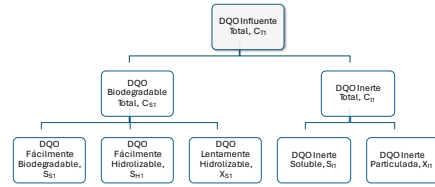


- Normalmente se representa una matriz de la siguiente forma:

Componente $\rightarrow j$	1	2	3	Velocidad, $r(j)$
$j \downarrow$ Proceso	S_1	S_2	
proceso 1	coeficientes					$r(1)$
proceso 2						
...						
	DQO	unidades				

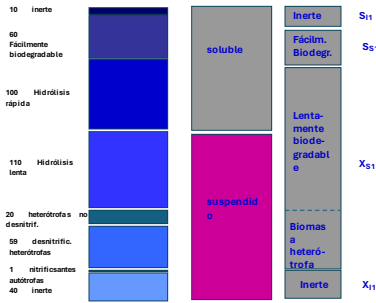
1

Caracterización del influente



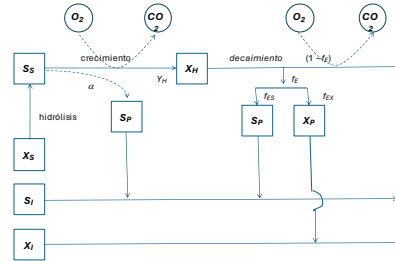
2

Ej: Componentes de la DQO de un agua cloacal con 400 mgDQO/L



3

Modelo que incluye el decaimiento endógeno



4

Modelo sencillo que involucra los procesos de Crecimiento, Decaimiento Endógeno e Hidrólisis

• Variables

- Las siguientes variables definen la naturaleza del agua residual: S_j , S_S , X_j y X_S
- Se considera asimismo la biomasa heterótrofa, X_H , las fracciones que caracterizan los productos, S_P y X_P
- Finalmente, incluimos la concentración de oxígeno disuelto, S_O

5

Componente $\rightarrow j$	1	2	3	4	5	6	7	8	Velocidad, $r(j)$
$j \downarrow$ Proceso	S_1	S_2	X_1	X_2	X_3	X_4	S_3	S_4	
crecimiento									$r(1)$
decaimiento									$r(2)$
hidrólisis									$r(3)$
	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	O ₂	

6

Los elementos inertes no son afectados por la actividad biológica por lo que sus coeficientes son cero.

Asumiendo que se cumple Monod para el crecimiento celular:

$$r(1) = \hat{\mu}_H \frac{S_S}{K_S + S_S} X_H$$

Para el sustrato S_D la variación debida al crecimiento está dado por el coeficiente de rendimiento $Y_{i,c}$:

$$\left. \frac{dS_S}{dt} \right|_{\text{crecimiento}} = \frac{1}{Y_H} \hat{\mu}_H \frac{S_S}{K_S + S_S} X_H$$

O sea que el coeficiente del componente 2 en el proceso 1 es $1/Y_H$

Pero también hay variación en la concentración de sustrato debido a la hidrólisis del sólido; asumiendo que la velocidad de hidrólisis sigue una cinética de primer orden

$$r(3) = k_h X_S$$

$$\left. \frac{dS_S}{dt} \right|_{\text{hidrólisis}} = -k_h X_S$$

Por lo que el coeficiente del componente 2 en el proceso 3 es 1

Componente → j	1	2	3	4	5	6	7	8	Velocidad, r(j)
j ↓ Proceso	S_1	S_2	X_1	X_2	X_3	X_4	S_5	S_6	S_7
Crecimiento		$\frac{1}{Y_H}$							$\hat{\mu}_H \frac{S_S}{K_S + S_S} X_H$
Decaimiento			1						$-k_h X_S$
Hidrólisis									
	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	O ₂

7

8

La biomasa heterótrofa participa en el proceso de crecimiento (coeficiente 1) y también en el decaimiento

$$r(2) = b_H X_H$$

y en este caso como desaparece el coeficiente es -1

La formación de producto insoluble también es proporcional al decaimiento, siendo entonces el coeficiente del componente 6 en el proceso 2, f_{EX} , un factor que representa la fracción inerte de la biomasa que decae.

La formación de producto soluble, S_7 , es proporcional al crecimiento, siendo α , el coeficiente de proporcionalidad, pero también es proporcional al decaimiento, siendo f_{ES} , la fracción de la biomasa que se convierte en componentes solubles biodegradables.

Los coeficientes para el oxígeno soluble, S_8 , surgen de la suma de los coeficientes del resto de los componentes.

Componente → j	1	2	3	4	5	6	7	8	Velocidad, r(j)
j ↓ Proceso	S_1	S_2	X_1	X_2	X_3	X_4	S_5	S_6	
Crecimiento		$\frac{1}{Y_H}$			1		α	$\frac{1 - \alpha f_{EX} - f_{ES}}{Y_H}$	$\hat{\mu}_H \frac{S_S}{K_S + S_S} X_H$
Decaimiento					-1	f_{EX}	f_{ES}	$-f_{EX} - f_{ES}$	$-b_H X_H$
Hidrólisis		1		-1					$k_h X_S$
	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	DQO	O ₂

9

10

Modelo ASM1

El ASM1 fue desarrollado por la IAWQ (posteriormente IWA) para modelar procesos aeróbicos, particularmente procesos de lodos activados. Es la primera versión, luego se fueron agregando más variables y procesos (ASM2, incluye remoción de fósforo), ASM3

Involucra 12 variables:
 DQO soluble inerte
 DQO fácilmente biodegradable
 DQO particulado inerte
 DQO lentamente biodegradable
 Biomasa heterótrofa activa
 Biomasa autótrofa activa
 DQO particulado inerte prov. de la biomasa
 Oxígeno disuelto
 Nitrato + nitrato
 Amonio + amoniaco
 Nitrógeno orgánico soluble
 Nitrógeno orgánico particulado

Y 8 procesos:
 Crecimiento aeróbico de los heterótrofos
 Crecimiento anóxico de los heterótrofos
 Crecimiento aeróbico de los autótrofos
 Decaimiento de los heterótrofos
 Decaimiento de los autótrofos
 Amonificación del nitrógeno orgánico soluble
 Hidrólisis de los orgánicos atrapados
 Hidrólisis del nitrógeno

11

12

Table 2.1: Process kinetics for organic matter oxidation, nitrification and denitrification for model ASM1

j	Process rate	Definition
μ_1	$\mu_H \left(\frac{S_1}{K_{S1} + S_1} \right) \left(\frac{S_2}{K_{S2} + S_2} \right) X_H$	Aerobic growth of heterotrophs
μ_2	$\mu_H \left(\frac{S_1}{K_{S1} + S_1} \right) \left(\frac{S_2}{K_{S2} + S_2} \right) \left(\frac{S_3}{K_{S3} + S_3} \right) X_{NH}$	Aerobic growth of heterotrophs
μ_3	$\mu_A \left(\frac{S_1}{K_{S1} + S_1} \right) \left(\frac{S_2}{K_{S2} + S_2} \right) X_{AA}$	Aerobic growth of autotrophs
μ_4	$-b_H X_H$	Decay of heterotrophs
μ_5	$-b_A X_{AA}$	Decay of autotrophs
μ_6	$k_A S_{10} - X_{NH}$	Ammonification of soluble organic nitrogen
μ_7	$k_H \frac{S_1 X_1}{K_{S1} + S_1} - (f_{EX} \mu_1 + f_{ES} \mu_2) X_H$	Hydrolysis of entrapped organic
μ_8	$\mu \left(\frac{S_1}{K_S} \right)$	Hydrolysis of entrapped organic nitrogen

11

2

Table 2.2: Process stoichiometry for organic matter oxidation, nitrification and denitrification for model ASM1

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
	S_1	S_2	X_1	X_2	X_{NH}	X_{NO}	X_P	S_3	S_{NH}	S_{NO}	S_{PO}	X_{PO}
r_1	$-Y_H \mu$							$-i_{X,P} \mu$				
r_2		$Y_H \mu$										
r_3												
r_4												
r_5												
r_6												
r_7												
r_8												

13

14

Table 2.3: Default values at 20°C for the model ASM1

Symbol	Definition	Default Value
Y_H	Aerobic yield for heterotrophic biomass (gCOD/gCOD ⁻¹)	0.67
μ_{max}	Maximum specific growth rate for heterotrophic biomass (day ⁻¹)	6.0
b_H	Decay coefficient for heterotrophic biomass (day ⁻¹)	0.62
K_{S1}	S_1 half-saturation coefficient for heterotrophic biomass (gCOD/m ³)	20
K_{S2}	S_2 half-saturation coefficient for heterotrophic biomass (gCOD/m ³)	0.2
K_{S3}	S_3 half-saturation coefficient for heterotrophic biomass under anoxic conditions (gN/m ³)	0.5
α_2	Correction factor for μ_{max} under anoxic conditions (Dimensionless)	0.8
α_3	Correction factor for hydrolysis under anoxic conditions (Dimensionless)	0.4
k_H	Maximum specific hydrolysis rate (gCOD/gCOD.day ⁻¹)	3.0
K_{X1}	Half saturation coefficient for hydrolysis of slowly biodegradable substrate (gCOD/gCOD ⁻¹)	0.03
K_{X2}	Ammonification rate (μ) (gCOD/gCOD ⁻¹)	0.08
f_P	Fraction of biomass leading to inert particulate products (Dimensionless)	0.08
$i_{X,P}$	Mass of nitrogen per mass of COD in biomass (gN/gCOD ⁻¹)	0.066
$i_{X,N}$	Mass of oxygen per mass of COD in biomass (gO/gCOD ⁻¹)	0.96
Y_A	Yield for autotrophic biomass (gCOD/gN ⁻¹)	0.24
μ_A	Maximum specific growth rate for NH ₄ ⁺ oxidizers autotrophic biomass (day ⁻¹)	0.8
b_A	Decay coefficient for autotrophic biomass (day ⁻¹)	0.04
K_{S4}	S_4 half-saturation coefficient for autotrophic biomass (gN/m ³)	0.4
K_{S5}	S_5 half-saturation coefficient for autotrophic biomass (gN/m ³)	1.0

ADM1: desarrollado por IWA para procesos anaerobios

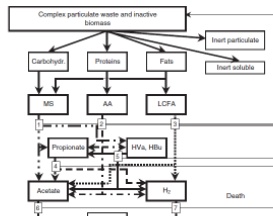


Figure 1 The anaerobic model as implemented including biochemical processes: (1) acidogenesis from sugars, (2) acidogenesis from amino acids, (3) acidogenesis from LCFA, (4) acetogenesis from propionate, (5) acetogenesis from butyrate and valerate, (6) acetogenic methanogenesis, and (7) hydrogenogenic methanogenesis

15

16

Table A1 Biochemical rate coefficients (k_{ij}) and stoichiometric equations (q_i) for soluble components (i = 1-12, j = 1-16)

Component	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1. Hydrolysis																
2. Hydrolysis carbohydrates																
3. Hydrolysis proteins																
4. Hydrolysis lipids																
5. Uptake of sugars																
6. Uptake of amino acids																
7. Uptake of LCFA																
8. Uptake of butyrate																
9. Uptake of propionate																
10. Uptake of hydrogen																
11. Uptake of acetate																
12. Decay of X ₁																
13. Decay of X ₂																
14. Decay of X ₃																
15. Decay of X ₄																
16. Decay of X ₅																

Table A4 Biochemical rate coefficients (k_{ij}) and stoichiometric equations (q_i) for soluble components (i = 13-24, j = 1-16)

Component	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
13. Decay of X ₆																
14. Decay of X ₇																
15. Decay of X ₈																
16. Decay of X ₉																
17. Decay of X ₁₀																
18. Decay of X ₁₁																
19. Decay of X ₁₂																
20. Decay of X ₁₃																
21. Decay of X ₁₄																
22. Decay of X ₁₅																
23. Decay of X ₁₆																
24. Decay of X ₁₇																

17

18

Table A2 Inhibition expressions

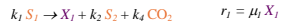
Description	Equation	Used for	ref
Non-competitive inhibition	$f = \frac{1}{1 + S_i/K_i}$	hydrogen inhibition free ammonia inhibition	1
Substrate limitation	$f = \frac{S_i}{S_i + K_i}$	total ammonia limitation	
Empirical	$f = \frac{1 + 2 \times 10^{3(\text{pH} - \text{pH}_{L1})}}{1 + 10^{3(\text{pH} - \text{pH}_{L1})} + 10^{3(\text{pH}_{U1} - \text{pH})}}$	pH inhibition when both high and low pH inhibition occur	2
	$f = \max\left(\frac{1 - \left(\frac{\text{pH} - \text{pH}_{L1}}{\text{pH}_{U1} - \text{pH}_{L1}}\right)^2}{\text{pH}_{U1} - \text{pH}_{L1}}, 0\right)$	pH inhibition when only low pH inhibition occurs	3

Note: For the first pH function, pH_{L1} and pH_{U1} are upper and lower limits where the group of organisms is 20% inhibited, respectively. For example, acetate-utilizing methanogens with a pH_{L1} of 7.5 and a pH_{U1} of 6.5 have an optimum at pH 7. For the second function, pH_{U1} and pH_{L1} are points at which the organisms are not inhibited, and at which inhibition is full respectively. Acetate-utilizing methanogens with a pH_{L1} of 7 and a pH_{U1} of 6 will be completely inhibited below pH 6 and not inhibited above pH 7.
References: 1. Pavlostathis and Girardo-Gomez (1991), 2. Angelidaki et al. (1995), 3. Ramsay (1997)

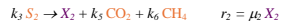
17

El modelo AM2

acidogénesis



metanización



El flujo de metano gaseoso está dado por

$$q_M = k_6 \mu_2 X_2$$

y el de anhídrido carbónico

$$q_C = k_1 a (\text{CO}_2 - K_H p_C)$$

19

Modelo AM2

19

$$\frac{dX_1}{dt} = [\mu_1(\xi) - aD]X_1$$

$$\frac{dX_2}{dt} = [\mu_2(\xi) - aD]X_2$$

$$\frac{dS_1}{dt} = D(S_{1in} - S_1) - k_1 \mu_1 X_1$$

$$\frac{dS_2}{dt} = D(S_{2in} - S_2) + k_2 \mu_1 X_1 - k_3 \mu_2 X_2$$

$$\frac{dC}{dt} = D(C_{in} - C) - q_C + k_4 \mu_1 X_1 + k_5 \mu_2 X_2$$

$$\frac{d\xi}{dt} = K r(\xi) - D\xi - Q + F$$

$$\xi = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ S_1 \\ S_2 \\ C \end{bmatrix} \quad r(\xi) = \begin{bmatrix} \mu_1(\xi)X_1 \\ \mu_2(\xi)X_2 \end{bmatrix} \quad K = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -k_1 & 0 & 0 \\ k_2 & -k_3 & 0 \\ k_4 & k_5 & 1 \end{bmatrix}$$

$$F = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ DS_{1in} \\ DS_{2in} \\ DC_{in} \end{bmatrix} \quad Q = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ q_C(\xi) \end{bmatrix} \quad D = \begin{bmatrix} aD & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & aD & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D \end{bmatrix}$$

20

Modelo AM2

20