1971). Además, la utilización de esta unidad permite visualizar la continuidad en DQO, por ejemplo en transformaciones de desaparición de biomasa, o los requerimientos de oxígeno o nitratos en el crecimiento de éstas.

Con respecto a la materia nitrogenada, el modelo ASM1 distingue entre el nitrógeno orgánico, que se corresponde con el nitrógeno contenido en la materia orgánica, y el nitrógeno amoniacal o nitratos. El primero, a su vez se divide en los componentes  $S_{ND}$  y  $X_{ND}$  dependiendo de si forman parte de la materia orgánica soluble o particulada. Al igual que en el caso de la materia orgánica, el hecho de que estos componentes estén expresados en unidades de N permite visualizar en las matriz de estequiometría del modelo la continuidad de masa de N en todas las transformaciones. Únicamente en el caso de la desnitrificación, puesto que el compuesto  $N_2$  no está representado por ningún componente, existe una discontinuidad en masa de N.

Finalmente, el modelo ASM1 considera los componentes adicionales  $S_o$  que representa la concentración de oxígeno disuelto en el medio y  $S_{alk}$  que representa la alcalinidad y que, en base a un balance de cargas en la matriz de estequiometría, describe las pérdidas o recuperaciones de alcalinidad según las transformaciones bioquímicas que tienen lugar.

Desde su origen, el modelo ASM1 fue bien acogido por la comunidad científica, y a lo largo de los últimos 20 años, ha sido ampliamente utilizado en el diseño de EDAR y en el estudio de distintas estrategias de operación y control de éstas. Sin embargo, en el momento de su publicación, desde mediados de los años 80 a mediados de los 90, los procesos de eliminación biológica de P crecían en

popularidad debido a los requerimientos cada vez más exigentes en la calidad de vertidos de EDAR. Por este motivo, se hizo necesaria una ampliación y modificación del modelo ASM1 con el objetivo de obtener un modelo capaz de describir además de la eliminación de materia orgánica y N, la eliminación biológica del P. El modelo obtenido, conocido como ASM2 o ASM2d, se describe a continuación.

#### **1.4.1.3 Modelo del sistema de fangos activados para la eliminación de materia orgánica, nitrógeno y fósforo ASM2/ASM2d**

El modelo ASM2 (Henze et al., 1995) surgió como respuesta a la necesidad de considerar la eliminación biológica del P en las EDAR y es aplicable a sistemas de fangos activados con las configuraciones descritas en el Apartado 1.3.2.3.

El cambio más significativo del modelo ASM2 con respecto al modelo ASM1 es la consideración de la población de bacterias acumuladoras de P ( $X_{PAO}$ ) y de su estructura interna, requisito necesario para describir la eliminación biológica del P. Así, el modelo ASM2, además de incluir las transformaciones correspondientes a la biodegradación de materia orgánica en condiciones aerobias y anóxicas (desnitrificación), y el proceso de nitrificación, considera el proceso de almacenamiento de P en forma de Poli-Hidroxi-Fosfatos y liberación en forma de ortofosfatos, que tiene lugar en las bacterias PAO cuando se le somete a distintas condiciones ambientales (Apartado 1.2.1.3).

Desde el momento de la publicación del modelo ASM2, se observó que este modelo presentaba una carencia con respecto a la capacidad que presentan parte de las bacterias  $X_{PAO}$  de permanecer activas en condiciones anóxicas (Kern-Jspersen and Henze, 1993; Mino *et al.*, 1995). Por este motivo el modelo ASM2 se amplió al modelo ASM2d en el cual que se consideraba la actividad de las bacterias  $X_{PAO}$  en condiciones anóxicas. En la Figura 1.12, se muestran las transformaciones y componentes que tienen lugar en el modelo ASM2d.

Los componentes  $S_F$  y  $S_A$  representan al sustrato fermentable soluble y a los ácidos grasos volátiles respectivamente. Esta distinción permite reproducir la liberación los Poli-Fosfatos  $X_{PP}$  en forma de  $S_{PO4}$ , a partir del almacenamiento únicamente de ácidos grasos volátiles  $S_A$  por parte de las bacterias  $X_{PAO}$  en forma de Poli-Hidroxi-Alcanoatos ( $X_{PHA}$ ). Posteriormente, a partir del  $X_{PHA}$  almacenado, se da el crecimiento de bacterias  $X_{PAO}$  en condiciones aerobias anóxicas. Este crecimiento, a su vez lleva asociado el almacenamiento de  $S_{PO4}$  por parte de las bacterias  $X_{PAO}$  en forma de  $X_{PP}$ .

En el modelo ASM2/ASM2d, la actividad de las bacterias  $X_{BH}$  en condiciones aerobias y anóxicas y la nitrificación por parte de las bacterias  $X_{AUT}$  se describen del mismo modo que en el modelo ASM1. Igualmente, la desaparición de la biomasa se describe mediante el concepto lisis-regeneración en el que parte de los productos obtenidos en la desaparición se convierten en materia inerte ( $X_I$ ) y otra parte se convierte en sustrato lentamente biodegradable ( $X_S$ ). En los modelos ASM2/ASM2d, a diferencia del modelo ASM1, no existe una distinción entre la materia inerte del influente y la materia inerte obtenida en la desaparición de las bacterias. Esta simplificación, aunque reduce el número de componentes y por lo tanto la complejidad del modelo, ha supuesto un inconveniente en la garantía de la continuidad de la masa elemental en el modelo ya que la composición másica elemental de los compuestos inertes en el influente no tiene que coincidir con la composición de los compuestos inertes obtenidos en la desaparición de las bacterias.

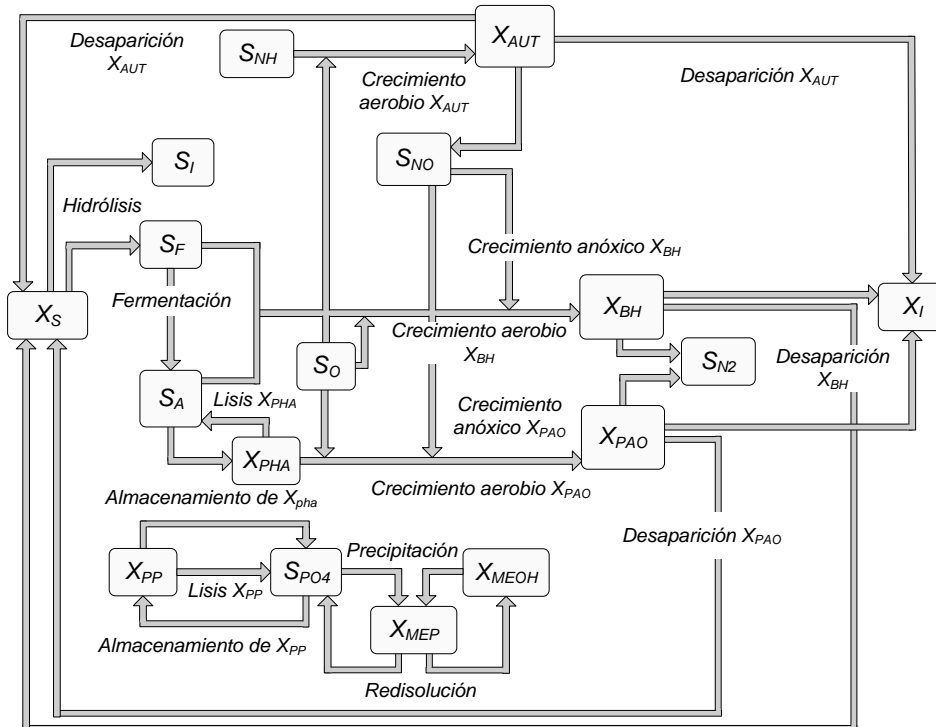


Figura 1.12. Componentes y transformaciones del modelo ASM2d

El componente  $X_S$  obtenido en la desaparición de las bacterias y procedente del influente sufre una hidrólisis y se convierte en  $S_F$  y de forma opcional en materia inerte soluble  $S_I$ . El componente  $S_F$ , puede ser asimilado directamente por las bacterias  $X_{BH}$  o bien, en condiciones anaerobias puede sufrir una fermentación obteniendo como producto  $S_A$ . Aunque esta fermentación forma parte del metabolismo de poblaciones de bacterias acidogénicas, en el modelo ASM2 se ha considerado que esta transformación está metabolizada por las bacterias  $X_{BH}$ .

Finalmente, el modelo ASM2 ha considerado los procesos de precipitación y redisolución de sales ortofosfóricas.

Aunque en la construcción de la estequiometría del modelo ASM1 ya se había tenido en cuenta la continuidad en DQO, N y carga, fue en el modelo ASM2 donde se introdujo el concepto de ecuación de continuidad. Las ecuaciones de continuidad son el equivalente matemático al principio de que en las transformaciones físicas, químicas o biológicas ni la materia ni la carga eléctrica se crea o se destruye. Una ecuación de continuidad, que debe ser válida para cada una de las transformaciones  $j$  y elemento o carga  $E$  sujeto a conservación.

$$\sum_i v_{ij} \cdot \beta_{E,i} = 0 \quad (1.24)$$

En concreto, en los modelos ASM2/ASM2d, las ecuaciones de conservación se utilizan para calcular los coeficientes estequiométricos de los componentes  $S_O$  ( $S_{NO}$  y  $S_{N2}$  en la desnitrificación) a partir del balance en DQO,  $S_{NH4}$  a partir del balance de N,  $S_{PO4}$  a partir del balance en P,  $S_{ALK}$  a partir de la carga y  $X_{TSS}$  para garantizar la continuidad de los sólidos suspendidos totales en las transformaciones.

#### 1.4.1.4 Modelo del sistema de fangos activados para la eliminación de materia orgánica y nitrógeno ASM3

Tal y como se ha mencionado anteriormente, la introducción del modelo ASM1 introdujo un nuevo paradigma en el modelado matemático de los sistemas de fangos activados y ha sido durante años la referencia en infinidad de proyectos científicos y de ingeniería. Sin embargo, durante los años posteriores a su publicación, y a partir de utilización, se fueron detectando algunas limitaciones

que presentaba este modelo. Por ejemplo, se observó que el modelo de lisis-regeneración utilizado en el ASM1 no describía con exactitud la respiración endógena y los fenómenos de almacenamiento de los compuestos, muerte, predación y lisis de las bacterias. Además, tampoco con el modelo ASM1, podían reproducirse las concentraciones de productos de almacenamiento (PHA) o lípidos o glicógeno experimentalmente detectados con altas concentraciones de sustrato rápidamente biodegradable.

Considerando estas y otras limitaciones del modelo ASM1, y debido a los avances en el campo de la computación, en 1999 se propuso un nuevo modelo matemático llamado ASM3 (Gujer et al., 1999).

El modelo ASM3, al igual que el modelo ASM1 describe el consumo de oxígeno, la producción de fangos, la nitrificación y desnitrificación en aguas residuales urbanas. Sin embargo, en el modelo ASM3 se describen de forma más detallada los procesos de almacenamiento del sustrato orgánico por parte de las bacterias y los procesos de respiración endógena de las bacterias, separando completamente la actividad de las poblaciones de bacterias heterótrofas y nitrificantes.

En la Figura 1.13 se muestran los componentes y transformaciones considerados en el modelo ASM3.

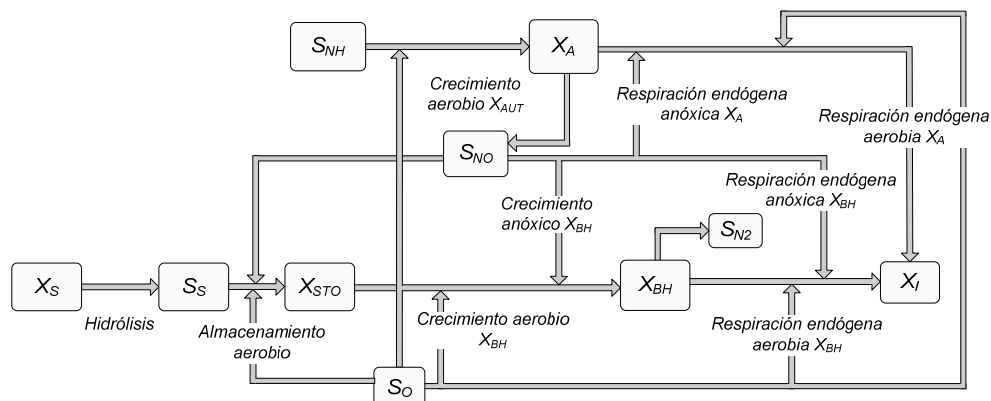


Figura 1.13. Componentes y transformaciones del modelo ASM3

El modelo ASM3, al igual que en los modelos ASM1 y ASM2, describe la hidrólisis de la materia orgánica particulada  $X_S$  que se convierte en sustrato fácilmente biodegradable  $S_S$ . Posteriormente, al igual que se describe el

almacenamiento de sustrato el caso específico de las bacterias acumuladoras de fósforo en el modelo ASM2, el componente  $S_S$  se convierte en el producto almacenado  $X_{STO}$ . A partir de este producto almacenado  $X_{STO}$  se da el crecimiento de las bacterias heterótrofas  $X_{BH}$ . Finalmente, la desaparición de las  $X_{BH}$  se da mediante la respiración endógena en condiciones aerobias y anóxicas hasta convertirse en materia inerte representada por  $X_I$ . En esta transformación se incluyen todos los mecanismos que intervienen en la desaparición de las bacterias: respiración endógena, muerte, predación, lisis, etc. y es significativamente diferente a como se describe en los modelos ASM1 y ASM2. Las bacterias autótrofas  $X_A$  llevan a cabo el proceso de nitrificación oxidando el  $S_{NH}$  a  $S_{NO}$  y posteriormente, y al igual que  $X_{BH}$  sufren el proceso de respiración endógena en condiciones aerobias y anóxicas convirtiéndose finalmente en el producto inerte  $X_I$ .

La descripción detallada de la estructura interna de la materia celular en el modelo ASM3, permite una mejor descripción del proceso de desaparición de las bacterias heterótrofas y autótrofas, y reduce la importancia del proceso de hidrólisis en predicciones del modelo.

En el modelo ASM3 se consideran tres ecuaciones de conservación correspondientes a DOT (Demanda de Oxígeno Teórica), nitrógeno y carga. La DOT puede asumirse igual al valor de DQO en componentes orgánicos. Para componentes inorgánicos sin embargo, el valor de DOT debe calcularse en mediante reacciones redox en base a su estado de referencia ( $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $NH_4^+$ ,  $PO_4^{3-}$ ,  $SO_4^{2-}$ , etc.).

### **1.4.2 Modelado matemático en la digestión anaerobia de fangos**

Aunque los procesos de biodegradación anaerobia han sido utilizados desde hace más de un siglo en el campo del tratamiento de aguas residuales y de residuos sólidos urbanos, la unificación de los modelos existentes y la utilización de modelos estándar aceptados por la comunidad científica, ha sido algo más tardía que en el caso de los modelos de sistemas de fangos activados.

Debido a que la biodegradación de materia orgánica en condiciones anaerobias se da mediante un proceso secuencial, los primeros modelos de digestores anaerobios desarrollados tenían como objetivo describir únicamente el paso limitante del proceso secuencial (Andrews, 1971; Eastman and Ferguson, 1981).



Sin embargo, aunque esta simplificación dio lugar a modelos sencillos en su utilización éstos fueron descartados por no predecir correctamente el comportamiento del digestor anaerobio, sobre todo en condiciones transitorias.

Durante las décadas de los años 70 y 80 se propusieron otros modelos que describían de forma más completa el comportamiento de los digestores anaerobios. Por ejemplo, el modelo propuesto en Hill and Barth, (1977) que incluye los procesos de hidrólisis, acidogénesis y acetogénesis, o el modelo propuesto por Moletta *et al.*, (1986) que considera el proceso de acidogénesis en el que se forma acetato a partir de glucosa, y la inhibición de este proceso por la aparición de ácido acético sin disociar.

Posteriormente, (Costello *et al.*, 1991) propuso un modelo para representar el proceso de digestión anaerobia utilizando la glucosa como sustrato estándar. En él se consideran cuatro grupos de bacterias que transforman la glucosa hasta metano, dióxido de carbono e hidrógeno. En este modelo se incluyen las ecuaciones de inhibición por pH en las expresiones cinéticas de las transformaciones, y la influencia de la presión parcial de hidrógeno para determinar la producción de VFA.

Fue a partir de los años 90, y en base a estudios microbiológicos (McCarty and Mosey, 1991), cuando surgió la generación más reciente de modelos (Angelidaki *et al.*, 1993; Angelidaki *et al.*, 1999; Batstone *et al.*, 2000; Siegrist *et al.*, 1993; Vavilin *et al.*, 2001). Estos modelos incorporaron progresivamente nuevos conocimientos sobre los procesos de biodegradación anaerobia de materia orgánica, de forma que en los modelos se consideran más transformaciones y componentes, cinéticas más complejas con inhibiciones y diferentes sustratos.

Uno de los modelos más completos es el modelo propuesto por Siegrist *et al.*, (1993), que describe la digestión anaerobia en condiciones mesófilas con un planteamiento similar al utilizado en los modelos de fangos activados (ASM). Así, este modelo se presenta en notación matricial aplicando las ecuaciones de continuidad de la DQO, el nitrógeno y el carbono y está basado en el esquema de reacciones propuesto por (Gujer and Zehnder, 1983). Una de las características más destacables del modelo es que en el cálculo dinámico del pH, los protones son un componente más y se considera la transformación de disociación del  $\text{CO}_2$  en  $\text{HCO}_3^-$  y  $\text{H}^+$  y viceversa. Así, esta transformación está incluida dentro de la matriz de estequiometría y su cinética está gobernada por la constante del equilibrio químico de estas especies. Este cálculo dinámico del

pH permitió describir la actividad de las bacterias metanogénicas, y modelar las curvas de inhibición por pH determinadas previamente de forma experimental. Posteriormente, los autores actualizaron y extendieron el modelo propuesto (Siegrist et al., 2002). Esta nueva versión podría reproducir también condiciones termófilas y acualiza el modelado de la deabsorción de gases, así como las inibiciones causadas por el pH, el amoniaco, el hidrógeno y el acetato.

Finalmente, en base a los modelos obtenidos, en 1998 la IWA constituyó un grupo de trabajo con el objetivo de desarrollar un modelo estándar que unificara los principales trabajos y aportaciones en el campo de la biodegradación anaerobia de materia orgánica. Como resultado de este trabajo, en el año 2002, se publicó el modelo ADM1 (*Anaerobic Digestion Model N°1*) (Batstone et al., 2002), que se describe a continuación.

### **1.4.3 Modelo de digestión anaerobia ADM1**

El modelo ADM1 fue presentado por primera vez en la “9th IWA Conference on Anaerobic Digestión” en el año 2001 y fue publicado posteriormente a principios del 2002 (Batstone *et al.*, 2002).

La publicación del ADM1 supuso la aparición de una plataforma estándar para el modelado fundamental del proceso de digestión anaerobia, y posibilitar así la investigación de aspectos específicos bajo un marco común.

La estructura del modelo ADM1 es la misma que la utilizada en los modelos ASM (Apartado 1.4.1.1) y las transformaciones y componentes que incluye este modelo se muestran en la siguiente Figura.

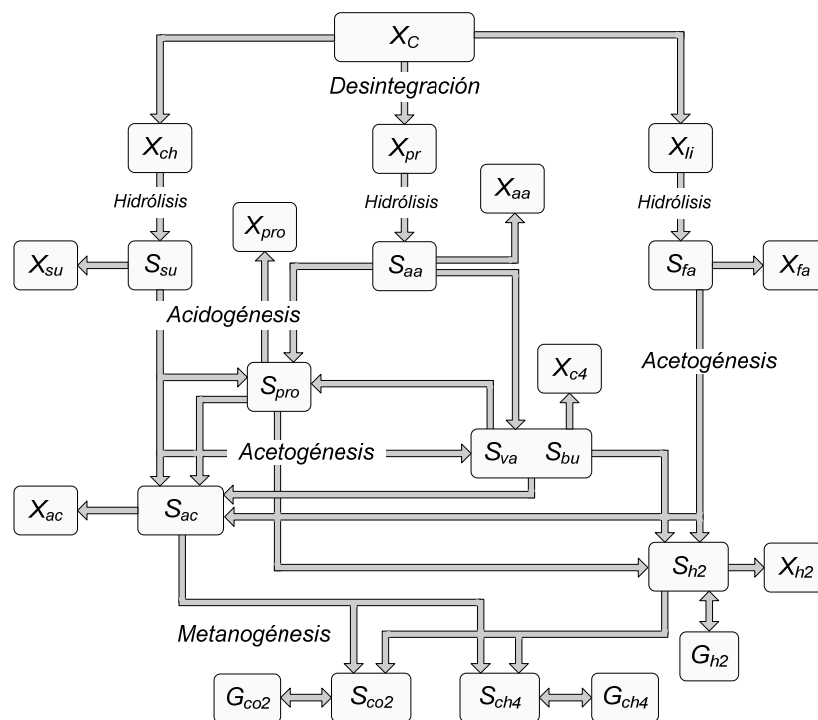


Figura 1.14. Componentes y transformaciones del modelo ADM1

Tal y como se observa en la Figura 1.14, en el modelo ADM1 se consideran transformaciones bioquímicas y físico-químicas. Algunas transformaciones y componentes para aplicaciones específicas de digestión anaerobia han sido excluidas del modelo para evitar una complejidad extrema. Aun y todo, el elevado número de parámetros y las limitaciones de identificabilidad son los mayores inconvenientes para la aplicación del ADM1, así como algunos puntos débiles en su estructura que han sido evaluados recientemente (Kleerebezem and van Loosdrecht, 2004).

Aun así, el enfoque estándar del modelado de la digestión anaerobia ha favorecido la aplicación del ADM1 por parte de tecnólogos y usuarios. Desde su reciente publicación, está tomando cada vez más relevancia y está siendo utilizado y actualizado por los investigadores incorporando mejoras en sus fundamentos, su aplicación y su resolución numérica (Batstone et al., 2006). Por ejemplo, (Blumensaat and Keller, 2005) validaron el modelo para su aplicación en el caso de un proceso a escala piloto de la digestión anaerobia de fangos urbanos en dos etapas. Estimaron dos grupos de valores optimizados para los

parámetros para las condiciones mesófilas y termófilas, confirmando la viabilidad del modelo para predecir el comportamiento de los digestores. Sin embargo, también concluyeron que el modelo debía ser actualizado para solucionar ciertos aspectos numéricos e importantes problemas que afectan a los balances de masa y a la incompatibilidad de las transformaciones de lisis de biomasa y de desintegración.

## 1.5 MODELADO INTEGRAL DE EDAR

Tal y como se ha mencionado en en Apartado 1.4 , los modelos matemático de las diferentes tecnologías existentes en una EDAR han sido ampliamente utilizados durante las últimas décadas. Estos modelos matemáticos, que describen específicamente tanto los procesos bioquímicos como el transporte de masa de cada una de las tecnologías, han sido capaces de obtener soluciones óptimas para su diseño y operación.

Sin embargo, cuando el problema a analizar no se refiere a una tecnología concreta sino a una EDAR que integra varias de ellas (por ejemplo EDAR que incluyen líneas de aguas y fangos), las soluciones óptimas dadas por el modelo matemático deben considerar las interrelaciones mutuas existentes. Por lo tanto, la obtención de soluciones óptimas tanto en el diseño como en la operación de las EDAR no consiste únicamente en la combinación de las soluciones óptimas obtenidas por separado para cada una de las tecnologías, sino que requiere la construcción de modelos matemáticos en los que el problema quede analizado de forma conjunta. Por lo tanto, los modelos matemáticos empleados para analizar el comportamiento global de una EDAR deben ser construidos de forma rigurosa, teniendo en cuenta el comportamiento dinámico de todas las tecnologías incluidas en las líneas de aguas y fangos, y el efecto de los flujos de retorno desde unas tecnologías a otras.

La construcción de modelos integrales de EDAR que garanticen la continuidad de la masa y carga en todo el modelo no es una tarea ni sencilla ni inmediata (Vanrolleghem *et al.*, 2005; Wentzel *et al.*, 2006). Las principales dificultades para obtener estos modelos integrales están causadas por las incompatibilidades y la diferente descripción de los componentes y transformaciones en los modelos estándar, por ejemplo, la diferente descripción de la materia orgánica y

nitrógeno, la diferente descripción del pH y capacidad de amortiguamiento en el agua o en el fango, los diferentes procesos bioquímicos considerados, etc.

Las soluciones aportadas con respecto a esta cuestión hasta este momento, se han centrado en dos alternativas. La primera de ellas consiste en la construcción de interfaces específicas entre los modelos estándar de las distintas tecnologías incluidas en una EDAR. La segunda consiste en la construcción de un único modelo constituido por todos los procesos bioquímicos, químicos o físico-químicos que tienen lugar de forma relevante en cada una de las tecnologías incluidas en la EDAR.

A continuación se describen algunas de las soluciones propuestas en base a estas dos alternativas.

### **1.5.1 Interfaces entre modelos estándar**

La construcción de interfaces específicas entre modelos comúnmente conocidos ha sido una de las opciones más utilizadas en la obtención de modelos globales de EDAR (Copp *et al.*, 2003; Johnson and Shang, 2005; Wett and Alex, 2003; Wett *et al.*, 2006; Yasui *et al.*, 2006).

Estas interfaces se han desarrollado de forma específica para cada uno de los casos, teniendo en cuenta los componentes existentes en los modelos a conectar y los requerimientos de continuidad de masa considerados en cada uno de los modelos. A continuación se describen de forma detallada las interfaces entre los modelos ASM1-ADM1 propuestas en (Copp *et al.*, 2003) y la metodología general CBIM, propuesta para la construcción de interfaces entre dos modelos estándar cualquiera.

#### **1.5.1.1 Interfaces ASM1-ADM1 propuestos por Copp et al. 2003**

Los interfaces propuestos por Copp *et al.*, (2003) fueron desarrollados con el objetivo de poder conectar los modelos estándar ASM1-ADM1. Por lo tanto, estas interfaces están constituidas por una serie de ecuaciones mediante las que los componentes del modelo ASM1 se transforman en componentes del modelo ADM1. Puesto que los modelos ASM1 y ADM1 presentan diferencias fundamentales tanto en la definición como en la composición de los componentes, estas interfaces se han centrado en garantizar únicamente la continuidad en DQO y TKN durante la conversión.

### 1.5.1.1.1 Interfaz ASM1→ADM1

La conversión de los componentes del modelo ASM1 en los componentes del modelo ADM1 se ha llevado a cabo, tal y como se ha mencionado anteriormente, garantizando la continuidad de DQO y TKN.

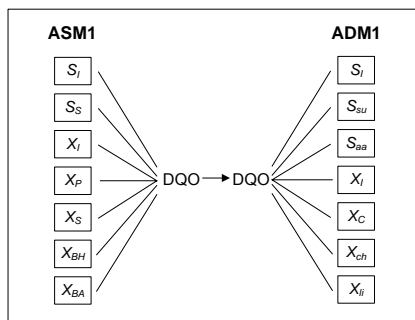


Figura 1.15. Conversión de la DQO

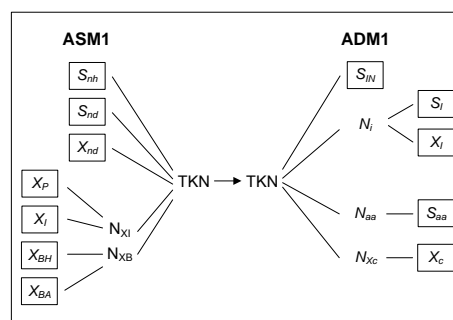


Figura 1.16. Conversión del TKN

Previamente a la conversión de los componentes ASM1 a los componentes ADM1, los aceptores de electrones ( $S_O$  y  $S_{NO}$ ) existentes en el flujo másico de entrada a la interfaz deben quedar reducidos a partir de la DQO disponible. La DQO requerida se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$DQO_{demanda} = S_O + 2,86 \cdot S_{NO} \quad (1.25)$$

El valor de DQO necesario para la reducción de los componentes del modelo ASM1  $S_O$  y  $S_{NO}$  debe provenir en primer lugar del componente  $S_S$ . En caso de que la cantidad de éste no fuera suficiente para reducirlos completamente, la DQO se tomaría sucesivamente de los componentes  $X_S$ ,  $X_{BH}$  y  $X_{BA}$ . En el caso extremo de que no existiera la suficiente cantidad de DQO para reducir el  $S_O$  y  $S_{NO}$  presentes, las concentraciones restantes de éstos entrarían y saldrían del digestor anaerobio sin intervenir en ninguna transformación biológica.

Una vez reducidos los componentes  $S_O$  y  $S_{NO}$ , la conversión de la DQO y el TKN totales obtenidos a partir de los componentes del modelo ASM1 (Figura 1.15 y Figura 1.16), se reparten entre los componentes del modelo ADM1 mediante cuatro pasos consecutivos.

### A) Conversión del nitrógeno orgánico soluble

En este paso, el nitrógeno orgánico soluble, representado por el componente  $S_{nd}$  en el modelo ASM1, junto con la DQO requerida, se convierte en el componente  $S_{aa}$  del modelo ADM1. La DQO requerida en esta conversión debe provenir del componente  $S_S$ . Sin embargo, si la cantidad de  $S_S$  existente es menor que la DQO requerida,  $S_{aa}$  coincidirá con  $S_S$  y el  $S_{nd}$  restante se incluirá dentro del TKN total existente. Si por el contrario, la cantidad de  $S_S$  es mayor que la DQO necesaria para convertir todo el  $S_{nd}$ , el resto de  $S_S$  se convertirá en  $S_{su}$ . En la Figura 1.17, se muestra esta conversión.

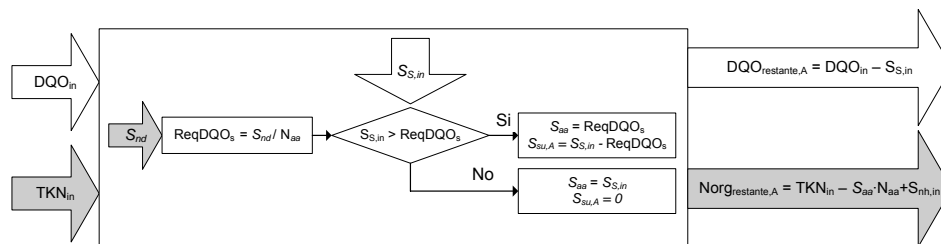


Figura 1.17. Esquema del paso A de la interfaz ASM1 →ADM1

### B) Conversión de la materia orgánica inerte soluble

En este paso, el componente  $S_I$  del modelo ASM1 se convierte, junto con la cantidad de N requerida, en el componentes  $S_I$  del modelo ADM1.

Esta conversión se lleva a cabo calculando en primer lugar, el N orgánico requerido para convertir la cantidad de  $S_I$  en el modelo ASM1 a  $S_I$  en el modelo ADM1. Si la cantidad de N disponible en este paso ( $N_{org\_restante\_A}$ ) es mayor que la requerida, el componente  $S_I$  se convierte enteramente. En caso contrario, la cantidad de  $S_I$  en el modelo ADM1 estará limitada por la cantidad de N disponible, y la cantidad restante de  $S_I$  procedente del modelo ASM1 se convertirá en el componente  $S_{su}$ . La Figura 1.18 muestra de forma esquemática esta conversión.

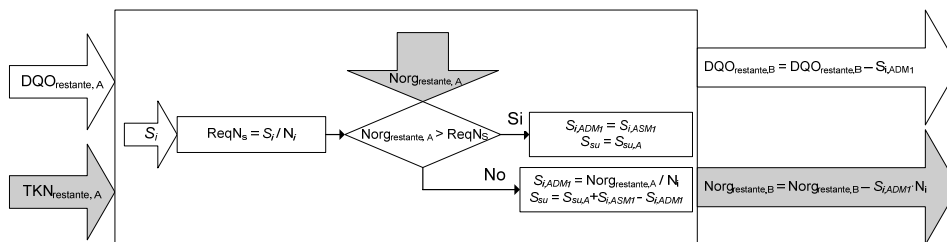


Figura 1.18. Esquema del paso B de la interfaz ASM1 → ADM1

### C) Conversión de la materia orgánica inerte particulada

En este paso, los componentes  $X_P$  y  $X_I$  del modelo ASM1 se convierten, junto con la cantidad de N requerida, en el componente  $X_I$  del modelo ADM1.

La conversión de la materia inerte particulada  $X_I$  y  $X_P$  en el modelo ASM1 se lleva a cabo mediante un procedimiento similar al detallado en el paso B. Así, en primer lugar se calcula el N requerido para convertir los componentes  $X_I$  y  $X_P$  del modelo ASM1 en el componente  $X_I$  del modelo ADM1. Si la cantidad de N orgánico restante una vez finalizado el paso anterior ( $Norg_{\text{restante,B}}$ ) es mayor que la requerida para convertir los componentes  $X_I$  y  $X_P$  en  $X_I$  del modelo ADM1, esta conversión se dará completamente. En caso contrario, la cantidad de N disponible limitará la cantidad de  $X_I$  en el modelo ADM1.

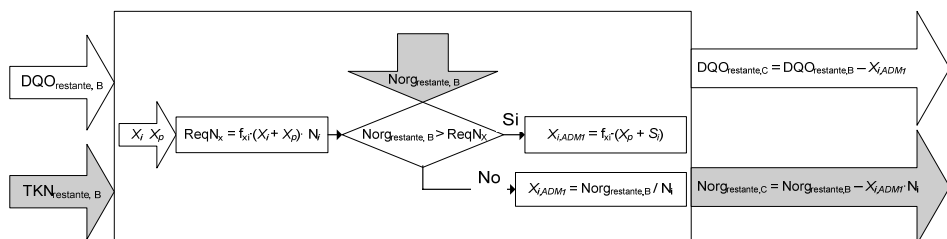


Figura 1.19. Esquema del paso C de la interfaz ASM1 → ADM1

La DQO y TKN restantes se distribuyen en el siguiente paso tal y como se describe a continuación.



#### D) Fraccionamiento de la DQO y TKN restantes

En este último paso se lleva a cabo el reparto de la DQO y TKN restante maximizando la cantidad del componente  $X_c$  en el ADM1. De esta forma, en primer lugar se calcula la DQO necesaria para agotar la cantidad de N orgánico disponible, de acuerdo con el contenido en N del componente  $X_c$ . Si la cantidad de DQO calculada es menor que la DQO disponible, el valor de  $X_c$  coincidirá con el calculado y el resto se fraccionará en  $X_{ch}$  y  $X_{ii}$ . En caso contrario,  $X_c$  estará limitado por la cantidad de DQO disponible y el N orgánico restante quedará convertido en N inorgánico.

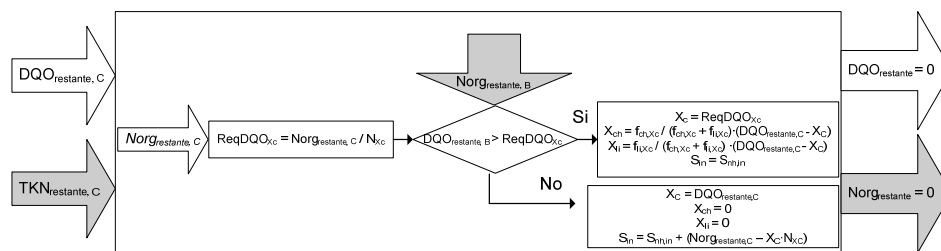


Figura 1.20. Esquema del paso D del transformador ASM1  $\rightarrow$ ADM1

Finalmente, debe indicarse que, aunque los componentes  $S_{cat}$  y  $S_{an}$  en el modelo ADM1 no tienen un equivalente en el modelo ASM1, sus valores deberían calcularse a partir de medidas en el agua residual estudiada o estimarse a partir de los valores de  $S_{in}$  y  $S_{ic}$ .

##### 1.5.1.1.2 Interfaz ADM1 $\rightarrow$ ASM1

La conversión de los componentes ADM1 a los componentes ASM1 es algo más sencilla y se representa de forma esquemática en las siguientes figuras.

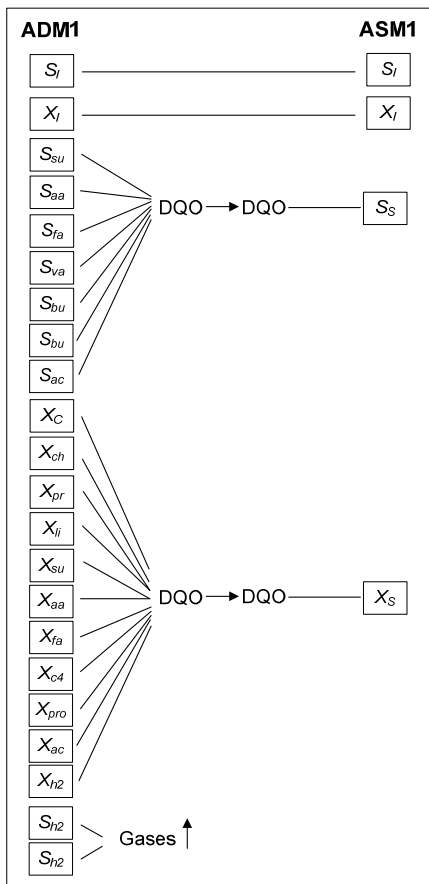


Figura 1.21. Transformación de la DQO en ADM1  $\rightarrow$  ASM1

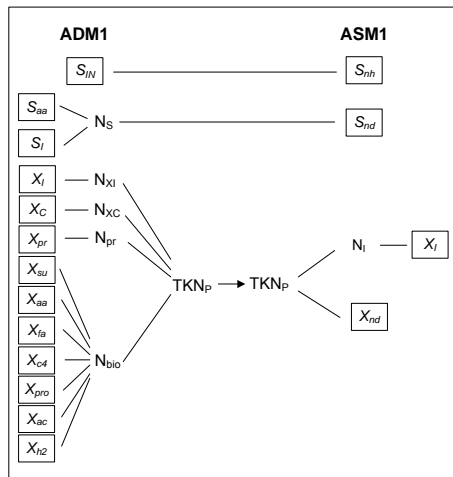


Figura 1.22. Transformación del N en ASM1  $\rightarrow$  ADM1

Tal y como se observa en la Figura 1.21, la DQO soluble y particulada se convierten directamente en los componentes  $S_S$  y  $X_S$  del modelo ASM1. Igualmente, el N procedente de los componentes del modelo ADM1 queda convertido en los componentes  $S_{nh}$ ,  $S_{nd}$  y  $X_{nd}$  del modelo ASM1. Finalmente, el componente  $S_{alk}$  que representa la alcalinidad en el modelo ASM1 puede calcularse a partir del componente  $S_{IC}$ .

### 1.5.1.2 Interfaces CBIM

La metodología CBIM (*Continuity-Based-Interface-Models*) se propone en (Vanrolleghem *et al.*, 2005) como un procedimiento que permite la construcción de interfaces entre dos modelos cualesquiera garantizando la continuidad de masa y carga en la conexión. Esta metodología se basa en la definición de un conjunto de *conversiones* que describen, mediante una matriz de Petersen, el cambio de los *componentes del modelo origen* a los *componentes del modelo destino* a partir de un conjunto de transformaciones algebraicas basadas en la continuidad de los flujos másicos.

| <i>Componentes</i> →<br><i>Conversiones</i> ↓ | <i>Componentes del modelo origen</i> |                |     |                | <i>Componentes del modelo destino</i> |                  |     |                  |
|-----------------------------------------------|--------------------------------------|----------------|-----|----------------|---------------------------------------|------------------|-----|------------------|
|                                               | X <sub>1</sub>                       | X <sub>2</sub> | ... | X <sub>p</sub> | X <sub>p+1</sub>                      | X <sub>p+2</sub> | ... | X <sub>p+Q</sub> |
| $\rho_1$                                      | $V_{1,1}$                            | ...            | ... | ...            | ...                                   | $V_{1,p+2}$      | ... | ...              |
| $\rho_2$                                      | ...                                  | $V_{2,2}$      | ... | ...            | $V_{2,p+1}$                           | ...              | ... | $V_{2,p+Q}$      |
| ...                                           |                                      |                |     |                |                                       |                  |     |                  |
| $\rho_n$                                      | ...                                  | ...            | ... | $V_{n,p}$      | ...                                   | ...              | ... | $V_{n,p+Q}$      |

Figura 1.23. Esquema de las matrices de Petersen en las interfaces CBIM

Por lo tanto, la interfaz construida de acuerdo con la metodología CBIM, debe incluir el conjunto de conversiones necesarias para garantizar que los componentes del modelo origen se transforman en componentes del modelo destino y además debe garantizar la continuidad de la masa en términos de C, H, N, O, P y carga en cada una de estas conversiones. Con este objetivo, la construcción de un interfaz CBIM requiere que todos los componentes de los modelos origen y destino estén descritos en base a sus fracciones másicas y que además algunos de los componentes (del modelo origen o destino) actúen como componentes *fuentes-sumidero*, asumiendo las posibles descompensaciones de masa en cada una de las conversiones.

Finalmente, los flujos másicos de los componentes destino se obtienen a la salida del interfaz CBIM mediante una serie de ecuaciones algebraicas tal y como se indica a continuación:

$$FM_{Entrada,k} = - \sum_{j=1}^n v_{j,k} \cdot \rho_j \quad k=1, \dots, P \quad (1.26)$$

$$FM_{Salida,k} = - \sum_{j=1}^n v_{j,k} \cdot \rho_j \quad k=P+1, \dots, P+Q \quad (1.27)$$

Donde

$FM_{Entrada,k}$ : Flujo másico de entrada a la interfaz del componente  $k$

$FM_{Salida,k}$ : Flujo másico de salida de la interfaz del componente  $k$

$v_{j,k}$ : coeficientes estequiométricos en la matriz de Petersen de la interfaz

$n$ : número de conversiones

$P$ : número de componentes del modelo origen

$Q$ : número de componentes del modelo destino

El procedimiento seguido en la construcción de las interfaces ASM1-ADM1 de acuerdo con la metodología CBIM se muestra con detalle en el Anexo C.

Tanto las interfaces propuestas por Copp *et al.*, 2003, como la metodología CBIM, han sido utilizadas en esta tesis en la construcción de las interfaces entre los modelos estándar ASM1 y ADM1 para reproducir el comportamiento global de una EDAR que integra líneas de aguas y fangos. Las ventajas y desventajas que presenta la utilización de interfaces se analizan y discuten en el Capítulo 3,. Sin embargo, en este punto debe indicarse que la conversión de los componentes de un modelo origen a los de un modelo destino de forma general y garantizando la continuidad de la masa, ante cualquier escenario estacionario o dinámico, es una tarea que entraña gran dificultad debido principalmente a la diferente descripción de los compuestos presentes en las aguas residuales y fangos en los diferentes modelos.

### 1.5.2 Modelo único

La segunda alternativa para obtener modelos integrales de EDAR consiste en la construcción de modelos únicos que consideran los componentes y transformaciones necesarios para describir todos los procesos que tienen lugar en cada una de las tecnologías que incluye la EDAR, tanto en la línea de aguas como de fangos. A continuación se describen brevemente dos modelos propuestos como modelos únicos para describir las transformaciones en una EDAR.

### 1.5.2.1 Modelo general BioWin

Este modelo general, implantado en la plataforma de simulación BLOWIN (Jones and Tákaacs, 2004), incluye de forma integral los procesos biológicos y físicos que tienen lugar en las tecnologías de fangos activados, digestión anaerobia y decantación. Además, el modelo BioWin incluye el cálculo del pH, transferencias líquido-gas y precipitación química.

Este modelo general se divide en los cinco grupos siguientes:

- *Proceso de fangos activados*

El proceso de fangos activados, a su vez, incluye 5 módulos que describen el crecimiento y desaparición de heterótrofos, el crecimiento y desaparición de consumidores de metanol en condiciones anóxicas, los procesos de hidrólisis, adsorción y amonificación, el crecimiento y desaparición de la biomasa autótrofa y el crecimiento y desaparición de la biomasa acumuladora de fósforo.

- *Proceso de digestión anaerobia*

El proceso de digestión anaerobia se describe de acuerdo con el modelo anaerobio propuesto en (Siegrist *et al.*, 2002) y que incluye los procesos de fermentación, el crecimiento y desaparición de las acetogénicas y el crecimiento y desaparición de las metanogénicas.

- *Precipitación química*

La precipitación química en el modelo BioWin describe la formación de sales metálicas insolubles que se da comúnmente en aguas residuales. Dentro de la precipitación química se incluyen los procesos de precipitación de fosfatos de hierro y aluminio, y la precipitación espontánea de sales de calcio y magnesio.

- *Proceso de decantación*

Para describir la separación sólido-líquido en unidades de separación el modelo BioWin incluye dos modelos basados en la teoría del flujo de sólidos: El modelo de Vesilind modificado y el modelo de doble exponencial.

- *Cálculo del pH*

- *Descripción de la transferencia líquido-gas*

En el modelo BioWin se consideran los procesos de transferencia líquido-gas entre las fases disueltas y gaseosas del oxígeno, dióxido de carbono, hidrógeno y amoníaco.

### 1.5.2.2 Modelo biológico BNRM1

El modelo BNRM1 (*Biological Nutrient Renoval Model N°1*) consiste en un único modelo que incluye los procesos físicos, químicos y biológicos más importantes que tienen lugar en una EDAR (Seco *et al.*, 2004).

El modelo BNRM1, implantado en la plataforma de simulación DESASS (DEsing and Simulation of Activated Sludge systems), permite el diseño y estudio de la operación por simulación de EDAR que integran decantadores primarios, tecnologías de fangos activados con eliminación de DQO, N y P, espesadores por gravedad, digestores de fangos aerobios o anaerobios y tecnologías de fermentación.

Los procesos bioquímicos están basados en los modelos estándar ASM2d para los que tienen lugar en condiciones aerobias y anóxicas. Para las condiciones anaerobias se consideran tres poblaciones de bacterias que reproducen los procesos de acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis. A diferencia del modelo ASM2d, el modelo BNRM1 predice el valor del pH mediante un balance de cargas tanto en condiciones anaerobias, como en condiciones anóxicas y anaerobias.

La estequiometría en las transformaciones está basada en seis ecuaciones de continuidad para la DQO, nitrógeno, fósforo, sólidos suspendidos totales, carbono y carga. Por otro lado, las ecuaciones cinéticas de las transformaciones incluyen los términos de activación e inhibición necesarios para describir correctamente la actividad biológica en función de las condiciones ambientales y pH del medio.

## 1.6 CONCLUSIONES

Las tecnologías empleadas en la depuración del agua residual y el tratamiento de los fangos han sufrido una larga evolución desde sus comienzos. Esta evolución, causada principalmente por un conocimiento más profundo en el campo de la biología y una legislación más exigente con respecto a la calidad de los vertidos de EDAR, ha desembocado en la actualidad en EDAR que integran diferentes tecnologías, y que entrañan una evidente complejidad tanto en su diseño como en su operación.

A este respecto, el modelado matemático en el tratamiento de las aguas residuales y fangos, ha supuesto a lo largo de las últimas décadas una herramienta útil en el diseño, operación y control de las EDAR. Fue en la década de los 80 cuando, debido los avances en el campo de la computación y el trabajo desarrollado por la Universidad de Cape Town, se publicó el modelo ASM1 que implicó no sólo la aparición de un modelo de fangos activados, sino la aparición de una estructura de modelado estándar. Así, a partir de su publicación, el modelo ASM1 ha sido empleado como base para desarrollar otros modelos de fangos activados que permiten describir mayor número de procesos bioquímicos (ASM2/ASM2d y ASM3). El modelado en el tratamiento de fangos, aunque algo más tardío debido a la complejidad de los procesos bioquímicos que incluye, también ha desembocado en la actualidad en el modelo ADM1, que manteniendo la estructura propuesta en el modelo ASM1, permite describir los procesos bioquímicos de degradación anaerobia.

Sin embargo, es importante señalar que aunque estos modelos son los más empleados en la actualidad, éstos están orientados a tecnologías específicas. Así, aunque describen los procesos bioquímicos o físicos que tienen lugar en cada tecnología de forma realista, los modelos empleados en los sistemas de fangos activados, digestores, separadores, etc. presentan diferencias relevantes en su complejidad y en la descripción de los procesos bioquímicos.

La obtención de un modelo de EDAR que integre diferentes tecnologías, por ejemplo líneas de aguas y fangos, y que tenga en cuenta las interrelaciones entre ellas (digestión del fango purgado, retornos, etc.) es una tarea que entraña cierta dificultad si se quiere llevar a cabo de forma rigurosa y garantizando la continuidad de masa y carga en todo el modelo. A este respecto en la actualidad se han planteado dos soluciones.

La primera de ellas consiste en la construcción de interfaces específicas entre modelos estándar. Aunque ésta ha sido la solución más utilizada hasta el momento, debe remarcarse que únicamente las interfaces construidas con la metodología CBIM garantizan la continuidad de la masa elemental y carga en la conexión. Sin embargo, la construcción de estas interfaces es una tarea que entraña una dificultad considerable debido a la diferente descripción de los componentes en los diferentes modelos estándar. Tal y como se verá en el Capítulo 3, tanto la construcción como la posterior utilización de estas interfaces en condiciones dinámicas requiere un conocimiento avanzado tanto de los modelos a conectar como de la interfaz empleada.

La segunda solución consiste en la utilización de modelos que integren todos los procesos bioquímicos en cualquier condición ambiental, físicos y físico-químicos relevantes en la EDAR. Estos modelos, frente a la utilización de interfaces, permiten el modelado de EDAR que incluya diferentes tecnologías garantizando la continuidad de masa y carga. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que estos modelos poseen una flexibilidad limitada en el caso de que se quieran estudiar EDAR que incluyan procesos bioquímicos o físicos distintos de los considerados en el modelo o EDAR más sencillas.

En esta tesis se presenta una nueva metodología de modelado integral, que combinando diferentes aspectos de las dos propuestas existentes, propone un procedimiento sistemático para la construcción de modelos matemáticos integrales de EDAR. Los principios en los que se basa esta metodología permiten la construcción de modelos integrales adaptados a la EDAR estudiada garantizando la continuidad de la masa elemental y carga en el modelo, sin necesidad de la construcción de interfaces específicas entre los distintos modelos de proceso unitario. Las características más importantes de esta metodología y el procedimiento propuesto para la construcción de modelos integrales de EDAR se presentan en el Capítulo 2.





## CAPÍTULO 2

# ***METODOLOGÍA PWM PARA EL MODELADO INTEGRAL DE EDAR***

---

Una síntesis de este capítulo ha sido presentado a:

*Grau P., de Gracia M., Vanrolleghem P. and Ayesa E. (2007) A new Plant-Wide modelling methodology for WWTPs. Aceptado en la revista Water Research (en fase de corrección).*

### **2.1 INTRODUCCIÓN**

El modelado matemático y la simulación numérica de los diferentes procesos unitarios que forman parte de las EDAR es una herramienta muy útil en el estudio de la operación y diseño de las EDAR.

Sin embargo, la gran mayoría de los modelos matemáticos existentes en la actualidad, aunque describen con éxito los principales mecanismos de los elementos de proceso unitario (reactores de fangos activados, decantadores, espesadores, digestores, filtros, etc.), han sido construidos para describir específicamente los principales mecanismos de cada uno de los elementos por separado. Así, tal y como se ha descrito en el Capítulo 1, en la actualidad

existen grandes limitaciones para analizar dinámicamente una EDAR en su globalidad. Debe tenerse en cuenta que debido a las interrelaciones que existen entre los diferentes elementos unitarios, únicamente un modelo de EDAR que integre el comportamiento de los diferentes elementos, permitirá analizar el sistema en su globalidad y explorar distintas estrategias de operación para cada escenario.

De las conclusiones extraídas en el Capítulo 1, puede afirmarse que la obtención de modelos integrales de EDAR, es una tarea que entraña dificultad y que debe realizarse con rigor para evitar incoherencias en los balances de masa a lo largo de la planta.

En este Capítulo se presenta una metodología de modelado integral de EDAR que permite la construcción de los modelos matemáticos que describan de forma global el comportamiento dinámico de una EDAR que incluye líneas de aguas residuales y fangos.

Esta metodología está basada en la selección, para cada caso de estudio, de las transformaciones que se dan de forma más relevante en la EDAR y permite la construcción de modelos integrales específicos para la EDAR estudiada sin necesidad de transformadores entre los modelos de proceso unitario.

Frente a los modelos existentes en los cuales los componentes se expresan a partir de la medida analítica DQO, esta metodología propone una caracterización de los componentes en base a sus fracciones másicas, y por lo tanto, la DQO junto con otras medidas como SST, TKN, etc. se consideran variables calculadas a partir de los componentes y sus fracciones másicas. Esta definición de los componentes permite garantizar la continuidad de masa y carga en cualquier punto del modelo integrado construido de forma sencilla y rigurosa.

Finalmente, la metodología que se propone a continuación permite posibles ampliaciones con nuevos procesos de EDAR de forma sencilla lo que la convierte en una herramienta flexible para la construcción de cualquier modelo de EDAR.

A continuación se presentan las características de esta nueva metodología y se describe el procedimiento a seguir para la construcción de modelos integrales de EDAR.

## 2.2 DESCRIPCIÓN DE LA METODOLOGÍA PWM

De acuerdo con lo mencionado anteriormente, en este capítulo se propone una nueva metodología de modelado integral de EDAR denominada metodología **PWM** (*Plant-Wide Modelling*) que permite la construcción rigurosa y sistemática del modelo matemático más apropiado para describir de forma global el comportamiento dinámico de una EDAR que incluye las líneas de aguas residuales y fangos. Esta metodología está basada principalmente en la selección del conjunto de transformaciones de proceso estrictamente necesarias para el modelado de los diferentes elementos de proceso unitario que incluye la EDAR estudiada. Frente al planteamiento de modelado convencional “*basado en procesos*”, el planteamiento propuesto en esta tesis “*basado en transformaciones*”, permite la construcción de diferentes modelos compatibles de proceso unitario que no requieren de interfaces específicas para su conexión y además, garantiza la continuidad de masa y carga en todo el modelo integral de EDAR obtenido.

La metodología de modelado propuesta requiere como paso previo a la construcción del modelo global de planta, la recopilación en una Lista global de Transformaciones **LT** (*List of Transformations*) de todas aquellas transformaciones bioquímicas, químicas y físico-químicas, expresadas con su correspondiente estequiometría y cinética (matriz de Petersen), que tienen lugar de forma relevante en una EDAR, incluyendo las líneas de tratamiento de aguas residuales y fangos.

Una vez determinada la LT, la construcción de cualquier modelo de planta se basa en un procedimiento sistemático que incluye tres pasos sucesivos:

- a) Selección del conjunto de transformaciones necesarias para describir todos los procesos que tienen lugar en la EDAR estudiada y construcción de un Modelo de Transformaciones de Planta **PTM** (*Plant Transformations Model*) específico para esta EDAR.
- b) Construcción del conjunto de Modelos de Procesos Unitarios UPM (*Unit Process Models*) compatibles entre sí, y que describen el comportamiento de cada una de los elementos incluidos en la EDAR.
- c) Construcción del Modelo Integral de EDAR **PWM** (*Plant Wide Model*) mediante la conexión directa de los Modelos de Proceso Unitario construidos en el paso anterior.

En los siguientes apartados se describe la LT propuesta en esta tesis (Apartado 2.3) y el procedimiento sistemático para la construcción de modelos integrales de EDAR (Apartado 2.4).

## 2.3 LISTA GLOBAL DE TRANSFORMACIONES (LT)

Tal y como se ha mencionado anteriormente, la LT, base para la construcción de cualquier modelo integral de planta, debe incluir todas aquellas transformaciones bioquímicas, químicas y fisico-químicas que puedan tener lugar en una EDAR y debe generar una librería estándar aplicable a cualquier EDAR dentro del tratamiento de aguas residuales y fangos. La Figura 2.1 muestra un esquema de todas las transformaciones recopiladas en la LT propuesta en esta tesis. Esta lista puede modificarse si se considera necesario, sin modificación alguna de la metodología propuesta en esta tesis.

La base empleada para la construcción de esta librería han sido los modelos propuestos por la IWA: ASM1, ASM2d, ASM3 (Henze *et al.*, 2000), RWQM1 (Reichert *et al.*, 2001) y ADM1 (Batstone *et al.*, 2002). No obstante, con el objetivo de obtener una LT estándar y compatible que permita el modelado de EDAR en un contexto más general, las transformaciones incluidas en los modelos estándar se han modificado en base a una serie de requisitos.

Por un lado, la estequiometría de las transformaciones incluidas en la LT debe construirse de forma que todas y cada una de ellas garanticen la continuidad de masa elemental en base a Carbono (C), Nitrógeno (N), Oxígeno (O), Fósforo (P), Hidrógeno (H), otros elementos (X) y carga. Además, los componentes utilizados en la descripción de la estequiometría de estas transformaciones deben definirse de forma que no existan redundancias entre ellos.

Por otro lado, las ecuaciones cinéticas deben incorporar todos los términos de activación e inhibición necesarios para reproducir la actividad apropiada en cada una de las condiciones ambientales que puede existir en una EDAR.

A continuación se detalla el procedimiento de análisis de continuidad de masa elemental y carga para cada transformación (Apartado 2.3.1), así como los términos de activación e inhibición utilizados para incluir las condiciones ambientales (Apartado 2.3.2). Finalmente se detalla la estequiometría y cinética de las transformaciones incluidas en la LT (Apartado 2.3.3).

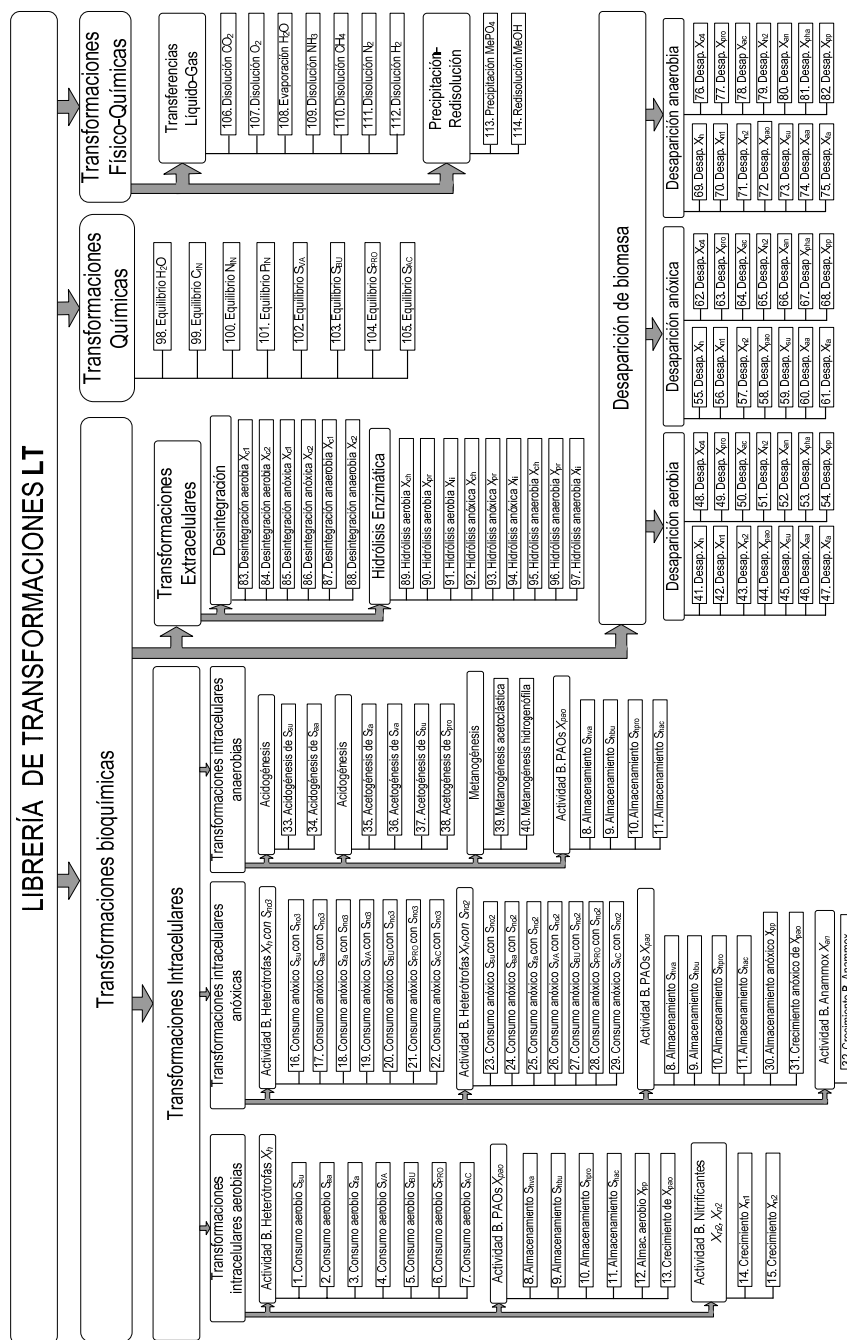


Figura 2.1. Librería de Transformaciones LT

### 2.3.1 Continuidad de masa y carga en la definición de la estequiometría

Tal y como se ha mencionado anteriormente, como primer requisito de la metodología propuesta, la estequiometría de las transformaciones incluidas en la LT debe construirse de forma que, en cada una de ellas, se garantice la continuidad de la masa elemental y carga. Con este objetivo, los componentes utilizados en la construcción de la estequiometría de las transformaciones deben describirse en base a su composición másica elemental y densidad de carga y la siguiente ecuación, llamada ecuación de continuidad, debe cumplirse en todas y cada una de las transformaciones.

$$\sum_i v_{ij} \cdot \beta_{E,i} = 0 \quad E = C, H, O, N, P, \text{Carga eléctrica} \quad (2.1)$$

Donde

$v_{ij}$  es el coeficiente estequiométrico para el componente  $i$  en la transformación  $j$

$\beta_{E,i}$  es el factor de conversión del componente  $i$  a la unidad de medida del elemento o carga  $E$  al que se le aplica la conservación

A continuación se describen los componentes involucrados en las transformaciones incluidas en la LT y las pautas seguidas en el cálculo de los factores de conversión  $\beta_{E,i}$ , necesarios para la construcción de la estequiometría de las transformaciones.

#### 2.3.1.1 Descripción de los componentes

##### 2.3.1.1.1 Nomenclatura, unidades y definición

Los componentes  $C_i$  necesarios para la descripción de las transformaciones incluidas en la LT pueden clasificarse, según el estado del compuesto al que representan, en disueltos  $S_i$ , particulados  $X_i$  y gaseosos  $G_i$ .

La unidad estequiométrica ( $UE_i$ ) escogida para describir los componentes orgánicos ha sido la DQO debido a su uso tradicional como medida de caracterización de aguas residuales y fangos. Los componentes inorgánicos se han expresado en gramos de elemento carbono (C), hidrógeno (H), oxígeno (O),

nitrógeno (N), fósforo (P) y el elemento genérico (X). Los componentes que representan el H<sub>2</sub>O y el O<sub>2</sub> están expresados en masa de componente. En cualquier caso, la definición de los componentes en base a su composición másica permite, como se verá posteriormente, expresar los componentes en cualquier otra unidad sin alterar el procedimiento.

### 2.3.1.1.2 Composición másica y densidad de carga

La definición de un componente a partir de su composición másica elemental se basa en la hipótesis de que este componente está formado por fracciones másicas constantes en el tiempo  $\alpha_{E,i}$  de los elementos C, H, O, N, P y X, que engloba a todos los elementos distintos a los enumerados (Reichert *et al.*, 2001). Por lo tanto, de acuerdo con esta hipótesis, cualquier componente incluido en la LT puede describirse mediante la siguiente fórmula estequiométrica:

$$\left[ C(\alpha_{C,i}/12)H(\alpha_{H,i})O(\alpha_{O,i}/16)N(\alpha_{N,i}/14)P(\alpha_{P,i}/31)X(\alpha_{X,i}/Mx) \right]^{\alpha_{Ch,i}} \quad (2.2)$$

Donde

Los parámetros  $\alpha_{C,i}$ ,  $\alpha_{H,i}$ ,  $\alpha_{O,i}$ ,  $\alpha_{N,i}$ ,  $\alpha_{P,i}$  y  $\alpha_{X,i}$  representan las *fracciones másicas elementales* de un componente genérico  $C_i$  que se definen como la masa de C, H, O, N, P u otro elemento X por unidad de masa del componente  $C_i$ .

$$\alpha_{E,i} = \frac{\text{masa de Elemento } (E)}{\text{masa del componente } C_i} \quad \left[ \frac{g E}{g C_i} \right] \quad E = C, H, O, N, P \quad (2.3)$$

El parámetro  $\alpha_{Ch,i}$  representa la *densidad de carga* de un componente genérico  $S_i$  definida como la carga eléctrica asociada a su unidad de masa.

$$\alpha_{Ch,i} = \frac{\text{mol carga}}{\text{masa del componente } C_i} \quad \left[ \frac{\text{mol}}{g C_i} \right] \quad (2.4)$$

En las siguientes tablas se presentan las fracciones de masa y carga para los componentes considerados en la descripción de las transformaciones incluidas en la LT propuesta.



Tabla 2.1. Componentes disueltos

| <i>i</i> | Nombre      | Fórmula                                                   | Descripción            | UE                              | Fracciones másicas y densidad de carga |                 |                 |                 |                 |                  |                 |
|----------|-------------|-----------------------------------------------------------|------------------------|---------------------------------|----------------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|-----------------|
|          |             |                                                           |                        |                                 | $\alpha_{C,i}$                         | $\alpha_{H,i}$  | $\alpha_{O,i}$  | $\alpha_{N,i}$  | $\alpha_{P,i}$  | $\alpha_{Ch,i}$  | $\alpha_{X,i}$  |
| 1        | $S_{h2o}$   | H <sub>2</sub> O                                          | Agua                   | gH <sub>2</sub> O               | ---                                    | 0,1111          | 0,8889          | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 2        | $S_{o2}$    | O <sub>2</sub>                                            | Oxígeno disuelto       | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | ---                                    | ---             | 1               | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 3        | $S_{h+}$    | H <sup>+</sup>                                            | Protones               | gH/m <sup>3</sup>               | ---                                    | 1               | ---             | ---             | ---             | 1                | ---             |
| 4        | $S_{oh-}$   | OH <sup>-</sup>                                           | Iones Hidroxilo        | gH/m <sup>3</sup>               | ---                                    | 0,0588          | 0,9412          | ---             | ---             | -0,0588          | ---             |
| 5        | $S_{hpo4}$  | HPO <sub>4</sub> <sup>=</sup>                             | Hidroxilo fosfato      | gP/m <sup>3</sup>               | ---                                    | 0,0104          | 0,6667          | ---             | 0,3229          | -0,0208          | ---             |
| 6        | $S_{h2po4}$ | H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>               | Dihidroxilo fosfato    | gP/m <sup>3</sup>               | ---                                    | 0,0206          | 0,6598          | ---             | 0,3196          | -0,0103          | ---             |
| 7        | $S_{nh4}$   | NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>                              | Amonio                 | gN/m <sup>3</sup>               | ---                                    | 0,2222          | ---             | 0,7778          | ---             | 0,0556           | ---             |
| 8        | $S_{nh3}$   | NH <sub>3</sub>                                           | Amoniac disuelto       | gN/m <sup>3</sup>               | ---                                    | 0,1765          | ---             | 0,8235          | ---             | ---              | ---             |
| 9        | $S_{co2}$   | CO <sub>2</sub>                                           | Dióxido carbono dis.   | gC/m <sup>3</sup>               | 0,2727                                 | ---             | 0,7273          | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 10       | $S_{hco3-}$ | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>                             | Bicarbonato            | gC/m <sup>3</sup>               | 0,1967                                 | 0,0164          | 0,7869          | ---             | ---             | -0,0164          | ---             |
| 11       | $S_{su}$    | C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>             | Monosacáridos          | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,40                                   | 0,0667          | 0,5333          | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 12       | $S_{aa}$    | C <sub>4</sub> H <sub>6,1</sub> O <sub>1,2</sub> N        | Aminoácidos            | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,5498                                 | 0,0699          | 0,2199          | 0,1604          | ---             | ---              | ---             |
| 13       | $S_{fa}$    | C <sub>16</sub> O <sub>2</sub> H <sub>32</sub>            | LCFAs                  | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,75                                   | 0,125           | 0,125           | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 14       | $S_{hva}$   | C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>             | Ácido valérico         | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,5882                                 | 0,098           | 0,3137          | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 15       | $S_{va-}$   | C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub> <sup>-</sup> | Valerato               | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,5941                                 | 0,0891          | 0,3168          | ---             | ---             | -0,0099          | ---             |
| 16       | $S_{hbu}$   | C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>              | Ácido butírico         | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,5455                                 | 0,0909          | 0,3636          | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 17       | $S_{bu-}$   | C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> <sup>-</sup> | Butirato               | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,5517                                 | 0,0805          | 0,3678          | ---             | ---             | -0,0115          | ---             |
| 18       | $S_{hpro}$  | C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>              | Ácido propiónico       | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,4865                                 | 0,0811          | 0,4324          | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 19       | $S_{pro-}$  | C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> <sup>-</sup> | Propionato             | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,4932                                 | 0,0685          | 0,4384          | ---             | ---             | -0,0137          | ---             |
| 20       | $S_{hac}$   | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>              | Ácido acético          | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,4                                    | 0,0667          | 0,5333          | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 21       | $S_{ac-}$   | C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> <sup>-</sup> | Acetato                | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,4068                                 | 0,0508          | 0,5424          | ---             | ---             | -0,0169          | ---             |
| 22       | $S_{h2}$    | H <sub>2</sub>                                            | Hidrógeno disuelto     | gDQO/m <sup>3</sup>             | ---                                    | 1               | ---             | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 23       | $S_{ch4}$   | CH <sub>4</sub>                                           | Metano disuelto        | gDQO/m <sup>3</sup>             | 0,75                                   | 0,25            | ---             | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 24       | $S_{n2}$    | N <sub>2</sub>                                            | Nitrógeno disuelto     | gN/m <sup>3</sup>               | ---                                    | ---             | ---             | 1               | ---             | ---              | ---             |
| 25       | $S_{no2}$   | NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>                              | Nitritos               | gN/m <sup>3</sup>               | ---                                    | ---             | 0,6957          | 0,3043          | ---             | -0,0217          | ---             |
| 26       | $S_{no3}$   | NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>                              | Nitratos               | gN/m <sup>3</sup>               | ---                                    | ---             | 0,7742          | 0,2258          | ---             | -0,0161          | ---             |
| 27       | $S_{k+}$    | K <sup>+</sup>                                            | Cationes de Potasio    | gk/m <sup>3</sup>               | ---                                    | ---             | ---             | ---             | ---             | 0,0256           | 1               |
| 28       | $S_{Mg2+}$  | Mg <sup>2+</sup>                                          | Cationes de Magnesio   | gMg/m <sup>3</sup>              | ---                                    | ---             | ---             | ---             | ---             | 0,0823           | 1               |
| 29       | $S_I$       | --                                                        | Inertes solubles       | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\alpha_{C,29}$                        | $\alpha_{H,29}$ | $\alpha_{O,29}$ | $\alpha_{N,29}$ | $\alpha_{P,29}$ | $\alpha_{Ch,29}$ | $\alpha_{X,29}$ |
| 30       | $S_p$       | --                                                        | Producto sol. de lisis | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\alpha_{C,30}$                        | $\alpha_{H,30}$ | $\alpha_{O,30}$ | $\alpha_{N,30}$ | $\alpha_{P,30}$ | $\alpha_{Ch,30}$ | $\alpha_{X,30}$ |

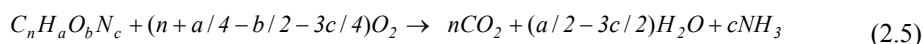
Tabla 2.2. Componentes particulados y gaseosos

| <i>i</i> | Nombre       | Fórmula                                                           | Descripción          | UE                                              | Fracciones máscas y densidad de carga |                 |                 |                 |                 |                  |                 |
|----------|--------------|-------------------------------------------------------------------|----------------------|-------------------------------------------------|---------------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|-----------------|
|          |              |                                                                   |                      |                                                 | $\alpha_{C,i}$                        | $\alpha_{H,i}$  | $\alpha_{O,i}$  | $\alpha_{N,i}$  | $\alpha_{P,i}$  | $\alpha_{Ch,i}$  | $\alpha_{X,i}$  |
| 31       | $X_{c1}$     | --                                                                | Complejos 1          | gDQO/m <sup>3</sup>                             | $\alpha_{C,31}$                       | $\alpha_{H,31}$ | $\alpha_{O,31}$ | $\alpha_{N,31}$ | $\alpha_{P,31}$ | $\alpha_{Ch,31}$ | $\alpha_{X,31}$ |
| 32       | $X_{c2}$     | --                                                                | Complejos 2          | gDQO/m <sup>3</sup>                             | $\alpha_{C,32}$                       | $\alpha_{H,32}$ | $\alpha_{O,32}$ | $\alpha_{N,32}$ | $\alpha_{P,32}$ | $\alpha_{Ch,32}$ | $\alpha_{X,32}$ |
| 33       | $X_{ch}$     | C <sub>6</sub> H <sub>9,95</sub> O <sub>5</sub> P <sub>0,05</sub> | Carbohidratos        | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,4401                                | 0,0608          | 0,489           | ---             | 0,01            | ---              | ---             |
| 34       | $X_{pr}$     | (C <sub>4</sub> H <sub>6,1</sub> O <sub>1,2</sub> N) <sub>x</sub> | Proteínas            | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5498                                | 0,0699          | 0,2199          | 0,1604          | ---             | ---              | ---             |
| 35       | $X_{li}$     | C <sub>51</sub> H <sub>97,9</sub> O <sub>6</sub> P <sub>0,1</sub> | Lípidos              | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,752                                 | 0,1201          | 0,118           | ---             | 0,01            | ---              | ---             |
| 36       | $X_h$        | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. Heterótrofas      | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 37       | $X_{n1}$     | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. Nitrosomonas      | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 38       | $X_{n2}$     | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. Nitrobacter       | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 39       | $X_{pao}$    | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. Ac. fósforo PAOs  | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 40       | $X_{pha}$    | C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>                      | Prod. de almacenam.  | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,2791                                | 0,0698          | 0,3721          | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 41       | $X_{pp}$     | K <sub>0,33</sub> Mg <sub>0,33</sub> PO <sub>3</sub>              | Poli-fosfatos        | gP/m <sup>3</sup>                               | ---                                   | ---             | 0,4794          | ---             | 0,3096          | ---              | 0,2111          |
| 42       | $X_{su}$     | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. deg. Azucares     | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 43       | $X_{aa}$     | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. deg. Aminoácidos  | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 44       | $X_{fa}$     | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. deg. LCFA         | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 45       | $X_{c4}$     | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. deg. Valer/butir  | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 46       | $X_{pro}$    | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. deg. Propiónico   | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 47       | $X_{ac}$     | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. deg acético       | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 48       | $X_{h2}$     | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. deg. hidrógeno    | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 49       | $X_{an}$     | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub>  | B. anammox           | gDQO/m <sup>3</sup>                             | 0,5155                                | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | 0,03            | ---              | ---             |
| 50       | $X_I$        | --                                                                | Inertes particulados | gDQO/m <sup>3</sup>                             | $\alpha_{C,50}$                       | $\alpha_{H,50}$ | $\alpha_{O,50}$ | $\alpha_{N,50}$ | $\alpha_{P,50}$ | $\alpha_{Ch,50}$ | $\alpha_{X,50}$ |
| 51       | $X_P$        | --                                                                | Prod. Lisis part.    | gDQO/m <sup>3</sup>                             | $\alpha_{C,51}$                       | $\alpha_{H,51}$ | $\alpha_{O,51}$ | $\alpha_{N,51}$ | $\alpha_{P,51}$ | $\alpha_{Ch,51}$ | $\alpha_{X,51}$ |
| 52       | $X_{Me(oh)}$ | Fe(OH) <sub>3</sub>                                               | Hidróxido férrico    | g/m <sup>3</sup>                                | ---                                   | 0,0281          | 0,4492          | ---             | ---             | ---              | 0,5227          |
| 53       | $X_{MeP}$    | FePO <sub>4</sub>                                                 | Fosfato de hierro    | g/m <sup>3</sup>                                | ---                                   | ---             | 0,4243          | ---             | 0,2055          | ---              | 0,3702          |
| 54       | $X_{II}$     | --                                                                | Inertes Inorgánicos  | g/m <sup>3</sup>                                | ---                                   | ---             | ---             | ---             | ---             | ---              | 1               |
| 55       | $G_{co2}$    | CO <sub>2</sub>                                                   | Dióxido carbono gas  | gC/m <sup>3</sup> <sub>(g)</sub>                | 0,2727                                | ---             | 0,7273          | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 56       | $G_{h2}$     | H <sub>2</sub>                                                    | Hidrógeno gas        | gDQO/m <sup>3</sup> <sub>(g)</sub>              | ---                                   | 1               | ---             | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 57       | $G_{ch4}$    | CH <sub>4</sub>                                                   | Metano gas           | gDQO/m <sup>3</sup> <sub>(g)</sub>              | 0,75                                  | 0,25            | ---             | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 58       | $G_{nh3}$    | NH <sub>3</sub>                                                   | Amoniac gas          | gN/m <sup>3</sup> <sub>(g)</sub>                | ---                                   | 0,1765          | ---             | 0,8235          | ---             | ---              | ---             |
| 59       | $G_{n2}$     | N <sub>2</sub>                                                    | Nitrógeno gas        | gN/m <sup>3</sup> <sub>(g)</sub>                | ---                                   | ---             | ---             | 1               | ---             | ---              | ---             |
| 60       | $G_{o2}$     | O <sub>2</sub>                                                    | Oxígeno gas          | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> <sub>(g)</sub>  | ---                                   | ---             | 1               | ---             | ---             | ---              | ---             |
| 61       | $G_{h2o}$    | H <sub>2</sub> O                                                  | Vapor de agua        | gH <sub>2</sub> O/m <sup>3</sup> <sub>(g)</sub> | ---                                   | 0,1111          | 0,8889          | ---             | ---             | ---              | ---             |

### 2.3.1.1.3 Demanda de oxígeno teórica

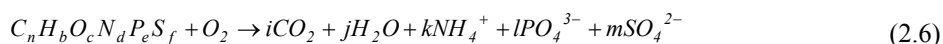
La definición de los componentes de la LT en base a sus fracciones máscas elementales y densidad de carga permite el cálculo sistemático y directo de la demanda de oxígeno teórica DOT para cada uno de estos componentes. Este cálculo se basa en la definición de DQO ya que, aunque tradicionalmente la DQO se ha empleado como unidad de medida de los compuestos orgánicos, ésta

no es una medida directa de la cantidad de compuesto, sino que por definición, representa la cantidad de  $O_2$  requerida para oxidar cualquier compuesto orgánico a  $CO_2$ ,  $H_2O$  y  $NH_4^+$  en medio ácido tal y como se observa en la Ecuación (2.5).



A partir de esta ecuación, por tanto, puede concluirse que la expresión de cualquier componente en base a sus fracciones másicas, permite establecer una relación directa entre la cantidad de masa de este componente y su medida en DQO.

El concepto de DQO puede extrapolarse al de Demanda de Oxígeno teórica (DOT), definida como la cantidad de oxígeno requerida para oxidar los elementos que forman parte de un compuesto orgánico o inorgánico a sus compuestos de referencia.



El compuesto de referencia para un determinado elemento (C, H, N, O, P, X) es aquel en el cual este elemento presenta su número de oxidación máximo. Para el caso del oxígeno, sin embargo, por ser este el agente oxidante, su compuesto de referencia será aquel en el cual el oxígeno presenta su mayor estado de reducción. Otra excepción es el caso del nitrógeno en el que, el  $NH_4^+$  actúa como compuesto referencia en lugar del  $NO_3^-$  (Gujer *et al.*, 1999).

De forma general, la DOT de un componente con fracciones másicas conocidas puede calcularse mediante ecuaciones de oxidación-reducción sabiendo que 8 g de DOT implican la transferencia de 1 mol de electrones. Así, para cualquier elemento o carga (E) que forman parte de un compuesto, la relación  $\gamma_E$  (gDOT/mol E) puede establecerse calculando el número de moles de electrones que deben transferirse para que E alcance su número máximo de oxidación o en el caso del  $O_2$ , su número de reducción.

En la Tabla 2.3 se enumeran todos los elementos que forman parte de los componentes incluidos en la LT con sus correspondientes números de oxidación y compuestos de referencia. A partir de estos valores,  $\gamma_E$  se calcula de forma directa para cualquier elemento o carga tal y como se indica en el ejemplo.

Tabla 2.3. Compuestos de referencia

| Elemento  | Compuesto de referencia         | Nº de oxidación de E | $\gamma_E$ (g DOT/mol E) |
|-----------|---------------------------------|----------------------|--------------------------|
| Carbono   | C CO <sub>2</sub>               | + 4                  | + 32                     |
| Hidrógeno | H H <sup>+</sup>                | + 1                  | + 8                      |
| Oxígeno   | O H <sub>2</sub> O              | - 2                  | - 16                     |
| Nitrógeno | N NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>  | - 3                  | - 24                     |
| Fósforo   | P HPO <sub>4</sub> <sup>=</sup> | + 5                  | + 40                     |
| Hierro    | Fe Fe <sup>3+</sup>             | + 3                  | + 24                     |
| Aluminio  | Al Al <sup>3+</sup>             | + 3                  | + 24                     |
| Magensio  | Mg Mg <sup>2+</sup>             | + 2                  | + 16                     |
| Azufre    | S SO <sub>4</sub> <sup>=</sup>  | + 6                  | + 48                     |
| Potasio   | K K <sup>+</sup>                | + 1                  | + 8                      |
| Carga +   |                                 | + 1                  | + 8                      |
| Carga -   |                                 | - 1                  | - 8                      |

Ejemplo:

$$\gamma_C = \frac{8 \text{ g DOT}}{\text{mol } e^-} \cdot 4 \text{ moles } e^- = 32 \frac{\text{g DOT}}{\text{mol C}}$$

A partir de la relación  $\gamma_E$ , la DOT por unidad de masa  $\gamma_{DOT,i}$  para cualquier componente genérico  $C_i$  definido mediante la Fórmula (2.2), puede calcularse a partir de la siguiente ecuación:

$$\gamma_{DOT,i} = \gamma_C \frac{\alpha_{C,i}}{12} + \gamma_H \cdot \alpha_{H,i} + \gamma_O \frac{\alpha_{O,i}}{16} + \gamma_N \frac{\alpha_{N,i}}{14} + \gamma_P \frac{\alpha_{P,i}}{31} + \gamma_X \frac{\alpha_{X,i}}{M_x} + \gamma_{Ch} \cdot \alpha_{Ch,i} \quad (2.7)$$

La relación directa entre la DOT y masa de componente establecida mediante esta ecuación, facilita la expresión de los compuestos orgánicos en la unidad de medida más conveniente y la caracterización del agua residual o fango a partir de medidas experimentales en cualquier punto de la EDAR, tal y como se verá en el Capítulo 4.

#### 2.3.1.1.4 Conversión entre unidades y factores de conversión

Finalmente, la definición de los componentes en base a sus fracciones másicas elementales junto con las relaciones  $\gamma_{DOT,i}$  dadas en la Ecuación (2.7), permiten establecer una serie relaciones unívocas entre la masa de cualquier elemento o carga (E) y la unidad estequiométrica (UE<sub>i</sub>) de un componente. Estas relaciones UM<sub>E</sub>/UE<sub>i</sub> para un componente genérico  $C_i$  se denominan *factores de conversión*  $\beta_{E,i}$  y de forma general se calculan mediante las siguientes ecuaciones.

- *Componente cuya UE es la masa de componente*

Cuando las  $UE_i$  y  $UM_i$  coinciden, por ejemplo en el caso de los componentes  $S_{o2}$  o  $S_{h2o}$  incluidos en la LT,  $\beta_{E,i}$  coincide con los valores de las fracciones másicas  $\alpha_{E,i}$ .

$$\beta_{E,i} = \alpha_{E,i} \quad \left[ \frac{UM_E}{UE_i} \right] = \left[ \frac{UM_E}{UM_i} \right] \quad (2.8)$$

- *Componentes cuya UE es la DQO*

Puesto que en el caso de los componentes orgánicos se asume que la DOT coincide con la medida analítica de DQO, los factores de conversión de los componentes cuya UE es la DQO se calculan a partir de las relaciones DOT/UM<sub>i</sub> establecidas en la ecuación (2.7)

$$\beta_{E,i} = \frac{\alpha_{E,i}}{DOT/UM_i} \quad \left[ \frac{UM_E}{UE_i} \right] \quad (2.9)$$

- *Componentes cuya UE es masa de oxígeno*

$$\beta_{E,i} = \frac{\alpha_{E,i}}{\alpha_{O,i}} \quad \left[ \frac{UM_E}{UE_i} \right] \quad (2.10)$$

- *Componentes cuya UE es masa de hidrógeno*

$$\beta_{E,i} = \frac{\alpha_{E,i}}{\alpha_{H,i}} \quad \left[ \frac{UM_E}{UE_i} \right] \quad (2.11)$$

- *Componentes cuya UE es masa de fósforo*

$$\beta_{E,i} = \frac{\alpha_{E,i}}{\alpha_{P,i}} \quad \left[ \frac{UM_E}{UE_i} \right] \quad (2.12)$$

- *Componentes cuya UE es masa de nitrógeno*

$$\beta_{E,i} = \frac{\alpha_{E,i}}{\alpha_{N,i}} \left[ \frac{UM_E}{UE_i} \right] \quad (2.13)$$

- *Componentes cuya UE es masa de carbono*

$$\beta_{E,i} = \frac{\alpha_{E,i}}{\alpha_{C,i}} \left[ \frac{UM_E}{UE_i} \right] \quad (2.14)$$

El cálculo de los factores de conversión  $\beta_{E,i}$  permite, tal y como se observa en la Ecuación 2.1, una evaluación rigurosa y automática de la continuidad de la masa elemental y carga en las transformaciones incluidas en la LT.

Por otro lado, y al igual que las relaciones  $\gamma_{DOT,i}$ , a partir de los factores de conversión  $\beta_{E,i}$  pueden establecerse una serie de relaciones unívocas entre la composición másica de los componentes considerados en un modelo y las medidas experimentales realizadas en una EDAR. En el Capítulo 4 se detallan estas relaciones y las ventajas que presentan tanto la definición de los componentes en base a sus fracciones másicas como la utilización de los factores de conversión, en la caracterización de un agua residual o fango influente a una EDAR.

La Tabla 2.4 y la Tabla 2.5 presentan los valores de los factores de conversión  $\beta_{E,i}$  calculados a partir de las fracciones másicas elementales y densidad de carga de los componentes propuestos en la Tabla 2.1 y Tabla 2.2.

Tabla 2.4. Factores de conversión de componentes disueltos

| <i>i</i> | Componente UE | Factores de conversión ( $\beta_{E,i}$ ) |                                            |                                            |                                            |                                            |                                            |                                             |                                            |
|----------|---------------|------------------------------------------|--------------------------------------------|--------------------------------------------|--------------------------------------------|--------------------------------------------|--------------------------------------------|---------------------------------------------|--------------------------------------------|
|          |               | $\beta_{C,i}$                            | $\beta_{H,i}$                              | $\beta_{O,i}$                              | $\beta_{N,i}$                              | $\beta_{P,i}$                              | $\beta_{Ch,i}$                             | $\beta_{X,i}$                               |                                            |
| 1        | $S_{h2o}$     | gH <sub>2</sub> O                        | ---                                        | 0,1111                                     | 0,8889                                     | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 2        | $S_{o2}$      | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup>          | ---                                        | ---                                        | 1                                          | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 3        | $S_{h+}$      | gH/m <sup>3</sup>                        | ---                                        | 1                                          | ---                                        | ---                                        | 1                                          | ---                                         | ---                                        |
| 4        | $S_{oh-}$     | gH/m <sup>3</sup>                        | ---                                        | 1                                          | 16,01                                      | ---                                        | ---                                        | -1                                          | ---                                        |
| 5        | $S_{hpo4}$    | gP/m <sup>3</sup>                        | ---                                        | 0,0322                                     | 2,0647                                     | ---                                        | 1                                          | -0,0644                                     | ---                                        |
| 6        | $S_{h2po4}$   | gP/m <sup>3</sup>                        | ---                                        | 0,0645                                     | 2,0645                                     | ---                                        | 1                                          | -0,0322                                     | ---                                        |
| 7        | $S_{nh4}$     | gN/m <sup>3</sup>                        | ---                                        | 0,2857                                     | ---                                        | 1                                          | ---                                        | 0,0715                                      | ---                                        |
| 8        | $S_{nh3}$     | gN/m <sup>3</sup>                        | ---                                        | 0,2143                                     | ---                                        | 1                                          | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 9        | $S_{co2}$     | gC/m <sup>3</sup>                        | 1                                          | ---                                        | 2,667                                      | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 10       | $S_{hco3-}$   | gC/m <sup>3</sup>                        | 1                                          | 0,0834                                     | 4,0005                                     | ---                                        | ---                                        | -0,0834                                     | ---                                        |
| 11       | $S_{su}$      | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,375                                      | 0,0625                                     | 0,5                                        | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 12       | $S_{aa}$      | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,3689                                     | 0,0516                                     | 0,2065                                     | 0,1106                                     | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 13       | $S_{fa}$      | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,2568                                     | 0,0445                                     | 0,0411                                     | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 14       | $S_{hva}$     | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,2885                                     | 0,0481                                     | 0,1538                                     | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 15       | $S_{va-}$     | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,2885                                     | 0,0433                                     | 0,1538                                     | ---                                        | ---                                        | -0,0048                                     | ---                                        |
| 16       | $S_{hbu}$     | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,3                                        | 0,05                                       | 0,2                                        | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 17       | $S_{bu-}$     | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,3                                        | 0,04375                                    | 0,2                                        | ---                                        | ---                                        | -0,0063                                     | ---                                        |
| 18       | $S_{hpro}$    | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,3214                                     | 0,0536                                     | 0,2857                                     | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 19       | $S_{pro-}$    | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,3214                                     | 0,0446                                     | 0,2857                                     | ---                                        | ---                                        | -0,0089                                     | ---                                        |
| 20       | $S_{hac}$     | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,375                                      | 0,0625                                     | 0,5                                        | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 21       | $S_{ac-}$     | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,375                                      | 0,0469                                     | 0,5                                        | ---                                        | ---                                        | -0,0156                                     | ---                                        |
| 22       | $S_{h2}$      | gDQO/m <sup>3</sup>                      | ---                                        | 0,125                                      | ---                                        | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 23       | $S_{ch4}$     | gDQO/m <sup>3</sup>                      | 0,1875                                     | 0,0625                                     | ---                                        | ---                                        | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 24       | $S_{n2}$      | gN/m <sup>3</sup>                        | ---                                        | ---                                        | ---                                        | 1                                          | ---                                        | ---                                         | ---                                        |
| 25       | $S_{no2}$     | gN/m <sup>3</sup>                        | ---                                        | ---                                        | 2,2857                                     | 1                                          | ---                                        | -0,0714                                     | ---                                        |
| 26       | $S_{no3}$     | gN/m <sup>3</sup>                        | ---                                        | ---                                        | 3,4286                                     | 1                                          | ---                                        | -0,0714                                     | ---                                        |
| 27       | $S_{k+}$      | gk/m <sup>3</sup>                        | ---                                        | ---                                        | ---                                        | ---                                        | ---                                        | 0,0256                                      | 1                                          |
| 28       | $S_{Mg2+}$    | gMg/m <sup>3</sup>                       | ---                                        | ---                                        | ---                                        | ---                                        | ---                                        | 0,0823                                      | 1                                          |
| 29       | $S_I$         | gDQO/m <sup>3</sup>                      | $\alpha_{C,29}$<br>(DOT/UM <sub>29</sub> ) | $\alpha_{H,29}$<br>(DOT/UM <sub>29</sub> ) | $\alpha_{O,29}$<br>(DOT/UM <sub>29</sub> ) | $\alpha_{N,29}$<br>(DOT/UM <sub>29</sub> ) | $\alpha_{P,29}$<br>(DOT/UM <sub>29</sub> ) | $\alpha_{Ch,29}$<br>(DOT/UM <sub>29</sub> ) | $\alpha_{X,29}$<br>(DOT/UM <sub>29</sub> ) |
| 30       | $S_p$         | gDQO/m <sup>3</sup>                      | $\alpha_{C,30}$<br>(DOT/UM <sub>30</sub> ) | $\alpha_{H,30}$<br>(DOT/UM <sub>30</sub> ) | $\alpha_{O,30}$<br>(DOT/UM <sub>30</sub> ) | $\alpha_{N,30}$<br>(DOT/UM <sub>30</sub> ) | $\alpha_{P,30}$<br>(DOT/UM <sub>30</sub> ) | $\alpha_{Ch,30}$<br>(DOT/UM <sub>30</sub> ) | $\alpha_{X,30}$<br>(DOT/UM <sub>30</sub> ) |

Tabla 2.5. Factores de conversión de componentes particulados y gaseosos

| <i>i</i> | Componente UE | Factores de conversión ( $\beta_{E,i}$ )            |                                                     |                                                     |                                                     |                                                     |                                                      |                                                     |
|----------|---------------|-----------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|
|          |               | $\beta_{C,i}$                                       | $\beta_{H,i}$                                       | $\beta_{O,i}$                                       | $\beta_{N,i}$                                       | $\beta_{P,i}$                                       | $\beta_{Ch,i}$                                       | $\beta_{X,i}$                                       |
| 31       | $X_{cl}$      | $\frac{\alpha_{C,31}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{31})}$ | $\frac{\alpha_{H,31}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{31})}$ | $\frac{\alpha_{O,31}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{31})}$ | $\frac{\alpha_{N,31}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{31})}$ | $\frac{\alpha_{P,31}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{31})}$ | $\frac{\alpha_{Ch,31}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{31})}$ | $\frac{\alpha_{X,31}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{31})}$ |
| 32       | $X_{c2}$      | $\frac{\alpha_{C,32}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{32})}$ | $\frac{\alpha_{H,32}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{32})}$ | $\frac{\alpha_{O,32}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{32})}$ | $\frac{\alpha_{N,32}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{32})}$ | $\frac{\alpha_{P,32}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{32})}$ | $\frac{\alpha_{Ch,32}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{32})}$ | $\frac{\alpha_{X,32}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{32})}$ |
| 33       | $X_{ch}$      | 0,3861                                              | 0,0588                                              | 0,5127                                              | ---                                                 | 0,0097                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 34       | $X_{pr}$      | 0,31                                                | 0,066                                               | 0,1847                                              | 0,0989                                              | ---                                                 | ---                                                  | ---                                                 |
| 35       | $X_{li}$      | 0,2630                                              | 0,0415                                              | 0,0381                                              | ---                                                 | 0,0035                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 36       | $X_h$         | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 37       | $X_{n1}$      | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 38       | $X_{n2}$      | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 39       | $X_{pao}$     | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 40       | $X_{pha}$     | 0,3                                                 | 0,05                                                | 0,2                                                 | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                  | ---                                                 |
| 41       | $X_{pp}$      | ---                                                 | ---                                                 | 1,5484                                              | ---                                                 | 1                                                   | ---                                                  | 0,6818                                              |
| 42       | $X_{su}$      | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 43       | $X_{aa}$      | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 44       | $X_{fa}$      | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 45       | $X_{c4}$      | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 46       | $X_{pro}$     | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 47       | $X_{ac}$      | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 48       | $X_{h2}$      | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 49       | $X_{an}$      | 0,3661                                              | 0,0431                                              | 0,201                                               | 0,0861                                              | 0,0215                                              | ---                                                  | ---                                                 |
| 50       | $X_I$         | $\frac{\alpha_{C,50}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{50})}$ | $\frac{\alpha_{H,50}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{50})}$ | $\frac{\alpha_{O,50}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{50})}$ | $\frac{\alpha_{N,50}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{50})}$ | $\frac{\alpha_{P,50}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{50})}$ | $\frac{\alpha_{Ch,50}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{50})}$ | $\frac{\alpha_{X,50}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{50})}$ |
| 51       | $X_P$         | $\frac{\alpha_{C,51}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{51})}$ | $\frac{\alpha_{H,51}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{51})}$ | $\frac{\alpha_{O,51}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{51})}$ | $\frac{\alpha_{N,51}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{51})}$ | $\frac{\alpha_{P,51}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{51})}$ | $\frac{\alpha_{Ch,51}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{51})}$ | $\frac{\alpha_{X,51}}{(\text{DOT}/\text{UM}_{51})}$ |
| 52       | $X_{Me(oh)}$  | ---                                                 | 0,0281                                              | 0,4492                                              | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                  | 0,5227                                              |
| 53       | $X_{MeP}$     | ---                                                 | ---                                                 | 0,4243                                              | ---                                                 | 0,2055                                              | ---                                                  | 0,3702                                              |
| 54       | $X_{II}$      | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                  | 1                                                   |
| 55       | $G_{co2}$     | 1                                                   | ---                                                 | 2,6667                                              | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                  | ---                                                 |
| 56       | $G_{h2}$      | ---                                                 | 1                                                   | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                  | ---                                                 |
| 57       | $G_{ch4}$     | 0,1875                                              | 0,0625                                              | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                  | ---                                                 |
| 58       | $G_{nh3}$     | ---                                                 | 0,2143                                              | ---                                                 | 1                                                   | ---                                                 | ---                                                  | ---                                                 |
| 59       | $G_{n2}$      | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                 | 1                                                   | ---                                                 | ---                                                  | ---                                                 |
| 60       | $G_{o2}$      | ---                                                 | ---                                                 | 1                                                   | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                  | ---                                                 |
| 61       | $G_{h2o}$     | ---                                                 | 0,1111                                              | 0,8889                                              | ---                                                 | ---                                                 | ---                                                  | ---                                                 |



### 2.3.1.2 Ecuación de continuidad en las transformaciones

Una vez definidas las fracciones másicas  $\alpha_{E,i}$  y calculados los factores de conversión  $\beta_{E,i}$ , la ecuación de continuidad (2.1) debe cumplirse en cada transformación  $j$  para cada elemento o carga  $E$  sujeto a conservación.

Con este objetivo, algunos componentes del modelo deben actuar como componentes *fuentes-sumidero* asumiendo las posibles descompensaciones de los elementos C, N, O, P, H, X y carga en cada transformación. El papel de componente fuente-sumidero para cada elemento o carga  $E$  se asocia de forma general a su compuesto de referencia. En este caso, tal y como se indica en Reichert *et al.* (2001), los componentes dióxido de carbono ( $S_{co2}$ ), agua ( $S_{h2o}$ ), oxígeno ( $S_{o2}$ ), amonio ( $S_{nh4}$ ), fósforo inorgánico ( $S_{hpo4}$ ) y protones ( $S_{h+}$ ) han sido escogidos para garantizar la continuidad de C, H, O, N, P y carga eléctrica respectivamente en cada transformación. A raíz de la ecuación (2.1), los coeficientes estequiométricos en la matriz de Petersen de los componentes fuente-sumidero se calculan de forma general para todas las transformaciones mediante las siguientes expresiones:

Tabla 2.6. Coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero

| $i$ | $x_i$     | Coeficiente estequiométrico $v_{ij}$                                                   | $i$ | $x_i$      | Coeficiente estequiométrico $v_{ij}$                                                  |
|-----|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------|-----|------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| 1   | $S_{h2o}$ | $v_{1j} = -\sum_{i=2}^n \left( \frac{\beta_{H,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{H,1}} \right)$   | 5   | $S_{hpo4}$ | $v_{5j} = -\sum_{i=6}^n \left( \frac{\beta_{P,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{P,5}} \right)$  |
| 2   | $S_{o2}$  | $v_{2j} = -\sum_{i=1,3}^n \left( \frac{\beta_{O,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{O,2}} \right)$ | 7   | $S_{nh4}$  | $v_{7j} = -\sum_{i=8}^n \left( \frac{\beta_{N,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{N,7}} \right)$  |
| 3   | $S_{h+}$  | $v_{3j} = -\sum_{i=4}^n \left( \frac{\beta_{Ch,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{Ch,3}} \right)$ | 9   | $S_{co2}$  | $v_{9j} = -\sum_{i=10}^n \left( \frac{\beta_{C,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{C,9}} \right)$ |

Para los elementos representados por X (Fe, S, Mg, Ca...etc), no se han propuesto componentes *fuentes-sumidero* de forma general ya que son elementos minoritarios que intervienen en contadas transformaciones. No obstante, en aquellas transformaciones en las que esté involucrado algún elemento X, su continuidad en masa deberá evaluarse de forma particular.

La utilización de  $S_{o_2}$  como fuente sumidero del O en lugar de  $S_{h_2o}$  (compuesto de referencia del O) facilita la definición de la estequiometría en las transformaciones en las que interviene el  $S_{o_2}$  y permite evaluar de forma simultánea la continuidad de la DQO y oxígeno. El componente  $S_{h_2o}$  por tanto, puede utilizarse como fuente-sumidero del H y el componente  $S_{h+}$  puede asumir las descompensaciones de carga en cada transformación.

### **2.3.2 Términos de activación e inhibición incluidos en las ecuaciones cinéticas**

De acuerdo con el segundo requisito de la metodología propuesta, las transformaciones incluidas en la LT deben incluir los términos de activación e inhibición necesarios para reproducir de forma adecuada la actividad biológica en la EDAR.

Estos términos se han empleado regularmente para facilitar la descripción de las ecuaciones cinéticas de los modelos activando o desactivando algunas transformaciones en función de las condiciones ambientales, pH, etc. La finalidad de los términos de activación es limitar la transformación cuando existe una carencia de uno de los componentes necesarios en esta transformación. Los términos de inhibición, por otro lado, inhiben la transformación ante un componente perjudicial para ésta.

Los términos de activación e inhibición considerados en las transformaciones de la LT se clasifican en cuatro grupos:

- Términos de activación/inhibición en función de las condiciones ambientales
- Términos de activación correspondientes a componentes fuente-sumidero
- Términos de inhibición por pH
- Términos de inhibición por presencia de componentes inhibidores

#### **2.3.2.1 Términos de activación/inhibición en función de las condiciones ambientales**

Los términos de activación/inhibición en función de las condiciones ambientales, deben considerarse en aquellas transformaciones que se dan de forma específica en condiciones aerobias, anóxicas o anaerobias.

Estos términos cobran especial relevancia en los modelos construidos a partir de la metodología de construcción de modelos integrales de EDAR propuesta en este Capítulo. De esta forma, la incorporación de estos términos en las transformaciones de la LT permite la adecuada descripción de la actividad biológica en cada uno de los modelos de proceso unitario incluidos en el modelo integral.

Los términos de activación o inhibición utilizados en las ecuaciones cinéticas de las transformaciones incluidas en la LT, se definen a continuación.

- *Condiciones aerobias*

$$A_{o_2} = \frac{S_{o_2}}{K_{A,o_2} + S_{o_2}} \quad \text{Activación por oxígeno} \quad (2.15)$$

- *Condiciones anóxicas*

$$A_{no_3} = \frac{S_{no_3-}}{K_{A,no_3} + S_{no_3-}} \quad \text{Activación por nitratos} \quad (2.16)$$

$$A_{no_2} = \frac{S_{no_2-}}{K_{A,no_2} + S_{no_2-}} \quad \text{Activación por nitritos} \quad (2.17)$$

$$A_{nox} = \frac{(S_{no_2-} + S_{no_3-})}{K_{A,nox} + S_{no_2-} + S_{no_3-}} \quad \text{Activación por nitritos y nitratos} \quad (2.18)$$

$$I_{o_2} = \frac{K_{A,o_2}}{K_{A,o_2} + S_{o_2}} \quad \text{Inhibición por oxígeno} \quad (2.19)$$

- *Condiciones anaerobias*

$$I_{o_2} = \frac{K_{A,o_2}}{K_{A,o_2} + S_{o_2}} \quad \text{Inhibición por oxígeno} \quad (2.19)$$

$$I_{nox} = \frac{K_{A,nox}}{K_{A,nox} + S_{no_2-} + S_{no_3-}} \quad \text{Inhibición por nitratos y nitritos} \quad (2.20)$$

### 2.3.2.2 Términos de activación correspondientes a componentes fuente-sumidero

Los términos de activación de componentes fuente-sumidero deben incluirse en las ecuaciones cinéticas de las transformaciones para inhibirlas en el caso de la ausencia de éstas. De forma estricta, los términos de activación únicamente serían necesarios en aquellas transformaciones en las cuales los coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero tomasen valores negativos. Sin embargo, puesto que los componentes fuente-sumidero se utilizan para compensar los posibles desajustes de masa y carga en las transformaciones, el signo de sus coeficientes estequiométricos no puede determinarse a priori sino que es función de las fracciones másicas elementales asignadas a cada componente que interviene en la transformación. Por tanto, con el objetivo de obtener una LT estándar para cualquier caso de estudio, los términos de activación correspondientes a fuente-sumidero se han incluido en las ecuaciones cinéticas de todas las transformaciones incluidas en la LT.

Se han considerado tres términos de activación para los componentes  $S_{co_2}$ ,  $S_{nh_4^+}$  y  $S_{hpo_4^{=}}$ , que actúan como fuente-sumidero de C, N y P respectivamente. Los efectos inhibidores causados por la ausencia de  $H^+$  se han considerado en los términos de inhibición por pH (2.3.2.3) y en el caso del O, el término de activación se incluye en los términos por condiciones ambientales (2.3.2.1). En el caso del H no se considera limitación de  $H_2O$ .

Sin embargo, en la definición de estos tres términos de activación debe tenerse en cuenta que los componentes  $S_{co_2}$ ,  $S_{nh_4^+}$  y  $S_{hpo_4^{=}}$  que actúan como fuente sumidero del C, N y P, forman parte de sistemas ácido/base débiles. Así, debido a los equilibrios ácido-base que se establecen entre ellos y sus correspondientes componentes ácido/base conjugados, sus concentraciones irán aumentando o disminuyendo dependiendo del valor de pH del medio. Por tanto, si se tiene en cuenta que las transformaciones incluidas en la LT pueden darse en un rango de pH de 6–9, las constantes de saturación empleadas en los términos de activación deberían variar en función del valor de pH y en algunos casos podría llegarse a situaciones de inestabilidad numérica. Para evitar este problema, los términos de activación por fuente-sumidero se han definido en función de variables compuestas que incluyen los dos componentes ácido y base conjugada. De esta forma queda garantizado que las transformaciones quedarán inactivadas en ausencia de C, N o P inorgánico y no ante variaciones de pH en el medio.

$$\begin{aligned}
 S_{IC} &= S_{hco3-} + S_{co2} \\
 S_{IN} &= S_{nh3} + S_{nh4+} \\
 S_{IP} &= S_{hpo4=} + S_{h2po4-}
 \end{aligned}
 \tag{2.21}$$

$$A_{IC} = \frac{S_{IC}}{K_{A,IC} + S_{IC}} \quad \text{Activación por carbono inorgánico}
 \tag{2.22}$$

$$A_{IN} = \frac{S_{IN}}{K_{A,IN} + S_{IN}} \quad \text{Activación por nitrógeno inorgánico}
 \tag{2.23}$$

$$A_{IP} = \frac{S_{IP}}{K_{A,IP} + S_{IP}} \quad \text{Activación por fósforo inorgánico}
 \tag{2.24}$$

Los valores de los parámetros de saturación ( $K_{A,IC}$ ,  $K_{A,IN}$ ,  $K_{A,IP}$ ) varían en función de la sensibilidad de la transformación a la ausencia de los componentes. En este caso, como el objetivo los términos de activación es inhibir la transformación en ausencia de  $S_{IC}$ ,  $S_{IN}$  o  $S_{IP}$ , los valores de estos parámetros deben ser muy bajos.

### 2.3.2.3 Términos de inhibición por pH

Los términos de inhibición por pH se consideran en aquellas transformaciones bioquímicas que describen actividades biológicas sensibles al valor del pH. Teniendo en cuenta las transformaciones bioquímicas incluidas en la LT, y a partir de referencias bibliográficas, los términos de inhibición por pH se consideran en la actividad llevada a cabo por las bacterias nitrificantes (nitrosomonas y nitrobacter), acumuladoras de fósforo, acidogénicas (consumidoras de azúcares y aminoácidos), acetogénicas (consumidoras de LCFA, valérico, butírico y propiónico) y metanogénicas (consumidoras de acético e hidrógeno).

El efecto de inhibición por pH de las bacterias que actúan en condiciones anaerobias, se ha basado en el modelo ADM1 (Batstone *et al.*, 2002). Sin embargo, los términos de inhibición utilizados han sido los propuestos en (Siegrist *et al.*, 2002) ya que reproducen el efecto de los términos incluidos en el modelo ADM1 pero no presentan discontinuidades.

$$I_{pH,aa} = \frac{K_{I,h,aa}^2}{K_{I,h,aa}^2 + S_{h+}^2} \quad \text{Inhibición por pH de las transformaciones de acidogénesis y acetogénesis} \quad (2.25)$$

$$I_{pH,ac} = \frac{K_{I,h,ac}^2}{K_{I,h,ac}^2 + S_{h+}^2} \quad \text{Inhibición por pH de la metanogénesis acetoclástica} \quad (2.26)$$

$$I_{pH,h2} = \frac{K_{I,h,h2}^2}{K_{I,h,h2}^2 + S_{h+}^2} \quad \text{Inhibición por pH de la metanogénesis hidrogenófila} \quad (2.27)$$

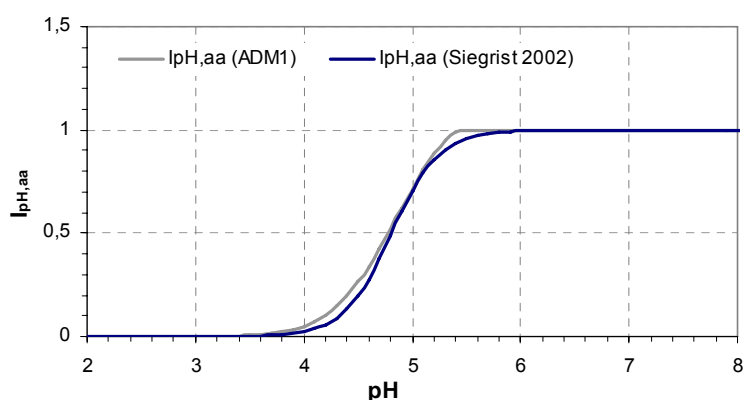


Figura 2.2. Término de inhibición de la acidogénesis y acetogénesis

Con respecto a la nitrificación, diferentes estudios experimentales muestran que la actividad de las bacterias responsables de la nitrificación, *Nitrosomonas* y *Nitrobacter*, se ve afectada por variaciones en el pH (Antoniou *et al.*, 1990; Grunditz and Dalhammar, 2001). De esta forma, cuando el pH varía alejándose de los valores óptimos 8.1 para las *Nitrosomonas* y 7.9 para las *Nitrobacter*, el rendimiento de éstas disminuye hasta llegar a una actividad nula en valores de pH alrededor de 6 y 10. En este caso, los términos de inhibición propuestos en Siegrist *et al.* (2002) han sido modificados para reproducir la inhibición de la nitrificación a valores de pH superiores e inferiores al valor óptimo en cada caso.

$$I_{pH,N1} = \frac{K_{I,h,N1}^2}{K_{I,h,N1}^2 + S_{h^+}^2} \cdot \frac{S_{h^+}^2}{K_{A,h,N1}^2 + S_{h^+}^2} \quad \text{Inhibición por pH de la actividad de las nitrosomonas} \quad (2.28)$$

$$I_{pH,N2} = \frac{K_{I,h,N2}^2}{K_{I,h,N2}^2 + S_{h^+}^2} \cdot \frac{S_{h^+}^2}{K_{A,h,N2}^2 + S_{h^+}^2} \quad \text{Inhibición por pH de la actividad de las nitrobacter} \quad (2.29)$$

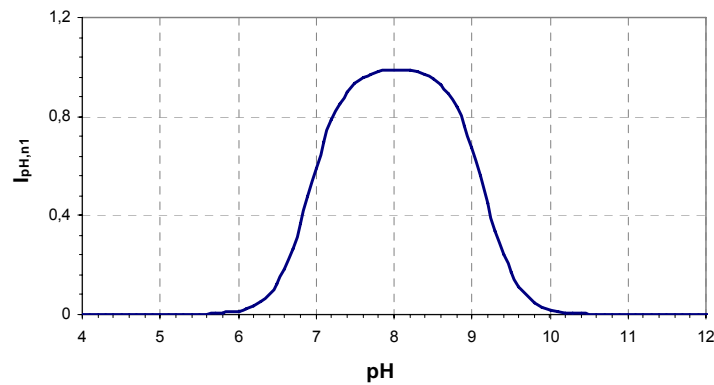


Figura 2.3. Término de inhibición por pH de la actividad de las Nitrosomonas

A este respecto, al igual que en el caso de la nitrificación se ha observado que valores de pH superiores o inferiores a un valor óptimo de 7.4, provocan una disminución en la actividad biológica de las bacterias acumuladoras de fósforo (Filipe *et al.*, 2001b). Por tanto, el término de inhibición por pH propuesto sigue la misma tendencia que en el caso de las nitrificantes:

$$I_{pH,PAO} = \frac{K_{I,h,PAO}^2}{K_{I,h,PAO}^2 + S_{h^+}^2} \cdot \frac{S_{h^+}^2}{K_{A,h,PAO}^2 + S_{h^+}^2} \quad \text{Inhibición por pH de la actividad de las acumuladoras de fósforo} \quad (2.30)$$

### 2.3.2.3.1 Términos de inhibición causados por la presencia de componentes inhibidores

Se han considerado los términos de inhibición de la acetogénesis por la presencia de  $S_{h_2}$  y  $S_{nh_3}$  en concentraciones elevadas. Las expresiones utilizadas han sido las propuestas en el modelo ADM1.

$$I_{h2,fa} = \frac{K_{I,h2,fa}}{K_{I,h2,fa} + S_{h2}} \quad \text{Inhibición por hidrógeno de la acetogénesis de los ácidos grasos} \quad (2.31)$$

$$I_{h2,c4} = \frac{K_{I,h2,c4}}{K_{I,h2,c4} + S_{h2}} \quad \text{Inhibición por hidrógeno de la acetogénesis de los ácidos valérico y butírico} \quad (2.32)$$

$$I_{h2,pro} = \frac{K_{I,h2,pro}}{K_{I,h2,pro} + S_{h2}} \quad \text{Inhibición por hidrógeno de la acetogénesis del ácido propiónico} \quad (2.33)$$

$$I_{nh3} = \frac{K_{I,nh3}}{K_{I,nh3} + S_{nh3}} \quad \text{Inhibición por amoníaco} \quad (2.34)$$

### 2.3.3 Descripción de las transformaciones en base a su estequiometría y cinética

Tal y como se indica en la Figura 2.1, las transformaciones incluidas en la LT a partir de la cual se construirán los modelos integrales de EDAR, se han clasificado según su naturaleza en transformaciones bioquímicas, químicas y físico-químicas. Estas transformaciones, aunque están basadas en los modelos estándar ASM y ADM1, han sido modificadas de acuerdo con los requisitos detallados previamente con el objetivo de construir una librería estándar y válida para el modelado integral en EDAR. Algunos ejemplos concretos de estas modificaciones se refieren a la caracterización del nitrógeno orgánico y sustrato carbonoso o la descripción del pH. Además, en la LT se han incluido otras transformaciones que, aunque no se contemplan en los modelos estándar mencionados, permiten el modelado de un mayor número de procesos que pueden tener lugar en la EDAR (por ejemplo, nitrificación y desnitrificación en dos etapas, oxidación anaerobia del amonio, etc.).

A continuación se describe mediante matrices de Petersen la estequiometría y cinética de todas estas transformaciones. En estas matrices no se han incluido los coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero, ya que el valor de estos coeficientes dependerá de las fracciones másicas asignadas a los componentes involucrados en las transformaciones en el caso de estudio concreto. Sin embargo, es importante recalcar que estos coeficientes, calculados



con las ecuaciones propuestas en la Tabla 2.6, deben ser considerados en todas y cada una de las transformaciones propuestas.

### 2.3.3.1 Transformaciones bioquímicas

Las transformaciones bioquímicas incluidas en la LT propuesta describen todas las reacciones que tienen lugar en la eliminación biológica de C, N y P en aguas residuales y fangos en un rango de temperatura mesófila (10-40 °C). Estas transformaciones se llevan a cabo por distintas poblaciones de bacterias que actúan de forma selectiva en condiciones aerobias, anóxicas o anaerobias y que, tal y como se muestra en la Figura 2.1, se han clasificado en transformaciones intracelulares, transformaciones de desaparición de la biomasa y transformaciones extracelulares.

#### 2.3.3.1.1 Transformaciones intracelulares

Las transformaciones intracelulares describen todas las reacciones que las distintas poblaciones de bacterias llevan a cabo en el interior de sus paredes celulares. Estas transformaciones describen las reacciones de oxidación del sustrato consumido y en algunos casos, el almacenamiento de sustrato y la liberación de productos almacenados por las bacterias.

Las poblaciones de bacterias capaces de llevar a cabo una reacción de oxidación y la energía libre obtenida, que implica un mayor o menor rendimiento en la construcción de materia celular, dependen, por un lado del componente que actúe como aceptor de electrones (condiciones aerobias, anóxicas o anaerobias) y por otro, del sustrato a oxidar (orgánicos o inorgánicos).

A continuación y siguiendo el esquema propuesto en la Figura 2.1, se describe la actividad llevada a cabo por las poblaciones de bacterias más relevantes en el tratamiento de aguas residuales y fangos en condiciones aerobias, anóxicas y anaerobias y las transformaciones intracelulares que describen esta actividad.

##### 2.3.3.1.1.1 Transformaciones intracelulares aerobias

Las transformaciones intracelulares aerobias se llevan a cabo por distintas poblaciones de bacterias que se engloban dentro de los grupos de bacterias heterótrofas ( $X_h$ ), bacterias acumuladoras de fósforo ( $X_{pao}$ ) y bacterias autótrofas nitrificantes ( $X_{n1}$  y  $X_{n2}$ ).

- *Transformaciones llevadas a cabo por bacterias heterótrofas ( $X_h$ )*

Las bacterias representadas por el componente  $X_h$ , llamadas bacterias heterótrofas, engloban las poblaciones de bacterias que, tomando como aceptor de electrones el oxígeno ( $S_{o_2}$ ), oxidan el sustrato orgánico disuelto y obtienen como productos de reacción, además de energía y materia celular, los componentes  $S_{co_2}$  y  $S_{h_2o}$ .

En la Tabla 2.7 se describen las transformaciones en las cuales las bacterias heterótrofas  $X_h$  llevan a cabo la oxidación de todos los tipos de sustratos orgánicos incluidos en la LT. Aunque las poblaciones de bacterias que actúan sobre cada tipo de sustrato orgánico pueden ser poblaciones diferentes, la inclusión de todas ellas bajo el componente  $X_h$  puede asumirse como una simplificación válida ya que los productos finales son los mismos en todos los casos.

Con respecto a la estequiometría de estas transformaciones debe tenerse en cuenta que los rendimientos de crecimiento de las bacterias  $Y_h$  dependen, para cada tipo de sustrato, de la energía libre liberada en la oxidación de cada uno de estos sustratos. La energía libre liberada por mol de electrones transferido en el consumo de los sustratos orgánicos existentes en un agua residual o fango varía entre 105 y 121 kJ/e<sup>-</sup> eq. Por lo tanto, puede asumirse el mismo rendimiento  $Y_h$  en la oxidación de todos los sustratos considerados (Sötemann *et al.*, 2005a). Además, en la definición de la estequiometría de las transformaciones de consumo de VFA, se han tomado como sustratos los componentes referentes a las especies ácidas (Sötemann *et al.*, 2005b).

Debido a que el crecimiento de  $X_h$  se da a partir de diferentes tipos de sustratos, las ecuaciones cinéticas descritas en la Tabla 2.7 introducen términos de competitividad tal y como se propone en el modelo ASM2 para los sustratos fermentables y productos de fermentación. La inclusión de estos términos en las ecuaciones cinéticas permite utilizar la tasa máxima de crecimiento propuesta en los modelos convencionales ASM en todas las ecuaciones cinéticas propuestas en la Tabla 2.7. Sin embargo, las constantes de saturación para cada sustrato deben estimarse en cada caso de estudio.

Los términos de Monod en las ecuaciones cinéticas de consumo de VFA se han expresado en base a las variables compuestas que engloban los componentes ácido y base del valérico, butírico, propiónico y acético. De esta forma se evita la utilización de distintas constantes de saturación en función del pH y la

aparición de inestabilidades numéricas en la simulación para valores extremos de éste.

$$S_{VA} = S_{hva} + S_{va-} \quad (2.35)$$

$$S_{BU} = S_{hbu} + S_{bu-} \quad (2.36)$$

$$S_{PRO} = S_{hpro} + S_{pro-} \quad (2.37)$$

En las ecuaciones cinéticas se utiliza la variable adicional  $S_S$  definida como:

$$S_S = S_{su} + S_{aa} + S_{fa} + S_{hva} + S_{va-} + S_{hbu} + S_{bu-} + S_{hpro} + S_{pro-} + S_{hac} + S_{ac-} \quad (2.38)$$

Tabla 2.7. Crecimiento de  $X_h$  en condiciones aerobias

| Componentes $i \rightarrow$     | 11       | 12       | 13       | 14        | 16        | 18         | 20        | 36    |
|---------------------------------|----------|----------|----------|-----------|-----------|------------|-----------|-------|
| Transformaciones $j \downarrow$ | $S_{su}$ | $S_{aa}$ | $S_{fa}$ | $S_{hva}$ | $S_{hbu}$ | $S_{hpro}$ | $S_{hac}$ | $X_h$ |
| 1 Consumo Aerobio $S_{su}$      | -I       |          |          |           |           |            |           | $Y_h$ |
| 2 Consumo Aerobio $S_{aa}$      |          | -I       |          |           |           |            |           | $Y_h$ |
| 3 Consumo Aerobio $S_{fa}$      |          |          | -I       |           |           |            |           | $Y_h$ |
| 4 Consumo Aerobio $S_{hva}$     |          |          |          | -I        |           |            |           | $Y_h$ |
| 5 Consumo Aerobio $S_{hbu}$     |          |          |          |           | -I        |            |           | $Y_h$ |
| 6 Consumo Aerobio $S_{hpro}$    |          |          |          |           |           | -I         |           | $Y_h$ |
| 7 Consumo Aerobio $S_{hac}$     |          |          |          |           |           |            | -I        | $Y_h$ |

$$\rho_1 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{su}}{K_{su\_h} + S_{su}} \cdot \frac{S_{su}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_2 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{aa}}{K_{aa\_h} + S_{aa}} \cdot \frac{S_{aa}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_3 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{fa}}{K_{fa\_h} + S_{fa}} \cdot \frac{S_{fa}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_4 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{VA}}{K_{VA\_h} + S_{VA}} \cdot \frac{S_{VA}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_5 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{BU}}{K_{BU\_h} + S_{BU}} \cdot \frac{S_{BU}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_6 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{PRO}}{K_{PRO\_h} + S_{PRO}} \cdot \frac{S_{PRO}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_7 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{AC}}{K_{AC\_h} + S_{AC}} \cdot \frac{S_{AC}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

- *Transformaciones llevadas a cabo por las bacterias acumuladoras de fósforo  $X_{pao}$*

Tal y como se ha mencionado en el Capítulo 1, las bacterias acumuladoras de fósforo representadas por el componente  $X_{pao}$ , son una población de bacterias heterótrofas específicas que presentan la capacidad de acumular fósforo en su interior en forma de polifosfatos ( $X_{pp}$ ). Esta característica, convierte a las bacterias  $X_{pao}$  en las responsables de la eliminación biológica del fósforo en el tratamiento de aguas residuales. La eliminación biológica del fósforo requiere, no obstante, una descripción más detallada de las transformaciones que ocurren en el interior de las bacterias que la dada para el caso de las bacterias  $X_h$ . De esta manera, en la actividad de las bacterias  $X_{pao}$  se distingue el almacenamiento de sustrato orgánico y el consumo y oxidación de productos almacenados como dos etapas consecutivas.

En la primera etapa, representada por las transformaciones 8-11, se describe el proceso en el que las bacterias  $X_{pao}$  liberan  $S_{hpo4=}$  a partir de polifosfatos almacenados en su interior ( $X_{pp}$ ), y utilizan la energía obtenida en la hidrólisis de  $X_{pp}$  para almacenar sustrato fermentado (VFA) en forma de Poli-Hidroxi-Alcanoatos ( $X_{pha}$ ). Esta primera etapa ocurre mayoritariamente bajo condiciones anaerobias, aunque también puede darse bajo condiciones aerobias y anóxicas. Por este motivo, las transformaciones que describen esta etapa de almacenamiento se incluyen dentro de las transformaciones aerobias, anóxicas y anaerobias y su ecuación cinética no incluye términos de inhibición o activación por condiciones ambientales.

En una segunda etapa, descrita en las transformaciones 12-13, 30-31, se da el almacenamiento del  $S_{hpo4=}$  en forma de  $X_{pp}$  y el crecimiento de las bacterias  $X_{pao}$ . El almacenamiento de  $S_{hpo4=}$  como  $X_{pp}$  requiere una cantidad de energía que se obtiene de la oxidación del sustrato  $X_{pha}$  hasta alcanzar ratios  $X_{pp}/X_{pao}$  máximos determinados por el parámetro  $K_{MAX}$ . De forma simultánea al almacenamiento de  $S_{hpo4=}$ , se da el crecimiento de las bacterias  $X_{pao}$  a partir del sustrato almacenado  $X_{pha}$  con el mismo rendimiento  $Y_h$  que el supuesto para el crecimiento de las bacterias heterótrofas en general. Esta segunda etapa puede darse bajo condiciones aerobias o anóxicas tal y como se indica en la Figura 2.1.

En la Tabla 2.8 se incluyen las transformaciones que corresponden a las dos etapas en condiciones aerobias. El componente  $S_{hpo4=}$ , aunque es un componente fuente-sumidero, se incluye en la descripción de la estequiometría para una mejor comprensión de las transformaciones.

En las ecuaciones cinéticas, por motivos de simplicidad, se ha utilizado la variable adicional  $S_A$  que se definen como la suma de los componentes productos de la fermentación.

$$S_A = S_{hva} + S_{va-} + S_{hbu} + S_{bu-} + S_{hpro} + S_{pro-} + S_{hac} + S_{ac-} \quad (2.39)$$

Tabla 2.8. Eliminación de Fósforo en condiciones aerobias

| Componentes $i \rightarrow$                     | 14        | 16        | 18         | 20        | 28                              | 27                             | 5                            | 40         | 41         | 39        |
|-------------------------------------------------|-----------|-----------|------------|-----------|---------------------------------|--------------------------------|------------------------------|------------|------------|-----------|
| Transformaciones $j \downarrow$                 | $S_{hva}$ | $S_{hbu}$ | $S_{hpro}$ | $S_{hac}$ | $S_{Mg2+}$                      | $S_{k+}$                       | $S_{hpo4=}$                  | $X_{pha}$  | $X_{pp}$   | $X_{pao}$ |
| 8 Almacenamiento de $X_{pha}$ sobre $S_{hva}$   | -1        |           |            |           | $\beta_{Mg, Xpp} \cdot Y_{po4}$ | $\beta_{k, Xpp} \cdot Y_{po4}$ | $Y_{po4}$                    | 1          | $-Y_{po4}$ |           |
| 9 Almacenamiento de $X_{pha}$ sobre $S_{hbu}$   |           | -1        |            |           | $\beta_{Mg, Xpp} \cdot Y_{po4}$ | $\beta_{k, Xpp} \cdot Y_{po4}$ | $Y_{po4}$                    | 1          | $-Y_{po4}$ |           |
| 10 Almacenamiento de $X_{pha}$ sobre $S_{hpro}$ |           |           | -1         |           | $\beta_{Mg, Xpp} \cdot Y_{po4}$ | $\beta_{k, Xpp} \cdot Y_{po4}$ | $Y_{po4}$                    | 1          | $-Y_{po4}$ |           |
| 11 Almacenamiento de $X_{pha}$ sobre $S_{hac}$  |           |           |            | -1        | $\beta_{Mg, Xpp} \cdot Y_{po4}$ | $\beta_{k, Xpp} \cdot Y_{po4}$ | $Y_{po4}$                    | 1          | $-Y_{po4}$ |           |
| 12 Almacenamiento aerobio de $X_{pp}$           |           |           |            |           | $-\beta_{Mg, Xpp}$              | $-\beta_{k, Xpp}$              | -1                           | $-Y_{pha}$ | 1          |           |
| 13 Crecimiento aerobio de $X_{pao}$             |           |           |            |           |                                 |                                | $-\beta_{p, Xpao} \cdot Y_h$ | -1         |            | $Y_h$     |

$$\rho_8 = q_{PHA} \cdot \frac{S_{VA}}{K_{VA\_h} + S_{VA}} \cdot \frac{S_{VA}}{S_A} \cdot \frac{X_{pp}/X_{pao}}{K_{PP} + X_{pp}/X_{pao}} \cdot [A_{IN} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pao}$$

$$\rho_9 = q_{PHA} \cdot \frac{S_{BU}}{K_{BU\_h} + S_{BU}} \cdot \frac{S_{BU}}{S_A} \cdot \frac{X_{pp}/X_{pao}}{K_{PP} + X_{pp}/X_{pao}} \cdot [A_{IN} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pao}$$

$$\rho_{10} = q_{PHA} \cdot \frac{S_{PRO}}{K_{PRO\_h} + S_{PRO}} \cdot \frac{S_{PRO}}{S_A} \cdot \frac{X_{pp}/X_{pao}}{K_{PP} + X_{pp}/X_{pao}} \cdot [A_{IN} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pao}$$

$$\rho_{11} = q_{PHA} \cdot \frac{S_{AC}}{K_{AC\_h} + S_{AC}} \cdot \frac{S_{AC}}{S_A} \cdot \frac{X_{pp}/X_{pao}}{K_{PP} + X_{pp}/X_{pao}} \cdot [A_{IN} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pao}$$

$$\rho_{12} = q_{PP} \cdot \frac{S_{IP}}{K_{PS} + S_{IP}} \cdot \frac{X_{pha}/X_{pao}}{K_{PHA} + X_{pha}/X_{pao}} \cdot \frac{K_{MAX} - X_{pp}/X_{pao}}{K_{IPP} + K_{MAX} - X_{pp}/X_{pao}} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pao}$$

$$\rho_{13} = k_{m, Pao} \cdot \frac{X_{pha}/X_{pao}}{K_{PHA} + X_{pha}/X_{pao}} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pao}$$

- *Transformaciones llevadas a cabo por las bacterias autótrofas nitrificantes  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$*

Las bacterias autótrofas nitrificantes representadas por  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$  están constituidas por dos poblaciones de bacterias capaces de oxidar el  $\text{NH}_4^+$  a  $\text{NO}_3^-$  en dos etapas consecutivas en condiciones aerobias. La presencia de estas bacterias por tanto, permite la eliminación de nitrógeno amoniacal en un agua residual o fango.

En la primera etapa, la población de bacterias autótrofas llamada *Nitrosomonas* ( $X_{n1}$ ) utiliza el  $S_{nh4+}$  como sustrato para la obtención de energía y construcción de material celular dando  $S_{no2-}$  como producto de reacción:



En la segunda etapa, la población de bacterias llamada *Nitrobacter* ( $X_{n2}$ ) utiliza el  $S_{no2-}$  como sustrato y se obtiene  $S_{no3-}$  como producto de reacción.



De forma general, en plantas de aguas residuales a temperatura ambiente (10 – 20 °C), las bacterias *Nitrobacter* crecen con velocidades mayores que las *Nitrosomonas*. De esta forma, la oxidación de  $S_{nh4+}$  a  $S_{no3-}$  se da de forma completa y la concentración de  $S_{no2-}$  es prácticamente nula. Por este motivo, en los modelos estándar ASM1, ASM2 y ASM3, la nitrificación se ha considerado como una única transformación llevada a cabo por una población de bacterias autótrofas sin tener en cuenta el componente intermedio  $S_{no2-}$ .

Sin embargo, la inclusión en la LT de la nitrificación como dos transformaciones consecutivas llevadas a cabo por  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$  permitirá el modelado de nuevos procesos como el tratamiento de sobrenadantes procedentes de la digestión anaerobia o de aguas industriales con altos contenidos de nitrógeno (Procesos *Sharon–Anammox*) basados en nitrificaciones parciales.

Las transformaciones llevadas a cabo por las bacterias  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$  se describen en la Tabla 2.9. Los rendimientos  $Y_{n1}$  e  $Y_{n2}$  utilizados en la estequiometría de estas transformaciones tienen valores distintos ya que la energía libre liberada en cada una de las transformaciones y la energía necesaria para la construcción de material celular es diferente en cada caso (Hellinga *et al.*, 1999).

Por otro lado, las ecuaciones cinéticas deben describir la dependencia de los parámetros con la temperatura e incluir los términos de inhibición por pH tal y como se han descrito en el Apartado 2.3.2. En la ecuación cinética que describe el crecimiento de  $X_{n1}$ , el término de Monod se describe utilizando la variable adicional  $S_{IN}$  ya que, aunque en la actualidad la posibilidad de que el sustrato utilizado por  $X_{n1}$  sea el  $S_{nh3}$  es la más aceptada (Pambrun *et al.*, 2006), la utilización de la variable  $S_{IN}$  permite la utilización de estas transformaciones en rangos de pH amplios sin causar inestabilidades numéricas durante la simulación.

Por último, debe tenerse en cuenta que, aunque la descripción de la nitrificación mediante estas dos transformaciones permite reproducir el comportamiento de procesos unitarios diferentes en una EDAR (eliminación de N de aguas residuales urbanas y tratamiento de aguas con altos contenidos de N), algunos parámetros utilizados en las ecuaciones cinéticas tales como las constantes de saturación  $K_{NH,N1}$  y  $K_{NO,N2}$  dependerán en gran medida de las concentraciones de nitrógeno del medio (Pambrun *et al.*, 2006).

El componente  $S_{nh4+}$ , aunque es un componente fuente-sumidero se incluye en la siguiente tabla para una mejor comprensión de las transformaciones.

Tabla 2.9. Nitrificación en dos etapas

| Componentes $i \rightarrow$                                                                                                                                        | 25                               | 26         | 7                             | 37       | 38       |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------|------------|-------------------------------|----------|----------|
| Transformaciones $j \downarrow$                                                                                                                                    | $S_{no2-}$                       | $S_{no3-}$ | $S_{nh4+}$                    | $X_{n1}$ | $X_{n2}$ |
| 14 Crecimiento de $X_{n1}$                                                                                                                                         | $1 - \beta_{N,Xn1} \cdot Y_{n1}$ |            | $-1$                          | $Y_{n1}$ |          |
| 15 Crecimiento de $X_{n2}$                                                                                                                                         | $-1$                             | $1$        | $-\beta_{N,Xn2} \cdot Y_{n2}$ |          | $Y_{n2}$ |
| $\rho_{14} = k_{m,N1} \cdot \frac{S_{IN}}{K_{NH,N1} + S_{IN}} \cdot \frac{S_{o2}}{K_{O,N1} + S_{o2}} \cdot [A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{pH,N1}] \cdot X_{n1}$     |                                  |            |                               |          |          |
| $\rho_{15} = k_{m,N2} \cdot \frac{S_{no2-}}{K_{NO,N2} + S_{no2-}} \cdot \frac{S_{o2}}{K_{O,N2} + S_{o2}} \cdot [A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{pH,N2}] \cdot X_{n2}$ |                                  |            |                               |          |          |

### 2.3.3.1.1.2 Transformaciones intracelulares anóxicas

- *Transformaciones llevadas a cabo por bacterias heterótrofas facultativas ( $X_h$ )*

En aguas residuales o fangos, existen poblaciones de bacterias llamadas facultativas que se caracterizan por su capacidad de utilizar como aceptor de electrones oxígeno ( $S_{o_2}$ ) o nitratos y nitritos ( $S_{no_3^-}$ ,  $S_{no_2^-}$ ) dependiendo de las condiciones ambientales en las cuales se da la oxidación de la materia orgánica. Debido a la dificultad que entraña el distinguir las bacterias facultativas del resto de poblaciones de bacterias heterótrofas aerobias, y tomando como referencia los modelos ASM y RWQM1, las bacterias facultativas se han incluido dentro del componente  $X_h$ . En condiciones anóxicas sin embargo, puesto que únicamente estas poblaciones de bacterias permanecen activas, las ecuaciones cinéticas de crecimiento de  $X_h$  incluyen un término de reducción ( $\eta_{NO_3}$ ,  $\eta_{NO_2}$ ) que reflejan una menor actividad biológica global.

Las transformaciones de oxidación de materia orgánica bajo condiciones anóxicas propuestas en la LT, se incluyen en la Tabla 2.10 y Tabla 2.11. Estas transformaciones describen la oxidación de los sustratos orgánicos presentes en aguas residuales y fangos cuando los componentes  $S_{no_3^-}$  y  $S_{no_2^-}$  actúan como aceptores de electrones. La construcción de la estequiometría de la desnitrificación con  $S_{no_2^-}$  y  $S_{no_3^-}$  se ha basado en las transformaciones descritas en el modelo RWQM1 y al igual que en condiciones aerobias, se consideran los mismos rendimientos  $Y_{h,no_2}$  y  $Y_{h,no_3}$  para todos los sustratos considerados. Los valores de  $Y_{h,no_2}$  y  $Y_{h,no_3}$  sin embargo, pueden presentar valores distintos entre ellos, ya que las energías libres de las reacciones de oxidación son distintas cuando  $S_{no_2^-}$  y  $S_{no_3^-}$  actúan como aceptores de electrones (Hellinga *et al.*, 1999). A este respecto, y a partir de distintos estudios experimentales, se ha concluido que el rendimiento de construcción de materia celular bajo condiciones anóxicas se reduce aproximadamente al 80% del rendimiento en condiciones aerobias (Söttemann *et al.*, 2005a). Sin embargo, y puesto que los modelos ASM1 y ASM2 no consideran esta reducción, los valores de  $Y_{h,no_2}$  y  $Y_{h,no_3}$  dependerán del caso de estudio y los objetivos del modelo a construir.

El crecimiento anóxico de  $X_h$  con  $S_{no_3^-}$  y  $S_{no_2^-}$  permitirá, al igual que la nitrificación en dos etapas, la construcción de modelos capaces de reproducir nuevos procesos para el tratamiento de aguas residuales con altos contenidos en nitrógeno.



Tabla 2.10. Crecimiento anóxico de  $X_h$  con  $S_{no3}$ .

| Componentes $i \rightarrow$      | 11       | 12       | 13       | 14        | 16        | 18         | 20        | 25                     | 26                     | 36          |
|----------------------------------|----------|----------|----------|-----------|-----------|------------|-----------|------------------------|------------------------|-------------|
| Transformaciones $j \downarrow$  | $S_{su}$ | $S_{aa}$ | $S_{fa}$ | $S_{hva}$ | $S_{hbu}$ | $S_{hpro}$ | $S_{hac}$ | $S_{no2-}$             | $S_{no3-}$             | $X_h$       |
| 16 Cons. $S_{su}$ con $S_{no3}$  | -1       |          |          |           |           |            |           | $(1 - Y_{h,no3})/1.14$ | $(Y_{h,no3} - 1)/1.14$ | $Y_{h,no3}$ |
| 17 Cons. $S_{aa}$ con $S_{no3}$  |          | -1       |          |           |           |            |           | $(1 - Y_{h,no3})/1.14$ | $(Y_{h,no3} - 1)/1.14$ | $Y_{h,no3}$ |
| 18 Cons. $S_{fa}$ con $S_{no3}$  |          |          | -1       |           |           |            |           | $(1 - Y_{h,no3})/1.14$ | $(Y_{h,no3} - 1)/1.14$ | $Y_{h,no3}$ |
| 19 Cons. $S_{VA}$ con $S_{no3}$  |          |          |          | -1        |           |            |           | $(1 - Y_{h,no3})/1.14$ | $(Y_{h,no3} - 1)/1.14$ | $Y_{h,no3}$ |
| 20 Cons. $S_{BU}$ con $S_{no3}$  |          |          |          |           | -1        |            |           | $(1 - Y_{h,no3})/1.14$ | $(Y_{h,no3} - 1)/1.14$ | $Y_{h,no3}$ |
| 21 Cons. $S_{PRO}$ con $S_{no3}$ |          |          |          |           |           | -1         |           | $(1 - Y_{h,no3})/1.14$ | $(Y_{h,no3} - 1)/1.14$ | $Y_{h,no3}$ |
| 22 Cons. $S_{AC}$ con $S_{no3}$  |          |          |          |           |           |            | -1        | $(1 - Y_{h,no3})/1.14$ | $(Y_{h,no3} - 1)/1.14$ | $Y_{h,no3}$ |

$$\rho_{16} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{su}}{K_{su-h} + S_{su}} \cdot \frac{S_{su}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{17} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{aa}}{K_{aa-h} + S_{aa}} \cdot \frac{S_{aa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{18} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{fa}}{K_{fa-h} + S_{fa}} \cdot \frac{S_{fa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IP}] \cdot X_h$$

$$\rho_{19} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{VA}}{K_{VA-h} + S_{VA}} \cdot \frac{S_{VA}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{20} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{BU}}{K_{BU-h} + S_{BU}} \cdot \frac{S_{BU}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{21} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{PRO}}{K_{PRO-h} + S_{PRO}} \cdot \frac{S_{PRO}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{22} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{S_{AC}}{K_A + S_{AC}} \cdot \frac{S_{AC}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

Tabla 2.11. Crecimiento anóxico de  $X_h$  con  $S_{no2}$ .

| Componentes $i \rightarrow$      | 11       | 12       | 13       | 14        | 16        | 18         | 20        | 24                     | 25                     | 26          |
|----------------------------------|----------|----------|----------|-----------|-----------|------------|-----------|------------------------|------------------------|-------------|
| Transformaciones $j \downarrow$  | $S_{su}$ | $S_{aa}$ | $S_{fa}$ | $S_{hva}$ | $S_{hbu}$ | $S_{hpro}$ | $S_{hac}$ | $S_{n2}$               | $S_{no2}$              | $X_h$       |
| 23 Cons. $S_{su}$ con $S_{no2}$  | -1       |          |          |           |           |            |           | $(1 - Y_{h,no2})/1.71$ | $(Y_{h,no2} - 1)/1.71$ | $Y_{h,no2}$ |
| 24 Cons. $S_{aa}$ con $S_{no2}$  |          | -1       |          |           |           |            |           | $(1 - Y_{h,no2})/1.71$ | $(Y_{h,no2} - 1)/1.71$ | $Y_{h,no2}$ |
| 25 Cons. $S_{fa}$ con $S_{no2}$  |          |          | -1       |           |           |            |           | $(1 - Y_{h,no2})/1.71$ | $(Y_{h,no2} - 1)/1.71$ | $Y_{h,no2}$ |
| 26 Cons. $S_{VA}$ con $S_{no2}$  |          |          |          | -1        |           |            |           | $(1 - Y_{h,no2})/1.71$ | $(Y_{h,no2} - 1)/1.71$ | $Y_{h,no2}$ |
| 27 Cons. $S_{BU}$ con $S_{no2}$  |          |          |          |           | -1        |            |           | $(1 - Y_{h,no2})/1.71$ | $(Y_{h,no2} - 1)/1.71$ | $Y_{h,no2}$ |
| 28 Cons. $S_{PRO}$ con $S_{no2}$ |          |          |          |           |           | -1         |           | $(1 - Y_{h,no2})/1.71$ | $(Y_{h,no2} - 1)/1.71$ | $Y_{h,no2}$ |
| 29 Cons. $S_{AC}$ con $S_{no2}$  |          |          |          |           |           |            | -1        | $(1 - Y_{h,no2})/1.71$ | $(Y_{h,no2} - 1)/1.71$ | $Y_{h,no2}$ |

$$\rho_{23} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{su}}{K_F + S_{su}} \cdot \frac{S_{su}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{24} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{aa}}{K_F + S_{aa}} \cdot \frac{S_{aa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{25} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{fa}}{K_F + S_{fa}} \cdot \frac{S_{fa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{26} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{VA}}{K_A + S_{VA}} \cdot \frac{S_{VA}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{27} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{BU}}{K_A + S_{BU}} \cdot \frac{S_{BU}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{28} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{PRO}}{K_A + S_{PRO}} \cdot \frac{S_{PRO}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{29} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{AC}}{K_A + S_{AC}} \cdot \frac{S_{AC}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

- Transformaciones llevadas a cabo por las bacterias acumuladoras de fósforo  $X_{pao}$

Tal y como se ha descrito anteriormente, en la actividad de las bacterias  $X_{pao}$  se distingue el almacenamiento de sustrato y el posterior consumo de este sustrato almacenado. El almacenamiento de sustrato, que ocurre en condiciones aerobias, anóxicas o anaerobias corresponde a las transformaciones 8-11 descritas en la Tabla 2.8. Por otro lado, el consumo del sustrato almacenado y almacenamiento anóxico de  $X_{pp}$  en condiciones anóxicas se describe en la siguiente tabla.

Tabla 2.12. Actividad de las bacterias  $X_{pao}$  en condiciones anóxicas

| Componentes $i \rightarrow$                                                                                                                                                                                                                                                        | 27               | 28                | 24                 | 26                 | 5                | 40         | 41       | 39        |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|-------------------|--------------------|--------------------|------------------|------------|----------|-----------|
| Transformaciones $j \downarrow$                                                                                                                                                                                                                                                    | $S_{k+}$         | $S_{Mg2+}$        | $S_{n2}$           | $S_{no3-}$         | $S_{hpo4=}$      | $X_{pha}$  | $X_{pp}$ | $X_{pao}$ |
| 30 Almacenam. anóxico<br>$X_{pp}$                                                                                                                                                                                                                                                  | $-\beta_{K,Xpp}$ | $-\beta_{Mg,Xpp}$ | $-Y_{pha} / 2.86$  | $Y_{pha} / 2.86$   | $-1$             | $-Y_{pha}$ | $1$      |           |
| 31 Crecimiento anóxico<br>$X_{pao}$                                                                                                                                                                                                                                                |                  |                   | $(1 - Y_h) / 2.86$ | $(Y_h - 1) / 2.86$ | $\beta_{P,Xpao}$ | $-1$       |          | $Y_h$     |
| $\rho_{30} = q_{PP} \cdot \eta_{no3} \frac{S_{IP}}{K_{PS} + S_{IP}} \cdot \frac{X_{pha} / X_{pao}}{K_{PHA} + X_{pha} / X_{pao}} \cdot \frac{K_{MAX} - X_{pp} / X_{pao}}{K_{PP} + K_{MAX} - X_{pp} / X_{pao}} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pao}$ |                  |                   |                    |                    |                  |            |          |           |
| $\rho_{31} = k_{m,Pao} \cdot \eta_{no3} \frac{X_{pha} / X_{pao}}{K_{PHA} + X_{pha} / X_{pao}} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pao}$                                                                                                                |                  |                   |                    |                    |                  |            |          |           |

- *Transformaciones de oxidación llevadas a cabo por bacterias autótrofas*

Tal y como se ha mencionado en el Capítulo 1, dentro del conjunto de las bacterias autótrofas, existe una población específica, conocida como bacteria Anammox ( $X_{an}$ ) capaz de oxidar el nitrógeno amoniacal utilizando nitritos como aceptor de electrones (Mulder *et al.*, 1995).



La estequiometría y cinética de la transformación de crecimiento de las bacterias Anammox se ha basado en la propuesta por (Hao *et al.*, 2002) y se describe en la Tabla 2.13.

La consideración de la actividad de estas bacterias en la LT permite describir el proceso *Anammox*, que como se ha mencionado anteriormente, se utiliza en el tratamiento de aguas residuales con altos contenidos de nitrógeno amoniacal.

Tabla 2.13. Crecimiento de las bacterias Anammox

| Componentes $i \rightarrow$                                                                                                                                              | 25                     | 26              | 24       | 7                                   | 49       |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|-----------------|----------|-------------------------------------|----------|
| Transformaciones $j \downarrow$                                                                                                                                          | $S_{no2-}$             | $S_{no3-}$      | $S_{n2}$ | $S_{nh4+}$                          | $X_{an}$ |
| 32 Crecimiento de $X_{an}$                                                                                                                                               | $-(1 + Y_{an} / 1.14)$ | $Y_{an} / 1.14$ | $2$      | $-(1 + Y_{an} \cdot \beta_{N,Xan})$ | $Y_{an}$ |
| $\rho_{32} = k_{m,An} \frac{S_{no2-}}{K_{NO2,AN} + S_{no2-}} \cdot \frac{S_{IN}}{K_{NH,AN} + S_{IN}} \cdot [I_{o2} \cdot A_{IC} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP}] \cdot X_{an}$ |                        |                 |          |                                     |          |

### 2.3.3.1.1.3 Transformaciones intracelulares anaerobias

Dentro de las transformaciones intracelulares anaerobias se incluyen todas las transformaciones llevadas a cabo por distintas poblaciones de bacterias en ausencia de  $O_2$ ,  $NO_3^-$  y  $NO_2^-$ . En condiciones anaerobias, a diferencia de las condiciones aerobias o anóxicas, las poblaciones de bacterias actúan de forma selectiva sobre los sustratos orgánicos dando lugar a diferentes productos de reacción. Por este motivo, estas transformaciones requieren una descripción más detallada de las diferentes poblaciones de bacterias activas y de las transformaciones que llevan a cabo cada una de ellas.

- *Transformaciones de fermentación: acidogénesis*

De forma general, la fermentación es un proceso en el cual parte del sustrato orgánico no se oxida completamente convirtiéndose en otros compuestos orgánicos. En concreto, la acidogénesis o fermentación ácida anaerobia incluye las transformaciones en las cuales los azúcares solubles y aminoácidos, actuando simultáneamente como aceptores y dadores de electrones, son degradados por las bacterias  $X_{su}$  y  $X_{aa}$  a diferentes ácidos orgánicos. Debido a que la acidogénesis, al contrario que la acetogénesis, se produce sin aceptor de electrones adicional, y debido a que sus rendimientos energéticos son normalmente superiores, estas reacciones pueden producirse con concentraciones de hidrógeno altas y con unos mayores rendimientos de la biomasa.

Las transformaciones de acidogénesis consideradas en la LT (Tabla 2.14) se basan en las transformaciones propuestas en el modelo ADM1. La estequiometría de estas transformaciones es una síntesis de varios procesos de acidogénesis paralelos dependiendo en gran medida de la composición de los azúcares y de los aminoácidos sujetos a degradación, y por lo tanto, debe ser calibrada para casos particulares. En las ecuaciones cinéticas deben incluirse los términos de inhibición correspondientes a las condiciones aerobias y anóxicas y los de inhibición por pH tal y como se han descrito en 2.3.2.

Tabla 2.14. Acidogénesis o fermentación ácida

| Compon. $i$ →                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 11       | 12       | 14                      | 16                      | 18                       | 20                      | 22                      | 42       | 43       |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|----------|-------------------------|-------------------------|--------------------------|-------------------------|-------------------------|----------|----------|
| Transform. $j$ ↓                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | $S_{su}$ | $S_{aa}$ | $S_{hva}$               | $S_{hbu}$               | $S_{hpro}$               | $S_{hac}$               | $S_{h2}$                | $X_{su}$ | $X_{aa}$ |
| 33 Acidogénesis de $S_{su}$                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | -1       |          |                         | $(1 - Y_{su})f_{bu,su}$ | $(1 - Y_{su})f_{pro,su}$ | $(1 - Y_{su})f_{ac,su}$ | $(1 - Y_{su})f_{h2,su}$ | $Y_{su}$ |          |
| 34 Acidogénesis de $S_{aa}$                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |          | -1       | $(1 - Y_{aa})f_{va,aa}$ | $(1 - Y_{aa})f_{bu,aa}$ | $(1 - Y_{aa})f_{pro,aa}$ | $(1 - Y_{aa})f_{ac,aa}$ | $(1 - Y_{aa})f_{h2,aa}$ |          | $Y_{aa}$ |
| $\rho_{33} = k_{m,su} \cdot \frac{S_{su}}{K_{S,su} + S_{su}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{pH,aa}] \cdot X_{su}$ $\rho_{34} = k_{m,aa} \cdot \frac{S_{aa}}{K_{S,aa} + S_{aa}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{pH,aa}] \cdot X_{aa}$ |          |          |                         |                         |                          |                         |                         |          |          |

- *Transformaciones de oxidación: acetogénesis*

La acetogénesis incluye las transformaciones en las que los ácidos orgánicos son oxidados obteniendo acético e hidrógeno como producto. Las poblaciones de bacterias que intervienen en la acetogénesis, utilizan como aceptores de electrones los iones hidrógeno o el dióxido de carbono para producir hidrógeno gas y acetato.

Las transformaciones incluidas en la LT se han basado en las transformaciones consideradas en el modelo ADM1.

En la definición de la estequiometría, al igual que en los casos de oxidación aerobia, se han tomado como sustratos de las transformaciones los componentes referentes a las especies ácidas (Söttemann *et al.*, 2005b).

En las ecuaciones cinéticas, sin embargo, los términos de Monod se expresan en base a las variables compuestas que engloban los componentes ácido y base del valérico, butírico y propiónico. Además, debido a que la acetogénesis no es favorable desde el punto de vista energético cuando la presión del  $H_2$  es alta, las ecuaciones cinéticas, incluyen términos de inhibición por altas concentraciones de  $H$  y valores bajos de pH.

Tabla 2.15. Acetogénesis

| Componentes $i \rightarrow$     | 13       | 14        | 16        | 18                              | 20                               | 22                               | 44       | 45       | 46        |
|---------------------------------|----------|-----------|-----------|---------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|----------|----------|-----------|
| Transformaciones $j \downarrow$ | $S_{fa}$ | $S_{hva}$ | $S_{hbu}$ | $S_{hpro}$                      | $S_{hac}$                        | $S_{h2}$                         | $X_{fa}$ | $X_{c4}$ | $X_{pro}$ |
| 35 Acetogénesis de $S_{fa}$     | -1       |           |           |                                 | $f_{ac,fa} \cdot (1 - Y_{fa})$   | $f_{h2,fa} \cdot (1 - Y_{fa})$   | $Y_{fa}$ |          |           |
| 36 Acetogénesis de $S_{VA}$     |          | -1        |           | $f_{pro,va} \cdot (1 - Y_{c4})$ | $f_{ac,va} \cdot (1 - Y_{c4})$   | $f_{h2,va} \cdot (1 - Y_{c4})$   |          | $Y_{c4}$ |           |
| 37 Acetogénesis de $S_{BU}$     |          |           | -1        |                                 | $f_{ac,bu} \cdot (1 - Y_{c4})$   | $f_{h2,bu} \cdot (1 - Y_{c4})$   |          | $Y_{c4}$ |           |
| 38 Acetogénesis de $S_{PRO}$    |          |           |           | -1                              | $f_{ac,pro} \cdot (1 - Y_{pro})$ | $f_{h2,pro} \cdot (1 - Y_{pro})$ |          |          | $Y_{pro}$ |

$$\rho_{35} = k_{m,fa} \cdot \frac{S_{fa}}{K_{S,fa} + S_{fa}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,fa} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{fa}$$

$$\rho_{36} = k_{m,c4} \cdot \frac{S_{VA}}{K_{S,c4} + S_{VA}} \cdot \frac{I}{I + S_{BU}/S_{VA}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,c4} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{37} = k_{m,c4} \cdot \frac{S_{BU}}{K_{S,c4} + S_{BU}} \cdot \frac{I}{I + S_{VA}/S_{BU}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,c4} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{38} = k_{m,pro} \cdot \frac{S_{PRO}}{K_{S,pro} + S_{PRO}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,pro} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{pro}$$

- *Transformaciones de oxidación: metanogénesis*

La etapa de metanogénesis describe la formación de metano a partir del acético (metanogénesis acetoclástica) y del hidrógeno (metanogénesis hidrogenófila). Esta etapa se da de forma consecutiva a la etapa de la acetogénesis.

La estequiometría y cinética de las transformaciones que describen la metanogénesis se basan en el modelo ADM1 y se muestran en la Tabla 2.16. Las ecuaciones cinéticas incluyen los términos de inhibición correspondientes a las condiciones aerobias y anóxicas y pH propuestos en 2.3.2.

Tabla 2.16. Metanogénesis

| Componentes $i \rightarrow$     | 20        | 22       | 23           | 47       | 48       |
|---------------------------------|-----------|----------|--------------|----------|----------|
| Transformaciones $j \downarrow$ | $S_{hac}$ | $S_{h2}$ | $S_{ch4}$    | $X_{ac}$ | $X_{h2}$ |
| 39 Metanogénesis acetoclástica  | -1        |          | $I - Y_{ac}$ | $Y_{ac}$ |          |
| 40 Metanogénesis hidrogenófila  |           | -1       | $I - Y_{h2}$ |          | $Y_{h2}$ |

$$\rho_{39} = k_{m,ac} \cdot \frac{S_{AC}}{K_{S,ac} + S_{AC}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{nh3} \cdot I_{ph,ac}] \cdot X_{ac}$$

$$\rho_{40} = k_{m,h2} \cdot \frac{S_{h2}}{K_{S,h2} + S_{h2}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{ph,h2}] \cdot X_{h2}$$

- *Transformaciones llevadas a cabo por bacterias acumuladoras de fósforo*  
 $X_{pao}$

Aunque el crecimiento de las bacterias  $X_{pao}$  y almacenamiento de  $S_{hpo4=}$ , son transformaciones que se dan exclusivamente en condiciones aerobias o anóxicas, el almacenamiento de VFA en forma de  $X_{pha}$  se da mayoritariamente en condiciones anaerobias. Por tanto, tal y como se muestra en la Figura 2.1, las transformaciones 8-11 que describen el almacenamiento de  $X_{pha}$  por parte de las bacterias  $X_{pao}$ , también deben incluirse dentro de las transformaciones intracelulares anaerobias.

#### 2.3.3.1.2 Transformaciones de desaparición de las bacterias

Las transformaciones referentes a la desaparición y lisis de las poblaciones de bacterias incluidas en la LT se basan en el modelo lisis-regeneración propuesto en el modelo ADM1 y tanto en aguas residuales como en fangos, se describe mediante dos tipos de transformaciones consecutivas. En primer lugar, las poblaciones de bacterias activas se convierten en el componente complejo  $X_{c2}$ . Posteriormente, se da una desintegración o lisis de  $X_{c2}$  en diferentes sustratos particulados y materia inerte.

Las transformaciones que describen la desaparición de las bacterias activas convirtiéndolas en el componente complejo  $X_{c2}$  engloban una serie de mecanismos (respiración endógena, muerte interna y externa, predación y regeneración) que se dan tanto intra como extracelularmente (Van Loosdrecht and Henze, 1999) y por lo tanto, se han considerado como un grupo distinto dentro de las transformaciones bioquímicas (Figura 2.1). Las transformaciones que describen la desintegración o lisis de los componentes complejos  $X_{c2}$ , sin embargo, se incluyen dentro del conjunto de transformaciones bioquímicas extracelulares.

Las transformaciones que describen la desaparición de todas las poblaciones de bacterias en condiciones aerobias anóxicas y anaerobias incluidas en la LT se muestran en la Tabla 2.17. La consideración de transformaciones diferentes dependiendo de las condiciones ambientales, permitirá reproducir de forma continua la desaparición de una determinada población de bacterias cuando las condiciones ambientales no le sean favorables.





Además, los componentes particulados que las bacterias  $X_{pao}$  almacenan en su interior,  $X_{pha}$  y  $X_{pp}$  deben desaparecer a la vez que lo hacen las bacterias  $X_{pao}$ . Las transformaciones que describen la desaparición de estos dos productos de almacenamiento se presentan en la siguiente tabla:

Tabla 2.18. Desaparición de los productos almacenados en  $X_{pao}$

| Componentes $i \rightarrow$                                               | 14           | 16           | 18            | 20           | 5           | 40        | 41       |
|---------------------------------------------------------------------------|--------------|--------------|---------------|--------------|-------------|-----------|----------|
| Transformaciones $j \downarrow$                                           | $S_{hva}$    | $S_{hbu}$    | $S_{hpro}$    | $S_{hac}$    | $S_{hpo4=}$ | $X_{pha}$ | $X_{pp}$ |
| 53-67-81 Desap-Lisis $X_{pha}$                                            | $f_{va,pha}$ | $f_{bu,pha}$ | $f_{pro,pha}$ | $f_{ac,pha}$ |             |           | -1       |
| 54-68-82 Desap-Lisis $X_{pp}$                                             |              |              |               |              |             | 1         | -1       |
| $\rho_{53} = k_{dec\_aer,xpha} \cdot A_{o2} \cdot X_{pha}$                |              |              |               |              |             |           |          |
|                                                                           |              |              |               |              |             |           |          |
| $\rho_{67} = k_{dec\_anox,xpha} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{pha}$ |              |              |               |              |             |           |          |
|                                                                           |              |              |               |              |             |           |          |
| $\rho_{81} = k_{dec\_anox,xpha} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{pp}$  |              |              |               |              |             |           |          |
|                                                                           |              |              |               |              |             |           |          |
| $\rho_{54} = k_{dec\_an,xpha} \cdot A_{o2} \cdot X_{pp}$                  |              |              |               |              |             |           |          |
|                                                                           |              |              |               |              |             |           |          |
| $\rho_{68} = k_{dec\_an,xpha} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{pha}$   |              |              |               |              |             |           |          |
|                                                                           |              |              |               |              |             |           |          |
| $\rho_{82} = k_{dec\_aer,xpha} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{pp}$   |              |              |               |              |             |           |          |
|                                                                           |              |              |               |              |             |           |          |

### 2.3.3.1.3 Transformaciones extracelulares

Por último, dentro de las transformaciones extracelulares se incluyen la desintegración de los componentes complejos ( $X_{c1}$  y  $X_{c2}$ ) y la hidrólisis enzimática de los compuestos particulados ( $X_{ch}$ ,  $X_{pr}$  y  $X_{li}$ ). En ambos casos, se han distinguido transformaciones diferentes que reproducen la desintegración e hidrólisis en condiciones aerobias, anóxicas y anaerobias ya que, aunque su estequiometría no depende de las condiciones ambientales, las velocidades a las cuales se dan estas transformaciones son diferentes.

- *Desintegración de los Componentes Complejos  $X_{c1}$  y  $X_{c2}$*

En el modelo de digestión anaerobia ADM1, el componente  $X_c$  se describe como un componente que engloba los compuestos complejos de tamaño considerable y los productos procedentes de la lisis de la biomasa. La desintegración de  $X_c$  se define como un paso previo a la hidrólisis que describe la ruptura de compuestos complejos en compuestos más sencillos y la desaparición y lisis de la biomasa de forma más realista que la planteada en los modelos ASM1 y ASM2 (Batstone *et al.*, 2002). Sin embargo, la descripción de los componentes en base a sus fracciones másicas elementales pone de manifiesto la dificultad, o incluso la incompatibilidad, de garantizar la continuidad de la masa utilizando un único componente complejo  $X_c$  para

describir los componentes particulados en el influente y los productos de lisis. Por una parte, las fracciones másicas elementales de los componentes complejos provenientes del influente deben ser coherentes con las posibles medidas experimentales, por otra, los productos de lisis deben serlo con las fracciones másicas de las biomasa de las que proceden. Es frecuente que dependiendo de las características del agua de entrada, estas restricciones sean incompatibles (Huete *et al.*, 2006; Tugtas *et al.*, 2005). Por ello, el componente  $X_c$  debe desdoblarse en dos componentes  $X_{c1}$  y  $X_{c2}$  que representen los compuestos orgánicos complejos en el influente y los obtenidos por la lisis de la biomasa.

Por tanto, en la LT se han incluido dos desintegraciones de los componentes complejos  $X_{c1}$  y  $X_{c2}$ . Los productos obtenidos en la desintegración de  $X_{c1}$  son los componentes particulados  $X_{ch}$ ,  $X_{pr}$ ,  $X_{li}$  y una cantidad de materia inerte soluble y particulada expresada mediante los componentes  $S_i$  y  $X_i$ . Por otro lado, los productos obtenidos en la desintegración de  $X_{c2}$  son los componentes particulados  $X_{ch}$ ,  $X_{pr}$  y  $X_{li}$  y una cantidad de materia inerte producto de la lisis de la biomasa representado por  $S_p$  y  $X_p$ . Los fraccionamientos de  $X_{c1}$  a sus respectivos componentes particulados deben estimarse en cada caso de estudio dependiendo del tipo de influente. El fraccionamiento de  $X_{c2}$ , por otro lado, debe ser totalmente coherente con la composición másica de la biomasa.

Las transformaciones de desintegración de  $X_{c1}$  y  $X_{c2}$  en condiciones aerobias, anóxicas y anaerobias se han considerado como transformaciones distintas ya que, aunque su estequiometría no depende de las condiciones ambientales, la velocidad de desintegración es mayor en condiciones aerobias que en anaerobias (Batstone *et al.*, 2002). Las ecuaciones cinéticas de estas transformaciones se describen como cinéticas de primer orden con respecto a  $X_{c1}$  o  $X_{c2}$  tal y como se propone en el modelo ADM1.

Tabla 2.19. Desintegración de los componentes complejos

| Componentes $i \rightarrow$                                                                                 | 29           | 30           | 33           | 34           | 35           | 31       | 32       | 50           | 51                                                                                                          |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|----------|----------|--------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Transformaciones $j \downarrow$                                                                             | $S_i$        | $S_p$        | $X_{ch}$     | $X_{pr}$     | $X_{li}$     | $X_{c1}$ | $X_{c2}$ | $X_i$        | $X_p$                                                                                                       |
| 83-85-87 Desintegración $X_{c1}$                                                                            | $f_{si,xc1}$ |              | $f_{ch,xc1}$ | $f_{pr,xc1}$ | $f_{li,xc1}$ | -1       |          | $f_{xi,xc1}$ |                                                                                                             |
| 84-86-88 Desintegración $X_{c2}$                                                                            |              | $f_{sp,xc2}$ | $f_{ch,xc2}$ | $f_{ch,xc2}$ | $f_{li,xc2}$ |          | -1       |              | $f_{xp,xc2}$                                                                                                |
| $\rho_{83} = k_{d\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c1}$                 |              |              |              |              |              |          |          |              | $\rho_{84} = k_{d\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c2}$                 |
| $\rho_{85} = k_{d\_Anox} \cdot [A_{nox} \cdot I_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c1}$  |              |              |              |              |              |          |          |              | $\rho_{86} = k_{d\_Anox} \cdot [A_{nox} \cdot I_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c2}$  |
| $\rho_{87} = k_{d\_Anaer} \cdot [I_{nox} \cdot I_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c1}$ |              |              |              |              |              |          |          |              | $\rho_{88} = k_{d\_Anaer} \cdot [I_{nox} \cdot I_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c2}$ |

- *Hidrólisis de carbohidratos, proteínas y lípidos*

Las transformaciones de hidrólisis de carbohidratos ( $X_{ch}$ ), proteínas ( $X_{pr}$ ) y lípidos ( $X_{li}$ ) describen la ruptura de estos componentes en compuestos más sencillos que puedan ser transportados al interior de las paredes celulares de las bacterias. Los componentes obtenidos en la hidrólisis de  $X_{ch}$ ,  $X_{pr}$  y  $X_{li}$  son respectivamente azúcares ( $S_{su}$ ), aminoácidos ( $S_{aa}$ ) y ácidos grasos ( $S_{fa}$ ).

Se han considerado transformaciones distintas para la hidrólisis de  $X_{ch}$ ,  $X_{pr}$  y  $X_{li}$  en condiciones aerobias, anóxicas y anaerobias ya que, como en el caso de la desintegración, la hidrólisis en condiciones aerobias se da a velocidad mayores que en condiciones anóxicas y anaerobias (Batstone *et al.*, 2002).

Tradicionalmente, los modelos ASM describen las ecuaciones cinéticas propuestas para la hidrólisis mediante la ecuación de *Contois* en la que se tiene en cuenta la relación entre las concentraciones de componente particulado y biomasa en el medio. Sin embargo, en la LT propuesta se asume que todas las transformaciones de hidrólisis presentan cinéticas de primer orden con respecto al componente particulado bajo cualquier condición ambiental, tal y como se propone en los modelos ADM1 y RWQM1.

Tabla 2.20. Hidrólisis de componentes particulados

| Componentes $i \rightarrow$                                                                                 | 11              | 12       | 13          | 33       | 34       | 35       |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|----------|-------------|----------|----------|----------|
| Transformaciones $j \downarrow$                                                                             | $S_{su}$        | $S_{aa}$ | $S_{fa}$    | $X_{ch}$ | $X_{pr}$ | $X_{li}$ |
| 89-92-95 Hidrólisis $X_{ch}$                                                                                | 1               |          |             | -1       |          |          |
| 90-93-96 Hidrólisis $X_{pr}$                                                                                |                 | 1        |             |          | -1       |          |
| 91-94-97 Hidrólisis $X_{li}$                                                                                | $1 - f_{fa,li}$ |          | $f_{fa,li}$ |          |          | -1       |
| $\rho_{89} = k_{h\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{ch}$                 |                 |          |             |          |          |          |
| $\rho_{90} = k_{h\_Anox} \cdot [I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{ch}$  |                 |          |             |          |          |          |
| $\rho_{91} = k_{h\_Anaer} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{ch}$ |                 |          |             |          |          |          |
| $\rho_{92} = k_{h\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pr}$                 |                 |          |             |          |          |          |
| $\rho_{93} = k_{h\_Anox} \cdot [I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pr}$  |                 |          |             |          |          |          |
| $\rho_{94} = k_{h\_Anaer} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pr}$ |                 |          |             |          |          |          |
| $\rho_{95} = k_{h\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{li}$                 |                 |          |             |          |          |          |
| $\rho_{96} = k_{h\_Anox} \cdot [I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{li}$  |                 |          |             |          |          |          |
| $\rho_{97} = k_{h\_Anaer} \cdot [I_{nox} \cdot I_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{li}$ |                 |          |             |          |          |          |



### 2.3.3.3 Transformaciones físico-químicas

Las transformaciones físico-químicas consideradas en la LT incluyen transferencias de masa líquido-gas entre componentes disueltos y gaseosos y precipitación y redisolución de sales de fósforo.

#### 2.3.3.3.1 Transferencia líquido-gas

Las transformaciones de transferencia líquido-gas que se han incluido en la LT, describen la disolución a la fase líquida y el escape a la fase gaseosa de todos los compuestos gaseosos que intervienen en las transformaciones bioquímicas y equilibrios ácido-base descritos. La inclusión de estas transformaciones al construir cualquier modelo en el que intervengan compuestos gaseosos, permite garantizar la continuidad de la masa en cualquier punto de la EDAR estudiada.

Los compuestos gaseosos que intervienen en el tratamiento de aguas residuales y fangos son  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_4$  y  $\text{H}_2\text{O}$ . Todos estos compuestos, se describen en la Tabla 2.1 y Tabla 2.2 como componentes disueltos  $S_i$  si los compuestos gaseosos se encuentra disueltos en la fase líquida o gaseosos  $G_i$  si se encuentra en la fase gaseosa.

Las ecuaciones cinéticas que describen la transferencia líquido-gas se expresan como la diferencia entre la solubilidad del compuesto gaseoso y la concentración real de gas disuelto en el agua residual o fango (Siegrist *et al.*, 2002). La solubilidad de un compuesto, a su vez, viene dada por el producto de la constante de Henry ( $K_{H,i}$ ) por la presión parcial del compuesto en la fase gaseosa ( $P_{gas,i}$ ).

La transformación que describe la evaporación-condensación del agua también se ha incluido en la LT aunque su efecto es relevante únicamente en procesos de digestión anaerobia a elevadas temperaturas. La ecuación cinética de esta transformación se describe como la diferencia entre la presión de saturación de  $\text{H}_2\text{O}_{(v)}$  a una determinada temperatura y el valor de presión de  $\text{H}_2\text{O}_{(v)}$  real. La velocidad de evaporación-condensación por tanto, es proporcional a esta diferencia y al valor del parámetro  $K_{Ma}$ .

Tabla 2.22. Transferencias líquido-gas

| Componentes $i \rightarrow$      | 23                                                                       | 24       | 22       | 8         | 57        | 59       | 56       | 58        | 55        | 60       | 61        |
|----------------------------------|--------------------------------------------------------------------------|----------|----------|-----------|-----------|----------|----------|-----------|-----------|----------|-----------|
| Transformaciones $j \downarrow$  | $S_{ch4}$                                                                | $S_{n2}$ | $S_{h2}$ | $S_{nh3}$ | $G_{ch4}$ | $G_{n2}$ | $G_{h2}$ | $G_{nh3}$ | $G_{co2}$ | $G_{o2}$ | $G_{h2o}$ |
| 106 Disolución CO <sub>2</sub>   |                                                                          |          |          |           |           |          |          |           | 1         |          |           |
| 107 Disolución O <sub>2</sub>    |                                                                          |          |          |           |           |          |          |           |           | 1        |           |
| 108 Evaporación H <sub>2</sub> O |                                                                          |          |          |           |           |          |          |           |           |          | 1         |
| 109 Disolución NH <sub>3</sub>   |                                                                          |          |          | -1        |           |          |          | 1         |           |          |           |
| 110 Disolución CH <sub>4</sub>   | -1                                                                       |          |          |           | 1         |          |          |           |           |          |           |
| 111 Disolución N <sub>2</sub>    |                                                                          | -1       |          |           |           | 1        |          |           |           |          |           |
| 112 Disolución H <sub>2</sub>    |                                                                          |          | -1       |           |           |          | 1        |           |           |          |           |
| <hr/>                            |                                                                          |          |          |           |           |          |          |           |           |          |           |
|                                  | $\rho_{106} = K_L a_{co2} \cdot (K_{H,co2} \cdot P_{gas,co2} - S_{co2})$ |          |          |           |           |          |          |           |           |          |           |
|                                  | $\rho_{107} = K_L a_{o2} \cdot (K_{H,o2} \cdot P_{gas,o2} - S_{o2})$     |          |          |           |           |          |          |           |           |          |           |
|                                  | $\rho_{108} = K_M a_{H2O} \cdot (P_{H2O}^{SAT} - P_{h2o})$               |          |          |           |           |          |          |           |           |          |           |
|                                  | $\rho_{109} = K_L a_{nh3} \cdot (K_{H,nh3} \cdot P_{gas,nh3} - S_{nh3})$ |          |          |           |           |          |          |           |           |          |           |
|                                  | $\rho_{110} = K_L a_{ch4} \cdot (K_{H,ch4} \cdot P_{gas,ch4} - S_{ch4})$ |          |          |           |           |          |          |           |           |          |           |
|                                  | $\rho_{111} = K_L a_{n2} \cdot (K_{H,n2} \cdot P_{gas,n2} - S_{n2})$     |          |          |           |           |          |          |           |           |          |           |
|                                  | $\rho_{112} = K_L a_{h2} \cdot (K_{H,h2} \cdot P_{gas,h2} - S_{h2})$     |          |          |           |           |          |          |           |           |          |           |

### 2.3.3.3.2 Transformaciones de precipitación y redisolución

Las transformaciones de precipitación-redisolución incluidas en la LT hacen referencia únicamente a la precipitación y redisolución del fósforo inorgánico tal y como se propone en el modelo ASM2/ASM2d. En este modelo se asume que la precipitación y redisolución son transformaciones inversas a partir de las cuales, en estado estacionario, se establece el siguiente equilibrio:



Los componentes PO<sub>4</sub><sup>3-</sup> y H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> no se ha incluido en la LT ya que concentraciones relevantes de este componente requieren valores de pH inusuales en el tratamiento de aguas residuales y fangos urbanos. La estequiometría de las transformaciones de precipitación-redisolución por tanto, se ha construido utilizando el componente  $S_{hpo4=}$ , ya que ésta es la especie iónica predominante cuando el pH toma valores cercanos a 7. Aunque el componente

$S_{hpo4=}$  actúa como componente fuente-sumidero del P, en este caso se ha incluido en la Tabla 2.23 para una mejor descripción de la estequiometría de las transformaciones de precipitación-redisolución.

Tabla 2.23. Precipitación y redisolución del fósforo

| Componentes $i \rightarrow$     | 52         | 53        | 6           |
|---------------------------------|------------|-----------|-------------|
| Transformaciones $j \downarrow$ | $X_{Meoh}$ | $X_{MeP}$ | $S_{hpo4=}$ |
| 113 Precipitación               | -3.45      | 4.87      | -1          |
| 114 Redisolución                | 3.45       | -4.87     | 1           |

$$\rho_{113} = k_{PRE} (S_{hpo4=} \cdot X_{Meoh})$$

$$\rho_{114} = k_{RED} \cdot X_{MeP}$$

En la actualidad, la descripción del comportamiento del fósforo y su precipitación formando parte de compuestos complejos como  $CaHPO_4$ , estruvita ( $MgNH_4PO_4$ ) u otros, se propone como una extensión interesante en los modelos de digestión anaerobia (Batstone *et al.*, 2005; van Rensburg *et al.*, 2003). Aunque en la LT presentada en esta tesis estas transformaciones no se han incluido, la utilización de las fracciones másicas del fósforo  $\alpha_{p,i}$ , la consideración de los equilibrios ácido-base del fósforo inorgánico y el cálculo dinámico del pH a partir del componente  $S_{h+}$ , facilitará su incorporación cuando sea necesario.

#### 2.3.3.4 Parámetros estequiométricos y cinéticos utilizados en las transformaciones

A continuación se describen los parámetros cinéticos y estequiométricos utilizados en la definición de la estequiometría y cinéticas de las transformaciones incluidas en la LT. Los valores numéricos de estos parámetros se detallan en el Anexo B y Anexo E para los casos estudiados en esta tesis.

## 2.3.3.4.1 Parámetros estequiométricos

Tabla 2.24. Parámetros estequiométricos correspondientes a fraccionamientos

| <b>Símbolo</b> | <b>Descripción</b>                                                            | <b>Unidad</b> |
|----------------|-------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| $f_{si,xc1}$   | Fración de inertes solubles por unidad de DQO de $X_{c1}$                     | -             |
| $f_{xi,xc1}$   | Fración de inertes particulados por unidad de DQO de $X_{c1}$                 | -             |
| $f_{ch,xc1}$   | Fración de carbohidratos por unidad de DQO de $X_{c1}$                        | -             |
| $f_{pr,xc1}$   | Fración de proteínas por unidad de DQO de $X_{c1}$                            | -             |
| $f_{li,xc1}$   | Fración de lípidos por unidad de DQO de $X_{c1}$                              | -             |
| $f_{sp,xc2}$   | Fración de inertes solubles por unidad de DQO de $X_{c2}$                     | -             |
| $f_{xp,xc2}$   | Fración de inertes particulados por unidad de DQO de $X_{c2}$                 | -             |
| $f_{ch,xc2}$   | Fración de carbohidratos por unidad de DQO de $X_{c2}$                        | -             |
| $f_{pr,xc2}$   | Fración de proteínas por unidad de DQO de $X_{c2}$                            | -             |
| $f_{li,xc2}$   | Fración de lípidos por unidad de DQO de $X_{c2}$                              | -             |
| $f_{fa,li}$    | Fración de ácidos grasos producidos por unidad de DQO de lípidos              | -             |
| $f_{h2,su}$    | Fración de hidrógeno producido por unidad de DQO de azúcares                  | -             |
| $f_{bu,su}$    | Fración de ácido butírico producido por unidad de DQO de azúcares             | -             |
| $f_{pro,su}$   | Fración de ácido propiónico producido por unidad de azúcares                  | -             |
| $f_{ac,su}$    | Fración de ácido acético producido por unidad de azúcares                     | -             |
| $f_{h2,aa}$    | Fración de hidrógeno producido por unidad de DQO de aminoácidos               | -             |
| $f_{va,aa}$    | Fración de ácido valérico producido por unidad DQO de aminoácidos             | -             |
| $f_{bu,aa}$    | Fración de ácido butírico producido por unidad DQO de aminoácidos             | -             |
| $f_{pro,aa}$   | Fración de ácido propiónico producido por unidad DQO aminoácidos              | -             |
| $f_{ac,aa}$    | Fración de ácido acético producido por unidad DQO aminoácidos                 | -             |
| $f_{va,pha}$   | Fración de ácido valérico producido en la lisis de una unidad de DQO de PHA   | -             |
| $f_{bu,pha}$   | Fración de ácido butírico producido en la lisis de una unidad de DQO de PHA   | -             |
| $f_{pro,pha}$  | Fración de ácido propiónico producido en la lisis de una unidad de DQO de PHA | -             |
| $f_{ac,pha}$   | Fración de ácido acético producido en la lisis de una unidad de DQO de PHA    | -             |



Tabla 2.25. Parámetros estequiométricos correspondientes a rendimientos de crecimiento de las bacterias

| <b>Símbolo</b> | <b>Descripción</b>                                                                                          | <b>Unidad</b>                 |
|----------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
| $Y_h$          | Rendimiento de la biomasa heterótrofa a partir de cualquier sustrato en condiciones aerobias                | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_s$ |
| $Y_{h,no3}$    | Rendimiento de la biomasa heterótrofa a partir de cualquier sustrato en condiciones anóxicas ( $Sno_{3-}$ ) | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_s$ |
| $Y_{h,no2}$    | Rendimiento de la biomasa heterótrofa a partir de cualquier sustrato en condiciones anóxicas ( $Sno_{2-}$ ) | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_s$ |
| $Y_{po4}$      | Requerimiento de PP por el almacenamiento de una unidad de DQO de PHA                                       | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_x$ |
| $Y_{pha}$      | Requerimiento de PHA por almacenamiento de PP                                                               | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_x$ |
| $Y_{nh4,N1}$   | Rendimiento de las B. Nitrosomonas a partir de Amonio                                                       | $\text{gCOD}_x/\text{gN}$     |
| $Y_{no2,N2}$   | Rendimiento de las B. Nitrobacter a partir de Nitritos                                                      | $\text{gCOD}_x/\text{gN}$     |
| $Y_{an}$       | Rendimiento de las B. Anammox a partir de Amonio                                                            | $\text{gCOD}_x/\text{gN}$     |
| $Y_{su}$       | Rendimiento de la biomasa a partir de azúcares                                                              | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_s$ |
| $Y_{aa}$       | Rendimiento de la biomasa a partir de aminoácidos                                                           | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_s$ |
| $Y_{fa}$       | Rendimiento de la biomasa a partir de ácidos grasos                                                         | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_s$ |
| $Y_{c4}$       | Rendimiento de la biomasa a partir de ácidos valérico y butírico                                            | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_s$ |
| $Y_{pro}$      | Rendimiento de la biomasa a partir del ácido propiónico                                                     | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_s$ |
| $Y_{ac}$       | Rendimiento de la biomasa metanogénica acetoclástica                                                        | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_s$ |
| $Y_{h2}$       | Rendimiento de la biomasa metanogénica hidrogenófila                                                        | $\text{gCOD}_x/\text{gCOD}_s$ |

## 2.3.3.4.2 Parámetros cinéticos

Tabla 2.26. Tasas máximas específicas de consumo de sustrato

| Símbolo       | Descripción                                                                                                                                | Unidad                                      |
|---------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------|
| $k_{m,h}$     | Tasa de consumo de sustrato por bacterias heterótrofas aerobia/anóxica                                                                     | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) |
| $\eta_{NO_3}$ | Factor de reducción de consumo de sustrato por bacterias Heterótrofas cuando NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> actúa como aceptor de electrones | ----                                        |
| $\eta_{NO_2}$ | Factor de reducción de consumo de sustrato por bacterias Heterótrofas cuando NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> actúa como aceptor de electrones | ----                                        |
| $k_{m,su}$    | Tasa de consumo de azúcares por bacterias acidogénicas consumidoras de azúcares                                                            | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) |
| $k_{m,aa}$    | Tasa de consumo de aminoácidos por bacterias acidogénicas consumidoras de aminoácidos                                                      | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) |
| $k_{m,fa}$    | Tasa de consumo de LCFA por bacterias acetogénicas consumidoras de LCFA                                                                    | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) |
| $k_{m,c4}$    | Tasa de consumo de valérico y butírico por bacterias acetogénicas consumidoras de VA-BU                                                    | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) |
| $k_{m,pro}$   | Tasa de consumo de propiónico por bacterias acetogénicas consumidoras de propiónico                                                        | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) |
| $k_{m,ac}$    | Tasa de consumo de acético por bacterias metanogénicas acetoclásticas                                                                      | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) |
| $k_{m,ac}$    | Tasa de consumo de acético por bacterias metanogénicas hidrogenófilas                                                                      | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) |
| $k_{m,pao}$   | Tasa de consumo de PHA por bacterias acumuladoras de P                                                                                     | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) |
| $q_{pha}$     | Tasa de almacenamiento de PHA por bacterias acumuladoras de P                                                                              | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) |
| $q_{pp}$      | Tasa de almacenamiento de PP por bacterias acumuladoras de P                                                                               | kgP/(kgCOD <sub>x</sub> ·d)                 |
| $k_{m,N1}$    | Tasa de consumo de N-NH <sub>x</sub> por bacterias Nitrosomonas                                                                            | kgN/(kgCOD <sub>x</sub> ·d)                 |
| $k_{m,N2}$    | Tasa de consumo de N-NH <sub>x</sub> por bacterias Nitrobacter                                                                             | kgN/(kgCOD <sub>x</sub> ·d)                 |
| $k_{m,An}$    | Tasa de consumo de N-NH <sub>x</sub> por bacterias Anammox                                                                                 | kgN/(kgCOD <sub>x</sub> ·d)                 |

Tabla 2.27. Constantes de velocidades de desaparición de biomasa

| Símbolo               | Descripción                                                                                            | Unidad   |
|-----------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|
| $k_{dec\_aer,xh}$     | Tasa de desaparición de las bacterias Heterótrofas en condiciones aerobias                             | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xn1}$    | Tasa de desaparición de las bacterias Nitrosomonas en condiciones aerobias                             | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xn2}$    | Tasa de desaparición de las bacterias Nitrobacter en condiciones aerobias                              | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xpao}$   | Tasa de desaparición de las bacterias PAO en condiciones aerobias                                      | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xsu}$    | Tasa de desaparición de las acidogénicas consumidoras de azúcares en condiciones aerobias              | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xaa}$    | Tasa de desaparición de las acidogénicas consumidoras de aminoácidos en condiciones aerobias           | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xfa}$    | Tasa de desaparición de las acetogénicas consumidoras de LCFA en condiciones aerobias                  | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xc4}$    | Tasa de desaparición de las acetogénicas consumidoras de valérico y butírico en condiciones aerobias   | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xpro}$   | Tasa de desaparición de las acetogénicas consumidoras de propiónico en condiciones aerobias            | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xac}$    | Tasa de desaparición de las metanogénicas acetoclásticas en condiciones aerobias                       | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xh2}$    | Tasa de desaparición de las metanogénicas hidrogenófilas en condiciones aerobias                       | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_aer,xan}$    | Tasa de desaparición de la bacterias Anammox en condiciones aerobias                                   | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xh}$    | Tasa de desaparición de las bacterias Heterótrofas en condiciones anóxicas                             | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xn1}$   | Tasa de desaparición de las bacterias Nitrosomonas en condiciones anóxicas                             | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xn2}$   | Tasa de desaparición de las bacterias Nitrobacter en condiciones anóxicas                              | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xpao}$  | Tasa de desaparición de las bacterias PAO en condiciones anóxicas                                      | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xsu}$   | Tasa de desaparición de las acidogénicas consumidoras de azúcares en condiciones anóxicas              | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xaa}$   | Tasa de desaparición de las acidogénicas consumidoras de aminoácidos en condiciones anóxicas           | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xfa}$   | Tasa de desaparición de las acetogénicas consumidoras de LCFA en condiciones anóxicas                  | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xc4}$   | Tasa de desaparición de las acetogénicas consumidoras de valérico y butírico en condiciones anóxicas   | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xpro}$  | Tasa de desaparición de las acetogénicas consumidoras de propiónico en condiciones anóxicas            | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xac}$   | Tasa de desaparición de las metanogénicas acetoclásticas en condiciones anóxicas                       | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xh2}$   | Tasa de desaparición de las metanogénicas hidrogenófilas en condiciones anóxicas                       | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anox,xan}$   | Tasa de desaparición de la bacterias Anammox en condiciones anóxicas                                   | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xh}$   | Tasa de desaparición de las bacterias Heterótrofas en condiciones anaerobias                           | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xn1}$  | Tasa de desaparición de las bacterias Nitrosomonas en condiciones anaerobias                           | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xn2}$  | Tasa de desaparición de las bacterias Nitrobacter en condiciones anaerobias                            | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xpao}$ | Tasa de desaparición de las bacterias PAO en condiciones anaerobias                                    | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xsu}$  | Tasa de desaparición de las acidogénicas consumidoras de azúcares en condiciones anaerobias            | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xaa}$  | Tasa de desaparición de las acidogénicas consumidoras de aminoácidos en condiciones anaerobias         | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xfa}$  | Tasa de desaparición de las acetogénicas consumidoras de LCFA en condiciones anaerobias                | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xc4}$  | Tasa de desaparición de las acetogénicas consumidoras de valérico y butírico en condiciones anaerobias | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xpro}$ | Tasa de desaparición de las acetogénicas consumidoras de propiónico en condiciones anaerobias          | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xac}$  | Tasa de desaparición de las metanogénicas acetoclásticas en condiciones anaerobias                     | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xh2}$  | Tasa de desaparición de las metanogénicas hidrogenófilas en condiciones anaerobias                     | $d^{-1}$ |
| $k_{dec\_anaer,xan}$  | Tasa de desaparición de la bacterias Anammox en condiciones anaerobias                                 | $d^{-1}$ |

Tabla 2.28. Constantes de saturación en el consumo de sustrato

| Símbolo      | Descripción                                                                                       | Unidad                          |
|--------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------|
| $K_{su\_h}$  | Constante de saturación en el crecimiento de Heterótrofas a partir de azúcares                    | gCOD/m <sup>3</sup>             |
| $K_{aa\_h}$  | Constante de saturación en el crecimiento de Heterótrofas a partir de aminoácidos                 | gCOD/m <sup>3</sup>             |
| $K_{fa\_h}$  | Constante de saturación en el crecimiento de Heterótrofas a partir de LCFA                        | gCOD/m <sup>3</sup>             |
| $K_{VA\_h}$  | Constante de saturación en el crecimiento de Heterótrofas a partir de valérico                    | gCOD/m <sup>3</sup>             |
| $K_{BU\_h}$  | Constante de saturación en el crecimiento de Heterótrofas a partir de butírico                    | gCOD/m <sup>3</sup>             |
| $K_{PRO\_h}$ | Constante de saturación en el crecimiento de Heterótrofas a partir de propiónico                  | gCOD/m <sup>3</sup>             |
| $K_{AC\_h}$  | Constante de saturación en el crecimiento de Heterótrofas a partir de acético                     | gCOD/m <sup>3</sup>             |
| $K_{O\_h}$   | Constante de saturación en el crecimiento de Heterótrofas a partir de O <sub>2</sub>              | gCOD/m <sup>3</sup>             |
| $K_{NH\_N1}$ | Constante de saturación en el crecimiento de Nitrosomonas a partir de N-NH <sub>x</sub>           | gN/m <sup>3</sup>               |
| $K_{NO\_N2}$ | Constante de saturación en el crecimiento de Nitrobacter a partir de NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> | gN/m <sup>3</sup>               |
| $K_{O\_N1}$  | Constante de saturación en el crecimiento de Nitrosomonas a partir de O <sub>2</sub>              | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> |
| $K_{O\_N2}$  | Constante de saturación en el crecimiento de Nitrobacter a partir de O <sub>2</sub>               | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> |
| $K_{PP}$     | Constante de saturación en el almacenamiento de PHA                                               | gP/m <sup>3</sup>               |
| $K_{PS}$     | Constante de saturación para P en el almacenamiento de PP                                         | gP/m <sup>3</sup>               |
| $K_{PHA}$    | Constante de saturación para PHA en el almacenamiento de PP                                       | gCOD/m <sup>3</sup>             |
| $K_{IPP}$    | Constante de inhibición para PP en el almacenamiento de PP                                        | gP/m <sup>3</sup>               |
| $K_{MAX}$    | Ratio máximo $X_{pp}/X_{pao}$                                                                     | gP/m <sup>3</sup>               |

Tabla 2.29. Constantes cinéticas de equilibrios químicos

| Símbolo      | Descripción                                                                                                         | Unidad          |
|--------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|
| $k_{AB,H2O}$ | Constante de velocidad en el equilibrio H <sup>+</sup> - OH <sup>-</sup>                                            | d <sup>-1</sup> |
| $k_{AB,IC}$  | Constante de velocidad en el equilibrio CO <sub>2</sub> - HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>                             | d <sup>-1</sup> |
| $k_{AB,IN}$  | Constante de velocidad en el equilibrio NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> - NH <sub>3</sub>                              | d <sup>-1</sup> |
| $k_{AB,IP}$  | Constante de velocidad en el equilibrio H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> - HPO <sub>4</sub> <sup>=</sup> | d <sup>-1</sup> |
| $k_{AB,VA}$  | Constante de velocidad en el equilibrio HVA - VA <sup>-</sup>                                                       | d <sup>-1</sup> |
| $k_{AB,BU}$  | Constante de velocidad en el equilibrio HBU - BU <sup>-</sup>                                                       | d <sup>-1</sup> |
| $k_{AB,PRO}$ | Constante de velocidad en el equilibrio HPRO - PRO <sup>-</sup>                                                     | d <sup>-1</sup> |
| $k_{AB,AC}$  | Constante de velocidad en el equilibrio HAC - AC <sup>-</sup>                                                       | d <sup>-1</sup> |

Tabla 2.30. Constantes de activación e inhibición

| <b>Símbolo</b> | <b>Descripción</b>                                                                         | <b>Unidad</b> |
|----------------|--------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| $K_{A_{o2}}$   | Constante de activación/inhibición por la presencia de $O_2$                               | $gO_2/m^3$    |
| $K_{A_{no3}}$  | Constante de activación/inhibición por la presencia de $NO_3^-$                            | $gN/m^3$      |
| $K_{A_{no2}}$  | Constante de activación/inhibición por la presencia de $NO_2^-$                            | $gN/m^3$      |
| $K_{A_{nox}}$  | Constante de activación/inhibición por la presencia de $NO_2^-$ y $NO_3^-$                 | $gN/m^3$      |
| $K_{A_{IC}}$   | Constante de activación/inhibición por la presencia carbono inorgánico                     | $gN/m^3$      |
| $K_{A_{IN}}$   | Constante de activación/inhibición por la presencia de nitrógeno inorgánico                | $gN/m^3$      |
| $K_{I,h,aa}$   | Constante de inhibición por pH en la acidogénesis y acetogénesis                           | $gH/m^3$      |
| $K_{I,h,ac}$   | Constante de inhibición por pH en la metanogénesis acetoclástica                           | $gH/m^3$      |
| $K_{I,h,h2}$   | Constante de inhibición por pH en la metanogénesis hidrogenófila                           | $gH/m^3$      |
| $K_{I,h,N1}$   | Constante de inhibición por pH en el crecimiento de las Nitrosomonas                       | $gH/m^3$      |
| $K_{I,h,N2}$   | Constante de inhibición por pH en el crecimiento de las Nitrobacter                        | $gH/m^3$      |
| $K_{I,h,PAO}$  | Constante de inhibición por pH en el crecimiento de las bacterias PAO                      | $gH/m^3$      |
| $K_{I,h2,fa}$  | Constante de inhibición por hidrógeno en la acetogénesis de los LCFA                       | $gDQO/m^3$    |
| $K_{I,h2,pro}$ | Constante de inhibición por hidrógeno en la acetogénesis de los ácidos valérico y butírico | $gDQO/m^3$    |
| $K_{I,h2,fa}$  | Constante de inhibición por hidrógeno en la acetogénesis del ácido propiónico              | $gDQO/m^3$    |
| $K_{I,nh3}$    | Constante de inhibición por $NH_3$                                                         | $gN/m^3$      |

Tabla 2.31. Constantes de desintegración e hidrólisis

| <b>Símbolo</b>      | <b>Descripción</b>                                                                     | <b>Unidad</b> |
|---------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| $k_{d_{Aer,xc1}}$   | Tasa de desintegración del componentes complejo $X_{c1}$ en condiciones aerobias       | $d^{-1}$      |
| $k_{d_{Anox,xc1}}$  | Tasa de desintegración del componentes complejo $X_{c1}$ en condiciones anóxicas       | $d^{-1}$      |
| $k_{d_{Anaer,xc1}}$ | Tasa de desintegración del componentes complejo $X_{c1}$ en condiciones anaerobias     | $d^{-1}$      |
| $k_{d_{Aer,xc2}}$   | Tasa de desintegración del componentes complejo $X_{c2}$ en condiciones aerobias       | $d^{-1}$      |
| $k_{d_{Anox,xc2}}$  | Tasa de desintegración del componentes complejo $X_{c2}$ en condiciones anóxicas       | $d^{-1}$      |
| $k_{d_{Anaer,xc2}}$ | Tasa de desintegración del componentes complejo $X_{c2}$ en condiciones anaerobias     | $d^{-1}$      |
| $k_{h_{Aer}}$       | Tasa de hidrólisis de los carbohidratos, proteínas y lípidos en condiciones aerobias   | $d^{-1}$      |
| $k_{h_{Anox}}$      | Tasa de hidrólisis de los carbohidratos, proteínas y lípidos en condiciones anóxicas   | $d^{-1}$      |
| $k_{h_{Anaer}}$     | Tasa de hidrólisis de los carbohidratos, proteínas y lípidos en condiciones anaerobias | $d^{-1}$      |

## 2.3.3.4.3 Parámetros físico-químicos

Tabla 2.32. Constantes de equilibrio químicas

| <b>Símbolo</b> | <b>Descripción</b>                                | <b>Unidad</b> |
|----------------|---------------------------------------------------|---------------|
| $K_{a,H2O}$    | Constante de equilibrio $H^+$ - $OH^-$            | $gH^2/m^6$    |
| $K_{a,IC}$     | Constante de equilibrio $CO_2$ - $HCO_3^-$        | $gH/m^3$      |
| $K_{a,IN}$     | Constante de equilibrio $NH_4^+$ - $NH_3$         | $gH/m^3$      |
| $K_{a,IP}$     | Constante de equilibrio $H_2PO_4^-$ - $HPO_4^{=}$ | $gH/m^3$      |
| $K_{a,VA}$     | Constante de equilibrio HVA - $VA^-$              | $gH/m^3$      |
| $K_{a,BU}$     | Constante de equilibrio HBU - $BU^-$              | $gH/m^3$      |
| $K_{a,PRO}$    | Constante de equilibrio HPRO - $PRO^-$            | $gH/m^3$      |
| $K_{a,AC}$     | Constante de equilibrio HAC - $AC^-$              | $gH/m^3$      |

Tabla 2.33. Constantes de velocidad de transferencia líquido-gas

| <b>Símbolo</b> | <b>Descripción</b>                                            | <b>Unidad</b> |
|----------------|---------------------------------------------------------------|---------------|
| $k_L a_{O_2}$  | Constante de velocidad de transferencia líquido-gas de $O_2$  | $d^{-1}$      |
| $k_L a_{CO_2}$ | Constante de velocidad de transferencia líquido-gas de $CO_2$ | $d^{-1}$      |
| $k_L a_{NH_3}$ | Constante de velocidad de transferencia líquido-gas de $NH_3$ | $d^{-1}$      |
| $k_L a_{CH_4}$ | Constante de velocidad de transferencia líquido-gas de $CH_4$ | $d^{-1}$      |
| $k_L a_{N_2}$  | Constante de velocidad de transferencia líquido-gas de $N_2$  | $d^{-1}$      |
| $k_L a_{H_2}$  | Constante de velocidad de transferencia líquido-gas de $H_2$  | $d^{-1}$      |
| $k_M a_{H_2O}$ | Constante de velocidad de evaporación de $H_2O$               | $d^{-1}$      |

Tabla 2.34. Constantes de Henry

| <b>Símbolo</b> | <b>Descripción</b>                                   | <b>Unidad</b>                          |
|----------------|------------------------------------------------------|----------------------------------------|
| $K_{H,o2}$     | Constante de Henry de disolución del O <sub>2</sub>  | gO <sub>2</sub> /(m <sup>3</sup> ·atm) |
| $K_{H,co2}$    | Constante de Henry de disolución del CO <sub>2</sub> | gC/(m <sup>3</sup> ·atm)               |
| $K_{H,nh3}$    | Constante de Henry de disolución del NH <sub>3</sub> | gN/(m <sup>3</sup> ·atm)               |
| $K_{H,ch4}$    | Constante de Henry de disolución del CH <sub>4</sub> | gDQO/(m <sup>3</sup> ·atm)             |
| $K_{H,n2}$     | Constante de Henry de disolución del N <sub>2</sub>  | gN/(m <sup>3</sup> ·atm)               |
| $K_{H,h2}$     | Constante de Henry de disolución del H <sub>2</sub>  | gDQO/(m <sup>3</sup> ·atm)             |

Tabla 2.35. Coeficientes de difusividad

| <b>Símbolo</b> | <b>Descripción</b>                                             | <b>Unidad</b>     |
|----------------|----------------------------------------------------------------|-------------------|
| $D_{L o2}$     | Coeficiente de difusividad del O <sub>2</sub> en fase líquida  | m <sup>2</sup> /d |
| $D_{L co2}$    | Coeficiente de difusividad del CO <sub>2</sub> en fase líquida | m <sup>2</sup> /d |
| $D_{L nh3}$    | Coeficiente de difusividad del NH <sub>3</sub> en fase líquida | m <sup>2</sup> /d |
| $D_{L ch4}$    | Coeficiente de difusividad del CH <sub>4</sub> en fase líquida | m <sup>2</sup> /d |
| $D_{L n2}$     | Coeficiente de difusividad del N <sub>2</sub> en fase líquida  | m <sup>2</sup> /d |
| $D_{L h2}$     | Coeficiente de difusividad del H <sub>2</sub> en fase líquida  | m <sup>2</sup> /d |

## **2.4 PROCEDIMIENTO SISTEMÁTICO PARA LA CONSTRUCCIÓN DE MODELOS INTEGRALES DE EDAR**

Basada en la LT previamente presentada, la construcción de cualquier Modelo Integral de EDAR (PWM) se lleva a cabo mediante un procedimiento sistemático basado en los tres pasos siguientes:

- 1 Construcción del Modelo de Transformaciones de Planta (PTM) mediante una selección adecuada de las transformaciones relevantes en la EDAR estudiada.
- 2 Construcción del conjunto de Modelos de Proceso Unitario (UPM) que describen el comportamiento de cada elemento incluido en la EDAR.
- 3 Construcción del Modelo Integral de EDAR (PWM) mediante la conexión directa de los UPM obtenidos.

### **2.4.1 Construcción del Modelo de Transformaciones de Planta (PTM)**

El primer paso de la metodología propuesta consiste en la construcción del modelo de transformaciones de planta (PTM). El PTM, específico para la EDAR estudiada, debe construirse seleccionando de la LT general todas aquellas transformaciones químicas, físico-químicas y bioquímicas que tienen lugar de forma relevante en esta EDAR.

Sin embargo, la selección de las transformaciones apropiadas en cada caso de estudio no es una tarea inmediata debido a las interrelaciones que existen entre ellas, y requiere un conocimiento bioquímico avanzado. Por lo tanto, con el objetivo de simplificar y estandarizar la tarea de la construcción del PTM, se ha diseñado un procedimiento general y sistemático basado en cuatro pasos consecutivos que permite su construcción de forma rigurosa y sencilla:

- 1 Selección de los *Procesos Biológicos* en la EDAR
- 2 Selección de las poblaciones activas de bacterias requeridas para describir los procesos biológicos seleccionados
- 3 Selección de las transformaciones bioquímicas asociadas a las poblaciones activas bacterias



- 4 Incorporación de las transformaciones de equilibrios ácido-base y líquido-gas necesarias en cada caso

#### **2.4.1.1 Selección de los Procesos Biológicos**

En este primer paso, el usuario debe decidir qué procesos biológicos deberían incluirse en el Modelo Global de Planta, de acuerdo con la configuración de la EDAR estudiada y los objetivos del modelo a construir. A continuación se enumeran los procesos biológicos más comunes en una EDAR:

- Proceso de fangos activados para la eliminación de Carbono **AS-C**
- Proceso de eliminación de Carbono y Nitrógeno **AS-CN** (ejemplo: modelo ASM1)
- Proceso de eliminación de Carbono, Nitrógeno y Fósforo **AS-CNP** (ejemplo: modelo ASM2)
- Fermentación Ácida
- Digestión Anaerobia (ejemplo: modelo ADM1)
- Proceso *Sharon* para el tratamiento de sobrenadantes recirculados a cabeza de planta
- Proceso *Anammox* para el tratamiento de sobrenadantes recirculados a cabeza de planta

La lista de procesos, al igual que la de transformaciones, puede ampliarse cuando sea necesario.

#### **2.4.1.2 Selección de las poblaciones activas de bacterias requeridas para describir los Procesos Biológicos**

Este segundo paso, decisivo para la posterior selección de las transformaciones que deberán incluirse en el PTM, consiste en la correcta identificación de las poblaciones activas de bacterias cuya actividad deba considerarse en el modelo integrado de EDAR. Tal y como se muestra en la Tabla 2.36, cada uno de los procesos biológicos enumerados en el apartado 2.4.1.1 implica la actividad de una o varias poblaciones de bacterias. Por lo tanto, a partir de los procesos biológicos seleccionados previamente, pueden identificarse y seleccionarse las poblaciones activas de bacterias que deben ser incluidas en el modelo de EDAR, de acuerdo a la Tabla 2.36.

Tabla 2.36. Relación entre Procesos Biológicos y poblaciones activas de microorganismos

| Procesos Biológicos |        | Poblaciones de Microorganismos                     |                                   |                                                   |               |           |          |          |          |          |           |          |          |   |   |
|---------------------|--------|----------------------------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------------------------|---------------|-----------|----------|----------|----------|----------|-----------|----------|----------|---|---|
|                     |        | $X_{an}$                                           | $X_{bh}$                          | $X_{n1}$                                          | $X_{n2}$      | $X_{pao}$ | $X_{su}$ | $X_{aa}$ | $X_{fa}$ | $X_{c4}$ | $X_{pro}$ | $X_{ac}$ | $X_{h2}$ |   |   |
| Anammox             | AS-CNP | Oxidación anaerobia N-NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> | ×                                 |                                                   |               |           |          |          |          |          |           |          |          |   |   |
|                     |        | AS-CN Sharon                                       | Oxidación de Carbono              |                                                   | ×             |           |          |          |          |          |           |          |          |   |   |
|                     |        |                                                    | AS-C                              | Nitrificación                                     | Nitrificación |           |          | ×        |          |          |           |          |          |   |   |
|                     |        | Nitratación                                        |                                   |                                                   |               |           |          | ×        |          |          |           |          |          |   |   |
|                     |        | Desnitrificación                                   |                                   | Desnitrificación con NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> |               | ×         |          |          |          |          |           |          |          |   |   |
|                     |        |                                                    |                                   | Desnitrificación con NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> |               | ×         |          |          |          |          |           |          |          |   |   |
|                     |        |                                                    | Bio-P almacenamiento y liberación |                                                   |               |           |          | ×        |          |          |           |          |          |   |   |
|                     |        | Digestión Anaerobia                                | Ferm                              | Acidogénesis                                      |               |           |          |          |          | ×        | ×         |          |          |   |   |
|                     |        |                                                    |                                   | Acetogénesis                                      |               |           |          |          |          |          | ×         | ×        | ×        |   |   |
|                     |        |                                                    |                                   | Metanogénesis                                     |               |           |          |          |          |          |           |          |          | × | × |

### 2.4.1.3 Selección de las transformaciones bioquímicas asociadas las poblaciones activas de bacterias

La selección de las transformaciones bioquímicas adecuadas está basada en las poblaciones de bacterias seleccionadas en el paso anterior. De esta manera, la presencia de una determinada población activa de bacterias implica la consideración del conjunto de transformaciones bioquímicas asociadas a su metabolismo bajo cualquier condición ambiental. Por tanto, una vez seleccionados el conjunto de poblaciones de bacterias de acuerdo con la Tabla 2.36, las transformaciones bioquímicas que describen su crecimiento, lisis e hidrólisis enzimática bajo todas las condiciones ambientales (aerobias, anóxicas y anaerobias) deben identificarse en la LT e incorporarse en el PTM.

A continuación, en las siguientes Tablas se muestra, para cada una de las poblaciones de bacterias consideradas en la LT (Apartado 2.3), cuáles son las transformaciones bioquímicas que describen su metabolismo.

Tabla 2.37. Relación entre la actividad de las poblaciones de bacterias y las transformaciones consideradas en la LT

| Actividad biológica |                                               | Condiciones ambientales |              |            |
|---------------------|-----------------------------------------------|-------------------------|--------------|------------|
|                     |                                               | Aerobias                | Anóxicas     | Anaerobias |
| $X_h$               | Crecimiento $X_h$                             | 1-7                     | 16-29        | ---        |
|                     | Desaparición $X_h$                            | 41                      | 55           | 69         |
|                     | Hidrólisis enzimática $X_h$                   | 89-91                   | 92-94        | ---        |
| $X_{n1}$            | Crecimiento $X_{n1}$                          | 14                      | ---          | ---        |
|                     | Desaparición $X_{n1}$                         | 42                      | 56           | 70         |
| $X_{n2}$            | Crecimiento $X_{n2}$                          | 15                      | ---          | ---        |
|                     | Desaparición $X_{n2}$                         | 43                      | 57           | 71         |
| $X_{pao}$           | Almac./Crecimiento $X_{pao}$                  | 8-13                    | 8-11, 30, 31 | 8-11       |
|                     | Desaparición $X_{pao}$ , $X_{pp}$ , $X_{pha}$ | 44, 53, 54              | 58, 67, 68   | 72, 81, 82 |
|                     | Hidrólisis enzimática $X_{pao}$               | 89-91                   | 92-94        | ---        |
| $X_{an}$            | Crecimiento $X_{an}$                          | ---                     | 32           | ---        |
|                     | Desaparición $X_{an}$                         | 52                      | 66           | 80         |
|                     | Hidrólisis enzimática $X_{an}$                | ---                     | ---          | ---        |
| $X_{su}$            | Crecimiento $X_{su}$                          | ---                     | ---          | 33         |
|                     | Desaparición $X_{su}$                         | 45                      | 59           | 73         |
|                     | Hidrólisis enzimática $X_{su}$                | ---                     | ---          | 95-97      |
| $X_{aa}$            | Crecimiento $X_{aa}$                          | ---                     | ---          | 34         |
|                     | Desaparición $X_{aa}$                         | 46                      | 60           | 74         |
|                     | Hidrólisis enzimática $X_{aa}$                | ---                     | ---          | 95-97      |
| $X_{fa}$            | Crecimiento $X_{fa}$                          | ---                     | ---          | 35         |
|                     | Desaparición $X_{fa}$                         | 47                      | 61           | 75         |
|                     | Hidrólisis enzimática $X_{fa}$                | ---                     | ---          | 95-97      |
| $X_{c4}$            | Crecimiento $X_{c4}$                          | ---                     | ---          | 36         |
|                     | Desaparición $X_{c4}$                         | 48                      | 62           | 76         |
|                     | Hidrólisis enzimática $X_{c4}$                | ---                     | ---          | 95-97      |
| $X_{pro}$           | Crecimiento $X_{pro}$                         | ---                     | ---          | 37         |
|                     | Desaparición $X_{pro}$                        | 49                      | 63           | 77         |
|                     | Hidrólisis enzimática $X_{pro}$               | ---                     | ---          | 95-97      |
| $X_{ac}$            | Crecimiento $X_{ac}$                          | ---                     | ---          | 37         |
|                     | Desaparición $X_{ac}$                         | 50                      | 64           | 78         |
|                     | Hidrólisis enzimática $X_{ac}$                | ---                     | ---          | 95-97      |
| $X_{h2}$            | Crecimiento $X_{h2}$                          | ---                     | ---          | 37         |
|                     | Desaparición $X_{h2}$                         | 51                      | 65           | 79         |
|                     | Hidrólisis enzimática $X_{h2}$                | ---                     | ---          | 95-97      |

Una vez seleccionadas todas las transformaciones que describen la actividad biológica de las poblaciones activas de bacterias, todos los componentes involucrados en estas transformaciones pueden identificarse e incluirse en el PTM.

### 2.4.1.4 Incorporación de las transformaciones de equilibrios ácido-base y líquido-gas

El último paso en la construcción del PTM consiste en la incorporación de las transformaciones de equilibrio ácido-base y transferencias líquido-gas requeridas en cada caso y dependerá de las transformaciones y componentes seleccionados en el paso anterior. Así, cuando los componentes seleccionados en el apartado 2.4.1.3 son susceptibles de establecer equilibrios ácido-base con sus respectivas parejas conjugadas, o equilibrios líquido-gas con componentes en fase gaseosa, estas transformaciones también deben incorporarse al PTM. Igualmente, los correspondientes componentes ácido/base conjugados y los componentes en fase gaseosa necesarios para describir estas transformaciones deben incluirse en el PTM y, junto con los componentes seleccionados en el apartado 2.4.1.3, constituirán el vector de componentes de planta **PCV** (*Plant Components Vector*).

En las siguientes figuras se muestran las transformaciones y componentes involucrados en la actividad de cada una de las poblaciones de bacterias consideradas en la LT.

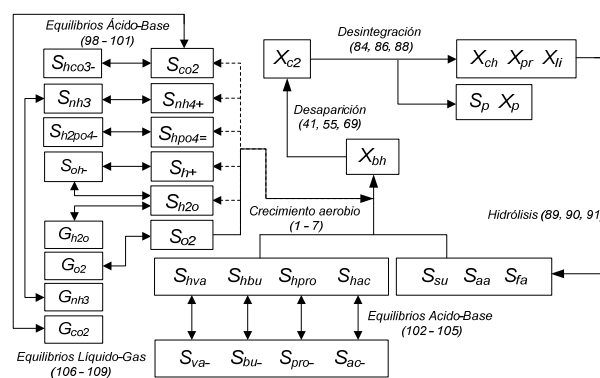


Figura 2.4. Actividad biológica de las bacterias  $X_{bh}$  en condiciones aerobias

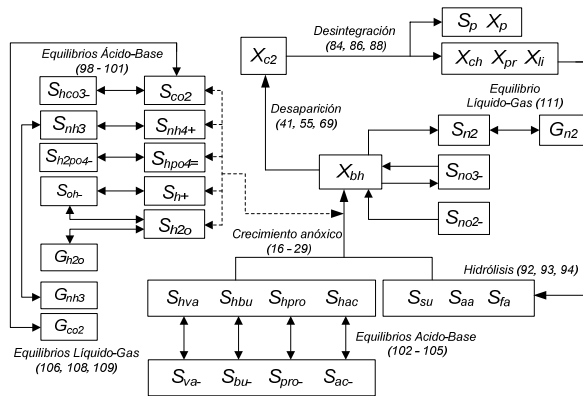


Figura 2.5. Actividad biológica de las bacterias  $X_{bh}$  en condiciones anóxicas

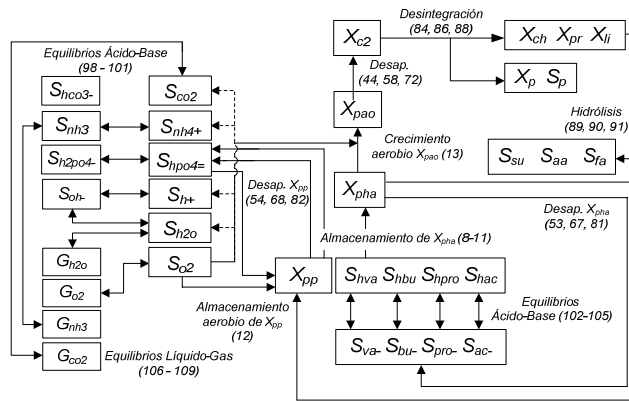


Figura 2.6. Actividad biológica de las bacterias  $X_{pao}$  en condiciones aerobias

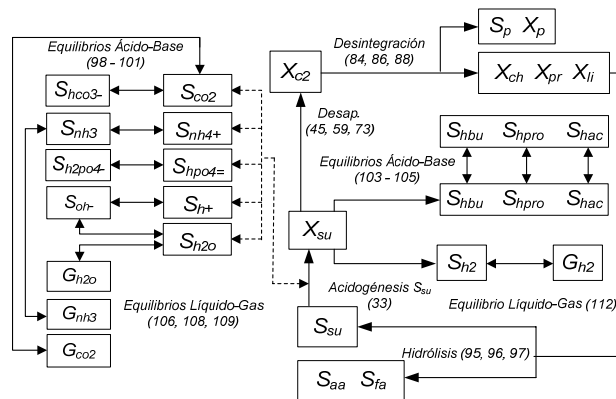


Figura 2.7. Actividad biológica de las bacterias  $X_{su}$

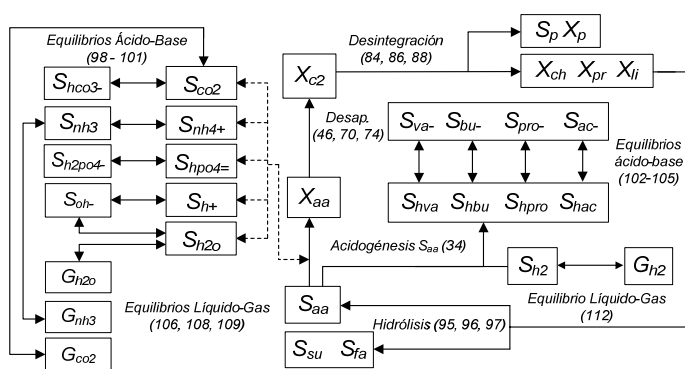


Figura 2.8. Actividad biológica de las bacterias  $X_{aa}$

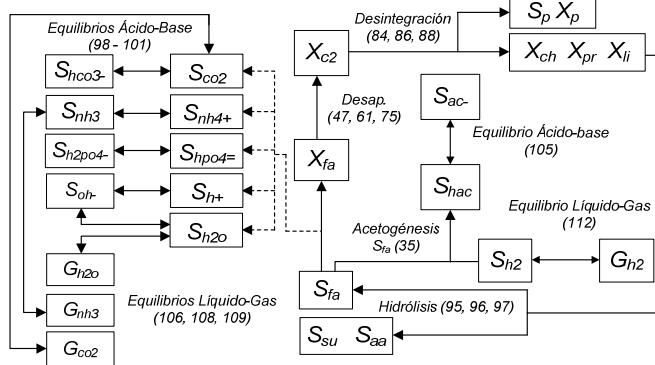


Figura 2.9. Actividad biológica de las bacterias  $X_{fa}$

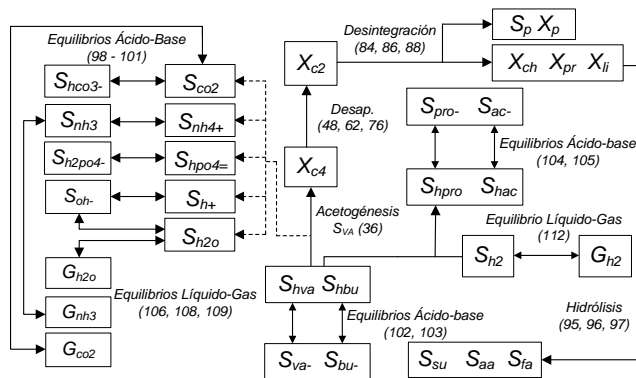


Figura 2.10. Actividad biológica de las bacterias  $X_{c4}$

Tal y como se observa de forma esquemática en la Figura 2.11, una vez finalizados los cuatro pasos se obtiene el Modelo de Transformaciones de Planta (PTM) y el Vector de Componentes de Planta (PCV).

Si el procedimiento se ha llevado a cabo de forma correcta, las transformaciones consideradas en el PTM deberán reproducir la actividad biológica que se da en fase líquida de la EDAR, incluyendo la capacidad amortiguadora que presenta esta fase, y la transferencia líquido-gas entre las fases líquida y gaseosa.

Además, el PCV obtenido será el vector de componentes común utilizado en la descripción del proceso en cualquier punto de la EDAR, y además, podrá utilizarse como interfaz común entre los distintos Modelos de Procesos Unitarios.

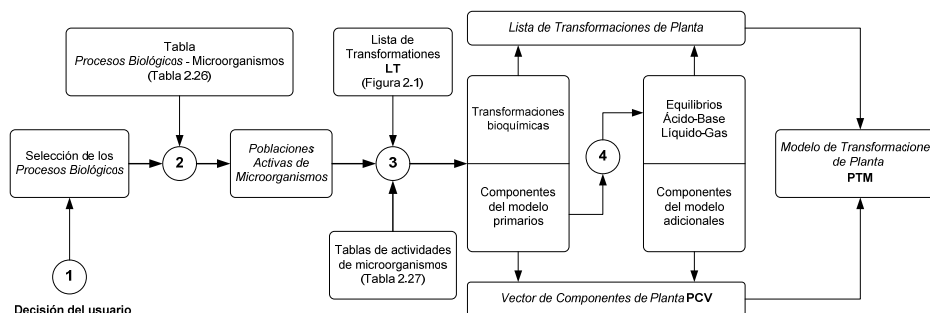


Figura 2.11. Esquema del procedimiento de construcción de PTM

Por último, y tal y como se observa en la Figura 2.11, es importante recalcar que la selección de los procesos biológicos llevada a cabo en el primer paso del procedimiento (Apartado 2.4.1.1) es la única decisión subjetiva que debe tomar el usuario para la construcción del PTM, ya que, tanto la selección de las poblaciones activas de bacterias como la selección de las transformaciones y componentes requeridos en cada caso, son pasos que se llevan a cabo de manera sistemática una vez seleccionados correctamente los procesos biológicos de EDAR.

### 2.4.2 Construcción de los Modelos de Proceso Unitario (UPM)

Una vez construido el PTM, el segundo paso de la metodología propuesta consiste en la construcción del conjunto de *Modelos de Proceso Unitario* (UPM) que describen de forma específica el comportamiento dinámico de cada uno de los elementos incluidos en la EDAR estudiada. El UPM de cada elemento considerado debe incluir la descripción matemática del *transporte de masa* y el conjunto de *transformaciones internas* incluidas en el PTM. Además, todos los UPM considerados en la EDAR estudiada debe utilizar como interfaz común el vector de componentes PCV obtenido previamente en la construcción del PTM.

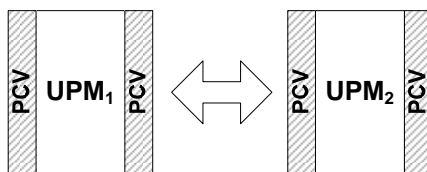


Figura 2.12. Interfaz entre dos Modelos de Proceso Unitario mediante el PCV

La descripción del transporte de masa en el UPM es, lógicamente, muy distinta en cada uno de los diferentes elementos de la EDAR dependiendo de cuál sea su función (reactores de mezcla completa, decantadores primarios o secundarios, filtros u otros sistemas de separación, etc). Por ejemplo, en casos en los que no se de una actividad biológica relevante, la descripción del transporte de masa podrá basarse en variables compuestas obtenidas mediante la combinación de varios componentes incluidos en el PCV (un ejemplo típico es la utilización de la concentración de sólidos suspendidos totales en el modelado de los procesos de clarificación y espesamiento). En otros casos, en los que, por ejemplo intervengan compuestos gaseosos, en el transporte de masa deberán distinguirse dos fases diferentes para los componentes líquidos y gaseosos respectivamente.

Por otro lado, la descripción de las transformaciones internas para todos los UPM debe estar basada, como regla general, en el PTM construido previamente (Apartado 2.4.1). La utilización del mismo conjunto de transformaciones y vector de componentes (PCV) en todos los elementos considerados en la EDAR facilita la descripción coherente del proceso en cualquier punto de la EDAR y permite una conexión directa entre los diferentes UPM garantizando la continuidad de masa y carga, sin necesidad de conversores específicos adicionales.



En algunos casos, sin embargo, con el objetivo de reducir la complejidad del UPM de un elemento específico e incrementar la eficiencia computacional, pueden considerarse algunas simplificaciones en las transformaciones o componentes incluidos en el PTM. Algunas de estas simplificaciones y los elementos donde podrían aplicarse se enumeran a continuación:

- *UPM de elementos en los cuales no se da una actividad biológica de forma relevante*

En los UPM de elementos en los que no se da una actividad bioquímica relevante, las transformaciones incluidas en el PTM pueden obviarse. En este caso, el UPM quedará constituido únicamente por el modelo de transporte de masa. Ejemplos típicos de este tipo de procesos unitarios son los decantadores primarios y secundarios, espesadores, etc.

- *UPM de elementos que siempre se encuentran bajo condiciones ambientales específicas*

En los UPM de elementos que siempre se encuentran bajo las mismas condiciones ambientales, todas aquellas transformaciones incluidas en el PTM que no se den en estas condiciones ambientales específicas pueden obviarse. Por ejemplo, las transformaciones de crecimiento de las poblaciones de bacterias anaerobias pueden ser eliminadas en los UPM construidos para reactores de fangos activados que se encuentren siempre en condiciones aerobias y anóxicas.

- *UPM basados en variables y transformaciones compuestas*

Por simplicidad o eficiencia computacional, algunos UPM pueden construirse basados en *transformaciones o variables compuestas*. Ejemplos típicos pueden ser la utilización de las variables compuestas en la descripción del sustrato lentamente ( $X_S$ ) o fácilmente ( $S_S$ ) biodegradable o transformaciones compuestas como pueden ser la nitrificación o desnitrificación en un solo paso. La conveniencia de este tipo de simplificaciones, sin embargo, debe ser analizada en profundidad para cada caso ya que requieren incorporar un interfaz interno entre los componentes específicos del UPM y el interfaz común PCV. La construcción de estos interfaces internos no es, en general, una tarea sencilla (Vanrolleghem *et al.*, 2005).

Finalmente, debe indicarse que, aunque el usuario de modelo pueda considerar este tipo de simplificaciones para la descripción de las transformaciones internas, el UPM construido debe garantizar la continuidad de masa y carga en las transformaciones y debe utilizar el PCV como interfaz común con el resto de

los UPM considerados en el modelo global de la EDAR. Por este motivo, cuando el tiempo de computación no supone una limitación importante se recomienda, por una mayor coherencia y simplicidad, la utilización directa del PTM para la descripción de las transformaciones internas.

## **2.5 CONSTRUCCIÓN DE LOS MODELOS INTEGRALES DE EDAR (PWM)**

Una vez contruidos los UPM para todos los elementos incluidos en la EDAR, el Modelo Integrado de EDAR **PWM** se construye, de forma sencilla y sin necesidad de interfaces específicos, mediante la conexión directa de los flujos másicos entre los diferentes UPM. El modelo integral de EDAR obtenido permite garantizar la continuidad de la masa y carga tanto en cada UPM como en la conexión entre ellos.

## **2.6 ANÁLISIS ESTEQUIOMÉTRICO BASADO EN EL VECTOR DE COMPONENTES DE PLANTA (PCV)**

La metodología PWM propuesta en esta tesis, además de permitir el modelado de EDAR que integral líneas de aguas y fangos, presenta ciertas ventajas frente a otras propuestas de modelado integral.

En primer lugar, los Modelos de Proceso Unitario contruidos de acuerdo con la metodología propuesta permiten un seguimiento del flujo másico elemental y de carga a lo largo de todo el modelo integral. Este seguimiento puede realizarse de forma sencilla y rigurosa debido a los requisitos de la metodología:

- Descripción de los componentes de forma no redundante y en base a sus fracciones másicas y densidad de carga
- Garantía de la continuidad de masa y carga en las transformaciones
- Utilización del Vector de Componentes de Planta como interfaz entre los diferentes Modelos de Proceso Unitario

Además, la descripción de los componentes en base a sus fracciones másicas, el cálculo posterior de los factores de conversión  $\beta_{E,i}$  y las relaciones  $\gamma_{DOT,i}$ ,

permiten establecer una serie de relaciones entre el valor numérico del vector de componentes PCV en cualquier punto de la EDAR y variables adicionales que facilitan la visualización de la operación de la EDAR (por ejemplo, SST, DQO, TKN, DQO/SSV, etc.). Es importante indicar, que la utilización del PCV como vector de componentes común en el modelo integral obtenido, permite que estas relaciones establecidas sean únicas e independientes del proceso estudiado. Además, estas relaciones pueden utilizarse de forma inversa de forma que, a partir de un conjunto de medidas analíticas obtenidas de forma experimental, puede estimarse el vector de componentes en cualquier punto de la EDAR. Un caso particular de estimación del vector de componentes a partir de un conjunto de medidas analíticas es la caracterización del influente detallada en el Capítulo 4.

## 2.7 CONCLUSIONES

La metodología PWM propuesta en este Capítulo permite la construcción de modelos integrales de EDAR con líneas de aguas y fangos, totalmente adaptados a las especificaciones de la EDAR estudiada, sin necesidad de interfaces específicas entre los diferentes modelos de proceso unitario y garantizando la continuidad de la masa y carga a lo largo de toda la EDAR.

La propuesta *basada en transformaciones* utilizada en esta metodología, frente a la propuesta *basada en procesos* comúnmente empleada, facilita el procedimiento sistemático para construir modelos de EDAR a medida y códigos computacionales de simulación de forma modular y eficiente.

Esta tesis plantea por tanto, la re-escritura de los modelos de proceso unitario en base a una Lista de Transformaciones aceptada por la comunidad científica, y siguiendo el procedimiento propuesto en este capítulo. De esta forma se obtendría un procedimiento riguroso y sistemático para el modelado integral de EDAR.

Finalmente, el hecho de que la *Lista de Transformaciones* permita la incorporación de nuevas transformaciones, convierte a esta metodología en una herramienta de simulación flexible y adaptable a cualquier plataforma de simulación que facilita el intercambio de información entre diferentes grupos de simulación.

## CAPÍTULO 3

# ***APLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA PWM AL CASO DE ESTUDIO BSM2***

---

Una síntesis de este capítulo se presenta en:

*Grau P., Vanrolleghem P. and Ayesa E. (2007) BSM2 Plant Wide Model construction and comparative analysis with other methodologies for integrated modelling. (Aceptado como presentación oral en el Congreso Internacional de Watermatex, Mayo 7-9, 2007, Washington DC-USA y en revisión para la revista Water Science and Technology)*

Un artículo relacionado con este capítulo se ha presentado a:

*Zaher U., Grau P., Benedetti L., Ayesa E. and Vanrolleghem P.A. (2007). Transformers for interfacing anaerobic digestion models to pre and post-treatment processes. Environmental Modelling and Software 22, 40-58.*

### 3.1 INTRODUCCIÓN

El *Benchmark Simulation Model N°2* BSM2 (Jeppsson *et al.*, 2006) ha sido propuesto recientemente como un ejemplo de modelo integral de EDAR que incluye líneas de aguas residuales y fangos, con el objetivo de evaluar distintas estrategias de operación y control en EDAR durante períodos largos de tiempo.

Sin embargo, tal y como se ha mencionado en el Capítulo 1, el modelado integral de EDAR no puede llevarse a cabo mediante la simple conexión de los diferentes modelos de proceso unitario existentes en la EDAR, ya que esto implica conectar vectores con diferente número de componentes. Ante esta problemática, hasta el momento, se han propuesto dos alternativas diferentes.

La primera propone la utilización de un *Modelo Biológico único* que incluye todos los componentes y transformaciones necesarios para reproducir el comportamiento de todos los elementos de proceso unitario incluidos en la EDAR (Jones and Tákacs, 2004; Seco *et al.*, 2004).

La segunda alternativa propone la construcción de *Interfaces* específicas entre los modelos estándar conocidos y comúnmente empleados. Algunas de estas interfaces garantizan la continuidad parcial en DQO o N (Copp *et al.*, 2003), mientras que otras, más elaborados, permiten garantizar la continuidad completa en masa de C, H, O, H, P y carga (Vanrolleghem *et al.*, 2005).

En este Capítulo se ha construido un modelo para la EDAR BSM2 de acuerdo a la metodología PWM propuesta en el Capítulo 2. Posteriormente, la capacidad de este modelo para describir los procesos biológicos más significativos ha sido verificada en diferentes escenarios de simulación.

Finalmente, los aspectos más importantes, tanto de las características del modelo construido, como de los resultados obtenidos en estudios por simulación, han sido comparados y discutidos frente a otras alternativas de modelado integral existentes en la bibliografía.

### 3.2 DESCRIPCIÓN DE LA EDAR BSM2

La EDAR propuesta en el modelo BSM2 está constituida por un decantador primario, un tratamiento biológico que coincide con la EDAR propuesta en el modelo BSM1 (Copp, 2002) y que consiste en un proceso de pre-desnitrificación y nitrificación convencional, y un tratamiento de fangos que incluye un espesador, un digestor anaerobio y un separador sólido-líquido (Figura 3.1).

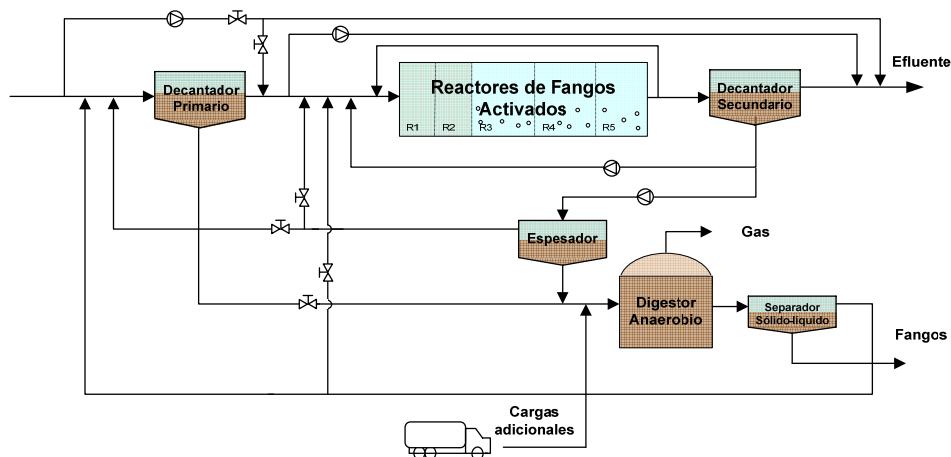


Figura 3.1. Esquema de la EDAR BSM2

Las características de los elementos incluidos en la EDAR BSM2 se muestran en la Tabla 3.1:

Tabla 3.1. Características físicas de la EDAR BSM2

| Elemento                                            | Configuración física                       |
|-----------------------------------------------------|--------------------------------------------|
| Reactores Anóxicos de Fangos Activados (R1, R2)     | Volumen = 1000 m <sup>3</sup>              |
| Reactores Aerobios de Fangos Activados (R3, R4, R5) | Volumen = 1333 m <sup>3</sup>              |
| Digestor Anaerobio                                  | Volumen = 3400 m <sup>3</sup>              |
| Decantador primario                                 | Volumen = 900 m <sup>3</sup>               |
| Decantador secundario                               | Altura = 4 m<br>Área = 1500 m <sup>2</sup> |
| Elemento                                            | Eficiencia de eliminación de sólidos (%)   |
| Espesador                                           | 98                                         |
| Separador sólido-líquido                            | 98                                         |

### **3.3 CONSTRUCCIÓN DEL MODELO INTEGRAL DE EDAR BSM2 (BSM2 PWM)**

La evaluación del comportamiento de la EDAR BSM2 requiere la utilización de un modelo integral que permita reproducir en primer lugar, la eliminación biológica de C y N en la línea de aguas teniendo en cuenta los retornos provenientes de la línea de fangos y en segundo lugar, la digestión anaerobia de los fangos extraídos del decantador primario, de la purga del decantador secundario y de posibles cargas adicionales. Además, el modelo construido debe reproducir la decantación de sólidos, tanto en los decantadores primario y secundario, como en las unidades de espesamiento y separación sólido-líquido. En el decantador secundario, con el objetivo reproducir posibles escapes de sólidos por el efluente en situaciones de sobrecarga, debe predecirse la altura del manto de lodos y la evolución de los sólidos en función de la altura del decantador.

A continuación, y de acuerdo con la metodología propuesta en el Capítulo 2, se presenta el Modelo Integral de EDAR BSM2 **BSM2 PWM**. La construcción de este modelo se ha llevado a cabo siguiendo los pasos propuestos en esta tesis:

- 1 Construcción del Modelo de Transformaciones de Planta (PTM) mediante una selección adecuada de las transformaciones relevantes en la EDAR estudiada.
- 2 Construcción del conjunto de Modelos de Proceso Unitario (UPM) que describen el comportamiento de cada elemento incluido en la EDAR.
- 3 Construcción del Modelo Integral de EDAR (BSM2 PWM) mediante la conexión directa de los UPM obtenidos.

#### **3.3.1 Construcción del Modelo de Transformaciones de Planta**

La construcción del Modelo de Transformaciones de Planta (PTM) se ha llevado a cabo de acuerdo con el procedimiento secuencial propuesto en el Apartado 2.4.1, que consiste en la adecuada identificación de las poblaciones de bacterias activas en base a los procesos biológicos que tienen lugar en la EDAR estudiada.

- *Selección de los Procesos Biológicos*

De acuerdo con la configuración de la EDAR BSM2 (Figura 3.1) y los objetivos del modelo, los procesos biológicos considerados han sido el proceso AS-CN de eliminación de C y N en condiciones aerobias y anóxicas (nitrificación-desnitrificación) y el proceso de digestión anaerobia.

- *Selección de las poblaciones activas de bacterias requeridas para describir los procesos biológicos seleccionados*

En base a los procesos biológicos seleccionados, tal y como se muestra en la Tabla 2.36, las poblaciones de bacterias necesarias para reproducir estos procesos han sido las poblaciones aerobias representadas por los componentes  $X_h$ ,  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$  y el conjunto de bacterias anaerobias  $X_{su}$ ,  $X_{aa}$ ,  $X_{fa}$ ,  $X_{c4}$ ,  $X_{pro}$ ,  $X_{ac}$  y  $X_{h2}$ .

- *Selección de las transformaciones bioquímicas asociadas a la actividad de las poblaciones activas de bacterias*

Una vez determinadas las poblaciones de bacterias, las transformaciones bioquímicas que describen su metabolismo, es decir, crecimiento, desaparición e hidrólisis enzimática en el caso de las bacterias heterótrofas, deben seleccionarse en todas las condiciones ambientales (Tabla 2.37).

Por tanto, las transformaciones seleccionadas han sido 1-7, 14, 15, 16-29, 33-40, 41-43, 45-51, 55-57, 59-65, 69-71, 73-79 y 89-97. Además, se han considerado las transformaciones que describen la desintegración de  $X_{c2}$  en condiciones aerobias, anóxicas y anaerobias ya que, tal y como se ha descrito en el Capítulo 2, esta transformación se ha considerado como un paso intermedio entre la desaparición de biomasa y la hidrólisis del sustrato particulado. La desintegración de  $X_{c1}$  sin embargo, no se ha incluido en el PTM ya que, tal y como se describirá en el Apartado 3.5, para el caso de estudio realizado no se considera el tratamiento de cargas adicionales de fangos procedentes del exterior en el digestor anaerobio.



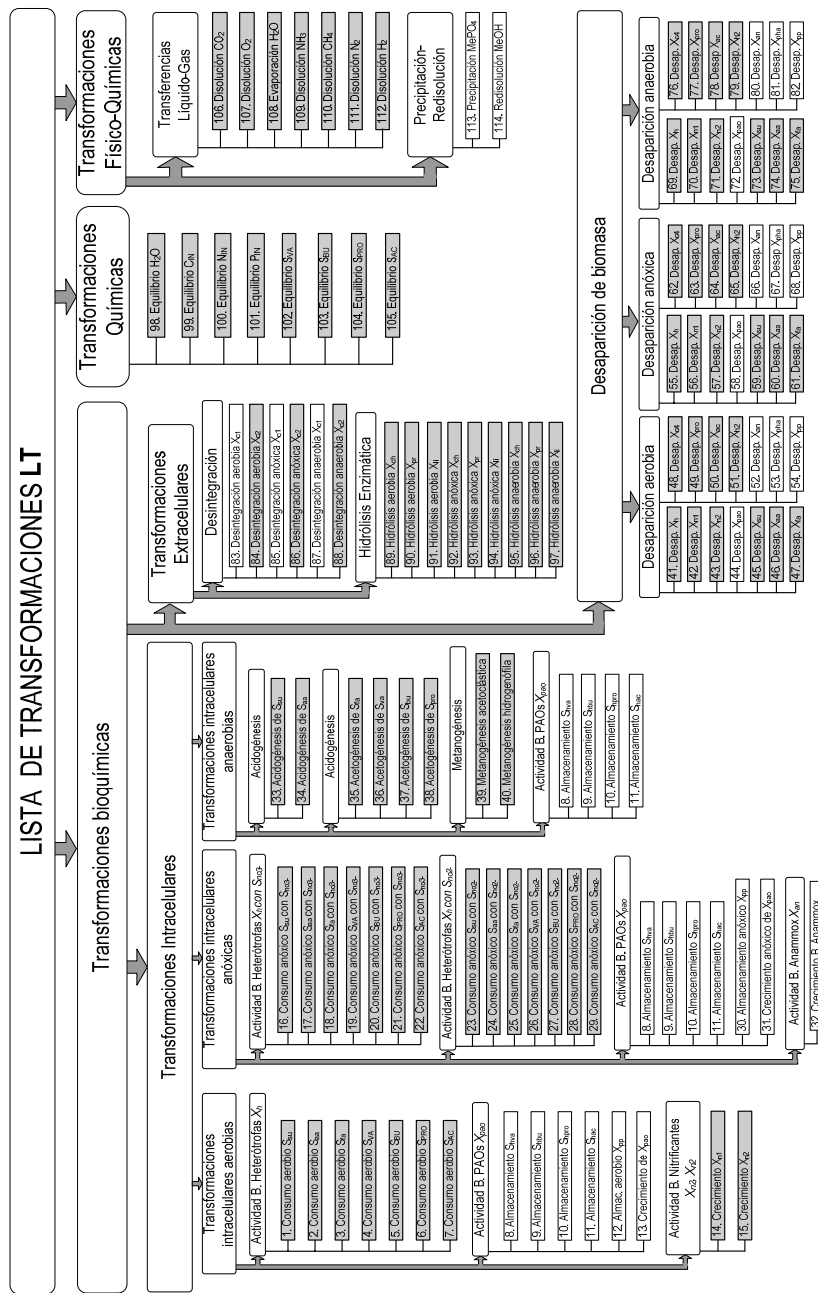


Figura 3.2. Transformaciones seleccionadas en la construcción del PTM

Los componentes involucrados en estas transformaciones son los correspondientes al sustrato soluble fácilmente biodegradable, las poblaciones de bacterias seleccionadas, los productos inertes obtenidos en la desintegración del componente  $X_{c2}$  y el sustrato lentamente biodegradable. Además se han considerado todos los componentes utilizados como componentes fuente-sumidero de forma que la continuidad de masa y carga quede garantizada en todas las transformaciones. Por último, los componentes inertes orgánicos  $S_i$  y  $X_i$  e inorgánicos  $X_{ii}$  procedentes del influente se han incluido en la lista de los componentes de forma que el modelo reproduzca de forma realista la cantidad de sólidos suspendidos totales y volátiles en la EDAR.

- *Incorporación de las transformaciones de equilibrios ácido-base y líquido-gas*

Finalmente, a partir de los componentes involucrados en las transformaciones bioquímicas seleccionadas, los equilibrios ácido base 98-105 y los equilibrios de transferencia líquido-gas 106-112 se han incorporado en el MTP. Igualmente, los componentes adicionales necesarios para describir los equilibrios ácido-base y transferencias líquido-gas también se han incluido.

En la Figura 3.2 se han señalado las transformaciones incluidas en el PTM construido para la EDAR BSM2. Este modelo, expresado mediante una matriz de estequiometría, un vector de cinéticas y un vector de componentes de planta (PCV) se detalla en el Anexo B.

### **3.3.2 Construcción de los Modelos de Proceso Unitario**

Una vez obtenido el PTM, deben construirse los Modelos de Proceso Unitario (UPM) para los reactores de fangos activados (R1, R2, R3, R4 y R5), digestor anaerobio, decantadores primario y secundario, espesador y unidad de separación sólido-líquido.

Tal y como se ha mencionado en el Capítulo 2, los UPM de los elementos incluidos en la EDAR BSM2 deben estar constituidos por el PTM construido en el Apartado 3.3.2 y la descripción del transporte de masa. Sin embargo, de acuerdo con las características y función de cada uno de los elementos en la EDAR BSM2, en algunos casos se han considerado las simplificaciones mencionadas en el Apartado 2.4.2. A continuación se describen los UPM de todos estos elementos.

### 3.3.2.1 Modelo de Proceso Unitario Reactor Biológico

El Modelo de Proceso Unitario de Reactor Biológico describe el comportamiento de todos aquellos elementos en los que tiene lugar una actividad biológica relevante, es decir, los reactores de fangos activados (R1, R2, R3, R4 y R5) y el digestor anaerobio.

Este UPM por tanto, incluye el PTM construido en el Apartado 3.3.1 y la descripción del transporte de masa. Teniendo en cuenta que el PTM construido incluye componentes en fase líquida (disueltos o particulados) y gaseosa, entre los que se dan transferencias líquido-gas, el modelo de proceso unitario debe considerar estas dos fases y describir el transporte de masa en ambas. Sin embargo, el UPM Reactor Biológico presenta algunas diferencias si describe el transporte de masa en reactores cerrados (digestor anaerobio) o si por el contrario, estos reactores están en contacto directo con la atmósfera (R1, R2, R3, R4 y R5). A continuación se describe el transporte de masa en ambos casos.

#### 3.3.2.1.1 Transporte de masa en el reactor biológico cerrado

El modelo de reactor biológico cerrado está constituido por dos reactores de mezcla completa de volumen constante que representan las fases líquida y gaseosa, y entre las cuales existe una transferencia de masa de los gases considerados.

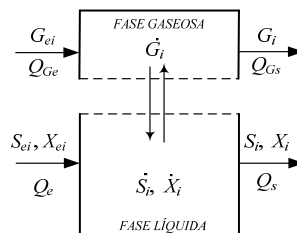


Figura 3.3. Esquema del Reactor Biológico cerrado

De forma general, las ecuaciones que describen el transporte de masa, tanto para la fase líquida como para la gaseosa, están basadas en balances de masa de todos los componentes considerados, aplicados a los dos reactores de mezcla completa.

Para el caso de los componentes disueltos y particulados, el balance de masa se aplica al reactor correspondiente a la fase líquida.

En primer lugar, para el caso del componente  $S_{h2o}$ , el balance de masa viene dado por la siguiente ecuación:

$$\frac{dM_{h2o}}{dt} = FM_{e,h2o} - FM_{s,h2o} + R_{h2o} \quad (3.1)$$

Donde

$M_{h2o}$ : Masa del componente  $S_{h2o}$  en fase líquida (g H<sub>2</sub>O)

$FM_{e,h2o}$ : Flujo másico de entrada de  $S_{h2o}$  en fase líquida (g H<sub>2</sub>O/d)

$FM_{s,h2o}$ : Flujo másico de salida de  $S_{h2o}$  en fase líquida (g H<sub>2</sub>O/d)

$R_{h2o}$ : Término de conversión del componente  $S_{h2o}$  (gH<sub>2</sub>O/m<sup>3</sup>·d)

Debido a que el componente  $S_{h2o}$  es el componente mayoritario, y el medio donde se encuentran los demás componentes disueltos y particulados, los caudales de entrada y salida en el reactor pueden calcularse a partir de los flujos másicos de  $S_{h2o}$  mediante la siguiente ecuación:

$$Q_e = FM_{e,S_{h2o}} \cdot v_{h2o} \quad (3.2)$$

$$Q_s = FM_{s,S_{h2o}} \cdot v_{h2o} \quad (3.3)$$

Donde

$Q_e$ : Caudal de entrada en la fase líquida (m<sup>3</sup>/d)

$Q_s$ : Caudal de salida en la fase líquida (m<sup>3</sup>/d)

$v_{h2o}$ : Volumen específico del H<sub>2</sub>O (m<sup>3</sup>/g H<sub>2</sub>O)

Además, con respecto al componente  $S_{h2o}$  es importante indicar, que la consideración de éste como componente en la LT y además necesario en cualquier PTM por su papel fuente-sumidero del H, permite establecer una relación directa entre el volumen de la fase líquida y la masa de  $S_{h2o}$  en el reactor.

$$V_{liq} = \sum_{i=1}^n M_i \cdot v_i \approx M_{h2o} \cdot v_{h2o} \quad (3.4)$$

Donde

$V_{liq}$ : Volumen de la fase líquida ( $m^3$ )

$M_i$ : Masa del componente  $i$  en fase líquida (g UM<sub>i</sub>)

$v_i$ : Volumen específico del componente  $i$  ( $m^3/g$  UM<sub>i</sub>)

$M_{h2o}$ : Masa del componente  $S_{h2o}$  en fase líquida (g UM<sub>i</sub>)

$v_{h2o}$ : Volumen específico del componente  $S_{h2o}$  ( $m^3/g$  H<sub>2</sub>O)

Con respecto a la Ecuación (3.1), debe tenerse en cuenta que el hecho de que el componente  $S_{h2o}$  intervenga en las transformaciones implica un valor de  $R_{h2o}$  distinto de cero y por tanto, el considerar caudales de entrada y salida iguales no será suficiente para mantener un valor constante de  $V_{liq}$  calculado a partir de ecuación (3.4). Por este motivo, con el objetivo de mantener un valor de  $V_{liq}$  constante y acorde con las dimensiones reales del reactor  $V_{liq\_C}$ , el caudal de salida se ha definido como una función de la masa de  $S_{h2o}$  en el interior del reactor en cada instante:

$$Q_s = Q_e \cdot \left( 1 + \alpha \cdot \frac{V_{liq} - V_{liq\_C}}{V_{liq\_C}} \right) \quad (3.5)$$

Donde

$Q_s$ : Caudal de salida ( $m^3/d$ )

$Q_e$ : Caudal de entrada ( $m^3/d$ )

$V_{liq}$ : Volumen de la fase líquida calculado a partir de la masa de  $S_{h2o}$  ( $m^3$ )

$V_{liq\_C}$ : Volumen de la fase líquida que coincide con las dimensiones reales del reactor ( $m^3$ )

$\alpha$ : Parámetro adimensional que depende del caso de estudio

Para el resto de componentes disueltos y particulados, el balance de masa viene dado por la ecuación (3.6).

$$\frac{dM_i}{dt} = C_{ei} \cdot Q_e - C_i \cdot Q_s + R_i \cdot V_{liq} \quad (3.6)$$

$$C_i = \frac{M_i}{V_{liq}} \quad (3.7)$$

Donde

$M_i$ : Masa del componente  $i$  en fase líquida (g UE<sub>i</sub>)

$R_i$ : Término de conversión del componente  $i$  que considera la aparición o desaparición de este componente en las transformaciones (g UE<sub>i</sub>/(d·m<sup>3</sup>))

$C_{e,i}$ : Concentración del componente  $i$  a la entrada del reactor (g UE<sub>i</sub>/m<sup>3</sup>)

$C_i$ : Concentración del componente  $i$  en el reactor (g UE<sub>i</sub>/m<sup>3</sup>)

$Q_e$ : Caudal de entrada al reactor (m<sup>3</sup>/d)

$Q_s$ : Caudal de salida del reactor (m<sup>3</sup>/d)

$V_{liq}$ : Volumen del reactor que representa la fase líquida (m<sup>3</sup>)

Por otro lado, el transporte de masa para los componentes gaseosos  $G_i$  se describe aplicando un balance de masa alrededor del reactor que representa la fase gaseosa:

$$\frac{dM_i}{dt} = G_{e,i} \cdot Q_{Ge} - G_i \cdot Q_{Gs} + R_i \cdot V_{liq} \quad (3.8)$$

$$G_i = \frac{M_i}{V_{gas}} \quad (3.9)$$

Donde

$M_i$ : Masa del componente gaseoso  $i$  en fase gaseosa (UE<sub>i</sub>)

$Q_{Gs}$ : Caudal de salida del gas (m<sup>3</sup>/d)

$Q_{Ge}$ : Caudal de entrada del gas (m<sup>3</sup>/d)

$G_{e,i}$ : Concentración del componente gaseoso  $i$  a la entrada (gUE<sub>i</sub>/m<sup>3</sup>)

$G_i$ : Concentración del componente gaseoso  $i$  en la fase gaseosa (gUE<sub>i</sub>/m<sup>3</sup>)

$V_{gas}$ : Volumen de la fase gaseosa (m<sup>3</sup>)

El caudal de salida del gas al exterior, depende de la presión total del gas en la fase gaseosa y viene dado por la siguiente ecuación:

$$Q_{out} = k_p \cdot (P_T - P_{atm}) \quad (3.10)$$

Donde

$k_p$ : coeficiente de Resistencia de la tubería (m<sup>3</sup>/(d·bar))

$P_{atm}$ : Presión atmosférica externa

$P_T$ : Presión total dada por la suma de las presiones parciales de los componentes gaseosos considerados.

Las presiones parciales en la fase gaseosa  $P_i$  varían en función de las transformaciones que tienen lugar en el reactor y pueden ser calculadas a partir de las concentraciones de los componentes gaseosos mediante la ecuación de gases ideales.

$$P_i = \frac{n_i}{V_{gas}} \cdot R \cdot T \quad (3.11)$$

Donde

$P_i$ : Presión parcial del componente  $i$  en la fase gaseosa (bar)

$n_i$ : moles del componente gaseoso  $i$  en el reactor ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )

$R$ : Constante de gases ideales ( $\text{bar} \cdot \text{m}^3 / (\text{mol} \cdot \text{K})$ )

$T$ : Temperatura en el reactor (K)

### 3.3.2.1.2 Transporte de masa en el reactor biológico abierto

El modelo de reactor biológico abierto está constituido por un reactor de mezcla completa de volumen constante, que representa la fase líquida en la cual se encuentran los componentes disueltos y particulados.

Este reactor está en contacto directo con la atmósfera, compuesta por una serie de componentes gaseosos con concentraciones constantes. De esta forma, dependiendo de las transformaciones que ocurren en la fase líquida, se da un intercambio de masa entre las fases disueltas y gaseosas de aquellos compuestos que en su estado estándar se encuentran en estado gaseoso (disolución del  $G_{O_2}$  en procesos aireados, escape del  $S_{n_2}$  en procesos de desnitrificación, etc.).

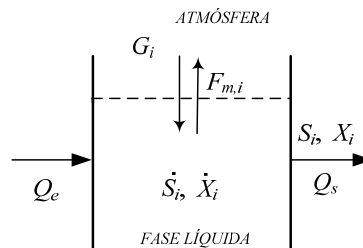


Figura 3.4. Esquema del Reactor Biológico abierto

Tal y como se ha planteado en el modelo de reactor cerrado, el transporte de masa del componente  $S_{h2o}$  se describe mediante la ecuación (3.1). También en este caso, el  $Q_s$  varía en función de la masa de  $S_{h2o}$  según la ecuación (3.5), de forma que el volumen de la fase líquida permanezca constante.

Igualmente, el transporte de masa para los componentes disueltos y particulados, se describe mediante un balance de materia aplicado al reactor que representa la fase líquida tal y como se ha planteado en la ecuaciones (3.6) y (3.7).

Sin embargo, para el caso de los componentes gaseosos, se asume que sus concentraciones permanecen en valores constantes independientemente del flujo másico entre las fases líquida y gaseosa. Los valores constantes de estas concentraciones pueden calcularse a partir de la composición atmosférica. En la Tabla 3.2, se muestran los porcentajes molares de los componentes gaseosos incluidos en el PCV en la atmósfera.

La ecuación que describe el flujo másico del componente gaseoso  $i$  entre las fases líquidas y gaseosas viene dado por:

$$FM_i = R_i \cdot V_{liq} \quad (3.12)$$

Donde

$R_i$ : Conversión del componente gaseoso  $i$  (gUE<sub>*i*</sub>/(m<sup>3</sup>·d))

$V_{liq}$ : Volumen de la fase líquida (m<sup>3</sup>)

Tabla 3.2. Composición atmosférica seca y Humedad relativa

| Componente gaseosos $G_i$      | Composición (%) |
|--------------------------------|-----------------|
| Humedad relativa ( $G_{h2o}$ ) | 80              |
| $G_{co2}$                      | 1               |
| $G_{o2}$                       | 20              |
| $G_{n2}$                       | 79              |
| $G_{ch4}$                      | 0.0             |
| $G_{nh3}$                      | 0.0             |
| $G_{h2}$                       | 0.0             |



### 3.3.2.2 Modelo de Proceso Unitario Decantador primario

El UPM de decantador primario debería incluir, al igual que en el caso del Reactor Biológico, el PTM construido para la EDAR BSM2 y la descripción del transporte de masa. Sin embargo, debido a que la función del decantador primario en la EDAR es, principalmente, la eliminación de parte de los sólidos suspendidos de entrada a la EDAR y las transformaciones bioquímicas no se dan de forma relevante, el UPM del decantador primario puede simplificarse obviando todas las transformaciones consideradas en el PTM tal y como se indica en el Apartado 2.4.2.

Por otro lado, el transporte de masa de este UPM, de acuerdo con lo propuesto en Jeppsson et al. (2006), se ha basado en el modelo de decantador primario desarrollado por (Otterphol and Freud, 1992). Este modelo, está constituido por un reactor de mezcla completa y una separación a la salida del reactor que divide el flujo másico efluente y el flujo másico extraído por el fondo del decantador (Figura 3.5).

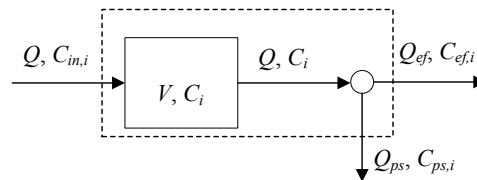


Figura 3.5. Esquema del modelo Otterpohl-Freud

Donde

$Q$ : Caudal de entrada al decantador ( $\text{m}^3/\text{d}$ )

$C_{in,i}$ : Concentración del componente  $i$  de entrada al decantador ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

$Q_{ef}$ : Caudal de salida por el efluente del decantador ( $\text{m}^3/\text{d}$ )

$C_{ef,i}$ : Concentración del componente  $i$  efluente ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

$Q_{ps}$ : Caudal extraído por el fondo del decantador ( $\text{m}^3/\text{d}$ )

$C_{ps,i}$ : Concentración del componente  $i$  en el fondo del decantador ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

En este modelo de decantación, la eliminación de partículas sólidas por el fondo del decantador se obtiene mediante una ecuación empírica que calcula, a partir de una serie de parámetros, el rendimiento de eliminación de DQO<sub>t</sub> ( $\eta_{DQO_t}$ ). En

el modelo empleado en esta tesis esta ecuación ha sido simplificada y la eliminación de sólidos se calcula a partir del rendimiento de eliminación de  $DQO_p$  ( $\eta_{DQOp}$ ).

Los balances de materia que describen el transporte de masa en este UPM para cada uno de los componentes incluidos en el PCV, y la ecuación simplificada para el cálculo del rendimiento de eliminación de sólidos se detallan en el Anexo D.

### 3.3.2.3 Modelo de Proceso Unitario de decantador secundario

El objetivo del decantador secundario en la EDAR es la eliminación de los sólidos en el efluente. De acuerdo con esto y al igual que en el caso anterior, puede asumirse que en el UPM del decantador secundario no existe una actividad biológica relevante y obviarse las transformaciones incluidas en el PTM.

Por otro lado, el transporte de masa en este UPM se ha descrito de acuerdo con un modelo de capas propuesto en (Tákacs *et al.*, 1991). Este modelo, basado en la teoría del flujo de sólidos, describe el transporte de masa en el decantador mediante un modelo unidimensional que consta de múltiples capas. Estas capas presentan un comportamiento de reactor de mezcla completa y por lo tanto, los sólidos influentes al decantador se distribuyen de forma instantánea y uniforme en toda la sección transversal de cada capa. Esta discretización del decantador permite obtener un modelo que, de acuerdo con los requisitos del modelo global, reproduce de forma dinámica la distribución de los sólidos en el decantador, la altura del manto de lodos y la concentración de sólidos en la recirculación.

El transporte de masa planteado según el modelo de capas se describe mediante un balance de masas para el caso del componente  $S_{h2o}$ , y dos variables compuestas  $X_T$  y  $S_T$ , que representan la suma de todos los componentes particulados y solubles en unidades de masa. Por tanto, el UPM del decantador secundario presenta un vector de componentes específico formado por estas dos variables y de acuerdo con la metodología PWM, requerirá de interfaces específicas a la entrada y salida, que conviertan a los componentes incluidos en el PCV en las variables compuestas  $X_T$  y  $S_T$  y viceversa.

Las ecuaciones que describen el transporte de masa en este modelo de proceso unitario se detallan en el Anexo D.

### 3.3.2.4 Modelos de Proceso Unitario espesador y separador sólido-líquido

Por último, los Modelos de Proceso Unitario espesador y separador sólido-líquido, al igual que en el caso de los decantadores, se han basado únicamente en la descripción del transporte de masa obviando las transformaciones internas incluidas en el PTM.

El transporte de masa en estos elementos está basado, tal y como se propone en Jeppsson *et al.*, (2006), en un modelo de separación instantánea en el cual se fija el porcentaje de sólidos requeridos en el fango espesado y el rendimiento de eliminación de sólidos. Al igual que en el caso del decantador secundario el transporte de masa se describe en base al componente  $S_{h2o}$ , representando el balance hidráulico, y las variables adicionales  $X_T$  y  $S_T$  (Figura 3.6). Por lo tanto, los UPM espesador y separador sólido-líquido también deberán incluir interfaces específicas entre el vector de componentes de planta (PCV) y las variables adicionales  $X_T$  y  $S_T$ .

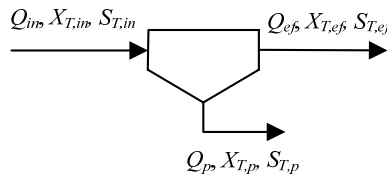


Figura 3.6. Esquema del espesador y separador sólido-líquido

El transporte de masa del componente  $X_T$  se describe a partir de las siguientes ecuaciones:

$$FX_{T,p} = FX_{T,in} \cdot \eta_{el} / 100 \quad (3.13)$$

$$FX_{T,in} = X_{T,in} \cdot Q_{in} \quad (3.14)$$

Donde

$FX_{T,p}$ : Flujo másico de sólidos extraído en la purga del espesador (g/d)

$FX_{T,in}$ : Flujo másico de entrada de sólidos al espesador (g/d)

$\eta_{el}$ : Rendimiento de eliminación de sólidos (%)

El caudal extraído por el espesador debe determinarse en cada instante dependiendo del flujo de sólidos a extraer y la concentración de sólidos fijada en el fango extraído:

$$Q_p = \frac{FX_{T,p}}{X_{T,p}(\%) \cdot \rho_{H_2O}} \quad (3.15)$$

Donde

$Q_p$ : Caudal extraído en el espesador (m<sup>3</sup>/d)

$X_{T,p}(\%)$ : Porcentaje de concentración de sólidos en el fango extraído

$\rho_{H_2O}$ : Densidad del H<sub>2</sub>O (g/m<sup>3</sup>)

El caudal en el efluente y el valor de  $X_{T,ef}$  vienen dados por:

$$Q_{ef} = Q_{in} - Q_p \quad (3.16)$$

$$FX_{T,ef} = FX_{T,in} - FX_{T,p} \quad (3.17)$$

$$X_{T,ef} = \frac{FX_{T,ef}}{Q_{ef}} \quad (3.18)$$

Para el caso del componente  $S_T$ , las concentraciones  $S_{T,ef}$  y  $S_{T,p}$  son iguales a la concentración de  $S_{T,in}$

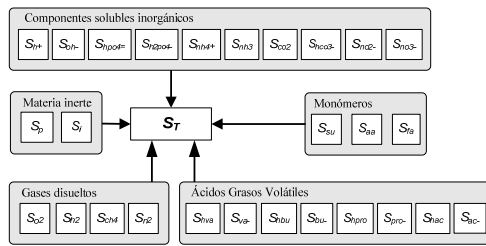
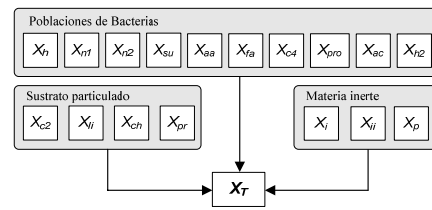
$$S_{T,in} = S_{T,ef} = S_{T,p} \quad (3.19)$$

### 3.3.2.5 Descripción de las interfaces entre el PCV y las variables compuestas $X_T$ y $S_T$

Tal y como se han mencionado anteriormente, los modelos de proceso unitario correspondientes al decantador secundario, espesador y separador sólido-líquido requieren de interfaces específicas entre el las variables compuestas utilizadas para describir el transporte de masa ( $S_T$  y  $X_T$ ) y el PCV. Las interfaces  $PCV \rightarrow X_T S_T$  y  $X_T S_T \rightarrow PCV$  se describen a continuación.

- *Interfaz  $PCV \rightarrow X_T S_T$*

En la interfaz  $PCV \rightarrow X_T S_T$ , representada de forma esquemática en la Figura 3.7 y Figura 3.8, los componentes particulados incluidos en el PCV se convierten en el componente  $X_T$  y los componentes solubles se convierten en el componente  $S_T$ .

Figura 3.7. Conversión de PCV a  $S_T$ Figura 3.8. Conversión de PCV a  $X_T$ 

Al realizar la conversión  $PCV \rightarrow X_T$   $S_T$ , debe tenerse en cuenta que estas variables están expresadas en unidades de masa, mientras que el conjunto de componentes tanto solubles como particulados en el PCV lo están mediante su correspondiente unidad estequiométrica.

Para el caso de los componentes particulados, puesto que todos ellos utilizan la unidad DQO como unidad estequiométrica excepto el componente que representa la concentración de sólidos inertes inorgánicos  $X_{ii}$ , el cálculo de  $X_T$  viene dado por la siguiente ecuación:

$$X_{T,in} = \sum_{j=29}^{44} \frac{X_{j,in}}{\gamma_{DOT,xj}} + X_{ii,in} \quad (3.20)$$

Donde

$X_{T,in}$ : Concentración de sólidos totales ( $g/m^3$ )

$X_{j,in}$ : Concentración del componente orgánico particulado  $j$  ( $gDQO/m^3$ )

$\gamma_{DOT,xj}$ : Relación entre DOT y masa del componente  $j$  ( $DOT_j/UM_j$ )

$X_{ii,in}$ : Concentración de sólidos inertes inorgánicos ( $g/m^3$ )

En el caso de los componentes solubles, de acuerdo con la unidad estequiométrica de cada uno de ellos, el componente  $S_T$  se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$S_{T,in} = S_{o2,in} + S_{h+,in} + S_{oh-,in} + \frac{S_{hpo4-,in}}{\alpha_{P,Shpo4-}} + \frac{S_{h2po4-,in}}{\alpha_{P,Sh2po4-}} + \frac{S_{nh4+,in}}{\alpha_{N,Shn4+}} + \frac{S_{nh3,in}}{\alpha_{N,Shn3}} \\ + \frac{S_{co2,in}}{\alpha_{C,SCO2}} + \frac{S_{hco3-,in}}{\alpha_{C,Sho3-}} + \sum_{j=11}^{23} \frac{S_{j,in}}{\gamma_{DOT,Sj}} + \frac{S_{n2,in}}{\alpha_{N,Sn2}} + \frac{S_{no2-,in}}{\alpha_{N,Sno2-}} + \frac{S_{no3-,in}}{\alpha_{N,Sno3-}} + \sum_{j=27}^{28} \frac{S_{j,in}}{\gamma_{DOT,Sj}} \quad (3.21)$$

Donde

$S_{T,in}$ : Concentración de componentes disueltos totales ( $\text{g}/\text{m}^3$ )

$S_{j,in}$ : Concentración del componente disuelto orgánico  $j$  ( $\text{gDQO}/\text{m}^3$ )

$\gamma_{DOT,sj}$ : Relación entre DOT y masa del componente  $j$  ( $\text{DOT}_j/\text{UM}_j$ )

Puesto que los UPM decantador secundario, espesador y separador sólido-líquido no consideran transformaciones de transferencia líquido-gas, los componentes gaseosos se han obviado en la descripción del transporte de masa y no se han tenido en cuenta en las conversiones. Este hecho sin embargo, no implica una discontinuidad de masa en el modelo global de la EDAR ya que en el flujo másico de entrada a estos elementos las concentraciones de los componentes gaseosos son nulas.

- *Interfaz*  $X_T$   $S_T \rightarrow PCV$

El interfaz que convierte las variables adicionales  $X_T$  y  $S_T$  en el vector de componentes del modelo, está constituido por las siguientes ecuaciones:

$$S_{j,salida} = S_{T,salida} \frac{S_{j,in}}{S_{T,in}} \quad (3.22)$$

$$X_{j,salida} = X_{T,salida} \frac{X_{j,in}}{X_{T,in}} \quad (3.23)$$

Donde

$S_{j,salida}$ : Concentración del componente disuelto  $j$  a la salida ( $\text{gUE}_j/\text{m}^3$ )

$S_{T,salida}$ : Concentración de componentes disueltos totales a la salida ( $\text{g}/\text{m}^3$ )

$S_{j,in}$ : Concentración del componente disuelto  $j$  a la entrada ( $\text{gUE}_j/\text{m}^3$ )

$S_{T,in}$ : Concentración de componentes disueltos totales a la entrada ( $\text{g}/\text{m}^3$ )

$X_{j,salida}$ : Concentración del componente particulado  $j$  a la salida ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

$X_{T,salida}$ : Concentración de sólidos totales a la salida de la interfaz ( $\text{g}/\text{m}^3$ )

$X_{j,in}$ : Concentración del componente particulado  $j$  a la salida ( $\text{gUE}_j/\text{m}^3$ )

$X_{T,in}$ : Concentración de sólidos totales a la entrada de la interfaz ( $\text{g}/\text{m}^3$ )

### **3.3.3 Obtención del modelo integral de EDAR BSM2 PWM**

Finalmente, el modelo integral BSM2 PWM se obtiene mediante la conexión directa de los flujos másicos de entrada y salida de los modelos de proceso unitario (UPM) construidos para cada elemento.

## **3.4 VALIDACIÓN DEL MODELO BSM2 PWM**

Una vez construido el modelo integral BSM2 PWM, su capacidad para reproducir los procesos biológicos de eliminación de C y N en condiciones aerobias y anóxicas debe ser evaluada. Con este objetivo, en primer lugar el BSM2 PWM se ha implantado en la plataforma de simulación WEST (Apartado 3.4.1) y posteriormente se ha analizado su comportamiento en dos escenarios diferentes (Apartado 3.4.2).

### **3.4.1 Implantación del modelo BSM2 PWM en la plataforma de simulación WEST**

El modelo BSM2 PWM ha sido implantado en la plataforma de simulación WEST<sup>®</sup> (<http://www.mostforwater.com/>). Esta herramienta informática ofrece una interfaz gráfica y una librería de modelos matemáticos de sistemas medioambientales que posee suficiente flexibilidad para implantar otros modelos nuevos o modificar los existentes. La plataforma de simulación WEST se divide en las siguientes aplicaciones:

- *Gestor de Proyectos*: Es la herramienta de organización de los ficheros que se manejan en WEST.
- *Editor de modelos*: Esta aplicación posibilita modificar los modelos matemáticos utilizados o añadir otros nuevos. MSL (Model Specification Language) es el lenguaje de programación utilizado para su desarrollo.
- *Constructor de configuraciones*: Es una herramienta gráfica para la construcción de modelos complejos creados a partir de la conexión de modelos de sistemas más sencillos.
- *Entorno de experimentación*: Es la herramienta de definición y ejecución de las simulaciones.

### 3.4.1.1 Creación de la categoría de Modelos Integrales de EDAR (PWM)

El programa de simulación WEST posee, tal y como se ha mencionado anteriormente, una librería de modelos. En esta librería, mediante una programación orientada a objetos y utilizando el lenguaje MSL, se describe el conjunto de transformaciones biológicas consideradas en los modelos estándar ASM1, ASM2/d, ASM3 y ADM1 conocidos como categorías. A su vez, para cada una de las categorías se incluye una descripción del transporte de masa de los elementos más comúnmente empleados en una EDAR (modelo de reactor de mezcla completa, modelo de decantador ideal o de capas, etc.).

Para la simulación del modelo BSM2 PWM se ha creado una nueva categoría llamada PWM (Plant-Wide Modelling). Esta categoría incluye todos los componentes y transformaciones incluidas en la Librería de Transformaciones descrita en el Apartado 2.3 y los modelos de transporte de masa descritos en el Apartado 3.3.2.

### 3.4.1.2 Construcción del modelo de EDAR BSM2 PWM en la plataforma de simulación WEST

La siguiente figura muestra un esquema de la EDAR BSM2 construida en el entorno de configuración de WEST.

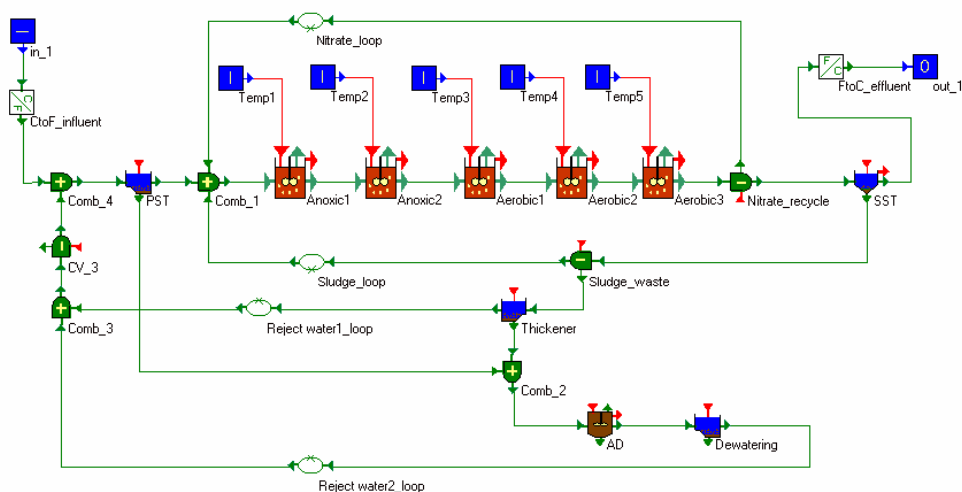


Figura 3.9. Esquema de la EDAR BSM2 en la plataforma de simulación WEST



### **3.4.2 Evaluación por simulación del modelo BSM2 PWM**

Una vez implantado el modelo BSM2 PWM en la plataforma de simulación de WEST, su comportamiento se ha validado en dos escenarios diferentes.

El primero de ellos ha sido la EDAR propuesta en el *Benchmark Simulation Model N°1* (BSM1) (Copp, 2002), que coincide a su vez con el tratamiento secundario de la EDAR BSM2. En este escenario se han evaluado los procesos de nitrificación y desnitrificación en condiciones aerobias y anóxicas.

El segundo escenario, coincide con el *COST Anaerobic Benchmark 1.2* propuesto en (Rosen and Jeppsson, 2002), y en él se han evaluado los procesos de acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis que tienen lugar en la digestión anaerobia.

#### **3.4.2.1 Validación del BSM2 PWM en los procesos de eliminación de materia orgánica y nitrógeno en condiciones aerobias y anóxicas**

La validez del modelo BSM2 PWM para reproducir los procesos de eliminación de materia orgánica y nitrógeno se ha evaluado mediante un análisis de resultados realizado de forma comparativa con los resultados obtenidos con el modelo ASM1.

Las variables de operación, el cálculo del influente de acuerdo con el modelo BSM2 PWM, y los valores de los parámetros cinéticos y estequiométricos se detallan en el Anexo B. El cálculo de los parámetros físico-químicos y químicos se incluye en el Anexo A. Por otro lado, los parámetros empleados en la simulación con el modelo ASM1 son los propuestos en Copp *et al.*, (2002). La composición del influente empleada para la validación ha sido la correspondiente al tiempo seco en condiciones estacionarias y dinámicas (<http://www.benchmarkwwtp.org/>).

Los resultados obtenidos han demostrado que las predicciones del modelo integral BSM2 PWM desarrollado en este capítulo son muy similares a las obtenidas con el modelo estándar ASM1. A continuación se muestran de forma comparativa algunos de los resultados obtenidos con el modelo ASM1 y BSM2 PWM.

La Figura 3.10 muestra las diferencias existentes entre el sustrato particulado y soluble en el primer reactor anóxico (R1) obtenidos con los dos modelos. Puede verse cómo el modelo BSM2 PWM reproduce la eliminación de materia

orgánica obtenida con el modelo ASM1. Las diferencias existentes entre ambos modelos son fundamentalmente debidas a la consideración de cinéticas de primer orden para la hidrólisis en el BSM2 PWM frente a las ecuaciones de tipo *Contois* utilizadas en el modelo ASM1.

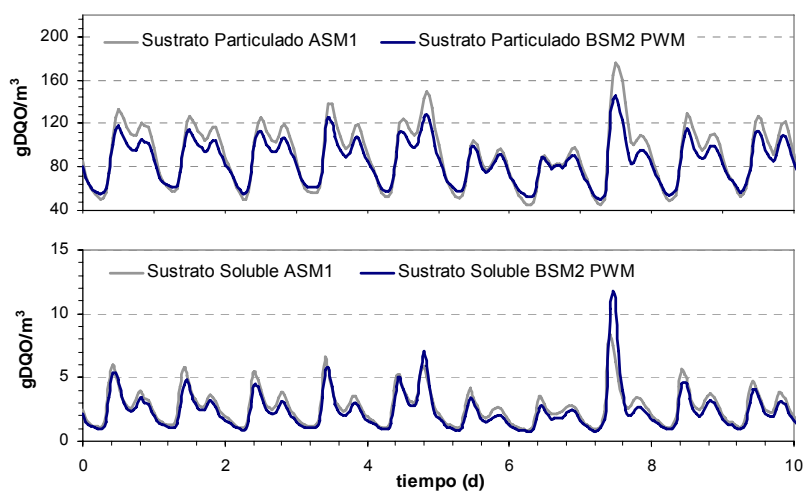


Figura 3.10. *Sustrato soluble y particulado obtenido con los modelos ASM1 y BSM2PWM*

La Figura 3.11 muestra de forma comparativa las concentraciones de nitrógeno  $N-NH_x$  y  $N-NO_x$  en el efluente obtenidas con ambos modelos.

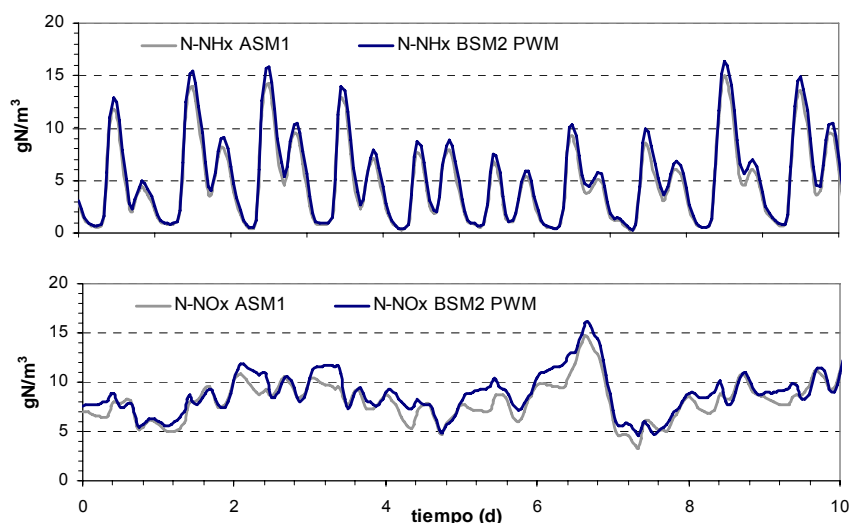


Figura 3.11.  $N-NH_x$  y  $N-NO_x$  obtenido con los modelos ASM1 y BSM2 PWM

Igualmente, a partir de la Figura 3.11 puede afirmarse que el BSM2 PWM reproduce la eliminación de N de manera similar modelo ASM1. Las pequeñas diferencias existentes entre los dos modelos están causadas por el efecto de las diferencias en la descripción de la hidrólisis y sus consecuencias en la desnitrificación, así como por la diferente descripción del nitrógeno orgánico en ambos modelos. Mientras el N orgánico soluble está representado por el componente  $S_{nd}$  en el modelo ASM1, en el BSM2 PWM éste está asociado al contenido de N en los aminoácidos ( $S_{aa}$ ). Por tanto, las diferencias existentes entre el componente  $S_{nd}$  y el contenido de N en  $S_{aa}$  en el último reactor aerobio provocan ligeras discrepancias en el proceso de nitrificación.

En cualquier caso, tal y como se ha comentado, el modelo BSM2 PWM propuesto es capaz de reproducir los resultados del ASM1 para los procesos de nitrificación-desnitrificación.

#### 3.4.2.2 Validación del modelo BSM2 PWM en el proceso de digestión anaerobia

La capacidad del modelo BSM2 PWM para reproducir los procesos anaerobios ha sido validada empleando el escenario de simulación propuesto en el *COST Anaerobic Benchmark 1.2* propuesto en Rosen *et al.*, (2002).

Debido a la gran similitud entre los componentes considerados en el modelo estándar ADM1 y los componentes incluidos en el modelo BSM2 PWM, el

influyente de acuerdo con estos componentes se obtiene de forma directa a partir del especificado en Rosen *et al.* (2002) para el modelo estándar ADM1. Específicamente, los componentes  $S_{hva}/S_{va-}$ ,  $S_{hbu}/S_{bu-}$ ,  $S_{hpro}/S_{pro-}$ ,  $S_{hac}/S_{ac-}$ ,  $S_{nh4+}/S_{nh3}$  y  $S_{co2}/S_{hco3-}$  pueden calcularse a partir los componentes  $S_{VA}$ ,  $S_{BU}$ ,  $S_{PRO}$ ,  $S_{AC}$ ,  $S_{IC}$ ,  $S_{IN}$  y valor de pH dados en el modelo ADM1.

Los parámetros cinéticos y estequiométricos utilizados se han detallado en el Anexo B. Por otro lado, las expresiones empleadas para el cálculo de los parámetros físico-químicos y químicos se han incluido en el Anexo A.

Debido a la gran similitud que existe entre las transformaciones que describen la digestión anaerobia en los modelos BSM2 PWM y ADM1, los resultados obtenidos con ambos modelos no presentan ninguna diferencia significativa.

Por lo tanto, en base a los resultados obtenidos en los procesos de nitrificación-desnitrificación y digestión anaerobia puede concluirse que, el modelo BSM2 PWM construido de acuerdo con la metodología PWM, es adecuado para evaluar el comportamiento dinámico de la EDAR BSM2 compuesta por líneas de aguas y fangos.

### **3.5 ANÁLISIS COMPARATIVO DE LAS DIFERENTES PROPUESTAS DE MODELADO INTEGRAL DE EDAR**

Las alternativas propuestas hasta el momento para el modelado integral de EDAR que incluye líneas de aguas y fangos se han basado, tal y como se detalla en el Capítulo 1, en la utilización de *Interfaces* específicas entre modelos estándar o la utilización de un *Modelo Único*. En esta tesis, y combinando diferentes aspectos de las dos propuestas existentes, se ha propuesto una nueva alternativa denominada metodología PWM (Capítulo 2).

En este apartado se lleva a cabo un análisis comparativo, basado en diferentes estudios de simulación, de las ventajas e inconvenientes que presentan las tres alternativas de modelado integral: PWM, Modelo Único e Interfaces.

### **3.5.1 Comparación del BSM2 PWM con el Modelo Bioquímico Único**

La alternativa del Modelo Bioquímico Único está basada en la utilización de un modelo que incluye todos los componentes y transformaciones necesarios para reproducir cualquier proceso en una EDAR (Jones and Tákacs, 2004; Seco *et al.*, 2004). Las características más importantes y las transformaciones que incluyen los modelos Biowin y BNRM1 han sido descritas en los Apartados 1.5.2.1 y 1.5.2.2.

Puesto que ambos modelos consideran los procesos de nitrificación, desnitrificación y digestión anaerobia, y permiten describir el transporte de masa en reactores de mezcla completa y elementos de separación sólido-líquido, ambos modelos son válidos para reproducir el comportamiento de la EDAR BSM2.

Sin embargo, esta alternativa no posee la flexibilidad de añadir o eliminar componentes o transformaciones dependiendo del caso de estudio y de los objetivos del modelo. De esta forma, en el caso del modelo de EDAR BSM2, los componentes y transformaciones relacionadas por ejemplo, con la eliminación biológica de fósforo deberían considerarse obligatoriamente aunque éstas no son relevantes en este caso de estudio.

Otro inconveniente significativo de esta alternativa es el continuo aumento de tamaño del modelo a medida que se consideren nuevos procesos unitarios en la EDAR (Volcke *et al.*, 2006b).

### **3.5.2 Comparación del BSM2 PWM con interfaces ASM1-ADM1**

La utilización de interfaces construidas específicamente para la conexión de los modelos estándar ASM1 y ADM1, es una segunda alternativa en la obtención de un modelo integral para la EDAR BSM2.

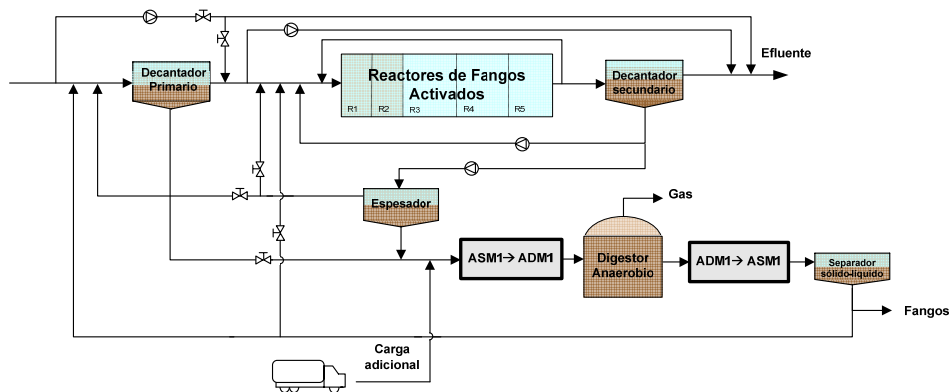


Figura 3.12. Esquema del modelo integral de EDAR BSM2 con interfaces

A este respecto, como primera alternativa, las interfaces ASM1-ADM1 propuestas por Copp *et al.*, (2003) constituyen una solución válida para la obtención del modelo de EDAR BSM2. Estas interfaces se han construido, de acuerdo con los requerimientos en masa de los modelos ASM1 y ADM1, mediante una serie de balances de masa aplicados sobre la DQO y N descritos con detalle en el Apartado 1.5.1.1.

Como segunda alternativa, se presenta la utilización de las interfaces ASM1-ADM1 construidas de acuerdo con la metodología CBIM. Éstas, a diferencia de las anteriores, se construyen para garantizar la continuidad de masa elemental y carga en la conexión de los modelos.

A continuación se analiza la utilización de ambas interfaces frente al modelo BSM2 PWM.

### 3.5.2.1 Comparación con las interfaces propuestos por Copp *et al.*, 2003

En primer lugar, se ha construido el modelo de EDAR BSM2 a partir de las interfaces propuestas por Copp *et al.*, (2003) y de acuerdo con las indicaciones dadas por (Vrecko *et al.*, 2006) y (Rosen *et al.*, 2006). Siguiendo estas indicaciones, el modelo ADM1 estándar se ha modificado según se propone en (de Gracia *et al.*, 2006) de forma que queda garantizada la continuidad de masa en todas las transformaciones. Además, y debido a que no se han considerado cargas adicionales de fango en el proceso de digestión anaerobia, el criterio empleado en Copp *et al.*, (2003) que considera que la DQO particulada se

convierte en el componente complejo  $X_c$ , se ha modificado considerando que se convierte en los componentes  $X_{ch}$ ,  $X_{pr}$  y  $X_{li}$ .

Una vez obtenido el modelo BSM2 a partir de estas interfaces, éste se ha implantado en la plataforma de simulación WEST® y se ha llevado a cabo un estudio de simulación durante un año a partir del influente propuesto en (Gernaey *et al.*, 2006).

Los resultados obtenidos han corroborado la capacidad del modelo BSM2 PWM para reproducir las predicciones de los modelos ASM1 y ADM1.

En la Figura 3.13 se muestra a modo de ejemplo, los resultados obtenidos con respecto al nitrógeno soluble en el efluente y el caudal de metano gas obtenido en el digestor anaerobio. Estos resultados se muestran de forma comparativa con los obtenidos con el modelo BSM2 PWM en el mismo escenario de simulación.

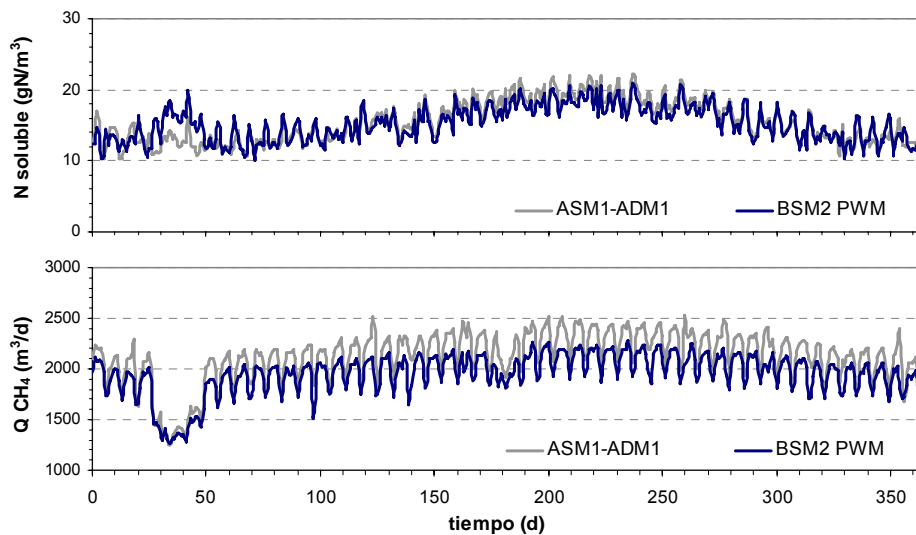


Figura 3.13.  $N$  soluble efluente y  $Q_{CH_4}$  en el digestor anaerobio

Las diferencias observadas en el  $N$  soluble efluente han sido discutidas en el Apartado 3.4.2.1. Con respecto al caudal de  $CH_4$  obtenido, las diferencias obtenidas son debidas a una descripción diferente de la estequiometría en las transformaciones de desaparición de las bacterias y posterior desintegración con respecto a la propuesta en Rosen *et al.*, (2006).

Aunque ambos modelos constituyen una solución válida para el estudio por simulación de la EDAR BSM2, la metodología PWM utilizada para la construcción del modelo BSM2 PWM proporciona un procedimiento general para la construcción de modelos a medida de la EDAR estudiada garantizando la continuidad de masa y carga a lo largo de todo el modelo. En este sentido, debe tenerse en cuenta que las interfaces propuestas por Copp permiten la conexión específica entre los modelos ASM1 y ADM1 garantizando únicamente la continuidad en DQO y N. Por tanto, éstas deberían modificarse para conectar modelos que precisaran garantizar otras continuidades de masa.

### 3.5.2.2 Comparación con las interfaces CBIM ASM1-ADM1

La utilización de las interfaces construidas a partir de la metodología CBIM se propone como otra alternativa para obtener modelos integrales de EDAR que, frente a las interfaces propuestas en Copp *et al.*, (2003), garantizan la continuidad de masa y carga durante la conversión.

Se ha realizado un análisis comparativo del modelo BSM2 PWM con un modelo de EDAR constituido por los modelos ASM1 y ADM1 unidos por interfaces CBIM tal y como se propone en (Zaher *et al.*, 2007).

El procedimiento general propuesto para la construcción de las interfaces CBIM se detalla en el Apartado 1.5.1.2 y la construcción detallada los interfaces ASM1-ADM1 de acuerdo con esta metodología se incluyen en el Anexo C. De forma general, y siguiendo los requerimientos de esta metodología, las fracciones másicas de los componentes de los modelos ASM1 y ADM1 se han definido tal y como se propone en Zaher *et al.*, (2007) y las conversiones han sido definidas en base a las propuestas en Copp *et al.*, (2003), pero cumpliendo la ecuación de continuidad para los elementos C, N, O, H, P y carga.

Aunque con estas interfaces se garantiza la continuidad de masa y carga durante la conexión de los modelos, su construcción y posterior utilización en diferentes escenarios de simulación bajo condiciones dinámicas, es una tarea que presenta ciertas limitaciones debidas a las diferentes hipótesis de partida y heterogeneidad estructural de los modelos a conectar.

Por un lado, en el caso de las interfaces CBIM diseñadas en el Anexo C, la definición de los componentes de los modelos ASM1 y ADM1 en base a sus fracciones másicas presenta dificultades en algunos casos. Por ejemplo, las fracciones másicas de algunos componentes considerados en los modelos



ASM1 y ADM1 ( $S_{alk}$ ,  $S_{ic}$ ,  $S_{in}$ ,  $S_{VA}$ , etc.) dependerán del valor de pH en cada momento. Además, el hecho de que en algunos casos los componentes del modelo no representen un compuesto real sino una parte específica de éste impide la definición de sus fracciones másicas. Así por ejemplo, los componentes  $S_{nd}$  y  $X_{nd}$  representan los contenidos en N de los sustratos solubles y particulados representados por  $S_S$  y  $X_S$  respectivamente. De esta forma, las fracciones másicas de N en  $S_S$  y  $X_S$  deben ser cero y como consecuencia, las fracciones másicas correspondientes a los elementos H, C, O o P tomarán valores por encima de sus valores reales, para garantizar que la suma de las fracciones másicas sea la unidad.

Por otro lado, la construcción de las conversiones que convierten los componentes de un modelo a otro garantizando, tanto la continuidad de masa y carga, como un funcionamiento correcto en cualquier condición estacionaria o dinámica, presenta dos dificultades principales. En primer lugar, si en la conexión de los modelos ASM1 y ADM1 quiere garantizarse la continuidad de masa elemental y carga, los componentes  $S_{ip}$ ,  $S_{h2o}$  y  $S_{h+}$  deberían incluirse en la interfaz y también en los propios modelos, asumiendo las posibles descompensaciones en P, H y carga respectivamente. En segundo lugar, y tal y como se detalla en el procedimiento de construcción de las interfaces CBIM (Anexo C), la utilización de estas interfaces requiere de una continua evaluación de los flujos másicos de los componentes del modelo destino en la interfaz para evitar posibles valores negativos. Así, puesto que las interfaces CBIM no incluyen criterios condicionales de restricción de masa como en la interfaz de Copp, pueden obtenerse valores negativos de algunos componentes del modelo destino si en un instante de simulación, la masa requerida de un componente es mayor que su masa de entrada al interfaz. A modo de ejemplo, La Figura 3.14 muestra, comparativamente con el resultado obtenido con la interfaz propuesta por Copp, cómo en la interfaz CBIM ASM1→ADM1, el flujo másico obtenido para el componente  $S_{su}$  del modelo ADM1 toma valores negativos en los instantes de tiempo en los cuales la cantidad de  $S_S$  requerida para agotar las concentraciones de  $S_o$ ,  $S_{nox}$  y  $S_{nd}$  es mayor que su flujo másico de entrada al interfaz.

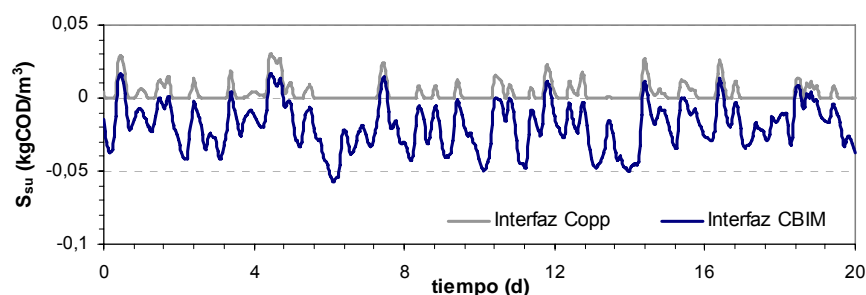


Figura 3.14. Concentración de  $S_{su}$  a la salida del interfaz  $ASMI \rightarrow ADM1$

En la Figura 3.15 y Figura 3.16 pueden observarse los flujos másicos de salida obtenidos para los componentes del modelo ADM1  $S_{IC}$  y  $S_{h+}$  respectivamente. Los valores negativos de estos componentes, que actúan como fuente-sumidero del C y carga en todas las conversiones, reflejan que las cantidades de estos elementos requeridas de forma global en todas las conversiones son mayores que las suministradas y de entrada a la interfaz. Por tanto, en este punto se refleja la importancia de que en el paso 3 del procedimiento propuesto en la construcción de la interfaz (Anexo C), los valores de los coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero en las conversiones sean mínimos. Concretamente, el requisito del balance de carga en esta interfaz es uno de los puntos más delicados en la construcción y utilización de las interfaces CBIM. Así, si el componente  $S_{h+}$  debe asumir las posibles descompensaciones de carga en cada una de las conversiones, y en las interfaces no se reproduce la capacidad de amortiguamiento descrita mediante los equilibrios ácido-base, las variaciones de  $S_{h+}$  pueden provocar fluctuaciones acentuadas en el valor de pH que lleven a errores en la simulación.

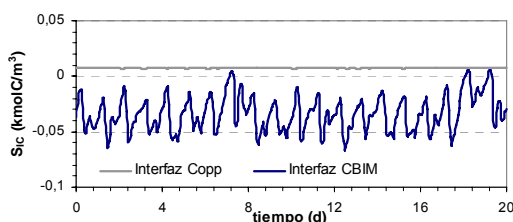


Figura 3.15.  $S_{IC}$  a la salida del interfaz  $ASMI \rightarrow ADM1$

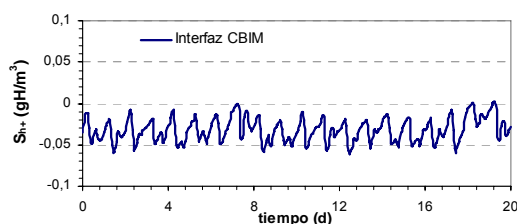


Figura 3.16.  $S_{h+}$  a la salida del interfaz  $ASMI \rightarrow ADM1$

Por lo tanto, la utilización de las interfaces CBIM requiere, para cada caso de estudio, una evaluación continua de los flujos másicos de los componentes del

modelo destino y una reescritura de las fracciones másicas y conversiones hasta que quede garantizado el comportamiento correcto de la interfaz. Lógicamente, esta restricción es muy difícil de garantizar para cualquier escenario dinámico.

Esta limitación, queda totalmente superada con la utilización del modelo BSM2 PWM construido en el Apartado 3.3, ya que en este caso, el modelo queda constituido mediante la conexión directa de los flujos másicos de entrada y salida de los diferentes modelos de proceso unitario sin necesidad de recurrir a interfaces entre los modelos de procesos unitarios.

Finalmente debe indicarse que la inclusión de procesos adicionales, por ejemplo los procesos *Sharon-Anammox* para el tratamiento de los retornos procedentes de la digestión anaerobia a la línea de aguas (Volcke et al., 2006), puede llevarse a cabo de forma sencilla mediante la selección de las transformaciones apropiadas y su inclusión en el modelo integrado de EDAR siguiendo el procedimiento propuesto en el Capítulo 2. A modo de ejemplo, en el Capítulo 5 se lleva a cabo la construcción de modelo integrado de EDAR que incluye estos novedosos procesos.

### 3.6 CONCLUSIONES

El modelado integral de una EDAR, incluyendo las interrelaciones entre los distintos modelos de proceso unitario no es una tarea tan sencilla como la simple conexión de éstos.

Por un lado, la propuesta de un *Modelo Único*, facilita la continuidad de la masa pero no es adaptable a las características específicas de la EDAR estudiada. Por otro lado, la propuesta de utilización de *Interfaces* permite la construcción de soluciones a medida pero presenta algunas limitaciones para transformar los componentes garantizando la continuidad de la masa.

En este capítulo se ha construido el modelo integral de un caso de estudio de EDAR estándar que incorpora líneas de agua y fangos denominado BSM2, a partir de la metodología de modelado integral PWM.

El modelo BSM2 PWM ha sido evaluado en diferentes escenarios de simulación y su validez para reproducir los procesos biológicos más comunes en EDAR que incluyen líneas de aguas y fangos ha quedado demostrada.

El modelo BSM2 PWM desarrollado en esta tesis garantiza una continuidad completa en masa elemental y carga en las conexiones entre los modelos de proceso unitario, que no es posible obtener con el modelo integral obtenido con las interfaces propuestas por Copp et al. (2003). Además, la metodología PWM constituye una herramienta general de conexión de cualquier modelo frente a estas interfaces, específicas para los modelos estándar ASM1 y ADM1.

Con respecto a las interfaces CBIM, el modelo BSM2 PWM construido permite garantizar la continuidad de la masa y carga en cualquier condición estacionaria o dinámica de forma directa y sin necesidad de interfaces. Esta continuidad no puede ser siempre garantizada con las interfaces CBIM.

Con respecto a la alternativa del Modelo Único, la metodología de modelado integral propuesta permite la construcción de modelos específicos a la medida de cada EDAR estudiada y posee la capacidad de posibles extensiones en el caso de que se consideren nuevos procesos unitarios.

Por lo tanto, como resultado de las conclusiones extraídas en este análisis, puede afirmarse que la metodología PWM propuesta en esta tesis presenta indudables ventajas frente a las alternativas existentes para la construcción de modelos integrales de EDAR.



## CAPÍTULO 4

# **METODOLOGÍA DE CARACTERIZACIÓN AUTOMÁTICA DEL INFLUENTE**

---

Una síntesis de este capítulo se presenta en:

*Grau P., Beltran S., de Gracia M. and Ayesa E. New mathematical procedure for the automatic estimation of influent characteristics (Aceptado como presentación oral en el Congreso Internacional de Watermatex, Mayo 7-9, 2007, Washington DC-USA y en revisión para la revista Water Science and Technology)*

### **4.1 INTRODUCCIÓN**

La utilización de modelos matemáticos en el tratamiento de aguas residuales o fangos requiere un estudio de calibración previo y realizado de forma rigurosa para garantizar resultados realistas (Roeleveld and van Loosdrecht, 2002). Dentro de la calibración, uno de los aspectos más importantes reside en la adecuada caracterización del agua residual o fango influente. De forma general, la caracterización de un agua residual o fango influente consiste en establecer

una serie de relaciones entre las medidas analíticas realizadas y las concentraciones de los componentes del modelo junto con las composiciones másicas requeridas dependiendo del modelo utilizado (N, P, C, etc.) (Melcer *et al.*, 2003).

En general, la caracterización del influente es una tarea que implica cierta complejidad debido a que, normalmente, las medidas analíticas no proporcionan la suficiente información para determinar el valor numérico del vector de componentes del modelo y sus composiciones másicas. Además, el hecho de que en modelos convencionales de procesos unitarios, algunos componentes representen agrupaciones de diferentes compuestos (por ejemplo  $S_s$ ,  $X_s$ ...etc.), aunque simplifica el modelo, implica un desconocimiento sobre las composiciones másicas elementales de los componentes que dificulta el problema de caracterización. A causa de esta incertidumbre, en la caracterización del influente se suele recurrir a estimaciones basadas en la experiencia (relaciones DQO/SSV, TKN/DQO, etc.), aunque debe tenerse en cuenta que, estrictamente, los valores de estas relaciones dependen del caso de estudio y por tanto su utilización puede provocar una propagación de errores e incertidumbre que lleve a soluciones erróneas.

Frente a las descripciones simplificadas del vector de componentes y sus contenidos en N, P, C etc. (típicamente conocidas como  $i_N$ ,  $i_P$ ,  $i_C$  en los modelos ASM), la descripción de los componentes en base a sus fracciones másicas elementales y densidad de carga tal y como se propone en esta tesis, permite establecer una serie de relaciones unívocas entre las concentraciones de los componentes y las medidas analíticas realizadas que simplifica el problema de la caracterización. Así, relaciones comúnmente utilizadas en la caracterización tales como DQO/SSV, TKN/DQO, etc. pueden calcularse como consecuencia de la descripción en fracciones másicas de los componentes  $\alpha_{E,i}$ , del cálculo de los factores de conversión  $\beta_{E,i}$  y de las relaciones DQO/UM<sub>i</sub> (Sötemann *et al.*, 2005c; Tákcacs and Vanrolleghem, 2006).

En este Capítulo se presenta una nueva metodología de caracterización basada en la descripción de los componentes del modelo en base a sus fracciones másicas y densidad de carga. De acuerdo con esto, el problema de caracterización consiste en determinar, a partir de una serie de medidas analíticas, el valor más adecuado de las concentraciones de los componentes del modelo y las fracciones másicas de todos aquellos que no presenten fórmula estequiométrica fija.

Para resolver el problema de caracterización se ha desarrollado una herramienta informática basada en un algoritmo de optimización que permite estimar el valor de los componentes del modelo y sus fracciones másicas de forma automática, y considerando globalmente toda la información disponible sobre las características del agua residual estudiada. Por lo tanto, con este algoritmo se evita la propagación de errores asociada a los procedimientos secuenciales de caracterización.

Finalmente, a modo de ejemplo, se ha llevado a cabo la caracterización del agua residual de entrada a la EDAR de Galindo (Bilbao).

## **4.2 FUNDAMENTOS: RELACIÓN ENTRE MEDIDAS ANALÍTICAS Y COMPONENTES DEL MODELO**

Tal y como se ha mencionado en el Apartado 4.1, la descripción de los componentes del modelo en base a sus fracciones másicas elementales y densidad de carga, permite establecer una serie de relaciones unívocas entre estos componentes y las medidas analíticas realizadas. Sin embargo, estas relaciones, que constituyen la base de la metodología de caracterización propuesta, dependerán, para cada caso de estudio, del vector de componentes del modelo utilizado. Por lo tanto, con el objetivo de obtener una metodología estándar e independiente del modelo utilizado, tanto las ecuaciones que relacionan componentes con medidas analíticas, como la resolución del problema de caracterización, se han desarrollado en base a la lista de componentes incluida en la LT detallada en el Capítulo 2. Puesto que esta lista de componentes se define como el conjunto de componentes capaz de describir cualquier proceso que tiene lugar en una EDAR, la caracterización basada en la LT permitirá una posterior conversión a los componentes de otros modelos más específicos si fuera necesario. Además, la descripción detallada de los componentes de la LT permite asignarles en la mayoría de los casos fórmulas estequiométricas fijas que reducen la incertidumbre existente en la caracterización.

La Tabla 4.1 muestran una lista de las medidas analíticas comúnmente utilizadas en la caracterización de aguas residuales y fangos, y las ecuaciones matemáticas que relacionan estas medidas con las concentraciones de los componentes incluidos en la LT y sus fracciones másicas. Estas ecuaciones se



expresan mediante las concentraciones de los componentes  $X_i$ , sus factores de conversión  $\beta_{E,i}$  (E/UE<sub>i</sub>) y relaciones  $\gamma_{DOT,i}$  (DOT/UM<sub>i</sub>) calculados a partir de las fracciones másicas y densidad de carga de los componentes.

Tabla 4.1. Relación entre medidas analíticas un componentes del modelo

| Medida analítica                                 | Unidad                 | Ecuaciones que relacionan medidas analíticas y componentes de la LT                                                                                                     |
|--------------------------------------------------|------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| DQO <sub>T</sub> DQO total                       | gDQO/m <sup>3</sup>    | $DQO_T = \sum_{i=11}^{23} X_i + \sum_{i=29}^{40} X_i + \sum_{i=42}^{51} X_i - S_{o2}$                                                                                   |
| DQO <sub>F</sub> DQO filtrada                    | gDQO/m <sup>3</sup>    | $DQO_F = \sum_{i=11}^{23} X_i + \sum_{i=29}^{30} X_i - S_{o2} + K_{X5} \cdot \sum_{i=33}^{35} X_i$                                                                      |
| DQO <sub>P</sub> DQO particulada                 | gDQO/m <sup>3</sup>    | $DQO_P = \sum_{i=31}^{40} X_i + \sum_{i=42}^{51} X_i - K_{X5} \cdot \sum_{i=33}^{35} X_i$                                                                               |
| DQO <sub>F,ef</sub> DQO filtrada en el efluente  | gDQO/m <sup>3</sup>    | $DQO_{F,ef} = \sum_{i=29}^{30} X_i + X_{c1} \cdot f_{si,xc1} + X_{c2} \cdot f_{sp,xc2}$                                                                                 |
| DBO <sub>T</sub> DBO total                       | gDBO/m <sup>3</sup>    | $DBO_T = \sum_{i=11}^{23} X_i + \sum_{i=31}^{40} X_i + \sum_{i=42}^{49} X_i - X_{c1} \cdot (f_{si,xc1} + f_{xi,xc1}) - X_{c2} \cdot (f_{sp,xc2} + f_{xp,xc2}) - S_{o2}$ |
| DBO <sub>t</sub> DBO para tiempo t (5, 20, etc.) | gDBO/m <sup>3</sup>    | $DBO_t = DBO_T \cdot (1 - e^{-K_{DBO} \cdot t})$                                                                                                                        |
| VFA Ácidos grasos de cadena corta                | gDQO/m <sup>3</sup>    | $VFA = \sum_{i=14}^{21} X_i$                                                                                                                                            |
| OD Oxígeno disuelto                              | gOD/m <sup>3</sup>     | $OD = S_{o2}$                                                                                                                                                           |
| Grasas Grasas totales                            | g Grasa/m <sup>3</sup> | $Grasas = S_{fa} \cdot \gamma_{DOT,fa}^{-1} + (X_{li} + X_{c1} \cdot f_{li,xc1} + X_{c2} \cdot f_{li,xc2}) \cdot \gamma_{DOT,li}^{-1}$                                  |
| Grasas <sub>F</sub> Grasas filtradas             | g Grasa/m <sup>3</sup> | $Grasas_F = S_{fa} \cdot \gamma_{fa}^{-1}$                                                                                                                              |
| HT Hidrógeno total                               | g H/m <sup>3</sup>     | $HT = \sum_{i=5}^{54} (\beta_{H,i} \cdot X_i) - \sum_{i=7}^8 (\beta_{H,i} \cdot X_i)$                                                                                   |
| CT Carbono total                                 | g C/m <sup>3</sup>     | $CT = \sum_{i=1}^{54} (\beta_{C,i} \cdot X_i) - S_{co2}$                                                                                                                |
| COT Carbono orgánico total                       | g C/m <sup>3</sup>     | $COT = \sum_{i=11}^{54} (\beta_{C,i} \cdot X_i)$                                                                                                                        |
| CIT Carbono inorgánico total                     | g C/m <sup>3</sup>     | $CIT = S_{hco3=}$                                                                                                                                                       |

|                   |                               |                                     |                                                                                                                                                                                                    |
|-------------------|-------------------------------|-------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| NT                | Nitrógeno total               | g N/m <sup>3</sup>                  | $NT = \sum_{i=1}^{54} (\beta_{N,i} \cdot X_i) - S_{n2} - \sum_{i=7}^8 X_i$                                                                                                                         |
| NT <sub>F</sub>   | Nitrógeno total filtrado      | g N/m <sup>3</sup>                  | $NT_F = \sum_{i=1}^{30} (\beta_{N,i} \cdot X_i) - S_{n2} - \sum_{i=7}^8 X_i + K_{Xs} \cdot \sum_{i=33}^{35} (\beta_{N,i} \cdot X_i)$                                                               |
| N-NO <sub>3</sub> | Nitratos                      | g N/m <sup>3</sup>                  | $N - NO_3^- = S_{no3-}$                                                                                                                                                                            |
| N-NO <sub>2</sub> | Nitritos                      | g N/m <sup>3</sup>                  | $N - NO_2^- = S_{no2-}$                                                                                                                                                                            |
| NKT               | Nitrógeno Khjendal total      | g N/m <sup>3</sup>                  | $NKT = \sum_{i=1}^{54} (\beta_{N,i} \cdot X_i) - S_{no2-} - S_{no3-}$                                                                                                                              |
| NKF               | Nitrógeno Khjendal filtrado   | g N/m <sup>3</sup>                  | $NKF = \sum_{i=1}^{30} (\beta_{N,i} \cdot X_i) - S_{no2-} - S_{no3-} + K_{Xs} \cdot \sum_{i=33}^{35} X_i$                                                                                          |
| N-NH <sub>x</sub> | Nitrógeno amoniacal           | g N/m <sup>3</sup>                  | $N - NH_x = S_{nh3} + S_{nh4+}$                                                                                                                                                                    |
| Alk               | Alcalinidad                   | g CaCO <sub>3</sub> /m <sup>3</sup> | $Alk = 4,17 \cdot S_{hco3-}$                                                                                                                                                                       |
| PT                | Fósforo total                 | g P/m <sup>3</sup>                  | $PT = \sum_{i=1}^{54} (\beta_{P,i} \cdot X_i)$                                                                                                                                                     |
| PT <sub>F</sub>   | Fósforo total filtrado        | g P/m <sup>3</sup>                  | $PT_F = \sum_{i=1}^{30} (\beta_{P,i} \cdot X_i) + K_{Xs} \cdot \sum_{i=33}^{35} X_i$                                                                                                               |
| POT               | Fósforo orgánico total        | g P/m <sup>3</sup>                  | $POT = \sum_{i=1}^{54} (\beta_{P,i} \cdot X_i) - S_{hpo4=} - S_{h2po4-}$                                                                                                                           |
| POF               | Fósforo orgánico filtrado     | g P/m <sup>3</sup>                  | $POF = \sum_{i=1}^{30} (\beta_{P,i} \cdot X_i) - S_{hpo4=} - S_{h2po4-} + K_{Xs}^{[a]} \cdot \sum_{i=33}^{35} X_i$                                                                                 |
| P-PO <sub>4</sub> | Fosfatos                      | g P/m <sup>3</sup>                  | $P - PO_4 = S_{hpo4=} + S_{h2po4-}$                                                                                                                                                                |
| SV                | Sólidos volátiles             | g SV/m <sup>3</sup>                 | $SV = \sum_{i=11}^{24} (X_i \cdot \gamma_{DOT,i}^{-1}) + \sum_{i=29}^{40} (X_i \cdot \gamma_{DOT,i}^{-1}) + \sum_{i=42}^{51} (X_i \cdot \gamma_{DOT,i}^{-1})$                                      |
| SST               | Sólidos suspendidos totales   | g SST/m <sup>3</sup>                | $SST = \sum_{i=31}^{40} (X_i \cdot \gamma_{DOT,i}^{-1}) + \sum_{i=42}^{51} (X_i \cdot \gamma_{DOT,i}^{-1}) + \sum_{i=52}^{54} X_i - K_{Xs} \cdot \sum_{i=33}^{35} (X_i \cdot \gamma_{DOT,i}^{-1})$ |
| SSV               | Sólidos suspendidos volátiles | g SSV/m <sup>3</sup>                | $SSV = \sum_{i=31}^{40} (X_i \cdot \gamma_i^{-1}) + \sum_{i=42}^{51} (X_i \cdot \gamma_i^{-1}) - K_{Xs} \cdot \sum_{i=33}^{35} (X_i \cdot \gamma_i^{-1})$                                          |
| SSF               | Sólidos suspendidos fijos     | g SSF/m <sup>3</sup>                | $SSF = \sum_{i=52}^{54} X_i$                                                                                                                                                                       |
| pH                | pH                            | ----                                | $pH = -\log_{10}(10^{-3} \cdot S_{h+})$                                                                                                                                                            |
| Q                 | Caudal                        | m <sup>3</sup> /d                   | $Q = v_{h2o} \cdot S_{h2o}$                                                                                                                                                                        |

Donde

$K_{Xs}$  : Fracción soluble del sustrato lentamente biodegradable

$K_{DBO}$ : Relación entre  $DBO_T$  y  $DBO_t$

$v_{h_2o}$  : Peso específico del agua ( $m^3/g$ )

- *Cálculo del valor de las medidas analíticas a partir del vector de componentes del modelo*

Tal y como se observa en la Tabla 4.1, la descripción de los componentes del modelo en base a sus fracciones másicas elementales y densidad de carga permite calcular el valor de cualquier medida analítica, o cualquier relación entre ellas ( $DQO_T/SST$ ,  $NKT/DQO_T$ ), a partir de las concentraciones de los componentes y sus fracciones másicas elementales.

Esta correspondencia unívoca permite expresar también el vector de componentes del modelo en cualquier punto de la EDAR mediante el valor de las medidas analíticas más comúnmente utilizadas por los usuarios ( $DQO$ ,  $SSV$ ,  $NTK$ , etc.).

- *Estimación de los componentes del modelo a partir de las medidas analíticas*

El problema inverso, es decir, la estimación del valor numérico del vector de componentes del modelo y de sus fracciones másicas elementales a partir del valor de las medidas analíticas realizadas y de las ecuaciones de la Tabla 4.1, es un típico caso de observación de estado cuya resolución reviste mayor dificultad.

Un caso de especial relevancia en la estimación de las concentraciones del vector de componentes del modelo y fracciones másicas, es la caracterización del influente. En el siguiente apartado, se describen las características más importantes que presenta el problema de caracterización del influente y el método propuesto en este Capítulo para su resolución.

### 4.3 CARACTERIZACIÓN DEL INFLUENTE

La caracterización del influente, entendida como un problema de estimación del vector de componentes y fracciones másicas a partir de un conjunto de medidas analíticas, es una tarea que implica cierta dificultad principalmente por dos motivos. En primer lugar, debido al grado de incertidumbre que presenta el problema ya que las medidas analíticas realizadas no son suficientes para una caracterización completa del agua residual o fango estudiado. Por este motivo, la información experimental debe complementarse con información adicional sobre las características y relaciones esperadas un agua residual o fango urbano. En segundo lugar, debido a las posibles incompatibilidades que pueden presentar los resultados finales causadas por los errores introducidos en estas medidas analíticas.

Por lo tanto, la caracterización del influente puede abordarse como un problema de estimación de una serie de parámetros (concentraciones y fracciones másicas), que están sujetos a ciertas restricciones, expresadas como un sistema de ecuaciones que será indeterminado o incompatible en la mayoría de los casos. Debido a las características que presenta este sistema, su resolución deberá llevarse a cabo teniendo en cuenta el conocimiento del usuario con respecto a los valores típicos de concentraciones y fracciones másicas en aguas residuales y fangos y la fiabilidad de las medidas analíticas realizadas.

A continuación se presentan los parámetros de estimación a determinar en la caracterización (4.3.1), las restricciones que deben cumplir (4.3.2), la información disponible para la estimación (4.3.3), el criterio empleado para resolver el sistema planteado (4.3.4) y el método de resolución desarrollado para llevar a cabo la caracterización del influente (4.3.5).

Tal y como se ha mencionado anteriormente, una vez determinados todos los parámetros de estimación basados en la lista de componentes incluidos en la LT, la caracterización del vector de componentes específico para el modelo considerado puede llevarse a mediante combinaciones lineales de los valores obtenidos.

### 4.3.1 Parámetros de estimación

Los parámetros de estimación  $\hat{\theta}_i$  que deben resolverse en la caracterización de un agua residual o fango de acuerdo con la lista de componentes incluida en la LT, pueden clasificarse del siguiente modo:

- *Parámetros de estimación correspondientes a concentraciones de los componentes*

En la siguiente tabla se incluyen las concentraciones del vector de componentes:

Tabla 4.2. Parámetros de estimación correspondientes a concentraciones

| $\hat{\theta}_i (UE_i)$ |                 |                 |                 |                  |                   |                    |                 |                  |
|-------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|-------------------|--------------------|-----------------|------------------|
| $\hat{S}_{h2o}$         | $\hat{S}_{o2}$  | $\hat{S}_{h+}$  | $\hat{S}_{oh-}$ | $\hat{S}_{hpo4}$ | $\hat{S}_{h2po4}$ | $\hat{S}_{nh4}$    | $\hat{S}_{nh3}$ | $\hat{S}_{co2}$  |
| $\hat{S}_{hco3-}$       | $\hat{S}_{su}$  | $\hat{S}_{aa}$  | $\hat{S}_{fa}$  | $\hat{S}_{hva}$  | $\hat{S}_{va-}$   | $\hat{S}_{hbu}$    | $\hat{S}_{bu-}$ | $\hat{S}_{hpro}$ |
| $\hat{S}_{pro-}$        | $\hat{S}_{hac}$ | $\hat{S}_{ac-}$ | $\hat{S}_{h2}$  | $\hat{S}_{ch4}$  | $\hat{S}_{n2}$    | $\hat{S}_{no2}$    | $\hat{S}_{no3}$ | $\hat{S}_{k+}$   |
| $\hat{S}_{Mg2+}$        | $\hat{S}_I$     | $\hat{S}_P$     | $\hat{X}_{c1}$  | $\hat{X}_{c2}$   | $\hat{X}_{ch}$    | $\hat{X}_{pr}$     | $\hat{X}_{li}$  | $\hat{X}_h$      |
| $\hat{X}_{n1}$          | $\hat{X}_{n2}$  | $\hat{X}_{pao}$ | $\hat{X}_{pha}$ | $\hat{X}_{pp}$   | $\hat{X}_{su}$    | $\hat{X}_{aa}$     | $\hat{X}_{fa}$  | $\hat{X}_{c4}$   |
| $\hat{X}_{pro}$         | $\hat{X}_{ac}$  | $\hat{X}_{h2}$  | $\hat{X}_{an}$  | $\hat{X}_I$      | $\hat{X}_P$       | $\hat{X}_{Me(oh)}$ | $\hat{X}_{MeP}$ | $\hat{X}_{II}$   |

- *Parámetros de estimación de correspondientes a las fracciones máxicas de los componentes que no presentan fórmulas estequiométricas definidas*

También se consideran como parámetros de estimación, las fracciones máxicas de los componentes que no presentan una fórmula estequiométrica definida (Tabla 4.3).

Tabla 4.3. Parámetros de estimación correspondientes a fracciones máxicas

| $\hat{\theta}_i (gE / UM_i)$ |                        |                        |                        |                        |                         |
|------------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|-------------------------|
| $\hat{\alpha}_{C,Si}$        | $\hat{\alpha}_{H,Si}$  | $\hat{\alpha}_{O,Si}$  | $\hat{\alpha}_{N,Si}$  | $\hat{\alpha}_{P,Si}$  | $\hat{\alpha}_{Ch,Si}$  |
| $\hat{\alpha}_{C,Sp}$        | $\hat{\alpha}_{H,Sp}$  | $\hat{\alpha}_{O,Sp}$  | $\hat{\alpha}_{N,Sp}$  | $\hat{\alpha}_{P,Sp}$  | $\hat{\alpha}_{Ch,Sp}$  |
| $\hat{\alpha}_{C,Xc1}$       | $\hat{\alpha}_{H,Xc1}$ | $\hat{\alpha}_{O,Xc1}$ | $\hat{\alpha}_{N,Xc1}$ | $\hat{\alpha}_{P,Xc1}$ | $\hat{\alpha}_{Ch,Xc1}$ |
| $\hat{\alpha}_{C,Xc2}$       | $\hat{\alpha}_{H,Xc2}$ | $\hat{\alpha}_{O,Xc2}$ | $\hat{\alpha}_{N,Xc2}$ | $\hat{\alpha}_{P,Xc2}$ | $\hat{\alpha}_{Ch,Xc2}$ |
| $\hat{\alpha}_{C,Xi}$        | $\hat{\alpha}_{H,Xi}$  | $\hat{\alpha}_{O,Xi}$  | $\hat{\alpha}_{N,Xi}$  | $\hat{\alpha}_{P,Xi}$  | $\hat{\alpha}_{Ch,Xi}$  |
| $\hat{\alpha}_{C,Xp}$        | $\hat{\alpha}_{H,Xp}$  | $\hat{\alpha}_{O,Xp}$  | $\hat{\alpha}_{N,Xp}$  | $\hat{\alpha}_{P,Xp}$  | $\hat{\alpha}_{Ch,Xp}$  |

- *Parámetros de estimación de correspondientes a los coeficientes estequiométricos de desintegración de los componentes complejos  $X_{c1}$  y  $X_{c2}$*

Estos parámetros de estimación corresponden a los coeficientes estequiométricos que, en las transformaciones de desintegración, dividen a los componentes  $X_{c1}$  y  $X_{c2}$  en los diferentes componentes particulados lentamente biodegradables e inertes.

Tabla 4.4. Parámetros de estimación correspondientes a la desintegración de  $X_{c1}$  y  $X_{c2}$

| $\hat{\theta}_i (UE_i / UE_i)$ |                    |                     |                     |                     |
|--------------------------------|--------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| $\hat{f}_{si,Xc1}$             | $\hat{f}_{xi,Xc1}$ | $\hat{f}_{Xch,Xc1}$ | $\hat{f}_{Xpr,Xc1}$ | $\hat{f}_{Xli,Xc1}$ |
| $\hat{f}_{Sp,Xc2}$             | $\hat{f}_{Xp,Xc2}$ | $\hat{f}_{Xch,Xc2}$ | $\hat{f}_{Xpr,Xc2}$ | $\hat{f}_{Xli,Xc2}$ |

- *Parámetros de estimación característicos de los métodos analíticos empleados*

Las constantes que determinan la fracción soluble del sustrato lentamente biodegradable ( $K_{XS}$ ) y la relación entre la  $DBO_t$  y  $DBO_T$  ( $K_{DBO}$ ), utilizadas en las ecuaciones presentadas en la Tabla 4.1, forman parte del conjunto de parámetros de estimación a resolver en la caracterización del influente.

#### 4.3.2 Restricciones consideradas

Las restricciones consideradas en la caracterización del agua residual y fangos se clasifican en restricciones absolutas y restricciones de rango. Las restricciones absolutas son aquellas que se expresan mediante igualdades. Las restricciones de rango son aquellas que delimitan los valores máximos y mínimos de los parámetros de estimación  $\hat{\theta}_i$ . A continuación se detallan las restricciones consideradas en este Capítulo para la caracterización del influente.

- *Restricciones absolutas*

Las restricciones absolutas que deben cumplir los parámetros de estimación son las siguientes:

- Los parámetros de estimación asociados a las concentraciones de los componentes que pertenecen a un par ácido-base deben cumplir el equilibrio químico en función del valor de pH.

Tabla 4.5. Restricciones correspondientes a equilibrios químicos

| $K_{a,i}$ : Constante de acidez del ácido $i$                        |                                                                      |
|----------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|
| $K_{a,H2O} = \hat{S}_{oh-} \cdot \hat{S}_{h+}$                       | $\hat{S}_{hva} \cdot K_{a,VA} = \hat{S}_{va-} \cdot \hat{S}_{h+}$    |
| $\hat{S}_{h2po4} \cdot K_{a,IP} = \hat{S}_{hpo4} \cdot \hat{S}_{h+}$ | $\hat{S}_{hbu} \cdot K_{a,BU} = \hat{S}_{bu-} \cdot \hat{S}_{h+}$    |
| $\hat{S}_{nh4} \cdot K_{a,IN} = \hat{S}_{nh3} \cdot \hat{S}_{h+}$    | $\hat{S}_{hpro} \cdot K_{a,PRO} = \hat{S}_{pro-} \cdot \hat{S}_{h+}$ |
| $\hat{S}_{co2} \cdot K_{a,IC} = \hat{S}_{hco3-} \cdot \hat{S}_{h+}$  | $\hat{S}_{hac} \cdot K_{a,AC} = \hat{S}_{ac-} \cdot \hat{S}_{h+}$    |

- La suma de los parámetros de estimación asociados a las fracciones másicas y coeficientes de desintegración de los componentes complejos (Tabla 4.3 y Tabla 4.4) debe ser la unidad.

Tabla 4.6. Restricciones correspondientes a las fracciones másicas y coeficientes de desintegración

$$\hat{\alpha}_{C,i} + \hat{\alpha}_{H,i} + \hat{\alpha}_{O,i} + \hat{\alpha}_{N,i} + \hat{\alpha}_{P,i} = 1$$

$$\hat{f}_{Si,Xc1} + \hat{f}_{Xi,Xc1} + \hat{f}_{Xch,Xc1} + \hat{f}_{Xpr,Xc1} + \hat{f}_{Xli,Xc1} = 1$$

$$\hat{f}_{Sp,Xc2} + \hat{f}_{Xp,Xc2} + \hat{f}_{Xch,Xc2} + \hat{f}_{Xpr,Xc2} + \hat{f}_{Xli,Xc2} = 1$$

- La composición másica de los componentes complejos  $X_{c1}$  y  $X_{c2}$  debe ser coherente con la composición másica de los componentes particulados que los constituyen.

Tabla 4.7. Restricciones correspondientes las composiciones másicas de  $X_{c1}$  y  $X_{c2}$ 

$$\hat{X}_{c1} \cdot \hat{\beta}_{E,Xc1} = \hat{f}_{si,Xc1} \cdot \hat{S}_i \cdot \hat{\beta}_{E,Si} + \hat{f}_{Xi,Xc1} \cdot \hat{X}_i \cdot \hat{\beta}_{E,Xi} + \hat{f}_{Xch,Xc1} \cdot \hat{X}_{ch} \cdot \hat{\beta}_{E,Xch} + \hat{f}_{Xpr,Xc1} \cdot \hat{X}_{pr} \cdot \hat{\beta}_{E,Xpr} + \hat{f}_{Xli,Xc1} \cdot \hat{X}_{li} \cdot \hat{\beta}_{E,Xli}$$

$$\hat{X}_{c2} \cdot \hat{\beta}_{E,Xc2} = \hat{f}_{sp,Xc2} \cdot \hat{S}_p \cdot \hat{\beta}_{E,Sp} + \hat{f}_{Xp,Xc2} \cdot \hat{X}_p \cdot \hat{\beta}_{E,Xp} + \hat{f}_{Xch,Xc2} \cdot \hat{X}_{ch} \cdot \hat{\beta}_{E,Xch} + \hat{f}_{Xpr,Xc2} \cdot \hat{X}_{pr} \cdot \hat{\beta}_{E,Xpr} + \hat{f}_{Xli,Xc2} \cdot \hat{X}_{li} \cdot \hat{\beta}_{E,Xli}$$

- *Restricciones de rango*

Las restricciones de rango que deben cumplir los parámetros de estimación son las siguientes:

- Las concentraciones estimadas de los componentes deben ser mayor o igual que cero ( $\hat{X}_i \geq 0$ ).
- Las fracciones másicas elementales estimadas deben ser mayor o igual que cero y menor o igual que uno ( $0 \leq \hat{\alpha}_{E,i} \leq 1$ ).

### **4.3.3 Parámetros y variables de información**

Los *parámetros y variables de información* aportan toda la información a partir de la cual se lleva a cabo la caracterización de un agua residual o fango influente. Esta información puede clasificarse en dos grupos:

- *Variables medibles  $y_k$*

Las variables medibles son el conjunto de medidas analíticas realizadas sobre el agua o fango que se desea caracterizar. Cada variable medible  $y_k$  aporta una ecuación al sistema.

- *Parámetros de estimación inicial  $\hat{\theta}_{i0}$*

Los parámetros de estimación inicial  $\hat{\theta}_{i0}$  son una serie de valores asignados inicialmente a los parámetros de estimación  $\hat{\theta}_i$ , que constituyen una solución coherente con las características de un agua residual o fango típicos. Los parámetros de estimación inicial establecen el punto de partida a partir del cual se resuelve el sistema de ecuaciones planteado en la caracterización.

### **4.3.4 Criterio de resolución**

De acuerdo con las características que presenta el sistema planteado para la caracterización del influente, la resolución de los parámetros de estimación debe llevarse a cabo en base a dos criterios. En primer lugar, los valores de las variables medibles calculados a partir de los valores de  $\hat{\theta}_i$  obtenidos y las ecuaciones de la Tabla 4.1, deben ser coherentes con las variables medibles  $y_k$  reales, teniendo en cuenta el posible error que la medida analítica introduce. En segundo lugar, los valores de  $\hat{\theta}_i$  obtenidos deben ser próximos a la estimación



inicial  $\hat{\theta}_{i0}$ , siempre y cuando, esta estimación inicial sea coherentes con caracterizaciones típicas de un agua residual influente urbana, fangos provenientes del decantador primario o secundario, etc.

Por lo tanto, en base a estos dos criterios, el sistema planteado para la caracterización está basado en una adaptación progresiva de la estimación inicial hasta que los parámetros de estimación obtenidos sean capaces de reproducir las medidas analíticas realizadas en el agua o fango influente. De acuerdo con esto, el problema de caracterización puede resolverse mediante la minimización de la siguiente función objetivo mixta  $\hat{\phi}(\hat{\theta})$ :

$$\phi(\hat{\theta}) = C \cdot \underbrace{\sum_{k=1}^m \frac{1}{ER} \cdot \left( \frac{y_k - \hat{y}_k(\hat{\theta})}{y_k} \right)^2}_{\phi_1(\hat{\theta})} + \underbrace{\sum_{i=1}^n \mu_i \cdot \left( \frac{\hat{\theta}_i - \theta_{i,0}}{\theta_{i,0}} \right)^2}_{\phi_2(\hat{\theta})} \quad (4.1)$$

Donde

$C$ : Factor de ponderación

$m$ : número de variables medibles

$y_k$ : Variable medible

$\hat{y}_k(\hat{\theta})$ : Variable medible  $k$  calculada a partir de los parámetros estimados

$ER$ : Error relativo (%) de la variable medible  $k$

$n$ : número de parámetros de estimación

$\hat{\theta}_i$ : Parámetro  $i$  de estimación

$\theta_{i,0}$ : Parámetro  $i$  en la estimación inicial

$\mu_i$ : Factor de rigidez del parámetro de estimación  $i$

Tal y como se observa en la ecuación (4.1), la función objetivo  $\phi(\hat{\theta})$  consta de dos términos  $\phi_1(\hat{\theta})$  y  $\phi_2(\hat{\theta})$ .

El primer término  $\phi_1(\hat{\theta})$  introduce el error residual cuadrático provocado por la diferencia que existe entre las variables medidas obtenidas experimentalmente  $y_k$  y las calculadas a partir del valor de los parámetros estimados  $\hat{y}_k(\hat{\theta})$  de acuerdo con las ecuaciones de la Tabla 4.1.

$$\phi_1(\hat{\theta}) = k_I \cdot \sum_{k=1}^m \frac{I}{ER} \cdot \left( \frac{y_k - \hat{y}_k(\hat{\theta})}{y_k} \right)^2 \quad (4.2)$$

Tal y como se observa en la ecuación (4.2), el efecto del error residual cuadrático introducido en la función objetivo  $\phi(\hat{\theta})$  por cada una de las variables medibles puede ponderarse mediante su error relativo  $ER$ . El  $ER$  de una determinada variable medible  $y_k$  indica la tendencia a la dispersión que presenta esta variable de forma que, a mayores valores de  $ER_k$ , menor fiabilidad presenta el valor de esta variable medible  $y_k$ . La introducción del término  $ER$  en el denominador de la ecuación (4.2), permite que las variables medibles menos fiables tengan una menor influencia en la minimización de la función objetivo  $\phi(\hat{\theta})$ . Un valor alto de  $\phi_1(\hat{\theta})$ , refleja un alto grado de incompatibilidad de la estimación con las medidas analíticas realizadas.

El segundo término  $\phi_2(\hat{\theta})$  introduce el error residual cuadrático provocado por la diferencia entre los parámetros en la estimación inicial  $\hat{\theta}_{i,0}$  y los parámetros estimados  $\hat{\theta}_i$ .

$$\phi_2(\hat{\theta}) = \sum_{i=1}^n \mu_i \left( \frac{\hat{\theta}_i - \hat{\theta}_{i,0}}{\hat{\theta}_{i,0}} \right)^2 \quad (4.3)$$

La incorporación del segundo término  $\phi_2(\hat{\theta})$  permite considerar el efecto de la distancia existente entre  $\hat{\theta}_{i,0}$  y la solución obtenida  $\hat{\theta}_i$  en la función objetivo global  $\phi(\hat{\theta})$ .

El factor de rigidez  $\mu_i$  definido para cada uno de los parámetros de estimación permite asignar de forma específica el grado de movilidad de cada  $\hat{\theta}_i$  frente a su correspondiente  $\hat{\theta}_{i,0}$ . Tal y como se observa en la ecuación (4.3), una  $\mu_i$  igual a cero implica que el error cuadrático debido la distancia entre  $\hat{\theta}_i$  y  $\hat{\theta}_{i,0}$  no influye en la minimización de  $\phi(\hat{\theta})$  y por tanto el valor de  $\hat{\theta}_i$  puede tomar valores totalmente diferentes de  $\hat{\theta}_{i,0}$ . A medida que aumenta  $\mu_i$  para un determinado parámetro de estimación  $\hat{\theta}_i$ , su distancia a  $\theta_{i,0}$  va teniendo mayor influencia en la minimización de  $\phi(\hat{\theta})$  hasta llegar a un valor máximo en el que el efecto del movimiento de  $\hat{\theta}_i$  en la función objetivo es tan grande que se imposibilita su variación. Un factor de rigidez para un determinado  $\hat{\theta}_i$  igual a este valor máximo, por lo tanto, implica que éste deja de ser parámetro de estimación en el problema de la caracterización. El considerar  $\mu_i$  iguales al valor máximo en ciertos parámetros de estimación permite simplificar el problema de

caracterización en casos concretos en los que se sabe, con toda probabilidad, que las concentraciones o fracciones máxicas de algunos componentes no van a presentar ninguna variación con respecto a la estimación inicial.

Por lo tanto, la incorporación de los dos términos  $\phi_1(\hat{\theta})$  y  $\phi_2(\hat{\theta})$  en la función objetivo mixta  $\phi(\hat{\theta})$  permite que, el vector de parámetros de estimación que minimizan esta función objetivo, sean el resultado de un compromiso entre una reducción de los errores residuales entre las variables medibles reales  $y_k$  y estimadas  $\hat{y}_k(\hat{\theta})$  y la proximidad a la estimación inicial.

Es importante recalcar que la utilización de una función objetivo mixta  $\phi(\hat{\theta})$ , frente a la utilización de una función objetivo que incluyera únicamente el término  $\phi_1(\hat{\theta})$ , permite garantizar la obtención de una solución en un sistema que si no incluyera  $\phi_2(\hat{\theta})$ , sería generalmente indeterminado. Además, la presencia de  $\phi_1(\hat{\theta})$  permite que esta solución se adecúe a la caracterización más idónea para cada caso de estudio.

Una vez detallada la función objetivo mixta  $\phi(\hat{\theta})$  (ecuación (4.1)), es importante indicar que la utilización de ésta, frente a la utilización de una función objetivo que incluyera únicamente el error residual cuadrático entre las variables medibles estimadas  $\hat{y}_k(\hat{\theta})$  y reales  $y_k$  ( $\phi_1(\hat{\theta})$ ), permite la obtención de una solución en un sistema indeterminado (sobretudo cuando se disponen de pocas medidas experimentales) y además permite que esta solución se adecue a la caracterización estándar más idónea para cada caso de estudio.

Por último, el factor  $C$  introducido en la función objetivo global  $\phi(\hat{\theta})$  permite ponderar cuál de los dos términos  $\phi_1(\hat{\theta})$  o  $\phi_2(\hat{\theta})$  debe tener mayor influencia en la minimización de la función objetivo global  $\phi(\hat{\theta})$ . De esta forma, un aumento en el valor de  $C$  implica una mayor sensibilidad de la función objetivo global  $\phi(\hat{\theta})$  al error cuadrático introducido en el término  $\phi_1(\hat{\theta})$ , y por tanto la solución óptima estará caracterizada por una mayor similitud entre las variables medibles reales  $y_k$  y estimadas  $\hat{y}_k(\hat{\theta})$  a costa de un mayor alejamiento de los parámetros estimados  $\hat{\theta}_i$  de la estimación inicial  $\hat{\theta}_{i0}$ .

#### **4.3.5 Método de minimización de la función objetivo**

Una vez determinada la función objetivo mixta  $\phi(\hat{\theta})$ , el problema de encontrar los valores óptimos de los parámetros de estimación  $\hat{\theta}_i$  queda reducido a la resolución matemática de un problema de optimización no lineal. La

minimización de  $\phi(\hat{\theta})$  puede llevarse a cabo, al igual que la mayoría de los protocolos de caracterización del influente, mediante un procedimiento secuencial basado en una serie de pasos sucesivos, en el que, a partir de los parámetros y variables de información y de las ecuaciones incluidas en la Tabla 4.1, pueden estimarse de forma sucesiva los valores de óptimos de  $\hat{\theta}_i$ . La caracterización del influente llevada a cabo de forma secuencial, sin embargo, implica una propagación del error cometido en las medidas analíticas que puede llevar en algunos casos a resultados finales erróneos e incompatibles.

Por tanto, frente a la resolución de  $\hat{\theta}_i$  de forma secuencial, en este apartado se propone el desarrollo de una herramienta informática de caracterización para la resolución de  $\hat{\theta}_i$ , basada en la minimización automática de  $\phi(\hat{\theta})$  mediante un algoritmo de optimización. Este algoritmo de optimización incorpora un procedimiento iterativo (Figura 4.1) que, para cada iteración lleva a cabo los siguientes pasos.

1. Estimación del vector de parámetros que minimizan la función de coste mixta  $\phi(\hat{\theta})$  utilizando el algoritmo de optimización GRG2 (Generalized Reduced Gradient algorithm).
2. Asignación de la nueva solución obtenida como estimación inicial de la siguiente iteración.
3. Evaluación de la validez de la solución obtenida a partir del cálculo de errores residuales ( $\phi_1(\hat{\theta})$ ).

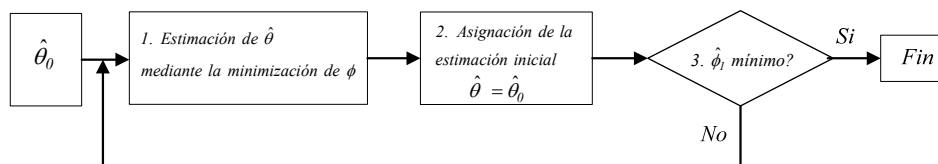


Figura 4.1. Esquema del algoritmo de optimización

Es importante señalar que el paso 2 elimina el efecto de  $\phi_2(\hat{\theta})$  para la siguiente iteración de forma que la nueva solución obtenida estará algo más alejada del punto inicial pero se ajustará mejor al valor de las variables medibles  $y_k$ . La validez de la solución encontrada y el criterio de terminación del procedimiento iterativo están basados en la imposibilidad de reducir el término  $\phi_1(\hat{\theta})$  (4.4).

$$\left| \phi_{l,n}(\hat{\theta}) - \phi_{l,n-1}(\hat{\theta}) \right| < \varepsilon \quad (4.4)$$

Donde

$\phi_{l,n}(\hat{\theta})$  : Valor de  $\phi_l(\hat{\theta})$  en el paso de iteración  $n$

$\phi_{l,n-1}(\hat{\theta})$  : Valor de  $\phi_l(\hat{\theta})$  en el paso de iteración anterior  $n-1$

Como conclusión, puede afirmarse que a partir de este procedimiento se obtienen caracterizaciones de aguas residuales y fangos lo más similares posibles a la estimación inicial, y que mejor se ajustan a las medidas experimentales. Además, esta herramienta puede utilizarse para un rango amplio de información sin problemas de convergencia. Sin embargo, debe indicarse que la posibilidad de encontrar mínimos locales no deseados no está completamente eliminada. Una apropiada estimación del factor de ponderación  $C$  eliminará generalmente este problema.

La herramienta de caracterización se ha implantado en la plataforma informática Microsoft Excel®. La elección de esta herramienta ha sido debida a la fácil conexión que en muchos casos ofrece ésta con modelos de simulación dinámica, y por su capacidad de incorporar la herramienta Premium Solver Platform®, que posee una robusta implantación del algoritmo *GRG2* utilizado en la optimización de la función objetivo (Nevov and Fylstra, 2003).

#### **4.4 CASO DE APLICACIÓN: CARACTERIZACIÓN DEL AGUA RESIDUAL INFLUENTE A LA EDAR DE GALINDO-BILBAO**

Como ejemplo de la metodología de caracterización propuesta, en este apartado se presenta la caracterización del agua residual influente a la EDAR de Galindo-Bilbao. Las características de esta EDAR se describen en el Capítulo 5.

Esta caracterización se ha llevado a cabo a partir de medidas analíticas realizadas en una campaña experimental realizada en los años 92/93 que tuvo como objetivo un diseño óptimo de la EDAR, que fue construida en años posteriores.

#### 4.4 Caso de aplicación: Caracterización del agua residual influente a la EDAR de Galindo-Bilbao175

La caracterización del agua residual se ha llevado a cabo mediante la herramienta de caracterización desarrollada e implantada en la plataforma Microsoft Excel® que incorpora el algoritmo de optimización automática descrito en la Figura 4.1. A continuación se detallan los parámetros y variables de información disponibles en esta caracterización, los valores de los parámetros de la función objetivo empleados y los resultados obtenidos.

##### 4.4.1 Parámetros y variables de información

Los parámetros y variables de información con respecto a las medidas analíticas disponibles y a la estimación inicial se detallan a continuación.

- *Variables medibles en la EDAR de Galindo*

Los valores de las medidas analíticas obtenidas durante la campaña experimental realizada en los años 92/93 se muestran en la Tabla 4.8.

Tabla 4.8. Medidas analíticas realizadas en los años 92/93

| Medidas           |                     | 7-18 Sept (92) | 2-16 Nov (92) | 1-13 Feb (93) | Valor medio   |
|-------------------|---------------------|----------------|---------------|---------------|---------------|
| Temp              | °C                  | 20,2           | 14,5          | 13            | <b>15,90</b>  |
| pH                | ---                 | 7,7            | 7,8           | 8,2           | <b>7,90</b>   |
| DOQ <sub>T</sub>  | gDQO/m <sup>3</sup> | 322            | 267           | 426           | <b>338,33</b> |
| DQO <sub>f</sub>  | gDQO/m <sup>3</sup> | 111            | 78            | 160           | <b>116,33</b> |
| SST               | gSST/m <sup>3</sup> | 125            | 112           | 141           | <b>126,00</b> |
| SSV               | gSSV/m <sup>3</sup> | 105            | 97            | 121           | <b>107,67</b> |
| DBO <sub>T</sub>  | gDBO/m <sup>3</sup> | 124            | 115           | 197           | <b>145,33</b> |
| DBO <sub>f</sub>  | gDBO/m <sup>3</sup> | 41             | 32            | 69            | <b>47,33</b>  |
| N-NO <sub>x</sub> | gN/m <sup>3</sup>   | 0,8            | 1,5           | 0,2           | <b>0,83</b>   |
| TKN <sub>T</sub>  | gN/m <sup>3</sup>   | 34,9           | 31,8          | 49,4          | <b>38,70</b>  |
| TKN <sub>F</sub>  | gN/m <sup>3</sup>   | 28,9           | 23,7          | 41,4          | <b>31,33</b>  |
| N-NH <sub>4</sub> | gN/m <sup>3</sup>   | 27             | 22,6          | 36,5          | <b>28,70</b>  |
| Alcalinidad       | eqV/m <sup>3</sup>  | 4,5            | 4,2           | 5             | <b>4,57</b>   |
| PT                | gP/m <sup>3</sup>   | 8,1            | 6,9           | 9,1           | <b>8,03</b>   |
| P-PO <sub>4</sub> | gP/m <sup>3</sup>   | 5,6            | 4,7           | 6,4           | <b>5,57</b>   |

- *Parámetros de estimación inicial*

La estimación inicial  $\hat{\theta}_0$  propuesta de forma general para la caracterización de aguas residuales urbanas con concentraciones medias, está basada en la caracterización del influente al tratamiento biológico propuesta en el modelo ASM2 (Henze *et al.*, 2000) y, para el caso de las fracciones másicas de algunos componentes, en el modelo RWQM1 (Reichert *et al.*, 2001).

De la caracterización propuesta en el ASM2 se han obtenido las concentraciones de todos los componentes y las fracciones másicas de N y P de todos aquellos que no presentan una fórmula estequiométrica determinada. Las fracciones másicas del H y O de estos componentes, se han obtenido del modelo RWQM1. Las concentraciones de fósforo inorgánico, nitrógeno inorgánico y alcalinidad dadas en la caracterización del ASM2, se han distribuido entre las correspondientes parejas de ácido base conjugada asumiendo un pH igual a 7. El sustrato orgánico rápidamente biodegradable, en primer lugar se ha dividido entre VFA y monómeros de acuerdo con las concentraciones de sustrato fermentable y fermentado dados en el modelo ASM2. Posteriormente, se ha determinado la concentración de  $S_{aa}$  a partir del contenido en N en la  $S_S$  y el resto de concentraciones de los componentes fácilmente biodegradables se ha calculado de forma equitativa de acuerdo con la  $DQO_F$  restante. Igualmente, en el caso del sustrato lentamente biodegradable ( $X_S$  en el ASM2), la fracción correspondiente a  $X_{pr}$  se ha calculado a partir del contenido en N de la  $X_S$  y las concentraciones de  $X_{ch}$  y  $X_{li}$  se han distribuido equitativamente de acuerdo con la  $DQO_P$  restante. Lógicamente, puesto en este caso de estudio se trata de caracterizar un agua residual influente, las concentraciones de la biomasa anaerobia ( $X_{su}$ ,  $X_{aa}$ ,  $X_{fa}$ , etc.), componentes complejos ( $X_{c1}$  y  $X_{c2}$ ) y componentes inertes productos de lisis de biomasa ( $X_p$ ,  $S_p$ ) se han considerado nulos. Las fracciones másicas de los componentes  $X_{c1}$  con sus respectivos fraccionamientos a los componentes particulados ( $f_{Si.Xc1}$ ,  $f_{Xi.Xc1}$ , etc.) y las fracciones másicas de  $X_{c2}$  con sus fraccionamientos ( $f_{Sp.Xc2}$ ,  $f_{Xp.Xc2}$ , etc.) se han obtenido de (Miron *et al.*, 2000) y (Pavlostathis, 1985) respectivamente. Por último los parámetros  $K_{SX}$  y  $K_{DBO}$  característicos del método analítico se han fijado en un valor de cero.





Tabla 4.10. Estimación inicial correspondiente a fraccionamientos de  $X_{c1}$  y  $X_{c2}$ 

|                    |      |                    |     |                     |       |                     |       |                     |       |
|--------------------|------|--------------------|-----|---------------------|-------|---------------------|-------|---------------------|-------|
| $\hat{f}_{si,Xc1}$ | 0.04 | $\hat{f}_{xi,Xc1}$ | 0.3 | $\hat{f}_{xch,Xc1}$ | 0.33  | $\hat{f}_{xpr,Xc1}$ | 0.16  | $\hat{f}_{xli,Xc1}$ | 0.17  |
| $\hat{f}_{sp,Xc2}$ | 0.1  | $\hat{f}_{xp,Xc2}$ | 0.1 | $\hat{f}_{xch,Xc2}$ | 0.104 | $\hat{f}_{xpr,Xc2}$ | 0.664 | $\hat{f}_{xli,Xc2}$ | 0.032 |

#### 4.4.2 Definición de los parámetros de la función objetivo

De acuerdo con los parámetros y variables de información disponibles, a continuación se definen los parámetros utilizados en la minimización de la función objetivo en esta caracterización.

- *Errores relativos (ER) de las variables medibles*

Los valores de *ER* dependen del tipo de medida analítica, del método seguido en su medición y del rango de valores en el que se encuentra una determinada medida. De acuerdo con *Standard Methods*, (1995) los *ER* para las medidas analíticas realizadas en la EDAR de Galindo durante la campaña experimental se presentan en la Tabla 4.11.

Tabla 4.11. Errores relativos de las medidas analíticas realizadas en la caracterización del agua influente a la EDAR de Galindo

| Variable Medible  | ER (%) | Variable Medible  | ER (%) |
|-------------------|--------|-------------------|--------|
| DQO <sub>T</sub>  | 7      | N-NH <sub>x</sub> | 1      |
| DQO <sub>F</sub>  | 10     | PT                | 6      |
| DBO <sub>T</sub>  | 15     | P-PO <sub>4</sub> | 6      |
| DBO <sub>F</sub>  | 19     | SST               | 10     |
| N-NO <sub>x</sub> | 25     | SSV               | 6      |
| NKT               | 2      | pH                | 1      |
| NKF               | 6      | Alcalinidad       | 12     |

- *Grado de rigidez de los parámetros de estimación  $\mu_i$*

El grado de rigidez  $\mu_i$  para cada uno de los parámetros estimados  $\hat{\theta}_i$  debe ser determinado por el usuario en cada caso de estudio dependiendo de la movilidad que se le quiera dar a  $\hat{\theta}_i$  con respecto a su estimación inicial  $\hat{\theta}_{i0}$ . En la herramienta de caracterización desarrollada, el rango de valores entre los que puede oscilar  $\mu_i$  está delimitado entre los valores de 0 y 1000.

Para este caso de estudio, puesto que se trata de caracterizar un agua residual influente, a los parámetros de estimación correspondientes a las concentraciones de productos de lisis de biomasa ( $S_p$  y  $X_p$ ) con sus respectivas fracciones másicas, a las concentraciones de biomasa anaerobia y a las concentraciones de componentes complejos ( $X_{c1}$ ,  $X_{c2}$ ) con sus respectivos fraccionamientos y fracciones másicas se les ha asignado un valor de  $\mu_i$  igual al máximo y por tanto, dejan de considerarse parámetros de estimación. Además, de forma general, se ha considerado que las concentraciones de todos los componentes pueden presentar una mayor variabilidad con respecto a la estimación inicial que las fracciones másicas de los componentes inertes. Por este motivo se ha asignado un grado de rigidez de 1 en el caso de las concentraciones y un grado de rigidez de 100 para el caso de las fracciones másicas de los componentes inertes. En este punto, por tanto, es importante señalar la relevancia de los análisis másicos de los componentes inertes en metodologías de caracterización basadas en análisis estequiométricos.

- *Factor de ponderación C*

El factor  $C$ , tal y como se ha mencionado anteriormente, debe estimarse de forma adecuada para evitar posibles soluciones que, aunque cumplen el criterio de terminación planteado en la Ecuación (4.4) no son lógicas desde un punto de vista físico. El valor de  $C$  en este estudio de caracterización se ha fijado en 0,1. En el siguiente apartado se muestran de forma comparativa y se discuten los resultados obtenidos cuando el factor de ponderación  $C$  toma valores de 0,1, 1 y 10.

#### **4.4.3 Resultados obtenidos**

La Tabla 4.12 presenta los parámetros de estimación obtenidos  $\hat{\theta}$  a partir del algoritmo de optimización descrito en el Apartado 4.3.5. Estos resultados se muestran de forma comparativa con la estimación inicial  $\hat{\theta}_0$  y cuando el factor de ponderación toma valores de 0,1, 1 y 10.

Igualmente, en la Tabla 4.13 se presentan de forma comparativa los resultados obtenidos para las medidas analíticas estimadas y las diferencias con respecto a los valores reales.

Tabla 4.12. Parámetros de estimación obtenidos

| $i$          | $\hat{\theta}_{i0}$ | $\hat{\theta}_i$    |                     |                     | $i$             | $\hat{\theta}_{i0}$ | $\hat{\theta}_i$ |       |        |
|--------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|-----------------|---------------------|------------------|-------|--------|
|              |                     | C = 0,1             | C = 1               | C = 10              |                 |                     | C = 0,1          | C = 1 | C = 10 |
| $S_{o2}$     | 0                   | 0                   | 0                   | 0                   | $S_{no3-}$      | 0                   | 1,15             | 1,15  | 1,15   |
| $S_{h+}$     | $1,0 \cdot 10^{-4}$ | $1,8 \cdot 10^{-5}$ | $1,8 \cdot 10^{-5}$ | $1,8 \cdot 10^{-5}$ | $S_I$           | 30                  | 36,5             | 34,6  | 31,6   |
| $S_{oh-}$    | $5,6 \cdot 10^{-5}$ | $3,1 \cdot 10^{-4}$ | $3,1 \cdot 10^{-4}$ | $3,1 \cdot 10^{-4}$ | $X_{ch}$        | 54,6                | 44,7             | 42,2  | 39,3   |
| $S_{hpo4=}$  | 1,37                | 3,99                | 4,01                | 4,00                | $X_{pr}$        | 30                  | 29,6             | 53,3  | 75,7   |
| $S_{h2po4-}$ | 2,25                | 1,17                | 1,17                | 1,16                | $X_{li}$        | 20,2                | 29,8             | 28,1  | 26,2   |
| $S_{nh4+}$   | 15,9                | 24,3                | 24,3                | 24,3                | $X_h$           | 50,1                | 42,1             | 13,3  | 0,328  |
| $S_{nh3}$    | 0,05                | 0,44                | 0,44                | 0,44                | $X_I$           | 25,0                | 36,4             | 53,8  | 65,4   |
| $S_{co2}$    | 14,6                | 0,54                | 0,54                | 0,54                | $X_{II}$        | 40,5                | 15,4             | 12,8  | 14,8   |
| $S_{hco3-}$  | 60                  | 12,5                | 12,5                | 12,5                | $\alpha_{C,Si}$ | 0,531               | 0,531            | 0,524 | 0,504  |
| $S_{su}$     | 11,6                | 12,1                | 12,7                | 12,9                | $\alpha_{H,Si}$ | 0,075               | 0,075            | 0,074 | 0,073  |
| $S_{aa}$     | 6,75                | 6,52                | 5,06                | 0,76                | $\alpha_{O,Si}$ | 0,351               | 0,351            | 0,350 | 0,360  |
| $S_{fa}$     | 11,6                | 12,1                | 12,7                | 12,9                | $\alpha_{N,Si}$ | 0,027               | 0,027            | 0,026 | 0,025  |
| $S_{hva}$    | 0,036               | $6,5 \cdot 10^{-3}$ | $6,7 \cdot 10^{-3}$ | $6,8 \cdot 10^{-3}$ | $\alpha_{P,Si}$ | 0,016               | 0,016            | 0,024 | 0,037  |
| $S_{va-}$    | 4,96                | 5,04                | 5,23                | 5,27                | $\alpha_{C,Xi}$ | 0,64                | 0,64             | 0,64  | 0,71   |
| $S_{hbu}$    | 0,033               | $5,9 \cdot 10^{-3}$ | $6,1 \cdot 10^{-3}$ | $6,3 \cdot 10^{-3}$ | $\alpha_{H,Xi}$ | 0,075               | 0,075            | 0,077 | 0,116  |
| $S_{bu-}$    | 4,96                | 5,04                | 5,24                | 5,28                | $\alpha_{O,Xi}$ | 0,238               | 0,238            | 0,226 | 0,139  |
| $S_{hpro}$   | 0,037               | $6,8 \cdot 10^{-3}$ | $7,0 \cdot 10^{-3}$ | $7,1 \cdot 10^{-3}$ | $\alpha_{N,Xi}$ | 0,029               | 0,029            | 0,027 | 0      |
| $S_{pro-}$   | 4,96                | 5,04                | 5,24                | 5,28                | $\alpha_{P,Xi}$ | 0,016               | 0,016            | 0,024 | 0,035  |
| $S_{hac}$    | 0,028               | $5,2 \cdot 10^{-3}$ | $5,4 \cdot 10^{-3}$ | $5,4 \cdot 10^{-3}$ | $K_{SY}$        | 0                   | 0,127            | 0,107 | 0,122  |
| $S_{ac-}$    | 4,96                | 5,06                | 5,25                | 5,29                |                 |                     |                  |       |        |

Tal y como se observa en la Tabla 4.2, la utilización de un valor adecuado del parámetro  $C$  es fundamental en la resolución del problema de caracterización. Un aumento del valor de este factor, aunque amplía el rango de búsqueda de mínimos locales del algoritmo de optimización GRG2 y por tanto, la posibilidad de encontrar soluciones más óptimas, implica una menor influencia de la estimación inicial. De esta forma, la solución obtenida presenta una mayor proximidad entre las variables medibles reales y estimadas, pero puede ser una solución ilógica para un agua residual urbana. De acuerdo con esto, en la Tabla 4.12 se observa cómo las concentraciones de los componentes  $X_{pr}$ ,  $X_i$ ,  $X_h$  y  $S_{aa}$  varían de forma notoria y progresiva con respecto al punto inicial, cuando el factor  $C$  toma valores de 1 y 10. Esta variación también se observa en el caso de las fracciones másicas de los componentes inertes para los valores de  $C$  iguales

a 1 ó 10. El hecho de que las fracciones másicas de los componentes inertes presenten variaciones tan acentuadas con respecto a su estado inicial, aún presentando rigideces ( $\mu$ ) muy superiores a las de las concentraciones, pone de manifiesto la gran sensibilidad que presentan estos parámetros de estimación en el problema de la caracterización. Por este motivo, la utilización de unos valores adecuados de las fracciones másicas de los componentes inertes en la estimación inicial y su fijación en el problema de caracterización, aumentando su rigidez o limitando su rango de variabilidad, es clave en la obtención de una estimación adecuada.

Tabla 4.13. Comparación entre medidas reales y estimadas

| Medida analítica  | Valor medido $y_k$ | Rango de variabilidad | Valor estimado $y_k(\hat{\theta})$ |       |        |
|-------------------|--------------------|-----------------------|------------------------------------|-------|--------|
|                   |                    |                       | C = 0,1                            | C = 1 | C = 10 |
| DQO <sub>T</sub>  | 294,5              | 275,4 – 313,6         | 270,2                              | 276,9 | 286,3  |
| DQO <sub>F</sub>  | 94,5               | 84,86 – 104,14        | 100,7                              | 99,3  | 96,6   |
| DBO <sub>5</sub>  | 119,5              | 101,1 – 138,0         | 114,5                              | 109,5 | 110    |
| BOD <sub>5F</sub> | 36,5               | 29,5 – 43,5           | 37,3                               | 37,6  | 37,8   |
| N-NO <sub>X</sub> | 1,15               | 1,14 – 1,16           | 1,15                               | 1,15  | 1,15   |
| NK <sub>T</sub>   | 33,4               | 32,8 – 34,0           | 33,3                               | 33,3  | 33,3   |
| NK <sub>F</sub>   | 26,3               | 24,8 – 27,7           | 26,5                               | 26,5  | 26,3   |
| N-NH <sub>X</sub> | 24,8               | 24,5 – 25,1           | 24,8                               | 24,8  | 24,8   |
| PT                | 7,5                | 7,0 – 7,9             | 7,5                                | 7,5   | 7,5    |
| P-PO <sub>4</sub> | 5,15               | 4,8 – 5,5             | 5,16                               | 5,18  | 5,15   |
| SST               | 118,5              | 106,8 – 130,2         | 120,9                              | 118,5 | 118,5  |
| SSV               | 101                | 94,4 – 107,5          | 105,5                              | 105,5 | 103,7  |
| pH                | 7,75               | 7,67 – 7,82           | 7,75                               | 7,75  | 7,75   |
| Alk               | 52,2               | 45,7 - 58,6           | 52,2                               | 52,2  | 52,2   |

En la Tabla 4.13 se observa, de acuerdo con lo comentado anteriormente, una mayor similitud entre las variables medibles estimadas y reales a medida que aumenta el valor de  $C$ . Únicamente se da una excepción en el caso de la DBO debido al alto valor de  $ER$  que poseen estas medidas y por tanto, su menor influencia en la minimización de la función objetivo.

A partir de los resultados presentados en la Tabla 4.12 y la Tabla 4.13, se toma como válida la estimación obtenida cuando el factor  $C$  toma el valor de 0,1 ya que en este caso, todas las variables medibles se encuentran dentro del rango de

variabilidad permitido (Tabla 4.13) y los parámetros de estimación no presentan diferencias significativas con respecto a la estimación inicial.

Por lo tanto, a partir de los resultados obtenidos puede afirmarse que la metodología de caracterización propuesta en este Capítulo permite obtener una solución que no presenta diferencias significativas con respecto a la estimación inicial (Tabla 4.12), se ajusta de forma razonable a las medidas experimentales (Tabla 4.13), y mantiene los valores iniciales de las fracciones másicas de los componentes inertes. Sin embargo, es importante señalar que, la utilización de esta herramienta de caracterización de forma general para diferentes tipos de aguas residuales o fangos, requiere un estudio más profundo del efecto de los parámetros de la función objetivo en la estimación obtenida, y una recopilación de las características de distintos tipos de aguas y fangos influentes que garanticen una estimación inicial fiable y adecuada para cada caso de estudio.

Además del ejemplo mostrado en este apartado, la herramienta de caracterización desarrollada ha sido también empleada en la caracterización de fangos. Detalles de estas caracterizaciones y los resultados obtenidos pueden encontrarse en De Gracia, (2007).

Finalmente, debe indicarse que la caracterización de un agua residual o fango será tanto más exacta cuanto mayor sea la información disponible. Así por ejemplo, en la caracterización de aguas residuales influentes a EDAR existentes y operativas (a escala real o piloto), medidas analíticas realizadas en el efluente o en los fangos obtenidos por la purga, pueden dar información acerca de las concentraciones y composiciones másicas de algunos componentes entre los que se encuentran los componentes inertes. Además, si esta EDAR está implantada en una plataforma de simulación y el modelo dinámico que reproduce los procesos biológicos está adecuadamente calibrado, mediante estudios por simulación de la producción de fangos o del proceso de desnitrificación pueden determinar relaciones tales como porcentaje de sólidos inertes o de sustrato fácilmente biodegradable en el influente. Basado en un modelo de EDAR de Galindo y mediante estudios por simulación, en el siguiente capítulo se llevará a cabo un reajuste de la estimación obtenida en la Tabla 4.12 en base a la información obtenida por simulación.

#### 4.4.4 Caracterización del influente para modelos de fangos activados convencionales (ASM1 y ASM2)

La metodología de caracterización propuesta en este Capítulo basada en la lista de componentes incluida en la LT, permite la caracterización del vector de componentes de cualquier modelo que describa los procesos que tienen lugar en una EDAR. Esto se debe fundamentalmente a que esta lista incluye sin redundancias y de forma detallada todos los componentes necesarios para reproducir cualquier proceso en una EDAR. Por lo tanto, las concentraciones y fracciones másicas del vector de componentes de cualquier modelo de proceso específico pueden calcularse como combinación lineal de los componentes de la LT y sus correspondientes fracciones másicas.

A continuación se presenta a modo de ejemplo, la caracterización del influente para los modelos estándar ASM1 y ASM2, basada en los resultados obtenidos en el Apartado 4.4.3.

##### 4.4.4.1 Caracterización del vector de componentes del ASM1

En la Tabla 4.14 se detallan los parámetros de estimación considerados en el modelo ASM1 y sus valores, calculados a partir de los valores presentados en la Tabla 4.12 y las ecuaciones presentadas a continuación.

La Figura 4.2 y la Figura 4.3 muestran la distribución de la DQO en distintas fracciones de acuerdo con los componentes considerados en el modelo ASM1 y en la lista de transformaciones LT.

Tabla 4.14. Caracterización del vector de componentes del modelo ASM1

| $\hat{\theta}_i$ | Unidad                          | Ecuación                                                                                                                                                                                                                          | Valor |
|------------------|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| $\hat{S}_i$      | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{S}_i = \hat{S}_i + \hat{S}_p$                                                                                                                                                                                               | 36,5  |
| $\hat{S}_{ND}$   | gN/m <sup>3</sup>               | $\hat{S}_{ND} = \hat{S}_{aa} \cdot \hat{\beta}_{N,Saa}$                                                                                                                                                                           | 0,722 |
| $\hat{S}_{NH}$   | gN/m <sup>3</sup>               | $\hat{S}_{NH} = \hat{S}_{nh4+} + \hat{S}_{nh3}$                                                                                                                                                                                   | 24,8  |
| $\hat{S}_{NO}$   | gN/m <sup>3</sup>               | $\hat{S}_{NO} = \hat{S}_{no2-} + \hat{S}_{no3-}$                                                                                                                                                                                  | 1,15  |
| $\hat{S}_O$      | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | $\hat{S}_O = \hat{S}_{o2}$                                                                                                                                                                                                        | ---   |
| $\hat{S}_S$      | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{S}_S = S_{su} + S_{aa} + S_{fa} + S_{hva} + S_{va-} + S_{hbu} + S_{bu-} + S_{hpro} + S_{pro-} + S_{nac} + S_{ac-}$                                                                                                          | 50,8  |
| $\hat{S}_{Alk}$  | molAlk/m <sup>3</sup>           | $\hat{S}_{ALK} = \hat{S}_{hco3-} / 12 + \hat{S}_{va-} / (\gamma_{DOT,Sva} \cdot 101) + \hat{S}_{bu-} / (\gamma_{DOT,Sbu} \cdot 87) + \hat{S}_{pro-} / (\gamma_{DOT,Spro} \cdot 73) + \hat{S}_{ac-} / (\gamma_{DOT,Sac} \cdot 59)$ | 1,221 |

|                |                     |                                                                                                                                   |        |
|----------------|---------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| $\hat{X}_I$    | gDQO/m <sup>3</sup> | $\hat{X}_I = \hat{X}_i$                                                                                                           | 36,4   |
| $\hat{X}_P$    | gDQO/m <sup>3</sup> | $\hat{X}_P = \hat{X}_p$                                                                                                           | ---    |
| $\hat{X}_S$    | gDQO/m <sup>3</sup> | $\hat{X}_S = \hat{X}_{ch} + \hat{X}_{pr} + \hat{X}_{li} + \hat{X}_{cl} + \hat{X}_{c2}$                                            | 104,2  |
| $\hat{X}_{ND}$ | gN/m <sup>3</sup>   | $\hat{X}_{ND} = \hat{X}_{pr} \cdot \hat{\beta}_{N,Xpr} + \hat{X}_h \cdot \hat{\beta}_{N,Xh} + \hat{X}_i \cdot \hat{\beta}_{N,Xi}$ | 7,1    |
| $\hat{X}_{BH}$ | gDQO/m <sup>3</sup> | $\hat{X}_{BH} = \hat{X}_{bh}$                                                                                                     | 42,1   |
| $\hat{X}_{BA}$ | gDQO/m <sup>3</sup> | $\hat{X}_{BA} = \hat{X}_{n1} + \hat{X}_{n2}$                                                                                      | ---    |
| $i_{NBM}$      | gN/gDOQ             | $i_{NBM} = \hat{\beta}_{N,Xbh}$                                                                                                   | 0,0861 |

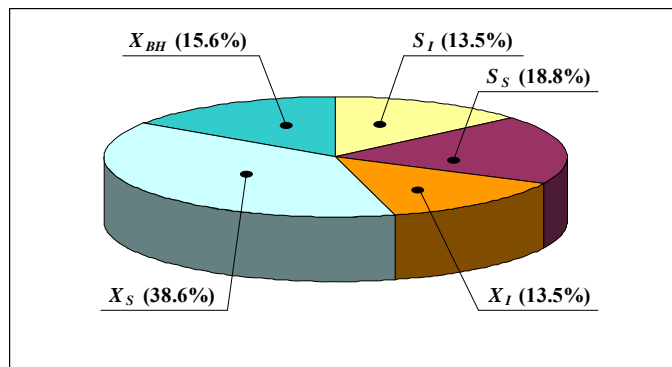


Figura 4.2. Fraccionamiento de la DQO total en el modelo ASMI

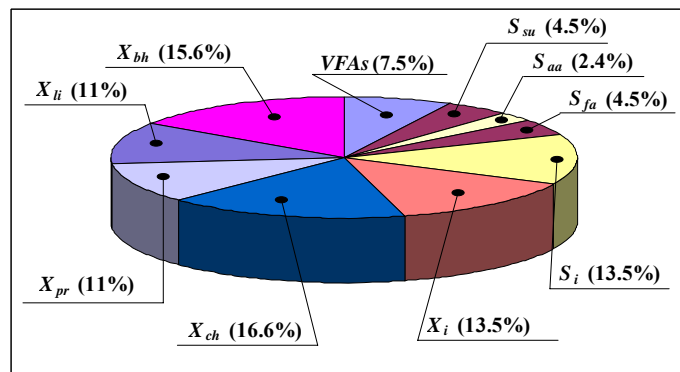


Figura 4.3. Fraccionamiento de la DQO total en base a LT

#### 4.4.4.2 Caracterización del vector de componentes del ASM2

Igualmente, en la Tabla 4.15, se presentan los resultados obtenidos para la caracterización de los componentes y contenidos en nitrógeno y fósforo requeridos en el modelo ASM2.

Tabla 4.15. Caracterización del vector de componentes del modelo ASM2

| $\hat{\theta}_i$                          | Unidad                          | Ecuación                                                                                                                                                                                                                          | Valor estimado |
|-------------------------------------------|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------|
| <i>Concentraciones de los componentes</i> |                                 |                                                                                                                                                                                                                                   |                |
| $\hat{S}_I$                               | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{S}_I = \hat{S}_i + \hat{S}_p$                                                                                                                                                                                               | 36,5           |
| $\hat{S}_{N2}$                            | gN/m <sup>3</sup>               | $\hat{S}_{N2} = \hat{S}_{n2}$                                                                                                                                                                                                     | ---            |
| $\hat{S}_{NH4}$                           | gN/m <sup>3</sup>               | $\hat{S}_{NH4} = \hat{S}_{nh4+} + \hat{S}_{nh3}$                                                                                                                                                                                  | 24,8           |
| $\hat{S}_{NO3}$                           | gN/m <sup>3</sup>               | $\hat{S}_{NO3} = \hat{S}_{no2} + \hat{S}_{no3}$                                                                                                                                                                                   | 1,1            |
| $\hat{S}_O$                               | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | $\hat{S}_O = \hat{S}_{o2}$                                                                                                                                                                                                        | ---            |
| $\hat{S}_{PO4}$                           | gP/m <sup>3</sup>               | $\hat{S}_{PO4} = \hat{S}_{hpo4=} + \hat{S}_{h2po4-}$                                                                                                                                                                              | 5,2            |
| $\hat{S}_A$                               | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{S}_A = \hat{S}_{hva} + \hat{S}_{va-} + \hat{S}_{hbu} + \hat{S}_{bu-} + \hat{S}_{hpro} + \hat{S}_{pro-} + \hat{S}_{hac} + \hat{S}_{ac-}$                                                                                     | 20,2           |
| $\hat{S}_F$                               | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{S}_F = \hat{S}_{su} + \hat{S}_{aa} + \hat{S}_{fa}$                                                                                                                                                                          | 30,6           |
| $\hat{S}_{ALK}$                           | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{S}_{ALK} = \hat{S}_{hco3-} / 12 + \hat{S}_{va-} / (\gamma_{DOT,Sva} \cdot 101) + \hat{S}_{bu-} / (\gamma_{DOT,Sbu} \cdot 87) + \hat{S}_{pro-} / (\gamma_{DOT,Spro} \cdot 73) + \hat{S}_{ac-} / (\gamma_{DOT,Sac} \cdot 59)$ | 1,2            |
| $\hat{X}_I$                               | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{X}_I = \hat{X}_i + \hat{X}_p$                                                                                                                                                                                               | 36,4           |
| $\hat{X}_S$                               | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{X}_S = \hat{X}_{ch} + \hat{X}_{pr} + \hat{X}_{li} + \hat{X}_{c1} + \hat{X}_{c2}$                                                                                                                                            | 104,2          |
| $\hat{X}_H$                               | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{X}_H = \hat{X}_{bh}$                                                                                                                                                                                                        | 42,2           |
| $\hat{X}_{PAO}$                           | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{X}_{PAO} = \hat{X}_{pao}$                                                                                                                                                                                                   | ---            |
| $\hat{X}_{PP}$                            | gP/m <sup>3</sup>               | $\hat{X}_{PP} = \hat{X}_{pp}$                                                                                                                                                                                                     | ---            |
| $\hat{X}_{PHA}$                           | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{X}_{PHA} = \hat{X}_{pha}$                                                                                                                                                                                                   | ---            |
| $\hat{X}_{AUT}$                           | gDQO/m <sup>3</sup>             | $\hat{X}_{AUT} = \hat{X}_{n1} + \hat{X}_{n2}$                                                                                                                                                                                     | ---            |
| $\hat{X}_{MeP}$                           | gMeP/m <sup>3</sup>             | $\hat{X}_{MeP} = \hat{X}_{MeP}$                                                                                                                                                                                                   | ---            |
| $\hat{X}_{MeOH}$                          | gMeOH/m <sup>3</sup>            | $\hat{X}_{MeOH} = \hat{X}_{Me(oh)}$                                                                                                                                                                                               | ---            |
| $\hat{X}_{TSS}$                           | gSST/m <sup>3</sup>             | $\hat{X}_{TSS} = \sum_{i=31}^{40} \hat{X}_i / \gamma_{DOT,i} + \sum_{i=42}^{51} \hat{X}_i / \gamma_{DOT,i} + \sum_{i=52}^{54} \hat{X}_i$                                                                                          | 136,7          |



| <i>Contenidos de N en algunos componentes</i> |         |                                                                                                                                                                                                                                                                 |        |
|-----------------------------------------------|---------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| $\hat{i}_{N_{SI}}$                            | gN/gDOQ | $\hat{i}_{N_{SI}} = \hat{\beta}_{N, Si}$                                                                                                                                                                                                                        | 0,0165 |
| $\hat{i}_{N_{SF}}$                            | gN/gDOQ | $\hat{i}_{N_{SF}} = \hat{\beta}_{N, Saa} \cdot \hat{S}_{aa} / \hat{S}_F$                                                                                                                                                                                        | 0,0236 |
| $\hat{i}_{N_{XI}}$                            | gN/gDOQ | $\hat{i}_{N_{XI}} = \hat{\beta}_{N, Xi}$                                                                                                                                                                                                                        | 0,0142 |
| $\hat{i}_{N_{XS}}$                            | gN/gDOQ | $\hat{i}_{N_{XS}} = \hat{\beta}_{N, Xpr} \cdot \hat{X}_{pr} / \hat{X}_S$                                                                                                                                                                                        | 0,0281 |
| $\hat{i}_{N_{BM}}$                            | gN/gDOQ | $\hat{i}_{N_{BM}} = \hat{\beta}_{N, Xbh}$                                                                                                                                                                                                                       | 0,0861 |
| <i>Contenidos de P en algunos componentes</i> |         |                                                                                                                                                                                                                                                                 |        |
| $\hat{i}_{P_{SI}}$                            | gP/gDOQ | $\hat{i}_{P_{SI}} = \hat{\beta}_{P, Si}$                                                                                                                                                                                                                        | 0,0098 |
| $\hat{i}_{P_{SF}}$                            | gP/gDOQ | $\hat{i}_{P_{SF}} = \left( \hat{\beta}_{P, Ssu} \cdot \hat{S}_{su} + \hat{\beta}_{P, Saa} \cdot \hat{S}_{aa} + \hat{\beta}_{P, Sfa} \cdot \hat{S}_{fa} \right) / \hat{S}_F$                                                                                     | ---    |
| $\hat{i}_{P_{XI}}$                            | gP/gDOQ | $\hat{i}_{P_{XI}} = \hat{\beta}_{P, Xi}$                                                                                                                                                                                                                        | 0,0083 |
| $\hat{i}_{P_{XS}}$                            | gP/gDOQ | $\hat{i}_{P_{XS}} = \left( \hat{\beta}_{P, Xc1} \cdot \hat{X}_{c1} + \hat{\beta}_{P, Xc2} \cdot \hat{X}_{c2} + \hat{\beta}_{P, Xch} \cdot \hat{X}_{ch} + \hat{\beta}_{P, Xpr} \cdot \hat{X}_{pr} + \hat{\beta}_{P, Xli} \cdot \hat{X}_{li} \right) / \hat{X}_S$ | 0,0051 |
| $\hat{i}_{P_{BM}}$                            | gP/gDOQ | $\hat{i}_{P_{BM}} = \hat{\beta}_{P, Xbh}$                                                                                                                                                                                                                       | 0,0215 |

## 4.5 CONCLUSIONES

En este Capítulo se ha presentado una nueva metodología de caracterización automática del influente basada en un algoritmo de optimización.

La lista extendida de componentes caracterizados por sus fracciones másicas en la que se ha basado esta metodología de caracterización, ha permitido establecer de forma sencilla relaciones entre estos componentes y sus fracciones másicas con las medidas experimentales. Así, la caracterización obtenida constituye una descripción completa del agua residual o fango fácilmente adaptable a diferentes vectores de componentes.

La función objetivo mixta utilizada en el algoritmo de optimización permite obtener de forma satisfactoria soluciones no muy diferentes de la estimación inicial y que se ajustan bien a las medidas experimentales disponibles. Por lo tanto, la herramienta de caracterización basada en el algoritmo de optimización constituye una solución al problema de caracterización flexible, capaz de aproximarse a diferentes estimaciones iniciales basadas en el conocimiento del usuario y a diferentes niveles de información experimental disponible. Además,

esta función de coste mixta garantiza el buen comportamiento del algoritmo sin problemas de convergencia en un rango amplio de información.

Los resultados obtenidos en la caracterización del agua residual influente a la EDAR de Galindo-Bilbao demuestran la validez de esta herramienta para la caracterización de un agua residual influente. Sin embargo, en este caso de estudio se ha observado la importancia que presenta la utilización de valores adecuados del parámetro  $C$ , rigideces de los parámetros de estimación y sus rangos de variabilidad en la función objetivo, para la obtención de una solución adecuada.

La conversión de la estimación obtenida a los componentes de los modelos ASM1 y ASM2, demuestra la capacidad que presenta la herramienta de caracterización para adaptarse a diferentes modelos estándar de tratamientos de aguas residuales y fangos.

Puesto que tanto la lista de componentes utilizada como las medidas experimentales consideradas son expandibles y adaptables, la herramienta de caracterización permite la inclusión de cualquier otro criterio que se considere conveniente en la caracterización (por ejemplo, conocimiento específico del caso tratado, adaptación de protocolos, etc.).



## CAPÍTULO 5

# **OPTIMIZACIÓN DE LA OPERACIÓN DE LA EDAR DE GALINDO**

---

Parte de este capítulo se presenta en:

*Ayesa E., De la Sota A., Grau P., Sagarna J.M., Salterain A. and Suescun J. (2006). Supervisory control strategies for the new WWTP of Galindo - Bilbao: The long run from the conceptual design to the full-scale experimental validation. Wat. Sci. Tech. 53 (4-5), 193-201.*

*Grau P., Sagarna J.M., Suescun J. and Ayesa E. Full-scale Experimental Validation of New Automatic Control Strategies for the Optimum Operation of WWTP with Nitrogen Removal. Proceedings on the IWA 4th World Water Congress & Exhibitions. Morocco, September 19-24, 2004.*

## 5.1 INTRODUCCIÓN

Los modelos matemáticos que describen el comportamiento dinámico de una EDAR presentan gran utilidad para la exploración de las estrategias de operación más adecuadas ante diferentes escenarios y perturbaciones. Así, en base a diferentes estudios por simulación, pueden analizarse distintas estrategias de operación y cuantificar de manera realista para cada una de ellas, sus efectos en la estabilidad del proceso, calidad del efluente y costes de explotación.

Igualmente, el diseño de las estrategias de control automático a partir de las cuales se optimiza la operación de las EDAR ante cualquier perturbación, requieren de un modelo matemático que permita caracterizar la respuesta de las variables manipulables sobre cada uno de los objetivos de control de la EDAR. En este sentido, debe tenerse en cuenta que estos análisis son, en muchos casos, difíciles de realizar en las EDAR de forma experimental y por tanto, la utilización de un modelo matemático adecuadamente calibrado es una herramienta de gran ayuda.

Este Capítulo recoge como parte de la presente tesis el trabajo realizado en los últimos años en la optimización de la operación de la EDAR de Galindo-Bilbao, tomando como base un modelo de planta.

Una primera línea de trabajo ha estado orientada a optimizar la operación de la línea de aguas (tratamiento secundario) adaptando, implantando y validando experimentalmente en una línea de la EDAR real, las estrategias de control previamente estudiadas en planta piloto (Galarza *et al.*, 2001b). En este Capítulo se describen las características del modelo de la EDAR de Galindo, y su utilización para el diseño y verificación preliminar de las estrategias de control, así como algunos resultados obtenidos en su implantación y validación experimental a escala real.

Una segunda línea de trabajo ha ido dirigida a explorar, utilizando un modelo integral de la EDAR, el efecto que tendrían en la línea de aguas los potenciales retornos del tratamiento de los lodos por digestión anaerobia. En este caso, la utilización de un modelo integral basado en la metodología PWM, en el que se describe el comportamiento de todos los procesos unitarios incluidos en la EDAR real de forma conjunta, ha sido fundamental en la exploración de distintas alternativas de la operación de la EDAR.

## 5.2 DESCRIPCIÓN DE LA EDAR DE GALINDO

La EDAR de Galindo mostrada en la Figura 5.1 está situada en Bilbao (España). Esta EDAR tiene como objetivo la depuración del agua residual proveniente del área de Bilbao de forma que la calidad del efluente sea la requerida en el estuario del Nerbión, calificado como zona sensible.

Los valores de caudales y concentración de contaminantes de entrada a la EDAR de Galindo se detallan en la Tabla 5.1. La Tabla 5.2 presenta las concentraciones de contaminantes requeridas en el efluente de esta EDAR, de acuerdo con los requisitos especificados en zonas sensibles.



Figura 5.1. Vista panorámica de la EDAR de Galindo (Bilbao)

Tabla 5.1. Caudales y contaminación de entrada a la EDAR de Galindo

| <b>Caudal de entrada a la EDAR</b>                        | <b>Valor medio</b>    |
|-----------------------------------------------------------|-----------------------|
| Caudal de entrada al tratamiento primario                 | 12 m <sup>3</sup> /s  |
| Caudal de entrada medio al tratamiento secundario         | 4 m <sup>3</sup> /s   |
| Caudal de entrada con garantías al tratamiento secundario | 6 m <sup>3</sup> /s   |
| <b>Concentración de contaminantes</b>                     | <b>Valor medio</b>    |
| DBO <sub>5</sub>                                          | 220 g/m <sup>3</sup>  |
| DQO                                                       | 587 g/m <sup>3</sup>  |
| SST                                                       | 264 g/m <sup>3</sup>  |
| N-NH <sub>4</sub>                                         | 27 g/m <sup>3</sup>   |
| NTK                                                       | 43 g/m <sup>3</sup>   |
| N-NO <sub>3</sub>                                         | 0.68 g/m <sup>3</sup> |

Tabla 5.2. Calidad del efluente requerida en la EDAR de Galindo

| <b>Concentraciones en el efluente</b> | <b>Valor medio</b>    |
|---------------------------------------|-----------------------|
| NKT                                   | ≤ 5 g/m <sup>3</sup>  |
| N-NH <sub>4</sub>                     | ≤ 2 g/m <sup>3</sup>  |
| N-NO <sub>3</sub>                     | ≤ 10 g/m <sup>3</sup> |
| DBO <sub>5</sub>                      | ≤ 15 g/m <sup>3</sup> |
| SST                                   | ≤ 20 g/m <sup>3</sup> |

### 5.2.1 Configuración de la EDAR de Galindo

La EDAR de Galindo está compuesta por líneas de aguas residuales y fangos. La línea de aguas consta de un tratamiento primario y un tratamiento secundario biológico diseñado para la eliminación de materia orgánica y nitrógeno. La línea de fangos incluye diferentes procesos de espesamiento y deshidratación del fango y un horno incinerador.

#### 5.2.1.1 Configuración de la línea de aguas

Los elementos que componen el tratamiento primario y sus características se muestran en la Tabla 5.3.

Tabla 5.3. Elementos incluidos en la decantación primaria

| Elemento               | Características     |
|------------------------|---------------------|
| Desbaste Grueso        | 3 rejas             |
| Desbaste fino          | 2 rejas y 5 tamices |
| Desarenado             | 8 unidades          |
| Decantadores primarios | 9 unidades          |

El tratamiento biológico trata  $4 \text{ m}^3/\text{s}$  de caudal medio y está dividido en seis líneas idénticas. La configuración de cada una de estas líneas ha sido diseñada de manera que puedan operarse mediante tres configuraciones: Desnitrificación-Nitrificación (DN), Regeneración-Desnitrificación-Nitrificación (RDN) ó Desnitrificación-Regeneración-Desnitrificación-Nitrificación (DRDN). Estas dos últimas incluyen una zona aireada en la recirculación de fangos (Regeneración), que evita en parte la aparición de bulking en la EDAR y permite operar la EDAR con menores caudales de recirculación interna. La Figura 5.2 muestra un esquema de una línea de la EDAR operada con la configuración RDN.

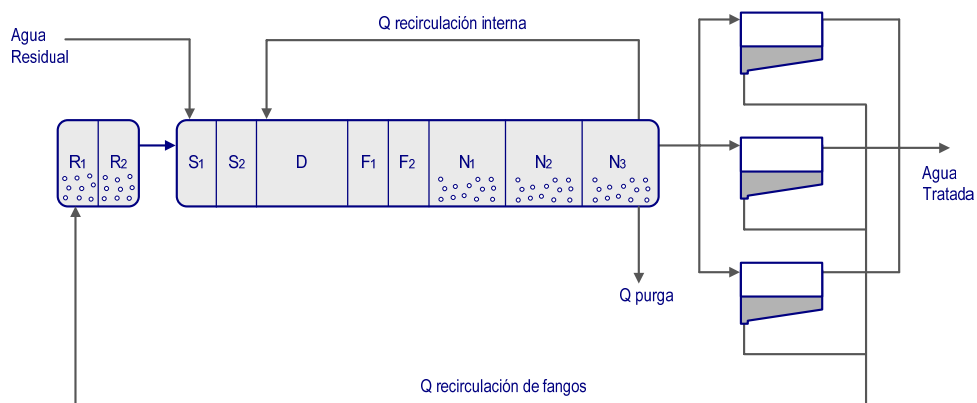


Figura 5.2. Esquema de una de las líneas del tratamiento biológico

Las dimensiones de las zonas de regeneración, desnitrificación, nitrificación y decantadores se incluyen en la Tabla 5.4.



Tabla 5.4. Dimensiones físicas de la EDAR de Galindo

| Elemento                        | Dimensiones                                                           |
|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|
| Reactor Selector 1 (S1)         | Volumen = 625 m <sup>3</sup>                                          |
| Reactor Selector 2 (S2)         | Volumen = 625 m <sup>3</sup>                                          |
| Reactor de Desnitrificación (D) | Volumen = 10000 m <sup>3</sup>                                        |
| Reactor Facultativo 1 (F1)      | Volumen = 666 m <sup>3</sup>                                          |
| Reactor Facultativo 2 (F2)      | Volumen = 666 m <sup>3</sup>                                          |
| Reactor de Nitrificación 1 (N1) | Volumen = 5330 m <sup>3</sup>                                         |
| Reactor de Nitrificación 2 (N2) | Volumen = 6660 m <sup>3</sup>                                         |
| Reactor de Nitrificación 3 (N3) | Volumen = 6660 m <sup>3</sup>                                         |
| Reactor de Regeneración 1 (R1)  | Volumen = 1250 m <sup>3</sup>                                         |
| Reactor de Regeneración 2 (R2)  | Volumen = 2500 m <sup>3</sup>                                         |
| Decantadores secundarios        | Área superficial = 1140 m <sup>2</sup><br>Altura = 4.5 m <sup>3</sup> |

### 5.2.1.2 Configuración de la línea de fangos

La Figura 5.3 muestra de forma esquemática la configuración de la línea de fangos existente en la EDAR de Galindo. En la actualidad, tal y como se muestra en esta Figura, el tratamiento de fangos está basado en una eliminación del agua presente en éste y su posterior incineración. El número y características de cada elemento se muestran en la Tabla 5.5.

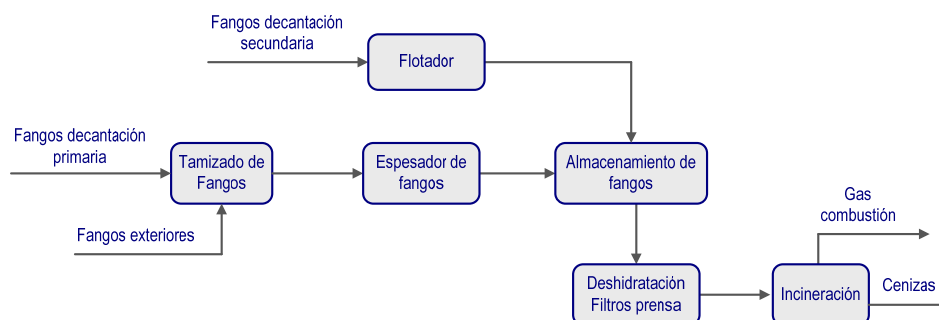


Figura 5.3. Esquema de la línea de fangos de la EDAR de Galindo

Tabla 5.5. Características de los elementos de la línea de fangos

| Elemento                             | Unidades | Dimensiones                                                                       |
|--------------------------------------|----------|-----------------------------------------------------------------------------------|
| Flotadores de fangos secundarios     | 3        | Volumen = 7920 m <sup>3</sup>                                                     |
| Espesadores fangos primarios         | 4        | Volumen = 10590 m <sup>3</sup>                                                    |
| Depósito de almacenamiento de fangos | 2        | Volumen = 910 m <sup>3</sup>                                                      |
| Deshidratadores por filtros prensa   | 5        | Número de placas = 666 m <sup>3</sup><br>Dimensión de placa = 2.25 m <sup>2</sup> |
| Horno incinerador de lecho fluido    | 1        | Capacidad = 8 Tm/h                                                                |

### 5.2.2 Sistema SCADA convencional

La EDAR de Galindo incluye un sistema de control supervisor y adquisición de datos (SCADA) convencional que facilita la monitorización centralizada de la EDAR y los controladores existentes, y el almacenamiento de bases de datos. En este sistema convencional, existen una serie de controladores de bajo nivel que generan órdenes específicas a los actuadores de campo (válvulas, variadores de frecuencia, etc.) en función de las variables de operación convencionales (caudales de recirculación, concentración de oxígeno disuelto en reactores aireados, caudal de purga, etc.). La comunicación entre el sistema SCADA y los sensores y controladores de campo se lleva a cabo mediante PLC.

### 5.2.3 Sistema SCADA supervisor

De acuerdo con las estrategias de control avanzado propuestas en este Capítulo (5.4.2) e implantadas en la EDAR de Galindo, en la actualidad ésta cuenta con una nueva estructura jerárquica de control basada en un sistema supervisor SCADA adicional conectado al convencional. Este sistema supervisor contiene una base de datos, muestra el estado general de la EDAR y actúa como interfaz con el operador de planta, y ha sido diseñado en un proyecto de investigación cofinanciado por el Gobierno Vasco y en el que han participado el CEIT, las empresas MSI Coop. y CADAGUA y el Consorcio de Aguas de Bilbao. La Figura 5.4 muestra un esquema de la estructura jerárquica de control que incluye este nivel supervisor.

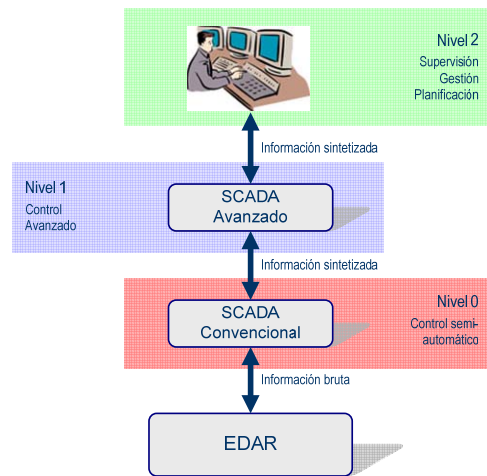


Figura 5.4. Esquema de la estructura jerárquica de control que incluye un sistema supervisor

El sistema supervisor implantado en la EDAR de Galindo permite el acceso de forma remota por módem e incluye la posibilidad de desconexión del SCADA convencional en caso de que la EDAR quiera ser operada de forma convencional. La Figura 5.5 muestra un ejemplo del interfaz desarrollado para el SCADA supervisor.

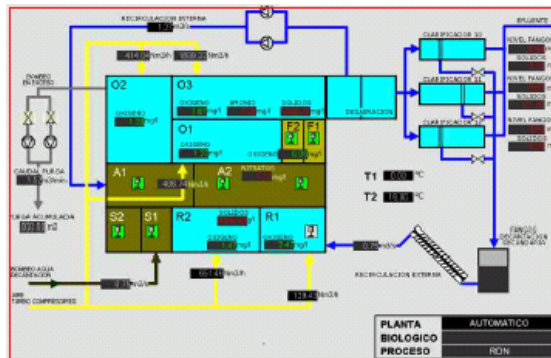


Figura 5.5. Interfaz del SCADA supervisor

### **5.3 MODELO DE LA LÍNEA DE AGUAS DE LA EDAR DE GALINDO**

Tal y como se ha mencionado en el Apartado 5.1, el modelo matemático de la línea de aguas de la EDAR de Galindo ha sido la base empleada en el estudio de la estrategia de operación óptima en la EDAR real.

El modelo matemático empleado en este estudio se ha construido de acuerdo con la metodología PWM propuesta en el Capítulo 2. En principio, el modelo empleado para describir los procesos biológicos que tienen lugar en la EDAR podría haber sido cualquiera de los modelos estándar ASM1, ASM2 o ASM3 (Henze *et al.*, 2000) debido a su capacidad para describir los procesos de eliminación de materia orgánica y nitrógeno. Sin embargo, la utilización de un modelo de EDAR construido de acuerdo con la metodología PWM permitirá, tal y como se detalla en el Apartado 5.4, una posterior exploración por simulación de la operación de la EDAR si ésta integrara, además de la línea del tratamiento de aguas, una línea de tratamiento de fangos con digestión anaerobia y tratamiento de sobrenadantes. En esta exploración, la flexibilidad que posee esta metodología para incorporar nuevos procesos y componentes al modelo de forma sencilla y sin necesidad de interfaces adicionales, quedará demostrada.

El procedimiento seguido en la construcción del modelo de la línea de aguas de la EDAR de Galindo (LAGuas Galindo PWM) se detalla a continuación (Apartado 5.3.1). Posteriormente se presenta una verificación de este modelo a partir de estudios de calibración previos y medidas experimentales obtenidas en la EDAR (Apartado 5.3.2).

#### **5.3.1 Construcción del Modelo LAGuas Galindo PWM**

La construcción de este modelo se ha llevado a cabo siguiendo el procedimiento propuesto en el Capítulo 2, y en base a la Lista de Transformaciones detallada en el Apartado 2.3.

### 5.3.1.1 Construcción del Modelo de Transformaciones de Planta (PTM)

El PTM se ha construido mediante el procedimiento indicado en el Apartado 2.4.1, basado en la identificación de las poblaciones de bacterias necesarias para reproducir los *Procesos Biológicos* que tienen lugar en la EDAR de Galindo.

- *Selección de los Procesos Biológicos*

De acuerdo con la configuración del tratamiento biológico de la EDAR de Galindo, en este caso únicamente se ha considerado el proceso de fangos activados para la eliminación de C y N en condiciones aerobias y anóxicas (AS-CN).

- *Selección de las poblaciones de bacterias activas requeridas para describir los Procesos Biológicos seleccionados*

De acuerdo con la Tabla 2.36, las poblaciones de bacterias seleccionadas han sido las bacterias heterótrofas  $X_h$  y las nitrificantes  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$ .

- *Selección de las transformaciones bioquímicas asociadas a la actividad de las poblaciones de bacterias*

Las transformaciones bioquímicas que deben incluirse en el PTM son, por tanto, aquellas que describen el crecimiento, desaparición e hidrólisis enzimática de las poblaciones  $X_h$ ,  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$  (Tabla 2.37) en todas las condiciones ambientales. En este caso, sin embargo, puesto que en ningún elemento de la EDAR se dan condiciones anaerobias, las transformaciones de hidrólisis y desaparición de biomasa en estas condiciones se han obviado. De acuerdo con la LT descrita en el Apartado 2.3, las transformaciones consideradas han sido 1-7, 14-29, 41-43, 55-57 y 89-94. De manera adicional se ha considerado la desintegración del componente complejo  $X_{c2}$  en condiciones aerobias y anóxicas.

Los componentes involucrados en estas transformaciones y que, por tanto, deben incluirse en el PTM son los componentes que representan el sustrato carbonoso soluble (monómeros y VFA) y particulado, los componentes que representan las poblaciones de bacterias heterótrofas y nitrificantes  $X_h$ ,  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$ , la materia orgánica inerte obtenida en la desaparición de las bacterias e influente al tratamiento biológico, y los componentes fuente-sumidero necesarios para garantizar la continuidad de la masa en todas las transformaciones.

- *Incorporación de las transformaciones de equilibrios ácido-base y líquido-gas*

Finalmente, las transformaciones 96-105 y 106-110 han sido incorporadas al PTM de modo que la capacidad de amortiguamiento y el intercambio de masa de la fase líquida con la gaseosa queden reproducidos por el modelo.

La Figura 5.6 muestra las transformaciones que han sido seleccionadas de la Librería de Transformaciones y constituyen el PTM del modelo LAguas Galindo PWM.

La matriz de estequiometría y el vector de cinéticas que constituyen el Modelo de Transformaciones de Planta se detallan en el Anexo D. También se incluye el Vector de Componentes de Planta (PCV) considerado como el interfaz común entre todos los modelos de proceso unitario.

### **5.3.1.2 Construcción de los Modelos de Proceso Unitario (UPM)**

De acuerdo con las características físicas y la función de los elementos incluidos en la EDAR, se han considerado dos modelos de proceso unitario diferentes.

El primero, que describe las transformaciones internas y el transporte de masa en los reactores de fangos activados, incluye el PTM construido y describe el transporte de masa de acuerdo con lo propuesto en el Apartado 3.3.2.1.

En el segundo, en el cual se describe el comportamiento del decantador secundario, las transformaciones incluidas en el PMT se han obviado y el transporte de masa se ha descrito según el modelo de capas propuesto por Tákacs et al., 1991 (Anexo D). Puesto que en la descripción del transporte de masa se utilizan las dos variables  $X_T$  y  $S_T$ , que representan la suma de los componentes particulados y solubles respectivamente, el decantador secundario incluye las dos interfaces descritas en el Apartado 3.3.2.5.

### **5.3.1.3 Construcción del modelo LAguas Galindo PWM**

Finalmente, se ha obtenido el modelo LAguas Galindo PWM mediante la conexión directa de los flujos másicos de entrada y salida de los diferentes modelos de proceso unitario.

Este modelo ha sido implantado en la plataforma de simulación WEST® a partir de la categoría PWM detallada en el Apartado 3.4.1.1.

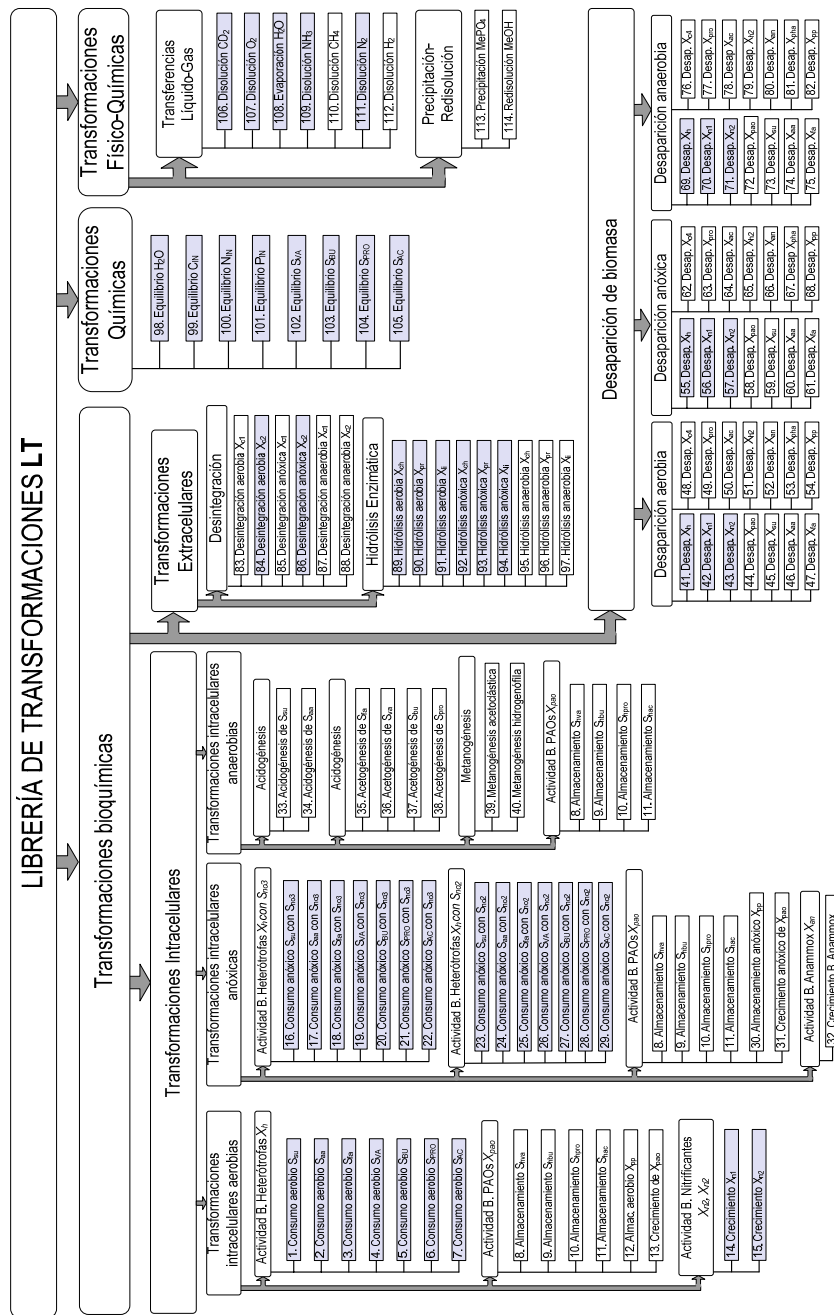


Figura 5.6. Transformaciones seleccionadas en el modelo LA\_Galindo PWM

### **5.3.2 Verificación del modelo de la línea de aguas de la EDAR de Galindo**

Una vez construido el modelo LAguas Galindo PWM, el comportamiento de éste ha sido verificado para garantizar que los resultados obtenidos por simulación reproduzcan el comportamiento real de la EDAR. La verificación de este modelo se ha centrado en los procesos de nitrificación, desnitrificación y producción de fangos y se ha llevado a cabo en base a dos estudios de calibración previos que se detallan brevemente a continuación.

#### **5.3.2.1 Estudios previos de calibración del modelo ASM1 en la EDAR de Galindo**

Previamente a la construcción de la EDAR de Galindo (1993-94), y una vez puesta en marcha ésta (2001-02), se llevaron a cabo dos estudios de calibración del modelo ASM1 que, en este Capítulo, se han empleado para la verificación del modelo construido LAguas Galindo PWM.

El primer estudio de calibración (De la Sota *et al.*, 1994) tuvo como objetivo caracterizar el agua residual influente a la EDAR y determinar el valor de los parámetros estequiométricos y cinéticos más significativos relacionados con los procesos de nitrificación, desnitrificación y producción de fangos, en base al modelo ASM1. Esta calibración se realizó en planta piloto mediante el ajuste de los resultados obtenidos por simulación del modelo a los resultados experimentales de los sólidos suspendidos totales en los reactores (SST), de nitrógeno amoniacal (N-NH<sub>4</sub>) y de nitratos (N-NO<sub>3</sub>) en el efluente. Además, con el objetivo de calibrar los coeficientes referentes a la actividad de las bacterias heterótrofas, facultativas y autótrofas nitrificantes se llevaron a cabo una serie de ensayos *batch* de AUR, NUR y OUR sobre mezclas de agua corriente y fango a una concentración dada.

Los parámetros estequiométricos y cinéticos obtenidos en la calibración y los empleados según la bibliografía (Henze *et al.*, 2000) se muestran en la Tabla 5.6.



Tabla 5.6. Coeficientes del modelo ASM1 obtenidos en la primera calibración

| <b>Fraccionamiento de la DQO del agua residual influente</b> |                                 |       |            |                                 |       |
|--------------------------------------------------------------|---------------------------------|-------|------------|---------------------------------|-------|
| Símbolo                                                      | Unidad                          | Valor |            |                                 |       |
| $f_{SS}$ ( $S_S/DQO_i$ )                                     | ---                             | *0,15 |            |                                 |       |
| $f_{SI}$ ( $S_i/DQO_i$ )                                     | ---                             | 0,085 |            |                                 |       |
| $f_{XH}$ ( $X_H/DQO_i$ )                                     | ---                             | 0,15  |            |                                 |       |
| $f_{XI}$ ( $X_i/DQO_i$ )                                     | ---                             | *0,2  |            |                                 |       |
| <b>Coefficientes estequiométricos</b>                        |                                 |       |            |                                 |       |
| Símbolo                                                      | Unidad                          | Valor |            |                                 |       |
| $Y_H$                                                        | gDQO/gDQO                       | 0,67  |            |                                 |       |
| $Y_A$                                                        | gDQO/gN                         | 0,24  |            |                                 |       |
| $f_p$                                                        | ---                             | 0,08  |            |                                 |       |
| $i_{XB}$                                                     | gN/gDQO                         | *0,08 |            |                                 |       |
| $i_{XP}$                                                     | gN/gDQO                         | 0,06  |            |                                 |       |
| $i_{XI}$                                                     | gN/gDQO                         | 0,04  |            |                                 |       |
| $i_{SI}$                                                     | gN/gDQO                         | 0,04  |            |                                 |       |
| <b>Coefficientes cinéticos</b>                               |                                 |       |            |                                 |       |
| Símbolo                                                      | Unidad                          | Valor | Símbolo    | Unidad                          | Valor |
| $\mu_H$                                                      | d <sup>-1</sup>                 | 6     | $\mu_A$    | d <sup>-1</sup>                 | *0,78 |
| $K_S$                                                        | gDQO/m <sup>3</sup>             | 5     | $K_{NH}$   | gN/m <sup>3</sup>               | 0,8   |
| $b_H$                                                        | d <sup>-1</sup>                 | 0,62  | $K_{OA}$   | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | 0,4   |
| $k_A$                                                        | m <sup>3</sup> ·DQO/g·d         | 0,05  | $b_A$      | d <sup>-1</sup>                 | 0,13  |
| $k_H$                                                        | d <sup>-1</sup>                 | 2     | $\theta_A$ | ---                             | 1,103 |
| $K_{OH}$                                                     | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | 0,2   |            |                                 |       |
| $K_{NO}$                                                     | gN/m <sup>3</sup>               | 0,1   |            |                                 |       |
| $\eta_g$                                                     | ---                             | 0,8   |            |                                 |       |
| $\eta_H$                                                     | ---                             | *0,4  |            |                                 |       |
| $\theta_H$                                                   | ---                             | 1,071 |            |                                 |       |

\* Obtenidos por calibración

Años más tarde, y una vez puesta en marcha la EDAR real, se llevó a cabo un segundo estudio de verificación en el año 2002. Este estudio tuvo como objetivo comprobar que los parámetros obtenidos en la primera calibración en planta piloto seguían siendo válidos para describir el comportamiento de la EDAR real. Al igual que en la calibración anterior, el estudio de verificación se centró

en la caracterización del influente y en los procesos de nitrificación y desnitrificación de acuerdo con el modelo ASM1.

Los resultados obtenidos en este estudio de verificación corroboraron que los parámetros determinados en la primera calibración seguían siendo válidos para reproducir los procesos biológicos en la EDAR real. Una incidencia reseñable de esta segunda fase de calibración, fueron las incoherencias detectadas en la concentración de sólidos suspendidos en los reactores biológicos que prolongaron el estudio de verificación. Finalmente, se detectó una purga de sólidos adicional por los sistemas de limpieza superficial de los decantadores secundarios que modificaba el SRT teórico. Una vez introducido este efecto en el modelo, pudo comprobarse que la calibración inicial realizada en planta piloto seguía siendo válida para la EDAR real.



Figura 5.7. Purga de sólidos adicional en el decantador secundario

### 5.3.2.2 Verificación del modelo LAguas Galindo PWM

En este Apartado, en base a resultados obtenidos de forma experimental en la EDAR real y a los parámetros del modelo ASM1 obtenidos en los anteriores estudios de calibración (Tabla 5.6), se ha llevado a cabo una caracterización del influente acorde con el vector de componentes considerado en el modelo LAguas Galindo y se ha comprobado la validez de los parámetros estequiométricos y cinéticos más relevantes de acuerdo con el modelo integral.

En primer lugar, la caracterización del influente a la EDAR de Galindo se ha basado en los resultados mostrados en la Tabla 4.12 obtenidos a partir de la metodología de caracterización propuesta en el Capítulo 4, ya que durante la campaña experimental realizada en el año 2002 se comprobó que los ratios

$DQO_s/DQO_t$  y  $N-NH_4/TKN_t$  en el agua influente seguían manteniendo los mismos valores que en la primera calibración.

Sin embargo, en este caso de estudio, puesto que además de las medidas analíticas (Tabla 4.8) se tiene información acerca de los fraccionamientos  $f_{xi}$ ,  $f_{ss}$ ,  $f_{si}$  en el influente (Tabla 5.6), éstos se han considerado como restricciones adicionales que deben cumplir los parámetros de estimación, de forma que la solución final se adecue mejor a las características del influente real. Los parámetros de estimación obtenidos se muestran en el Anexo D.

En segundo lugar, se ha corroborado que los parámetros cinéticos y estequiométricos relevantes en los procesos de nitrificación y desnitrificación propuestos en las calibraciones anteriores siguen siendo válidos en el modelo LAguas Galindo PWM. Esta verificación se ha llevado a cabo a partir de las medidas experimentales de caudal y concentraciones en muestra compuesta de DQO, N-NH<sub>4</sub>, P-PO<sub>4</sub> en el influente y en el último reactor de nitrificación, obtenidas en la campaña experimental realizada en el segundo estudio de calibración (5.3.2.1). Los valores de los parámetros estequiométricos y cinéticos utilizados en el modelo se han incluido en el Anexo D.

La Figura 5.8 muestra de forma comparativa los resultados de la concentración de sólidos suspendidos obtenidos por simulación con los modelos ASM1 y Galindo PWM y los obtenidos experimentalmente durante un período de verificación experimental del modelo.

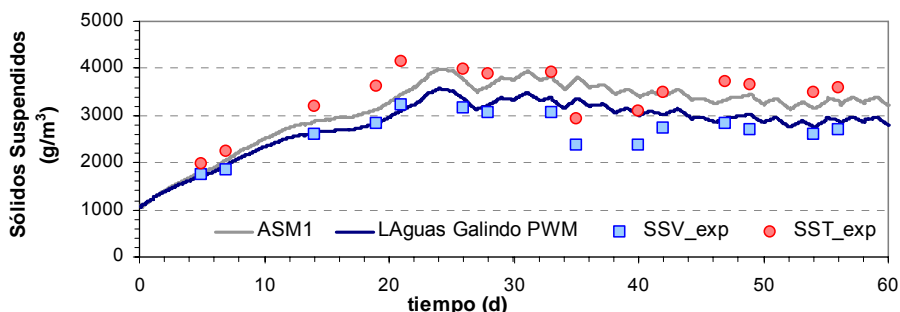


Figura 5.8. Ajuste de SS en la zona DN con los modelos ASM1 y LAguas Galindo PWM

En la Figura 5.8 puede observarse cómo el modelo LAguas Galindo PWM reproduce de forma adecuada la evolución de los sólidos suspendidos durante el período de experimentación. Las diferencias observadas con el modelo ASM1 son debidas a la distinta relación que existe entre los SST y DQO<sub>p</sub> en ambos

modelos. Así, mientras que en el modelo ASM1 se ha establecido que esta relación viene dado por un parámetro fijo con valor de 0.75, en el modelo LAguas Galindo PWM esta relación viene dada, para cada uno de los componentes particulados, por la relación *Masa de componente/ThOD* ( $1/\gamma_{\text{COD},i}$ ), calculada a partir de las fracciones máxicas de los componentes. Esta relación, para el caso de los componentes mayoritarios en los reactores biológicos  $X_h$  y  $X_i$  toma valores de 0,72 y 0,605 respectivamente. Por lo tanto, y puesto que no se ha considerado la entrada de sólidos inorgánicos en el influente, los sólidos suspendidos obtenidos con el modelo LAguas Galindo PWM se ajustan a los sólidos suspendidos volátiles SSV experimentales, tal y como se observa en la Figura 5.8.

La Figura 5.9 y la Figura 5.10 muestran de forma comparativa los resultados obtenidos de forma experimental para las concentraciones de  $\text{N-NO}_3$  y  $\text{N-NH}_4$  en el efluente y los obtenidos con los modelos ASM1 y LAguas Galindo PWM durante el periodo de verificación experimental del modelo.

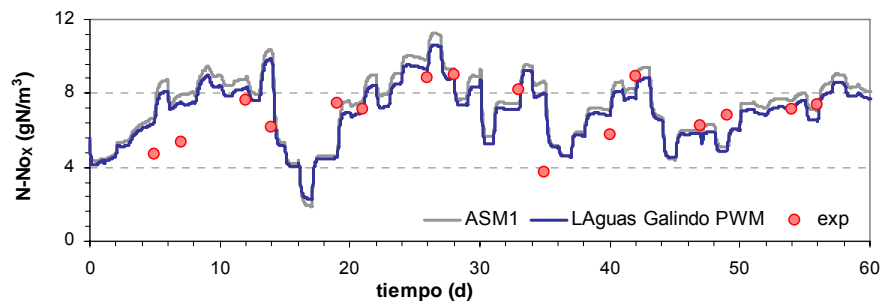


Figura 5.9. Ajuste de la concentración de  $\text{N-NO}_x$  en la zona DN con los modelos ASM1 y Galindo PWM

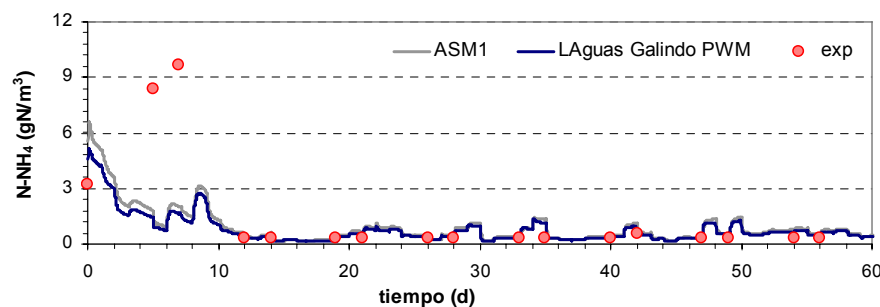


Figura 5.10. Ajuste de  $\text{N-NH}_4$  en el efluente con los modelos ASM1 y Galindo PWM

A partir de lo observado en ambas figuras puede afirmarse que los parámetros estequiométricos y cinéticos referentes a la hidrólisis, nitrificación y desnitrificación utilizados, reproducen de forma satisfactoria los procesos biológicos de eliminación de C y N la EDAR de Galindo. Asimismo, y tal y como ya quedó demostrado en el Capítulo 3, los modelos de EDAR construidos a partir de las transformaciones propuestas en el Apartado 2.3 y de acuerdo con la metodología PWM, aunque presentan algunas diferencias con respecto a los modelos convencionales ASM (nitrificación-desnitrificación en dos etapas, desaparición-desintegración de las bacterias, etc.) son capaces de reproducir el comportamiento de éstos.

La obtención del modelo matemático de la línea de aguas de la EDAR de Galindo adecuadamente calibrado ha sido un herramienta fundamental para, tal y como se detallará a continuación (Apartado 5.4), determinar una estrategia de operación óptima en la EDAR real de Galindo y la posterior evaluación e implantación de una estrategia de control avanzado.

Además, el modelo construido con la metodología PWM permitirá la exploración de estrategias de operación y control en la EDAR de Galindo, si en ésta se consideraran de forma conjunta la línea de aguas y una línea de fangos con digestión anaerobia y tratamientos de sobrenadantes procedentes de digestión (Apartado 5.5).

## **5.4 DISEÑO DE UNA ESTRATEGIA DE OPERACIÓN ÓPTIMA Y CONTROL EN LA LÍNEA DE AGUAS DE LA EDAR DE GALINDO**

El diseño de una estrategia de operación adecuada en la línea de aguas de la EDAR de Galindo requiere, al igual que en cualquier planta en la que se elimina C y N, una identificación de un valor adecuado de aquellas variables de operación que permitan una operación óptima de la EDAR, de acuerdo con los criterios de estabilidad, calidad del efluente y costes operacionales.

La selección de la estrategia de operación más adecuada en cualquier EDAR debe basarse en estudios previos que evalúen el efecto que, distintas variables de operación o *variables manipulables*, tienen sobre aquellas variables que determinan el punto óptimo de operación llamadas *variables objetivo*. Es

importante remarcar que la realización de esta tarea puede llevarse a cabo de forma sencilla y rápida si se dispone de un modelo matemático de EDAR correctamente calibrado e implantado en una plataforma de simulación.

En base al estudio realizado por Galarza *et al.*, (2001a), a continuación se detallan cuáles son las variables manipulables a tener en cuenta en la operación de una EDAR con eliminación de C y N y, de forma cualitativa, se describe cuál sería la estrategia a seguir para conseguir una operación óptima en la EDAR real de Galindo (Apartado 5.4.1).

Posteriormente, a partir de las conclusiones extraídas en este análisis y de las estrategias de control avanzado diseñadas y validadas en planta piloto en Galarza *et al.*, (2001b), se propone y describen los fundamentos de una estrategia de control avanzado para la EDAR real de Galindo (Apartado 5.4.2).

Esta estrategia ha sido verificada mediante un estudio por simulación durante un año y posteriormente, y en base a los beneficios obtenidos cuando la EDAR es operada mediante esta estrategia de control, ésta ha sido validada experimentalmente en la EDAR real. Los resultados más importantes obtenidos en el estudio de verificación por simulación y en la validación experimental se detallan en los Apartados 5.4.4 y 5.4.5 respectivamente.

#### **5.4.1 Estrategia óptima de operación en la EDAR de Galindo**

Tal y como se ha mencionado anteriormente, una estrategia óptima de operación se consigue mediante la manipulación adecuada de distintas variables para obtener una operación estable de la EDAR, una calidad del efluente acorde con los requisitos establecidos y mínimos costes de explotación.

La operación estable de la EDAR se conseguirá cuando la masa de bacterias en los reactores sea suficiente para garantizar la actividad biológica en ésta. La calidad del efluente vendrá determinada por los valores de amonio ( $N-NH_4$ ) y nitratos en el efluente ( $N-NO_3$ ). Por último, los principales costes de explotación en una EDAR estarán relacionados con el consumo de aire en las zonas aireadas (asociado al parámetro  $k_{LA}$ ) y la producción de fangos (asociado al caudal de purga).

En primer lugar, el valor de oxígeno disuelto (OD) en las zonas aireadas debería mantenerse a un nivel lo suficientemente alto como para permitir el adecuado crecimiento de las bacterias garantizando la tasa de nitrificación requerida y

mantener un suficiente valor de mezclado. Por otro lado, este nivel de OD también debe ser lo suficientemente bajo para ahorrar energía, evitar un excesivo mezclado y evitar una oxigenación excesiva en la zona de desnitrificación inducida por la recirculación de nitratos. Además, un valor de OD bajo favorecerá la desnitrificación en la zona anóxica y una simultánea nitrificación-desnitrificación en la zona aireada (Olsson and Newell, 1999).

En segundo lugar, la recirculación interna necesaria para obtener un óptimo potencial de desnitrificación en la zona anóxica dependerá no sólo de la carga orgánica procedente del influente sino de la concentración de N-NO<sub>3</sub> obtenida en la zona aireada en la nitrificación.

Finalmente, el caudal de purga debería seleccionarse de forma que se garantice la actividad biológica en la EDAR, pero teniendo en cuenta el flujo máximo de sólidos que el decantador secundario puede espesar sin provocar un escape de sólidos en el efluente.

De acuerdo con esto, una estrategia de operación óptima implicaría la selección continua por parte del operador de planta, de las variables de operación OD, recirculación interna y caudal de purga en un valor adecuado de forma que, en cada momento, el comportamiento estable de la EDAR y la calidad del efluente quedaran garantizados. Sin embargo, de modo convencional y debido a la complejidad de esta tarea, las variables de operación OD, recirculación interna y caudal de purga se mantienen en su valor de diseño para condiciones críticas de forma que los requisitos de calidad del efluente y el comportamiento estable de la EDAR queden garantizados en la operación normal de la EDAR.

Ante este modo convencional de operación, en el siguiente apartado se propone una estrategia de control avanzado a partir de la que, mediante la supervisión y manipulación automática del valor de las variables de operación en función de las condiciones del proceso en cada momento, puede conseguirse una operación óptima de la EDAR de Galindo.

#### **5.4.2 Descripción de la estrategia de control avanzado**

La estrategia de control avanzado diseñada para la EDAR de Galindo está basada en una estructura jerárquica de control, que consta de tres niveles, en los que se incluyen las leyes de actuación y el flujo de información (Figura 5.4). En la parte superior de esta estructura (nivel 2), se procesa toda la información

suministrada por los sensores, y en base a las decisiones del operador de planta, se dan órdenes de actuación a los niveles inferiores (niveles 1 y 0).

El **nivel 0**, está constituido básicamente por los sistemas de control automático y de adquisición de datos (SCADA) que por un lado, regulan la actuación de los controladores de bajo nivel en función del valor de referencia establecido por los niveles superiores, y por otro lado, condensan toda la información suministrada por los sensores de la planta.

El **nivel 1**, proporciona al sistema supervisor toda la información relevante obtenida por los sensores en la EDAR, e incluye una serie de leyes de control que, en base a las decisiones definidas en el nivel superior, seleccionan el valor de referencia de los controladores de bajo nivel.

El **nivel 2** o supervisor, centraliza la información disponible proveniente de los niveles inferiores y decide la estrategia de control a aplicar. Aunque no se ha abordado en esta tesis, este nivel podría estar relacionado con sistemas de soporte de decisión EDSS que facilitarían y permitirían la toma de decisiones en base a predicciones del modelo, experiencia en la operación de la EDAR, etc. (Poch *et al.*, 2004)

A continuación se detallan los tres lazos supervisores en los que se basa la estrategia de control avanzado propuesta e implantada en la EDAR real de Galindo.

#### **5.4.2.1 Control de amonio efluente**

El primer lazo supervisor (Figura 5.11), tiene como objetivo mantener el valor seleccionado de amonio medio (24 h) en el efluente, mediante la selección automática del valor de OD más apropiado en cada caso en los reactores aerobios (Suescun *et al.*, 2001). Lógicamente, la medida del amonio medio efluente debería realizarse a la salida de los reactores biológicos para evitar los efectos de retardo y amortiguamiento producidos en los decantadores.



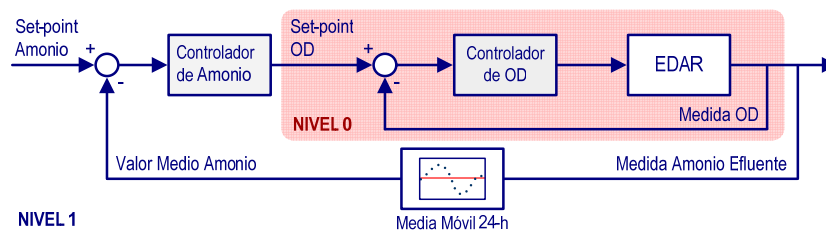


Figura 5.11. Lazo supervisor de  $N-NH_4$  medio efluente

La ventana de media móvil (24 h) es un simple concepto matemático que filtra las típicas variaciones en las concentraciones efluente generadas por el perfil diario de carga y por lo tanto, los valores de referencia de OD seleccionados por el controlador actúan en función del valor medio de amonio efluente obtenido durante las últimas 24 horas. De esta manera, el valor de OD varía progresivamente de acuerdo con perturbaciones producidas a medio y largo plazo (por ejemplo tiempo seco o de lluvia, variaciones de carga inesperadas, cambios en la temperatura, variaciones de carga semanales o estacionales, etc.), pero no se ve afectado por las perturbaciones causadas por el perfil periódico diario (Ostolaza and García-Sanz, 1998). La ventana de media móvil puede también ser utilizada para “distribuir” las perturbaciones cíclicas entre el valor del amonio efluente y el valor de referencia del OD. Por ejemplo, si el período de tiempo que abarca la media móvil se reduce desde 24 hasta 12 horas, se reduciría el tiempo de respuesta del controlador y la altura de los picos de amonio efluente instantáneo, a costa de un aumento en las fluctuaciones del valor de referencia del OD dados por el controlador. Por lo tanto, el operador de planta puede seleccionar el tamaño más apropiado de la ventana de media móvil para cada caso particular. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que, una reducción del tamaño de media móvil para el amonio efluente causará mayores fluctuaciones a corto plazo en los valores de referencia del OD y por lo tanto, un incremento neto del aire total consumido para una cantidad similar de amonio eliminado. Este efecto está causado debido a la relación no lineal entre la concentración de OD y la velocidad de nitrificación combinado con la disminución de la transferencia de oxígeno a valores altos de OD.

### 5.4.2.2 Control del proceso de desnitrificación

El segundo lazo supervisor tiene como objetivo la utilización óptima del potencial de desnitrificación de la planta seleccionando el valor más apropiado de la recirculación de nitratos desde la salida de la zona aireada a la zona anóxica. La utilización del potencial de desnitrificación óptimo en la operación de la EDAR implicará, una eliminación máxima de nitratos en el efluente, una eliminación máxima de materia orgánica sin consumo de oxígeno y una recuperación máxima de la alcalinidad del agua residual.

Con este propósito, el segundo lazo de control (Figura 5.12) diseñado para la EDAR de Galindo selecciona de forma continua el caudal de recirculación interna necesario para mantener una concentración de nitratos baja y estable al final de la zona anóxica.

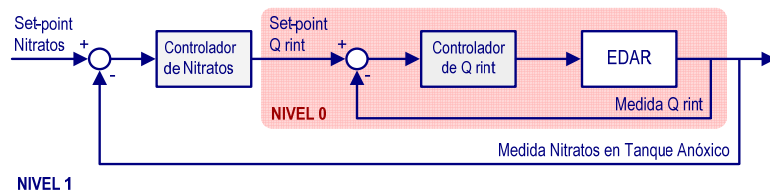


Figura 5.12. Lazo supervisor del potencial de desnitrificación

Un valor de referencia bajo para esta concentración asegura una desnitrificación completa utilizando caudales de recirculación interna mínimos, con una cantidad de oxígeno mínima recirculada y un tiempo máximo de retención hidráulico en la zona anóxica.

Por último, debe indicarse que esta estrategia de control está basada en el valor instantáneo de nitratos en la zona anóxica y por tanto no necesita de filtro de media móvil.

### 5.4.2.3 Control de la masa de sólidos en los reactores

La selección de un valor apropiado de la cantidad total de fango en los reactores biológicos tiene también una influencia significativa en el comportamiento del proceso. Así, el operar la EDAR con masas de sólidos altas (bajos caudales de purga) implica un aumento en la demanda de oxígeno (debido a la respiración endógena) y en la cantidad de sólidos al decantador secundario. Por otro lado, la

producción de fangos se reduce y aumenta la actividad biológica, mejorando la estabilidad del proceso.

De acuerdo con esto, el tercer lazo de control tiene como objetivo mantener un valor medio seleccionado de masa total de sólidos suspendidos en los reactores biológicos mediante la manipulación automática del caudal de purga. La utilización de la masa total de sólidos (en vez de las medidas de concentración de sólidos medidas por los sensores), permiten la generalización de esta estrategia en plantas de alimentación escalonada o con configuraciones de contacto-estabilización (RDN). Sin embargo, debe tenerse en cuenta que el valor apropiado de referencia de la masa de sólidos debe seleccionarse teniendo en cuenta la cantidad de sólidos que el decantador secundario puede asumir, y este valor está relacionado con los SSLM en el último reactor. Al igual que en el primer lazo de control, en ésta también se ha introducido un filtro de media móvil 24-horas para reducir las perturbaciones producidas por los perfiles diarios de carga.

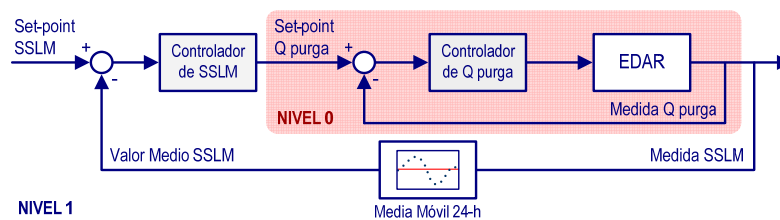


Figura 5.13. Lazo de control de la masa de sólidos en el sistema

Los tres lazos de control detallados han sido implantados en una de las líneas de la EDAR de Galindo como estructuras SISO (Simple Input Simple Output) ya que, estudios realizados previamente han demostrado que no hay interferencias significativas entre estas tres estrategias de control si las variables manipulables se encuentran dentro del rango de operación normal (Ostolaza and García-Sanz, 1998).

El tipo de controladores utilizados en las estrategias son controladores de tipo Proporcional-Integral (PI) incremental (Aström and Hägglund, 1995).

### **5.4.3 Calibración de los controladores**

La calibración de los controladores PI utilizados en las estrategias de control descritas se ha llevado a cabo de manera que éstos garanticen un comportamiento adecuado ante cualquier perturbación externa. Es importante tener en cuenta que ésta no es una tarea sencilla en una EDAR real, donde los procesos que tienen lugar presentan comportamientos no lineales en la mayoría de los casos y con tiempos de respuesta muy diferentes. Por lo tanto, aunque la calibración de los controladores se ha llevado a cabo siguiendo el procedimiento sistemático que se describe a continuación, la validación de los parámetros obtenidos mediante estudios por simulación a partir del modelo LAGuas Galindo PWM obtenido en el Apartado 5.3.1, ha sido fundamental en el reajuste de estos parámetros para optimizar su comportamiento en la EDAR real.

La calibración de los controladores se ha llevado a cabo en dos pasos:

- 1 Caracterización del proceso en lazo abierto
- 2 Sintonización de los parámetros del controlador

#### **5.4.3.1 Caracterización del proceso en lazo abierto**

Un proceso en lazo abierto queda caracterizado cuando se determinan sus modelos estático y dinámico.

El modelo estático establece la relación entre variable manipulable y variable objetivo en diferentes situaciones estacionarias. Mediante este modelo se determina la linealidad del proceso y el valor de su constante proporcional en un rango de valores determinado. En caso de que un proceso presentase un comportamiento no lineal en el rango de operación normal de la EDAR, y esta no-linealidad fuera muy pronunciada, la ley de control debería modificarse incluyendo por ejemplo, una ganancia variable para garantizar el comportamiento adecuado del controlador.

El modelo dinámico permite, ante variaciones en el valor de la variable manipulable, estudiar el comportamiento dinámico del proceso seleccionando el orden del sistema y estimando el valor de los tiempos de respuesta y retardo en el caso de que lo hubiera.

De acuerdo con la estrategia de control avanzado propuesta en este Capítulo, los tres procesos en lazo abierto estudiados son:

- OD – N-NH<sub>4</sub> medio en el efluente

- Caudal de recirculación interna ( $Q_{Rint}$ ) –  $N-NO_3$  en la zona anóxica
- Caudal de purga ( $Q_{Purga}$ ) – Masa total de sólidos en la zona DN (MTSS DN)

La determinación de los modelos estáticos a partir de ensayos experimentales en EDAR real presenta varias dificultades debido a que existe una interrelación entre diferentes relaciones causa-efecto y el proceso se ve afectado por muchas perturbaciones simultáneamente. Por este motivo, los modelos estáticos de los tres procesos en lazo abierto han sido determinados mediante estudios por simulación y únicamente en el proceso  $Q_{Rint}$  -  $N-NO_3$  en la zona anóxica, debido a su rápido tiempo de respuesta, el modelo estático ha sido verificado experimentalmente. Las siguientes Figuras muestran los modelos estáticos obtenidos para los procesos OD-  $N-NH_4$  medio y  $Q_{Rint}$ -  $N-NO_3$ .

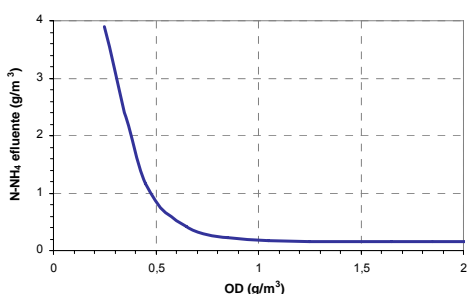


Figura 5.14. Modelo estático del proceso OD -  $N-NH_4$  medio

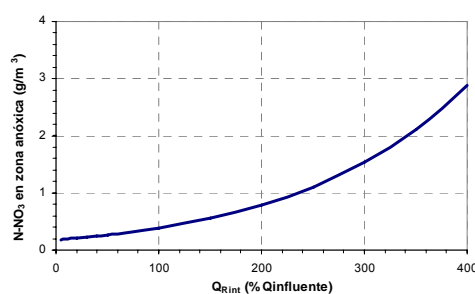


Figura 5.15. Modelo estático del proceso  $Q_{Rint}$  –  $N-NO_3$

La determinación del modelo dinámico en los tres procesos se ha llevado a cabo mediante el estudio de la respuesta de la variable objetivo ante cambios de tipo escalón en la variable manipulable. Al igual que el caso anterior, los estudios por simulación a partir del modelo LAGuas Galindo PWM han sido determinantes. En concreto, en el caso del proceso  $Q_{Purga}$  – MTSS en DN, el modelo dinámico ha sido determinado mediante estudios por simulación, ya que este proceso presenta altos tiempos de respuesta y retardo. En el caso de los procesos OD-  $N-NH_4$  medio y  $Q_{Rint}$ -  $N-NO_3$  en la zona anóxica, aunque la respuesta de las variables objetivo se ha estudiado de forma experimental, en estos estudios se ha puesto de manifiesto la gran dificultad para identificar experimentalmente la relación entrada-salida entre las variables manipulables y los objetivos de control en la EDAR real

A este respecto por ejemplo, en el tanque de desnitrificación D donde se medía la concentración de  $N-NO_3$ , se observó que los valores del tiempo de respuesta del sistema y constante proporcional, dependían en gran medida del punto en el que se encontrase el potencial de desnitrificación en la zona anóxica. Así, si el ensayo se llevaba a cabo durante los picos de entrada de materia orgánica a la EDAR, la respuesta de la concentración de  $N-NO_3$  no era apenas perceptible debido a que la mayor parte de la carga de  $N-NO_3$  recirculada, era empleada instantáneamente en el consumo de materia orgánica. En la Figura 5.16, se muestra un ejemplo de la respuesta de la concentración de  $N-NO_3$  cuando se produce un cambio de tipo escalón en el caudal de recirculación interna en un punto en el cual el potencial de desnitrificación se encuentra suficientemente agotado.

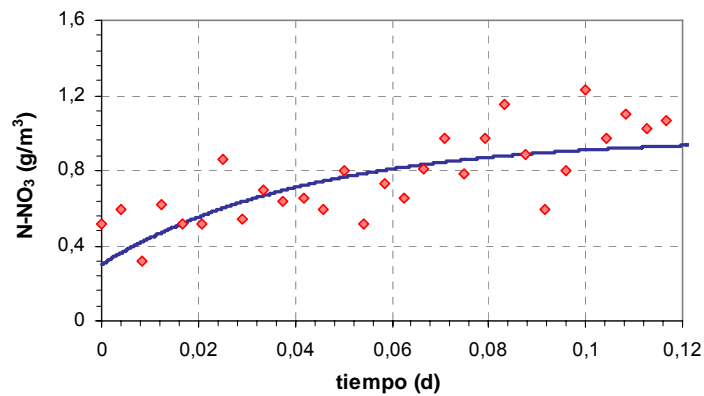


Figura 5.16. Respuesta de la concentración de  $N-NO_3$  ante una entrada de tipo escalón de recirculación interna

La Figura 5.17 muestra los resultados obtenidos en la respuesta del  $N-NH_4$  efluente ante una variación de tipo escalón en el OD en los reactores N1 y N2.

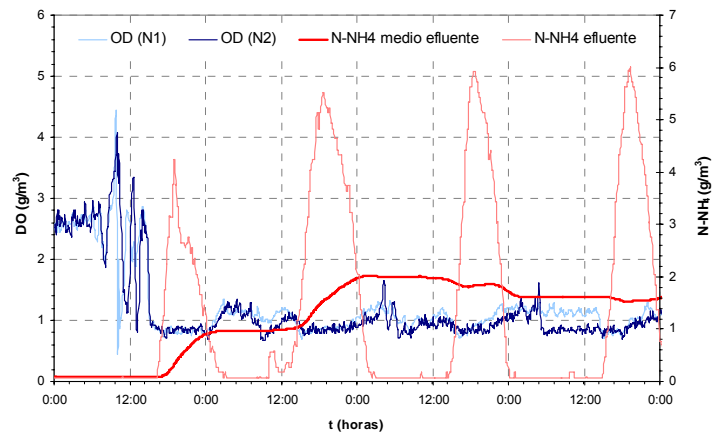


Figura 5.17. Respuesta de la concentración de N-NH<sub>4</sub> ante una entrada de tipo escalón de OD

Sin embargo, y al igual que en el caso anterior, en la respuesta de N-NH<sub>4</sub> medio efluente ante variaciones de tipo escalón en la concentración de OD, se obtienen resultados muy diferentes dependiendo de la franja horaria en la que se lleve a cabo estos ensayos. A este respecto, la Figura 5.18 muestra la diferente respuesta del N-NH<sub>4</sub> medio obtenidas por simulación ante cambios de tipo escalón en el valor de OD realizados en dos momentos diferentes del día.

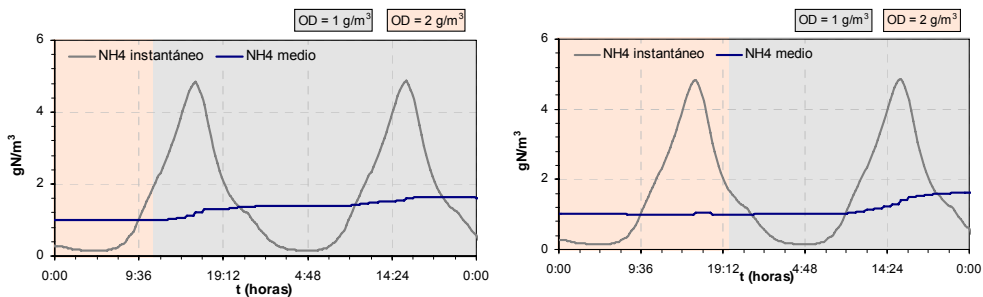


Figura 5.18. Respuesta del NH<sub>4</sub> efluente ante cambios escalón en el valor de OD

En esta Figura puede observarse que, tanto la ganancia como el tiempo de respuesta y retardo en la respuesta del N-NH<sub>4</sub> efluente medio, son totalmente dependientes de la perturbación.

Por lo tanto, y debido a la imposibilidad de obtener una respuesta experimental entrada-salida independiente de las perturbaciones a las que está sometida la EDAR real, la utilización del modelo de la EDAR de Galindo ha sido utilizado para determinar los procesos en lazo abierto en una situación estacionaria (Figura 5.19).

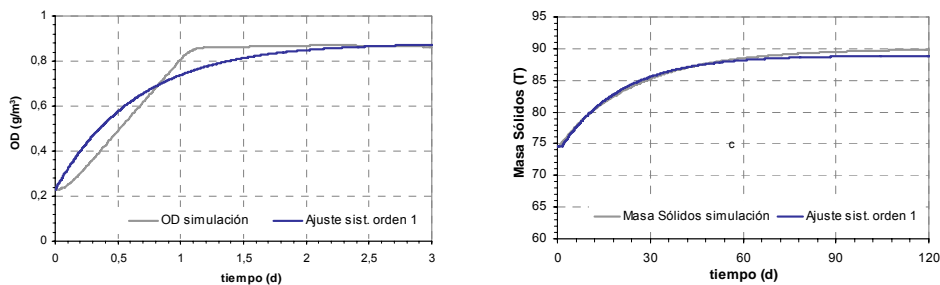


Figura 5.19. Respuesta del  $\text{NH}_4$  efluente y Masa de sólidos ante cambios escalón en el valor de OD y  $Q_{\text{purga}}$  respectivamente

En base a los modelos dinámicos obtenidos se concluye que, al igual que en la mayoría de los procesos que tienen lugar en una EDAR, los tres procesos estudiados pueden ser reproducidos razonablemente con modelos lineales de primer orden.

#### 5.4.3.2 Sintonización de los parámetros del controlador

Una vez caracterizados los tres procesos en lazo abierto, la sintonización de los parámetros del controlador se ha llevado a cabo mediante el método de Ziegler-Nichols. Posteriormente, los parámetros obtenidos han sido reajustados mediante un método de optimización utilizando el criterio ITAE (Aström and Hägglund, 1995). Este criterio permite evaluar la respuesta de un controlador cuando se produce un cambio de tipo escalón en el valor de referencia de la variable objetivo. Los detalles de esta sintonización y los parámetros obtenidos para los controladores PI se detallan en (Grau y Ayesa, 2003).

Finalmente, y a partir de los valores obtenidos con estos dos métodos, el comportamiento de los controladores ha sido validado por simulación utilizando el modelo LAGuas Galindo PWM. Debe indicarse que esta validación ha sido de gran ayuda en la implantación segura y estable de los lazos supervisores de



control en la EDAR real sin necesidad de reajustar los parámetros de los controladores.

#### **5.4.4 Verificación por simulación de la estrategia de control avanzado**

En base al modelo LAguas Galindo PWM, en este Apartado se presentan los resultados obtenidos en la verificación por simulación de la estrategia de control avanzado propuesta en el Apartado 5.4.2. En este estudio se evalúa de forma comparativa el comportamiento de una de las líneas de la EDAR de Galindo durante un año, cuando ésta es operada de forma convencional o mediante la estrategia de control avanzado. Aunque en estudios anteriores en planta piloto estas ventajas habían quedado demostradas y cuantificadas (Galarza et *al.*, 2001b), con este estudio se pretende evaluar si las ventajas obtenidas en planta piloto pueden ser extrapoladas en la operación de la EDAR real.

El influente utilizado en este estudio se ha obtenido, en primer lugar, a partir de datos medios diarios de entrada a la EDAR real de caudal, DQO, N-NH<sub>4</sub>, P inorgánico y temperatura durante el año 2002, y el perfil horario normalizado que presentan éstos en la EDAR de Galindo. Posteriormente, y en base a la caracterización del influente presentada en el Anexo E, se han calculado los valores de entrada horarios para cada uno de los componentes incluidos en el Vector de Componentes de Planta. Los valores de caudales de entrada, DQO y N-NH<sub>4</sub> horarios, y los valores de temperatura diaria se detallan en la Figura 5.20.

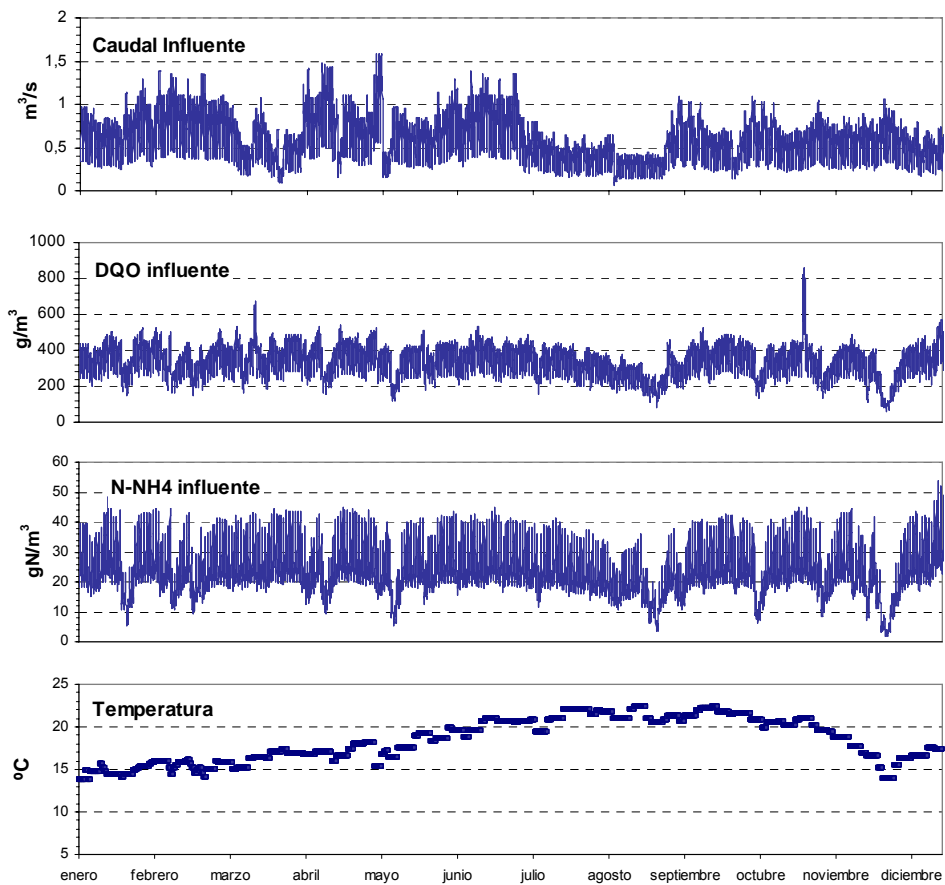


Figura 5.20. Influyente horario utilizado en el estudio por simulación

Las siguientes Figuras muestran de forma comparativa los resultados obtenidos por simulación del modelo LAguas Galindo PWM con respecto a calidad del efluente, costes de aireación y producción de fangos durante un año, cuando la EDAR de Galindo es operada de modo convencional o mediante la estrategia de control avanzado descrita en el Apartado 5.4.2.

En la Tabla 5.7 se muestran los valores de las variables de operación cuando la EDAR es operada de modo convencional.

Tabla 5.7. Valor de las variables de operación en la estrategia de operación convencional

| Actuación                                 | Unidades           | Valor |
|-------------------------------------------|--------------------|-------|
| Caudal de recirculación interna           | % Caudal influente | 200   |
| Caudal de recirculación externa           | % Caudal influente | 100   |
| Oxígeno disuelto en el reactor aerobio N1 | g/m <sup>3</sup>   | 2     |
| Oxígeno disuelto en el reactor aerobio N2 | g/m <sup>3</sup>   | 2     |
| Oxígeno disuelto en el reactor aerobio N3 | g/m <sup>3</sup>   | 2     |
| Edad del fango (SRT)                      | días               | 18    |

En la Tabla 5.8 se muestran los valores de referencia que deben seleccionarse cuando ésta se opera mediante la estrategia de control avanzado. El valor de 135,5 en la masa total de la planta se corresponde con una concentración de 3500 g/m<sup>3</sup> de sólidos suspendidos en la zona DN. El valor de la concentración OD en el último reactor aerobio (N3) se ha fijado en un valor de 2 g/m<sup>3</sup> y no se ha incluido dentro de la estrategia de control avanzado fundamentalmente por dos motivos. En primer lugar, debido al riesgo de decantación de sólidos que existe en este reactor causado por el pequeño valor de OUR al final del proceso. En segundo lugar, debido a que su influencia en los costes aireación es muy pequeña ya que la actividad biológica y el aporte de aire son mucho mayores en los primeros reactores.

Tabla 5.8. Valor de las variables de operación en la estrategia de operación avanzada

| Actuación                                 | Unidades           | Valor |
|-------------------------------------------|--------------------|-------|
| Amonio medio efluente                     | g/m <sup>3</sup>   | 1.5   |
| Nitratos en la zona anóxica               | g/m <sup>3</sup>   | 1     |
| Masa total de la planta                   | T                  | 135,5 |
| Oxígeno disuelto en el reactor aerobio N3 | g/m <sup>3</sup>   | 2     |
| Caudal de recirculación externa           | % Caudal influente | 100   |

En las siguientes figuras se muestran los resultados obtenidos por simulación en la concentración de SST y en la producción de fangos cuando la EDAR se opera con y sin la estrategia de control avanzado.

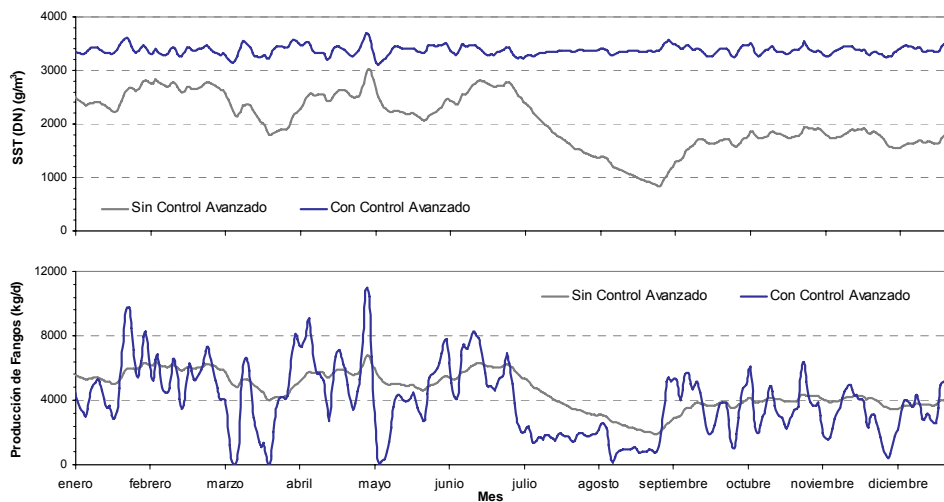


Figura 5.21. Simulación de la concentración de SST en la zon DN y producción de fangos cuando la EDAR es operada con y sin estrategias de control avanzado

La Figura 5.21 muestra cómo el controlador mantiene la masa de sólidos totales alrededor del valor de referencia ( $3500 \text{ g/m}^3$  en la zona DN) mediante la continua adaptación del caudal de purga. En esta figura además, puede observarse el ahorro en la producción de fangos y la garantía de una actividad biológica que implica la implantación de la estrategia de control avanzado, en períodos de tiempo en los que la carga influente a la EDAR disminuye.

La Figura 5.22 muestra de forma comparativa el amonio efluente instantáneo y medio (24h) frente al consumo de aire en el primer reactor aerobio, cuando la EDAR se opera con y sin las estrategias de control avanzado. En esta Figura puede observarse que la estrategia de control implantada permite cumplir la restricción del amonio medio efluente durante prácticamente todo el año de simulación, excepto en algunos periodos puntuales durante los meses de invierno. Además, la concentración del amonio efluente es menor, con menos fluctuaciones y con menos requerimientos de aireación debido a la mayor actividad en los reactores conseguida con la estrategia de control  $Q_{\text{Purga}} - \text{MTSS}$  en la zona DN.

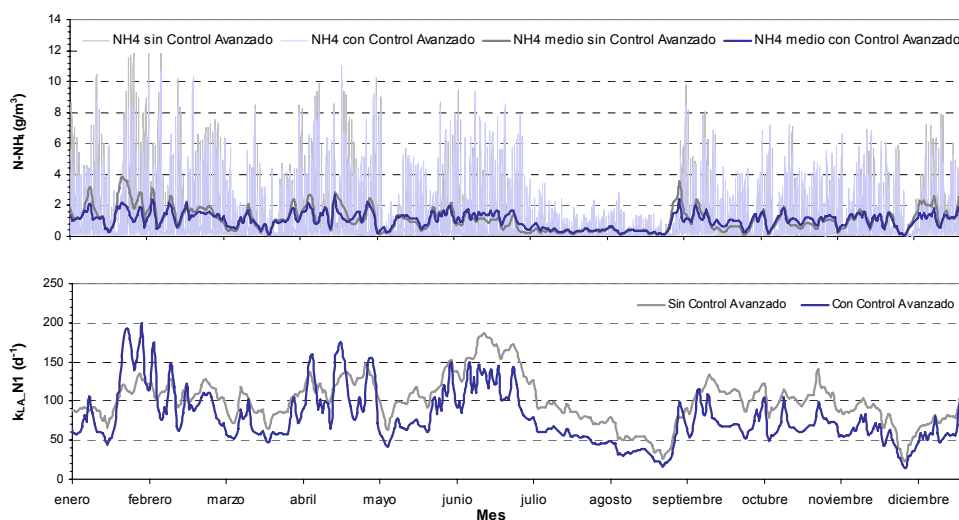


Figura 5.22. Concentración de  $\text{NH}_4$  efluente y consumo de aire en el primer reactor aerobio cuando la EDAR es operada con y sin estrategias de control avanzado

En base a este estudio de simulación, puede concluirse que las estrategias de control avanzado implican, además de una mayor calidad en el efluente, un ahorro en la aireación del 22% en el primer reactor aerobio y del 11% en el segundo, y un ahorro en la producción de fangos del 15%. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que el estudio de simulación se ha llevado a cabo a partir de los datos obtenidos en la EDAR durante el año 2002 en el que ésta se operaba en condiciones de baja carga. Por lo tanto, los resultados obtenidos en este estudio por simulación podrían ser algo más optimistas que los obtenidos de forma real en la actualidad.

#### **5.4.5 Implantación y validación experimental en la EDAR real de Galindo de la estrategia de control avanzado**

En la actualidad, y en base a los resultados obtenidos en el estudio por simulación, la estrategia de control avanzado ha sido implantada en una de las líneas de aguas de la EDAR real de Galindo.

Los valores de referencia de las variables de operación en operación de la EDAR mediante la estrategia de control avanzado se muestran en la Tabla 5.9.

Tabla 5.9. Valor de las variables de operación en la estrategia de operación avanzada en la validación experimental

| Actuación                                 | Unidades           | Valor |
|-------------------------------------------|--------------------|-------|
| Amonio medio efluente                     | $\text{g/m}^3$     | 1     |
| Nitratos en la zona anóxica               | $\text{g/m}^3$     | 0,5   |
| Masa total de la planta                   | T                  | 75,5  |
| Oxígeno disuelto en el reactor aerobio N3 | $\text{g/m}^3$     | 2     |
| Caudal de recirculación externa           | % Caudal influente | 100   |

Las Figuras 5.23, 5.24, 5.25 y 5.26 muestran los resultados obtenidos durante una validación experimental llevada a cabo durante varias semanas.

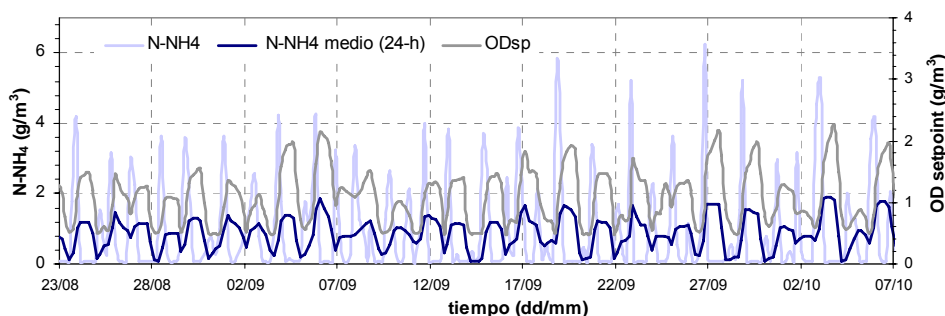


Figura 5.23. Concentración de  $\text{NH}_4$  efluente y valor de referencia de OD durante la validación experimental

La Figura 5.23 muestra la concentración de amonio efluente medido experimentalmente a la salida de los reactores biológicos (valores instantáneos y medios de 24 horas) y la concentración de OD en los reactores aerobios. Puede observarse como el lazo de control supervisor regula el valor de amonio medio efluente alrededor del valor de referencia seleccionado ( $1,0 \text{ gN/m}^3$  durante este periodo experimental) con algunos picos ocasionales de amonio instantáneo en efluente que serán amortiguados en el decantador secundario. También puede observarse en esta figura que la estrategia de control basada en un lazo de retroalimentación no permite eliminar completamente las oscilaciones periódicas alrededor de la referencia seleccionada y como consecuencia, debería considerarse un factor de seguridad al seleccionar los valores de referencia más adecuados. Este comportamiento oscilatorio, probablemente podría reducirse introduciendo una estrategia de tipo feed-forward o simplemente, desplazando

el analizador de amonio desde la salida hasta un punto intermedio en el volumen de nitrificación para mejorar la sensibilidad del controlador ante continuas variaciones en el  $\text{N-NH}_4$ .

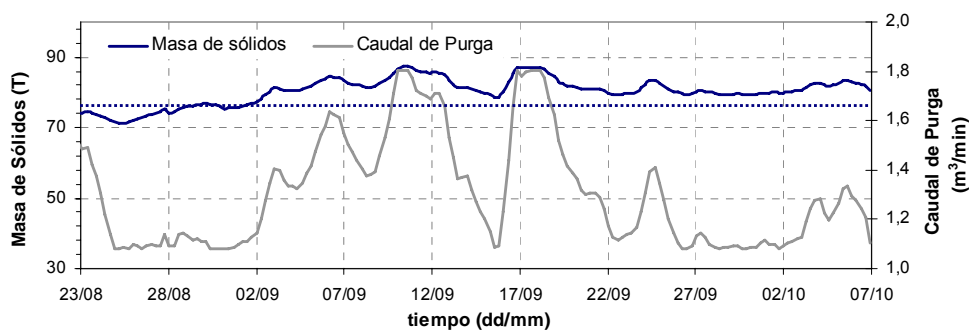


Figura 5.24. Masa de sólidos en la EDAR y setpoint del Caudal de purga durante la validación experimental

En la Figura 5.24 se observa cómo el lazo supervisor utilizado para regular la masa de sólidos en los reactores biológicos es capaz de mantener un valor medio de la masa estable alrededor de 77,4 T (concentración de  $2000 \text{ g/m}^3$  en la zona DN) mediante la manipulación del caudal de purga, a pesar de las perturbaciones causadas, sobretodo, por las fluctuaciones en la carga influente o por los trasvases de masa de unas líneas a otras durante la puesta en marcha de las diferentes líneas de la EDAR.

Finalmente, el lazo supervisor del control de nitratos en la zona anóxica permite regular la concentración instantánea de  $\text{N-NO}_3$  a la salida del último reactor de desnitrificación (D) en un valor de  $0,5 \text{ gN/m}^3$ . Este lazo supervisor posee una rápida respuesta ante las variaciones en la entrada y no requiere ningún tipo de ventana de media móvil. Aunque, este hecho facilita la calibración experimental del proceso en lazo abierto, el controlador puede sufrir una propagación excesiva del ruido en la medida, que sería especialmente notoria si se introdujese el término derivativo en la ley de control. La Figura 5.25 muestra la mejora significativa observada cuando se introdujo un filtro de pasa bajo apropiado en el período de validación.

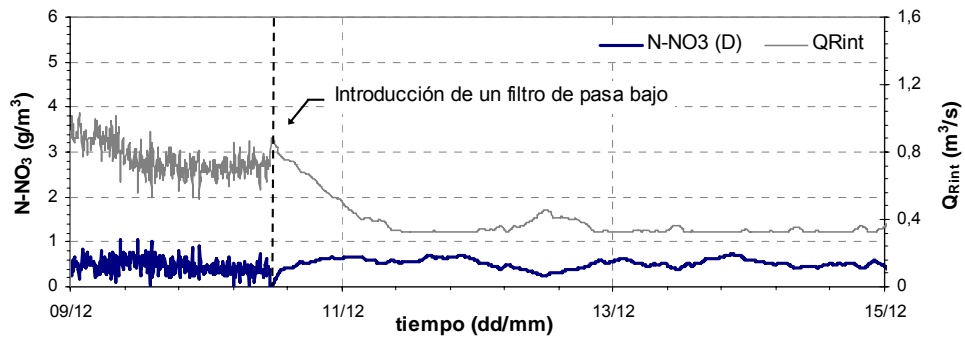


Figura 5.25.  $N\text{-NO}_3$  en el reactor D y valor de referencia de caudal de recirculación interna durante la validación experimental

Los principales beneficios obtenidos con la implantación de la estrategia de control se han centrado en estabilidad del proceso, calidad del efluente y ahorro en costes.

Algunos interesantes resultados obtenidos referentes al consumo de aire se presentan en la Figura 5.26.

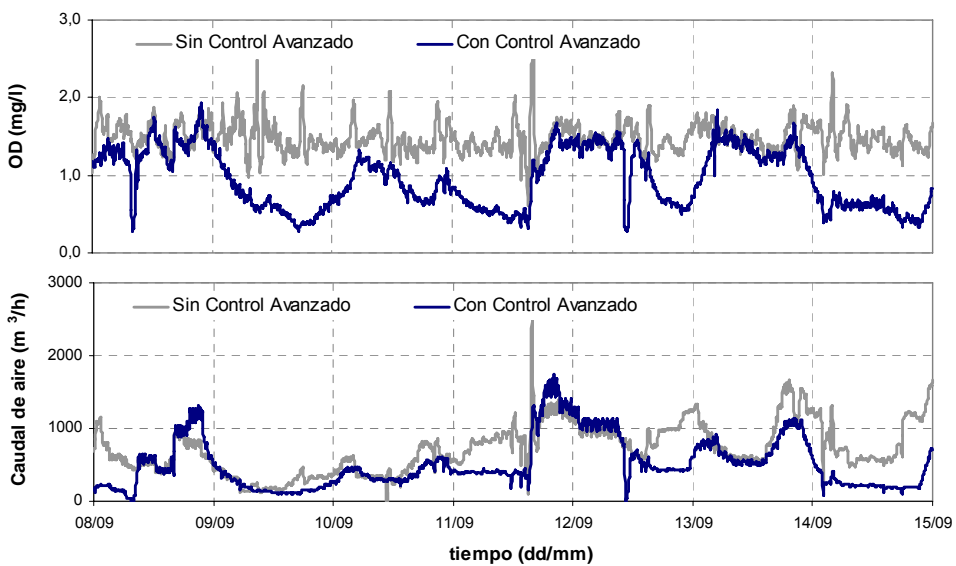


Figura 5.26. OD disuelto y Caudal de aire durante el período de validación experimental



La Figura 5.26 compara la concentración de OD y el consumo de aire en el primer tanque de nitrificación en dos líneas paralelas durante una semana. Mientras que una de las líneas es operada con un valor de referencia de OD constante ( $1,5 \text{ g/m}^3$ ), en la otra la operación se lleva a cabo mediante la estrategia de control avanzado. La Figura 5.26 muestra cómo el control supervisor modifica la concentración de OD de acuerdo con el valor medio de  $\text{N-NH}_4$  efluente, produciendo una reducción en el consumo de aire durante períodos de baja carga.

La reducción obtenida en los costes de aireación durante esta validación experimental ha sido del 15-20%, valor que corroboran los resultados estimados en el estudio de simulación que realizado previamente.

El ahorro en el consumo total de aire durante todo el año es difícil de estimar ya que este ahorro está determinado por la carga y la temperatura durante todo el año. Debido a que la validación experimental se ha llevado a cabo en un período del año donde las condiciones de temperatura y carga contaminante a la entrada son muy favorables, en principio podría pensarse que el ahorro en costes de aireación anual será algo menor que el obtenido en este estudio. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que, el valor de referencia de  $\text{N-NH}_4$  medio efluente se ha fijado en  $1 \text{ gN/m}^3$  frente al valor de  $1,5$  empleado en el estudio por simulación. Además, en la línea operada de modo convencional el valor de OD se ha mantenido en  $1,5$  mientras que en la verificación por simulación el valor de OD se ha fijado en  $2 \text{ g/m}^3$ . Por estos dos motivos, puede concluirse que los posibles ahorros en costes de aireación anuales no serán muy inferiores al valor obtenido en esta validación.

La mejora en la calidad del efluente se basa principalmente en el uso óptimo del potencial de desnitrificación. Sin embargo, la reducción global en los costes de aireación se debe principalmente a tres factores: la utilización de una gran cantidad de nitratos como aceptor de electrones en las condiciones anóxicas, la mejora en la eficiencia de la transferencia de oxígeno en valores bajos de OD y finalmente, la continua adaptación de la eliminación de  $\text{N-NH}_4$  para cumplir estrictamente los requerimientos del efluente. Por último, debe indicarse que posibles efectos colaterales y no deseados, tales como el deterioro de las propiedades de decantación de los flóculos, o la decantación de los sólidos suspendidos en los reactores biológicos no se observaron durante la validación.

Actualmente, y en vista de los numerosos beneficios con respecto a la estabilidad del proceso, calidad del efluente y ahorro de costes de explotación que la implantación de la estrategia de control avanzado ha reportado, ésta está siendo implantada en todas las líneas de la EDAR real.

## **5.5 EXPLORACIÓN DE LA OPERACIÓN INTEGRADA EN LA EDAR DE GALINDO**

En este apartado se presenta una exploración por simulación de distintas alternativas de operación en EDAR considerando de forma conjunta las líneas de tratamientos de aguas residuales y fangos. Mediante este estudio se pretende evaluar los efectos que tendrían sobre la calidad del efluente, estabilidad del proceso y costes operacionales, el tratamiento por digestión anaerobia de los fangos procedentes de la decantación primaria y secundaria, y los retornos de los sobrenadantes procedentes de la línea de fangos al tratamiento biológico.

Puesto que la EDAR de Galindo no incluye el proceso de digestión anaerobia en la línea de fangos, esta exploración se ha llevado a cabo a partir de un escenario ficticio, basado en una de las seis líneas de tratamiento biológico de la EDAR de Galindo. En esta línea se han agregado un decantador primario y una línea de fangos, en la que se han ido incorporando progresivamente un digestor anaerobio para el tratamiento de los fangos obtenidos en la decantación, y procesos de tratamiento de sobrenadantes que reducen la carga contaminante de entrada a la línea de aguas.

El modelo matemático a partir del cual se realiza esta exploración se ha construido, dependiendo de los procesos considerados en cada caso, de acuerdo con la metodología de modelado integral PWM propuesta en el Capítulo 2 y a partir del modelo obtenido en el apartado 5.3.1. La ampliación de este modelo con las nuevas transformaciones y componentes necesarios para describir los procesos requeridos en cada caso, permitirá visualizar la flexibilidad que posee esta metodología para la construcción de modelos adaptados a EDAR o casos de estudio específicos.

### 5.5.1 Exploración de la operación de la EDAR de Galindo con digestión anaerobia de fangos

En este apartado se lleva a cabo la exploración de la EDAR de Galindo cuando en ésta se considera de forma conjunta la decantación primaria, el tratamiento biológico y el tratamiento de fangos mediante digestión anaerobia. Tal y como se ha mencionado anteriormente, este estudio se ha llevado a cabo tomando como escenario una de las líneas del tratamiento biológico de la EDAR de Galindo. Los resultados obtenidos podrían ser extrapolados posteriormente en todas las líneas, para una evaluación global de toda la EDAR.

La configuración empleada en esta exploración, el modelo matemático construido y los resultados obtenidos se detallan a continuación.

#### 5.5.1.1 Configuración de la EDAR de Galindo con digestión anaerobia de fangos

En este caso de estudio, tal y como se muestra en la Figura 5.27, a la configuración de una de las líneas de tratamiento biológico de la EDAR de Galindo, se le ha agregado un decantador primario (DP), dos espesadores de fangos (ESP1 y ESP2) y un digestor anaerobio (DA).

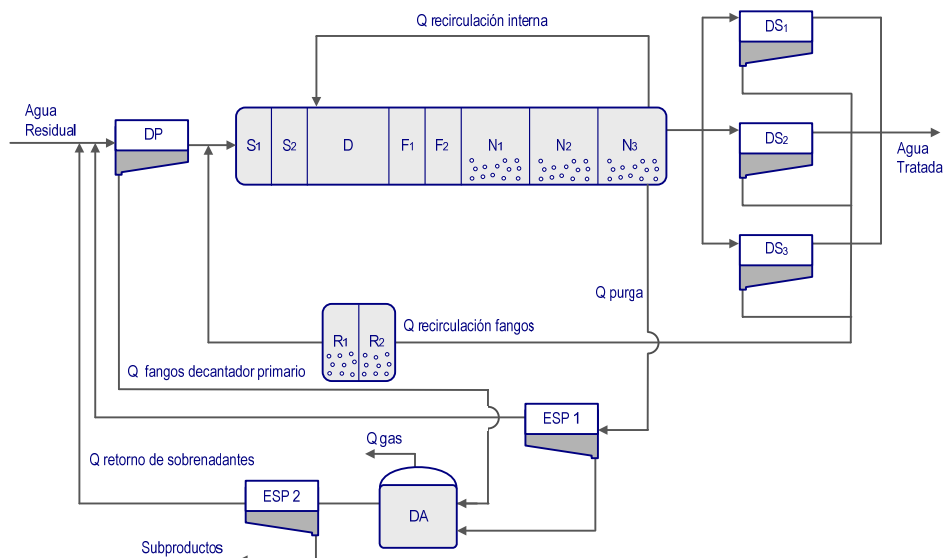


Figura 5.27. Configuración de la EDAR de Galindo con digestión anaerobia

Las características más importantes de los elementos incorporados se describen a continuación.

- *Decantador primario*

En base a un análisis del rendimiento en la eliminación de sólidos en el tratamiento primario en la EDAR de Galindo, el decantador primario incluido en esta configuración presenta un rendimiento en la eliminación de sólidos del 80%. El caudal extraído por el fondo del decantador varía de forma que la concentración de sólidos extraídos por el fondo del decantador es del 4%.

- *Espesador*

Los espesadores incluidos en la línea de fangos tienen como objetivo la deshidratación de los fangos provenientes del tratamiento biológico (ESP1) y del digestor anaerobio (ESP2). El rendimiento de eliminación de sólidos se ha fijado en 98% y la concentración de sólidos extraídos por el fondo en 7% y 28% (Jeppsson *et al.*, 2006) para los espesadores ESP1 y ESP2.

- *Digestor anaerobio*

El digestor incorporado permite la digestión anaerobia de los fangos procedentes de la decantación primaria y del tratamiento biológico con un tiempo de residencia de 20 días (Jeppsson *et al.*, 2006). A partir del volumen de fango obtenido, el volumen de digestión anaerobia requerido es de 20000 m<sup>3</sup> por línea.

### **5.5.1.2 Construcción del modelo integral de EDAR de Galindo con digestión anaerobia LAguas+LFangos1 Galindo PWM**

El estudio por simulación de la EDAR presentada en la Figura 5.27 requiere un modelo matemático que describa, además de los procesos biológicos de eliminación de C y N en condiciones aerobias y anóxicas, el proceso biológico de la digestión anaerobia del fango y el transporte de masa en cada uno de los elementos incorporados.

La construcción de este modelo se ha llevado a cabo mediante la ampliación del modelo obtenido en el Apartado 5.3.1 y siguiendo el procedimiento propuesto para la construcción de modelos integrales de EDAR, tal y como se detalla a continuación.

### 5.5.1.2.1 Construcción del modelo de transformaciones de planta (PTM)

- *Selección de los Procesos Biológicos*

De acuerdo con la configuración de la EDAR, además del proceso biológico de eliminación de materia orgánica y N considerado previamente, en este nuevo modelo se ha considerado la degradación de materia orgánica en condiciones anaerobias.

- *Selección de las poblaciones de bacterias activas requeridas para describir los Procesos Biológicos seleccionados*

Por lo tanto, de acuerdo con la Tabla 2.36, además de las poblaciones de bacterias  $X_h$  y las nitrificantes  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$ , deben incorporarse en el modelo el conjunto de bacterias que lleva a cabo la degradación de materia orgánica en condiciones anaerobias ( $X_{su}$ ,  $X_{aa}$ ,  $X_{fa}$ ,  $X_{c4}$ ,  $X_{pro}$ ,  $X_{ac}$  y  $X_{h2}$ ).

- *Selección de las transformaciones bioquímicas asociadas a la actividad de las poblaciones de bacterias*

Las transformaciones bioquímicas que deben incorporarse en el PTM son aquellas que describen el crecimiento, desaparición e hidrólisis enzimática de las poblaciones  $X_{su}$ ,  $X_{aa}$ ,  $X_{fa}$ ,  $X_{c4}$ ,  $X_{pro}$ ,  $X_{ac}$  y  $X_{h2}$  (Tabla 2.37) en todas las condiciones ambientales. Además, puesto que en este caso en la EDAR se van a dar condiciones anaerobias, las transformaciones de hidrólisis, desintegración de  $X_{c2}$  y desaparición de  $X_{bh}$  y  $X_{ba}$  en estas condiciones también deben considerarse. De acuerdo con la LT presentada en el Apartado 2.3, las transformaciones bioquímicas añadidas al PTM han sido 33-40, correspondientes al crecimiento de las bacterias anaerobias, 45-51, 59-65, 73-79 y 55-57 correspondientes a la desaparición de las bacterias anaerobias y finalmente las transformaciones 88, 95-97 que describen la desintegración de  $X_{c2}$  e hidrólisis en condiciones anaerobias.

Los componentes que en este caso deben añadirse al PTM construido en el apartado 5.3.1.3 son los que representan a las bacterias anaerobias:  $X_{su}$ ,  $X_{aa}$ ,  $X_{fa}$ ,  $X_{c4}$ ,  $X_{pro}$ ,  $X_{ac}$  y  $X_{h2}$  y los componentes  $S_{h2}$  y  $S_{ch4}$  obtenidos a partir de la biodegradación de la DQO en condiciones anaerobias.

- *Incorporación de las transformaciones de equilibrios ácido-base y líquido-gas*

Debido a la incorporación de los componentes  $S_{h2}$  y  $S_{ch4}$ , susceptibles de establecer equilibrios líquido-gas con sus correspondientes componentes en fase gaseosa, en el PTM se han incluido las transformaciones 110 112. Igualmente, los componentes  $G_{h2}$  y  $G_{ch4}$  han sido incorporados en este PTM y en el nuevo Vector de Componentes de Planta (VCP).

La Figura 5.28 muestra de forma esquemática las transformaciones seleccionadas en la construcción del modelo de transformaciones de planta. La estequiometría y cinéticas de las transformaciones incluidas en este nuevo PTM y el vector de componentes de planta se presentan en el Anexo D.

#### 5.5.1.2.2 Construcción de los modelos de proceso unitario (UPM)

Los modelos de proceso unitario para los elementos incorporados a la EDAR se describen a continuación.

- *UPM Digestor anaerobio*

En el Modelo de Proceso Unitario del Digestor Anaerobio, las transformaciones internas se describen mediante el PTM construido en el paso anterior. El transporte de masa se describe mediante balances de masa en dos reactores de mezcla completa para la fase líquida y gaseosa tal y como se describe en el Apartado 3.3.2.1.2.

- *UPM Decantador primario y Espesadores*

En el Modelo de Proceso Unitario del Decantador Primario y Espesador, debido a la función de estos elementos en la EDAR, las transformaciones internas se han obviado. Por lo tanto, los UPM están constituidos únicamente por la descripción del transporte de masa tal y como se detalla en el Apartado 3.3.2.4.

#### 5.5.1.2.3 Construcción del modelo LAguas+LFangos1 Galindo PWM

Finalmente, mediante la conexión de los flujos másicos de los distintos elementos, se obtiene modelo integral LAguas+LFangos1 Galindo PWM.

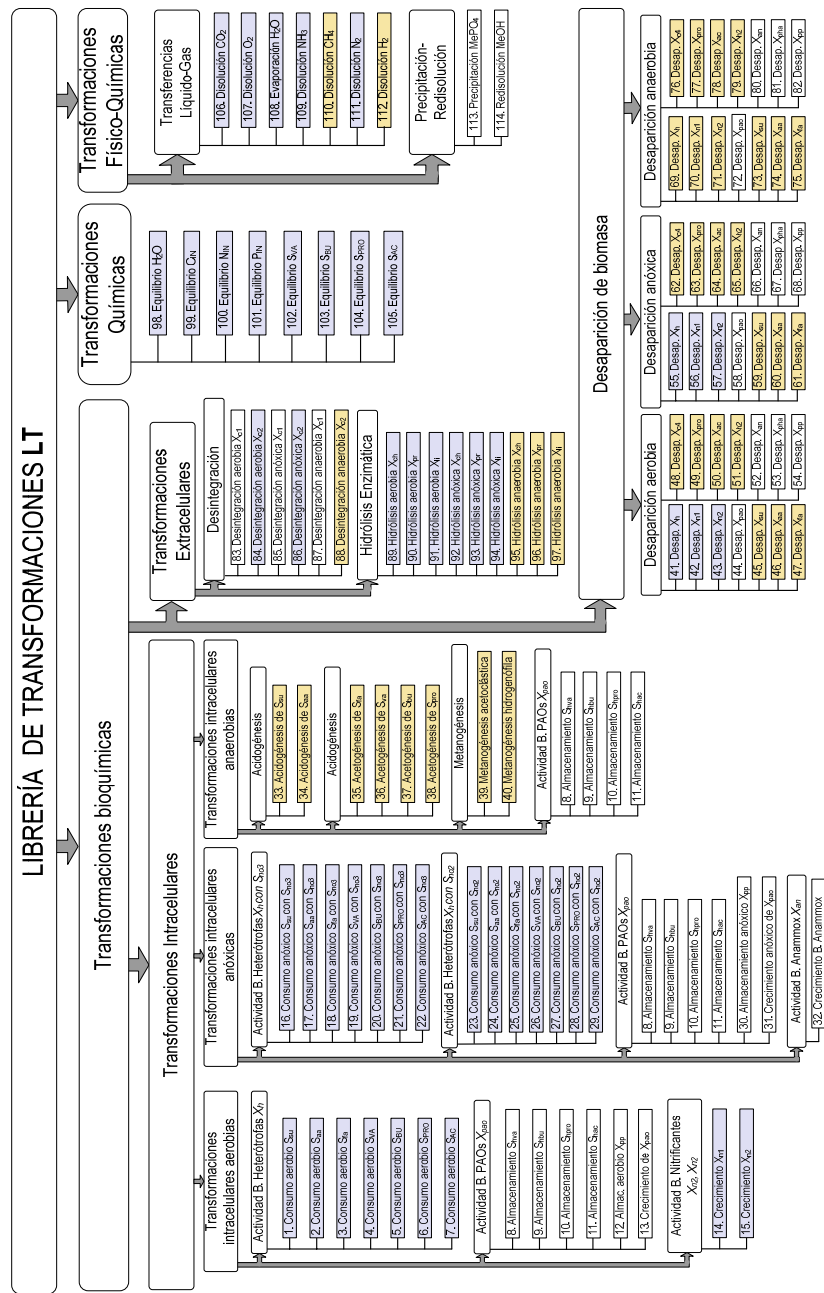


Figura 5.28. Esquema de las transformaciones seleccionadas en el modelo Laguas+LFangos1 Galindo PWM

### 5.5.1.3 Resultados obtenidos en la exploración

Una vez construido el modelo, éste ha sido implantado en la plataforma de simulación WEST® utilizando la nueva categoría PWM desarrollada (Apartado 3.4.1.1).

A continuación, se han llevado a cabo dos estudios por simulación en los que se ha explorado cuál sería el comportamiento integral de la EDAR de Galindo durante un año si ésta incluyera en la línea de fangos un tratamiento de digestión anaerobia (Figura 5.27). En el primero, el tratamiento biológico de la EDAR se ha operado mediante la estrategia de operación convencional planteada en la Tabla 5.7. En el segundo, el tratamiento biológico se ha operado mediante la estrategia de control avanzado propuesta en el apartado 5.4.2.

El influente utilizado en este estudio coincide con el mostrado en la Figura 5.20 para el caso de los componentes solubles. Sin embargo, para el caso de los componentes particulados, su concentración se ha incrementado teniendo en cuenta la eliminación de sólidos en el decantador primario. Los parámetros estequiométricos y cinéticos utilizados en las transformaciones que describen el proceso de digestión anaerobia son los propuestos en Rosen and Jeppsson, (2002) y se detallan en el Anexo D.

En primer lugar, la Figura 5.29 muestra el notable incremento de nitrógeno amoniacal a la entrada del tratamiento biológico debido a la incorporación del digestor anaerobio en la línea de fangos y el retorno de sobrenadantes a cabeza de planta. Este incremento elevado de nitrógeno amoniacal en el influente, causado fundamentalmente por el aporte de los productos de hidrólisis procedentes del decantador primario, es debido al elevado rendimiento de eliminación de SST en la decantación primaria en la EDAR de Galindo (80%), y al criterio utilizado en el cálculo del influente al decantador primario en este caso de estudio. Así, puesto que no se disponen de datos suficientes para caracterizar el influente al tratamiento primario de la EDAR, se ha supuesto que el porcentaje de eliminación de SST en el decantador (80%) se mantiene en el mismo valor para el caso de los SSV. Sin embargo, puede que una parte importante de los sólidos eliminados por el decantador sean sólidos suspendidos inorgánicos, que no se han considerado en esta exploración. En este caso, la cantidad de SSV retirada por el fondo del decantador primario sería menor que la considerada en este caso, y se reduciría el incremento del N a la entrada de la EDAR cuando se consideran los retornos procedentes de la línea de fangos.



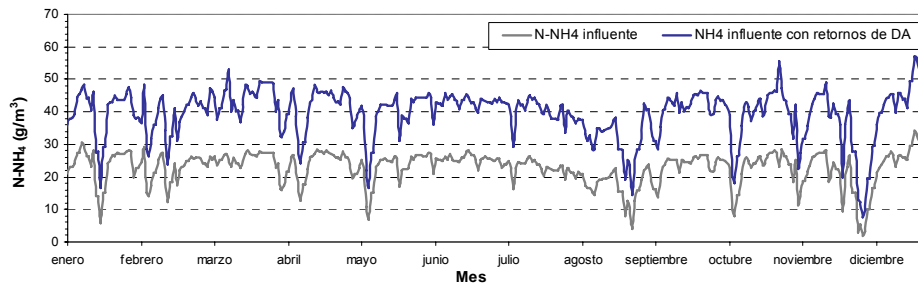


Figura 5.29. Resultados obtenidos por simulación del incremento en la concentración de  $N-NH_4$  con la incorporación del digester de fangos

Las siguientes figuras muestran los resultados obtenidos con respecto a calidad del efluente, costes de aireación y generación de fangos en la EDAR cuando ésta es operada de forma global incluyendo la producción de fangos en la decantación primaria y la recirculación de sobrenadantes a la entrada del biológico. Estos resultados se muestran de forma comparativa con los obtenidos cuando no se consideran los retornos procedentes de la línea de fangos y que ya han sido discutidos en el apartado 5.4.4.

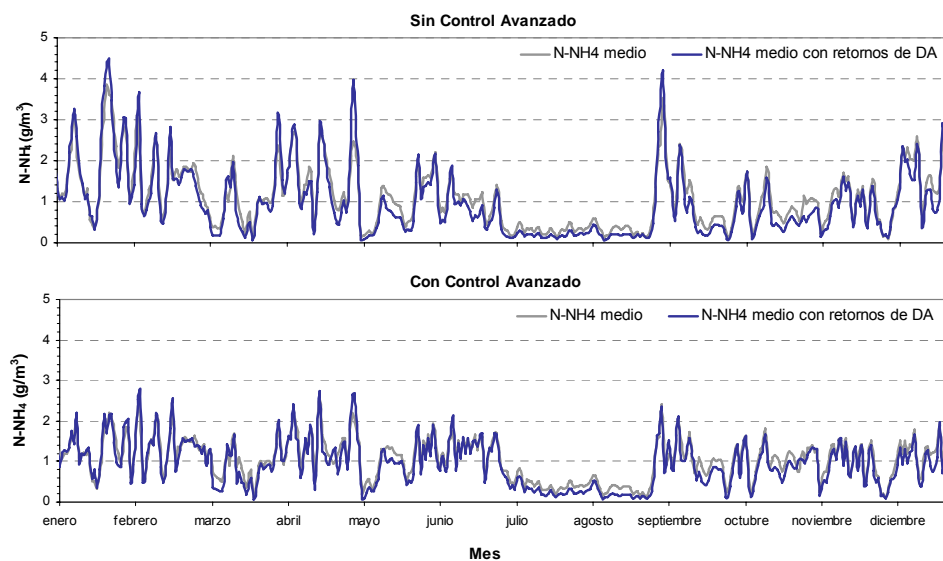


Figura 5.30.  $N-NH_4$  medio (24 h) en el efluente obtenido por simulación cuando se incorpora la línea de fangos con digester anaerobio

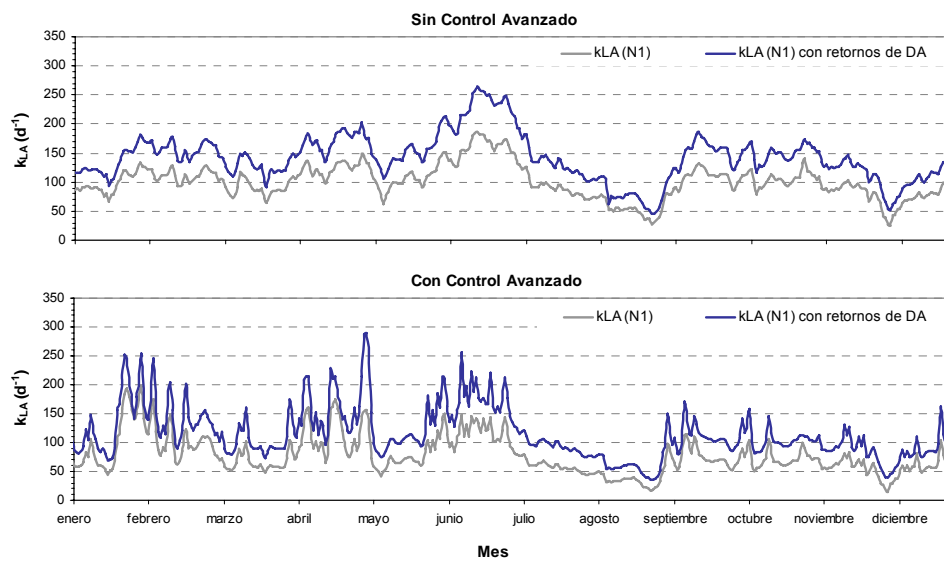


Figura 5.31. Consumo de aire en el primer reactor aireado (N1) obtenido por simulación cuando se incorpora la línea de fangos digester anaerobio

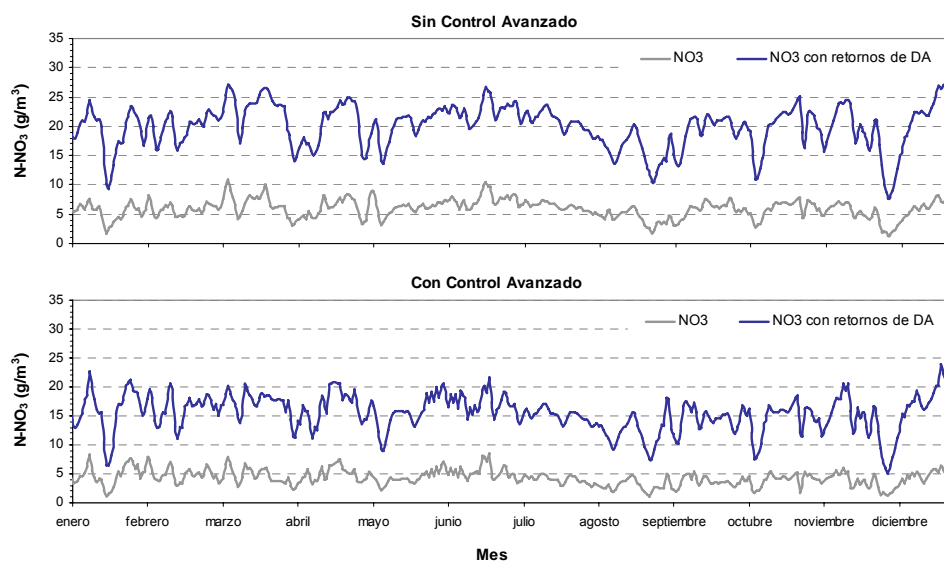


Figura 5.32.  $N-NO_3$  en el efluente obtenido por simulación cuando se incorpora la línea de fangos con digester anaerobio

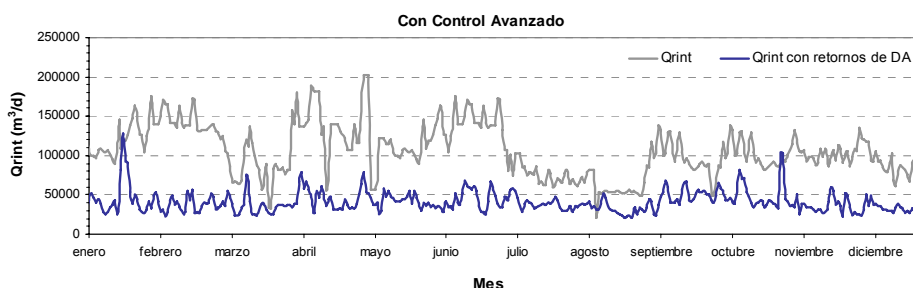


Figura 5.33. Caudal de recirculación interna obtenido por simulación cuando se incorpora el retorno de la línea de fangos con digestor anaerobio

Debido a que el tratamiento biológico de la EDAR de Galindo está ligeramente sobredimensionado en volumen aireado, la Figura 5.30 muestra que el incremento de la concentración amoniacal en el influente no implica un aumento significativo en la concentración de  $\text{N-NH}_4$  medio (24h) efluente.

Sin embargo, este aumento en la carga de  $\text{N-NH}_4$  a la entrada del biológico sí genera una mayor actividad biológica de las bacterias nitrificantes que repercute en un aumento del consumo de aire (Figura 5.31) y un aumento en la concentración de  $\text{N-NO}_3$  (Figura 5.32) en el efluente. Esta mayor actividad no influye de forma relevante en la producción de fangos procedente del tratamiento biológico, por la pequeña fracción de nitrificantes en la biomasa.

Tal y como se observa en la Figura 5.32, la concentración de  $\text{N-NO}_3$  en el efluente aumenta significativamente cuando los sobrenadantes procedentes de la línea de fangos se recirculan a la entrada de la EDAR. También en esta figura se observa que la estrategia de control avanzado es capaz de reducir esta concentración considerablemente. Así, tal y como se observa en la Figura 5.33, el lazo de control mostrado en la Figura 5.12, reduciría el valor de la recirculación interna hasta alcanzar un potencial de desnitrificación óptimo en la zona anóxica. Esta reducción se logra con una menor recirculación de oxígeno a la zona de desnitrificación incrementando así el consumo de nitratos en la degradación de la materia orgánica y reduciendo su concentración final en el efluente en un 22,5%.

Finalmente, en la Figura 5.34 y Figura 5.35 se observa la reducción en la generación de fangos diaria que supone la incorporación del digestor de fangos en la EDAR y el caudal de metano obtenido en el digestor anaerobio.

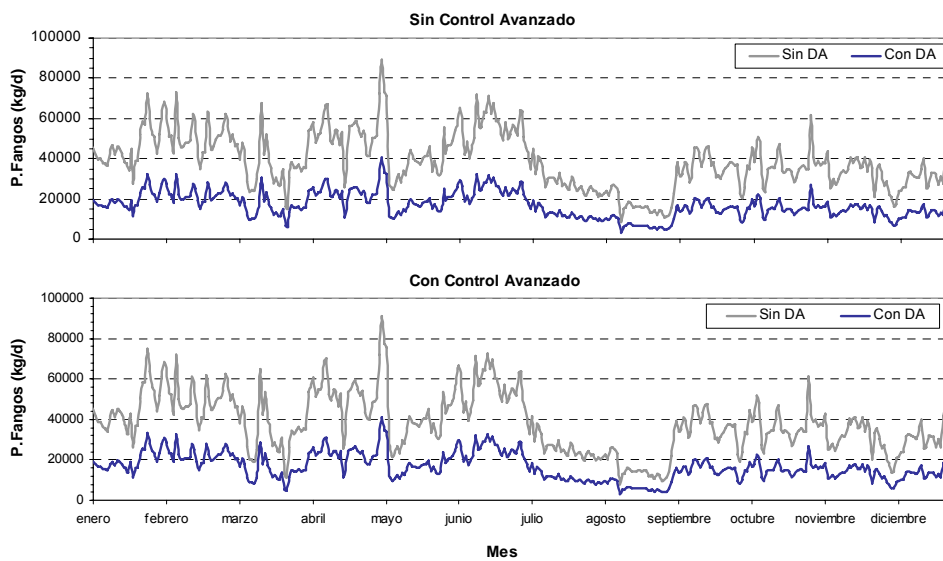


Figura 5.34. Predicción por simulación de la generación de fangos en la EDAR con y sin digestor de fangos

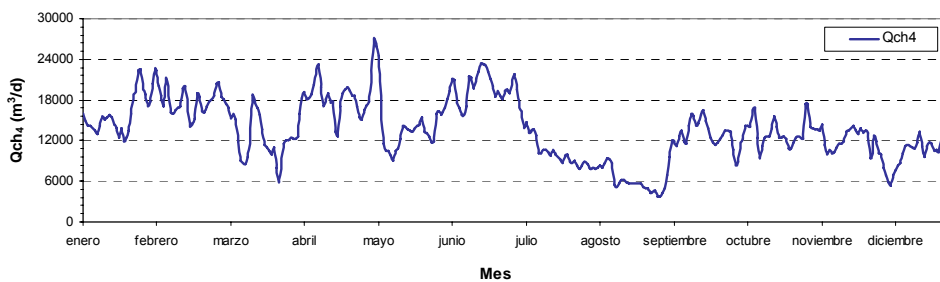


Figura 5.35. Predicción por simulación del caudal de metano obtenido en el digestor anaerobio

Tal y como se observa en la Figura 5.34, la incorporación de la digestión anaerobia del fango permite una reducción de la producción del fango en un 56,4 % y una generación significativa de metano gas (Figura 5.35), además de la obtención de un fango más estabilizado.

La siguiente Tabla muestra de forma comparativa los resultados obtenidos en los cuatro casos de estudio con respecto a calidad del efluente, costes de aireación y producción de fangos.

Tabla 5.10. Resultados obtenidos en los cuatro estudios por simulación

| Parámetro                                | Unidad            | Sin tratamiento de fangos |                           | Con tratamiento de fangos |                           |
|------------------------------------------|-------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
|                                          |                   | Sin estrategia de control | Con estrategia de control | Sin estrategia de control | Con estrategia de control |
| N-NH <sub>4</sub> influente al biológico | gN/m <sup>3</sup> | 22,9                      | 22,9                      | 39,62                     | 39,62                     |
| N-NH <sub>4</sub> efluente medio (24h)   | gN/m <sup>3</sup> | 1,11                      | 1,05                      | 1,00                      | 0,95                      |
| N-NO <sub>3</sub> efluente               | gN/m <sup>3</sup> | 5,91                      | 4,30                      | 20,00                     | 15,49                     |
| Consumo k <sub>1</sub> A                 | ---               | 206                       | 193                       | 284                       | 256                       |
| Producción de Fangos                     | kg/d              | 38,81                     | 38,15                     | 16,89                     | 16,64                     |

Por lo tanto, en base a los resultados obtenidos puede afirmarse que la incorporación de un digestor anaerobio en la línea de fangos permite reducir significativamente la producción de fangos en la EDAR y conseguir un aporte energético en forma de gas metano. Además, y debido a que la EDAR está siendo operada en situación de baja carga, el nitrógeno amoniacal en el efluente se mantiene dentro de los límites establecidos aunque con mayores aportes de caudal de aire. Sin embargo, la concentración de nitratos aumenta de forma significativa y, aunque mediante la estrategia de control su concentración queda reducida, su valor sigue estando por encima de los límites normalmente establecidos.

Manteniendo la configuración actual (Figura 5.36), la reducción de la concentración de N-NO<sub>3</sub> en el efluente podría estudiarse mediante la exploración de distintas alternativas de operación.

- Redimensionar la zona DN en la EDAR aumentando la zona de desnitrificación
- Operar la EDAR mediante la configuración DRDN, incrementando la zona anóxica en la EDAR
- Considerar menores rendimientos de eliminación de sólidos en la decantación primaria de forma que la cantidad de materia orgánica en el tratamiento biológico fuera mayor
- Adición de materia orgánica en la zona de desnitrificación

Otra alternativa planteada en la actualidad para reducir la concentración de N-NO<sub>3</sub> en el efluente es la incorporación de los procesos *Sharon-Anammox* en los que, mediante una nitrificación parcial del N-NH<sub>4</sub> procedente del digestor

anaerobio, se reduce considerablemente la carga de nitrógeno procedente de la línea de fangos al tratamiento biológico.

Por lo tanto, con el objetivo de alcanzar una calidad del efluente acorde con los límites establecidos, en el siguiente apartado se explora el comportamiento de la EDAR integral mostrada en la Figura 5.27, incorporando un tratamiento de sobrenadantes de digestor constituido por los procesos *Sharon-Anammox*.

### **5.5.2 Exploración de la operación de la EDAR con digestión anaerobia de fangos y tratamiento de sobrenadantes procedentes de digestor**

De acuerdo con lo expuesto anteriormente, en este apartado se muestra mediante una exploración por simulación el efecto que tendrían los procesos *Sharon-Anammox* sobre la calidad del efluente en EDAR que incluyen líneas de tratamientos de fangos con digestión anaerobia. Los fundamentos bioquímicos de estos procesos, basados en una nitrificación parcial en primer lugar, y una posterior oxidación de los nitritos obtenidos a nitrógeno gas, han sido descritos en el apartado 1.2.1.2.

Esta exploración se ha llevado a cabo a partir de la configuración mostrada en la Figura 5.27 y el modelo matemático LAguas+LFangos1 Galindo PWM construido en el apartado 5.5.1.2.3.

#### **5.5.2.1 Configuración de la EDAR de Galindo con digestión anaerobia de fangos y tratamiento de sobrenadantes**

En este caso, en la configuración de una de las líneas de la EDAR de Galindo se ha considerado, además del tratamiento biológico, un decantador primario (DP), dos espesadores de fangos (ESP1 y ESP2), un digestor anaerobio (DA), un reactor aireado (SHARON) y un reactor anóxico (ANAMMOX).

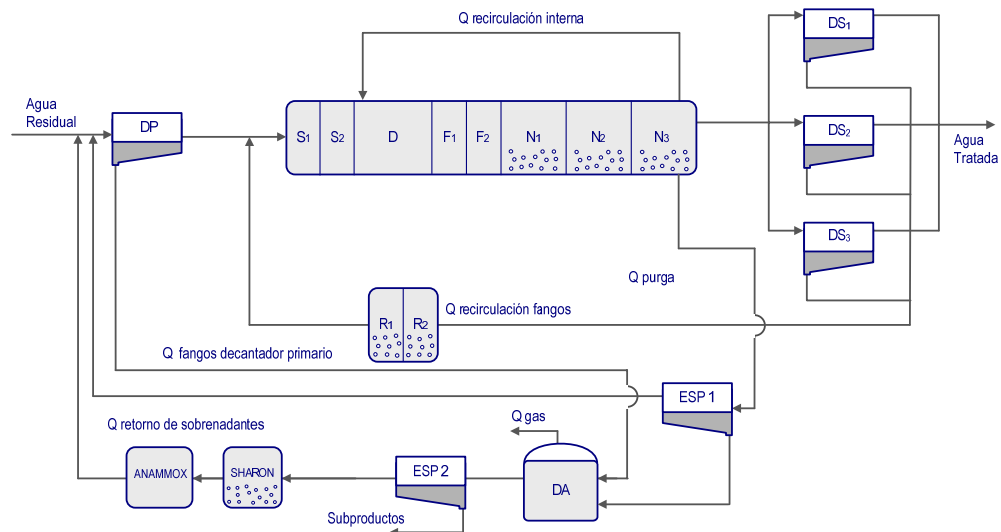


Figura 5.36. Configuración de la EDAR de Galindo ampliada con la línea de fangos y procesos Sharon-Anammox

Las características más importantes de los reactores SHARON y ANAMMOX se describen a continuación.

- *Reactor Sharon*

El reactor Sharon incluido no presenta retención de fangos y por lo tanto el tiempo de residencia de fangos coincide con el tiempo de residencia hidráulico. El volumen de este reactor se ha fijado en  $750 \text{ m}^3$ , que corresponde con un tiempo de residencia hidráulico de 1,25 días (Volcke *et al.*, 2006c).

- *Reactor Anammox*

El volumen del reactor Anammox se ha fijado en un valor de  $150 \text{ m}^3$ . En este reactor se ha aplicado una retención de la biomasa del 99,5% de acuerdo con las indicaciones dadas en Volcke *et al.*, (2006c).

### 5.5.2.2 Construcción del modelo integral con digestión anaerobia y procesos Sharon-Anammox LAGuas+LFangos2 Galindo PWM

El estudio por simulación de la EDAR presentada en la Figura 5.36 requiere un modelo matemático que describa por un lado, los procesos biológicos de eliminación de C y N en condiciones aerobias y anóxicas, digestión anaerobia

del fango, Sharon y Anammox. Por otro lado, el modelo debe describir el transporte de masa en cada uno de los elementos considerados.

La construcción de este modelo se ha llevado a cabo mediante la ampliación del modelo LAguas+LFangos1 Galindo PWM obtenido en el apartado 5.3.1.3 y siguiendo el procedimiento propuesto por la metodología PWM (Capítulo 2) para la construcción de modelos integrales de EDAR.

#### 5.5.2.2.1 Construcción del modelo de transformaciones de planta (PTM)

- *Selección de los Procesos Biológicos*

De acuerdo con la configuración de la EDAR, los procesos biológicos considerados han sido: el proceso de eliminación de materia orgánica y N en condiciones aerobias y anóxicas, el proceso de degradación de materia orgánica en condiciones anaerobias y los procesos Sharon y Anammox.

- *Selección de las poblaciones de bacterias activas de bacterias requeridas para describir los Procesos Biológicos seleccionados*

De acuerdo con la Tabla 2.36, además de las poblaciones de bacterias  $X_h$ ,  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$  y el conjunto de bacterias anaerobias ( $X_{su}$ ,  $X_{aa}$ ,  $X_{fa}$ ,  $X_{c4}$ ,  $X_{pro}$ ,  $X_{ac}$  y  $X_{h2}$ ), en este caso deben considerarse las bacterias  $X_{an}$ .

- *Selección de las transformaciones bioquímicas asociadas a la actividad de las poblaciones de bacterias*

Por lo tanto, las transformaciones bioquímicas que deben incorporarse al PTM construido en el apartado 5.5.1.2.1 son las que describen el crecimiento y desaparición de la población  $X_{an}$  en todas las condiciones ambientales (Tabla 2.37). De acuerdo con la LT presentada en el Apartado 2.3, las transformaciones bioquímicas añadidas al PTM han sido 32, 52, 68 y 70. De acuerdo con estas transformaciones, en este caso únicamente debe añadirse al PTM el componente  $X_{an}$ .

- *Incorporación de las transformaciones de equilibrios ácido-base y líquido-gas*

En este caso no es necesario considerar ninguna transformación de equilibrio ácido-base o líquido-gas adicional. La Figura 5.37 muestra las transformaciones incluidas en el PTM construido para el modelo LAguas+LFangos2 Galindo PWM.



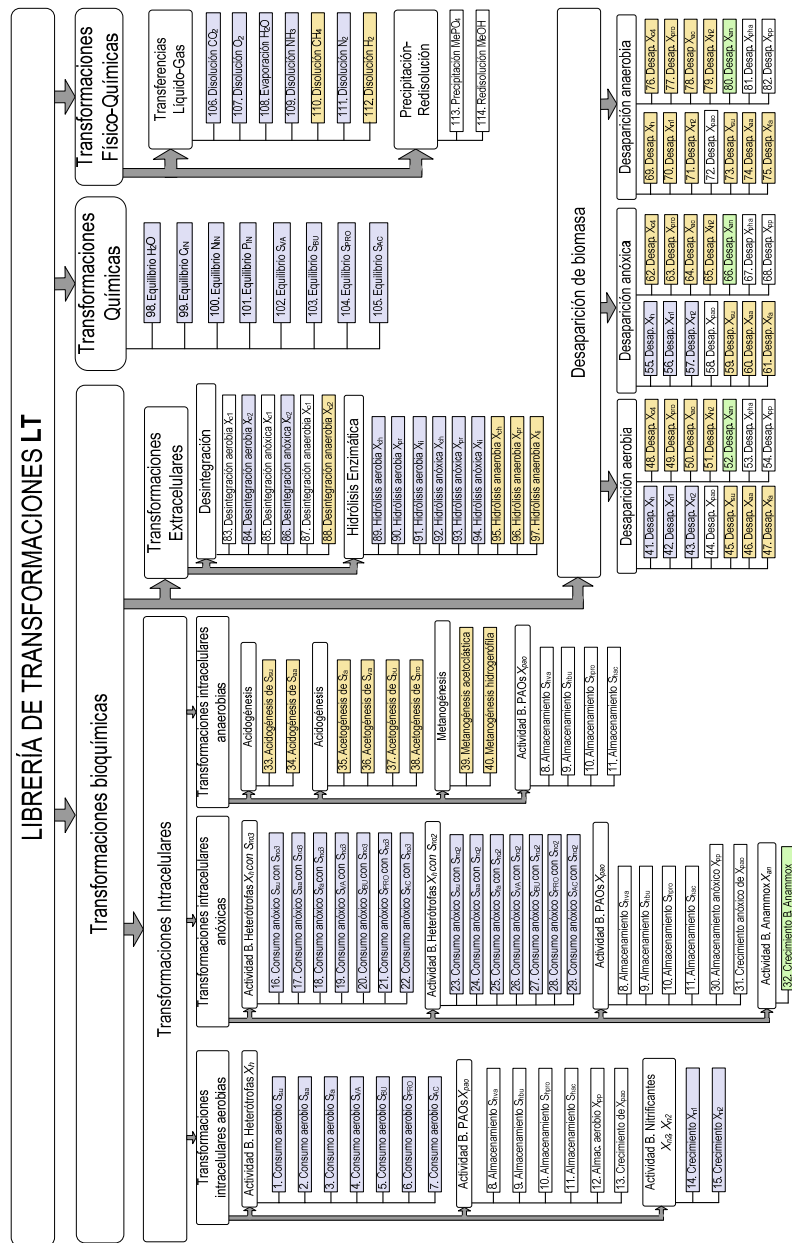


Figura 5.37. Esquema de las transformaciones seleccionadas en el modelo *LAGuas+LFangos2 Galindo PWM*

La estequiometría y cinéticas de las transformaciones incluidas en este nuevo PTM se presentan en el Anexo D.

#### 5.5.2.2.2 Construcción de los modelos de proceso unitario (UPM)

Los modelos de proceso unitario para los elementos que describen los reactores Sharon y Anammox se describen a continuación.

- *UPM Reactor Sharon*

En el Modelo de Proceso Unitario del reactor Sharon, la descripción de las transformaciones internas se lleva a cabo mediante el PTM construido en el paso anterior. Por otro lado, el transporte de masa se describe mediante balances de masa en un reactor de mezcla completa tal y como se describe en el apartado 3.3.2.1.2.

- *UPM Reactor Anammox*

Igualmente, en el Modelo de Proceso Unitario del reactor Anammox, el PTM se utiliza para describir las transformaciones internas. El transporte de masa se describe mediante un sistema formado por el reactor de mezcla completa detallado en el apartado 3.3.2.1.2 seguido de un separador sólido-líquido en el que la fracción de sólidos no sedimentables se fija en un 0,5%.

#### 5.5.2.2.3 Construcción del modelo LAguas+LFangos2 Galindo PWM

Finalmente, mediante la conexión de los flujos másicos de los distintos elementos, se obtiene el modelo integral LAguas+LFangos2 Galindo PWM.

### 5.5.2.3 Resultados obtenidos en la exploración

El modelo integral LAguas+LFangos2 Galindo PWM ha sido implantado en la plataforma de simulación WEST® y el comportamiento de la EDAR ha sido evaluado por simulación durante el período de un año.

El influente empleado ha sido el mismo que en la exploración realizada en el apartado 5.5.1. Los parámetros estequiométricos y cinéticos utilizados en los procesos Sharon y Anammox se detallan en el Anexo D.

La operación de la línea de aguas se ha llevado a cabo de manera convencional tal y como se detalla en la Tabla 5.7. Por otro lado, en el tratamiento de sobrenadantes se ha aplicado una de las estrategias de operación óptima en estos procesos detallada en Volcke *et al.*, (2006a). Así, el reactor Sharon se opera

mediante una estrategia de control que incluye dos lazos de control (SISO) desacoplados.

El primero de ellos tiene como objetivo mantener el pH en un valor de referencia neutro (7) mediante la adición de un ácido o base fuerte y garantizar así, la actividad de las bacterias nitrificantes.

El segundo lazo de control tiene como objetivo mantener la relación deseada entre  $\text{N-NO}_2$  y  $\text{N-NH}_4$  de forma que en el proceso Anammox el rendimiento en la oxidación de  $\text{N-NH}_4$  sea máximo. El valor de referencia escogido en esta exploración se ha fijado en un valor de 1,129 que coincide con la relación estequiométrica entre los componentes  $\text{N-NO}_2$  y  $\text{N-NH}_4$  en la transformación de oxidación anaerobia del  $\text{N-NH}_4$ . Este lazo de control está formado por una estructura jerárquica en la que el nivel superior determina el valor de OD necesario para garantizar la la relación  $\text{N-NO}_2/\text{N-NH}_4$  y el nivel inferior determina el caudal de aire necesario para garantizar este valor de OD.

La temperatura a la que se han llevado a cabo los procesos Sharon-Anammox se ha mantenido constante durante toda la simulación en el valor de 35 °C, que coincide con el valor de la temperatura del flujo másico a la salida del digestor anaerobio. A este respecto debe indicarse que el valor de temperatura elevado, junto con las altas concentraciones de  $\text{N-NH}_4$  alcanzadas en el digestor anaerobio, permiten y favorecen en gran medida la nitrificación parcial en la que se basa el proceso Sharon.

A continuación se muestran como ejemplo algunos de los resultados obtenidos en este estudio de simulación.

La Figura 5.38 muestra de forma comparativa las concentraciones de  $\text{N-NH}_4$  de salida del digestor anaerobio, de  $\text{N-NH}_4$  y  $\text{N-NO}_2$  en el reactor Sharon y  $\text{N-NH}_4$  y  $\text{N-NO}_2$  en el reactor Anammox. En esta figura se observa cómo la concentración de  $\text{N-NH}_4$  se reduce progresiva y significativamente desde el digestor anaerobio, en primer lugar en el reactor Sharon, y a continuación en el reactor Anammox.

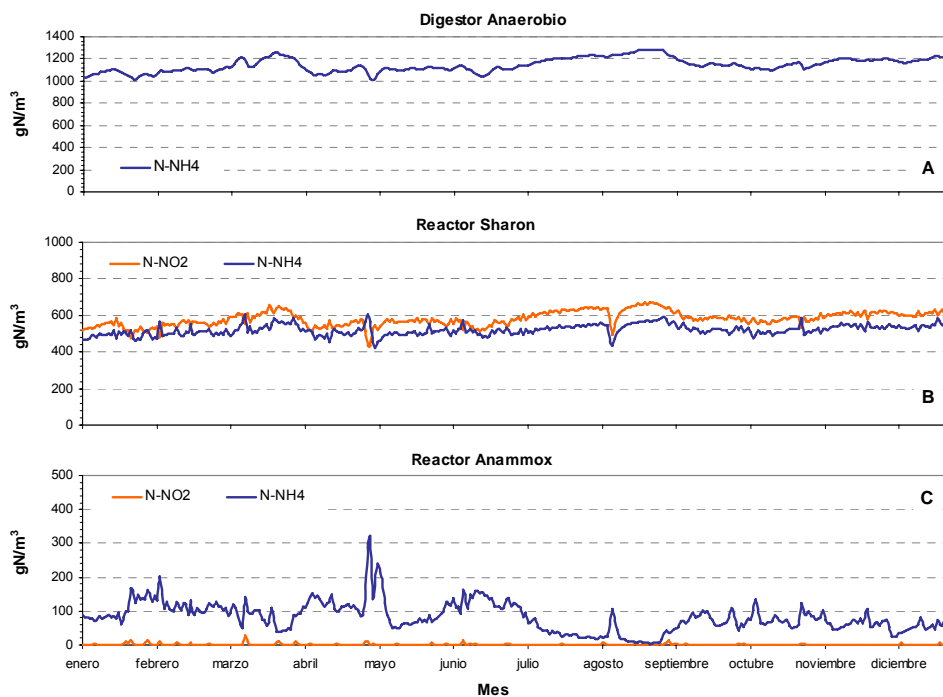


Figura 5.38. Resultados obtenidos por simulación de la concentración de  $N-NH_4$  y  $N-NO_2$  en el digester anaerobio y en los reactores Sharon y Anammox

En la Figura 5.38(B) se observa una reducción del  $N-NH_4$  aproximadamente del 50% a partir de una nitrificación parcial de éste a  $N-NO_2$ . También se observa en esta figura que el controlador implantado en el reactor Sharon mantiene en todo momento la relación  $N-NO_2/N-NH_4$  en su valor de referencia a costa de una variación en la concentración de OD (Figura 5.39).

En la Figura 5.38(C) se muestra una reducción total de la concentración de  $N-NO_2$  y una disminución algo menor en la concentración de  $N-NH_4$ . Las altas concentraciones de  $N-NH_4$  alcanzadas en el reactor Anammox, comparadas con las de  $N-NO_2$ , son debidas principalmente al consumo de  $N-NO_2$  en la desnitrificación que se produce en este reactor. Sin embargo, esta predicción está totalmente condicionada por la cantidad de biomasa heterótrofa procedente del digester anaerobio y el reactor Sharon. Este valor debería ser determinado experimentalmente para conseguir una predicción correcta de la desnitrificación que se produce en el reactor Anammox.

A este respecto, una posible solución sería la introducción de un lazo de control adicional en cascada que regulara la relación entre  $N\text{-NO}_2$  y  $N\text{-NH}_4$  en el reactor Sharon de manera que se optimizara la eliminación del N en el reactor Anammox.

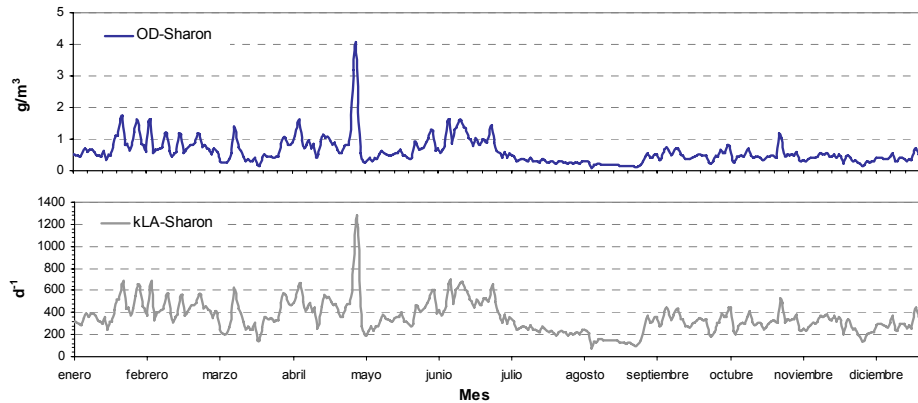


Figura 5.39. Resultados obtenidos por simulación del OD y consumo de  $k_{La}$  en el reactor Sharon

Finalmente, la Figura 5.40 muestra de forma comparativa el  $N\text{-NH}_4$  a la entrada del tratamiento biológico cuando no se consideran retornos procedentes de la línea de fangos, cuando se consideran estos retornos y cuando éstos son tratados mediante los procesos Sharon-Anammox.

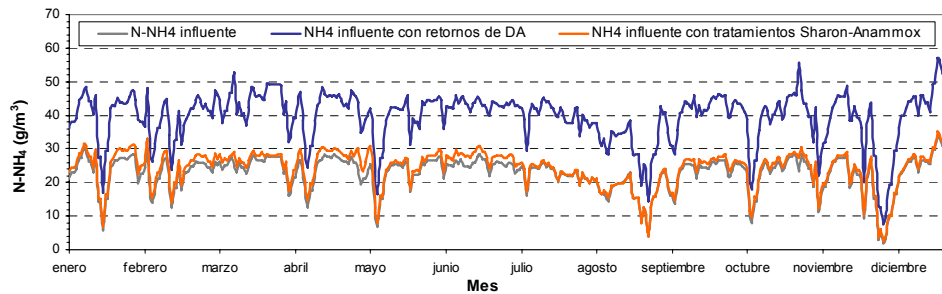


Figura 5.40. Incremento en la concentración de  $N\text{-NH}_4$  obtenido por simulación con la incorporación del digestor de fangos y tratamientos de sobrenadantes

A partir de la Figura 5.40 puede concluirse que la incorporación de los procesos Sharon-Anammox en la línea de fangos reducirían significativamente el nitrógeno amoniacal de entrada al tratamiento biológico. Así, puesto que esta reducción permitiría alcanzar concentraciones de  $N-NH_4$  prácticamente iguales a los valores de  $N-NH_4$  cuando no se consideran retornos procedentes de la línea de fangos, las concentraciones de  $N-NO_3$  y  $N-NH_4$  obtenidas en el efluente de la EDAR en este caso, estarían dentro de los límites de calidad del efluente exigidos.

La Figura 5.41 muestra los resultados obtenidos en el efluente con respecto a las concentraciones de  $N-NH_4$  y  $N-NO_3$  cuando en la línea de fangos se incorporan los procesos Sharon-Anammox y la línea de aguas se opera mediante la estrategia de control avanzado.

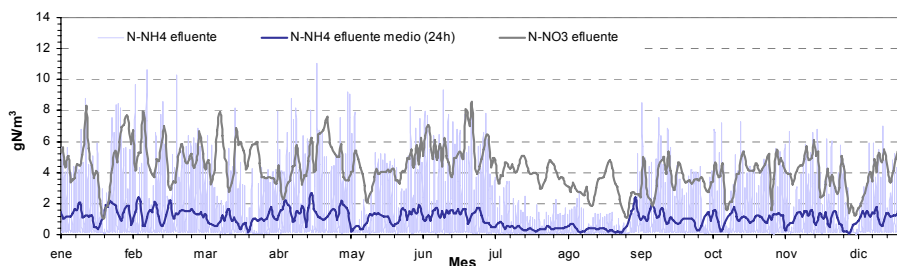


Figura 5.41.  $N-NH_4$  y  $N-NO_3$  obtenidos por simulación en el efluente cuando se consideran los procesos Sharon-Anammox

Por lo tanto, en base a los resultados obtenidos en esta exploración, puede concluirse que la consideración de los procesos Sharon-Anammox permitiría, por un lado, obtener las ventajas obtenidas con respecto a la generación de fangos cuando se introduce el digestor anaerobio y, por otro lado, obtener calidades del efluente y costes de aireación prácticamente iguales a las obtenidas cuando no se consideran los retornos procedentes de la digestión anaerobia.

Finalmente, y en vista de los resultados obtenidos en este apartado, deben remarcarse dos aspectos. En primer lugar, la posibilidad que ofrecen los modelos construidos con la metodología PWM de diseñar estrategias de control automático en EDAR integrales *Plant-Wide Control* (Olsson and Jeppsson, 2006). En segundo lugar, el gran interés que supondría el diseño de estas estrategias en la optimización global de la EDAR, teniendo en cuenta todas las

interrelaciones entre los elementos incluidos en ésta (decantadores primarios, reactores de fangos activados, espesadores, retornos desde la línea de fangos, etc.).

## 5.6 CONCLUSIONES

En este Capítulo se ha llevado a cabo una exploración por simulación de distintas estrategias de operación en la EDAR de Galindo. En esta exploración, la utilización de modelos matemáticos que describen de forma conjunta los procesos biológicos que tienen lugar en los diferentes elementos y el transporte de masa en cada uno de ellos, ha sido un factor decisivo.

Los modelos matemáticos empleados en cada caso de estudio han sido contruidos a partir de la metodología PWM. La sencillez y flexibilidad que posee esta metodología para la construcción de modelos adaptados a cada configuración de EDAR estudiada ha quedado demostrada.

En concreto, el modelo matemático empleado para describir los procesos de nitrificación y desnitrificación en el tratamiento biológico de la EDAR de Galindo ha sido verificado a partir de medidas experimentales y estudios de calibración previos. A este respecto también debe señalarse, que la herramienta de caracterización desarrollada en el Capítulo 4, ha permitido la caracterización del influente de acuerdo con el vector de componentes considerado en este modelo matemático.

El modelo matemático de la EDAR de Galindo adecuadamente calibrado ha sido fundamental en la adaptación a escala real de una estrategia de control automático avanzada, desarrollada y validada previamente a escala piloto. Mediante un estudio por simulación se han visualizado las mejoras obtenidas con respecto a una operación de la EDAR más estable, una mayor calidad del efluente y menores costes de explotación.

Posteriormente, esta estrategia de operación óptima se ha validado de forma experimental en la EDAR real de Galindo obteniendo resultados muy similares a los obtenidos con el estudio por simulación. Debido a los excelentes resultados obtenidos en esta validación experimental, en la actualidad esta estrategia control avanzado está siendo implantada en las seis líneas de la EDAR de Galindo.

La exitosa validación experimental de los controladores de la línea de aguas ha corroborado la capacidad predictiva del modelo utilizado y ha demostrado que la tecnología actual disponible (analizadores on-line, equipos de automatización, simuladores, etc.) ya permite realizar aplicaciones a escala real de manera robusta y eficiente.

El procedimiento propuesto en la metodología PWM ha permitido la construcción de modelos matemáticos con los que se puede explorar un hipotético escenario de la EDAR de Galindo en el que, además del tratamiento existente en la actualidad, se incluirían una línea de tratamiento de fangos por digestión anaerobia con posibles tratamientos de sobrenadantes de retorno a partir de los procesos Sharon-Anammox.

De la exploración realizada se concluyen los siguientes aspectos. La incorporación de un digestor anaerobio de fangos en la EDAR permitiría reducir la concentración de fangos producidos en ésta, obtener un fango más estabilizado y una cantidad de energía en forma de gas metano. Por contrapartida, el retorno de los sobrenadantes procedentes del digestor a la línea de aguas empeoraría de forma notoria la calidad del efluente en la línea de aguas. A este respecto, la incorporación de los procesos Sharon-Anammox para el tratamiento de sobrenadantes procedentes del digestor anaerobio, permitiría reducir en gran medida las concentraciones de nitrógeno amoniacal en el influente de la línea de aguas, lo que repercutiría en una mejora significativa en la calidad del efluente.





## *CAPÍTULO 6*

# ***CONCLUSIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN***

---

### **6.1 CONCLUSIONES**

La presente tesis doctoral propone una nueva **metodología de modelado matemático integral de EDAR PWM** (Plant-Wide-Modelling) que permite construir de una manera rigurosa y sistemática modelos capaces de reproducir el comportamiento dinámico del sistema en su conjunto.

Esta metodología está basada en una caracterización másica elemental de los componentes del modelo, a partir de la cual se garantiza la continuidad de masa elemental y carga en todas y cada una de las transformaciones, y en una selección de las transformaciones más apropiadas para describir el comportamiento dinámico específico de cada EDAR objeto de estudio.

De acuerdo con esto, la metodología PWM permite obtener modelos integrales a la medida de la EDAR estudiada, sin interfaces entre los modelos de proceso unitario, y garantizando la continuidad de la masa y carga del proceso.

Los principios en los que se ha basado esta metodología implican, además de la obtención de modelos integrales de EDAR con las características mencionadas, una serie de ventajas con respecto a rigurosidad, flexibilidad y coherencia en el

modelado matemático de procesos de EDAR que se resumen en los siguientes puntos:

- El procedimiento sistemático propuesto para la construcción de modelos integrales de EDAR permite una selección sencilla y rigurosa de las transformaciones que deben ser incorporadas para cada uno de los modelos construidos. Además, este procedimiento sistemático podría adaptarse con facilidad a la generación de códigos computacionales de simulación.
- La lista de transformaciones presentada en esta tesis permite describir con detalle los procesos más relevantes que tienen lugar en una EDAR avanzada. Además, esta lista es ampliable con cualquier transformación adicional, siempre que ésta esté expresada mediante su estequiometría y cinética, sin necesidad de modificaciones en la metodología propuesta.
- La definición completa en fracciones másicas de cada componente permite expresar cualquier variable medible en cualquier punto de la EDAR (SST, DQO, NKT, etc.) como función del valor de los componentes del modelo. Esto ha permitido el desarrollo de procedimientos para la caracterización automática del influente.

En base a la descripción de las fracciones másicas de los componentes, se ha desarrollado un novedoso y eficiente **algoritmo de caracterización** automática del influente que permite estimar los valores más probables del vector de componentes del modelo.

- El algoritmo de caracterización propuesto permite combinar adecuadamente la información previa sobre las características del agua residual o fango influente con los datos experimentales.
- Los resultados obtenidos en la caracterización del agua influente a la EDAR de Galindo han mostrado de manera satisfactoria la capacidad de modificar la caracterización estimada inicialmente hasta hacerla acorde con las medidas experimentales realizadas.
- Estos resultados han permitido una estimación adecuada de los componentes de diferentes modelos estándar (ASM1 y ASM2). Esta característica, junto con la flexibilidad que presenta este algoritmo para incluir componentes y restricciones adicionales, lo convierten en una

herramienta general de caracterización del influente independientemente del modelo utilizado.

De acuerdo con estas conclusiones puede afirmarse que el algoritmo de caracterización obtenido constituye una herramienta flexible y rigurosa, de gran utilidad en el problema de la caracterización del influente, considerado como una de las principales limitaciones en la utilización de modelos matemáticos en la operación de EDAR.

La metodología PWM propuesta ha permitido la construcción de **un modelo integral para un caso de estudio estándar (BSM2)** de manera satisfactoria. El modelo obtenido ha sido evaluado en un escenario de simulación estándar y los resultados obtenidos presentan una gran similitud con los obtenidos con otras propuestas de modelado integral. Del análisis comparativo realizado frente a estas propuestas se extraen las siguientes conclusiones:

- El modelo BSM2 PWM desarrollado en esta tesis garantiza una continuidad completa en masa elemental y carga en las conexiones entre los modelos de proceso unitario, que no es posible obtener con el modelo integral obtenido con las interfaces propuestas por el Task Group de la IWA. Además, la metodología PWM constituye una herramienta general de conexión de cualquier modelo frente a estas interfaces, específicas para los modelos estándar ASM1 y ADM1.
- Con respecto a las interfaces CBIM, el modelo BSM2 PWM construido permite garantizar la continuidad de la masa y carga en cualquier condición estacionaria o dinámica de forma directa y sin necesidad de interfaces. Esta continuidad no puede ser garantizada en todo momento con las interfaces CBIM.
- Con respecto a la alternativa del Modelo Único, la metodología de modelado integral propuesta permite la construcción de modelos específicos a la medida de cada EDAR estudiada y posee la capacidad de posibles extensiones en el caso de que se consideren nuevos procesos unitarios.

Por lo tanto, como resultado de las conclusiones extraídas en este análisis, puede afirmarse que la metodología de modelado integral propuesta en esta tesis aporta significativas ventajas frente a las alternativas existentes hasta la fecha en la construcción de modelos integrales de EDAR.

Se ha construido un modelo para la EDAR Galindo-Bilbao de acuerdo con la metodología PWM. Este modelo ha sido fundamental en la **adaptación y validación a escala real de una estrategia de control automático avanzada** desarrollada y validada previamente a escala piloto.

- El modelo obtenido reproduce adecuadamente los resultados experimentales obtenidos en la línea de aguas de la EDAR respectivos a los procesos de nitrificación-desnitrificación y producción de fangos.
- Este modelo ha sido utilizado en la adaptación a escala real de una estrategia de control automático que permite una operación óptima del tratamiento biológico secundario de la EDAR con mayor estabilidad, mayor calidad del efluente y menores costes de operación.
- Esta estrategia de control avanzado ha sido implantada y validada con éxito en una de las líneas de la EDAR real. Los resultados experimentales a escala real han corroborado las predicciones del modelo en cuanto a la mayor estabilidad del proceso, mayor calidad del efluente y un ahorro significativo en los costes de aireación. En la actualidad, y debido a los beneficios obtenidos, esta estrategia de control está siendo implantada en todas las líneas de la EDAR de Galindo.

La exitosa validación experimental de los controladores de la línea de aguas ha corroborado la capacidad predictiva del modelo utilizado y ha demostrado que la tecnología actual disponible (analizadores on-line, equipos de automatización, simuladores, etc.) ya permite realizar aplicaciones a escala real de manera robusta y eficiente.

La metodología PWM propuesta en esta tesis ha permitido, mediante la incorporación de las transformaciones adecuadas, ampliar el modelo de la EDAR de Galindo previamente construido para la **exploración de la EDAR en escenarios hipotéticos que consideran conjuntamente líneas de aguas y fangos**. De esta exploración pueden extraerse las siguientes conclusiones:

- La incorporación de un digestor de fangos reduciría significativamente el fango generado en la EDAR, además de permitir la obtención de energía en forma de gas metano. Por contrapartida, el retorno de los sobrenadantes procedentes del digestor a la línea de aguas empeoraría de forma notoria la calidad del efluente en la línea de aguas.
- La incorporación de los procesos Sharon-Anammox para el tratamiento de sobrenadantes procedentes del digestor anaerobio, permitiría reducir en gran

medida las concentraciones de nitrógeno amoniacal en el influente de la línea de aguas, lo que repercutiría en una mejora significativa en la calidad del efluente.

A partir de los resultados obtenidos, puede concluirse que la nueva metodología PWM desarrollada en esta tesis es una herramienta que permite construir modelos integrales a medida de la EDAR, sin interfaces entre procesos unitarios y garantizando en todo momento la continuidad de masa y carga.

Para adaptar los modelos existentes a la nueva metodología, se propone la re-escritura de los modelos actuales (ASM1, ASM2d, ASM3, ADM1, etc.) en base a la selección de las transformaciones más adecuadas para cada caso de estudio. La lista de transformaciones general deberá estar entonces previamente consensuada y aceptada por la comunidad científica, y constituirá la base común para la construcción de los modelos de proceso unitario totalmente compatibles para el modelado integral de las EDAR.

## 6.2 FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

A raíz de la metodología propuesta y teniendo en cuenta las posibilidades que ésta introduce en el modelado matemático de EDAR, se proponen las siguientes líneas de investigación:

- Ampliación y modificación, cuando sea necesario, de la librería de transformaciones propuesta en esta tesis mediante la re-escritura de las existentes en los modelos convencionales y la incorporación de todas aquellas que permitan reproducir procesos novedosos en EDAR (nitrificación parcial, ozonización, etc.).
- Desarrollo de un nuevo procedimiento de creación de códigos de computación específico para cada EDAR estudiada. La plataforma de simulación WEST ofrece un entorno idóneo para esta tarea.
- Diseño de nuevas estrategias de control automático que permitan optimizar la operación de EDAR integrando de forma conjunta líneas de aguas y fangos (Plant-Wide Control).

- Optimización de los métodos numéricos de integración para reducir el tiempo de simulación en EDAR de grandes dimensiones.
- Incorporación de balances de energía térmica y predicción de la temperatura en los reactores

## CAPÍTULO 7

### REFERENCIAS

---

- Ahring B. K. (1994). Status on science and application of thermophilic anaerobic digestion. *Water Science and Technology*. **30**(12), 241.
- Andrews J. F. and Kambu K. (1969). Aerobic thermophilic process for the biological treatment of wastes - simulation studies. *Water Pollution Control Federation*. **41**, 127 - 141.
- Andrews J. F. (1971). Kinetic models of biological waste treatment processes. *Biotechnology Bioengineering Symposium*. **2**, 5-33.
- Angelidaki I., Ellegaard L., and Ahring B. K. (1993). A mathematical model for dynamic simulation of anaerobic digestion of complex substrates: focusing on ammonia inhibition. *Biotechnology and Bioengineering*. **42**, 159-166.
- Angelidaki I., Ellegaard L., and Ahring B. K. (1999). A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. *Biotechnology and Bioengineering*. **63**(3), 363-372.
- Antoniou P., Hamilton J., Koopman B., Jain R., Holloway B., Lyberatos G., and Svoronos S. A. (1990). Effect of Temperature and pH on the Effective Maximum Specific Growth Rate of Nitrifying Bacteria. *Water Research*. **24**(1), 97-101.
- Arden E. and Lockett W. T. (1914). Experiments on the Oxidation of Sewage without the Aid of Filters. *J. Soc. Chem. Ind.* **33**, 523.
- Aström K. and Hägglund T. *PID Controllers: Theory, Design and Tuning*. North Caroline 27709, USA, 1995.



- Ayesa E., Goya B., Larrea A., Larrea L., and Rivas A. (1998). Selection of operational strategies in activated sludge processes based on optimization algorithms. *Water Science and Technology*. **37**, 327-334.
- Ayesa E., Garralón G., Rivas A., Suescun J., Larrea L., and Rivas A. (2001). New simulators for the optimum management and operation of complex WWTP. *Water Science and Technology*. **44**(2-3), 1-9.
- Ayesa E. y Larrea A. (2005). Optimización del diseño, operación y control de EDAR utilizando modelos matemáticos y herramientas de simulación. *Tecnología del Agua*. **266**, 74 - 79.
- Barnard J. L. (1973). Biological Denitrification. *Water Pollution Control Federation*. **34**, 920.
- Barnard J. L. (1975). Biological Nutrient removal without the Addition of Chemicals. *Water Research*. **9**, 485.
- Batstone D. J., Keller J., and Steyer J. P. (2000). Modelling anaerobic digestion of complex wastewater I: model development. *Bioresources Technology*. **75**, 67-74.
- Batstone D. J., Keller J., Angelidaki I., Kalyuzhnyi S. V., Pavlostathis S. G., Rozzi A., Sanders W. T. M., Siegrist H., and Vavilin V. A. (2002). *Anaerobic Digestion Model N°1*. Scientific and Technical Report N°13, I. Publishing, London.
- Batstone D. J., Keller J., Newel B., and Newland M. (2006). A Review of ADM1 Extensions, Applications, and Analysis 2002-2005. *Water Science and Technology*. **54**(4), 1-10.
- Blumensaat F. and Keller J. (2005). Modelling of two-stage anaerobic digestion using the IWA Anaerobic Digestion Model N°1 (ADM1). *Water Research*. **39**(171-183).
- Carstensen J. (1994). *Identification of Wastewater Processes*. Institute of Mathematical Statistics and Operations Research, Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark.
- Copp J. *The COST Simulation Benchmark-Description and Simulator Manual*. Luxembourg: Office for Official Publication of the European Communities, 2002.
- Copp J. B., Jeppsson U., and Rosen C. Towards an ASM1-ADM1 State Variable Interface for Plant-Wide Wastewater Treatment Modeling. In: *Proceedings of the WEFTEC*. Los Angeles Convention Center, Los Angeles, CA, USA, October 11-15, 2003.

- Costello D. J., Greenfield P. F., and Lee P. L. (1991). Dynamic modelling of a single-stage high-rate anaerobic reactor-I. Model derivation. *Water Research*. **25**(7), 847-858.
- Dapena-Mora A., Van Hulle S. W. H., Campos J. L., Méndez R., and Vanrolleghem P. A. (2004). Enrichment of anammox biomass from municipal activated sludge: experimental and modelling results. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*. **79**, 1421-1428.
- de Gracia M., Sancho L., García-Heras J. L., Vanrolleghem P. A., and Ayesa E. (2006). Mass and Charge Conservation Check in Dynamic Models: Application to the New ADM1 Model. *Water Science & Technology*. **53**(1), 225-240.
- de Gracia M. (2007). *Modelado matemático de los reactores de digestión de lodos de EDAR*. Departamento de Ingeniería Medioambiental, CEIT, Universidad de Navarra, San Sebastián.
- de la Sota A., Larrea L., Novak L., Grau P., and Henze M. (1994). Performance and model calibration of RDN process in pilot-plant. *Water Science and Technology*. **30**(6), 355-364.
- de la Sota A. (1995). *Evaluación del funcionamiento y modelización de procesos de nitrificación-desnitrificación en una planta piloto de tratamiento de aguas residuales de Bilbao*. Universidad de Navarra, San Sebastián, España.
- Dold P. L., Ekama G. A., and Marais G. v. R. (1980). A general model for the activated sludge process. *Prog. Wat. Tech.* **12**, 47-77.
- Downing A. L., Painter H. A., and Knowles G. (1964). Nitrification in the Activated Sludge Process. *Proc. Inst. Sewage Purification*. **64**, 130 - 258.
- Eastman J. A. and Ferguson J. F. (1981). Solubilization of particulate organic carbon during the acid phase of anaerobic digestion. *Journal WPCF*. **53**, 352-366.
- Ekama G. A. and Marais G. v. R. (1979). Dynamic Behaviour of the Activated Sludge Process. *Water Pollution Control Federation*. **51**, 534 - 556.
- Filipe C., Daigger G. T., and Grady Jr. C. P. L. (2001b). Effects of pH on the rates of aerobic metabolism of phosphate accumulating organisms and glycogen accumulating organisms. *Water environmental research*. **73**(2), 213-222.
- Galarza A., Ayesa E., Linaza M. T., Rivas A., and Salterain A. (2001a). Application of mathematical tools to improve the design and operation of activated sludge plants. Case study: the new WWTP of Galindo-

- Bilbao. Part II: Selection of operational strategies and automatic controllers. *Water Science and Technology*. **43**(7), 167-174.
- Galarza A., Ayesa E., Salterain A., Linaza M. T., and Florez J. Real Time Control strategies for activated sludge plants - Application to RDN and DRDN processes. In: *Proceedings of the 1st IWA Conference on Instrumentation, Control and Automation - ICA 2001*. Malmö, Sweden 2001b.
- Gaudy A. F. and Gaudy E. T. (1971). *Biological concepts for design and operation of the activated sludge process*. U. E. P. A. W. P. R. S. R. N. F. 09/1, Washington DC.
- Gernaey K. V., Rosen C., and Jeppsson U. (2006). WWTP dynamic disturbance modelling- an essential module for long-term benchmarking development. *Water Science and Technology*. **53**(4-5), 225-234.
- Gijzen H. J. (2001). Anaerobes, Aerobes and Phototrophs. A winning team for wastewater management. *Water Science and Technology*. **44**(8), 123 - 132.
- Goodman B. L. and Englade A. J. (1974). A Unified Model of the Activated Sludge Process. *Water Pollution Control Federation*. **46**, 312 - 332.
- Grady C. P. L., Daigger G. T., and Lim H. C. *Biological Wastewater treatment*, 2 ed, 1999.
- Grau P. y Ayesa E. (2003). *Implantación de estrategias avanzadas de control en la EDAR de Galindo*. San Sebastián, España.
- Grunditz C. and Dalhammar G. (2001). Development of Nitrification Inhibition Assays Using Pure Cultures of Nitrosomonas and Nitrobacter. *Water Research*. **35**(2), 433-440.
- Gujer W. and Zehnder A. J. (1983). Conversion processes in anaerobic digestion. *Water Science and Technology*. **15**, 127-167.
- Gujer W., Henze M., Mino T., and van Loosdrecht M. C. M. (1999). *Activated Sludge Model N° 3*. London.
- Hao X., Heijnen J. J., and M.C.M. v. L. (2002). Sensitivity Analysis of a Biofilm Model describing a one-stage completely autotrophic nitrogen removal (CANON) process. *Biotechnology and Bioengineering*. **77**(3), 266-277.
- Hellinga C., van Loosdrecht M. C. M., and Heijnen J. J. (1999). Model Based Design of a Novel Process for Nitrogen Removal from Concentrated Flows. *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems*. **5**(4), 351-371.

- Henze M., Grady C. P. L., Gujer W., Marais G. v. R., and Matsuo T. (1987). *Activated Sludge Model N°1*. I. S. a. T. R. N°1, London.
- Henze M., Gujer W., Mino T., Matsuo T., Wentzel M., and Marais G. v. R. (1995). *Activated Sludge Model N°2*. I. S. a. T. report, London.
- Henze M., Harremoës P., LaCour Jansen J., and Arvin E. *Wastewater treatment: biological and chemical processes*: Springer, Heidelberg, 1997.
- Henze M., Gujer W., Mino T., and M.C.M. v. L. (2000). *Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d, and ASM3*. Scientific and Technical Report N°9, I. Publishing, London.
- Hill D. T. and Barth C. L. (1977). A dynamic model for simulation of animal waste digestion. *Journal WPCF*. **10**, 2129-2143.
- Horiuchi J. L., Shimizu T., Tada K., Kanno T., and Kobayashi M. (2002). Selective production of organic acids in anaerobic reactor by pH control. *Bioresource Technology*. **82**(3), 209 - 213.
- Huete E., de Gracia M., Ayesa E., and García-Heras J. L. (2006). ADM1-Based Methodology for the Characterization of the Influent Sludge in Anaerobic Reactors. *Water Science and Technology*. **54**(4), 157-166.
- Jeppsson U., Rosen C., Alex J., Copp J., Gernaey K. V., Pons M.-N., and Vanrolleghem P. A. (2006). Towards a benchmark simulation model for plant-wide control strategy performance evaluation of WWTPs. *Water Science and Technology*. **53**(1), 287-295.
- Jetten M. S. M., Strous M., van de Pas-Schoonen K. T., Schalk J., van Dongen U. G. J. M., Van de Graaf A. A., Logemann S., Muyzer G., van Loosdrecht M. C. M., and Kuenen J. G. (1999). The anaerobic oxidation of ammonium. *FEMS Microbiology Reviews*. **22**, 421-437.
- Johnson B. R. and Shang Y. The Applications and Limitations of ADM1 in Municipal Wastewater Solids Treatment. In: *Proceedings of the The First International Workshop on the IWA Anaerobic Digestion Model N°1*. Lyngby - Denmark, September 2-4, 2005.
- Jones R. M. and Tákacs I. Importance of anaerobic digestion modelling on predicting the overall performance of waste-water treatment plants. In: *Proceedings of the Tenth World Congress*. Montréal, Canada, 29 August 2004 - 2 September 2004, 2004.
- Kern-Jaspersen J. P. and Henze M. (1993). Biological Phosphorous uptake under anoxic and anaerobic conditions. *Water Research*. **27**, 617 - 624.

- Kleerebezem R. and van Loosdrecht M. C. M. Criticizing some concepts of ADM1. In: *Proceedings of the Anaerobic digestion 2004, 10th world congress*. Montreal, Canada, Aug. 29 - Sept. 2, 2004.
- Lawrence A. W. and McCarty P. L. (1970). Unified Basis for Biological Treatment Design and Operation. *San. Eng. Div., ASCE*. **96**, 757 - 778.
- Ludzack F. J. and Ettinger M. B. (1962). Controlling operation to minimize activated sludge effluent nitrogen. *J. Wat. Pol. Control Fed.* **34**, 920-931.
- Marais G. v. R. and Ekama G. A. (1976). The Activated Sludge process (Part I) - Steady state behaviour. *Water SA*. **2**(4), 163-200.
- Mavinic D. S. and Koers D. A. (1982). Fate of nitrogen in aerobic sludge digestion. *Journal of Water Pollution Control Federation*. **54**(4), 352 - 360.
- McCarty P. L. and Mosey F. E. (1991). Modelling of anaerobic digestion processes (a discussion of concepts). *Water Science and Technology*. **24**(8), 17-33.
- McKinney R. E. and Ooten R. J. Concepts of Complete Mixing Activated Sludge. In: *Proceedings of the Trans. 19th San. Eng. Conf.* University of Kansas, Kansas, USA 1969.
- Melcer H., Dold P. L., Jones R. M., Bye C. M., Tákcacs I., Stensel H. D., Wilson A. W., Sun P., and Bury S. *Methods for wastewater characterization in activated sludge modelling*. Alexandria, VA, USA, 2003.
- Mino T., Liu W.-T., Kurisu F., and Matsuo T. (1995). Modelling glycogen storage and denitrification capability of microorganisms in enhanced biological phosphate removal processes. *Water Science and Technology*. **31**(2), 25 - 34.
- Miron Y., Zeeman G., van Lier J. B., and Lettinga G. (2000). The role of sludge retention time in the hydrolysis and acification of lipids, carbohydrates and proteins during digestion of primary sludge in CSTR system. *Water Research*. **34**(5), 1705-1713.
- Moletta R., Verrier D., and Albagnac G. (1986). Dynamic modelling of anaerobic digestion. *Water Research*. **20**, 427-434.
- Mulder A., van de Graaf A. A., Robertson L. A., and Kuenen J. G. (1995). Anaerobic ammonium oxidation discovered in a denitrifying fluidized bed reactors. *FEMS Microbiology Ecology*. **16**, 177-184.
- Murthy D. N. P., Page N. W., and Rodin E. Y. *Mathematical Modelling*. New York, USA, 1990.

- Nevov I. and Fylstra D. (2003). Interval Methods for Accelerated Global Search in the Microsoft Excel Solver. *Reliable Computing*. **9**(2), 143-159.
- Olsson G. and Newell B. *Wastewater Treatment Systems. Modelling, Diagnosis and Control*. Alliance House, 12 Caxton Street, London SW1H 0QS, UK: IWA Publishing, 1999.
- Olsson G. and Jeppsson U. (2006). Plant-Wide control: dream, necessity or reality? *Water Science and Technology*. **53**(3), 121-129.
- Ostolaza X. and García-Sanz M. QFT-Robust Control of a Wastewater Treatment Plant. In: *Proceedings of the IEEE Internal Conference on Control Applications*. Trieste, Italy 1998.
- Otterphol R. and Freud M. (1992). Dynamic models for clarifiers of activated sludge plants with dry and wet weather flows. *Water Science and Technology*. **26**(5-6), 1391-1400.
- Pambrun V., Paul E., and Spérandio M. (2006). Modeling the Partial Nitrification in Sequencing Batch Reactor for Biomass Adapted to High Ammonia Concentrations. *Biotechnology and Bioengineering*. **95**(1), 120-131.
- Pavlostathis S. G. (1985). *A kinetic Model for Anaerobic Digestion of Waste Activated Sludge*. School of Civil and Environmental Engineering, Cornell University, Ithaca, NY.
- Perry R. H. and Chilton C. H. *Chemical Engineer's Handbook*. USA, 1973.
- Poch M., Comas J., Rodríguez-Roda I., Sánchez-Marrè M., and Cortés U. (2004). Designing and building real environmental decision support systems. *Environmental Modelling and Software*. **19**, 857-873.
- Reichert P., Borchardt D., Henze M., Rauch W., Shanahan P., Somlyódy L., and Vanrolleghem P. (2001). *River Water Quality Model N°1*. Scientific and Technical Report N°12, I. Publishing, London.
- Rivas A. and Ayesa E. (1997). Optimum design of activated sludge plants using the simulator Daisy 2.0. *Measurements and Modelling in Environmental Pollution*. **13**.
- Rivas A., Ayesa E., Galarza A., and Salterain A. (2001). Application of mathematical tools to improve the design and operation of activated sludge plants. Case study: the new WWTP of Galindo-Bilbao Part I: Optimum design. *Water Science and Technology*. **43**(7), 157-165.
- Roeleveld P. and van Loosdrecht M. C. M. (2002). Experiences with Guidelines for Wastewater Characterisation in the Netherlands. *Water Science and Technology*. **45**(6), 77-87.

- Rosen C. and Jeppsson U. (2002). *Anaerobic COST benchmark model description, version 1.2*. Sweden.
- Rosen C., Vrecko D., Gernaey K. V., and Jeppsson U. (2006). Implementing ADM1 for Plant wide benchmark simulation in Matlab/simulink. *Water Science and Technology*. **54**(4), 11-19.
- Sawyer C. N., McCarty P. L., and Parkin G. F. *Chemistry for environmental engineering*, 2<sup>o</sup> ed, 1994.
- Seco A., Ribes J., Serralta J., and Ferrer J. (2004). Biological Nutrient Removal Model N°1 (BNR1). *Water Science and Technology*. **50**(6), 69 -78.
- Siegrist H., Renggli D., and Gujer W. (1993). Mathematical modelling of anaerobic mesophilic sewage sludge treatment. *Water Science and Technology*. **27**, 25-36.
- Siegrist H., Vogt D., García-Heras J. L., and Gujer W. (2002). Mathematical Model for Meso- and Thermophilic Anaerobic Sewage Sludge Digestion. *Environmental Science & Technology*. **36**(5), 1113-1123.
- Smolders G. J. F., van Loosdrecht M. C. M., and Heijnen J. J. (1995a). A metabolic modelo for the biological phosphorous removal process. *Water Science and Technology*. **31**(2), 79 - 93.
- Söttemann S., Musvoto E. V., Wentzel M. C., and Ekama G. A. (2005a). Integrated biological, chemical and physical processes kinetic modelling Part1-Anoxic-aerobic C and N removal in the activated sludge systems. *Water SA*. **31**(4).
- Söttemann S., Rensburg P. v., Ristow N., Wentzel M. C., Loewenthal R. E., and Ekama G. A. (2005b). Integrated chemical/physical and biological processes modelling Part 2 - Anaerobic digestion of sewage sludges. *Water SA*. **31**(4).
- Söttemann S., Ristow N., Wentzel M., and Ekama G. A. (2005c). A steady state model for anaerobic digestion of sewage sludges. *Water SA*. **31**(4), 511-528.
- Strous M., Heijnen J. J., Kuenen J. G., and Jetten M. S. M. (1998). The sequencing batch reactor as a powerful tool for the study of slowly growing anaerobic ammonium-oxidizing microorganisms. *Applied Microbiology and Biotechnology*. **50**, 589-596.
- Suescun J., Rivas A., Ayesa E., and Larrea L. (1994). A new simulation program oriented to the design of complex biological processes for wastewater treatment. *Computer Techniques in Environmental Studies*. **5**.

- Suescun J., Ostolaza X., García-Sanz M., and Ayesa E. (2001). Real-time control strategies for predenitrification-nitrification activated sludge plants: Biodegradation control. *Water Science and Technology*. **43**(1), 209-216.
- Tákacs I., Patry G. G., and Nolasco D. (1991). A dynamic model of the clarification thickening process. *Water Research*. **25**, 1263-1271.
- Tákacs I. and Vanrolleghem P. A. Elemental balances in activated sludge modelling. In: *Proceedings of the IWA World Water Congress 2006*. Beijing, China, September 10-14, 2006.
- Thompson D., Chapman D. T., and Murphy K. L. (1989). Step feed control to minimize solids loss during storm flows. *Research Journal WPCF*. **61**, 1658-1665.
- Tugtas A. E., Tezel U., and Pavlostathis S. G. (2005). An Extension of the Anaerobic Digestion Model No. 1 to Include the Effect of Nitrate Reduction Processes. *Water Science and Technology*. **54**(4), 41-49.
- Ullrich A. H. and Smith M. W. (1951). The biosorption process of sewage and waste treatment. *Sewage and Industrial wastes*. **23**, 1248-1253.
- Van Haandel A. C., Ekama G. A., and Marais G. v. R. (1981). The Activated Sludge Process: Part 3 - Single Sludge Denitrification. *Water Research*. **15**, 1135-1152.
- Van Hulle S. W. H., Volcke E. I. P., Teruel J. L., Donckels B., van Loosdrecht M. C. M., and Vanrolleghem P. A. Influence of temperature and pH on the kinetics of the SHARON nitritation process. In: *Proceedings of the 4th IWA World Water Congress*. Marrakech, Morocco, September 19-24, 2004.
- Van Loosdrecht M. C. M. and Henze M. (1999). Maintenance, endogenous respiration, lysis, decay and predation. *Water Science & Technology*. **39**(1), 107-117.
- Van Rensburg P., Musvoto E. V., Wentzel M., and Ekama G. A. (2003). Modelling multiple mineral precipitation in anaerobic digester liquor. *Water Research*. **37**(13), 3087-3097.
- Vanrolleghem P. A., Rosen C., Zaher U., Copp J., Benedetti L., Ayesa E., and Jeppsson U. (2005). Continuity-Based Interfacing of Models for Wastewater Systems Described by Petersen Matrices. *Water Science & Technology*. **52**(1-2), 493-500.
- Vavilin V. A., Rytov S. V., Lokshina L. Y., Rintala J. A., and Lyberatos G. (2001). Simplified hydrolysis models for the optimal design of two stage anaerobic digestion. *Water Research*. **35**(17), 4247-4251.



- Vogelaar J. C. T., Klapwijk B., van Lier J. B., and Rulkens W. H. (2000). Temperature effects on the oxygen transfer rate between 20 and 55 °C. *Water Research*. **34**(3), 435-442.
- Volcke E. I. P., van Loosdrecht M. C. M., and Vanrolleghem P. A. (2006a). Controlling the nitrite:ammonium ratio in a SHARON reactor in view of its coupling with an Anammox process. *Water Science and Technology*. **53**(4-5), 45-54.
- Volcke E. I. P., van Loosdrecht M. C. M., and Vanrolleghem P. A. (2006b). Continuity-based model interfacing for plant-wide simulation: A general approach. *Water Research*. **52**(1-2), 2817-2828.
- Volcke E. I. P., Gernaey K. V., Vrecco D., Jeppsson U., van Loosdrecht M. C. M., and Vanrolleghem P. A. (2006c). Plant-Wide (BSM2) Evaluation of reject water treatment with a SHARON-Anammox process. *Water Science and Technology*. **54**(8), 93-100.
- Vrecco D., Gernaey K. V., Rosen C., and Jeppsson U. (2006). Benchmark Simulation Model N° 2 in Matlab-Simulink: towards plant-wide WWTP control strategy evaluation. *Water Science and Technology*. **54**(8), 65-72.
- Wentzel M., Ekama G. A., and Sötemann S. (2006). Mass balance-based plant-wide wastewater treatment plant models - Part 1: Biodegradability of wastewater organics under anaerobic conditions. *Water SA*. **32**(3), 269-275.
- Wett B. and Alex J. (2003). Impacts of Separate Rejection Water Treatment on the Overall Plant Performance. *Water Science & Technology*. **48**(4), 139-146.
- Wett B. and Rauch W. (2003). The role of inorganic carbon limitation in biological nitrogen removal of extremely ammonia concentrated wastewater. *Water Research*(37), 1100-1110.
- Wett B., Eladawy A., and Ogurek M. (2006). Description of Nitrogen Incorporation and -Release in ADM1. *Water Science and Technology*. **54**(4), 67-76.
- Wiesmann U., Biological nitrogen removal from wastewater, in *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology*, vol. 51. Berlin: Springer-Verlag, 1994, pp. 113-154.
- Yasui H., Sugimoto M., Komatsu K., Rajeev Goel Y. Y. L., and Noike T. (2006). An approach for substrate mapping between ASM and ADM1 for sludge digestion. *Water Science and Technology*. **54**(4), 83-92.

- 
- Zaher U., Grau P., Benedetti L., Ayesa E., and Vanrolleghem P. A. (2007). Transformers for Interfacing Anaerobic Digestion Models to Pre- and Post-Treatment Processes in a Plant-Wide Modelling Context. *Environmental Modelling and Software*. **22**, 40-58.



## *ANEXO A*

# *CÁLCULO DE PARÁMETROS QUÍMICOS Y FÍSICO- QUÍMICOS*

---

### **A.1 CÁLCULO DE LAS CONSTANTES DE LOS EQUILIBRIOS QUÍMICOS**

Las constantes de los equilibrios químicos considerados en la *Librería de Transformaciones* se han se han definido en función de la Temperatura mediante la ecuación de Van't Hoff tal y como se muestra en la Tabla A.1.

Tabla A.1. Constantes de equilibrio ácido-base en función de la Temperatura

|              | Constante de acidez<br>(T = 298 K) (mol/l) | Expresión dependiente de la Temperatura<br>(Perry and Chilton, 1973)                                                              | Unidades                           |
|--------------|--------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------|
| $K_{a,H_2O}$ | $10^{-14}$                                 | $K_{a,H_2O} = 10^{-14} \cdot \exp\left(\frac{55900}{8,314} \cdot \left(\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T}\right)\right) \cdot 1000^2$ | $\text{gH}_2\text{O}^2/\text{m}^6$ |
| $K_{a,IC}$   | $10^{-6,35}$                               | $K_{a,IC} = 10^{-6,35} \cdot \exp\left(\frac{7646}{8,314} \cdot \left(\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T}\right)\right) \cdot 1000$    | $\text{gH}/\text{m}^3$             |
| $K_{a,IN}$   | $10^{-9,25}$                               | $K_{a,IN} = 10^{-9,25} \cdot \exp\left(\frac{51965}{8,314} \cdot \left(\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T}\right)\right) \cdot 1000$   | $\text{gH}/\text{m}^3$             |
| $K_{a,IP}$   | $10^{-7,2}$                                | $K_{a,IP} = 10^{-7,2} \cdot \exp\left(\frac{4200}{8,314} \cdot \left(\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T}\right)\right) \cdot 1000$     | $\text{gH}/\text{m}^3$             |
| $K_{a,VA}$   | $10^{-4,86}$                               | ---                                                                                                                               | $\text{gH}/\text{m}^3$             |
| $K_{a,BU}$   | $10^{-4,82}$                               | ---                                                                                                                               | $\text{gH}/\text{m}^3$             |
| $K_{a,PRO}$  | $10^{-4,88}$                               | ---                                                                                                                               | $\text{gH}/\text{m}^3$             |
| $K_{a,AC}$   | $10^{-4,76}$                               | ---                                                                                                                               | $\text{gH}/\text{m}^3$             |

## A.2 CÁLCULO DE LAS CONSTANTES DE HENRY

De igual modo, las constantes de Henry que indican la solubilidad de los gases en el agua residual o fango se han expresado en función de la temperatura.

Tabla A.2. Constantes de Henry en función de la Temperatura

|              | Constante de Henry<br>(T = 298 K) (mol/l) | Expresión dependiente de la Temperatura<br>(Perry and Chilton, 1973)                                                            | Unidades                 |
|--------------|-------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|
| $K_{H,CO_2}$ | 0,035                                     | $K_{H,CO_2} = 0,035 \cdot \exp\left(\frac{-19410}{8,314} \cdot \left(\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T}\right)\right) \cdot 12000$  | $\text{gC}/\text{m}^3$   |
| $K_{H,CH_4}$ | 0,0014                                    | $K_{H,CH_4} = 0,0014 \cdot \exp\left(\frac{-14240}{8,314} \cdot \left(\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T}\right)\right) \cdot 64000$ | $\text{gDQO}/\text{m}^3$ |
| $K_{H,O_2}$  | 0,0013                                    | $K_{H,O_2} = 0,0013 \cdot \exp\left(\frac{-1500}{8,314} \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298}\right)\right) \cdot 32000$      | $\text{gO}_2/\text{m}^3$ |
| $K_{H,N_2}$  | 0,00078                                   | $K_{H,N_2} = 0,00078 \cdot \exp\left(\frac{-4180}{8,314} \cdot \left(\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T}\right)\right) \cdot 28000$  | $\text{gN}/\text{m}^3$   |
| $K_{H,NH_3}$ | 0,00175                                   | $K_{H,NH_3} = 0,00175 \cdot \exp\left(-4100 \cdot \left(\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T}\right)\right) \cdot 14000$               | $\text{gN}/\text{m}^3$   |

### A.3 CÁLCULO DE LA PRESIÓN DE VAPOR DE EQUILIBRIO DEL AGUA

La presión de vapor de equilibrio del agua en función de la temperatura viene dada por la siguiente expresión:

$$P_{eq\_H_2O}(T) = 0,0313 \cdot \exp\left(5290 \cdot \left(\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T}\right)\right)$$

### A.4 CÁLCULO DE LOS COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA LÍQUIDO-GAS

Los coeficientes de transferencia líquido-gas en la disolución o escape de gases ( $k_L a$ ) se han calculado en función al valor del coeficiente líquido-gas del O<sub>2</sub> tal y como se muestra en la siguiente ecuación (Perry and Chilton, 1973):

$$k_L a_{gas} = k_L a_{o_2} \cdot \sqrt{\frac{D_{gas}}{D_{o_2}}} \quad (A.1)$$

Los coeficientes de difusividad de los gases considerados en la LT se muestran a continuación (Perry and Chilton, 1973):

Tabla A.3. Constantes de Henry en función de la Temperatura

| Símbolo          | Unidad            | Valor                 |
|------------------|-------------------|-----------------------|
| D <sub>co2</sub> | m <sup>2</sup> /d | 1,69·10 <sup>-4</sup> |
| D <sub>h2</sub>  | m <sup>2</sup> /d | 5,05·10 <sup>-4</sup> |
| D <sub>n2</sub>  | m <sup>2</sup> /d | 1,64·10 <sup>-4</sup> |
| D <sub>ch4</sub> | m <sup>2</sup> /d | 1,92·10 <sup>-4</sup> |
| D <sub>o2</sub>  | m <sup>2</sup> /d | 2,16·10 <sup>-4</sup> |
| D <sub>nh3</sub> | m <sup>2</sup> /d | 1,19·10 <sup>-4</sup> |

En los casos en los que el coeficiente de transferencia  $k_L a_{O_2}$  no ha sido un parámetro controlado (EDAR BSM2, Capítulo 3), éste se ha expresado en función de la temperatura a partir de expresión propuesta por (Vogelaar *et al.*, 2000).

$$k_L a_{O_2}(T) = k_L a_{O_2}(T_{ref}) \cdot e^{\theta(T-T_{ref})} \quad (A.2)$$

Donde

$k_L a_{O_2}(T_{ref})$ : Valor de  $k_L a$  ( $d^{-1}$ ) a la Temperatura de referencia

$\theta$ : Factor de corrección de Temperatura (1,024)

## *ANEXO B*

# *ESTEQUIOMETRÍA, CINÉTICAS Y PARÁMETROS EMPLEADOS EN EL MODELO BSM2 PWM*

---

### **B.1 MODELO DE TRANSFORMACIONES DE PLANTA (PTM) Y VECTOR DE COMPONENTES DE PLANTA (PCV)**

A continuación se presenta el Vector de Componentes de Planta (PCV) y el Modelo de Transformaciones de Planta (PTM), expresado mediante su matriz de estequiometría y vector de cinéticas, constituidos en la construcción del Modelo Integral de EDAR BSM2 (Capítulo 3).



Tabla B.1. Vector de Componentes de Planta (PCV) del modelo BSM2 PWM

| Componente UE                                 | Fracciones másicas y densidad de carga |                 |                 |                 |                 |                  | Componente UE                                    | Fracciones másicas y densidad de carga |                           |                          |                        |                         |                         |
|-----------------------------------------------|----------------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|--------------------------------------------------|----------------------------------------|---------------------------|--------------------------|------------------------|-------------------------|-------------------------|
|                                               | $\alpha_{C,i}$                         | $\alpha_{H,i}$  | $\alpha_{O,i}$  | $\alpha_{N,i}$  | $\alpha_{P,i}$  | $\alpha_{Ch,i}$  |                                                  | $\alpha_{C,j}$                         | $\alpha_{H,j}$            | $\alpha_{O,j}$           | $\alpha_{N,j}$         | $\alpha_{P,j}$          | $\alpha_{Ch,j}$         |
| 1 $S_{a2}$<br>gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | ---                                    | ---             | 1               | ---             | ---             | ---              | 29 $X_{c2}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | $\alpha_{C,29}$<br>0,4401              | $\alpha_{H,29}$<br>0,0608 | $\alpha_{O,29}$<br>0,489 | $\alpha_{N,29}$<br>--- | $\alpha_{P,29}$<br>0,01 | $\alpha_{Ch,29}$<br>--- |
| 2 $S_{h2o}$<br>gH <sub>2</sub> O              | ---                                    | 0,1111          | 0,8889          | ---             | ---             | ---              | 30 $X_{c,h}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>              | 0,5498                                 | 0,0699                    | 0,2199                   | 0,1604                 | ---                     | ---                     |
| 3 $S_{h+}$<br>gH/m <sup>3</sup>               | ---                                    | 1               | ---             | ---             | 1               | ---              | 31 $X_{pr}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | 0,752                                  | 0,1201                    | 0,118                    | ---                    | ---                     | ---                     |
| 4 $S_{oh-}$<br>gH/m <sup>3</sup>              | ---                                    | 0,0588          | 0,9412          | ---             | -0,0588         | ---              | 32 $X_{f,i}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>              | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 5 $S_{hpo4}$<br>gP/m <sup>3</sup>             | ---                                    | 0,0104          | 0,6667          | ---             | 0,3229          | -0,0208          | 33 $X_h$<br>gDOO/m <sup>3</sup>                  | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 6 $S_{h2po4}$<br>gP/m <sup>3</sup>            | ---                                    | 0,0206          | 0,6598          | ---             | 0,3196          | -0,0103          | 34 $X_{n,i}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>              | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 7 $S_{nh4}$<br>gN/m <sup>3</sup>              | ---                                    | 0,2222          | ---             | 0,7778          | ---             | 0,0556           | 35 $X_{n2}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 8 $S_{nh3}$<br>gN/m <sup>3</sup>              | ---                                    | 0,1765          | ---             | 0,8235          | ---             | ---              | 36 $X_{su}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 9 $S_{o2}$<br>gC/m <sup>3</sup>               | 0,2727                                 | ---             | 0,7273          | ---             | ---             | ---              | 37 $X_{aa}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 10 $S_{hca3-}$<br>gC/m <sup>3</sup>           | 0,1967                                 | 0,0164          | 0,7869          | ---             | ---             | -0,0164          | 38 $X_{fa}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 11 $S_{su}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>            | 0,40                                   | 0,0667          | 0,5333          | ---             | ---             | ---              | 39 $X_{c4}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 12 $S_{aa}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>            | 0,5498                                 | 0,0699          | 0,2199          | 0,1604          | ---             | ---              | 40 $X_{pro}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>              | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 13 $S_{fa}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>            | 0,75                                   | 0,125           | 0,125           | ---             | ---             | ---              | 41 $X_{ac}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 14 $S_{hva}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>           | 0,5882                                 | 0,098           | 0,3137          | ---             | ---             | ---              | 42 $X_{h2}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 15 $S_{va-}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>           | 0,5941                                 | 0,0891          | 0,3168          | ---             | ---             | -0,0099          | 43 $X_I$<br>gDOO/m <sup>3</sup>                  | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 16 $S_{hhu}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>           | 0,5455                                 | 0,0909          | 0,3636          | ---             | ---             | ---              | 44 $X_p$<br>gDOO/m <sup>3</sup>                  | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 17 $S_{huc}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>           | 0,5517                                 | 0,0805          | 0,3678          | ---             | ---             | -0,0115          | 45 $X_{f,i}$<br>g/m <sup>3</sup>                 | 0,5155                                 | 0,0592                    | 0,275                    | 0,1203                 | 0,03                    | ---                     |
| 18 $S_{hpo}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>           | 0,4865                                 | 0,0811          | 0,4324          | ---             | ---             | ---              | 46 $G_{c2}$<br>gC/m <sup>3</sup>                 | 0,2727                                 | ---                       | 0,7273                   | ---                    | ---                     | ---                     |
| 19 $S_{pro}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>           | 0,4932                                 | 0,0685          | 0,4384          | ---             | ---             | -0,0137          | 47 $G_{h2}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | ---                                    | 1                         | ---                      | ---                    | ---                     | ---                     |
| 20 $S_{hac}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>           | 0,4                                    | 0,0667          | 0,5333          | ---             | ---             | ---              | 48 $G_{c,h4}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>             | 0,75                                   | 0,25                      | ---                      | ---                    | ---                     | ---                     |
| 21 $S_{ac-}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>           | 0,4068                                 | 0,0508          | 0,5424          | ---             | ---             | -0,0169          | 49 $G_{nh3}$<br>gN/m <sup>3</sup>                | ---                                    | 0,1765                    | ---                      | 0,8235                 | ---                     | ---                     |
| 22 $S_{n2}$<br>gN/m <sup>3</sup>              | ---                                    | ---             | ---             | 1               | ---             | ---              | 50 $G_{n2}$<br>gN/m <sup>3</sup>                 | ---                                    | ---                       | ---                      | 1                      | ---                     | ---                     |
| 23 $S_{no2}$<br>gN/m <sup>3</sup>             | ---                                    | ---             | 0,6957          | 0,3043          | ---             | -0,0217          | 51 $G_{n2}$<br>gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup>   | ---                                    | ---                       | ---                      | ---                    | ---                     | ---                     |
| 24 $S_{no3}$<br>gN/m <sup>3</sup>             | ---                                    | ---             | 0,7742          | 0,2258          | ---             | -0,0161          | 52 $G_{h2o}$<br>gH <sub>2</sub> O/m <sup>3</sup> | ---                                    | 0,1111                    | 0,8889                   | ---                    | ---                     | ---                     |
| 25 $S_{h2}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>            | 0,75                                   | 0,25            | ---             | ---             | ---             | ---              | ---                                              | ---                                    | ---                       | ---                      | ---                    | ---                     | ---                     |
| 26 $S_{ch4}$<br>gDOO/m <sup>3</sup>           | ---                                    | ---             | ---             | ---             | ---             | ---              | ---                                              | ---                                    | ---                       | ---                      | ---                    | ---                     | ---                     |
| 27 $S_I$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | $\alpha_{C,27}$                        | $\alpha_{H,27}$ | $\alpha_{O,27}$ | $\alpha_{N,27}$ | $\alpha_{P,27}$ | $\alpha_{Ch,27}$ | $\alpha_{C,27}$                                  | $\alpha_{H,27}$                        | $\alpha_{O,27}$           | $\alpha_{N,27}$          | $\alpha_{P,27}$        | $\alpha_{Ch,27}$        | $\alpha_{X,27}$         |
| 28 $S_P$<br>gDOO/m <sup>3</sup>               | $\alpha_{C,28}$                        | $\alpha_{H,28}$ | $\alpha_{O,28}$ | $\alpha_{N,28}$ | $\alpha_{P,28}$ | $\alpha_{Ch,28}$ | $\alpha_{C,28}$                                  | $\alpha_{H,28}$                        | $\alpha_{O,28}$           | $\alpha_{N,28}$          | $\alpha_{P,28}$        | $\alpha_{Ch,28}$        | $\alpha_{X,28}$         |

Tabla B.2. Matriz de estequiometría del PTM del modelo BSM2 PWM (Parte 1)

| Componentes →<br>Transformaciones ↓         | 1          | 2          | 3          | 5           | 7          | 9          | 11       | 12       | 13       | 14        | 16        | 18        | 20        | 22                               | 23                   | 24                | 32        | 33       | 34       |
|---------------------------------------------|------------|------------|------------|-------------|------------|------------|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|----------------------------------|----------------------|-------------------|-----------|----------|----------|
|                                             | $S_{a2}$   | $S_{k2b}$  | $S_{h+}$   | $S_{ppol+}$ | $S_{mb+}$  | $S_{c02}$  | $S_{sw}$ | $S_{su}$ | $S_{fa}$ | $S_{pva}$ | $S_{pba}$ | $S_{pbo}$ | $S_{pso}$ | $S_{hsc}$                        | $S_{n2}$             | $S_{m2+}$         | $X_h$     | $X_{n1}$ | $X_{n2}$ |
| 1 Consumo aerobio de $S_{sw}$               | $V_{2,1}$  | $V_{2,1}$  | $V_{3,1}$  | $V_{5,1}$   | $V_{7,1}$  | $V_{9,1}$  | -I       |          |          |           |           |           |           |                                  |                      |                   | $Y_h$     |          |          |
| 2 Consumo aerobio de $S_{su}$               | $V_{1,2}$  | $V_{1,2}$  | $V_{3,2}$  | $V_{5,2}$   | $V_{7,2}$  | $V_{9,2}$  |          | -I       |          |           |           |           |           |                                  |                      |                   | $Y_h$     |          |          |
| 3 Consumo aerobio de $S_{fa}$               | $V_{1,3}$  | $V_{1,3}$  | $V_{3,3}$  | $V_{5,3}$   | $V_{7,3}$  | $V_{9,3}$  |          |          | -I       |           |           |           |           |                                  |                      |                   | $Y_h$     |          |          |
| 4 Consumo aerobio de $S_{fa}$               | $V_{1,4}$  | $V_{1,4}$  | $V_{3,4}$  | $V_{5,4}$   | $V_{7,4}$  | $V_{9,4}$  |          |          |          | -I        |           |           |           |                                  |                      |                   | $Y_h$     |          |          |
| 5 Consumo aerobio de $S_{BIO}$              | $V_{1,5}$  | $V_{1,5}$  | $V_{3,5}$  | $V_{5,5}$   | $V_{7,5}$  | $V_{9,5}$  |          |          |          |           | -I        |           |           |                                  |                      |                   | $Y_h$     |          |          |
| 6 Consumo aerobio de $S_{PNO}$              | $V_{1,6}$  | $V_{1,6}$  | $V_{3,6}$  | $V_{5,6}$   | $V_{7,6}$  | $V_{9,6}$  |          |          |          |           |           | -I        |           |                                  |                      |                   | $Y_h$     |          |          |
| 7 Consumo aerobio de $S_{AC}$               | $V_{1,7}$  | $V_{1,7}$  | $V_{3,7}$  | $V_{5,7}$   | $V_{7,7}$  | $V_{9,7}$  |          |          |          |           |           |           | -I        |                                  |                      |                   | $Y_h$     |          |          |
| 8 Crecimiento $X_{n1}$                      | $V_{1,8}$  | $V_{1,8}$  | $V_{3,8}$  | $V_{5,8}$   | $V_{7,8}$  | $V_{9,8}$  |          |          |          |           |           |           |           | $I - \beta_{n,301} \cdot Y_{n1}$ |                      |                   | $Y_{n1}$  |          |          |
| 9 Crecimiento $X_{n2}$                      | $V_{1,9}$  | $V_{1,9}$  | $V_{3,9}$  | $V_{5,9}$   | $V_{7,9}$  | $V_{9,9}$  |          |          |          |           |           |           |           |                                  | -I                   |                   |           | $Y_{n2}$ |          |
| 10 Consumo anox. de $S_{sw}$ con $S_{m2+}$  | $V_{1,10}$ | $V_{2,10}$ | $V_{3,10}$ | $V_{5,10}$  | $V_{7,10}$ | $V_{9,10}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |
| 11 Consumo anox. de $S_{su}$ con $S_{m2+}$  | $V_{1,11}$ | $V_{2,11}$ | $V_{3,11}$ | $V_{5,11}$  | $V_{7,11}$ | $V_{9,11}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n03} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n03})/1.14$ | $Y_{n03}$ |          |          |
| 12 Consumo anox. de $S_{fa}$ con $S_{m2+}$  | $V_{1,12}$ | $V_{2,12}$ | $V_{3,12}$ | $V_{5,12}$  | $V_{7,12}$ | $V_{9,12}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |
| 13 Consumo anox. de $S_{BIO}$ con $S_{m2+}$ | $V_{1,13}$ | $V_{2,13}$ | $V_{3,13}$ | $V_{5,13}$  | $V_{7,13}$ | $V_{9,13}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n03} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n03})/1.14$ | $Y_{n03}$ |          |          |
| 14 Consumo anox. de $S_{BIO}$ con $S_{m2+}$ | $V_{1,14}$ | $V_{2,14}$ | $V_{3,14}$ | $V_{5,14}$  | $V_{7,14}$ | $V_{9,14}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n03} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n03})/1.14$ | $Y_{n03}$ |          |          |
| 15 Consumo anox. de $S_{PNO}$ con $S_{m2+}$ | $V_{1,15}$ | $V_{2,15}$ | $V_{3,15}$ | $V_{5,15}$  | $V_{7,15}$ | $V_{9,15}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |
| 16 Consumo anox. de $S_{AC}$ con $S_{m2+}$  | $V_{1,16}$ | $V_{2,16}$ | $V_{3,16}$ | $V_{5,16}$  | $V_{7,16}$ | $V_{9,16}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |
| 17 Consumo anox. de $S_{sw}$ con $S_{m2+}$  | $V_{1,17}$ | $V_{2,17}$ | $V_{3,17}$ | $V_{5,17}$  | $V_{7,17}$ | $V_{9,17}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |
| 18 Consumo anox. de $S_{su}$ con $S_{m2+}$  | $V_{1,18}$ | $V_{2,18}$ | $V_{3,18}$ | $V_{5,18}$  | $V_{7,18}$ | $V_{9,18}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |
| 19 Consumo anox. de $S_{fa}$ con $S_{m2+}$  | $V_{1,19}$ | $V_{2,19}$ | $V_{3,19}$ | $V_{5,19}$  | $V_{7,19}$ | $V_{9,19}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |
| 20 Consumo anox. de $S_{BIO}$ con $S_{m2+}$ | $V_{1,20}$ | $V_{2,20}$ | $V_{3,20}$ | $V_{5,20}$  | $V_{7,20}$ | $V_{9,20}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |
| 21 Consumo anox. de $S_{BIO}$ con $S_{m2+}$ | $V_{1,21}$ | $V_{2,21}$ | $V_{3,21}$ | $V_{5,21}$  | $V_{7,21}$ | $V_{9,21}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |
| 22 Consumo anox. de $S_{PNO}$ con $S_{m2+}$ | $V_{1,22}$ | $V_{2,22}$ | $V_{3,22}$ | $V_{5,22}$  | $V_{7,22}$ | $V_{9,22}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |
| 23 Consumo anox. de $S_{AC}$ con $S_{m2+}$  | $V_{1,23}$ | $V_{2,23}$ | $V_{3,23}$ | $V_{5,23}$  | $V_{7,23}$ | $V_{9,23}$ |          |          |          |           |           |           |           |                                  | $(Y_{n02} - 1)/1.14$ | $(-Y_{n02})/1.14$ | $Y_{n02}$ |          |          |



Tabla B.4. Matriz de estequiometría del PTM del modelo BSM2 PWM (Parte 3)

| Componentes →<br>Transformaciones ↓ | 1         | 2         | 3         | 4        | 5          | 6           | 7           | 8          | 9         | 10         | 14         | 15         | 16         | 17         | 18         | 19         | 20         | 21         | 22         | 25         | 26         | 34       | 35       | 36       | 37       | 38       | 39       | 40       |  |  |  |  |  |  |  |
|-------------------------------------|-----------|-----------|-----------|----------|------------|-------------|-------------|------------|-----------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|--|--|--|--|--|--|--|
|                                     | $S_{a2}$  | $S_{b2}$  | $S_{b1}$  | $S_{d2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2+}$ | $S_{dpp2+}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{c2}$  | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $S_{dpp2}$ | $G_{a2}$ | $G_{a2}$ | $G_{a2}$ | $G_{a2}$ | $G_{a2}$ | $G_{a2}$ | $G_{b2}$ |  |  |  |  |  |  |  |
| 74 Equilibrio químico $S_{b2}$      | $V_{274}$ | $V_{274}$ |           | $I$      | $V_{274}$  |             | $V_{274}$   |            | $V_{274}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 75 Equilibrio químico $S_{f2}$      | $V_{275}$ | $V_{275}$ | $V_{275}$ |          | $V_{275}$  |             | $V_{275}$   |            | $V_{275}$ | $I$        |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 76 Equilibrio químico $S_{N2}$      | $V_{276}$ | $V_{276}$ | $V_{276}$ |          | $V_{276}$  |             | $V_{276}$   | $I$        | $V_{276}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 77 Equilibrio químico $S_{P2}$      | $V_{277}$ | $V_{277}$ | $V_{277}$ |          | $V_{277}$  | $-I$        | $V_{277}$   |            | $V_{277}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 78 Equilibrio químico $S_{r1}$      | $V_{278}$ | $V_{278}$ | $V_{278}$ |          | $V_{278}$  |             | $V_{278}$   |            | $V_{278}$ |            | $-I$       | $I$        |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 79 Equilibrio químico $S_{r2}$      | $V_{279}$ | $V_{279}$ | $V_{279}$ |          | $V_{279}$  |             | $V_{279}$   |            | $V_{279}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 80 Equilibrio químico $S_{p2}$      | $V_{280}$ | $V_{280}$ | $V_{280}$ |          | $V_{280}$  |             | $V_{280}$   |            | $V_{280}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 81 Equilibrio químico $S_{c2}$      | $V_{281}$ | $V_{281}$ | $V_{281}$ |          | $V_{281}$  |             | $V_{281}$   |            | $V_{281}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 82 Disolución $G_{a2}$              | $V_{282}$ | $V_{282}$ | $V_{282}$ |          | $V_{282}$  |             | $V_{282}$   |            | $V_{282}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 83 Disolución $G_{a2}$              | $V_{283}$ | $V_{283}$ | $V_{283}$ |          | $V_{283}$  |             | $V_{283}$   |            | $V_{283}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 84 Evaporación del agua $S_{b2}$    | $V_{284}$ | $V_{284}$ | $V_{284}$ |          | $V_{284}$  |             | $V_{284}$   |            | $V_{284}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 85 Disolución $G_{a2}$              | $V_{285}$ | $V_{285}$ | $V_{285}$ |          | $V_{285}$  |             | $V_{285}$   | $I$        | $V_{285}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 86 Disolución $G_{a2}$              | $V_{286}$ | $V_{286}$ | $V_{286}$ |          | $V_{286}$  |             | $V_{286}$   |            | $V_{286}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 87 Disolución $G_{a2}$              | $V_{287}$ | $V_{287}$ | $V_{287}$ |          | $V_{287}$  |             | $V_{287}$   |            | $V_{287}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 88 Disolución $G_{a2}$              | $V_{288}$ | $V_{288}$ | $V_{288}$ |          | $V_{288}$  |             | $V_{288}$   |            | $V_{288}$ |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |          |          |          |          |          |          |          |  |  |  |  |  |  |  |

Ecuaciones utilizadas para calcular el valor de los componentes fuente-sumidero

$$V_{S_{a2},j} = -\sum_{i=1}^{52} \left( \frac{\beta_{C,i} V_{ij}}{\beta_{C,S_{a2}}} \right) \quad V_{S_{b2},j} = -\sum_{i=8}^{52} \left( \frac{\beta_{N,i} V_{ij}}{\beta_{N,S_{b2}+4}} \right) \quad V_{S_{pp2},j} = -\sum_{i=6}^{52} \left( \frac{\beta_{P,i} V_{ij}}{\beta_{P,S_{pp2}+4}} \right) \quad V_{S_{sh2},j} = -\sum_{i=4}^{52} \left( \frac{\beta_{Ch,i} V_{ij}}{\beta_{Ch,S_{sh2}}} \right) \quad V_{S_{d2},j} = -\sum_{i=3}^{52} \left( \frac{\beta_{H,i} V_{ij}}{\beta_{H,S_{d2}}} \right) \quad V_{S_{o2},j} = -\sum_{i=2}^{52} \left( \frac{\beta_{O,i} V_{ij}}{\beta_{O,S_{o2}}} \right)$$

A continuación se presentan las ecuaciones cinéticas de cada una de las transformaciones incluidas en el PTM del modelo BSM2 PWM.

$$\rho_1 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{su}}{K_{su\_h} + S_{su}} \cdot \frac{S_{su}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_2 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{aa}}{K_{aa\_h} + S_{aa}} \cdot \frac{S_{aa}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_3 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{fa}}{K_{fa\_h} + S_{fa}} \cdot \frac{S_{fa}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_4 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{VA}}{K_{VA\_h} + S_{VA}} \cdot \frac{S_{VA}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_5 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{BU}}{K_{BU\_h} + S_{BU}} \cdot \frac{S_{BU}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_6 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{PRO}}{K_{PRO\_h} + S_{PRO}} \cdot \frac{S_{PRO}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_7 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{AC}}{K_{AC\_h} + S_{AC}} \cdot \frac{S_{AC}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_8 = k_{m,N1} \cdot \frac{S_{IN}}{K_{NH,N1} + S_{IN}} \cdot \frac{S_{o2}}{K_{O,N1} + S_{o2}} \cdot [A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{pH,N1}] \cdot X_{n1}$$

$$\rho_9 = k_{m,N2} \cdot \frac{S_{no2-}}{K_{NO,N2} + S_{no2-}} \cdot \frac{S_{o2}}{K_{O,N2} + S_{o2}} \cdot [A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{pH,N2}] \cdot X_{n2}$$

$$\rho_{10} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{S_{su}}{K_{su\_h} + S_{su}} \cdot \frac{S_{su}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{11} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{S_{aa}}{K_{aa\_h} + S_{aa}} \cdot \frac{S_{aa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{12} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{S_{fa}}{K_{fa\_h} + S_{fa}} \cdot \frac{S_{fa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IP}] \cdot X_h$$

$$\rho_{13} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{S_{VA}}{K_{VA\_h} + S_{VA}} \cdot \frac{S_{VA}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{14} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{S_{BU}}{K_{BU\_h} + S_{BU}} \cdot \frac{S_{BU}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{15} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{S_{PRO}}{K_{PRO\_h} + S_{PRO}} \cdot \frac{S_{PRO}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{16} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{S_{AC}}{K_A + S_{AC}} \cdot \frac{S_{AC}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{17} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{su}}{K_F + S_{su}} \cdot \frac{S_{su}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{18} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{aa}}{K_F + S_{aa}} \cdot \frac{S_{aa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{19} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{fa}}{K_F + S_{fa}} \cdot \frac{S_{fa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{20} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{VA}}{K_A + S_{VA}} \cdot \frac{S_{VA}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{21} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{BU}}{K_A + S_{BU}} \cdot \frac{S_{BU}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{22} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{PRO}}{K_A + S_{PRO}} \cdot \frac{S_{PRO}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{23} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{AC}}{K_A + S_{AC}} \cdot \frac{S_{AC}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{24} = k_{m,su} \cdot \frac{S_{su}}{K_{S,su} + S_{su}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{su}$$

$$\rho_{25} = k_{m,aa} \cdot \frac{S_{aa}}{K_{S,aa} + S_{aa}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{aa}$$

$$\rho_{26} = k_{m,fa} \cdot \frac{S_{fa}}{K_{S,fa} + S_{fa}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,fa} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{fa}$$

$$\rho_{27} = k_{m,c4} \cdot \frac{S_{VA}}{K_{S,c4} + S_{VA}} \cdot \frac{I}{I + S_{BU}/S_{VA}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,c4} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{28} = k_{m,c4} \cdot \frac{S_{BU}}{K_{S,c4} + S_{BU}} \cdot \frac{I}{I + S_{VA}/S_{BU}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,c4} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{29} = k_{m,pro} \cdot \frac{S_{PRO}}{K_{S,pro} + S_{PRO}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,pro} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{pro}$$

$$\rho_{30} = k_{m,ac} \cdot \frac{S_{AC}}{K_{S,ac} + S_{AC}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{nh3} \cdot I_{ph,ac}] \cdot X_{ac}$$

$$\rho_{31} = k_{m,h2} \cdot \frac{S_{h2}}{K_{S,h2} + S_{h2}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{ph,h2}] \cdot X_{h2}$$

$$\rho_{32} = k_{d\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c2}$$

$$\rho_{33} = k_{d\_Anox} \cdot [A_{nox} \cdot I_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c2}$$

$$\rho_{34} = k_{d\_Anaer} \cdot [I_{nox} \cdot I_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c2}$$

$$\rho_{35} = k_{h\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{ch}$$

$$\rho_{36} = k_{h\_Anox} \cdot [I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{ch}$$

$$\rho_{37} = k_{h\_Anaer} \cdot [I_{nox} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{ch}$$

$$\rho_{38} = k_{h\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pr}$$

$$\rho_{39} = k_{h\_Anox} \cdot [I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pr}$$

$$\rho_{40} = k_{h\_Anaer} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pr}$$

$$\rho_{41} = k_{h\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{li}$$

$$\rho_{42} = k_{h\_Anox} \cdot [I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{li}$$

$$\rho_{43} = k_{h\_Anaer} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{li}$$

$$\rho_{44} = k_{dec\_aer,xh} \cdot A_{o2} \cdot X_h$$

$$\rho_{45} = k_{dec\_anox,xh} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_h$$

$$\rho_{46} = k_{dec\_anaer,xh} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_h$$

$$\rho_{47} = k_{dec\_aer,xn1} \cdot A_{o2} \cdot X_{n1}$$

$$\rho_{48} = k_{dec\_anox,xn1} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{n1}$$

$$\rho_{49} = k_{dec\_an,xn1} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{n1}$$

$$\rho_{50} = k_{dec\_aer,xn2} \cdot A_{o2} \cdot X_{n2}$$

$$\rho_{51} = k_{dec\_anox,xn2} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{n2}$$

$$\rho_{52} = k_{dec\_an,xn2} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{n2}$$

$$\rho_{53} = k_{dec\_aer,xsu} \cdot A_{o2} \cdot X_{su}$$

$$\rho_{54} = k_{dec\_anox,xsu} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{su}$$

$$\rho_{55} = k_{dec\_an,xsu} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{su}$$

$$\rho_{56} = k_{dec\_aer,xaa} \cdot A_{o2} \cdot X_{aa}$$

$$\rho_{57} = k_{dec\_anox,xaa} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{aa}$$

$$\rho_{58} = k_{dec\_an,xaa} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{aa}$$

$$\rho_{59} = k_{dec\_aer,xfa} \cdot A_{o2} \cdot X_{fa}$$

$$\rho_{61} = k_{dec\_an,xfa} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{fa}$$

$$\rho_{62} = k_{dec\_aer,xc4} \cdot A_{o2} \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{63} = k_{dec\_anox,xc4} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{64} = k_{dec\_an,xc4} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{65} = k_{dec\_aer,xpro} \cdot A_{o2} \cdot X_{pro}$$

$$\rho_{66} = k_{dec\_anox,xpro} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{pro}$$

$$\rho_{67} = k_{dec\_an,xpro} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{pro}$$

$$\rho_{68} = k_{dec\_aer,xac} \cdot A_{o2} \cdot X_{ac}$$

$$\rho_{69} = k_{dec\_anox,xac} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{ac}$$

$$\rho_{70} = k_{dec\_an,xac} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{ac}$$

$$\rho_{71} = k_{dec\_aer,xh2} \cdot A_{o2} \cdot X_{h2}$$

$$\rho_{72} = k_{dec\_anox,xh2} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{h2}$$

$$\rho_{73} = k_{dec\_an,xh2} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{h2}$$

$$\rho_{74} = k_{AB,H2O} \cdot (K_{a,H2O} \cdot S_{oh-} \cdot S_{H+})$$

$$\rho_{75} = k_{AB,IC} \cdot (K_{a,IC} \cdot S_{co2} \cdot S_{hco3-} \cdot S_{h+})$$

$$\rho_{76} = k_{AB,IN} \cdot (K_{a,IN} \cdot S_{nh4+} \cdot S_{nh3} \cdot S_{h+})$$

$$\rho_{77} = k_{AB,IP} \cdot (K_{a,IP} \cdot S_{h2po4-} \cdot S_{hpo4=} \cdot S_{h+})$$

$$\rho_{78} = k_{AB,VA} \cdot (K_{a,VA} \cdot S_{hva} \cdot S_{va-} \cdot S_{h+})$$

$$\rho_{79} = k_{AB,BU} \cdot (K_{a,BU} \cdot S_{hbu} \cdot S_{bu-} \cdot S_{h+})$$

$$\rho_{80} = k_{AB,PRO} \cdot (K_{a,PRO} \cdot S_{hpro} \cdot S_{pro-} \cdot S_{h+})$$

$$\rho_{81} = k_{AB,AC} \cdot (K_{a,AC} \cdot S_{hac} \cdot S_{ac-} \cdot S_{h+})$$

$$\rho_{82} = K_L a_{co2} \cdot (K_{H,co2} \cdot P_{gas,co2} \cdot S_{co2})$$

$$\rho_{83} = K_L a_{o2} \cdot (K_{H,o2} \cdot P_{gas,o2} \cdot S_{o2})$$

$$\rho_{84} = K_M a_{H2O} \cdot (P_{H2O}^{SAT} - P_{h2o})$$

$$\rho_{85} = K_L a_{nh3} \cdot (K_{H,nh3} \cdot P_{gas,nh3} \cdot S_{nh3})$$

$$\rho_{86} = K_L a_{ch4} \cdot (K_{H,ch4} \cdot P_{gas,ch4} \cdot S_{ch4})$$

$$\rho_{87} = K_L a_{n2} \cdot (K_{H,n2} \cdot P_{gas,n2} \cdot S_{n2})$$

$$\rho_{88} = K_L a_{h2} \cdot (K_{H,h2} \cdot P_{gas,h2} \cdot S_{h2})$$

## B.2 VARIABLES DE OPERACIÓN Y DEFINICIÓN DEL INFLUENTE EN EL MODELO BSM2 PWM

Las variables de operación se muestran en la siguiente Tabla. Los volúmenes de los 5 reactores de fangos activados y las dimensiones del decantador secundario coinciden con los especificados en la Tabla 3.1.

Tabla B.5. Variables de operación en la EDAR BSM1

| VARIABLES DE OPERACIÓN          | UNIDAD            | VALOR |
|---------------------------------|-------------------|-------|
| Caudal influente medio          | m <sup>3</sup> /d | 20648 |
| Caudal de recirculación externa | m <sup>3</sup> /d | 20648 |
| Caudal de recirculación interna | m <sup>3</sup> /d | 55338 |
| Caudal de purga                 | m <sup>3</sup> /d | 300   |
| k <sub>LA</sub> (N1,N2)         | h <sup>-1</sup>   | 10    |
| k <sub>LA</sub> (N3)            | h <sup>-1</sup>   | 3.5   |

Puesto que el influente propuesto para la validación está definido de acuerdo con los componentes del modelo ASM1, en la siguiente Tabla se especifican las ecuaciones a partir de las cuales se obtiene un influente coherente con los componentes considerados en el BSM2 PWM.



Tabla B.6. Cálculo de los componentes del BSM2 PWM

| Componente     | UE         | Ecuaciones empleadas para el cálculo dei influente del BSM2 PWM                                                                                                                                                                                                                                                             |
|----------------|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $S_{h2o}$      | $m^3/d$    | $S_{h2o} = Q_{inf}$                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| $S_{h+}$       | $gH/m^3$   | $S_{h+} = 10^{-(pH)} \cdot 1000$                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| $S_{oh-}$      | $gH/m^3$   | $S_{oh-} = \frac{K_{a,H2O}}{S_{h+}}$                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| $S_{hpo4=}$    | $gP/m^3$   | Estimado                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| $S_{hco3-}$    | $gC/m^3$   | $S_{hco3-} = S_{Alk(ASM1)} \cdot 12$                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| $S_{aa}$       | $gDQO/m^3$ | $S_{aa} = \left\{ \begin{array}{l} Si \left( \frac{S_{ND(ASM1)}}{\beta_{N,Saa}} < S_{S(ASM1)} \right) \Rightarrow \frac{S_{ND(ASM1)}}{\beta_{N,Saa}} \\ Si \text{ no } \Rightarrow S_{S(ASM1)} \end{array} \right\}$                                                                                                        |
| $S_{su}$       | $gDQO/m^3$ | $S_{su} = \frac{S_{S(ASM1)} - S_{aa}}{2}$                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| $S_{fa}$       | $gDQO/m^3$ | $S_{fa} = \frac{S_{S(ASM1)} - S_{aa}}{2}$                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| $S_{no3-}$     | $gN/m^3$   | $S_{no3-} = S_{NO(ASM1)}$                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| $S_i$          | $gDQO/m^3$ | $S_i = S_{I(ASM1)}$                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| $X_h$          | $gDQO/m^3$ | $X_h = X_{BH(ASM1)}$                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| $X_{pr}$       | $gDQO/m^3$ | $X_{pr} = \left\{ \begin{array}{l} Si \left( \frac{X_{ND(ASM1)} - X_h \cdot \beta_{N,Xh} - X_i \cdot \beta_{N,xi}}{\beta_{N,Xpr}} < X_{S(ASM1)} \right) \\ \Rightarrow \frac{X_{ND(ASM1)} - X_h \cdot \beta_{N,Xh} - X_i \cdot \beta_{N,xi}}{\beta_{N,Xpr}} \\ Si \text{ no } \Rightarrow X_{S(ASM1)} \end{array} \right\}$ |
| $X_{ch}$       | $gDQO/m^3$ | $X_{ch} = \frac{X_{S(ASM1)} - X_{pr}}{2}$                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| $X_{li}$       | $gDQO/m^3$ | $X_{li} = \frac{X_{S(ASM1)} - X_{pr}}{2}$                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| $X_i$          | $gDQO/m^3$ | $X_i = X_{I(ASM1)}$                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| $S_{IN}^{[a]}$ | $gN/m^3$   | $S_{IN} = S_{NH(ASM1)} + (S_{nd(ASM1)} - S_{aa} \cdot \beta_{N,Saa}) + (X_{nd(ASM1)} - X_{pr} \cdot \beta_{N,Xpr})$                                                                                                                                                                                                         |
| $S_{nh4+}$     | $gN/m^3$   | $S_{nh4+} = \frac{S_{IN} \cdot S_{h+}}{K_{a,IN} + S_{h+}}$                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| $S_{nh3}$      | $gN/m^3$   | $S_{nh3} = \frac{S_{nh4+} \cdot K_{a,IN}}{S_{h+}}$                                                                                                                                                                                                                                                                          |

[a] Se incluye de forma adicional para una mayor claridad en la definición de  $S_{nh4+}$  y  $S_{nh3}$

### B.3 PÁRAMETROS ESTEQUIOMÉTRICOS Y CINÉTICOS EMPLEADOS EN EL PTM DEL MODELO BSM2 PWM

- *Parámetros estequiométricos*

Tabla B.7. Fracciones másicas de los componentes que no presentan fórmula estequiométrica definida

| Componente | UE                  | Fracciones másicas y densidad de carga |                       |                      |                       |                     |                 |                |
|------------|---------------------|----------------------------------------|-----------------------|----------------------|-----------------------|---------------------|-----------------|----------------|
|            |                     | $\alpha_{C,i}$                         | $\alpha_{H,i}$        | $\alpha_{O,i}$       | $\alpha_{N,i}$        | $\alpha_{P,i}$      | $\alpha_{Ch,i}$ | $\alpha_{X,i}$ |
| $S_i$      | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5575 <sup>[d]</sup>                  | 0,06 <sup>[a]</sup>   | 0,28 <sup>[a]</sup>  | 0,0925 <sup>[b]</sup> | 0,01 <sup>[a]</sup> | ---             | ---            |
| $X_{c2}$   | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5155 <sup>[d]</sup>                  | 0,0592 <sup>[c]</sup> | 0,275 <sup>[c]</sup> | 0,1203 <sup>[c]</sup> | 0,03 <sup>[c]</sup> | ---             | ---            |
| $X_i$      | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5575 <sup>[d]</sup>                  | 0,06 <sup>[a]</sup>   | 0,28 <sup>[a]</sup>  | 0,0925 <sup>[b]</sup> | 0,01 <sup>[a]</sup> | ---             | ---            |
| $X_p$      | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5575 <sup>[d]</sup>                  | 0,06 <sup>[a]</sup>   | 0,28 <sup>[a]</sup>  | 0,0925 <sup>[b]</sup> | 0,01 <sup>[a]</sup> | ---             | ---            |

[a]: RWQM1 (Reichert et al, 2001)  
 [b]: contenido de N de  $X_p$  en BSM1 (Copp et al, 2002)  
 [c]: coincide con las fracciones másicas de los componentes asociados a la biomasa  
 [d]: Calculadas como la unidad menos la suma de las demás fracciones másicas

Tabla B.8. Parámetros estequiométricos

| Símbolo      | Unidad | Valor | Referencia            | Símbolo      | Unidad                               | Valor | Referencia            |
|--------------|--------|-------|-----------------------|--------------|--------------------------------------|-------|-----------------------|
| $f_{sp,xc2}$ | -      | 0,00  | Henze et al., 2000    | $Y_h$        | gCOD <sub>N</sub> /gCOD <sub>S</sub> | 0,67  | Henze et al., 2000    |
| $f_{xp,xc2}$ | -      | 0,08  | Henze et al., 2000    | $Y_{h,no3}$  | gCOD <sub>N</sub> /gCOD <sub>S</sub> | 0,67  | Henze et al., 2000    |
| $f_{ch,xc2}$ | -      | 0,09  | Estimado              | $Y_{h,no2}$  | gCOD <sub>N</sub> /gCOD <sub>S</sub> | 0,67  | Henze et al., 2000    |
| $f_{pr,xc2}$ | -      | 0,54  | Estimado              | $Y_{nh4,N1}$ | gCOD <sub>N</sub> /gN                | 0,21  | Pambrun et al., 2006  |
| $f_{li,xc2}$ | -      | 0,29  | Estimado              | $Y_{no2,N2}$ | gCOD <sub>N</sub> /gN                | 0,03  | Pambrun et al., 2006  |
| $f_{fa,li}$  | -      | 0,95  | Batstone et al., 2002 | $Y_{su}$     | gCOD <sub>N</sub> /gCOD <sub>S</sub> | 0,10  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{h2,su}$  | -      | 0,19  | Batstone et al., 2002 | $Y_{aa}$     | gCOD <sub>N</sub> /gCOD <sub>S</sub> | 0,08  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{bu,su}$  | -      | 0,13  | Batstone et al., 2002 | $Y_{fa}$     | gCOD <sub>N</sub> /gCOD <sub>S</sub> | 0,06  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{pro,su}$ | -      | 0,27  | Batstone et al., 2002 | $Y_{c4}$     | gCOD <sub>N</sub> /gCOD <sub>S</sub> | 0,06  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{ac,su}$  | -      | 0,41  | Batstone et al., 2002 | $Y_{pro}$    | gCOD <sub>N</sub> /gCOD <sub>S</sub> | 0,04  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{h2,aa}$  | -      | 0,06  | Batstone et al., 2002 | $Y_{ac}$     | gCOD <sub>N</sub> /gCOD <sub>S</sub> | 0,05  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{va,aa}$  | -      | 0,23  | Batstone et al., 2002 | $Y_{h2}$     | gCOD <sub>N</sub> /gCOD <sub>S</sub> | 0,06  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{bu,aa}$  | -      | 0,26  | Batstone et al., 2002 |              |                                      |       |                       |
| $f_{pro,aa}$ | -      | 0,05  | Batstone et al., 2002 |              |                                      |       |                       |
| $f_{ac,aa}$  | -      | 0,40  | Batstone et al., 2002 |              |                                      |       |                       |

Los valores de  $f_{ch,xc2}$ ,  $f_{pr,xc2}$  y  $f_{li,xc2}$  se han estimado de forma que los coeficientes de los componentes fuente sumidero en la transformación de desintegración sean mínimos.

- *Parámetros cinéticos*

Debido a que la estequiometría de las transformaciones de crecimiento de las bacterias se ha expresado por unidad de sustrato consumido y no por unidad de biomasa, las tasas de consumo de sustratos en el caso de las bacterias heterótrofas aerobias y anóxicas ( $k_{m,h}$ ) y en el caso de las nitrificantes ( $k_{m,N1}$  y  $k_{m,N2}$ ) se han calculado como a partir de los valores de  $\mu_H$  y  $\mu_A$  divididos por  $Y_H$ ,  $Y_{N1}$  e  $Y_{N2}$  respectivamente.

Los valores de  $\eta_{NO3}$  y  $\eta_{NO2}$  se han estimado a partir del valor de  $\eta_{NO}$  dado en Copp et al, (2002).

Tabla B.9. Parámetros cinéticos de consumo de sustrato

| <b>Símbolo</b> | <b>Unidad</b>                               | <b>Valor (T=15 °C)</b> | <b>Referencia</b>     |
|----------------|---------------------------------------------|------------------------|-----------------------|
| $k_{m,h}$      | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) | 5,97                   | Copp et al, 2002      |
| $k_{m,N1}$     | kgN/(kgCOD <sub>x</sub> ·d)                 | 2,38                   | Copp et al, 2002      |
| $k_{m,N2}$     | kgN/(kgCOD <sub>x</sub> ·d)                 | 19,33                  | Copp et al, 2002      |
| $\eta_{NO3}$   | ----                                        | 0,35                   | Estimado              |
| $\eta_{NO2}$   | ----                                        | 0,45                   | Estimado              |
| <b>Símbolo</b> | <b>Unidad</b>                               | <b>Valor</b>           | <b>Referencia</b>     |
| $k_{m,su}$     | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) | 30                     | Batstone et al., 2002 |
| $k_{m,aa}$     | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) | 50                     | Batstone et al., 2002 |
| $k_{m,fa}$     | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) | 6                      | Batstone et al., 2002 |
| $k_{m,c4}$     | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) | 20                     | Batstone et al., 2002 |
| $k_{m,pro}$    | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) | 9                      | Batstone et al., 2002 |
| $k_{m,ac}$     | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) | 9                      | Batstone et al., 2002 |
| $k_{m,ac}$     | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>x</sub> ·d) | 35                     | Batstone et al., 2002 |

Tabla B.10. Parámetros cinéticos de desaparición de biomasa

| Símbolo             |                      |                       | Valor (T=15 °C) | Referencia            |
|---------------------|----------------------|-----------------------|-----------------|-----------------------|
| $k_{dec\_aer,xh}$   | $k_{dec\_anox,xh}$   | $k_{dec\_anaer,xh}$   | 0,300           | Copp et al, 2002      |
| $k_{dec\_aer,xn1}$  | $k_{dec\_anox,xn1}$  | $k_{dec\_anaer,xn1}$  | 0,030           | Copp et al, 2002      |
| $k_{dec\_aer,xn2}$  | $k_{dec\_anox,xn2}$  | $k_{dec\_anaer,xn2}$  | 0,024           | Copp et al, 2002      |
| Símbolo             |                      |                       | Valor           |                       |
| $k_{dec\_aer,xsu}$  | $k_{dec\_anox,xsu}$  | $k_{dec\_anaer,xsu}$  | 0,02            | Batstone et al., 2002 |
| $k_{dec\_aer,xaa}$  | $k_{dec\_anox,xaa}$  | $k_{dec\_anaer,xaa}$  | 0,02            | Batstone et al., 2002 |
| $k_{dec\_aer,xfa}$  | $k_{dec\_anox,xfa}$  | $k_{dec\_anaer,xfa}$  | 0,02            | Batstone et al., 2002 |
| $k_{dec\_aer,xc4}$  | $k_{dec\_anox,xc4}$  | $k_{dec\_anaer,xc4}$  | 0,02            | Batstone et al., 2002 |
| $k_{dec\_aer,xpro}$ | $k_{dec\_anox,xpro}$ | $k_{dec\_anaer,xpro}$ | 0,02            | Batstone et al., 2002 |
| $k_{dec\_aer,xac}$  | $k_{dec\_anox,xac}$  | $k_{dec\_anaer,xac}$  | 0,02            | Batstone et al., 2002 |
| $k_{dec\_aer,xh2}$  | $k_{dec\_anox,xh2}$  | $k_{dec\_anaer,xh2}$  | 0,02            | Batstone et al., 2002 |

Tabla B.11. Factores de corrección con la Temperatura

| Símbolo            | Unidad | Valor | Referencia        |
|--------------------|--------|-------|-------------------|
| $\theta_{m\_h}$    | ---    | 1,072 | Henze et al, 2000 |
| $\theta_{m\_N1}$   | ---    | 1,103 | Henze et al, 2000 |
| $\theta_{m\_N2}$   | ---    | 1,103 | Henze et al, 2000 |
| $\theta_{dec\_h}$  | ---    | 1,112 | Henze et al, 2000 |
| $\theta_{dec\_N1}$ | ---    | 1,116 | Henze et al, 2000 |
| $\theta_{dec\_N2}$ | ---    | 1,116 | Henze et al, 2000 |

Tabla B.12. Constantes de saturación de consumo de sustrato

| Símbolo       | Unidad                          | Valor | Referencia         | Símbolo          | Unidad              | Valor | Referencia             |
|---------------|---------------------------------|-------|--------------------|------------------|---------------------|-------|------------------------|
| $K_{O_h}$     | gCOD/m <sup>3</sup>             | 0,2   | Copp et al, (2002) | $K_{PRO_h}$      | gCOD/m <sup>3</sup> | 1     | Estimado               |
| $K_{NH_{N1}}$ | gN/m <sup>3</sup>               | 1     | Copp et al, (2002) | $K_{AC_h}$       | gCOD/m <sup>3</sup> | 1     | Estimado               |
| $K_{NO_{N2}}$ | gN/m <sup>3</sup>               | 0,001 | Estimado           | $K_{su_{Xsu}}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, (2002) |
| $K_{O_{N1}}$  | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | 0,4   | Copp et al, (2002) | $K_{aa_{xaa}}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, (2002) |
| $K_{O_{N2}}$  | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | 0,4   | Copp et al, (2002) | $K_{fa_{xfa}}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, (2002) |
| $K_{su_h}$    | gCOD/m <sup>3</sup>             | 3     | Estimado           | $K_{VA_{xc4}}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, (2002) |
| $K_{aa_h}$    | gCOD/m <sup>3</sup>             | 3     | Estimado           | $K_{BU_{xc4}}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, (2002) |
| $K_{fa_h}$    | gCOD/m <sup>3</sup>             | 3     | Estimado           | $K_{PRO_{xpro}}$ | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, (2002) |
| $K_{VA_h}$    | gCOD/m <sup>3</sup>             | 1     | Estimado           | $K_{AC_{xac}}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, (2002) |
| $K_{BU_h}$    | gCOD/m <sup>3</sup>             | 1     | Estimado           |                  |                     |       |                        |

Tabla B.13. Constantes de hidrólisis y desintegración

| Símbolo             | Unidad          | Valor | Referencia             |
|---------------------|-----------------|-------|------------------------|
| $k_{d_{Aer,xc2}}$   | d <sup>-1</sup> | 43    | Estimado               |
| $k_{d_{Anox,xc2}}$  | d <sup>-1</sup> | 26    | Estimado               |
| $k_{d_{Anaer,xc2}}$ | d <sup>-1</sup> | 0,5   | Batstone et al, (2002) |
| $k_{h_{Aer}}$       | d <sup>-1</sup> | 43    | Estimado               |
| $k_{h_{Anox}}$      | d <sup>-1</sup> | 26    | Estimado               |
| $k_{h_{Anaer}}$     | d <sup>-1</sup> | 10    | Batstone et al, (2002) |

Tabla B.14. Constantes de activación e inhibición

| Símbolo       | Unidad                          | Valor  | Referencia             | Símbolo        | Unidad              | Valor   | Referencia             |
|---------------|---------------------------------|--------|------------------------|----------------|---------------------|---------|------------------------|
| $K_{A_{o2}}$  | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | 0,2    | Copp et al, (2002)     | $K_{h,N1}$     | gH/m <sup>3</sup>   | 1,0E-07 | Estimado               |
| $K_{A_{no3}}$ | gN/m <sup>3</sup>               | 0,5    | Reichert et al, (2001) | $K_{1,h,N1}$   | gH/m <sup>3</sup>   | 8,5E-04 | Estimado               |
| $K_{A_{no2}}$ | gN/m <sup>3</sup>               | 0,001  | Estimado               | $K_{h,N2}$     | gH/m <sup>3</sup>   | 1,0E-07 | Estimado               |
| $K_{A_{nox}}$ | gN/m <sup>3</sup>               | 0,5    | Copp et al, (2002)     | $K_{1,h,N2}$   | gH/m <sup>3</sup>   | 8,5E-04 | Estimado               |
| $K_{A_{JC}}$  | gN/m <sup>3</sup>               | 0,001  | Estimado               | $K_{1,h2,fa}$  | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,005   | Batstone et al, (2002) |
| $K_{A_{IN}}$  | gN/m <sup>3</sup>               | 0,001  | Estimado               | $K_{1,h2,c4}$  | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,01    | Batstone et al, (2002) |
| $K_{1,h,aa}$  | gH/m <sup>3</sup>               | 0,0155 | Batstone et al, (2002) | $K_{1,h2,pro}$ | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,0035  | Batstone et al, (2002) |
| $K_{1,h,ac}$  | gH/m <sup>3</sup>               | 0,0005 | Batstone et al, (2002) | $K_{1,h3}$     | gN/m <sup>3</sup>   | 25,2    | Batstone et al, (2002) |
| $K_{1,h,h2}$  | gH/m <sup>3</sup>               | 0,0005 | Batstone et al, (2002) |                |                     |         |                        |

Las constantes de velocidad de los equilibrios ácido-base  $k_{AB,i}$  se han fijado en un valor de  $1 \cdot 10^6$  de manera que los componentes ácido/base cumplan los respectivos equilibrios pero teniendo en cuenta que valores excesivamente altos pueden provocar una ralentización notable en los tiempos de simulación.

## B.4 PÁRAMETROS EMPLEADOS EN EL TRANSPORTE DE MASA DE LOS MODELOS DE PROCESO UNITARIO (MPU)

- *Modelo de Proceso Unitario de Reactor de Fangos Activados*

Tabla B.15. Parámetros del modelo Reactor de Fangos Activados

|                                                |                     |
|------------------------------------------------|---------------------|
| Volumen reactores R1, R2                       | 1000 m <sup>3</sup> |
| Volumen reactores R3, R4, R5                   | 1333 m <sup>3</sup> |
| $\alpha$ (para el cálculo de caudal de salida) | 1                   |

- *Modelo de Proceso Unitario de Digestor Anaerobio*

Tabla B.16. Parámetros del modelo Digestor Anaerobio

|                                                |                     |
|------------------------------------------------|---------------------|
| Volumen fase líquida                           | 3400 m <sup>3</sup> |
| Volumen fase gas                               | 500 m <sup>3</sup>  |
| $\alpha$ (para el cálculo de caudal de salida) | 1                   |

- *Modelo de Proceso Unitario de Decantador Secundario*

Tabla B.17. Parámetros del modelo Decantador Secundario

| Símbolo  | Unidad               | Valor    | Referencia         |
|----------|----------------------|----------|--------------------|
| $v'_0$   | m/d                  | 250      | Copp et al, (2002) |
| $v_0$    | m/d                  | 474      | Copp et al, (2002) |
| $r_h$    | m <sup>3</sup> /gSST | 0,000576 | Copp et al, (2002) |
| $r_p$    | m <sup>3</sup> /gSST | 0,00286  | Copp et al, (2002) |
| $f_{ns}$ | ---                  | 0,00228  | Copp et al, (2002) |

- *Modelo de Proceso Unitario de Decantador Primario*

Tabla B.18. Parámetros del modelo Decantador Primario

| <b>Símbolo</b> | <b>Unidad</b>  | <b>Valor</b> | <b>Referencia</b>         |
|----------------|----------------|--------------|---------------------------|
| $f_{ps}$       | ---            | 0,007        | Otterphol and Freud, 1992 |
| $T_m$          | d              | 0,125        | Otterphol and Freud, 1992 |
| $V_{clar}$     | m <sup>3</sup> | 900          | Jeppsson et al, 2006      |
| $f_{sx,i}$     | ---            | 1            | Otterphol and Freud, 1992 |

- *Modelo de Proceso Unitario de espesador*

Tabla B.19. Parámetros del modelo Espesador

| <b>Símbolo</b> | <b>Unidad</b> | <b>Valor</b> | <b>Referencia</b>    |
|----------------|---------------|--------------|----------------------|
| $\eta_{el}$    | (%)           | 98           | Jeppsson et al, 2006 |
| $X_{T,p}$      | (%)           | 7            | Jeppsson et al, 2006 |

- *Modelo de Proceso Unitario separador sólido-líquido*

Tabla B.20. Parámetros del modelo Separador sólido-líquido

| <b>Símbolo</b> | <b>Unidad</b> | <b>Valor</b> | <b>Referencia</b>    |
|----------------|---------------|--------------|----------------------|
| $\eta_{el}$    | (%)           | 98           | Jeppsson et al, 2006 |
| $X_{T,p}$      | (%)           | 28           | Jeppsson et al, 2006 |

## *ANEXO C*

# *CONSTRUCCIÓN DE LAS INTERFACES CBIM ASM1- ADM1*

---

### **C.1 PROCEDIMIENTO DE CONSTRUCCIÓN DE INTERFACES CBIM**

La construcción de interfaces según la metodología CBIM puede llevarse a cabo mediante un procedimiento secuencial que, de forma esquemática, se muestra en la Figura C.1.



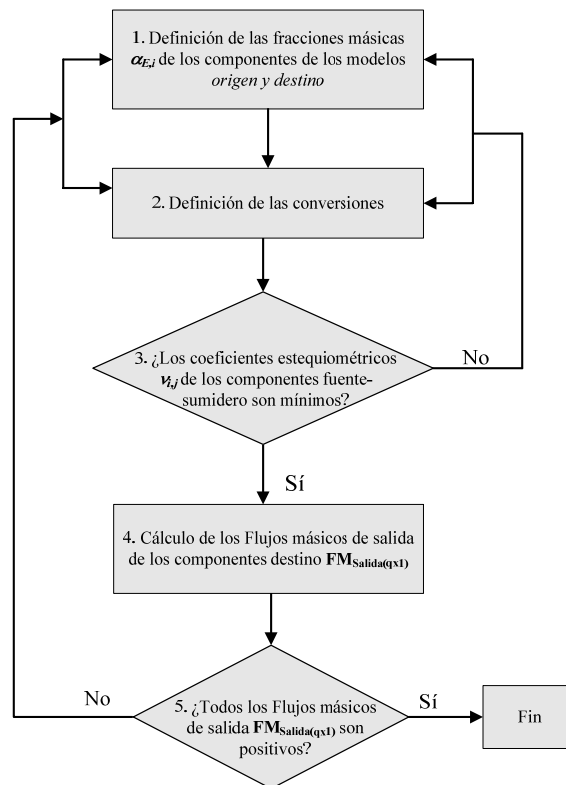


Figura C.1. Esquema del procedimiento de construcción de interfaces CBIM

De acuerdo con esta figura, los cinco pasos a seguir para la construcción de los interfaces CBIM son:

1. *Definición de las fracciones másicas  $\alpha_{E,i}$*

En primer lugar deben definirse las fracciones másicas de los componentes del modelo origen y destino en términos de C, H, O, N, P y su densidad de carga. En el caso en que los componentes no presenten fórmulas estequiométricas definidas, los valores de éstas pueden ser estimados inicialmente de acuerdo con la bibliografía. Sin embargo, tal y como se verá posteriormente, estas fracciones másicas pueden ser redefinidas posteriormente en los puntos de evaluación (3 y 5) de forma que sean coherentes con las conversiones definidas en el punto 2, y con los flujos másicos de entrada de los componentes del modelo origen a partir de los cuales se calculan los flujos másicos de salida en el punto 5.

## 2. Definición de las conversiones

Las conversiones que transforman los componentes del modelo origen en componentes del modelo destino, deben construirse de acuerdo con el significado de los componentes en el modelo y con las fracciones másicas de los componentes origen y destino. Por ejemplo, en el interfaz ASM1-ADM1, el componente  $S_S$  debe convertirse a los componentes  $S_{su}$ ,  $S_{aa}$ ,  $S_{fa}$ ,  $S_{VA}$  etc., puesto que todos estos componentes representan sustrato carbonoso rápidamente biodegradable, y además, los fraccionamientos en la conversión que determinan qué cantidad de  $S_S$  se convierte en cada uno de los componentes en el ADM1, deben calcularse de forma que no existan descompensaciones de masa importantes en la conversión.

Como requisito de la metodología CBIM, para obtener una solución válida de los flujos másicos de salida, debe tenerse en cuenta que el número de conversiones no puede ser mayor que el número de componentes del modelo origen.

## 3. Evaluación de los coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero

Una vez determinadas las fracciones másicas de los componentes y definidas las conversiones, los coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero deben ser evaluados en cada una de las conversiones. Así, valores altos de estos coeficientes en una determinada conversión, indican una descompensación de masa considerable entre los componentes origen y destino y requieren por tanto, una re-definición, bien de los componentes involucrados en la transformación, o bien de las fracciones másicas de estos componentes.

## 4. Cálculo de los Flujos másicos de salida de los componentes del modelo destino

El cálculo de los flujos másicos de los componentes del modelo destino se realiza mediante las siguientes ecuaciones.

$$FM_{Entrada,k} = - \sum_{j=1}^n v_{j,k} \cdot \rho_j \quad k=1, \dots, P \quad (C.1)$$

$$FM_{Salida,k} = - \sum_{j=1}^n v_{j,k} \cdot \rho_j \quad k=P+1, \dots, P+Q \quad (C.2)$$

Donde

$FM_{Entrada,k}$ : Flujo másico de entrada al interfaz del componente  $k$

$FM_{Salida,k}$ : Flujo másico de salida del interfaz del componente  $k$

$v_{j,k}$ : coeficientes estequiométricos en la matriz de Petersen del interfaz

$n$ : número de conversiones

$P$ : número de componentes del modelo origen

$Q$ : número de componentes del modelo destino

Estas ecuaciones representadas de forma matricial permiten el cálculo directo de los flujos másicos de salida a partir de la siguiente ecuación:

$$FM_{Salida(Q \times 1)} = -T_{destino(Q \times n)} \cdot T_{origen(P \times n)}^{-1} \cdot FM_{Entrada(P \times 1)} \quad (C.3)$$

Donde

$P$  es el número de componentes del modelo origen

$FM_{Entrada(P \times 1)}$  es el vector de los flujos másicos de entrada al interfaz de los componentes del modelo origen

$Q$  es el número de componentes del modelo destino

$FM_{Salida(Q \times 1)}$  es el vector de los flujos másicos de salida del interfaz de los componentes del modelo destino

$T_{origen(P \times n)}$  es la matriz transpuesta de estequiometría origen

$T_{destino(Q \times n)}$  es la matriz transpuesta de estequiometría destino

$n$  es el número de conversiones

En este punto debe indicarse que la ecuación (C.3) puede calcularse únicamente si la matriz  $E_{origen}$  es cuadrada, es decir si el número de conversiones es igual al número de componentes en el modelo origen. En caso contrario, el cálculo de los flujos másicos de salida deberá realizarse mediante el cálculo de los ratios de conversión de cada una de las conversiones de forma individual, a partir de las ecuaciones (C.1) y (C.2).

### *5. Evaluación de los flujos másicos de salida de los componentes del modelo destino*

Una vez calculados los flujos másicos de salida, como requisito para garantizar el buen funcionamiento del interfaz debe comprobarse, bajo cualquier circunstancia estacionaria o dinámica, que los valores de los flujos másicos de salida de los componentes del modelo destino toman valores positivos. Aunque en principio esto debería ser obvio si se considera que los componentes del modelo origen presentan coeficientes estequiométricos negativos en su correspondiente conversión y los componentes del modelo destino presentan valores positivos, el hecho de que algunos componentes intervengan en más de una conversión o el hecho de que en algunas conversiones puedan existir requerimientos excesivos de componentes fuente-sumidero, puede provocar situaciones en las cuales la demanda de masa de algún componente en un determinado instante sea mayor que la existente y aparezcan flujos másicos de salida negativos. Esta situación, tal y como se indica en la Figura C.1, requiere una redefinición bien de las fracciones másicas de algunos componentes o bien de las conversiones consideradas.

A continuación se describen los interfaces  $ASM1 \rightarrow ADM1$  y  $ADM1 \rightarrow ASM1$  contruidos de acuerdo con este procedimiento.

## C.2 CONSTRUCCIÓN DEL INTERFAZ CBIM ASM1→ADM1

En primer lugar, las fracciones máxicas asignadas a los componentes de los modelos ASM1 y ADM1 se muestran en la Tabla C.1 y Tabla C.2.

Tabla C.1. Fracciones máxicas de los componentes del modelo ASM1

| Componente | Fórmula     | UE                                                               | Fracciones máxicas y densidad de carga |                       |                     |                     |                       |                     |         |
|------------|-------------|------------------------------------------------------------------|----------------------------------------|-----------------------|---------------------|---------------------|-----------------------|---------------------|---------|
|            |             |                                                                  | $\alpha_{C,i}$                         | $\alpha_{H,i}$        | $\alpha_{O,i}$      | $\alpha_{N,i}$      | $\alpha_{P,i}$        | $\alpha_{Ch,i}$     |         |
| 1          | $S_s$       | --                                                               | gDQO/m <sup>3</sup>                    | 0,63 <sup>[c]</sup>   | 0,08 <sup>[a]</sup> | 0,28 <sup>[a]</sup> | ---                   | 0,01 <sup>[a]</sup> | ---     |
| 2          | $S_{no3^-}$ | NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>                                     | gN/m <sup>3</sup>                      | ---                   | ---                 | 0,7742              | 0,2258                | ---                 | -0,0161 |
| 3          | $S_I$       | --                                                               | gDQO/m <sup>3</sup>                    | 0,64 <sup>[c]</sup>   | 0,07 <sup>[a]</sup> | 0,28 <sup>[a]</sup> | ---                   | 0,01 <sup>[a]</sup> | ---     |
| 4          | $X_S$       | --                                                               | gDQO/m <sup>3</sup>                    | 0,63 <sup>[c]</sup>   | 0,08 <sup>[a]</sup> | 0,28 <sup>[a]</sup> | ---                   | 0,01 <sup>[a]</sup> | ---     |
| 5          | $X_{BH}$    | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub> | gDQO/m <sup>3</sup>                    | 0,5155                | 0,0592              | 0,275               | 0,1203                | 0,03                | ---     |
| 6          | $X_{BA}$    | C <sub>5</sub> H <sub>6,9</sub> O <sub>2</sub> NP <sub>0,1</sub> | gDQO/m <sup>3</sup>                    | 0,5155                | 0,0592              | 0,275               | 0,1203                | 0,03                | ---     |
| 7          | $X_I$       | --                                                               | gDQO/m <sup>3</sup>                    | 0,5575 <sup>[c]</sup> | 0,06 <sup>[a]</sup> | 0,28 <sup>[a]</sup> | 0,0925 <sup>[b]</sup> | 0,01 <sup>[a]</sup> | ---     |
| 8          | $X_P$       | --                                                               | gDQO/m <sup>3</sup>                    | 0,5575 <sup>[c]</sup> | 0,06 <sup>[a]</sup> | 0,28 <sup>[a]</sup> | 0,0925 <sup>[b]</sup> | 0,01 <sup>[a]</sup> | ---     |
| 9          | $S_{nh4^+}$ | NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>                                     | gN/m <sup>3</sup>                      | ---                   | 0,2222              | ---                 | 0,7778                | ---                 | 0,0556  |
| 10         | $S_{ND}$    | NH <sub>3</sub>                                                  | gN/m <sup>3</sup>                      | ---                   | 0,1765              | ---                 | 0,8235                | ---                 | ---     |
| 11         | $X_{ND}$    | NH <sub>3</sub>                                                  | gN/m <sup>3</sup>                      | ---                   | 0,1765              | ---                 | 0,8235                | ---                 | ---     |
| 12         | $S_{alk}$   | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>                                    | gC/m <sup>3</sup>                      | 0,1967                | 0,0164              | 0,7869              | ---                   | ---                 | -0,0164 |
| 13         | $S_O$       | O <sub>2</sub>                                                   | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup>        | ---                   | ---                 | 1                   | ---                   | ---                 | ---     |

[a] RWQM1 (Reichert et al, 2001)

[b] ASM1 (Henze et al, 2000)

[c] Calculadas como la unidad menos la suma de las demás

Tabla C.2. Fracciones másicas de los componentes del modelo ADM1

| <i>i</i> | Nombre     | Fórmula                    | Descripción          | UE                  | Fracciones másicas y densidad de carga |                      |                     |                       |                     |                 |
|----------|------------|----------------------------|----------------------|---------------------|----------------------------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|---------------------|-----------------|
|          |            |                            |                      |                     | $\alpha_{C,i}$                         | $\alpha_{H,i}$       | $\alpha_{O,i}$      | $\alpha_{N,i}$        | $\alpha_{P,i}$      | $\alpha_{Ch,i}$ |
| 1        | $S_{IN}$   | $NH_4^+$                   | Amonio               | gN/m <sup>3</sup>   | ---                                    | 0,2222               | ---                 | 0,7778                | ---                 | 0,0556          |
| 2        | $S_{IC}$   | $HCO_3^-$                  | Bicarbonato          | gC/m <sup>3</sup>   | 0,1967                                 | 0,0164               | 0,7869              | ---                   | ---                 | -0,0164         |
| 3        | $S_{su}$   | $C_6H_{12}O_6$             | Monosacáridos        | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,40                                   | 0,0667               | 0,5333              | ---                   | ---                 | ---             |
| 4        | $S_{aa}$   | $C_4H_6,1O_{1,2}N$         | Aminoácidos          | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5498                                 | 0,0699               | 0,2199              | 0,1604                | ---                 | ---             |
| 5        | $S_{fa}$   | $C_{16}O_2H_{32}$          | LCFAs                | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,75                                   | 0,125                | 0,125               | ---                   | ---                 | ---             |
| 6        | $S_{va-}$  | $C_5H_9O_2^-$              | Valerato             | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5941                                 | 0,0891               | 0,3168              | ---                   | ---                 | -0,0099         |
| 7        | $S_{bu-}$  | $C_4H_7O_2^-$              | Butirato             | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5517                                 | 0,0805               | 0,3678              | ---                   | ---                 | -0,0115         |
| 8        | $S_{pro-}$ | $C_3H_5O_2^-$              | Propionato           | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,4932                                 | 0,0685               | 0,4384              | ---                   | ---                 | -0,0137         |
| 9        | $S_{ac-}$  | $C_2H_3O_2^-$              | Acetato              | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,4068                                 | 0,0508               | 0,5424              | ---                   | ---                 | -0,0169         |
| 10       | $S_{h2}$   | $H_2$                      | Hidrógeno disuelto   | gDQO/m <sup>3</sup> | ---                                    | 1                    | ---                 | ---                   | ---                 | ---             |
| 11       | $S_{ch4}$  | $CH_4$                     | Metano disuelto      | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,75                                   | 0,25                 | ---                 | ---                   | ---                 | ---             |
| 12       | $S_I$      | --                         | Inertes solubles     | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,64 <sup>[c]</sup>                    | 0,07 <sup>[a]</sup>  | 0,28 <sup>[a]</sup> | ---                   | 0,01 <sup>[a]</sup> | ---             |
| 13       | $X_c$      | --                         | Complejos            | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,595 <sup>[d]</sup>                   | 0,055 <sup>[d]</sup> | 0,28 <sup>[d]</sup> | 0,06 <sup>[d]</sup>   | 0,01 <sup>[d]</sup> | ---             |
| 14       | $X_{ch}$   | $C_6H_{9,95}O_5P_{0,05}$   | Carbohidratos        | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,4401                                 | 0,0608               | 0,489               | ---                   | 0,01                | ---             |
| 15       | $X_{pr}$   | $(C_4H_6,1O_{1,2}N)_x$     | Proteínas            | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5498                                 | 0,0699               | 0,2199              | 0,1604                | ---                 | ---             |
| 16       | $X_{li}$   | $C_{51}H_{97,9}O_8P_{0,1}$ | Lípidos              | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,752                                  | 0,1201               | 0,118               | ---                   | 0,01                | ---             |
| 17       | $X_{su}$   | $C_5H_6,9O_2NP_{0,1}$      | B. deg. Azucres      | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5155                                 | 0,0592               | 0,275               | 0,1203                | 0,03                | ---             |
| 18       | $X_{aa}$   | $C_5H_6,9O_2NP_{0,1}$      | B. deg. Aminoácidos  | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5155                                 | 0,0592               | 0,275               | 0,1203                | 0,03                | ---             |
| 19       | $X_{fa}$   | $C_5H_6,9O_2NP_{0,1}$      | B. deg. LCFA         | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5155                                 | 0,0592               | 0,275               | 0,1203                | 0,03                | ---             |
| 20       | $X_{c4}$   | $C_5H_6,9O_2NP_{0,1}$      | B. deg. Valer/butir  | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5155                                 | 0,0592               | 0,275               | 0,1203                | 0,03                | ---             |
| 21       | $X_{pro}$  | $C_5H_6,9O_2NP_{0,1}$      | B. deg. Propiónico   | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5155                                 | 0,0592               | 0,275               | 0,1203                | 0,03                | ---             |
| 22       | $X_{ac}$   | $C_5H_6,9O_2NP_{0,1}$      | B. deg acético       | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5155                                 | 0,0592               | 0,275               | 0,1203                | 0,03                | ---             |
| 23       | $X_{h2}$   | $C_5H_6,9O_2NP_{0,1}$      | B. deg. hidrógeno    | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5155                                 | 0,0592               | 0,275               | 0,1203                | 0,03                | ---             |
| 24       | $X_I$      | --                         | Inertes particulados | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5575 <sup>[c]</sup>                  | 0,06 <sup>[a]</sup>  | 0,28 <sup>[a]</sup> | 0,0925 <sup>[b]</sup> | 0,01 <sup>[a]</sup> | ---             |

[a] RWQM1 (Reichert et al, 2001)

[b] ASM1 (Henze et al, 2000)

[c] Calculadas como la unidad menos la suma de las demás

[d] Estimadas a partir de las indicaciones dadas en Rosen et al, (2002)

En segundo lugar, las conversiones propuestas para el interfaz ASM1→ADM1 se han basado en los criterios de conversión utilizados en el interfaz propuesto por Copp et al. (2003). Se ha considerado una conversión para cada uno de los componentes del modelo origen de forma que la matriz  $E_{origen}$  es cuadrada y los flujos másicos de salida pueden calcularse a partir de la ecuación (C.3).

El papel de componentes fuente-sumidero en las conversiones se ha sido asignado a los componentes  $S_{IC}$ ,  $S_{IN}$ ,  $S_{IP}$ ,  $S_{h+}$ ,  $S_{h2o}$  del modelo ADM1 y el componente  $S_o$  del modelo ASM1 para los elementos C, N, P, carga, H y O respectivamente. Por este motivo, en los modelos ASM1 y ADM1 se han considerado de forma adicional los componentes  $S_{IP}$  y  $S_{h+}$  y  $S_{h2o}$ . Los coeficientes estequiométricos de estos componentes se han calculado en todas las conversiones mediante un conjunto de ecuaciones (Tabla C.3) que

garantizan la continuidad de masa y carga en todas las conversiones. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que, de acuerdo con el tercer paso del procedimiento de construcción del interfaz, los requerimientos o liberaciones de masa en las conversiones deberían ser mínimos para garantizar el buen funcionamiento del interfaz. Las conversiones consideradas en el interfaz ASM1-ADM1 se enumeran a continuación.

1. *Conversión de  $S_{H_2O}$  en  $S_{h_2o}$*

Esta conversión permite el paso de caudal a través del interfaz y se realiza mediante un balance de masa de agua.

2. *Conversión de  $S_S$  en  $S_{su}$*

El componente  $S_S$  se convierte en el componente  $S_{su}$  en el modelo ADM1 mediante un balance de DQO.

3. *Consumo de  $S_{no3-}$*

La conversión de  $S_{no3-}$  se ha definido como una transformación bioquímica en la que el componente  $S_S$  se consume tomando como aceptor de electrones el componente  $S_{no3-}$  y dando lugar a un crecimiento de las bacterias heterótrofas  $X_{bh}$  y liberación de  $S_{n2}$ . Puesto que el componente  $S_{n2}$  no se considera en el modelo ASM1 se asume que el  $S_{n2}$  obtenido en esta conversión escapa de forma inmediata a la atmósfera. Sin embargo, este componente debe introducirse en la matriz de estequiometría en el interfaz para garantizar el balance en DQO y N y evitar una descompensación de masa de N y DQO en la conversión. En esta conversión por tanto, no interviene ningún componente del modelo destino excepto los correspondientes componentes fuente-sumidero ya que el crecimiento de  $X_{BH}$  requiere una cantidad adicional de nutrientes (N, P). Esta conversión es un claro ejemplo de la imposibilidad en algunas conversiones, de minimizar los coeficientes de los componentes fuente-sumidero tal y como se propone en el punto 3 del procedimiento propuesto.

4. *Conversión de  $S_I$  a  $S_i$*

Puesto que se ha considerado la misma composición másica de los componentes inertes solubles de los modelos ASM1 y ADM1, la conversión es directa y sin requerimientos o liberaciones adicionales de masa.

5. *Conversión de  $X_S$  a  $X_{ch}$*

La conversión de  $X_S$  a  $X_{ch}$ , basada en el hecho de que ninguno de los dos componentes contiene N, se ha llevado a cabo mediante un balance de DQO.

6. y 7. *Conversiones de  $X_{bh}$  y  $X_{ba}$  a  $X_c$*

Las poblaciones de bacterias  $X_{bh}$  y  $X_{ba}$  dejan de presentar actividad biológica en condiciones anaerobias y por tanto se convierten en el componente complejo  $X_c$  mediante un balance en DQO.

8. y 9. *Conversión de  $X_I$  y  $X_p$  a  $X_i$*

Se considera que toda la materia inerte representada por los componentes  $X_I$  y  $X_p$  en el modelo ASM1 sigue siendo materia inerte  $X_i$  en el modelo ADM1.

10. *Conversión de  $S_{nh4+}$  a  $S_{IN}$*

Si se asume un pH igual a 7 en el interfaz, las fracciones másicas del componente  $S_{IN}$  pueden definirse de acuerdo con la fórmula estequiométrica  $NH_4^+$  y por tanto esta conversión se realiza mediante un balance de N y no presenta descompensaciones de masa.

11. *Conversión de  $S_{nd}$  a  $S_{aa}$*

En esta conversión se asume que el nitrógeno orgánico soluble representado en modelo ASM1 como  $S_{nd}$  se convierte en el contenido de N del componente  $S_{aa}$ . La cantidad de DQO requerida en esta conversión se toma del componente  $S_S$ .

12. *Conversión de  $X_{nd}$  a  $X_c$*

Al igual que en el caso anterior, en esta conversión se asume que el nitrógeno orgánico particulado representado en modelo ASM1 como  $X_{nd}$  se convierte en el contenido de N contenida del componente  $X_c$ . La cantidad de DQO requerida en esta conversión se toma del componente  $X_S$ .

13. *Conversión de  $S_{alk}$  a  $S_{ic}$*

La alcalinidad del agua residual cuando el pH toma valores cercanos a 7, procede mayoritariamente del  $HCO_3^-$ . Por tanto, puede asumirse que los componentes  $S_{Alk}$  y  $S_{IC}$  presentan igual composición másica que la correspondiente al compuesto  $HCO_3^-$ .

14. *Desaparición del  $S_{o2}$*

Al igual que en el caso de la desaparición del  $S_{no3-}$ , se asume que la desaparición del  $S_{o2}$  se da a partir del consumo del componente  $S_S$  e implica el crecimiento de las bacterias  $X_{bh}$  a partir de cierta cantidad de nutrientes  $S_{IN}$  y  $S_{IP}$ .

15. *Conversión de  $S_{IP}$  a  $S_{IP}$*

Esta conversión se lleva a cabo mediante un balance de masa de P.



16. Conversión de  $S_{h+}$  a  $S_{h+}$ 

Esta conversión se lleva a cabo mediante un balance de masa de H.

Las matrices de estequiometría  $E_{origen}$  y  $E_{destino}$  que describen estas conversiones se presentan a continuación. Los coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero se han calculado mediante las siguientes expresiones:

Tabla C.3. Coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero

| $x_i$    | Coeficiente estequiométrico $\nu_{ij}$                                                                                                                                                                        | $x_i$     | Coeficiente estequiométrico $\nu_{ij}$                                                                                                                                                                            |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $S_{IN}$ | $\nu_{j,S_{IN}} = -\left( \sum_{i=1}^{13} \left( \frac{\beta_{N,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{N,S_{IN}}} \right) + \sum_{i=15}^{24} \left( \frac{\beta_{N,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{N,S_{IN}}} \right) \right)$ | $S_{h+}$  | $\nu_{j,S_{h+}} = -\left( \sum_{i=1}^{13} \left( \frac{\beta_{Ch,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{Ch,S_{h+}}} \right) + \sum_{i=15}^{27} \left( \frac{\beta_{Ch,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{Ch,S_{h+}}} \right) \right)$ |
| $S_{IC}$ | $\nu_{j,S_{IC}} = -\left( \sum_{i=1}^{13} \left( \frac{\beta_{C,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{C,S_{IC}}} \right) + \sum_{i=15}^{25} \left( \frac{\beta_{C,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{C,S_{IC}}} \right) \right)$ | $S_{h2o}$ | $\nu_{j,S_{h2o}} = -\left( \sum_{i=1}^{13} \left( \frac{\beta_{H,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{H,S_{h2o}}} \right) + \sum_{i=15}^{28} \left( \frac{\beta_{H,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{H,S_{h2o}}} \right) \right)$  |
| $S_{IP}$ | $\nu_{j,S_{IP}} = -\left( \sum_{i=1}^{13} \left( \frac{\beta_{P,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{P,S_{IP}}} \right) + \sum_{i=15}^{26} \left( \frac{\beta_{P,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{P,S_{IP}}} \right) \right)$ | $S_o$     | $\nu_{j,S_o} = -\left( \sum_{i=1}^{13} \left( \frac{\beta_{O,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{O,S_o}} \right) + \sum_{i=15}^{29} \left( \frac{\beta_{O,i} \cdot \nu_{j,i}}{\beta_{O,S_o}} \right) \right)$              |

Una vez definidas las conversiones en el interfaz ASM1  $\rightarrow$  ADM1, la validez de éstas dependerá de las condiciones estacionarias o dinámicas del caso de estudio particular.



### C.3 CONSTRUCCIÓN DEL INTERFAZ CBIM ADM1→ASM1

Las fracciones másicas de los componentes de los dos modelos, puesto que deben coincidir con las fracciones másicas asignadas en el interfaz ASM1→ADM1 se muestran en la Tabla C.1 y Tabla C.2.

Las conversiones consideradas en el interfaz ADM1→ASM1 se enumeran a continuación:

#### 1. Conversión de $S_i$ a $S_I$

Se realiza de forma directa mediante un balance de DQO. Como las fracciones másicas de los componentes inertes solubles se han definido igual en ambos modelos, en esta conversión, no existen descompensaciones de masa.

#### 2, 4-8. Conversiones de $S_{su}$ , $S_{fa}$ , $S_{VA}$ , $S_{BU}$ , $S_{PRO}$ y $S_{AC}$ a $S_S$

En este caso, las conversiones se definen aplicando balances de DQO entre los componentes del modelo origen y el componente  $S_S$ . En estas conversiones sí existen descompensaciones de masa debido a las diferencias que existen entre las fracciones másicas de los componentes que representan el sustrato soluble en el modelo ADM1 y el componente  $S_S$ . En caso de que estas descompensaciones influyan negativamente en el funcionamiento del conversor, las fracciones másicas de los componentes  $S_S$  deberían redefinirse en función de los flujos másicos de entrada de  $S_{su}$ ,  $S_{fa}$ ,  $S_{VA}$ ,  $S_{BU}$ ,  $S_{PRO}$  y  $S_{AC}$ .

#### 3. Conversión de $S_{aa}$ a $S_S$ y $S_{nd}$

Esta conversión se define mediante un balance de DQO entre los componentes  $S_{aa}$  y  $S_S$  y el contenido en nitrógeno en el componente  $S_{aa}$  se convierte en  $S_{nd}$ .

#### 9. Conversión de $X_i$ a $X_I$

Como en el caso del sustrato soluble, la conversión se define mediante un balance de DQO en el que además como las fracciones másicas de ambos componentes son iguales no existen descompensaciones de masa.

#### 10. Conversión de $X_c$ a $X_S$ y $X_{nd}$

En esta conversión el componente  $X_c$  se transforma en  $X_S$  mediante un balance de DQO y el contenido en nitrógeno de  $X_c$  se convierte en  $X_S$ .

#### 11 y 13. Conversiones de $X_{ch}$ , y $X_{li}$ a $X_S$

Los componentes  $X_{ch}$  y  $X_{li}$  se convierten en  $X_S$ .

### 12. Conversión de $X_{pr}$ a $X_S$ y $X_{nd}$

Al igual que la conversión 10, la conversión de  $X_{pr}$  a  $X_S$  se realiza mediante un balance de DQO y el nitrógeno contenido en el componente  $X_{pr}$  se convierte en  $X_{nd}$ .

### 14-20. Conversiones de $X_{su}$ , $X_{aa}$ , $X_{fa}$ , $X_{c4}$ , $X_{pro}$ , $X_{ac}$ , $X_{h2}$ a $X_S$ y $X_{nd}$

Las conversiones de los componentes que representan la biomasa anaerobia se realizan mediante balances de DQO entre estos componentes y el componente  $X_S$ . El contenido en nitrógeno de la biomasa se transforma en  $X_{nd}$ .

### 21. Conversión de $S_{IN}$ a $S_{NH}$

La conversión se ha definido mediante un balance de N.

### 22. Conversión de $S_{IC}$ a $S_{ALK}$

La conversión se ha definido mediante un balance de C.

### 23. Conversión de $S_{IP}$ a $S_{IP}$

La conversión se ha definido mediante un balance de P.

### 24. Conversión de $S_{h+}$ a $S_{h+}$

La conversión se ha definido mediante un balance de H.

Las conversiones de los componentes  $S_{ch4}$  y  $S_{h2}$  no se incluyen en el interfaz ya que se considera un escape instantáneo de estos componentes a la atmósfera. Las conversiones de los componentes  $S_{cat}$  y  $S_{an}$  tampoco se han considerado ya que en el modelo ASM1 no se contabilizan las cargas.

A continuación se muestran las matrices de estequiometría  $E_{origen}$  y  $E_{destino}$  propuestas para el interfaz ADM1→ASM1 de acuerdo con las conversiones descritas.



Tabla C.7. Matriz de estequiometría  $E_{destino}$  en el interfaz ADM1→ASM1

| Componentes (i) →      | 26                  | 27                  | 28                  | 29                | 30                | 31                | 32                | 33                            | 34                | 35                               | 36                              |
|------------------------|---------------------|---------------------|---------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------------------|-------------------|----------------------------------|---------------------------------|
| Conversiones (j) ↓     | $S_I$               | $X_S$               | $X_I$               | $S_{ND}$          | $X_{ND}$          | $S_{nh4+}$        | $S_{alk}$         | $S_{ip}$ (HPO4 <sup>-</sup> ) | $S_{H+}$          | $S_{H2O}$                        | $S_O$                           |
|                        | gDQO/m <sup>3</sup> | gDQO/m <sup>3</sup> | gDQO/m <sup>3</sup> | gN/m <sup>3</sup> | gN/m <sup>3</sup> | gN/m <sup>3</sup> | gC/m <sup>3</sup> | gP/m <sup>3</sup>             | gH/m <sup>3</sup> | gH <sub>2</sub> O/m <sup>3</sup> | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> |
| 1 $S_{h2o\_}S_{h2o}$   |                     |                     |                     |                   |                   |                   |                   |                               |                   | 1                                |                                 |
| 2 $S_I\_S_I$           | 1000                |                     |                     |                   |                   |                   |                   |                               |                   |                                  |                                 |
| 3 $S_{su\_}S_S$        |                     |                     |                     |                   |                   |                   | 7,15              | -10                           | 6,52              | 10                               |                                 |
| 4 $S_{aa\_}S_{ND},S_S$ |                     |                     |                     | 98                |                   |                   | 7,25              | -9,4                          | 6,65              | -380                             |                                 |
| 5 $S_{fa\_}S_S$        |                     |                     |                     |                   |                   |                   | -2,40             | -10                           | -3,03             | 10                               |                                 |
| 6 $S_{va\_}S_S$        |                     |                     |                     |                   |                   |                   | -0,06             | -10                           | -5,50             | 10                               |                                 |
| 7 $S_{hu\_}S_S$        |                     |                     |                     |                   |                   |                   | 0,90              | -10                           | -5,98             | 10                               |                                 |
| 8 $S_{pro\_}S_S$       |                     |                     |                     |                   |                   |                   | 2,69              | -10                           | -6,88             | 10                               |                                 |
| 9 $S_{ac\_}S_S$        |                     |                     |                     |                   |                   |                   | 7,15              | -10                           | -9,11             | 10                               |                                 |
| 10 $X_I\_X_I$          |                     |                     | 1000                |                   |                   |                   |                   |                               |                   |                                  |                                 |
| 11 $X_C\_X_S$          |                     | 1000                |                     |                   | 37,6              |                   | 5,35              | -3,9                          | 2,41              | -263                             |                                 |
| 12 $X_{ch\_}X_S$       |                     | 1000                |                     |                   |                   |                   | 6,60              | -10                           | 5,97              | 55                               |                                 |
| 13 $X_{pr\_}X_S$       |                     | 1000                |                     |                   | 98,0              |                   | 5,35              | -10                           | -2,28             | -272                             |                                 |
| 14 $X_{ii\_}X_S$       |                     | 1000                |                     |                   |                   |                   | -2,95             | -10                           | -3,58             | 55                               |                                 |
| 15 $X_{su\_}X_S$       |                     | 1000                |                     |                   |                   | 86,2              | 5,87              | 11,55                         | 0,45              | -291                             |                                 |
| 16 $X_{aa\_}X_S$       |                     | 1000                |                     |                   |                   | 86,2              | 5,87              | 11,55                         | 0,45              | -291                             |                                 |
| 17 $X_{fa\_}X_S$       |                     | 1000                |                     |                   |                   | 86,2              | 5,87              | 11,55                         | 0,45              | -291                             |                                 |
| 18 $X_{ct\_}X_S$       |                     | 1000                |                     |                   |                   | 86,2              | 5,87              | 11,55                         | 0,45              | -291                             |                                 |
| 19 $X_{pro\_}X_S$      |                     | 1000                |                     |                   |                   | 86,2              | 5,87              | 11,55                         | 0,45              | -291                             |                                 |
| 20 $X_{ac\_}X_S$       |                     | 1000                |                     |                   |                   | 86,2              | 5,87              | 11,55                         | 0,45              | -291                             |                                 |
| 21 $X_{h2\_}X_S$       |                     | 1000                |                     |                   |                   | 86,2              | 5,87              | 11,55                         | 0,45              | -291                             |                                 |
| 22 $S_m\_S_{nh4+}$     |                     |                     |                     |                   |                   | 14000             |                   |                               |                   |                                  |                                 |
| 23 $S_{ic\_}S_{alk}$   |                     |                     |                     |                   |                   | 0                 | 1000              |                               |                   |                                  |                                 |
| 24 $S_{ip\_}S_{ip}$    |                     |                     |                     |                   |                   |                   |                   | 1                             |                   |                                  |                                 |
| 25 $S_{h+\_}S_{h+}$    |                     |                     |                     |                   |                   |                   |                   |                               | 1                 |                                  |                                 |

Tabla C.8. Coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero en el interfaz ADM1→ASM1

| $x_i$      | Coeficiente estequiométrico $V_{ij}$                                                                    | $x_i$     | Coeficiente estequiométrico $V_{ij}$                                                                   |
|------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $S_{nh4+}$ | $v_{j,S_{nh4+}} = -\sum_{i=1}^{30} \left( \frac{\beta_{N,i} \cdot v_{j,i}}{\beta_{N,S_{nh4+}}} \right)$ | $S_{h+}$  | $v_{j,S_{h+}} = -\sum_{i=1}^{33} \left( \frac{\beta_{Ch,i} \cdot v_{j,i}}{\beta_{Ch,S_{h+}}} \right)$  |
| $S_{alk}$  | $v_{j,S_{alk}} = -\sum_{i=1}^{31} \left( \frac{\beta_{C,i} \cdot v_{j,i}}{\beta_{C,S_{alk}}} \right)$   | $S_{h2o}$ | $v_{j,S_{h2o}} = -\sum_{i=15}^{34} \left( \frac{\beta_{H,i} \cdot v_{j,i}}{\beta_{H,S_{h2o}}} \right)$ |
| $S_{ip}$   | $v_{j,S_{ip}} = -\sum_{i=1}^{32} \left( \frac{\beta_{P,i} \cdot v_{j,i}}{\beta_{P,S_{ip}}} \right)$     | $S_O$     | $v_{j,S_O} = -\sum_{i=1}^{35} \left( \frac{\beta_{O,i} \cdot v_{j,i}}{\beta_{O,S_O}} \right)$          |



## ANEXO D

# MODELOS DE DECANTACIÓN EMPLEADOS EN EL MODELO BSM2 PWM

---

### D.1 MODELO DE DECANTACIÓN PRIMARIA OT- TERPHOL AND FREUD

Este modelo (Otterphol and Freud, 1992), está constituido por un reactor de mezcla completa y una separación a la salida del reactor que divide el flujo másico efluente y el flujo másico extraído por el fondo del decantador (Figura 3.5).

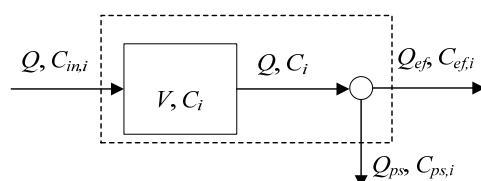


Figura D.1. Esquema del modelo Otterpohl-Freud



Donde

$Q$ : Caudal de entrada al decantador ( $\text{m}^3/\text{d}$ )

$C_{in,i}$ : Concentración del componente  $i$  de entrada al decantador ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

$Q_{ef}$ : Caudal de salida por el efluente del decantador ( $\text{m}^3/\text{d}$ )

$C_{ef,i}$ : Concentración del componente  $i$  efluente ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

$Q_{ps}$ : Caudal extraído por el fondo del decantador ( $\text{m}^3/\text{d}$ )

$C_{ps,i}$ : Concentración del componente  $i$  en el fondo del decantador ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

Las ecuaciones que describen el transporte de masa para cada uno de los componentes  $C_i$  incluidos en el VCP del modelo BSM2 PWM se describen a continuación.

En primer lugar, y debido a la relación existente entre el caudal hidráulico y el componente  $S_{h2o}$ , el transporte de masa de este componente puede describirse mediante las ecuaciones (D.1) y (D.2).

$$Q = Q_{ps} + Q_{ef} \quad (\text{D.1})$$

$$Q_{ps} = f_{ps} \cdot Q \quad (\text{D.2})$$

Donde

$Q_{ps}$ : Caudal extraído por el fondo del decantador ( $\text{m}^3/\text{d}$ )

$Q_{ef}$ : Caudal de salida por el efluente del decantador ( $\text{m}^3/\text{d}$ )

$f_{ps}$ : Fracción del caudal de entrada que se extrae en la decantación

El flujo másico del resto de los componentes incluidos en el VCP extraídos por el fondo del decantador puede obtenerse a partir del siguiente balance de masas:

$$Q_{ps} \cdot C_{ps,i} = Q \cdot C_{in,i} - (Q - Q_{ps}) \cdot C_{ef,i} \quad (\text{D.3})$$

Donde

$C_{in,i}$ : Concentración del componente  $i$  de entrada al decantador ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

$C_{ef,i}$ : Concentración del componente  $i$  efluente ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

$C_{ps,i}$ : Concentración del componente  $i$  en el fondo del decantador ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

A su vez, la concentración de todos los componentes en el efluente del decantador se calculan a partir de las siguientes ecuaciones:

$$C_{ef,i} = f_i \cdot C_i \quad (D.4)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{Q}{V} \cdot (C_{in,i} - C_i) \quad (D.5)$$

$$f_i = 1 - \frac{\eta_{DQOp}}{100} \cdot f_{sx,i} \quad (D.6)$$

Donde

$C_i$ : Concentración del componente  $i$  a la salida del reactor de mezcla completa ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

$f_i$ : Factor de concentración de efluente del componente  $i$  ( $\text{gUE}_i/\text{m}^3$ )

$V$ : Volumen del decantador primario ( $\text{m}^3$ )

$\eta_{DQOp}$ : Rendimiento de eliminación de DQO<sub>p</sub> (%)

$f_{sx,i}$ : factor que define la fracción de materia particulada de cada componente (generalmente, igual a uno en los componentes particulados y cero en los componentes solubles)

Puesto que para los componentes solubles el valor de  $f_{sx,i}$  es igual a cero, a partir de las ecuaciones (D.4) (D.5) y (D.6), puede concluirse que las concentraciones de los componentes solubles en los flujos de salida por el efluente y por el fondo del decantador son en ambos casos iguales a  $C_i$ . En el caso de los componentes particulados, sin embargo, debido a que el parámetro  $f_{sx,i}$  toma de forma general el valor de uno, el rendimiento de eliminación de la DQO<sub>p</sub>  $\eta_{DQOp}$  es quien determina concentraciones de éstos en el efluente y en el fango extraído en el decantador.

Según se propone en , la eliminación de los sólidos suspendidos en el decantador está basada en el factor rendimiento de eliminación de DQO<sub>p</sub> calculado a partir de las siguientes ecuaciones:

$$\eta_{DQOp} = \frac{\eta_{DQOt}}{f_x} \quad (D.7)$$

$$\eta_{DQOt} = f_{corr} \cdot (2.88 \cdot f_x - 0.118) \cdot (1.45 + 6.15 \cdot \ln(t_h)) \quad (D.8)$$

Donde

$\eta_{DQO_t}$ : Rendimiento de eliminación de  $DQO_t$  (%)

$f_{corr}$ : Factor de corrección de eliminación de  $DQO_t$

$f_x$ : valor medio de la relación  $DQO_p$  y  $DQO_t$

$t_h$ : Tiempo de retención hidráulico (min)

De acuerdo con las ecuaciones anteriores, se observa que el rendimiento de eliminación  $DQO_p$  depende del rendimiento de eliminación de  $DQO_t$ , que a su vez depende de la relación  $DQO_p/DQO_t$  en el influente. En la Figura D.2 y Figura D.3 se representan gráficamente los rendimientos de eliminación de  $DQO_t$  y  $DQO_p$  respectivamente en función del tiempo de residencia hidráulico  $t_h$  para distintos valores de  $f_x$  ( $f_{corr} = 0.65$ ).

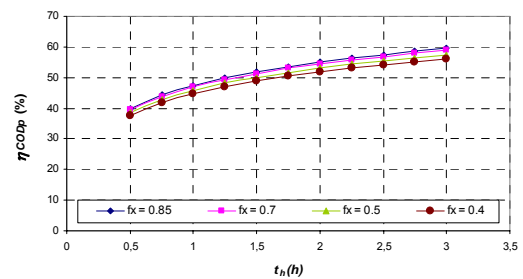
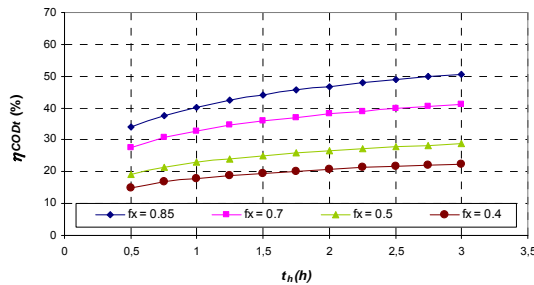


Figura D.2. Rendimiento de eliminación de  $DQO_t$  Figura D.3. Rendimiento de eliminación de  $DQO_p$

A partir de estas Figuras puede concluirse que, aunque el valor de  $f_x$  tiene una influencia importante en el rendimiento de eliminación de la  $DQO_t$ , su influencia en la eliminación de la  $DQO_p$  es mínima. Por lo tanto, teniendo en cuenta que las ecuaciones que determinan la concentración de los componentes particulados en el efluente (D.4) y (D.6) están expresadas en función del rendimiento  $\eta_{DQO_p}$ , en la descripción del transporte de masa en el decantador primario, se propone un cálculo de  $\eta_{DQO_p}$  simplificado e independiente de  $f_x$ , a partir de la siguiente ecuación logarítmica.

$$\eta_{DQO_p} = 10.958 \cdot \ln(t_h) + 47.449 \quad (D.9)$$

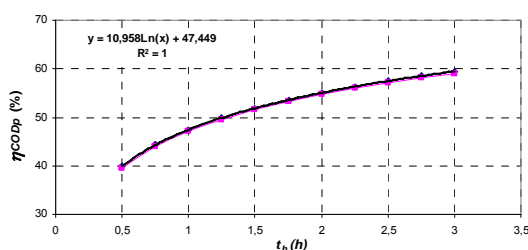


Figura D.4. Representación gráfica de la ecuación D.9

El tiempo de retención hidráulico en las ecuaciones (D.8) y (D.9) se calcula mediante las siguientes ecuaciones:

$$t_h = \frac{V}{Q_m + 0.001} \quad (\text{D.10})$$

Donde

$Q_m$ : Caudal medio influente ( $\text{m}^3/\text{d}$ )

El  $Q_m$  a su vez, se calcula mediante una ecuación que corresponde a un sistema lineal de primer orden con tiempo de respuesta  $T_m$ :

$$\frac{dQ_m}{dt} = (Q - Q_m) \cdot \frac{1}{T_m} \quad (\text{D.11})$$

Donde

$T_m$ : tiempo de respuesta (d)

Finalmente debe indicarse, que la eliminación de sólidos en el decantador basada en el rendimiento de eliminación de DQO tal y como se propone en este modelo, puede presentar algunas deficiencias, ya que en éste no se considera la eliminación de sólidos inorgánicos.

Como en el caso de estudio presentado en este capítulo, el componente  $X_{ii}$  se ha incluido en el vector de componentes, con el objetivo de reproducir la concentración de sólidos suspendidos totales, se ha considerado un rendimiento de eliminación de  $X_{ii}$  igual al valor de  $\eta_{DQOp}$  calculado para el resto de componentes particulados orgánicos.

## D.2 MODELO DE CAPAS PARA LA DECANTACIÓN SECUNDARIA

En el modelo de decantador secundario incluido en el BSM2 PWM el transporte de masa se ha descrito de acuerdo con el modelo de capas propuesto en (Tákacs *et al.*, 1991). Este modelo, basado en la teoría del flujo de sólidos, describe el transporte de masa en el decantador mediante un modelo unidimensional que consta de múltiples capas. Estas capas presentan un comportamiento de reactor de mezcla completa y por lo tanto, los sólidos influentes al decantador se distribuyen de forma instantánea y uniforme en toda la sección transversal de cada capa. Esta discretización del decantador permite obtener un modelo que, de acuerdo con los requisitos del modelo global, reproduce de forma dinámica la distribución de los sólidos en el decantador, la altura del manto de lodos y la concentración de sólidos en la recirculación.

El transporte de masa planteado según el modelo de capas se describe mediante un balance hidráulico para el caso del componente  $S_{h2o}$  y dos variables compuestas  $X_T$  y  $S_T$  que representan la suma de todos los componentes particulados y solubles en unidades de masa. El MPU del decantador secundario, por tanto, presenta un vector de componentes específico formado por estas dos variables y de acuerdo con la metodología propuesta, requerirá de conversores específicos a la entrada y salida que conviertan a los componentes incluidos en el VCP en las variables compuestas  $X_T$  y  $S_T$  y vice-versa.

El transporte de masa del componente  $S_{h2o}$  se describe mediante la siguiente ecuación:

$$Q_{in} = Q_{ef} + Q_{rec} \quad (D.12)$$

Las concentraciones de  $X_T$  y  $S_T$  a lo largo del decantador se calculan mediante un conjunto de balances de masa alrededor de cada una de las capas. Este balance se lleva a cabo teniendo en cuenta el flujo másico por gravedad y el flujo másico causado por las velocidades ascensionales y descendenciales.

El flujo másico de sedimentación  $J_S$  en la capa  $i$  está determinado por la velocidad de sedimentación de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$J_{S,i} = v_{S,i} \cdot X_{T,i} \quad (D.13)$$

Donde:

$J_{S,i}$ : flujo de sólidos debido a la decantación por gravedad en la capa  $i$

$X_{T,i}$ : Concentración del componente  $X_T$  en la capa  $i$

$v_{s,i}$ : velocidad de sedimentación de las partículas sólidas en la capa  $i$  (m/d)

La velocidad de sedimentación propuesta por este modelo se puede escribir como suma de dos términos exponenciales: el primer término representa la velocidad de las partículas grandes y floculantes, mientras que el segundo término está relacionado con la velocidad de las partículas pequeñas.

$$v_{s,i} = v_0 e^{-r_h(X_i - X_{min})} - v_0 e^{-r_p(X_i - X_{min})} \quad (D.14)$$

Donde:

$v_{s,i}$ : velocidad de sedimentación de las partículas sólidas en la capa  $i$  (m/d)

$v_0$ : máxima velocidad de decantación (m/d)

$r_h$  y  $r_p$ : parámetros característicos de decantación (m<sup>3</sup>/g)

$X_i$ : concentración de sólidos suspendidos en la capa  $i$  (g/m<sup>3</sup>)

$X_{min}$ : concentración mínima de sólidos suspendidos (g/m<sup>3</sup>)

A su vez, la expresión que calcula el valor de  $X_{min}$  viene dada por:

$$X_{min} = f_{ns} X_{in} \quad (D.15)$$

Donde

$X_{in}$ : sólidos suspendidos totales de entrada al decantador (g/m<sup>3</sup>)

$f_{ns}$ : fracción no sedimentable de  $X_{in}$

El flujo másico ascensional  $J_{up}$  en la capa  $i$  está determinado por la velocidad ascensional de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$J_{up,i} = \frac{Q_{ef} \cdot X_{T,i}}{A} \quad (D.16)$$

Donde:

$J_{up,i}$ : flujo de sólidos debido a la velocidad ascensional en la capa  $i$  (g/d)

$Q_{ef}$ : Caudal efluente (m<sup>3</sup>/d)

$X_{T,i}$ : Concentración del componente  $X_T$  en la capa  $i$  (g/m<sup>3</sup>)

$A$ : área del decantador (m<sup>2</sup>)

El flujo másico descendencial  $J_{dn}$  en la capa  $i$  está determinado por la velocidad descendencial de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$J_{dn,i} = \frac{Q_{rec} \cdot X_{T,i}}{A} \quad (D.17)$$

Donde:

$J_{dn,i}$ : flujo de sólidos debido a la velocidad ascensional en la capa  $i$  (g/d)

$Q_{rec}$ : Caudal de recirculación ( $m^3/d$ )

$X_{T,i}$ : Concentración del componente  $X_T$  en la capa  $i$  ( $g/m^3$ )

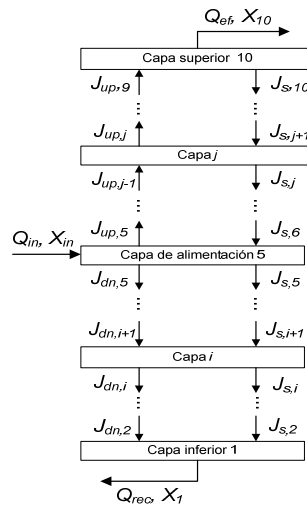


Figura D.5. Esquema del decantador de capas

La discretización del decantador en diferentes capas, sin embargo, provoca que ante situaciones de sobrecarga, una serie de discontinuidades que pueden lugar a que la concentración de sólidos de una determinada capa ser mayor que la concentración de sólidos en la capa inferior. Por lo tanto, y con el objetivo de evitar estas situaciones, el balance de masa debe incluir una serie de restricciones que aseguran que la concentración de sólidos nunca va a mostrar un gradiente de sólidos inverso al real. De esta forma, el flujo real que entra en una capa es el mínimo del flujo que sale de la capa superior y del flujo de la capa en estudio. Estas limitaciones no tienen sentido cuando la concentración sea menor que un valor umbral ( $X_l$ ).

Por lo tanto, de acuerdo con la Figura D.5, las siguientes ecuaciones describen el transporte de masa del componente  $X_T$ :

- Balance de masa en la capa de alimentación

$$\frac{dX_{T,5}}{dt} = \frac{\frac{Q_{in} X_{T,in}}{A} - J_{up,5} - J_{dn,5} + J_{s,6} - \min(J_4, J_5)}{z_5} \quad (D.18)$$

$$J_{s,al+1} = \begin{cases} \text{si } X_{T,5} \leq X_t & J_{s,6} = v_s \cdot X_{T,6} \\ \text{si } X_{T,5} > X_t & \begin{cases} \text{si } J_{s,5} < J_{s,6} & J_{s,6} = v_s \cdot X_{T,5} \\ \text{si } J_{s,5} > J_{s,6} & J_{s,6} = v_s \cdot X_{T,6} \end{cases} \end{cases} \quad (D.19)$$

- Balance de masa en las capas por debajo de la capa de alimentación

$$\frac{dX_{T,i}}{dt} = \frac{J_{dn,i+1} - J_{dn,i} + \min(J_{s,i}, J_{s,i+1}) - \min(J_{s,i-1}, J_{s,i})}{z_i} \quad (D.20)$$

- Balance de masa en la capa del fondo del decantador

$$\frac{dX_{T,1}}{dt} = \frac{J_{dn,2} - J_{dn,1} + \min(J_{s,1}, J_{s,2})}{z_1} \quad (D.21)$$

- Balance de masa en capas por encima de la alimentación

$$\frac{dX_{T,j}}{dt} = \frac{J_{up,j-1} - J_{up,j} + J_{s,j+1} - J_{s,j}}{z_j} \quad (D.22)$$

$$J_{s,j} = \begin{cases} \text{si } X_{T,j-1} \leq X_t & J_{s,j} = v_s \cdot X_{T,j} \\ \text{si } X_{T,j-1} > X_t & \begin{cases} \text{si } J_{s,j} < J_{s,j+1} & J_{s,j} = v_s \cdot X_{T,j} \\ \text{si } J_{s,j} > J_{s,j+1} & J_{s,j} = v_s \cdot X_{T,j+1} \end{cases} \end{cases} \quad (D.23)$$

- Balance de masa en la capa superior

$$\frac{dX_{T,10}}{dt} = \frac{J_{up,9} - J_{up,10} - J_{s,10}}{z_{10}} \quad (D.24)$$

$$J_{s,10} = \begin{cases} \text{si } X_{T,9} \leq X_t & J_{s,10} = v_s \cdot X_{T,10} \\ \text{si } X_{T,9} > X_t & \begin{cases} \text{si } J_{s,9} < J_{s,10} & J_{s,10} = v_s \cdot X_{T,9} \\ \text{si } J_{s,9} > J_{s,10} & J_{s,10} = v_s \cdot X_{T,10} \end{cases} \end{cases} \quad (D.25)$$

Para el caso del componente  $S_T$ , las ecuaciones que describen su transporte se presentan a continuación:



- Balance de masa en la capa de alimentación

$$\frac{dS_{T,5}}{dt} = \frac{\frac{Q_{in} \cdot S_{T,in}}{A} - (v_{up} + v_{dn}) \cdot S_{T,5}}{z_5} \quad (D.26)$$

- Balance de masa en la capa de alimentación

$$\frac{dS_{T,5}}{dt} = \frac{\frac{Q_{in} \cdot S_{T,in}}{A} - (v_{up} + v_{dn}) \cdot S_{T,5}}{z_5} \quad (D.27)$$

- Balance de masa en las capas por debajo de la capa de alimentación

$$\frac{dS_{T,i}}{dt} = \frac{v_{dn} \cdot (S_{T,i+1} - S_{T,i})}{z_i} \quad (D.28)$$

- Balance de masa en las capas por encima de la capa de alimentación

$$\frac{dS_{T,i}}{dt} = \frac{v_{up} \cdot (S_{T,i-1} - S_{T,i})}{z_i} \quad (D.29)$$

## *ANEXO E*

# ***ESTEQUIOMETRÍA, CINÉTICAS Y PARÁMETROS EMPLEADOS EN LOS MODELOS GALINDO PWM***

---

### **E.1 MODELO DE TRANSFORMACIONES DE PLANTA (PTM) Y VECTOR DE COMPONENTES (PCV) EN EL MODELO LAGUAS GALINDO PWM**

En este apartado se incluye el vector de componentes PCV y el modelo de transformaciones de planta PTM, con su estequiometría y cinéticas, correspondientes al modelo LAGUAS Galindo PWM.

Tabla E.1. Vector de Componentes de Planta (PCV) del Modelo Lagunas Galindo PWM

| Componente UE  | Fracciones málicas y densidad de carga |                |                |                |                | Component UE  | Fracciones málicas y densidad de carga |                 |                 |                 |                 |
|----------------|----------------------------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|---------------|----------------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
|                | $\alpha_{C,i}$                         | $\alpha_{H,i}$ | $\alpha_{O,i}$ | $\alpha_{N,i}$ | $\alpha_{X,i}$ |               | $\alpha_{C,j}$                         | $\alpha_{H,j}$  | $\alpha_{O,j}$  | $\alpha_{N,j}$  | $\alpha_{X,j}$  |
| 1 $S_{H2O}$    | ---                                    | 0,1111         | 0,8889         | ---            | ---            | 22 $S_{n2}$   | ---                                    | ---             | ---             | ---             | ---             |
| 2 $S_{O2}$     | ---                                    | ---            | 1              | ---            | ---            | 23 $S_{no2-}$ | ---                                    | ---             | 0,6957          | 0,3043          | ---             |
| 3 $S_{H+}$     | ---                                    | 1              | ---            | ---            | 1              | 24 $S_{no3-}$ | ---                                    | ---             | 0,7742          | 0,2258          | ---             |
| 4 $S_{OH-}$    | ---                                    | 0,0588         | 0,9412         | ---            | -0,0588        | 25 $S_I$      | $\alpha_{C,27}$                        | $\alpha_{H,27}$ | $\alpha_{O,27}$ | $\alpha_{N,27}$ | $\alpha_{X,27}$ |
| 5 $S_{HPO4=}$  | ---                                    | 0,0104         | 0,6667         | ---            | 0,3229         | 26 $S_P$      | $\alpha_{C,28}$                        | $\alpha_{H,28}$ | $\alpha_{O,28}$ | $\alpha_{N,28}$ | $\alpha_{X,28}$ |
| 6 $S_{H2PO4-}$ | ---                                    | 0,0206         | 0,6598         | ---            | 0,3196         | 27 $X_{c2}$   | $\alpha_{C,29}$                        | $\alpha_{H,29}$ | $\alpha_{O,29}$ | $\alpha_{N,29}$ | $\alpha_{X,29}$ |
| 7 $S_{NH4+}$   | ---                                    | 0,2222         | ---            | 0,7778         | ---            | 28 $X_{ch}$   | 0,4401                                 | 0,0608          | 0,489           | ---             | ---             |
| 8 $S_{NH3}$    | ---                                    | 0,1765         | ---            | 0,8235         | ---            | 29 $X_{pr}$   | 0,5498                                 | 0,0699          | 0,2199          | 0,1604          | ---             |
| 9 $S_{CO2}$    | 0,2727                                 | ---            | 0,7273         | ---            | ---            | 30 $X_{II}$   | 0,752                                  | 0,1201          | 0,118           | ---             | ---             |
| 10 $S_{HCO3-}$ | 0,1967                                 | 0,0164         | 0,7869         | ---            | -0,0164        | 31 $X_f$      | 0,5155                                 | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | ---             |
| 11 $S_{SU}$    | 0,40                                   | 0,0667         | 0,5333         | ---            | ---            | 32 $X_{nI}$   | 0,5155                                 | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | ---             |
| 12 $S_{aa}$    | 0,5498                                 | 0,0699         | 0,2199         | 0,1604         | ---            | 33 $X_{n2}$   | 0,5155                                 | 0,0592          | 0,275           | 0,1203          | ---             |
| 13 $S_{fa}$    | 0,75                                   | 0,125          | 0,125          | ---            | ---            | 34 $X_I$      | $\alpha_{C,43}$                        | $\alpha_{H,43}$ | $\alpha_{O,43}$ | $\alpha_{N,43}$ | $\alpha_{X,43}$ |
| 14 $S_{HVA}$   | 0,5882                                 | 0,098          | 0,3137         | ---            | ---            | 35 $X_P$      | $\alpha_{C,44}$                        | $\alpha_{H,44}$ | $\alpha_{O,44}$ | $\alpha_{N,44}$ | $\alpha_{X,44}$ |
| 15 $S_{H+}$    | 0,5941                                 | 0,0891         | 0,3168         | ---            | -0,0099        | 36 $X_{II}$   | ---                                    | ---             | ---             | ---             | 1               |
| 16 $S_{HPO}$   | 0,5455                                 | 0,0909         | 0,3636         | ---            | ---            | 37 $G_{CO2}$  | 0,2727                                 | ---             | 0,7273          | ---             | ---             |
| 17 $S_{HCO}$   | 0,5517                                 | 0,0805         | 0,3678         | ---            | -0,0115        | 38 $G_{NH3}$  | ---                                    | 0,1765          | ---             | 0,8235          | ---             |
| 18 $S_{HPO}$   | 0,4865                                 | 0,0811         | 0,4324         | ---            | ---            | 39 $G_{n2}$   | ---                                    | ---             | ---             | 1               | ---             |
| 19 $S_{HPO}$   | 0,4932                                 | 0,0685         | 0,4384         | ---            | -0,0137        | 40 $G_{O2}$   | ---                                    | ---             | 1               | ---             | ---             |
| 20 $S_{HCO}$   | 0,4                                    | 0,0667         | 0,5333         | ---            | ---            | 41 $G_{H2O}$  | ---                                    | 0,1111          | 0,8889          | ---             | ---             |
| 21 $S_{ac-}$   | 0,4068                                 | 0,0508         | 0,5424         | ---            | -0,0169        | ---           | ---                                    | ---             | ---             | ---             | ---             |





El cálculo de los componentes fuente-sumidero se lleva a cabo mediante las expresiones incluidas en la Tabla E.4.

Tabla E.4. Coeficientes estequiométricos de los componentes fuente-sumidero

| $i$ | $x_i$     | Coeficiente estequiométrico $v_{ij}$                                                      | $i$ | $x_i$      | Coeficiente estequiométrico $v_{ij}$                                                     |
|-----|-----------|-------------------------------------------------------------------------------------------|-----|------------|------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1   | $S_{h2o}$ | $v_{1j} = -\sum_{i=2}^{41} \left( \frac{\beta_{H,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{H,1}} \right)$   | 5   | $S_{hpo4}$ | $v_{5j} = -\sum_{i=6}^{41} \left( \frac{\beta_{P,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{P,5}} \right)$  |
| 2   | $S_{o2}$  | $v_{2j} = -\sum_{i=1,3}^{41} \left( \frac{\beta_{O,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{O,2}} \right)$ | 7   | $S_{nh4}$  | $v_{7j} = -\sum_{i=8}^{41} \left( \frac{\beta_{N,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{N,7}} \right)$  |
| 3   | $S_{h+}$  | $v_{3j} = -\sum_{i=4}^{41} \left( \frac{\beta_{Ch,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{Ch,3}} \right)$ | 9   | $S_{co2}$  | $v_{9j} = -\sum_{i=10}^{41} \left( \frac{\beta_{C,i} \cdot v_{ij}}{\beta_{C,9}} \right)$ |

A continuación se presentan las ecuaciones cinéticas para cada una de las transformaciones incluidas en el PTM del modelo LAGuas Galindo PWM:

$$\rho_1 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{su}}{K_{su\_h} + S_{su}} \cdot \frac{S_{su}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_2 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{aa}}{K_{aa\_h} + S_{aa}} \cdot \frac{S_{aa}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_3 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{fa}}{K_{fa\_h} + S_{fa}} \cdot \frac{S_{fa}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_4 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{VA}}{K_{VA\_h} + S_{VA}} \cdot \frac{S_{VA}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_5 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{BU}}{K_{BU\_h} + S_{BU}} \cdot \frac{S_{BU}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_6 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{PRO}}{K_{PRO\_h} + S_{PRO}} \cdot \frac{S_{PRO}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_7 = k_{m,h} \cdot \frac{S_{AC}}{K_{AC\_h} + S_{AC}} \cdot \frac{S_{AC}}{S_S} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_8 = k_{m,N1} \cdot \frac{S_{IN}}{K_{NH,N1} + S_{IN}} \cdot \frac{S_{o2}}{K_{O,N1} + S_{o2}} \cdot [A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{pH,N1}] \cdot X_{n1}$$

$$\rho_9 = k_{m,N2} \cdot \frac{S_{no2-}}{K_{NO,N2} + S_{no2-}} \cdot \frac{S_{o2}}{K_{O,N2} + S_{o2}} \cdot [A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{pH,N2}] \cdot X_{n2}$$

$$\rho_{10} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{su}}{K_{su_h} + S_{su}} \cdot \frac{S_{su}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{11} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{aa}}{K_{aa_h} + S_{aa}} \cdot \frac{S_{aa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{12} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{fa}}{K_{fa_h} + S_{fa}} \cdot \frac{S_{fa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IP}] \cdot X_h$$

$$\rho_{13} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{VA}}{K_{VA_h} + S_{VA}} \cdot \frac{S_{VA}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{14} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{BU}}{K_{BU_h} + S_{BU}} \cdot \frac{S_{BU}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{15} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \frac{S_{PRO}}{K_{PRO_h} + S_{PRO}} \cdot \frac{S_{PRO}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{16} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{S_{AC}}{K_A + S_{AC}} \cdot \frac{S_{AC}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no3} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{17} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{su}}{K_F + S_{su}} \cdot \frac{S_{su}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{18} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{aa}}{K_F + S_{aa}} \cdot \frac{S_{aa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{19} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{fa}}{K_F + S_{fa}} \cdot \frac{S_{fa}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{20} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{VA}}{K_A + S_{VA}} \cdot \frac{S_{VA}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{21} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{BU}}{K_A + S_{BU}} \cdot \frac{S_{BU}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{22} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{PRO}}{K_A + S_{PRO}} \cdot \frac{S_{PRO}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{23} = k_{m,h} \cdot \eta_{NO2} \frac{S_{AC}}{K_A + S_{AC}} \cdot \frac{S_{AC}}{S_S} \cdot [I_{o2} \cdot A_{no2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_h$$

$$\rho_{24} = k_{d\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c2}$$

$$\rho_{25} = k_{d\_Anox} \cdot [A_{nox} \cdot I_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c2}$$

$$\rho_{26} = k_{dec\_aer,xh} \cdot A_{o2} \cdot X_h$$

$$\rho_{27} = k_{dec\_aer,xn1} \cdot A_{o2} \cdot X_{n1}$$

$$\begin{aligned}
\rho_{28} &= k_{dec\_aer,xn2} \cdot A_{o2} \cdot X_{n2} \\
\rho_{29} &= k_{dec\_anox,xh} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_h \\
\rho_{30} &= k_{dec\_anox,xn1} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{n1} \\
\rho_{31} &= k_{dec\_anox,xn2} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{n2} \\
\rho_{32} &= k_{h\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{ch} \\
\rho_{33} &= k_{h\_Anox} \cdot [I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{ch} \\
\rho_{34} &= k_{h\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pr} \\
\rho_{35} &= k_{h\_Anox} \cdot [I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pr} \\
\rho_{36} &= k_{h\_Aer} \cdot [A_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{li} \\
\rho_{37} &= k_{h\_Anox} \cdot [I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{li} \\
\rho_{38} &= k_{AB,H2O} \cdot (K_{a,H2O} \cdot S_{oh-} \cdot S_{H+}) \\
\rho_{39} &= k_{AB,IC} \cdot (K_{a,IC} \cdot S_{co2} - S_{hco3-} \cdot S_{h+}) \\
\rho_{40} &= k_{AB,IN} \cdot (K_{a,IN} \cdot S_{nh4+} - S_{nh3} \cdot S_{h+}) \\
\rho_{41} &= k_{AB,VA} \cdot (K_{a,VA} \cdot S_{hva} - S_{va-} \cdot S_{h+}) \\
\rho_{42} &= k_{AB,BU} \cdot (K_{a,BU} \cdot S_{hbu} - S_{bu-} \cdot S_{h+}) \\
\rho_{43} &= k_{AB,PRO} \cdot (K_{a,PRO} \cdot S_{hpro} - S_{pro-} \cdot S_{h+}) \\
\rho_{44} &= k_{AB,AC} \cdot (K_{a,AC} \cdot S_{hac} - S_{ac-} \cdot S_{h+}) \\
\rho_{45} &= k_{AB,IP} \cdot (K_{a,IP} \cdot S_{h2po4-} - S_{hpo4=} \cdot S_{h+}) \\
\rho_{46} &= K_L a_{co2} \cdot (K_{H,co2} \cdot P_{gas,co2} - S_{co2}) \\
\rho_{47} &= K_L a_{o2} \cdot (K_{H,o2} \cdot P_{gas,o2} - S_{o2}) \\
\rho_{48} &= K_M a_{H2O} \cdot (P_{H2O}^{SAT} - P_{h2o}) \\
\rho_{49} &= K_L a_{nh3} \cdot (K_{H,nh3} \cdot P_{gas,nh3} - S_{nh3})
\end{aligned}$$



## E.2 CARACTERIZACIÓN DEL INFLUENTE EN EL MODELO LAGUAS GALINDO PWM

En la Tabla E.5 se muestran los resultados obtenidos en la caracterización del agua residual influente en base a las medidas experimentales presentadas en la Tabla 4.12 y los parámetros  $f_{SS}$ ,  $f_{SI}$  y  $f_{XH}$  y  $f_{XI}$  detallados en la Tabla 5.6.

Tabla E.5. Parámetros de estimación obtenidos en la caracterización del agua residual influente a la EDAR de Galindo

| $i$          | $\hat{\theta}_{i0}$ | $\hat{\theta}_i$    | $i$        | $\hat{\theta}_{i0}$ | $\hat{\theta}_i$    | $i$             | $\hat{\theta}_{i0}$ | $\hat{\theta}_i$ |
|--------------|---------------------|---------------------|------------|---------------------|---------------------|-----------------|---------------------|------------------|
| $S_{o2}$     | 0                   | 0                   | $S_{hbu}$  | 0,033               | $5,2 \cdot 10^{-3}$ | $\alpha_{C,Si}$ | 0,531               | 0,531            |
| $S_{h+}$     | $1,0 \cdot 10^{-4}$ | $1,8 \cdot 10^{-5}$ | $S_{bu-}$  | 4,96                | 4,42                | $\alpha_{H,Si}$ | 0,075               | 0,075            |
| $S_{oh-}$    | $5,6 \cdot 10^{-5}$ | $3,1 \cdot 10^{-4}$ | $S_{hpro}$ | 0,037               | $5,7 \cdot 10^{-3}$ | $\alpha_{O,Si}$ | 0,351               | 0,351            |
| $S_{hpo4=}$  | 1,37                | 3,99                | $S_{pro-}$ | 4,96                | 4,43                | $\alpha_{N,Si}$ | 0,027               | 0,027            |
| $S_{h2po4-}$ | 2,25                | 1,17                | $S_{nac}$  | 0,028               | $4,5 \cdot 10^{-3}$ | $\alpha_{P,Si}$ | 0,016               | 0,016            |
| $S_{nh4+}$   | 15,9                | 24,3                | $S_{ac-}$  | 4,96                | 4,43                | $\alpha_{C,Xi}$ | 0,64                | 0,64             |
| $S_{nh3}$    | 0,05                | 0,44                | $S_{no3-}$ | 0                   | 1,15                | $\alpha_{H,Xi}$ | 0,075               | 0,075            |
| $S_{co2}$    | 14,6                | 0,54                | $S_I$      | 30                  | 24,1                | $\alpha_{O,Xi}$ | 0,238               | 0,238            |
| $S_{hco3-}$  | 60                  | 12,5                | $X_{ch}$   | 54,6                | 47,2                | $\alpha_{N,Xi}$ | 0,029               | 0,029            |
| $S_{su}$     | 11,6                | 8,75                | $X_{pr}$   | 30                  | 30,1                | $\alpha_{P,Xi}$ | 0,016               | 0,016            |
| $S_{aa}$     | 6,75                | 5,36                | $X_{li}$   | 20,2                | 31,5                | $K_{SX}$        | 0                   | 0,29             |
| $S_{fa}$     | 11,6                | 8,75                | $X_h$      | 50,1                | 42,5                |                 | 0                   |                  |
| $S_{hva}$    | 0,036               | $5,7 \cdot 10^{-3}$ | $X_I$      | 25,0                | 54,3                |                 |                     |                  |
| $S_{va-}$    | 4,96                | 4,42                | $X_{II}$   | 40,5                | 16                  |                 |                     |                  |

## E.3 ESTEQUIOMETRÍA Y CINÉTICAS DE LAS TRANSFORMACIONES INCORPORADAS EN EL MODELO LAGUAS+LFANGOS1 GALINDO PWM

En la Tabla E.6 se presenta el vector de componentes (PCV) del modelo LAGuas+LFangos1 Galindo PWM en el que se incorporan las transformaciones correspondientes a la digestión anaerobia del fango.

Tabla E.6. Vector de Componentes de Planta (PCV) del modelo LAGuas+LFangos1 Galindo PWM

| Componente | UE           | Fracciones másticas y densidad de carga |                 |                 |                 |                 |                  | Componente      | UE              | Fracciones másticas y densidad de carga |                 |                 |                  |                 |                 |                  |
|------------|--------------|-----------------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|-----------------|-----------------|-----------------------------------------|-----------------|-----------------|------------------|-----------------|-----------------|------------------|
|            |              | $\alpha_{C,j}$                          | $\alpha_{H,j}$  | $\alpha_{O,j}$  | $\alpha_{N,j}$  | $\alpha_{P,j}$  | $\alpha_{Ch,j}$  |                 |                 | $\alpha_{C,j}$                          | $\alpha_{H,j}$  | $\alpha_{O,j}$  | $\alpha_{N,j}$   | $\alpha_{P,j}$  | $\alpha_{Ch,j}$ |                  |
| 1          | $S_{o2}$     | ---                                     | ---             | 1               | ---             | ---             | ---              | 29              | $X_{e2}$        | $gDOO/m^3$                              | $\alpha_{C,29}$ | $\alpha_{H,29}$ | $\alpha_{O,29}$  | $\alpha_{N,29}$ | $\alpha_{P,29}$ | $\alpha_{Ch,29}$ |
| 2          | $S_{h2o}$    | ---                                     | 0,1111          | 0,8889          | ---             | ---             | ---              | 30              | $X_{eh}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,4401          | 0,0608          | 0,489            | ---             | 0,01            | ---              |
| 3          | $S_{h+}$     | ---                                     | 1               | ---             | ---             | 1               | ---              | 31              | $X_{pr}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,5498          | 0,0699          | 0,2199           | 0,1604          | ---             | ---              |
| 4          | $S_{oh-}$    | ---                                     | 0,0588          | 0,9412          | ---             | -0,0588         | ---              | 32              | $X_{li}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,752           | 0,1201          | 0,118            | ---             | 0,01            | ---              |
| 5          | $S_{lppr4}$  | ---                                     | 0,0104          | 0,6667          | ---             | 0,3229          | -0,0208          | 33              | $X_h$           | $gDOO/m^3$                              | 0,5155          | 0,0592          | 0,275            | 0,1203          | 0,03            | ---              |
| 6          | $S_{l2ppr4}$ | ---                                     | 0,0206          | 0,6598          | ---             | 0,3196          | -0,0103          | 34              | $X_{r1}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,5155          | 0,0592          | 0,275            | 0,1203          | 0,03            | ---              |
| 7          | $S_{mh4}$    | ---                                     | 0,2222          | ---             | 0,7778          | ---             | 0,0556           | 35              | $X_{r2}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,5155          | 0,0592          | 0,275            | 0,1203          | 0,03            | ---              |
| 8          | $S_{mh3}$    | ---                                     | 0,1765          | ---             | 0,8235          | ---             | ---              | 36              | $X_{ur}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,5155          | 0,0592          | 0,275            | 0,1203          | 0,03            | ---              |
| 9          | $S_{o2}$     | 0,2727                                  | ---             | 0,7273          | ---             | ---             | ---              | 37              | $X_{aa}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,5155          | 0,0592          | 0,275            | 0,1203          | 0,03            | ---              |
| 10         | $S_{hca2-}$  | 0,1967                                  | 0,0164          | 0,7869          | ---             | -0,0164         | ---              | 38              | $X_{fa}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,5155          | 0,0592          | 0,275            | 0,1203          | 0,03            | ---              |
| 11         | $S_{sw}$     | 0,40                                    | 0,0667          | 0,5333          | ---             | ---             | ---              | 39              | $X_{e4}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,5155          | 0,0592          | 0,275            | 0,1203          | 0,03            | ---              |
| 12         | $S_{oa}$     | 0,5498                                  | 0,0699          | 0,2199          | 0,1604          | ---             | ---              | 40              | $X_{pr}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,5155          | 0,0592          | 0,275            | 0,1203          | 0,03            | ---              |
| 13         | $S_{fa}$     | 0,75                                    | 0,125           | 0,125           | ---             | ---             | ---              | 41              | $X_{ac}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,5155          | 0,0592          | 0,275            | 0,1203          | 0,03            | ---              |
| 14         | $S_{hva}$    | 0,5882                                  | 0,098           | 0,3137          | ---             | ---             | ---              | 42              | $X_{h2}$        | $gDOO/m^3$                              | 0,5155          | 0,0592          | 0,275            | 0,1203          | 0,03            | ---              |
| 15         | $S_{ur-}$    | 0,5941                                  | 0,0891          | 0,3168          | ---             | -0,0099         | ---              | 43              | $X_l$           | $gDOO/m^3$                              | $\alpha_{C,43}$ | $\alpha_{H,43}$ | $\alpha_{O,43}$  | $\alpha_{N,43}$ | $\alpha_{P,43}$ | $\alpha_{Ch,43}$ |
| 16         | $S_{lbtu}$   | 0,5455                                  | 0,0909          | 0,3636          | ---             | ---             | ---              | 44              | $X_p$           | $gDOO/m^3$                              | $\alpha_{C,44}$ | $\alpha_{H,44}$ | $\alpha_{O,44}$  | $\alpha_{N,44}$ | $\alpha_{P,44}$ | $\alpha_{Ch,44}$ |
| 17         | $S_{bu-}$    | 0,5517                                  | 0,0805          | 0,3678          | ---             | -0,0115         | ---              | 45              | $X_{l1}$        | $g/m^3$                                 | ---             | ---             | ---              | ---             | ---             | ---              |
| 18         | $S_{lppo}$   | 0,4865                                  | 0,0811          | 0,4324          | ---             | ---             | ---              | 46              | $G_{o2}$        | $gC/m^3$                                | 0,2727          | ---             | 0,7273           | ---             | ---             | ---              |
| 19         | $S_{ppo-}$   | 0,4932                                  | 0,0685          | 0,4384          | ---             | -0,0137         | ---              | 47              | $G_{h2}$        | $gDOO/m^3$                              | ---             | 1               | ---              | ---             | ---             | ---              |
| 20         | $S_{huc}$    | 0,4                                     | 0,0667          | 0,5333          | ---             | ---             | ---              | 48              | $G_{ch4}$       | $gDOO/m^3$                              | 0,75            | 0,25            | ---              | ---             | ---             | ---              |
| 21         | $S_{ac-}$    | 0,4068                                  | 0,0508          | 0,5424          | ---             | -0,0169         | ---              | 49              | $G_{mh3}$       | $gN/m^3$                                | ---             | 0,1765          | ---              | 0,8235          | ---             | ---              |
| 22         | $S_{n2}$     | ---                                     | ---             | 1               | ---             | ---             | ---              | 50              | $G_{n2}$        | $gN/m^3$                                | ---             | ---             | ---              | 1               | ---             | ---              |
| 23         | $S_{no2}$    | ---                                     | ---             | 0,6957          | 0,3043          | ---             | -0,0217          | 51              | $G_{o2}$        | $gO_2/m^3$                              | ---             | ---             | 1                | ---             | ---             | ---              |
| 24         | $S_{no3}$    | ---                                     | ---             | 0,7742          | 0,2258          | ---             | -0,0161          | 52              | $G_{h2o}$       | $gH_2O/m^3$                             | ---             | 0,1111          | 0,8889           | ---             | ---             | ---              |
| 25         | $S_{h2}$     | ---                                     | 1               | ---             | ---             | ---             | ---              | ---             | ---             | ---                                     | ---             | ---             | ---              | ---             | ---             | ---              |
| 26         | $S_{ch4}$    | 0,75                                    | 0,25            | ---             | ---             | ---             | ---              | ---             | ---             | ---                                     | ---             | ---             | ---              | ---             | ---             | ---              |
| 27         | $S_l$        | $\alpha_{C,27}$                         | $\alpha_{H,27}$ | $\alpha_{O,27}$ | $\alpha_{N,27}$ | $\alpha_{P,27}$ | $\alpha_{Ch,27}$ | $\alpha_{C,27}$ | $\alpha_{H,27}$ | $\alpha_{O,27}$                         | $\alpha_{N,27}$ | $\alpha_{P,27}$ | $\alpha_{Ch,27}$ | $\alpha_{C,27}$ | $\alpha_{H,27}$ | $\alpha_{O,27}$  |
| 28         | $S_p$        | $\alpha_{C,28}$                         | $\alpha_{H,28}$ | $\alpha_{O,28}$ | $\alpha_{N,28}$ | $\alpha_{P,28}$ | $\alpha_{Ch,28}$ | $\alpha_{C,28}$ | $\alpha_{H,28}$ | $\alpha_{O,28}$                         | $\alpha_{N,28}$ | $\alpha_{P,28}$ | $\alpha_{Ch,28}$ | $\alpha_{C,28}$ | $\alpha_{H,28}$ | $\alpha_{O,28}$  |



A continuación se enumeran las ecuaciones cinéticas de todas las transformaciones incorporadas en el modelo LAGuas+LFangos1 Galindo PWM

$$\rho_{50} = k_{m,su} \cdot \frac{S_{su}}{K_{S,su} + S_{su}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{pH,aa}] \cdot X_{su}$$

$$\rho_{51} = k_{m,aa} \cdot \frac{S_{aa}}{K_{S,aa} + S_{aa}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{pH,aa}] \cdot X_{aa}$$

$$\rho_{52} = k_{m,fa} \cdot \frac{S_{fa}}{K_{S,fa} + S_{fa}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,fa} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{fa}$$

$$\rho_{53} = k_{m,c4} \cdot \frac{S_{VA}}{K_{S,c4} + S_{VA}} \cdot \frac{I}{I + S_{BU}/S_{VA}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,c4} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{54} = k_{m,c4} \cdot \frac{S_{BU}}{K_{S,c4} + S_{BU}} \cdot \frac{I}{I + S_{VA}/S_{BU}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,c4} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{55} = k_{m,pro} \cdot \frac{S_{PRO}}{K_{S,pro} + S_{PRO}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{h2,pro} \cdot I_{ph,aa}] \cdot X_{pro}$$

$$\rho_{56} = k_{m,ac} \cdot \frac{S_{AC}}{K_{S,ac} + S_{AC}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{nh3} \cdot I_{ph,ac}] \cdot X_{ac}$$

$$\rho_{57} = k_{m,h2} \cdot \frac{S_{h2}}{K_{S,h2} + S_{h2}} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC} \cdot I_{ph,h2}] \cdot X_{h2}$$

$$\rho_{58} = k_{d\_Anaer} \cdot [I_{nox} \cdot I_{o2} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{c2}$$

$$\rho_{59} = k_{h\_Anaer} \cdot [I_{nox} \cdot A_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{ch}$$

$$\rho_{60} = k_{h\_Anaer} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{pr}$$

$$\rho_{61} = k_{h\_Anaer} \cdot [I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP} \cdot A_{IC}] \cdot X_{li}$$

$$\rho_{62} = k_{dec\_an,xh} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_h$$

$$\rho_{63} = k_{dec\_an,xn1} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{n1}$$

$$\rho_{64} = k_{dec\_an,xn2} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{n2}$$

$$\rho_{65} = k_{dec\_aer,xsu} \cdot A_{o2} \cdot X_{su}$$

$$\rho_{66} = k_{dec\_anox,xsu} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{su}$$

$$\rho_{67} = k_{dec\_an,xsu} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{su}$$

$$\rho_{68} = k_{dec\_aer,xaa} \cdot A_{o2} \cdot X_{aa}$$

$$\rho_{69} = k_{dec\_anox,xaa} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{aa}$$

$$\rho_{70} = k_{dec\_an,xaa} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{aa}$$

$$\rho_{71} = k_{dec\_aer,xfa} \cdot A_{o2} \cdot X_{fa}$$

$$\rho_{72} = k_{dec\_anox,xfa} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{fa}$$

$$\rho_{73} = k_{dec\_an,xfa} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{fa}$$

$$\rho_{74} = k_{dec\_aer,xc4} \cdot A_{o2} \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{75} = k_{dec\_anox,xc4} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{76} = k_{dec\_an,xc4} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{c4}$$

$$\rho_{77} = k_{dec\_aer,xpro} \cdot A_{o2} \cdot X_{pro}$$

$$\rho_{78} = k_{dec\_anox,xpro} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{pro}$$

$$\rho_{79} = k_{dec\_an,xpro} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{pro}$$

$$\rho_{80} = k_{dec\_aer,xac} \cdot A_{o2} \cdot X_{ac}$$

$$\rho_{81} = k_{dec\_anox,xac} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{ac}$$

$$\rho_{82} = k_{dec\_an,xac} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{ac}$$

$$\rho_{83} = k_{dec\_aer,xh2} \cdot A_{o2} \cdot X_{h2}$$

$$\rho_{84} = k_{dec\_anox,xh2} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{h2}$$

$$\rho_{85} = k_{dec\_an,xh2} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{h2}$$

$$\rho_{86} = K_L a_{ch4} \cdot (K_{H,ch4} \cdot P_{gas,ch4} - S_{ch4})$$

$$\rho_{87} = K_L a_{h2} \cdot (K_{H,h2} \cdot P_{gas,h2} - S_{h2})$$

## E.4 ESTEQUIOMETRÍA Y CINÉTICAS DE LAS TRANSFORMACIONES INCORPORADAS EN EL MODELO LAGUAS+LFANGOS2 GALINDO PWM

Con respecto al vector de componentes (PCV) constituido en el modelo LAGuas+LFangos1 Galindo PWM, en el nuevo modelo LAGuas+LFangos2 Galindo PWM únicamente debe incorporarse el componente  $X_{an}$  que representa la población de bacterias Anammox.

El modelo de transformaciones de planta (PTM) incluye, con respecto al construido para el modelo LAGuas+LFangos1 Galindo PWM, cuatro nuevas transformaciones correspondientes al crecimiento y desaparición de las bacterias Anammox en condiciones aerobias, anóxicas y anaerobias. La estequiometría y la cinética de estas cuatro transformaciones se muestran a continuación.

Tabla E.8. Estequiometría de las transformaciones incorporadas en el modelo LAGuas+LFangos2 Galindo PWM

| Componentes →<br>Transformaciones ↓ | 1          | 2          | 3          | 5           | 7          | 9          | 23                   | 24            | 22       | 53       | 29       |
|-------------------------------------|------------|------------|------------|-------------|------------|------------|----------------------|---------------|----------|----------|----------|
|                                     | $S_{o2}$   | $S_{h2o}$  | $S_{h+}$   | $S_{hpo4-}$ | $S_{nh4+}$ | $S_{co2}$  | $S_{no2-}$           | $S_{no3-}$    | $S_{n2}$ | $X_{an}$ | $X_{c2}$ |
| 88 Crecimiento de $X_{an}$          | $V_{1,88}$ | $V_{2,88}$ | $V_{3,88}$ | $V_{5,88}$  | $V_{7,88}$ | $V_{9,88}$ | $-(1 + Y_{an}/1.14)$ | $Y_{an}/1.14$ | 2        | $Y_{an}$ |          |
| 89 Desap. de $X_{an}$ aerobia       | $V_{1,89}$ | $V_{2,89}$ | $V_{3,89}$ | $V_{5,89}$  | $V_{7,89}$ | $V_{9,89}$ |                      |               |          | -1       | 1        |
| 90 Desap. de $X_{an}$ anóxica       | $V_{1,90}$ | $V_{2,90}$ | $V_{3,90}$ | $V_{5,90}$  | $V_{7,90}$ | $V_{9,90}$ |                      |               |          | -1       | 1        |
| 91 Desap. de $X_{an}$ anaerobia     | $V_{1,91}$ | $V_{2,91}$ | $V_{3,91}$ | $V_{5,91}$  | $V_{7,91}$ | $V_{9,91}$ |                      |               |          | -1       | 1        |

$$\rho_{88} = k_{m,An} \cdot \frac{S_{no2-}}{K_{NO2,AN} + S_{no2-}} \cdot \frac{S_{IN}}{K_{NH,AN} + S_{IN}} \cdot [I_{o2} \cdot A_{IC} \cdot A_{IN} \cdot A_{IP}] \cdot X_{an}$$

$$\rho_{89} = k_{dec\_aer,xan} \cdot A_{o2} \cdot X_{an}$$

$$\rho_{90} = k_{dec\_anox,xan} \cdot I_{o2} \cdot A_{nox} \cdot X_{an}$$

$$\rho_{91} = k_{dec\_an,xan} \cdot I_{o2} \cdot I_{nox} \cdot X_{an}$$

## E.5 PÁRAMETROS ESTEQUIOMÉTRICOS Y CINÉTICOS EMPLEADOS EN EL PTM DE LOS MODELOS GALINDO PWM

- *Parámetros estequiométricos*

Tabla E.9. Fracciones másicas de los componentes que no presentan fórmula estequiométrica definida

| Componente | UE                  | Fracciones másicas y densidad de carga |                      |                      |                       |                      |                 |                |
|------------|---------------------|----------------------------------------|----------------------|----------------------|-----------------------|----------------------|-----------------|----------------|
|            |                     | $\alpha_{C,i}$                         | $\alpha_{H,i}$       | $\alpha_{O,i}$       | $\alpha_{N,i}$        | $\alpha_{P,i}$       | $\alpha_{Ch,i}$ | $\alpha_{X,i}$ |
| $S_i$      | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,531 <sup>[a]</sup>                   | 0,075 <sup>[a]</sup> | 0,351 <sup>[a]</sup> | 0,027 <sup>[a]</sup>  | 0,016 <sup>[a]</sup> | ---             | ---            |
| $X_{c2}$   | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,515 <sup>[c]</sup>                   | 0,059 <sup>[c]</sup> | 0,275 <sup>[c]</sup> | 0,120 <sup>[c]</sup>  | 0,030 <sup>[c]</sup> | ---             | ---            |
| $X_i$      | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,640 <sup>[a]</sup>                   | 0,075 <sup>[a]</sup> | 0,238 <sup>[a]</sup> | 0,029 <sup>[b]</sup>  | 0,016 <sup>[a]</sup> | ---             | ---            |
| $X_p$      | gDQO/m <sup>3</sup> | 0,5575                                 | 0,06 <sup>[d]</sup>  | 0,28 <sup>[d]</sup>  | 0,0925 <sup>[c]</sup> | 0,010 <sup>[d]</sup> | ---             | ---            |

[a]: Estimados a partir del algoritmo de caracterización  
 [b]: contenido de N de  $X_p$  en BSM1 (Copp et al, 2002)  
 [c]: coincide con las fracciones másicas de los componentes asociados a la biomasa  
 [d]: RWQM1 (Reichert *et al.*, 2001)

Tabla E.10. Parámetros estequiométricos

| Símbolo      | Unidad | Valor | Referencia            | Símbolo      | Unidad                               | Valor | Referencia            |
|--------------|--------|-------|-----------------------|--------------|--------------------------------------|-------|-----------------------|
| $f_{sp,xc2}$ | -      | 0,00  | Henze et al., 2000    | $Y_h$        | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,67  | Henze et al., 2000    |
| $f_{xp,xc2}$ | -      | 0,08  | Henze et al., 2000    | $Y_{h,no3}$  | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,67  | Henze et al., 2000    |
| $f_{ch,xc2}$ | -      | 0,09  | Estimado              | $Y_{h,no2}$  | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,67  | Henze et al., 2000    |
| $f_{pr,xc2}$ | -      | 0,54  | Estimado              | $Y_{nh4,N1}$ | gCOD <sub>x</sub> /gN                | 0,21  | Pambrun et al., 2006  |
| $f_{li,xc2}$ | -      | 0,29  | Estimado              | $Y_{no2,N2}$ | gCOD <sub>x</sub> /gN                | 0,03  | Pambrun et al., 2006  |
| $f_{fa,li}$  | -      | 0,95  | Batstone et al., 2002 | $Y_{su}$     | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,10  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{h2,su}$  | -      | 0,19  | Batstone et al., 2002 | $Y_{aa}$     | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,08  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{bu,su}$  | -      | 0,13  | Batstone et al., 2002 | $Y_{fa}$     | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,06  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{pro,su}$ | -      | 0,27  | Batstone et al., 2002 | $Y_{c4}$     | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,06  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{ac,su}$  | -      | 0,41  | Batstone et al., 2002 | $Y_{pro}$    | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,04  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{h2,aa}$  | -      | 0,06  | Batstone et al., 2002 | $Y_{ac}$     | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,05  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{va,aa}$  | -      | 0,23  | Batstone et al., 2002 | $Y_{h2}$     | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,06  | Batstone et al., 2002 |
| $f_{bu,aa}$  | -      | 0,26  | Batstone et al., 2002 | $Y_{an}$     | gCOD <sub>x</sub> /gCOD <sub>s</sub> | 0,16  | Strous et al., 1998   |
| $f_{pro,aa}$ | -      | 0,05  | Batstone et al., 2002 |              |                                      |       |                       |
| $f_{ac,aa}$  | -      | 0,40  | Batstone et al., 2002 |              |                                      |       |                       |

E.5 Parámetros estequiométricos y cinéticos empleados en el PTM de los modelos Galindo PWM329

• *Parámetros cinéticos*

Al igual que en el caso BSM2 PWM, los parámetros correspondientes a  $k_{m,h}$ ,  $k_{m,N1}$  y  $k_{m,N2}$  se han calculado a partir de los parámetros  $\mu_H$  y  $\mu_A$  y  $Y_H$ ,  $Y_{N1}$  e  $Y_{N2}$ .

Tabla E.11. Parámetros cinéticos de consumo de sustrato

| Símbolo      | Unidad                                      | Valor (T=20 °C) | Referencia              |
|--------------|---------------------------------------------|-----------------|-------------------------|
| $k_{m,h}$    | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>X</sub> ·d) | 8,96            | Henze et al., 2000      |
| $k_{m,N1}$   | kgN/(kgCOD <sub>X</sub> ·d)                 | 3,71            | de la Sota et al., 1994 |
| $k_{m,N2}$   | kgN/(kgCOD <sub>X</sub> ·d)                 | 26,0            | de la Sota et al., 1994 |
| $\eta_{NO3}$ | ----                                        | 0,35            | Estimado                |
| $\eta_{NO2}$ | ----                                        | 0,45            | Estimado                |
| $k_{m,An}$   |                                             | 0,119           | Strous et al., 1998     |
| Símbolo      | Unidad                                      | Valor           | Referencia              |
| $k_{m,su}$   | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>X</sub> ·d) | 30              | Batstone et al., 2002   |
| $k_{m,aa}$   | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>X</sub> ·d) | 50              | Batstone et al., 2002   |
| $k_{m,fa}$   | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>X</sub> ·d) | 6               | Batstone et al., 2002   |
| $k_{m,c4}$   | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>X</sub> ·d) | 20              | Batstone et al., 2002   |
| $k_{m,pro}$  | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>X</sub> ·d) | 9               | Batstone et al., 2002   |
| $k_{m,ac}$   | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>X</sub> ·d) | 9               | Batstone et al., 2002   |
| $k_{m,ac}$   | kgCOD <sub>s</sub> /(kgCOD <sub>X</sub> ·d) | 35              | Batstone et al., 2002   |

Tabla E.12. Parámetros cinéticos de desaparición de biomasa

| Símbolo             | Valor (T=20 °C)      |                       |        | Referencia               |
|---------------------|----------------------|-----------------------|--------|--------------------------|
| $k_{dec\_aer,xh}$   | $k_{dec\_anox,xh}$   | $k_{dec\_anaer,xh}$   | 0,620  | Henze et al., 2002       |
| $k_{dec\_aer,xn1}$  | $k_{dec\_anox,xn1}$  | $k_{dec\_anaer,xn1}$  | 0,130  | Henze et al., 2002       |
| $k_{dec\_aer,xn2}$  | $k_{dec\_anox,xn2}$  | $k_{dec\_anaer,xn2}$  | 0,13   | Henze et al., 2002       |
| $k_{dec\_aer,xan}$  | $k_{dec\_anox,xan}$  | $k_{dec\_anaer,xan}$  | 0,0025 | Dapena-Mora et al., 2004 |
| Símbolo             | Valor                |                       |        |                          |
| $k_{dec\_aer,xsu}$  | $k_{dec\_anox,xsu}$  | $k_{dec\_anaer,xsu}$  | 0,02   | Batstone et al., 2002    |
| $k_{dec\_aer,xaa}$  | $k_{dec\_anox,xaa}$  | $k_{dec\_anaer,xaa}$  | 0,02   | Batstone et al., 2002    |
| $k_{dec\_aer,xfa}$  | $k_{dec\_anox,xfa}$  | $k_{dec\_anaer,xfa}$  | 0,02   | Batstone et al., 2002    |
| $k_{dec\_aer,xc4}$  | $k_{dec\_anox,xc4}$  | $k_{dec\_anaer,xc4}$  | 0,02   | Batstone et al., 2002    |
| $k_{dec\_aer,xpro}$ | $k_{dec\_anox,xpro}$ | $k_{dec\_anaer,xpro}$ | 0,02   | Batstone et al., 2002    |
| $k_{dec\_aer,xac}$  | $k_{dec\_anox,xac}$  | $k_{dec\_anaer,xac}$  | 0,02   | Batstone et al., 2002    |
| $k_{dec\_aer,xh2}$  | $k_{dec\_anox,xh2}$  | $k_{dec\_anaer,xh2}$  | 0,02   | Batstone et al., 2002    |



Tabla E.13. Factores de corrección de la Temperatura

| Símbolo            | Unidad | Valor | Referencia          |
|--------------------|--------|-------|---------------------|
| $\theta_{m\_h}$    | ---    | 1,071 | Henze et al., 2000  |
| $\theta_{m\_N1}$   | ---    | 1,103 | Wiessmann, 1994     |
| $\theta_{m\_N2}$   | ---    | 1,103 | Wiessmann, 1994     |
| $\theta_{m\_an}$   | ---    | 1,102 | Jetten et al., 1999 |
| $\theta_{dec\_h}$  | ---    | 1,071 | Henze et al., 2000  |
| $\theta_{dec\_N1}$ | ---    | 1,103 | Wiessmann, 1994     |
| $\theta_{dec\_N2}$ | ---    | 1,103 | Wiessmann, 1994     |
| $\theta_{dec\_an}$ | ---    | 1,102 | Jetten et al., 1999 |

En este caso, los factores de corrección de la temperatura para las poblaciones de bacterias  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$ , tanto para su crecimiento como para su desaparición se han considerado diferentes. De esta forma, puede reproducirse el mayor crecimiento de las bacterias  $X_{n2}$  a temperaturas elevadas, en el que se basan los procesos Sharon-Anammox.

Tabla E.14. Constantes de saturación de consumo de sustrato

| Símbolo       | Unidad                          | Valor | Referencia          | Símbolo         | Unidad              | Valor | Referencia           |
|---------------|---------------------------------|-------|---------------------|-----------------|---------------------|-------|----------------------|
| $K_{O\_h}$    | gCOD/m <sup>3</sup>             | 0,2   | Henze et al., 2000  | $K_{BU\_h}$     | gCOD/m <sup>3</sup> | 1     | Estimado             |
| $K_{NH\_N1}$  | gN/m <sup>3</sup>               | 0,8   | Henze et al., 2000  | $K_{PRO\_h}$    | gCOD/m <sup>3</sup> | 1     | Estimado             |
| $K_{NO\_N2}$  | gN/m <sup>3</sup>               | 0,001 | Estimado            | $K_{AC\_h}$     | gCOD/m <sup>3</sup> | 1     | Estimado             |
| $K_{O\_N1}$   | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | 0,4   | Henze et al., 2000  | $K_{su\_Xsu}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, 2002 |
| $K_{O\_N2}$   | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | 0,4   | Henze et al., 2000  | $K_{aa\_xaa}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, 2002 |
| $K_{NH\_AN}$  | gN/m <sup>3</sup>               | 0,07  | Strous et al., 1998 | $K_{fa\_xfa}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, 2002 |
| $K_{NO2\_AN}$ | gN/m <sup>3</sup>               | 0,05  | Strous et al., 1998 | $K_{VA\_xc4}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, 2002 |
| $K_{su\_h}$   | gCOD/m <sup>3</sup>             | 3     | Estimado            | $K_{BU\_xc4}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, 2002 |
| $K_{aa\_h}$   | gCOD/m <sup>3</sup>             | 3     | Estimado            | $K_{PRO\_xpro}$ | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, 2002 |
| $K_{fa\_h}$   | gCOD/m <sup>3</sup>             | 3     | Estimado            | $K_{AC\_xac}$   | gCOD/m <sup>3</sup> | 100   | Batstone et al, 2002 |
| $K_{VA\_h}$   | gCOD/m <sup>3</sup>             | 1     | Estimado            |                 |                     |       |                      |

En la Tabla E.14 se presentan las constantes de saturación utilizadas en el PTM incluido en los modelos de proceso unitario de los reactores de fangos activados y digestor anaerobio.

Sin embargo, tal y como se menciona en Pambrun *et al.*, (2006), las constantes de saturación utilizadas en las ecuaciones cinéticas del crecimiento de las bacterias  $X_{n1}$  y  $X_{n2}$  y las correspondientes a la desnitrificación con  $\text{NO}_2^-$  y  $\text{NO}_3^-$  toman valores diferentes en medios en los que las concentraciones de N son elevadas. Por este motivo, algunos de los parámetros de saturación presentados en la Tabla E.14 se han modificado en los reactores Sharon-Anammox tomando los valores que se presentan a continuación.

Tabla E.15. Constantes de saturación empleadas en los reactores Sharon-Anammox

| Símbolo       | Unidad                          | Valor | Referencia             |
|---------------|---------------------------------|-------|------------------------|
| $K_{O_h}$     | gCOD/m <sup>3</sup>             | 0,2   | Henze et al., 2000     |
| $K_{NH_{N1}}$ | gN/m <sup>3</sup>               | 0,75  | Van Hulle et al., 2004 |
| $K_{NO_{N2}}$ | gN/m <sup>3</sup>               | 5,5   | Wiesmann et al., 1994  |
| $K_{O_{N1}}$  | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | 0,6   | Wiesmann et al., 1994  |
| $K_{O_{N2}}$  | gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> | 1,5   | Wiesmann et al., 1994  |
| $K_{A_{no3}}$ | gN/m <sup>3</sup>               | 0,5   | Henze et al., 2000     |
| $K_{A_{no2}}$ | gN/m <sup>3</sup>               | 0,5   | Henze et al., 2000     |

Tabla E.16. Constantes de hidrólisis y desintegración

| Símbolo             | Unidad          | Valor | Referencia           |
|---------------------|-----------------|-------|----------------------|
| $k_{d_{Aer,xc2}}$   | d <sup>-1</sup> | 75    | Estimado             |
| $k_{d_{Anox,xc2}}$  | d <sup>-1</sup> | 25    | Estimado             |
| $k_{d_{Anaer,xc2}}$ | d <sup>-1</sup> | 0,5   | Batstone et al, 2002 |
| $k_{h_{Aer}}$       | d <sup>-1</sup> | 75    | Estimado             |
| $k_{h_{Anox}}$      | d <sup>-1</sup> | 25    | Estimado             |
| $k_{h_{Anaer}}$     | d <sup>-1</sup> | 10    | Batstone et al, 2002 |

Tabla E.17. Constantes de activación e inhibición

| Símbolo       | Unidad                   | Valor  | Referencia           | Símbolo        | Unidad                   | Valor   | Referencia           |
|---------------|--------------------------|--------|----------------------|----------------|--------------------------|---------|----------------------|
| $K_{A_{o2}}$  | $\text{gO}_2/\text{m}^3$ | 0,2    | Henze et al., 2000   | $K_{h,N1}$     | $\text{gH}/\text{m}^3$   | 1,0E-07 | Estimado             |
| $K_{A_{no3}}$ | $\text{gN}/\text{m}^3$   | 0,1    | Henze et al., 2000   | $K_{I,h,N1}$   | $\text{gH}/\text{m}^3$   | 8,5E-04 | Estimado             |
| $K_{A_{no2}}$ | $\text{gN}/\text{m}^3$   | 0,001  | Estimado             | $K_{h,N2}$     | $\text{gH}/\text{m}^3$   | 1,0E-07 | Estimado             |
| $K_{A_{nox}}$ | $\text{gN}/\text{m}^3$   | 0,1    | Henze et al., 2000   | $K_{I,h,N2}$   | $\text{gH}/\text{m}^3$   | 8,5E-04 | Estimado             |
| $K_{A_{JC}}$  | $\text{gN}/\text{m}^3$   | 0,001  | Estimado             | $K_{I,h2,fa}$  | $\text{gDQO}/\text{m}^3$ | 0,005   | Batstone et al, 2002 |
| $K_{A_{IN}}$  | $\text{gN}/\text{m}^3$   | 0,001  | Estimado             | $K_{I,h2,c4}$  | $\text{gDQO}/\text{m}^3$ | 0,01    | Batstone et al, 2002 |
| $K_{I,h,aa}$  | $\text{gH}/\text{m}^3$   | 0,0155 | Batstone et al, 2002 | $K_{I,h2,pro}$ | $\text{gDQO}/\text{m}^3$ | 0,0035  | Batstone et al, 2002 |
| $K_{I,h,ac}$  | $\text{gH}/\text{m}^3$   | 0,0005 | Batstone et al, 2002 | $K_{I,nh3}$    | $\text{gN}/\text{m}^3$   | 25,2    | Batstone et al, 2002 |
| $K_{I,h,h2}$  | $\text{gH}/\text{m}^3$   | 0,0005 | Batstone et al, 2002 |                |                          |         |                      |

Las constantes de velocidad de los equilibrios ácido-base  $k_{AB,i}$  se han fijado en un valor de  $1.10^6$  de manera que los componentes ácido/base cumplan los respectivos equilibrios pero teniendo en cuenta que valores excesivamente altos pueden provocar una ralentización notable en los tiempos de simulación.

# *ANEXO F*

## *ARTÍCULOS CIENTÍFICOS GENERADOS*

---

A continuación se presentan los artículos científicos generados hasta el momento, como resultado de los trabajos de investigación desarrollados en la presente tesis.

### ***REVISTAS CIENTÍFICAS INTERNACIONALES***

#### *Artículos publicados*

Zaher U., Grau P., Benedetti L., Ayesa E. and Vanrolleghem P.A. (2007). Transformers for interfacing anaerobic digestion models to pre and post-treatment processes. *Environmnetal Modelling and Software* **22**, 40-58.

Ayesa E., De la Sota A., Grau P., Sagarna J.M., Salterain A. and Suescun J. (2006). Supervisory control strategies for the new WWTP of Galindo - Bilbao: The long run from the conceptual design to the full-scale experimental validation. *Wat. Sci. Tech.* 53 (4-5), 193-201.

Artículos en revisión

Grau P., de Gracia M., Vanrolleghem P. and Ayesa E. (2007) A new Plant-Wide modelling methodology for WWTPs. *Aceptado en la revista Water Research (en fase de corrección).*

Grau P., Vanrolleghem P. and Ayesa E. (2007). BSM2 Plant Wide Model construction and comparative analysis with other methodologies for integrated modelling. *En revisión para Wat. Sci. Tech.*

Grau P., Beltrán S., de Gracia M. and Ayesa E. (2007). New mathematical procedure for the automatic estimation of influent characteristics. *En revisión para Wat. Sci. Tech.*

Manterola G., Grau P., Ayesa E., Uriarte I. and Sancho L. (2007). Mathematical modelling of sludge ozonization process for WWTP excess sludge reduction. *En revisión para Wat. Sci. Tech.*

Artículos en preparación

De Gracia M., Grau P. and Ayesa E. Matemática modelling of the WWTP sludge digesters. Part I: Model description.

**REVISTA TÉCNICA NACIONAL**

Ayesa E., Grau P., Salterain A. y Irizar I. Estrategias avanzadas de control automático para la eliminación de N en EDAR: validación experimental en la EDAR de Galindo. *Tecnología del Agua*, publicación prevista en el N° 284 – Mayo de 2007.

## **COMUNICACIONES EN CONFERENCIAS CIENTÍFICAS INTERNACIONALES**

(\*)Grau P., Vanrolleghem P. and Ayesa E. (2007). BSM2 Plant Wide Model construction and comparative analysis with other methodologies for integrated modelling. *Aceptado para presentación oral en Watermatex'07*, 7 al 9 de Mayo de 2007, Washington DC-EEUU.

(\*)Grau P., Beltrán S., de Gracia M. and Ayesa E. (2007). New mathematical procedure for the automatic estimation of influent characteristics. *Aceptado para presentación oral en Watermatex'07*, 7 al 9 de Mayo de 2007, Washington DC-EEUU.

(\*)Manterola G., Grau P., Ayesa E., Uriarte I. and Sancho L. (2007). Mathematical modelling of sludge ozonization process for WWTP excess sludge reduction. *Aceptado para presentación oral en la IWA Specialist Conference. Moving Forward Wastewater Biosolids Sustainability. Technical, Managerial and Public Synergy*. June 24-27, 2007. Moncton, New Brunswick, Canada.

Ayesa E., De la Sota A., Grau P., Sagarna J.M., Salterain A. and Suescun J. (2006). Supervisory control strategies for the new WWTP of Galindo - Bilbao: The long run from the conceptual design to the full-scale experimental validation. *Proceedings of the 2° IWA Conference on Instrumentation, Control and Automation – ICA 2005.Korea, June 1-5, 2005*.

Grau P., Sagarna J.M., Suescun J. and Ayesa E. Full-scale Experimental Validation of New Automatic Control Strategies for the Optimum Operation of WWTP with Nitrogen Removal. *Proceedings on the IWA 4th World Water Congress & Exhibitions*. Morocco, September 19-24, 2004.

---

(\*) Estos artículos, tras una segunda revisión y posibles modificaciones, están siendo revisados para su posible publicación en la revista *Water Science and Technology*. Por tanto, figuran también como artículos en revisión para revistas internacionales.

**COMUNICACIONES EN CONFERENCIAS NACIONALES**

Suescun J., Sagarna J.M., Grau P., and Ayesa E. Implantación de estrategias avanzadas de control automático para la eliminación de nitrógeno en la edar de Galindo (Bilbao). *Proceedings en: Jornadas Técnicas sobre Gestión de EDAR organizado por Agencia Catalana del Agua*. Barcelona, 18-20 Enero, 2005.

Grau P., de Gracia M. y Ayesa E. Modelado integral de las EDAR urbanas: librería de modelos PWM. *Proceedings como ponencia en: Mesa Española de Tratamiento de Aguas (META)*. Valencia, 11-13 Marzo, 2006.

