
Modelización bidimensional de flujos hidrodinámicos transitorios y su influencia en los procesos biológicos de una Estación de Depuración de Aguas Residuales

Patricia Pérez Abad

Mecánica de Fluidos

Director: Pilar García Navarro

Codirector: Javier Murillo Castarlenas

Universidad de Zaragoza, 2010

Índice general

Referencias	5
A. Cinética del proceso biológico según el Modelo de Monod	9
B. Definición del agua residual a tratar	13
C. Modelo ASM1	15
D. Procesos biológicos involucrados en el ASM1	17
E. Glosario de variables en el modelo ASM1	21

Bibliografía

- [1] P. BRUFAU, P. GARCÍA NAVARRO. Conceptos básicos de hidrodinámica de superficie.
- [2] L.D. BENEFIELD, C.W. RANDALL. Biological process design for wastewater treatment. (*Prentice-Hall*)
- [3] L. CEA. Tesis Doctoral. *Universidad de La Coruña*, 2005.
- [4] J.A. CUNGE, F.M. HOLLY, A. VERWEY. *Practical aspects of computational river hydraulics*. Pitman Pub. Inc., 1989.
- [5] J.C. KABOURIS, A.P. GEORGAKAKOS. Parameter and state estimation of the Activated Sludge Process-I. Model development. *Pergamon* , 0043-1354(95)00325-8, 1996.
- [6] R.J. LEVEQUE. Finite Volume Methods fot Hyperbolic Problems. *Cambridge University Press, New York, 2002*, p. 380, 2002.
- [7] J. MAKINIA, S.A. WELLS. A general model of the activated sludge reactor with dispersive flow-I. Model development and parameter estimation. *PII: S0043-1354(00)00150-0* **32**, 2000.
- [8] J. MAKINIA, S.A. WELLS. A general model of the activated sludge reactor with dispersive flow-II. Model verification and application. *PII: S0043-1354(00)00151-2* **32**, 2000.
- [9] R.M. MARTIN, S.C. McCUTCHEON. Hydrodinamics and transport for water quaility modeling. *CRC Press, Florida, 1999*
- [10] METCALF AND EDDY. Wastewater engineering: treatment and reuse. *McGraw Hill, 1998*

- [11] J. MURILLO, J. BURGUETE, P. BRUFAU, AND P. GARCÍA-NAVARRO. Coupling between shallow water and solute flow equations: analysis and management of source terms in 2D. *International Journal of Numerical Methods in Fluids* **49**, 267–299, 2005.
- [12] J. MURILLO, J. BURGUETE AND P. GARCÍA-NAVARRO. Coupling between shallow water and solute flow equations: analysis and management of source terms in 2D. *International Journal of Numerical Methods in Fluids* **54**, 543–590, 2007.
- [13] J. MURILLO, J. BURGUETE AND P. GARCÍA-NAVARRO. Analysis of a second-order upwind method for the simulation of solute transport in 2d shallow water flow. *International Journal of Numerical Methods in Fluids* **56**, 661–686, 2008.
- [14] J. MURILLO, P. GARCIA-NAVARRO AND J. BURGUETE. Conservative Numerical Simulation of Multicomponent Transport in Two-Dimensional Unsteady Shallow Water Flow, *Journal of Computational Physics* **228**, 5539–5573, 2009.
- [15] J. MURILLO, P. GARCIA-NAVARRO. Weak solutions for partial differential equations with source terms: Application to the shallow water equations, *Journal of Computational Physics* **229**, 4327–4368, 2010.
- [16] A.K. RASTOGI AND W. RODI. Predictions of heat and mass transfer in open channels. *Journal of the Hydraulic Division, ASCE*, 397-420, 1978.
- [17] P.L. ROE. A basis for Upwind Differencing of the Two-Dimensional Unsteady Euler Equations. *Numerical Methods in Fluid dynamics, vol II (Oxford University Press, Oxford)*, 1986.
- [18] G. ROSATTI, J. MURILLO, L. FRACCAROLLO. Generalized Roe schemes for 1D two-phase, free-surface flows over a mobile bed. *Journal of Computational Physics* **54**, 543–590, 2007.
- [19] J.C. RUTHERFORD. River Mixing. (*Wiley, New York, 1994*), p. 21, 1994.

- [20] E.F. TORO. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. (*Springer, Berlin, 1997*), p. 526, 1997.
- [21] E.F. TORO. Shock-Capturing Methods for Free-Surface Shallow Flows. (*Wiley, New York, 2001*), p. 109, 2001.
- [22] M.E. VÁZQUEZ-CENDÓN. Improved treatment of source terms in upwind schemes for the shallow water equations in channels with irregular geometry. *Journal of Computational Physics* **148**, 497–498, 1999.
- [23] M. PLATTES, E. HENRY, P.M. SCHOSSELER, A. WEIDENHAUPT. Modelling and dynamic simulation of a moving bed bioreactor for the treatment of municipal wastewater. *Biochemical Engineering Journal* **32**, 61-68, 2006.
- [24] I.Y. SMETS, J.V. HAEGBAERTA, R. CARRETTEB, J.F. VAN IMPEA. Linearization of the activated sludge model ASM1 for fast and reliable predictions. *Water Research* **37**, 1831-1851, 2003.

Apéndice A

Cinética del proceso biológico según el Modelo de Monod

La tasa de crecimiento para la fase de crecimiento exponencial se define por la siguiente relación [10]:

$$r_g = \mu \ X \quad (\text{A.1})$$

donde r_g es la tasa de crecimiento bacteriano, μ es la tasa específica de crecimiento y X , la concentración de microorganismos.

Si en un cultivo en discontinuo uno de los elementos esenciales (sustrato y nutrientes) para el crecimiento estuviera presente sólo en cantidades limitadas, se agotaría primero y el crecimiento cesaría. En un cultivo continuo se ha encontrado que el efecto limitante de un sustrato o un nutriente se puede definir adecuadamente usando la siguiente expresión propuesta por Monod:

$$\mu = \mu_m \frac{S}{K_s + S} \quad (\text{A.2})$$

donde μ_m es la tasa específica máxima de crecimiento, S la concentración en la solución del sustrato limitante del crecimiento y K_s , la constante de velocidad media, concentración del sustrato en la mitad de la velocidad máxima de crecimiento.

Combinando las ecuaciones A.4 y A.2 queda:

$$r_g = \mu_m X \frac{S}{K_s + S} \quad (\text{A.3})$$

Tanto en los sistemas de cultivo continuos como discontinuos, una porción del

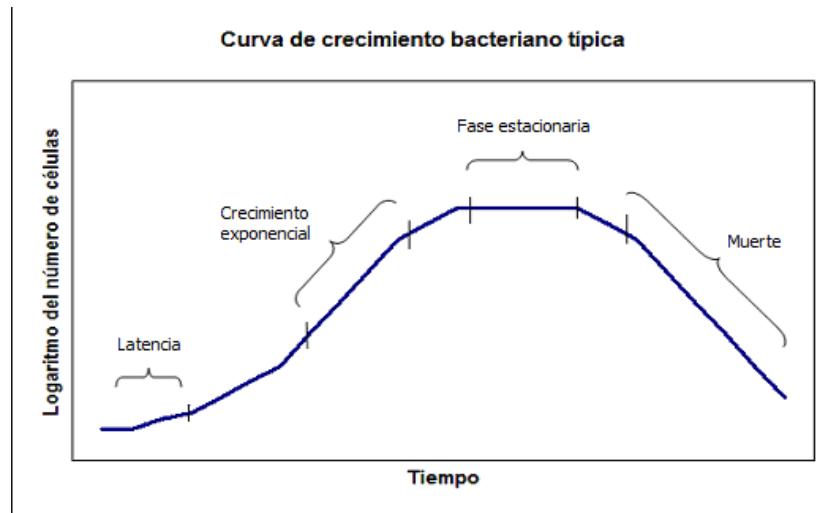


Figura A.1: Fases del modelo de crecimiento bacteriano basado en el número de células

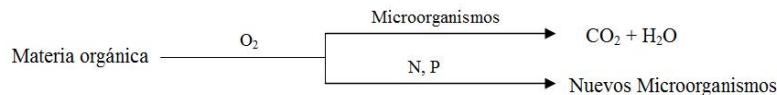


Figura A.2: Esquema del proceso de eliminación de Materia Orgánica

sustrato se convierte en células nuevas y una porción se oxida en productos finales orgánicos e inorgánicos (Figura A.2). Debido a que se ha observado que la cantidad de células nuevas producidas se puede reproducir para determinado sustrato, se desarrolló la siguiente relación entre la tasa de utilización del sustrato y la tasa de crecimiento:

$$r_g = -Y r_{su} \quad (\text{A.4})$$

donde r_g es la tasa de crecimiento bacteriano, Y es la relación de la masa de células formada en comparación con la masa consumida de sustrato, medida durante cualquier periodo finito de crecimiento exponencial y r_{su} , la tasa de utilización del sustrato.

Reorganizando las ecuaciones anteriores queda:

$$r_g = k \ X \frac{S}{K_s + S} \quad (\text{A.5})$$

donde

$$k = \frac{\mu_m}{Y} \quad (\text{A.6})$$

Apéndice B

Definición del agua residual a tratar

En todos los casos test realizados en este proyecto se ha utilizado la misma composición de agua residual a tratar. Algunas composiciones típicas de agua residual en distintos países son las que se muestran en la Tabla B.2[7]

Cuadro B.1: Composiciones típicas de aguas residuales

Sustancia	Unidades	Dinamarca	Suiza	Hungría
S_S	$gDQO/m^3$	125	70	100
S_I	$gDQO/m^3$	40	25	30
X_S	$gDQO/m^3$	250	100	150
X_I	$gDQO/m^3$	8	5	10
S_{ND}	gN/m^3	10	10	15
X_{ND}	gN/m^3	30	10	30
S_{NH}	$gN - NH_3/m^3$	2	2	3
S_{NO}	$gN - NH_3/m^3$	0.5	1	1

Los ensayos presentados en este proyecto se han llevado a cabo utilizando la composición de aguas residuales pertenecientes a Suiza por encontrarse en un punto intermedio entre las 3 presentadas. Un rango típico de concentración de microorganismos heterótrofos se puede calcular como 5 – 15 % del carbono orgánico total (COD) [7] donde

$$COD = S_S + S_I + X_S + X_I \quad (B.1)$$

Para este proyecto se asume que el porcentaje de COD total que da la concentración de microorganismos heterótrofos es del 10 %. Como no se ha obtenido información acerca de la concentración de microorganismos autótrofos, se toma como hipótesis que esta concentración sea igual a la de microorganismos heterótrofos.

La concentración de alcalinidad, medida como masa de carbonato cálcico, se toma como 189 g/m³ [8]. A falta de información sobre la cantidad de oxígeno disuelto que puede contener el agua residual, se toma el valor de la constante de semisaturación de oxígeno para microorganismos heterótrofos que proporciona el ASM1.

Combinando la información anterior, se construye la distribución de concentraciones del agua residual a tratar en los ensayos llevados a cabo en este proyecto y que se presenta en la siguiente Tabla:

Cuadro B.2: Composición de agua residual utilizada en las simulaciones.

S_I	$gDQO/m^3$	25
S_S	$gDQO/m^3$	50
X_I	$gDQO/m^3$	25
X_S	$gDQO/m^3$	100
$X_{b,H}$	$gDQO/m^3$	51.1
$X_{A,H}$	$gDQO/m^3$	51.1
X_p	$gDQO/m^3$	0
S_O	g/m^3	0.2
S_{NO}	$gN - NH_3/m^3$	1
S_{NH}	$gN - NH_3/m^3$	10
S_{ND}	gN/m^3	5
X_{ND}	gN/m^3	10
S_{ALK}	g/m^3	189

Es necesario señalar que el objetivo de este proyecto no es la optimización de un Proceso Orbital, sino la construcción y puesta a punto de una herramienta informática de simulación que permita realizarlo, por lo que en este caso concreto, la composición del agua residual a tratar no es un parámetro relevante, aunque se ha definido la expuesta anteriormente para todos los casos con el fin de que dichos casos sean comparables.

Apéndice C

Modelo ASM1

Figura C.1: Anexo III: Modelo ASM1 en notación matricial

Componentes, $\downarrow \rightarrow i$	S_1	S_S	X_{I}	X_S	$X_{B,H}$	X_B	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{NO}	S_{ND}	S_{ALK}	Tasas de reacción, ρ_j
Crecimiento aeróbico de heterótrofos	- $1/Y_H$			1				$-(1-Y_H)/(Y_H)$						$\mu_{H,aerobic} \left[\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right] \left[\frac{S_x}{K_x + S_x} \right] X_{x,H}$
Crecimiento anóxico de heterótrofos	- $1/Y_H$			1				$-(1-Y_H)/(2.86 Y_H)$						$\mu_{H,anoxic} \left[\frac{S_x}{K_x + S_x} \right] \left[\frac{K_{NO}}{K_{O,H} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right] X_{x,H}$
Crecimiento aeróbico de autótrofos	- $1/Y_H$			1				$-(4.57 - Y_A)/(Y_A)$	$1/Y_A$					$\mu_{A,aerobic} \left[\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right] \left[\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right] X_{x,A}$
Decaimiento de heterótrofos				1					$-i_{XB} - \Phi_{XB}$					$i_{XB}/14$
1. Decaimiento de autótrofos			$1-\frac{e}{P}$	-1		$\frac{e}{P}$								$b_H X_{B,H}$
Anonificación de N orgánico soluble			$1-\frac{e}{P}$	-1	$\frac{e}{P}$									$b_A X_{B,A}$
2. Hidrolisis de los orgánicos emedidos	1		-1							1	-1			$k_o S_{NO} X_{S,H}$
3. Hidrolisis del Nitrog. orgánico emedido														$\rho_1 (X_{NO} / X_S)$
Tasa de conversión Total (observada)														$\Sigma \rho_j$
														$\Sigma \rho_j = \Sigma \eta_j \rho_j$

Apéndice D

Procesos biológicos involucrados en el ASM1

Los diferentes procesos se describen a continuación:

- *Crecimiento aerobio de los heterótrofos:* Se considera que sólo S_s interviene en el crecimiento de los heterótrofos. X_s debe sufrir una hidrólisis antes de que pueda transformarse en S_s y ser utilizado por los microorganismos. El crecimiento se modeliza utilizando la estructura del modelo de Monod, donde pueden ser limitantes tanto S_s , como S_O . Este proceso es el más contribuyente en la remoción de DQO, producción de biomasa nueva y demanda de oxígeno. El nitrógeno amoniacal se consume en el proceso de crecimiento por su incorporación en las células, mientras que cambia también la alcalinidad.
- *Crecimiento anóxico de los heterótrofos:* En la ausencia de oxígeno, los organismos heterótrofos son capaces de utilizar los nitratos como acceptor terminal de electrones con S_s como sustrato. El proceso resulta en una producción suplementaria de biomasa heterótrofa y de nitrógeno gaseoso (desnitrificación). El último resulta de la reducción de los nitratos con su cambio sucesivo en la alcalinidad. Se utilizan las mismas expresiones cinéticas tipo Monod respecto al sustrato asociado a funciones de activación/desactivación respecto a los nitratos y oxígeno. Se utiliza un factor de corrección, $g < 1$, para tener en cuenta el hecho de que la tasa mínima de los heterótrofos es menor en medio anóxico. El amoniaco y la alcalinidad sufren cambios por las mismas razones que las anteriores.

- *Crecimiento aeróbico de los autótrofos:* El amoniaco se oxida para dar nitratos en un proceso denominado nitrificación que consta de una sola etapa. De este proceso se obtiene como resultado la producción de biomasa autótrofa nueva y un consumo adicional de oxígeno. El amoniaco se incorpora también en las células. El proceso tiene un efecto importante en el balance de alcalinidad y en el consumo de oxígeno, mientras que la contribución en la formación de lodo es pequeña, debido a que la tasa de crecimiento de los autótrofos es muy baja. El modelo es tipo Monod respecto al amoniaco y al oxígeno.
- *Decaimiento de los heterótrofos:* La noción de decaimiento en este modelo incluye todos los fenómenos de lisis, respiración endógena, muerte o depredación. Su tratamiento matemático en el ASM1 es diferente del enfoque tradicional en el que se le atribuía directamente un consumo de oxígeno (respiración endógena). La modelación del ASM1 utiliza la noción de muerte-regeneración, donde X_{b_H} da lugar a $X_S + X_P$ sin consumo directo de O_2 . El consumo de O_2 está diferido hasta el momento en que X_S se transforma en S_s (hidrólisis) y que S_s se utiliza en el proceso de crecimiento. Por eso el valor de b_H del modelo difiere mucho del valor empleado en los modelos tradicionales. El proceso no manifiesta ninguna pérdida de DQO, ni consumo directo de O_2 ; por el contrario, produce residuos orgánicos inertes (X_P) y una DQO lentamente biodegradable (X_S). Se supone que el proceso ocurre con la misma velocidad en condiciones aerobias que anóxicas.
- *Decaimiento de los autótrofos:* Este proceso se modeliza de forma análoga al caso de los heterótrofos.
- *Amonificación del nitrógeno orgánico soluble, S_{ND} :* Se modeliza con una cinética de orden 1 respecto a S_{ND} y respecto a la biomasa heterótrofa. Es frecuente que se omita este proceso en las versiones modificadas del ASM1 debido a su rapidez.
- *Hidrólisis de la materia orgánica:* La materia orgánica particulada lentamente biodegradable (X_S) se encuentra enredada en los flocs biológicos donde sufre una ruptura y solubilización por efecto de las enzimas extracelulares. El resultado es la producción de sustrato soluble fácilmente biodegradable, que se utiliza luego en el crecimiento. La estructura del modelo utilizada para este proceso es típica de los

procesos de superficie (adsorción). Es también de orden 1 respecto a la biomasa pero tiende a saturarse cuando la cantidad de sólidos enredados en los flocs (X_S) viene a ser grande comparado con la biomasa (X_{b_H}). La hidrólisis es un proceso que tiene lugar tanto en condiciones aerobias como anóxicas. Se utiliza un factor de corrección $\eta_h < 1$, para tomar en cuenta el hecho de que la tasa de hidrólisis es menor en medio anóxico comparado al medio aeróbico.

- *Hidrólisis del nitrógeno orgánico particulado:* El nitrógeno orgánico particulado (X_{ND}) es parte de la materia orgánica particulada (X_S), por lo que la tasa de hidrólisis del primero, está determinada por la tasa de hidrólisis (ρ_7) del segundo componente. El modelo utilizado muestra una proporcionalidad entre las dos tasas.

Apéndice E

Glosario de variables en el modelo ASM1

Cuadro E.1: Especies presentes en el modelo ASM1

<i>Species</i>	
S_I	Materia orgánica inerte soluble
S_S	Materia orgánica rápidamente biodegradable
X_I	Materia orgánica inerte en forma particulada
X_S	Materia orgánica lentamente biodegradable
$X_{b,H}$	Biomasa heterótrofa activa
$X_{A,H}$	Biomasa autótrofa activa
X_p	Productos particulados inertes procedentes del decaimiento
S_O	Oxígeno disuelto
S_{NO}	N en nitratos y nitritos
S_{NH}	N-NH ₄ ⁺ + N-NH ₃
S_{ND}	N orgánico soluble biodegradable
X_{ND}	N orgánico particulado biodegradable
S_{ALK}	Alcalinidad

Cuadro E.2: Parámetros cinéticos en el modelo ASM1

<i>Parámetros cinéticos</i>	
$\mu_{H,max}$	Tasa máxima de crecimiento para heterótrofos
$\mu_{A,max}$	Tasa máxima de crecimiento para autótrofos
$K_{O,H}$	Const. de semisaturación de oxígeno para heterótrofos
$K_{O,A}$	Const. de semisaturación de oxígeno para autótrofos
K_S	Const. de semisaturación de sustrato
K_{NO}	Const. de semisaturación de nitratos/nitritos
K_{NH}	Const. de semisaturación de especies amónicas
K_x	Coef. de semisaturación para la hidrólisis de XS
η_g	Factor de corrección para el crecimiento de Autótrofos en medio anóxico
η_h	Factor de corrección para la hidrólisis en en medio anóxico
k_h	Tasa máxima específica de hidrólisis
k_a	Amonificación, constante cinética de primer orden
b_H	Tasa de decaimiento biomasa heterótrofa
b_A	Tasa de decaimiento biomasa autótrofa

Cuadro E.3: Parámetros estequiométricos en el modelo ASM1

<i>Parámetros estequiométricos</i>	
Y_H	Rendimiento de los heteótrofos
Y_A	Rendimiento de los autótrofos
f_P	Fracción de biomasa que se transforma en productos inertes
i_{XB}	Masa de N por unidad de masa de biomasa en DQO
i_{XP}	Masa de N por unidad de masa de productos residuales en DQO

Índice de cuadros

B.1. Composiciones típicas de aguas residuales	13
B.2. Composición de agua residual utilizada en las simulaciones.	14
E.1. Especies presentes en el modelo ASM1	22
E.2. Parámetros cinéticos en el modelo ASM1	23
E.3. Parámetros estequiométricos en el modelo ASM1	23

Índice de figuras

A.1. Fases del modelo de crecimiento bacteriano basado en el número de células	10
A.2. Esquema del proceso de eliminación de Materia Orgánica	10
C.1. Anexo III: Modelo ASM1 en notación matricial	16