



UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA
Escuela de Ingeniería Industriales y Civiles

Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales
Departamento de Ingeniería de Procesos

TESIS DOCTORAL

Modalidad

Por Compendio de Publicaciones

MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS PARA LA RESOLUCIÓN DE MODELOS MATEMÁTICOS DE PROCESOS ANAEROBIOS EN SISTEMAS DE DEPURACIÓN NATURAL (SDN) PARA EL TRATAMIENTO DE EFLUENTES CON ALTA CARGA ORGÁNICA

Programa de Doctorado de Calidad Ambiental y Recursos Naturales

Saulo Manuel Brito Espino
Las Palmas de Gran Canaria, enero-2022





PROGRAMA DE DOCTORADO
CALIDAD AMBIENTAL Y RECURSOS NATURALES

INSTITUTO DE ESTUDIOS AMBIENTALES Y RECURSOS NATURALES

TESIS DOCTORAL POR COMPENDIO DE PUBLICACIONES

**MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS PARA LA
RESOLUCIÓN DE MODELOS MATEMÁTICOS DE
PROCESOS ANAEROBIOS EN SISTEMAS DE DEPURACIÓN
NATURAL (SDN) PARA EL TRATAMIENTO DE
EFLUENTES CON ALTA CARGA ORGÁNICA**

Las Palmas de Gran Canaria, noviembre de 2021

Autor: Saulo M. Brito
Espino

Director: Dr. Sebastián
Ovidio Pérez Báez

Director: Dr. Alejandro
Ramos Martín

Agradecimientos

Cuando echo la vista atrás me resulta difícil encontrar el momento en que tomé la decisión de emprender este largo, pero emocionante viaje que representa los estudios de doctorado. Quizás fue un capricho del destino, o tal vez la necesidad de buscar nuevos horizontes, motivado por un despido colectivo y una crisis laboral, lo que suscitó el retorno al mundo académico en aras de ampliar mi formación dentro un ambiente universitario. Con el beneplácito familiar para la realización de un máster por un periodo de un año, jamás sospeché que este plazo se ampliaría cuando me invitan a continuar los estudios a través del programa de doctorado en calidad ambiental y recursos naturales. Una vez, inmerso en la aventura descubrí un mundo nuevo de la mano de un equipo excepcional, donde adquirí nuevas experiencias, hallé nuevos colegas, visité diferentes congresos y redacté algunos artículos. En definitiva, fue un enriquecimiento en cuanto al conocimiento se refiere y el despertar de nuevas expectativas en mi vida.

Todo ello no hubiese sido posible sin la aportación de los directores de tesis, el Dr. D. Sebastián Ovidio Pérez que depositó su confianza en mi para continuar con el testigo que habían dejado otros compañeros en una nueva línea de investigación, y el Dr. D. Alejandro Ramos Martín que con su compromiso personal y pleno en este proyecto me ha prestado su apoyo en todo momento, especialmente en aquellos de flaqueza. Ha sido muy satisfactorio el poder aprender de sus conocimientos, experiencias, consejos y, sobre todo, del entusiasmo que aportan en todo momento que he seguido con gran interés e ilusión. Por todo ello, muchas gracias a ambos.

En segundo lugar, quisiera mostrar mi agradecimiento al Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, por respaldar este proyecto a través del proyecto MITIMAC (MAC2/1, 1a/263) aprobado en el marco del Programa de Cooperación Interreg V-A España-Portugal (Maderia – Azores – Canarias) 2014 – 2020 y co-financiado por el fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER).

En tercer lugar, me gustaría expresar mi reconocimiento al programa de Doctorado en Calidad Ambiental y Recurso Naturales (DOCARNA). Gracias a sus cursos, programas y actividades he podido aprender y desarrollar todas aquellas habilidades que tienen que ver con la investigación científica.

También quiero dar las gracias a mis compañeros, colegas, que a través de la participación en este y otros proyectos ha sido posible establecer procedimientos de trabajos colaborativos aportando experiencias, competencias y perspectivas diversas, posibilitando, así, una gran capacidad de reflexión y un aumento de las posibilidades de aprendizaje mutuo.

Por último, quiero mostrar mi agradecimiento a mi madre, Melita, que ha sido un ejemplo de voluntad y firmeza, a mis hijas, Laura y María, por acompañarme durante este largo periodo en todos los vaivenes físicos y emocionales y por último a Begoña, mi esposa, que sin su apoyo incondicional todo esto no hubiese sido posible. Por todo ello muchas gracias, os quiero.

La biodiversidad es nuestro recurso más valioso, pero el menos apreciado

Edward O. Wilson

ABSTRACT

The increasingly strict environmental regulation has created the need to find several solutions which combine low-cost facilities and resource efficiency in wastewater treatment. Natural Wastewater Treatment Systems (NWTs) operate as an alternative to conventional methods and are being more widely applied than other systems. Technologies based on anaerobic digestion, which apply to NWTs are a really appealing choice, since they are easy to use and offer minimal operational and maintenance requirements. In the Canary Islands, NWTs have been built by private and government initiatives since the early XXI century. Government initiatives have been carried out, initially, through the project DEPURANAT, promoted by the Instituto Tecnológico de Canarias, and more recently, through the project MITIMAC, co-financed by the European program INTERREG-Espacio Atlantico. In parallel, new areas of research, based on NWTs, have been created through different doctorate programmes of the University of Las Palmas de Gran Canaria.

Consequently, promoted by both the Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales and the process engineering department of the University of Las Palmas de Gran Canaria, a new area of research is set up in order to develop a theoretical framework, with the goal of deeping into the knowledges of the internal processes occurring within SDN.

Numerous researches about NWTs have been published over the last 60 years. The vast majority apply Black Box type models for the description of NWTs behaviour. Regarding the ones implementing mathematical models, these have been developed in order to calculate an specific variable or several of them.

The main objectives of this work have been, first, to develop a two dimensional computational fluid dynamic model with the purpose of describing the anaerobic digestion processes occurring within NWTs, and secondly, to design a methodology where the hydraulic, physical, biochemical and physical-chemical phenomena, that occur simultaneously, would be allowed.

For this, a deterministic model for numerous variables, composed by a system of parabolic PDE, is set out. This is created from the advection-diffusion-reaction, Stokes and energy equations, even the Anaerobic Digestion Model No1 (ADM1) is implemented. The methodology proposal to solve the mathematical model is based on the use of the Finite Ele-

ment Method (FEM) and the design of an algorithm grounded on the parallel solver (MPI). Thanks to Freefem++, open access software, both the PDE resolution and simulation of the different variables included in the problem has been possible. This document has been divided in four parts. The first, includes the consent of the co-authors of the articles for their contribution to this thesis.

The second part is dedicated to the introduction. It starts by setting the background of the study where it is highlighted the importance of NWTS nowadays. The choice of this kind of technology implemented for rural areas is increasingly growing in the Canary Islands just as much as all around the world. In this section the objectives and the published manuscript, main purpose of this Thesis by Compendium of Publications, are described. Further on, in the chapter "*Justification of the thematic unit of the Thesis*", the development of the research is shown through the different published manuscripts. Finally, with the development of the state of art where it is concluded that there are too few mathematical studies which describe NWTS based on anaerobic lagoons, the second part is concluded.

In the third part, the original published manuscripts are shown in chronological order. And subsequently, the abstracts, in Spanish, of the different manuscripts are stated.

In the fourth part, final conclusions are exposed together with future plans.

Keywords: Natural Wastewater Treatment Systems (NWTS), Constructed wetland, Anaerobic Digestion, ADM1, Anaerobic Lagoons, Mathematical Models, Computational Fluid Dynamics, Finite Element Method, Parallelization (MPI), FreeFem++.

RESUMEN

El incremento de la producción de las explotaciones ganaderas intensivas en todo el mundo, juntamente con la mala gestión del estiércol que éstas generan, aumenta el riesgo de contaminación medioambiental. Las disposiciones legales existentes en torno a la protección del medioambiente, cada vez más exigentes, ha suscitado la necesidad de encontrar soluciones al tratamiento de los excrementos de animales ocasionado por este tipo de instalaciones. Los Sistema de Depuración Natural (SDN) para el tratamiento de aguas residuales son soluciones que se basan en dos conceptos: instalaciones de bajo coste y eficiencia de recursos. Es por ello por lo que se han convertido en una de las alternativas a los métodos convencionales que se vienen aplicando cada vez más en todo el mundo. En este sentido, los Sistema de Depuración Natural basados en Procesos Anaerobios, lagos y lagunas, naturales o artificiales (SDN-A) se presentan como una apuesta muy atractiva, ya que son fáciles de usar y precisan de unos requisitos mínimos para la operación y el mantenimiento.

En Canarias, los SDN han sido desarrollados desde comienzos del presente siglo, tanto a través de iniciativas públicas como privadas. Las públicas han sido llevadas a cabo, inicialmente, a través del proyecto DEPURANAT, impulsado por el Instituto Tecnológico de Canarias, y recientemente, a través del proyecto MITIMAC, cofinanciado por el programa europeo INTERREG-Espacio Atlántico. Dentro del ámbito de la Universidad de las Palmas de Gran Canaria se han puesto en práctica numerosos proyectos entorno a los SDN. En el año 2000 se construyó un humedal artificial para el tratamiento de aguas residuales en el Campus de Tafira y posteriormente, en el año 2008, el Departamento de Ingeniería de Procesos y el Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales (i-UNAT) traza una línea de investigación para la construcción de varios humedales artificiales a escala real, junto a granjas ganaderas que se materializa, posteriormente, en una tesis doctoral dentro del Programa de Doctorado de Ingeniería Ambiental y Desalinización de la propia Universidad. Con el objetivo de mejorar el entendimiento de los SDN a través modelos determinísticos, el propio i-UNAT impulsa, finalmente, una nueva propuesta de investigación con el propósito de desarrollar un marco teórico para profundizar el conocimiento de los fenómenos que inciden en un SDN.

Durante los últimos 60 años se ha venido publicando una cantidad importante de estudios que tratan de predecir el comportamiento de los SDN. La mayor parte de los modelos

planteados son de tipo Caja Negra o Caja Gris, de los cuales estos últimos combinan modelos de conocimientos con modelos empíricos. Por otro lado, existe pocas publicaciones que proponen modelos tipo Caja Blanca, especialmente, los basados en procesos. En su mayoría han sido diseñados para humedales artificiales y se han apoyado en programas informáticos comerciales para su resolución.

Debido a la necesidad de ampliar los conocimientos entorno a los SDN, los principales objetivos de este trabajo de Tesis han sido: primero, desarrollar un modelo matemático basado en procesos que permita describir el comportamiento dinámico de los microorganismos anaerobios dentro de un SDN-A. Y segundo, desarrollar una metodología de cálculo con el fin de poder obtener resultados adecuados para la caracterización cuantitativa y cualitativa de los diferentes fenómenos que concurren dentro de estas Lagunas Anaerobia (LA). Para ello se propone un modelo integrado por un sistema de Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales (EDP) de segundo orden y de tipo parabólico que contiene, por un lado, las ecuaciones de Advección-Difusión-Reacción (ADR), de Stokes y de Energía, y por otro, el Modelo de Digestión Anaeróbica No1, Anaerobic Digestion Model No1 (ADM1), desarrollado por The International Water Association (IWA). El procedimiento escogido para la resolución de este modelo ha sido el uso del Método de los Elementos Finitos (MEF) y el diseño de un algoritmo basado en el cálculo en paralelo a través de la Interfaz de paso de mensajes - Message Passing Interface (MPI). Con el uso del lenguaje de programación FreeFem++, software de código abierto, ha sido posible resolver las EDP planteadas y simular las diferentes variables contempladas en el problema.

Este documento ha sido dividido en cuatro partes:

La primera incluye el consentimiento de los coautores de los artículos para su inclusión en la tesis.

La segunda parte está dedicada a la introducción. Se inicia con los antecedentes del estudio donde se destaca la importancia que tienen en la actualidad los SDN. La elección de este tipo de tecnología en las zonas rurales es cada vez mayor, tanto en Canarias como en todo el mundo. En esta parte se describen los objetivos y se presentan los manuscritos publicados, motivos de esta Tesis por Compendio de Publicaciones. Posteriormente, en el capítulo Justificación de la Unidad Temática de la Tesis se muestra el desarrollo de la investigación a través de los diferentes manuscritos publicados. Se finaliza con el Estado del Arte, donde

se describe el conocimiento referente a los modelos que se han desarrollados en torno a los SDN y se plantea la necesidad de futuras contribuciones.

La tercera parte de esta Tesis se inicia con la exposición de los manuscritos publicados, los cuales han sido ordenado de manera cronológica, conforme a la fecha de su publicación. Se completa este apartado con los resúmenes en español de cada uno estos manuscritos.

En la cuarta y última parte se describe las conclusiones finales, así como las posibles aportaciones que puedan ser desarrolladas por otros grupos de investigación en trabajos futuros.

Palabras clave:

Sistemas de Depuración Natural (SDN), Humedales Artificiales, Digestión Anaerobia, ADM1, Lagunas Anaerobia, Modelos Basados en Procesos, Dinámica de Fluidos Computacional, Método de Elementos Finitos, Paralelización (MPI), FreeFem++

Índice general

I	Solicitud Presentación de la Tesis	5
1.	Aceptación coautores	7
II	Introducción	11
2.	Introducción	13
2.1.	Antecedentes	13
2.2.	Objetivos de la Tesis	16
2.3.	Trabajos publicados	17
2.3.1.	Como autor principal	18
2.3.2.	Como colaborador en artículos relacionados directamente con este trabajo	23
2.3.3.	Como colaborador en otros artículos	26
2.4.	Justificación Tesis	30
3.	Inv. Bibliográfica	33
3.1.	Introducción	33
3.2.	Caja Negra	34
3.3.	Caja Gris	35
3.4.	Caja Blanca	37

3.4.1. Humedales Artificiales de Flujo Superficial	37
3.4.2. Humedales Artificiales de Flujo Horizontal Subsuperficial	38
3.4.3. Humedales Artificiales de Flujo Vertical Subsuperficial	39
 III Publicaciones originales que conforma la Tesis Doctoral	 51
 4. Application of a model-based method for hydrodynamic processes in constructed wetland for the management of livestock wastewater based on finite elements method	 53
 5. Application of a mathematical model to predict simultaneous reactions in anaerobic plug-flow reactors as a primary treatment for constructed wetlands	 61
 6. A framework based on finite element method (FEM) for modelling and assessing the affection of the local thermal weather factors on the performance of anaerobic lagoons for the natural treatment of swine wastewater	 73
 7. Resúmenes	 87
7.1. Application of a model-based...	88
7.2. Application of a mathematical...	93
7.3. A framework based on FINITE...	98
 IV Conclusiones Finales	 103
 8. Conclusiones	 105
 A. Simbología	 111
 B. Ec.del Modelo	 117
B.1. Advección-difusión-reacción	117

B.1.1. Formulación fuerte	117
B.1.2. Formulación débil	119
B.2. Stokes	120
B.2.1. Formulación fuerte	120
B.2.2. Formulación débil	120
B.3. Energía	120
B.3.1. Formulación fuerte	120
B.3.2. Formulación débil	122
B.4. ADM1	122
C. Código FreeFem++	125

Parte I

Solicitud Presentación de la Tesis

1 Aceptación de los coautores para que el doctorando presente el trabajo

Se adjunta, a continuación, la relación completa de los trabajos publicados donde consta el nombre y adscripción del autor y de todos los coautores, la referencia completa de la revista objeto de dicha publicación, y a continuación figura la aceptación por escrito y con firma original de los coautores dando su consentimiento para que estos artículos figuren en concepto de compendio en la presente tesis doctoral.

AUTORES (P.O. DE FIRMA): SAULO MANUEL BRITO ESPINO¹, SEBASTIAN OVIDIO PÉREZ BÁEZ¹, ALEJANDRO RAMOS MARTÍN², CARLOS ALBERTO MENDIETA PINO².
TÍTULO: *Application of a model-based method for hydrodynamic processes in constructed wetland for the management of livestock wastewater based on finite elements method*
REFERENCIA: DOI: 10.5004/dwt.2019.23940. VOL.152, PP. 92-98.
REVISTA: *Desalination and Water Treatment*
EDITORIAL: DESWATER
AFILIACIONES:



- (1) Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino), sperez@dip.ulpgc.es (S.O. Pérez-Báez)
 (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín), carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino)

LUGAR DE PUBLICACIÓN: Hopkinton- Massachusetts (USA)

FECHA DE PUBLICACIÓN: FEBRERO 2019

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) -> 0,854

DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
WATER RESOURCES	84/94	Q4
ENGINEERING, CHEMICAL	118/143	Q4

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

Los coautores del trabajo titulado “Application of a model-based method for hydrodynamic processes in constructed wetland for the management of livestock wastewater based on finite elements method” con D.O.I: DOI: 10.5004/dwt.2019.23940, hacen constar que Don Saulo Manuel Brito Espino con DNI: 43653956W es el autor principal de la investigación recogida en este artículo y que conocen y dan su consentimiento para que el artículo sea utilizado para que Don Saulo Manuel Brito Espino presente su tesis doctoral denominada “MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS PARA LA RESOLUCIÓN DE MODELOS MATEMÁTICOS DE PROCESOS ANAERÓBICOS EN SISTEMAS DE DEPURACIÓN NATURAL (SDN) PARA EL TRATAMIENTO DE EFLUENTES CON ALTA CARGA ORGÁNICA”, en el formato de compendio de artículos:

Dr. Sebastián Ovidio Pérez Báez Dr. Alejandro Ramos Martín Dr. Carlos Alberto Mendieta Pino

AUTORES (P.O. DE FIRMA): SAULO MANUEL BRITO ESPINO¹, SEBASTIAN OVIDIO PÉREZ BÁEZ¹, ALEJANDRO RAMOS MARTÍN², CARLOS ALBERTO MENDIETA PINO².
TÍTULO: *Application of a mathematical model to predict simultaneous reactions in anaerobic plug-flow reactors as a primary treatment for constructed wetlands*
REFERENCIA: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.136244>, VOL. 713, PP 136244
REVISTA: *Science of the Total Environment*
EDITORIAL: ELSEVIER
AFILIACIONES:



- (1) Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino), sperez@dip.ulpgc.es (S.O. Pérez-Báez)
- (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín), carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino)

LUGAR DE PUBLICACIÓN: NETHERLANDS

FECHA DE PUBLICACIÓN: ENERO 2020

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) -> 6.551

DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
ENVIRONMENTAL SCIENCES	22/265	Q1

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

Los coautores del trabajo titulado “*Application of a mathematical model to predict simultaneous reactions in anaerobic plug-flow reactors as a primary treatment for constructed wetlands*” con D.O.I: DOI: 10.5004/dwt.2019.23940, hacen constar que Don Saulo Manuel Brito Espino con DNI: 43653956W es el autor principal de la investigación recogida en este artículo y que conocen y dan su consentimiento para que el artículo sea utilizado para que Don Saulo Manuel Brito Espino presente su tesis doctoral denominada “MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS PARA LA RESOLUCIÓN DE MODELOS MATEMÁTICOS DE PROCESOS ANAERÓBICOS EN SISTEMAS DE DEPURACIÓN NATURAL (SDN) PARA EL TRATAMIENTO DE EFLUENTES CON ALTA CARGA ORGÁNICA”, en el formato de compendio de artículos:

Dr. Sebastián Ovidio Pérez Báez Dr. Alejandro Ramos Martín Dr. Carlos Alberto Mendieta Pino

AUTORES (P.O. DE FIRMA): SAULO MANUEL BRITO ESPINO¹, SEBASTIAN OVIDIO PÉREZ BÁEZ¹, ALEJANDRO RAMOS MARTÍN², CARLOS ALBERTO MENDIETA PINO², FEDERICO LEÓN ZERPA²
TÍTULO: A Framework Based on Finite Element Method (FEM) for Modelling and Assessing the Affection of the Local Thermal Weather Factors on the Performance of Anaerobic Lagoons for the Natural Treatment of Swine Wastewater
REFERENCIA: <https://doi.org/10.3390/w13070882>, VOL. 13,
REVISTA: WATER
EDITORIAL: MDPI
AFILIACIONES:



- (1) Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; saulobrito09@gmail.com (Saulo Brito-Espino), sperez@dip.ulpgc.es (Sebastián O. Pérez-Báez)
- (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (Alejandro Ramos-Martín), carlos.mendieta@ulpgc.es (Carlos. Mendieta-Pino), federico.leon@ulpgc.es (Federico León Zerpa)

LUGAR DE PUBLICACIÓN: SWITZERLAND

FECHA DE PUBLICACIÓN: MARZO 2021

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) -> 2.524

DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
WATER RESOURCES	31/94	Q2

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

Los coautores del trabajo titulado “A Framework Based on Finite Element Method (FEM) for Modelling and Assessing the Affection of the Local Thermal Weather Factors on the Performance of Anaerobic Lagoons for the Natural Treatment of Swine Wastewater” con D.O.I: DOI: 10.5004/dwt.2019.23940, hacen constar que Don Saulo Manuel Brito Espino con DNI: 43653956W es el autor principal de la investigación recogida en este artículo y que conocen y dan su consentimiento para que el artículo sea utilizado para que Don Saulo Manuel Brito Espino presente su tesis doctoral denominada “MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS PARA LA RESOLUCIÓN DE MODELOS MATEMÁTICOS DE PROCESOS ANAERÓBICOS EN SISTEMAS DE DEPURACIÓN NATURAL (SDN) PARA EL TRATAMIENTO DE EFLUENTES CON ALTA CARGA ORGÁNICA”, en el formato de compendio de artículos:

Dr. Sebastián Ovidio Pérez Báez Dr. Alejandro Ramos Martín Dr. Carlos Alberto Mendieta Pino

Dr. Federico León Zerpa

Parte II

Introducción

2 Introducción

2.1. Antecedentes

En el mundo que vivimos, a nadie le cabe duda de que el actual modelo socioeconómico lleva asociado la depredación de los recursos naturales y la degradación del medio ambiente que nos rodea. El crecimiento poblacional de las últimas décadas, el aumento del capital activo y los cambios en los hábitos alimenticios han provocado un aumento vertiginoso del mercado agrícola y ganadero [35]. Debido al incremento de la demanda de productos cárnicos se ha venido desencadenando una transformación en el sistema de producción ganadera pasando de una explotación extensiva poco masificada a una de tipo industrial, intensiva, muy concentrada en determinadas áreas. Es por lo que las grandes cantidades de estiércol animal y lodos que se generan en estas últimas representan un riesgo constante de contaminación con un posible impacto negativo en el medio ambiente cuando no son gestionadas de manera correcta [18].

En Canarias, a igual que en el resto del mundo, ha habido una intensificación del sector ganadero en los últimos años. El estiércol, utilizado como abono, años atrás, junto con el purín se han convertido en residuos susceptibles de ser gestionado. Un claro ejemplo es el de Gran Canaria que tiene una superficie de 1560 km^2 con una gran cantidad de áreas sujetas a algún tipo de protección ambiental, 33 espacios integrados en la Red de Espacios Naturales Protegidos de Canarias y el 43 % de la superficie terrestre insular incluidas dentro de la Reserva de la Biosfera [37]. Ésta se presenta como un territorio con problemas para la gestión y eliminación de residuos en general y de purines procedentes de explotaciones intensivas de porcinos en particular, y alto riesgo para aquellos vertidos ilícitos con capacidad de provocar contaminación de las aguas superficiales y subterráneas por nitratos, inutilización de terrenos y malos olores en el entorno [39]. Sin embargo, este tipo de riesgo ya se viene contemplando desde el año 2000 en la Directiva 2000/60/CE del Parlamento Europeo, en

la cual se establece una serie de estrategias en la lucha contra la contaminación del agua de una forma más completa y efectiva, con medidas que reduzcan los vertidos y con el objetivo de mejorar la calidad de las aguas superficiales [9].

Los métodos más avanzados para el tratamiento de aguas residuales urbanas, que se aplican en países desarrollados, Sistemas de Depuración Convencional (SDC), están basados en procesos mecánicos, biológicos y químicos. El empleo de este tipo de tecnologías exige disponer de una serie de recursos, tales como sistemas de aireación, tratamientos químicos y transporte [30]. Para ello es necesario contar con una considerable infraestructura, además de fuentes de energías, elevados costes de operación, control de emisiones de gases efecto invernadero y suministro de productos químicos [50]. En el caso de pequeñas comunidades o aquellas que se encuentran en vías de desarrollo esta opción resulta difícil o, en algunos casos, casi imposible de alcanzar ya que debe adecuarse la escasez de los recursos con aportaciones financieras y con la naturaleza física del terreno. Además, el problema se agrava cuando estas comunidades, debido a su lejanía o a sus condiciones orográficas, se encuentran desconectadas de los sistemas de depuración centralizados y disponen de escasa capacidad de suministro eléctrico de la red general de energía eléctricas [2]. De ahí que, se hayan practicado soluciones basadas en SDC adaptadas a pequeños núcleos [50]. Sin embargo, la implantación, puesta en marcha y mantenimiento de este tipo de instalaciones conlleva, también, una serie de costes que no siempre es posible hacer frente en todos los casos. En resumen, por todo ello, junto con la necesidad de disponer de mano de obra cualificada y de recursos técnicos y económicos, el establecimiento de SDC es muy difícil de asumir por pequeñas comunidades rurales. Para estos casos, se precisan de soluciones técnicas simples y con unos costes razonables [30, 48].

La adopción de SDN en pequeñas comunidades aporta una serie de ventajas tales como; minimización en el gasto energético, simplificación en el mantenimiento y en la explotación, eficacia y regularidad en el funcionamiento frente a grandes oscilaciones de caudal y carga contaminante, se facilita la gestión de los lodos generados en los procesos de depuración y son respetuosos con el medio ambiente [20]. La aplicación de técnicas descentralizadas basadas en SDN y que impliquen procesos anaerobios, SDN-A, tipo lagos, lagunas y estanques naturales y artificiales, resulta una excelente opción para el tratamiento de aguas residuales, siempre que se cumpla con los requerimientos medioambientales, ya que son de muy fácil manejo y precisa de poca capacidad humana para su mantenimiento [2]. Existen casos en el que los SDN-A han sido aprovechados para la producción de biogás mediante la colocación de

una cubierta externa. En Australia y EEUU se ha llevado a cabo esta práctica desde hace años para el tratamiento de efluentes procedentes de mataderos, y se ha utilizado el biogás resultante para generar energía, calor y como combustible para vehículos [4]. Otras veces se han empleado Reactores Anaerobios (RA) en combinación con humedales artificiales de tipo subsuperficial. En estos sistemas mixtos, los RA actúan como un complemento del humedal al que se le asigna las funciones de tratamientos previos. En estos casos, mediante la aplicación de un procedimiento adecuado, la reducción de los costes de construcción del humedal puede alcanzar valores de más del 40 % [2, 8]. Esto se debe a que con una actuación previa se logra disminuir la carga orgánica, por tanto, se reduce también la capacidad necesaria de tratamiento de propio humedal. A ello se le suma el riesgo de colmatación de su lecho filtrante que, como consecuencia, la vida útil del humedal se ve incrementada. En definitiva, a causa de todas estas ventajas, los SDN se vienen aplicando cada vez más, dentro de las tecnologías alternativas existentes en todo el mundo, para el tratamiento de aguas residuales en zonas rurales [30, 48].

De forma tradicional, el tratamiento de los residuos generados en las explotaciones pecuarias en la Islas Canarias ha estado realizándose a través de la implantación de SDC cuyos costes de mantenimiento y explotación resultan muy difícil de afrontar por parte del ganadero [38]. Sin embargo, los SDN empiezan a fomentarse en 1998-99, a través del Instituto Tecnológico de Canarias (ITC), mediante una primera iniciativa en el Aula de La Laurisilva del Cabildo de Gran Canaria [20]. Poco después, en el 2000, se promueven otros proyectos en el Campus de Tafira de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria y en la Finca de la Data del Coronado del Cabildo de Tenerife que generan líneas de trabajo, no solo en el ámbito público sino también en el sector privado. En el año 2004 se inicia el proyecto DEPURANT, cofinanciado por el programa europeo INTERREG-Espacio Atlantico y liderado por el ITC, a través de un consorcio de entidades de Andalucía, Norte de Portugal y Sur de Francia y Canarias se desarrolla conocimientos y herramientas entorno a los SDN dando fruto numerosos proyectos en Canarias, Andalucía, Francia y Portugal [55]. Otros trabajos puesto en práctica desde el i-UNAT y del Departamento de Ingeniería de Procesos de La Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, en colaboración con el Cabildo de Gran Canaria, consistieron en el diseño y puesta en marcha de varios SDN a escala real junto a explotaciones ganaderas para el estudio y análisis de sus idoneidades cuya recopilación de datos, durante seis años, sirvieron de base para una Tesis Doctoral, y posteriormente para

una publicación en revista científica internacional [38, 39]. Por último, en el año 2019 le es concedido a la ULPGC el proyecto MITIMAC del Programa de Cooperación Iteerreg V-A España-Portugal (Madeira-Azores-Canarias) 2014-2020 y cofinanciado por el fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER). Este proyecto, liderado por Miembros del i-UNAT, incluye esta línea de investigación, dentro de las actuaciones propuestas, para mitigar el cambio climático en la Macaronesia mediante la reducción de los gases de efecto invernadero. Como consecuencia de todo ello, el punto de mira en este trabajo ha sido puesto en el estudio de los SDN-A.

2.2. Objetivos de la Tesis

Los SDN-A son biorreactores con alta carga orgánica, periodos de retención hidráulica relativamente corto, de 1 a 7 días, y contenido en oxígeno muy bajo o nulo durante todo el año [57]. La remoción del contaminante se debe, principalmente, a la combinación de una serie de procesos físicos, fisicoquímicos y bioquímicos, siendo estos últimos desempeñado por una serie de bacterias y arqueas especializadas en cada una de las etapas que forma parte del proceso de Digestión Anaerobia (DA). El funcionamiento de los SDN-A es equiparable al de los reactores de flujo pistón, digestor ideal donde la composición del fluido varía de un punto a otro a lo largo de la dirección del flujo y en el que el proceso de mezcla se lleva a cabo en la dirección radial pero no en la dirección del movimiento del flujo [14]. Por ello, cada recarga de líquido hecha por el pistón se considera como una entidad separada que va recorriendo el digestor, el cual funciona como si se tratase de una tubería de grandes dimensiones. Este hecho le confiere a los SDN-A una serie de ventajas tales como; un uso apropiado del volumen de trabajo, una mayor capacidad para sobrecargas, una mayor protección frente a la acidificación y la generación de perfiles a lo largo del digestor [7].

Debido a su compleja naturaleza, la optimización de las tecnologías orientadas entorno a la DA está íntimamente ligadas a la disponibilidad de modelos matemáticos tanto para su diseño como para su control [33]. En concordancia con gran parte de las publicaciones, la necesidad de desarrollar estos tipos de modelos se justifica puesto que nos permite entender la dinámica de los procesos anaerobios, facilita la posibilidad de perfeccionamiento y, de forma general, ayuda a mejorar el rendimiento del digestor.

De ahí que el objetivo principal de esta investigación haya sido el planteamiento de un

modelo matemático para describir, con suficiente exactitud, el comportamiento dinámico de los microorganismos anaerobios que intervienen en los procesos de depuración de aguas residuales mediante sistemas naturales basados en lagunajes. Como objetivo adicional se ha propuesto el desarrollo de una metodología de cálculo a fin de obtener resultados idóneos para la caracterización cuantitativa y cualitativa del comportamiento dinámico de los distintos fenómenos ocurridos en el proceso de depuración en los SDN-A.

2.3. Trabajos publicados

En este apartado se presenta la relación de los trabajos publicados donde figura los autores, título, fecha de publicación, y referencia, así como datos relevantes de la revista; nombre, editorial, JCR, posición y cuartil.

En dicha correlación se listan aquellos artículos en los que este Doctorando figura como investigador principal, otros relacionados con la línea de trabajo y donde consta la participación como colaborador. Y por último aparecen las publicaciones que tienen que ver con aquellas colaboraciones científicas con otras líneas de investigación donde ha habido sinergias en trabajos cooperativos. Considerándose, todo ello, como un aspecto esencial dentro de la actividad de cualquier investigador.

2.3.1. Como autor principal

TÍTULO: Application of a model-based method for hydrodynamic processes in constructed wetland for the management of livestock wastewater based on finite elements method.

AUTORES (P.O.de firma): Saulo Manuel Brito Espino¹, Sebastián Ovidio Pérez Báez¹, Alejandro Ramos Martín², Carlos Alberto Mendieta Pino².

AFILIACIONES:

- (1) Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino), spe-rez@dip.ulpgc.es (S.O. Pérez-Báez)
- (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín), carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino)

REFERENCIA-DOI: 10.5004/dwt.2019.23940. VOL.152, PP. 92-98.

REVISTA: Desalination and Water Treatment

EDITORIAL: DESWATER



LUGAR DE PUBLICACIÓN: Hopkinton- Massachusetts (USA)

FECHA DE PUBLICACIÓN: FEBRERO 2019

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) → 0,854

DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
WATER RESOURCES	84/94	Q4
ENGINEERING, CHEMICAL	118/143	Q4

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

TÍTULO: Application of a mathematical model to predict simultaneous reactions in anaerobic plug-flow reactors as a primary treatment for constructed wetlands.

AUTORES (P.O.de firma): Saulo Manuel Brito Espino¹, Sebastián Ovidio Pérez Báez¹, Alejandro Ramos Martín², Carlos Alberto Mendieta Pino².

AFILIACIONES:

- (1) Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino), spe-rez@dip.ulpgc.es (S.O. Pérez-Báez)
- (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín), carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino)

REFERENCIA-DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.136244>, VOL. 713, PP 136244.

REVISTA: Science of the Total Environment

EDITORIAL: ELSEVIER

LUGAR DE PUBLICACIÓN: NETHERLANDS



FECHA DE PUBLICACIÓN: ENERO 2020

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) → 6.551

DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
ENVIRONMENTAL SCIENCES	22/265	Q1

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

TÍTULO: A Framework Based on Finite Element Method (FEM) for Modeling and Assessing the Affection of the Local Thermal Weather Factors on the Performance of Anaerobic Lagoons for the Natural Treatment of Swine Wastewater.

AUTORES (P.O.de firma): Saulo Manuel Brito Espino¹, Sebastián Ovidio Pérez Báez¹, Alejandro Ramos Martín², Carlos Alberto Mendieta Pino², Federico León Zerpa².

AFILIACIONES:

- (1) Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino), spe-rez@dip.ulpgc.es (S.O. Pérez-Báez)
- (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín), carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino), federico.leon@ulpgc.es (Federico León Zerpa)

REFERENCIA-DOI: <https://doi.org/10.3390/w13070882>, VOL. 13.

REVISTA: WATER

EDITORIAL: MDPI



LUGAR DE PUBLICACIÓN: SWITZERLAND

FECHA DE PUBLICACIÓN: MARZO 2021

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) → 2.524

DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
WATER RESOURCES	31/94	Q2

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

TÍTULO: Proposal of a Laboratory-Scale Anaerobic Biodigester for Introducing the Monitoring and Sensing Techniques, as a Potential Learning Tool in the Fields of Carbon Foot-Print Reduction and Climate Change Mitigation.

AUTORES (P.O.de firma): Saulo Brito Espino¹, Federico León Zerpa², Jenifer Vaswani Reboso¹, Alejandro Ramos Martín², Carlos Alberto Mendieta Pino¹.

AFILIACIONES:

- (1) Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino), federico.leon@ulpgc.es (Federico León Zerpa), jenifer.vaswani@ulpgc.es (J Vaswani-Reboso), carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino)
- (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín)

REFERENCIA-DOI: <https://doi.org/10.3390/w13172409>.

REVISTA: WATER

EDITORIAL: MDPI



LUGAR DE PUBLICACIÓN: SWITZERLAND

FECHA DE PUBLICACIÓN: 1 septiembre 2021

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) → 2.524

DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
WATER RESOURCES	31/94	Q2

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

2.3.2. Como colaborador en artículos relacionados directamente con este trabajo

TÍTULO: Management of slurry in Gran Canaria Island with full-scale natural treatment systems for wastewater (NTSW). One year experience in livestock farms.

AUTORES (P.O.de firma): Carlos Alberto Mendieta Pino², Alejandro Ramos Martín², Sebastián Ovidio Pérez Báez¹, Saulo Manuel Brito Espino¹. **AFILIACIONES:**

- (1) Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino), spear@dipl.ulpgc.es (S.O. Pérez-Báez)
- (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín), carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino)

REFERENCIA-DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2018.11.073>, VOL. 232.

REVISTA: JOURNAL OF ENVIRONMENTAL MANAGEMENT

EDITORIAL: ELSEVIER



FECHA DE PUBLICACIÓN: FEBRERO 2019

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) → 5.647

DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
ENVIRONMENTAL SCIENCES	33/265	Q1

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

TÍTULO: Natural treatment system for wastewater (NTSW) in a livestock farm, with five years of pilot plant management and monitoring.

AUTORES (P.O.de firma): Carlos Alberto Mendieta Pino², Sebastián Ovidio Pérez Báez¹, Alejandro Ramos Martín², Federico León Zerpa², Saulo Manuel Brito Espino¹.

AFILIACIONES:

- (1) Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino), spe-rez@dip.ulpgc.es (S.O. Pérez-Báez)
- (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín), carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino), federico.leon@ulpgc.es (Federico León Zerpa)

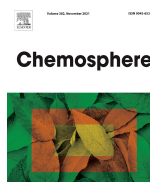
REFERENCIA-DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.131529>, Volumen 285.

REVISTA: CHEMOSPHERE

EDITORIAL: ELSEVIER

FECHA DE PUBLICACIÓN: DICIEMBRE 2021

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) → 6.596



DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
ENVIRONMENTAL SCIENCES	30/274	Q1

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

2.3.3. Como colaborador en otros artículos

TÍTULO: Climate Change Mitigation Strategy through Membranes Replacement and Determination Methodology of Carbon Footprint in Reverse Osmosis RO Desalination Plants for Islands and Isolated Territories.

AUTORES (P.O.de firma): Federico León Zerpa¹, Alejandro Ramos Martín², Jenifer Vaswani², Carlos Alberto Mendieta Pino², Saulo Manuel Brito Espino².

AFILIACIONES:

- (1) (1) University Institute of Intelligent Systems and Numerical Applications in Engineering, 35214 Las Palmas de Gran Canaria, Spain ; federico.leon@ulpgc.es (Federico León Zerpa)
- (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín), jenifer.vaswani@ulpgc.es (J Vaswani-Reboso), carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino), saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino),

REFERENCIA-DOI: <https://doi.org/10.3390/w13030293>, VOL. 13(3),293.

REVISTA: WATER

EDITORIAL: MDPI

LUGAR DE PUBLICACIÓN: SWITZERLAND

FECHA DE PUBLICACIÓN: ENERO 2021

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) → 2.524



DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
WATER RESOURCES	31/94	Q2

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

TÍTULO: Proposal to determine the carbon and ecological footprint of seawater reverse osmosis desalination plants considering the energy mix. Case study for the Canary Islands

AUTORES (P.O.de firma): Federico León Zerpa¹, Alejandro Ramos Martín², Yguanira Falcón Alvarado², Saulo Manuel Brito Espino².

AFILIACIONES:

- (1) Instituto Universitario de Sistemas Inteligentes y Aplicaciones Numéricas en Ingeniería, Universidad de las Palmas de Gran Canaria, Campus de Tafira Baja, 35017 Las Palmas de Gran Canaria, España; federico.leon@ulpgc.es (Federico León Zerpa)
- (2) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (Alejandro Ramos Martín), yguanira.falcon101@alu.ulpgc.es (Yguanira Falcón Alvarado), saulobrito09@gmail.com (Saulo Manuel Brito Espino)

REFERENCIA-DOI: <https://doi.org/10.5004/dwt.2021.27353>, VOL. 230(2021)9-16.

REVISTA: DESALINATION AND WATER TREATMENT

EDITORIAL: DESWATER

LUGAR DE PUBLICACIÓN: Hopkinton- Massachusetts
(USA)



FECHA DE PUBLICACIÓN: AGOSTO 2021

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) → 0,854

DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
WATER RESOURCES	84/94	Q4
ENGINEERING, CHEMICAL	118/143	Q4

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

TÍTULO: Proposal for modelling and numerical simulation with SCILAB for learning the continuous and discontinuous dynamics of biological and anaerobic digesters

AUTORES (P.O.de firma): Federico León Zerpa¹, Alejandro Ramos Martín¹, Saulo Manuel Brito Espino², Carlos Alberto Mendieta Pino¹, Tania Garcia-Ramirez ¹.

AFILIACIONES:

- (1) Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín), carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino), federico.leon@ulpgc.es (Federico León Zerpa)
- (2) Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas de Gran Canaria, España; saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino), spe-rez@dip.ulpgc.es (S.O. Pérez-Báez)

REFERENCIA-DOI: <https://doi.org/10.5004/dwt.2021.27535>, VOL. 234 (2021) 15–21.

REVISTA: DESALINATION AND WATER TREATMENT

EDITORIAL: DESWATER

LUGAR DE PUBLICACIÓN: Hopkinton- Massachusetts
(USA)



FECHA DE PUBLICACIÓN: SEPTIEMBRE 2021

FACTOR DE IMPACTO: PUBLICADO (JCR-2019) → 0,854

DESCRIPCIÓN CATEGORÍA	POSICIÓN:	Cuartil
WATER RESOURCES	84/94	Q4
ENGINEERING, CHEMICAL	118/143	Q4

REVISIÓN POR AL MENOS DOS EXPERTOS INDEPENDIENTES

2.4. Justificación de la unidad temática de la Tesis

La unidad temática de esta Tesis Doctoral por compendio se sustenta en que los trabajos realizados constituyen una línea de investigación. A través de los artículos se materializa la correspondencia entre el planteamiento de la investigación, el método seguido y los resultados obtenidos. Si bien para la exposición del problema se ha seleccionado, en cada uno de los artículos, un modelo tipo de SDN todos ellos coinciden en los siguientes aspectos; (1) Se trata de tecnologías exentas de mecanización. (2) Están basadas en sistemas de flujo libre, copian los procesos que se dan en lagos y ríos donde el movimiento del contaminante se debe a la existencia de un gradiente de concentración y a la presencia de un campo de velocidades en el fluido que va a depender de los caudales que se establezcan en la carga y descarga del sistema. (3) La biodegradación del contaminante se debe, fundamentalmente, al metabolismo de los microorganismos anaerobio. Es por ello que cada una de estas publicaciones mantiene una vinculación con el resto mediante una secuenciación que tiene que ver con la evolución del trabajo, y una interconexión con los manuscritos publicados a través un modelo y una metodología de base.

De ahí que estos artículos han sido elaborados a lo largo de un trabajo de investigación, bien definido y planificado, orientado al desarrollo de un modelo matemático que sirva para el diseño y la gestión de los SDN-A donde tiene lugar procesos anaerobios, en su totalidad o en parte de ellos. Uno de los aspectos innovadores que se presenta en estos trabajos, y así aparece reflejado en todos los artículos publicados, ha sido la implementación del ADM1 en las ecuaciones del modelo para la descripción de los fenómenos bioquímicos y fisicoquímicos que comprende los procesos de DA.

Con el artículo **“Application of a model-based method for hydrodynamic processes in constructed wetland for the management of livestock wastewater based on finite elements method”**, se estudia el comportamiento de un humedal artificial con una laguna anaerobia central a través de un modelo en 2D. El modelo ha sido confeccionado a partir de las ecuaciones de ADR y Stokes, resultando un conjunto de EDP de segundo orden y de tipo parabólico. Además, se ha implementado el modelo ADM1 para describir los procesos bioquímicos y fisicoquímicos relacionados con la DA. Entre los diversos factores que influyen en el crecimiento de la biomasa, se han considerado dos: uno bioquímico, relacionado con la concentración de cada uno de los diferentes tipos de sustratos que intervienen en

cada una de las fases comprendida dentro del proceso de la digestión, y otro fisicoquímico, donde no interviene los microorganismos y es debido a las concentraciones de ácidos y bases libres, expresado como pH. Por medio del MEF de Galerkin y el diseño de una metodología de cálculo, a través de un diagrama de flujo, fue posible resolver el sistema de ecuaciones definidas en el modelo que, a priori, se mostraba difícilmente abordable desde el punto de vista analítico. La estrategia para confeccionar el flujograma, Fig. 2.1 - caso a), se basa en lo siguiente: Se trata de un cálculo secuencial. Cada uno de los subprocesos definido en el ADM1, Fig B.3, es calculado de forma reiterada hasta lograr el estado estacionario. Seguidamente se continúa el cálculo en el siguiente subproceso procediendo de igual modo que en el anterior. Basándose en este diagrama de flujo se diseñó un algoritmo en FreeFem++ a través del cual se pudo simular las distintas variables que intervienen en el proceso, y como resultado de todo ello, se concluyó reseñando la capacidad del modelo para describir el comportamiento de la biomasa dentro un humedal artificial con lagunas anaerobias.

En el segundo artículo, **“Application of a mathematical model to predict simultaneous reactions in anaerobic plug-flow reactors as a primary treatment for constructed wetlands”**, se diseña un modelo, a partir del original, para el estudio de un digestor anaerobio que actúa como una instalación para tratamientos previos a un humedal artificial dentro de un sistema de tratamiento de aguas residuales tipo mixto o compartido. Su funcionamiento se asemeja al de un reactor flujo pistón donde la mezcla heterogénea fluye, de manera natural y continua, desde la alimentación hasta el desagüe del reactor. Una de las novedades de este modelo es que se incorpora una serie de funciones de inhibición además de las concernientes al pH que figuraba en el artículo anterior. Estas son: inhibición por amoníaco libre, limitación por amoníaco total y consumo competitivo entre el butirato y valerato. Con respecto a la metodología de cálculo, se mantiene la aplicada en el primer artículo, solo que, en este caso, se aumentó la densidad del mallado para obtener un resultado con mayor precisión.

En el tercer artículo, **“A framework based on finite element method (FEM) for modelling and assessing the affection of the local thermal weather factors on the performance of anaerobic lagoons for the natural treatment of swine wastewater”** el modelo va dirigido a los SDN-A que son utilizados para el tratamiento de aguas residuales con alta carga orgánica. En este ejemplo se considera el efecto de la temperatura en el entorno del sistema y su influencia en el proceso de remoción de la materia orgánica. Para

ello se incorpora, al modelo base, las ecuaciones de la energía junto con una serie de valores de frontera que están afectados por las condiciones térmicas del entorno. Aparte del uso de MEF de Galerkin, se reformula la metodología empleada en los anteriores manuscritos para generar otra nueva, innovadora, sustentada en un diagrama de flujo basada en el empleo de MPI, Fig. 2.1 - caso b). De manera general, los MPI han sido utilizados para realizar cálculos en paralelo de EDP en subdominios mediante técnicas de discretización para lograr así mayor precisión en los resultados. Sin embargo, no es éste el uso que se le ha dado al MPI en este trabajo. Debido a que se trata de un dominio de gran dimensión y geometría regular, y el flujo atraviesa el sistema es de tipo laminar, no precisa de este tipo de tratamientos. En este caso, el MPI ha sido empleado para el cálculo, simultáneo, de cada una de las variables que intervienen en el proceso, tal como si cada una de las fases transcurrieran de manera independiente en planos superpuestos, donde existe un intercambio de variables de manera reciproca y sincronizada. Con todo ello se ha podido desarrollar un procedimiento que permite acercarse más a la realidad del funcionamiento de los SDN-A.

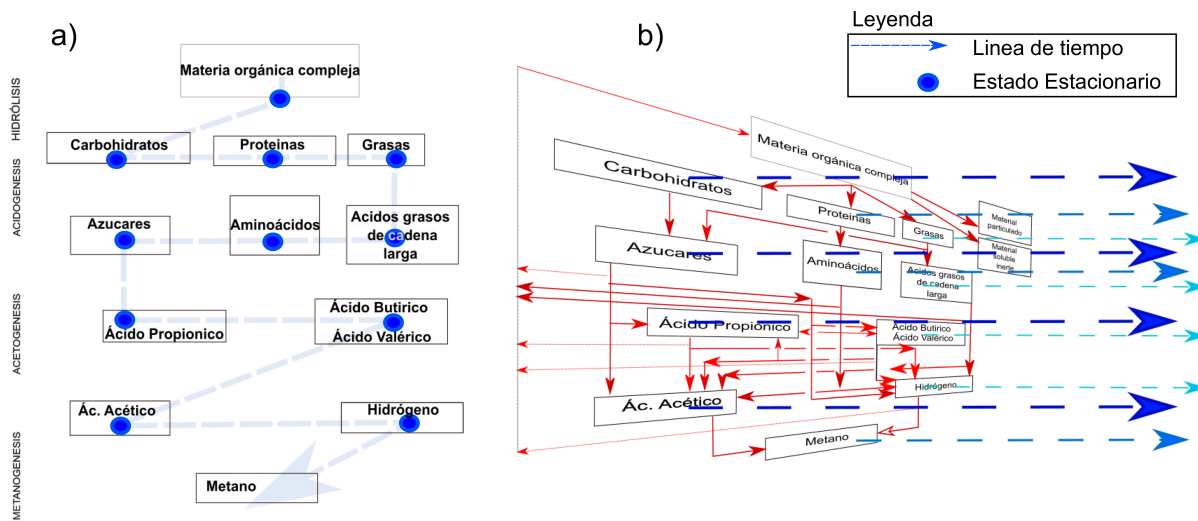


Figura 2.1: Diagramas de flujo planteados, para la resolución del modelo. a) La línea de flujo, discurre por cada una de las fases que intervienen en la DA, pasa a la siguiente una vez alcanza el estado estacionario. b) Existen líneas de flujo para cada una de las fases y se establece intercambio de información entre ellas.

3 Investigación Bibliográfica

3.1. Introducción

Los SDN constituye un tipo de tecnología que es usada para el tratamiento de aguas residuales donde la remoción de la materia orgánica contenida en las misma se lleva a cabo a través de los procesos físicos, químicos y biológicos que se manifiestas de forma espontánea en la naturaleza. Para ello precisa de unos periodos largos de almacenamiento, tiempo de residencia, además mayores superficies de ocupación con respecto a los sistemas convencionales. Sin embargo, precisa de un bajo consumo de energía, prácticamente las relacionadas con los equipos de bombeo o instalaciones de desbastes, ya que la energía aportada en el proceso de descontaminación resulta nula. Son adecuadas para el tratamiento de aguas en medios rurales y tienen una capacidad de remoción alta, así como la posibilidad para la reutilización del effluente generado. Dentro de los sistemas de tratamiento de aguas residua-

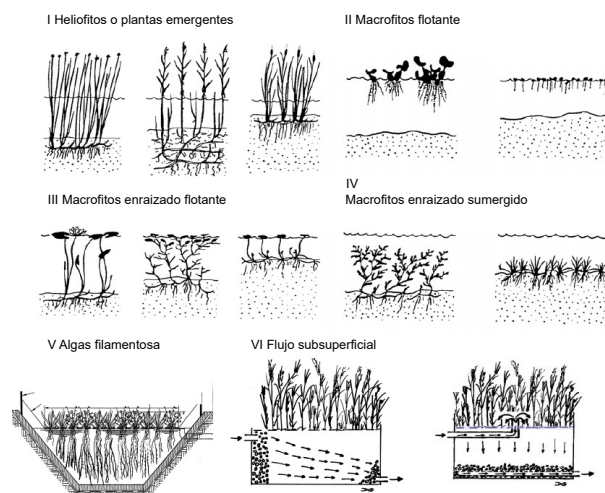


Figura 3.1: Representación esquemática de distintos tipos de humedales artificiales [45]

les se distinguen; las plantas acuáticas, los humedales artificiales, los métodos de aplicación

al terreno (baja carga, infiltración rápida, riego superficial) y las lagunas. El conocimiento existente acerca del funcionamiento de los SDN resulta incompleto debido a la complejidad de los fenómenos físicos, químicos y biológicos que las afecta. Por ello el conocimiento que se tiene de toda esta biotecnología basadas en SDN se apoyan en estudios específicos y estudios empíricos [47].

3.2. Modelos de Caja Negra

Los Modelos de Caja Negra (MCN) son modelos basados, simplemente, en la relación funcional existente entre la entrada y salida de un sistema sin tener en consideración los procesos internos que tienen lugar dentro de ellos [46, 58].

De manera tradicional, en el diseño de los SDN se han venido empleando métodos sustentados en una serie de **Reglas Generales**, reglas de oro, a partir de observaciones de un amplio rango de SDN similares en el que se aporta información referente a las condiciones climáticas y las características del afluente. Se trata, por tanto, de una metodología rápida, pero a la vez, muy rudimentaria [46, 47].

En la mayor parte de los MCN, los datos obtenidos son tratados mediante **Análisis de Regresión**. Se trata de una técnica estadística muy útil para inferir la relación entre una variable dependiente y otra independiente [28, 42]. En el análisis de regresión, el objetivo es obtener una predicción de una variable, dados los valores de las otras. Sin embargo, este modelo trata de agrupar, solamente, en dos o tres parámetros todos los procesos que suceden dentro en un SDN. Existe, por ello, una sobre simplificación de dichos procesos, donde quedan pendiente factores tan importantes como el clima, el material que conforma el fondo, etc... Así pues, el estudio se queda focalizado en una gran variedad de ecuaciones de regresión, y por ello con una gran incertidumbre en el diseño [46].

Los modelos matemáticos o computacionales, **Artificial Neural Network-Red Neuronal Artificial (ANN)**, son modelos tipo conexionista que se emplea muy generalizado en el reconocimiento de patrones y en el control de procesos que emergen de redes formadas por unidades sencillas interconectadas. A través de estos modelos se establece una relación entre los datos obtenidos en el proceso que tienen lugar dentro del SDN, el posible mecanismo de trabajo de la red biológica, y el aprendizaje a través de la estadística y la teoría de la

información [54]. Kiiza et al. [26] plantea un modelo basado en el método de ANN en humedales artificiales, donde los datos de entradas proceden de técnicas exploratoria estadísticas tales como el análisis de la varianza (ANOVA) y el Análisis de Componentes Principales. Los resultados muestran, de forma generalizada, una predicción de la remoción de nitrógeno y fósforo con menos variables en la entrada del humedal y reduciendo el tiempo y el coste de la monitorización. Otros autores han empleado ANN, tales como Akratos et al. [1] para predecir el comportamiento en humedales artificiales de flujo horizontal subsuperficial o Granata et al. [15] para evaluar la actual evapotranspiración en lagunas.

Otros **Enfoques Estadísticos** han sido llevado a cabo dentro de los MCN. Kumar and Singh [29] ha utilizado Microsoft Excel y el programa de análisis científico paleontológico y estadístico Paleontological Statistics donde los datos de correlación entre las concentraciones de contaminante del afluente y el efluente son verificados a través del análisis de regresión de variables múltiples para una variable independiente y n variables dependientes.

3.3. Modelos de Caja Gris

Los Modelos de Caja Gris (MCG) son aquellos que se obtienen mediante la combinación de modelos de tipo mecanicistas y modelos totalmente empíricos. La existencia de este tipo de modelos se debe, por un lado, a la necesidad de definir modelos más eficientes y, por el otro, la imposibilidad de describir el comportamiento del sistema mediante el uso exclusivo de cualquiera de los dos por separado.

Dentro de la tipología de MCG se encuentran los denominados **Modelos de Cinética de Primer Orden**, que tratan de explicar los procesos de transporte de masa, volatilización, sedimentación y absorción que tienen lugar en los SDN a través de una ecuación del tipo; $\frac{C_{out}}{C_{in}} = e^{-k_v t}$, donde C_{out} [g/L] es la concentración de DQO del efluente, C_{in} [g/L] la concentración de DQO del afluente, k_v [md^{-1}] es la constante de descomposición volumétrica y t [d] es el tiempo de retención hidráulica. Numerosos autores [21, 25, 27, 52, 53] han publicado artículos referentes a la aplicación de modelos de cinética de primer orden en humedales artificiales donde dichas aproximaciones han sido utilizada para predecir, al menos, la mayor parte de los contaminantes, tales como la materia orgánica, los sólidos suspendidos, nitrógeno y el potencial redox.

Dentro de los más recientes, Gajewska et al. [10] ha estudiado la eficiencia de remoción en humedales artificiales de flujo subsuperficial y de tipo mixto, horizontal y vertical, con diferentes configuraciones para climas templados. Para el cálculo emplea la siguiente ecuación; $MRR = [(C_{in} \times Q_{in}) - (C_{out} \times Q_{out})/A]$ $[gm^{-2}d^{-1}]$ donde A $[m^2]$ es el área del lecho del humedal artificial, Q_{in} y Q_{out} $[m^3d^{-1}]$ son las medias de los caudales de entrada y salida y C_{in} y C_{out} $[mgL^{-1}]$ las medias de las concentraciones de entrada y salida.

Kadlec [25] plantea que el desajuste de los modelos de cinética de primer orden se debe a las variaciones causadas por los cambios impredecibles en las fluctuaciones en el flujo de entrada y en las concentraciones, además de los cambios en el almacenamiento interno del sistema debido a las condiciones externas, de tipo atmosféricas, característica de la actividad que genera esa agua residual, así como otros factores referente al propio ecosistema. Sin embargo, aunque los modelos de cinética de primer orden han sido considerados apropiados ya que ofrece una razonable aproximación en un rango adecuado de funcionamiento de contaminantes para el diseño de humedales artificiales, diversos autores recomiendan la necesidad de estudiar las reacciones que tienen lugar dentro del sistema para así ayudar a los diseñadores a armonizar unas reglas o guías de diseños [25].

Para corregir las deficiencias que ofrece los modelos de cinéticas de primer orden Shepherd et al. [49] introduce el **Modelo de Retardo Dependiente del Tiempo** para la remoción de demandas químicas de oxígenos, reemplazando las concentraciones, C^* , por otros parámetros K_0 y b , donde se asume que las tasas de remoción decrece a lo largo del tiempo, ya que la sustancia más fácil de biodegradar se eliminarán primero y de manera rápida, dejando, luego, una solución con componentes con menos capacidad de biodegradación y por ello una cinética mucho más lenta. Estos cambios continuos en la composición de la solución pueden representarse mediante una ecuación de primer orden con variación volumétrica continua y con tasa, k_v constante; $k_v = \frac{K_0}{b \cdot \tau + 1}$ donde K_0 $[d^{-1}]$ es la tasa constante inicial, b $[d^{-1}]$ es el coeficiente de tiempo retardo y τ $[d]$ es el tiempo de retención. Este modelo resulta más apropiado para el diseño de los humedales artificiales, ya que describe una disminución de la DQO, o cualquier otro componente, con un mayor tiempo de tratamiento en lugar de un valor residual constante C^* .

El **Modelo de Reactores Conectados en Series (TIS)** se trata de un modelo matemático sencillo, de un solo parámetro, que se aplica a cualquier tipo de cinética. Se usa

para modelar el régimen de flujo correspondiente a un reactor tipo flujo pistón. Este modelo considera una hipotética serie de tanques agitados iguales e ideales y colocados en serie de manera que el parámetro es el número de tanques. Goswami et al. [14] describe las mediciones de las distribuciones de los tiempos de residencias, el flujo varía según el tramo, en humedales artificiales de flujo horizontal subsuperficial con el uso de técnicas de radiosonda. Previamente, se hace uso de un modelo de reactores conectados en serie con el propósito de simular las curvas de distribución de dicha variable.

De todas las ecuaciones empíricas sobre la tasa de crecimiento específico propuesta para la DA, la **Ecuación de Monod** es la más usada hoy en día, que describe el crecimiento de los microorganismos de forma general y las bacterias productoras de hidrógeno en particular. Se trata de una ecuación análoga a la expresión para la cinética enzimática de Michaelis-Menten que se corresponde con una función hiperbólica $\mu = \mu_{max} \frac{S}{S+K_S}$ en la que la tasa de crecimiento específica μ [h^{-1}] es función de una única concentración de sustrato limitante y está sujeta a la saturación del sustrato cuando $S \gg K_S$. [13] y Mitchell and McNevin [40] plantea la ecuación de Monod para humedales artificiales de flujo horizontal subsuperficial, mientras que Stefanakis et al. [51] lo usa para flujos verticales.

3.4. Modelos de Caja Blanca

Los Modelos de Caja Blanca (MCB), llamados también Modelo Basado en Procesos (MBP). Se trata de modelos matemáticos donde se van a considerar todas las relaciones existentes entre las variables relevantes a través de un software que va a servir de soporte para organizar dichas relaciones de manera adecuada. Estos están basados en leyes de conservación físicas y químicas. Dentro de los MBP, en función del SDN objeto del estudio, cabe distinguir;

3.4.1. Humedales Artificiales de Flujo Superficial

Gargallo et al. [11] desarrolla un MBP siguiendo la estructura de Activated Sludge Model 1 (ASM1) de Henze et al. [17] para la simulación de la remoción del nitrógeno y basándose en la relación existente entre el rendimiento de la desintegración de la materia orgánica y el nitrógeno, especialmente en el proceso de desnitrificación. A igual que Constructed Wetland Model No1 (CWM1), se asume la suma de nitrito y nitrato y para el cálculo estequiométrico

se considera todo nitrato. El modelo simula la hidrólisis de materia orgánica a través de los microorganismos heterótrofos, tanto aerobio como anaerobios. Para el cálculo se emplea el paquete de software **AQUASIM** [43]. Dentro de las conclusiones, se indica la necesidad de clarificar la distribución de los microorganismos a lo largo de la superficie dentro del sistema ya que podría responder cuestiones tales como donde tiene lugar los procesos dentro del sistema y como afecta la distribución de la biomasa a la comunidad microbiana.

Dentro de los modelos orientados a humedales artificiales de flujo superficial se ha desarrollado **SURFWET** [3]. Se trata de un modelo matemático, con una aproximación integral de los procesos bioquímicos más relevantes, aerobios, anóxicos y anaerobios, en un humedal artificial. Se centra en los procesos físicos y bioquímicos que envuelven la degradación de contaminantes, materia orgánica, nitrógeno, fósforo y sólidos suspendidos, a través de bacterias, macrófitos y fitoplancton. Este modelo considera reactores que funcionan a mezcla completa, y la formulación biocinética se basa en los modelos ASM1 [17] y CWM1 [32], planteando 16 componentes y 27 procesos diferentes.

3.4.2. Humedales Artificiales de Flujo Horizontal Subsuperficial

Langergraber et al. [32] presenta un modelo biocinético que describe los procesos de transformación y degradación de la materia orgánica y nitrógeno tanto para humedales de flujo horizontal como vertical y cuyo objetivo es simular la concentración del efluente. También incluye otros procesos tales como la hidrodinámica en medios porosos, influencia de las plantas, el transporte de partículas, o materias, suspendidas que describen el proceso de colmatación y el proceso de absorción. Este modelo ha sido implementado en muchas plataformas de simulación tales como COMSOL MultiphysicTM. A través de la cual se ha desarrollado el modelo **BIO-PORE** [47]. Este considera 18 componentes en vez de los 16 que figuran en CWM1 y las partículas inertes se dividen en fases sólida y líquida. En este se incluye un número limitado de contaminantes.

Dentro de esta categoría cabe destacar el modelo **SubWet 2.0**, desarrollado en el Centro de Tecnología Medioambiental Internacional de la División de Tecnología, Industria y Economía de la unidad de Medio Ambiente de las Naciones Unidas (UNEP-DTIE-IETC) y diseñado en un principio para Humedales Artificiales de Flujo Horizontal Subsuperficial (HSSF-CW), empleándose también para modelar Humedales Artificiales de Flujo Vertical

Subsuperficial (VSSF-CW) para el tratamiento de aguas domésticas [19]. El modelo utiliza 25 ecuaciones EDP y 16 parámetros tal como lo describe Joergensen and Fath [23] pudiendo simular la remoción de nitrógeno, en sus formas de nitrato, amonio y nitrógeno orgánico y fósforo totales en miligramos por litros así como su eficiencia de remoción en porcentajes.

Kadaverugu [24] propone un modelo para HSSF-CW para el tratamiento de aguas domésticas a través del entorno **OpenFOAM**®, software de código abierto desarrollado para la Dinámica de Fluido Computacional (DFC). Este describe el movimiento del fluido no lineal en un medio poroso, a través del fenómeno ADR, del contaminante en el que se incluye una cinética función de la temperatura. La utilidad de este modelo estriba en su capacidad para la representación, en un espacio temporal, de perfiles de contaminantes, constituyendo una herramienta ideal para los diseños de los SDN. Las ecuaciones correspondientes de continuidad y momentos vienen dadas por Maurer et al. [36]

3.4.3. Humedales Artificiales de Flujo Vertical Subsuperficial

La complejidad de estos tipos de modelos se debe al estado de saturación variable que presenta el humedal en contraposición de aquellos modelos que hacen referencia a condiciones saturadas. El más popular dentro de este grupo es el **CW2D**, desarrollado por Langergraber and Šimůnek [31] a partir del **HYDRUS-2D**, paquete informático para simulación del flujo de agua, calor y diversas sustancias a través de medios porosos parcialmente saturados [12]. En este modelo se incluyen los siguientes componentes bioquímicos; oxígeno disuelto, cuatro componentes del nitrógeno (amonio, nitrito, nitrato y dinitrógeno), fósforo inorgánico y microorganismos (autótrofos y heterótrofos), siendo los procesos considerados; hidrólisis, mineralización de la materia orgánica, nitrificación (modelado como un proceso de dos pasos), desnitrificación, y procesos de lisis de los microorganismos. Se asume que todos los procesos así como el coeficiente de difusión depende de la temperatura, y la degradación bioquímica y procesos de transformación están basados en las expresiones de Monod.

El otro modelo considerado dentro de este grupo es el modelo numérico **FITOVER** propuesto por Giraldi et al. [12] y desarrollado principalmente para la simulación de flujo vertical, convirtiéndose en una herramienta práctica para la optimización del diseño y operación de dichos humedales. Este permite la descripción del flujo a través de un medio poroso, en condiciones saturadas y no saturadas, con un grado de precisión aceptable. En el

modelo se incluye el efecto de la evapotranspiración, además se ha desarrollado un módulo bioquímico donde se describe tanto la degradación de la materia orgánica que se basa en ASM1 [22]. La formulación dinámica de este modelo permite simular el comportamiento no estacionario de los VSSF-CW.

En ambos modelos, el método numérico empleado para la resolución de las ecuaciones planteadas es el método de Galerkin en elementos finitos.

Otros modelos han estudiado los fosfolípidos disueltos en VSSF-CW a través de paquetes informáticos comerciales, como es el caso de STELLA (Structural Thinking, Experiential Learning Laboratory with Animation), simulando la absorción por parte de las plantas y microorganismos.

Bibliografía

- [1] C. Akrotos, J. Papaspyros, and V. Tsihrintzis. An artificial neural network model and design equations for bod and cod removal prediction in horizontal subsurface flow constructed wetlands. Chemical Engineering Journal, 143(1-3): 96–110, 2008. ISSN 13858947. doi: 10.1016/j.cej.2007.12.029. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-50649100676&doi=10.1016%2Fj.cej.2007.12.029&partnerID=40&md5=9be60d21106ac837b4a89f1b68bccf3a>.
- [2] J. Alvarez, I. Ruíz, and M. Soto. Anaerobic digesters as a pretreatment for constructed wetlands. Ecological Engineering, 33(1):54 – 67, 2008. ISSN 0925-8574. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2008.02.001>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857408000293>.
- [3] D. G. Aragonés, D. Sánchez-Ramos, and G. F. Calvo. Surfvet: A biokinetic model for surface flow constructed wetlands. Science of The Total Environment, 723:137650, 2020. ISSN 0048-9697. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.137650>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004896972031161X>.
- [4] A. Aziz, F. Basheer, A. Sengar, Irfanullah, S. U. Khan, and I. H. Farooqi. Biological wastewater treatment (anaerobic-aerobic) technologies for safe discharge of treated slaughterhouse and meat processing wastewater. Science of The Total Environment, 686: 681 – 708, 2019. ISSN 0048-9697. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.05.295>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969719323368>.
- [5] D. Batstone, J. Keller, I. Angelidaki, S. Kalyuzhnyi, S. Pavlostathis, A. Rozzi, W. Sanders, H. Siegrist, and V. Vavilin. The iwa anaerobic digestion model no 1 (adm1). Water Science and Technology, 45(10):65–73, 2002. ISSN 0273-1223. URL <http://wst.iwaponline.com/content/45/10/65>.

- [6] Y. Çengel. Heat transfer: A practical approach. In McGraw-Hill series in mechanical engineering. cengel2003, 2003. ISBN 9780072458930. URL <https://books.google.es/books?id=nrbfpSZTwsKC>.
- [7] A. Donoso-Bravo, C. Sadino-Riquelme, D. Gómez, C. Segura, E. Valdebenito, and F. Hansen. Modelling of an anaerobic plug-flow reactor. process analysis and evaluation approaches with non-ideal mixing considerations. Bioresource Technology, 260:95 – 104, 2018. ISSN 0960-8524. doi: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2018.03.082>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852418304449>.
- [8] M. R. Elena Comino, Vincenzo A. Riggio. Constructed wetland treatment of agricultural effluent from an anaerobic digester. Ecological Engineering, 54:165 – 172, 2013. ISSN 0925-8574. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2013.01.027>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857413000426>.
- [9] EU. Directiva 2000/60/ce del parlamento europeo y del consejo por la que se establece un marco comunitario de actuación en el ámbito de la política de aguas. In Diario Oficial de las Comunidades Europeas. Parlamento Europeo y Consejo de la Unión Europea, Diario Oficial num L 327 de 22/12/200 p. 0001 - 0073, Oct. 2000. Diario Oficial de las Comunidades Europeas.
- [10] M. Gajewska, K. Skrzypiec, K. Józwiakowski, Z. Mucha, W. Wójcik, A. Karczmarczyk, and P. Bugajski. Kinetics of pollutants removal in vertical and horizontal flow constructed wetlands in temperate climate. Science of The Total Environment, 718: 137371, 2020. ISSN 0048-9697. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.137371>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969720308810>.
- [11] S. Gargallo, M. Martín, N. Oliver, and C. Hernández-Crespo. Biokinetic model for nitrogen removal in free water surface constructed wetlands. Science of The Total Environment, 587-588:145 – 156, 2017. ISSN 0048-9697. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.02.089>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969717303376>.
- [12] D. Giraldi, M. de Michieli Vitturi, and R. Iannelli. Fitovert: A dynamic numerical model of subsurface vertical flow constructed wetlands. Enviromental Modelling & Software, 25

- (5):633–640, 2010. ISSN 1364-8152. doi: <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2009.05.007>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364815209001200>.
- [13] B. Gopalakrishnan, N. Khanna, and D. Das. Chapter 4 - dark-fermentative biohydrogen production. In *Biohydrogen (Second Edition)*, Biomass, Biofuels, Biochemicals, pages 79–122. Elsevier, second edition edition, 2019. ISBN 978-0-444-64203-5. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-64203-5.00004-6>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444642035000046>.
- [14] S. Goswami, H. Pant, D. Poswal, J. Samantray, and S. Asolekar. Investigation of flow dynamics of wastewater in a pilot-scale constructed wetland using radiotracer technique. *Applied Radiation and Isotopes*, 147:70–75, 2019. ISSN 0969-8043. doi: <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2019.01.013>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969804318308169>.
- [15] F. Granata, R. Gargano, and G. de Marinis. Artificial intelligence based approaches to evaluate actual evapotranspiration in wetlands. *Science of The Total Environment*, 703: 135653, 2020. ISSN 0048-9697. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.135653>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969719356487>.
- [16] G. Guldentops and S. Van Dessel. A numerical and experimental study of a cellular passive solar façade system for building thermal control. *Solar Energy*, 149:102 – 113, 2017. ISSN 0038-092X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.solener.2017.03.078>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038092X1730261X>.
- [17] M. Henze, W. Gujer, T. Mino, and M. van Loosedrecht. Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3. In *IWA Publishing*. IWA, 10 2006. ISBN 9781780402369. doi: 10.2166/9781780402369. URL <https://doi.org/10.2166/9781780402369>.
- [18] J. Holm-Nielsen, T. A. Seadi, and P. Oleskowicz-Popiel. The future of anaerobic digestion and biogas utilization. *Bioresource Technology*, 100(22):5478 – 5484, 2009. ISSN 0960-8524. doi: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2008.12.046>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852408011012>.
- [19] J. J. Huang, X. Gao, G. Balch, B. Wootton, S. E. Jørgensen, and B. Anderson. Modelling of vertical subsurface flow constructed wetlands for treatment of domestic sewage and stormwater runoff by subwet 2.0. *Ecological Engineering*, 74:8–12,

2015. ISSN 0925-8574. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2014.10.027>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857414005631>.
- [20] ITC. Informe divulgativo sobre experiencias y resultados en la aplicación de sistemas de depuración natural (sdn) de aguas residuales. Departamento de AguaDivisión de Investigación, Desarrollo e Innovación Tecnológica (ITC, Mar. 2017. URL <https://www.tecnoaqua.es/media/uploads/noticias/documentos/itc-informe-sistemas-depuracion-natural-tecnoaqua-es.pdf>.
- [21] R. Jamieson, R. Gordon, N. Wheeler, E. Smith, G. Stratton, and A. Madani. Determination of first order rate constants for wetlands treating livestock wastewater in cold climates. Journal of Environmental Engineering and Science, 6(1):65–72, 2007. ISSN 14962551. doi: 10.1139/S06-028. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-38349127637&doi=10.1139%2fS06-028&partnerID=40&md5=faa2320985a5176c048f634da1d95f6d>.
- [22] Y. jing Song, Y. bo Xie, and D. Yudianto. Extended activated sludge model no. 1 (asm1) for simulating biodegradation process using bacterial technology. Water Science and Engineering, 5(3):278–290, 2012. ISSN 1674-2370. doi: <https://doi.org/10.3882/j.issn.1674-2370.2012.03.004>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1674237015302039>.
- [23] S. Joergensen and B. Fath. Fundamentals of ecological modelling: Applications in environmental management and research. In Advanced Systems Analysis (ASA). Elsevier, Amsterdam, February 2011. URL <http://pure.iiasa.ac.at/id/eprint/9701/>.
- [24] R. Kadaverugu. Modeling of subsurface horizontal flow constructed wetlands using open-foam®. Modeling Earth Systems and Environment, 2(2):55, 2016. ISSN 2363-6211. doi: 10.1007/s40808-016-0111-0. URL <https://doi.org/10.1007/s40808-016-0111-0>.
- [25] R. Kadlec. The inadequacy of first-order treatment wetland models. Ecological Engineering, 15(1-2):105–119, 2000. ISSN 09258574. doi: 10.1016/S0925-8574(99)00039-7. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0034118171&doi=10.1016%2fS0925-8574%2899%2900039-7&partnerID=40&md5=be7dccc9d0c5a5b0dd933fe57979017>.

- [26] C. Kiiza, S. qi Pan, B. Bockelmann-Evans, and A. Babatunde. Predicting pollutant removal in constructed wetlands using artificial neural networks (anns). Water Science and Engineering, 13(1):14–23, 2020. ISSN 1674-2370. doi: <https://doi.org/10.1016/j.wse.2020.03.005>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1674237020300193>.
- [27] R. Knight, V. Payne Jr., R. Borer, R. Clarke Jr., and J. Pries. Constructed wetlands for livestock wastewater management. Ecological Engineering, 15(1-2):41–55, 2000. ISSN 09258574. doi: [10.1016/S0925-8574\(99\)00034-8](https://doi.org/10.1016/S0925-8574(99)00034-8). URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0034034884&doi=10.1016%2fS0925-8574%2899%2900034-8&partnerID=40&md5=1a377003a91fad44aafb3d7e9b99116d>.
- [28] J. Kumar and Y. Zhao. A review on numerous modeling approaches for effective, economical and ecological treatment wetlands. Journal of Environmental Management, 92(3): 400 – 406, 2011. ISSN 0301-4797. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2010.11.012>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301479710004159>.
- [29] M. Kumar and R. Singh. Assessment of pollutant removal processes and kinetic modeling in vertical flow constructed wetlands at elevated pollutant loading. Environmental Science and Pollution Research, 26(18):18421–18433, 2019. ISSN 1614-7499. doi: [10.1007/s11356-019-05019-y](https://doi.org/10.1007/s11356-019-05019-y). URL <https://doi.org/10.1007/s11356-019-05019-y>.
- [30] J. Laitinen, K. Moliis, and M. Surakka. Resource efficient wastewater treatment in a developing area—climate change impacts and economic feasibility. Ecological Engineering, 103:217 – 225, 2017. ISSN 0925-8574. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2017.04.017>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857417301817>.
- [31] G. Langergraber and J. Šimůnek. Modeling variably saturated water flow and multicomponent reactive transport in constructed wetlands. Vadose Zone Journal, 4(4): 924–938, 2005. doi: <https://doi.org/10.2136/vzj2004.0166>. URL <https://acsess.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.2136/vzj2004.0166>.
- [32] G. Langergraber, D. P. L. Rousseau, J. García, and J. Mena. CWM1: a general model to describe biokinetic processes in subsurface flow constructed wetlands. Water Science

- and Technology, 59(9):1687–1697, 05 2009. ISSN 0273-1223. doi: 10.2166/wst.2009.131. URL <https://doi.org/10.2166/wst.2009.131>.
- [33] J. Lauwers, L. Appels, I. P. Thompson, J. Degrève, J. F. V. Impe, and R. Dewil. Mathematical modelling of anaerobic digestion of biomass and waste: Power and limitations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 39(4):383 – 402, 2013. ISSN 0360-1285. doi: <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2013.03.003>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128513000178>.
- [34] M. G. Lawrence. The relationship between relative humidity and the dewpoint temperature in moist air: A simple conversion and applications. *Bulletin of The American Meteorological Society*, 86(2):225–234, 2005. doi: 10.1175/BAMS-86-2-225. URL <https://doi.org/10.1175/BAMS-86-2-225>. doi:10.1175/BAMS-86-2-225.
- [35] W. Livestock. Transforming the livestock sector through the sustainable development goals. In *Food and Agriculture Organization of the United Nations*. A. Acosta, cc by-nc-sa 3.0 igo edition, 2018. URL <http://www.fao.org/3/CA1201EN/ca1201en.pdf>.
- [36] L. Maurer, C. Villette, N. Reiminger, X. Jurado, J. Laurent, M. Nuel, R. Mosé, A. Wanko, and D. Heintz. Distribution and degradation trend of micropollutants in a surface flow treatment wetland revealed by 3d numerical modelling combined with lc-ms/ms. *Water Research*, 190:116672, 2021. ISSN 0043-1354. doi: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116672>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135420312070>.
- [37] A. Medio-Ambiente. Plan de vigilancia e inspección ambiental de la consejería de medio ambiente y emergencias del cabildo de gran canaria. In *Cabildo de Gran Canaria*, 2017. URL <https://miacecsec.files.wordpress.com/2014/12/plan-de-vigilancia-de-gran-canaria.pdf>.
- [38] C. A. Mendieta-Pino. *Evaluación y modelización de sistemas de tratamiento no convencional o natural para efluentes procedentes de explotaciones ganaderas de porcino en la isla de gran canaria*. PhD thesis, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, Nov. 2015.
- [39] C. A. Mendieta-Pino, A. Ramos-Martin, S. O. Perez-Baez, and S. Brito-Espino. Management of slurry in gran canaria island with full-scale natural treatment systems for

- wastewater (ntsw). one year experience in livestock farms. Journal of Environmental Management, 232:666 – 678, 2019. ISSN 0301-4797. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2018.11.073>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301479718313380>.
- [40] C. Mitchell and D. McNevin. Alternative analysis of bod removal in subsurface flow constructed wetlands employing monod kinetics. Water Research, 35(5):1295–1303, 2001. ISSN 0043-1354. doi: [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(00\)00373-0](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(00)00373-0). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135400003730>.
- [41] M. Y. Owusu-Twum and M. A. Sharara. Sludge management in anaerobic swine lagoons: A review. Journal of Environmental Management, 271:110949, 2020. ISSN 0301-4797. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2020.110949>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301479720308781>.
- [42] S. Ranganathan, K. Nakai, and C. Schönbach. Encyclopedia of Bioinformatics and Computational Biology: ABC of Bioinformatics, volume 1-3. Elsevier, Netherlands, 1st edition, Jan. 2019. ISBN 9780128114148.
- [43] Reichert and P. Eawag. Aquasim 2.0 - tutorial. computer program for the identification and simulation of aquatic systems. In Swiss Federal Institute for Environmental Science and Technology. (Eawag), Dübendorf, Switzerland, 1998. URL <https://www.dora.lib4ri.ch/eawag/islandora/object/eawag:10827>.
- [44] L. Rosso, J. Lobry, and J. Flandrois. An unexpected correlation between cardinal temperatures of microbial growth highlighted by a new model. Journal of Theoretical Biology, 162(4):447 – 463, 1993. ISSN 0022-5193. doi: <https://doi.org/10.1006/jtbi.1993.1099>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519383710994>.
- [45] D. Rousseau. Performance Of Constructed Treatment Wetlands: Model-based Evaluation And Impact Of Operation And Maintenance. PhD thesis, Ghent University, 2005. URL <http://dx.doi.org/1854/5611>.
- [46] D. P. Rousseau, P. A. Vanrolleghem, and N. D. Pauw. Model-based design of horizontal subsurface flow constructed treatment wetlands: a review. Water Research, 38(6):1484 – 1493, 2004. ISSN 0043-1354. doi: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2003.12.013>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135403006833>.

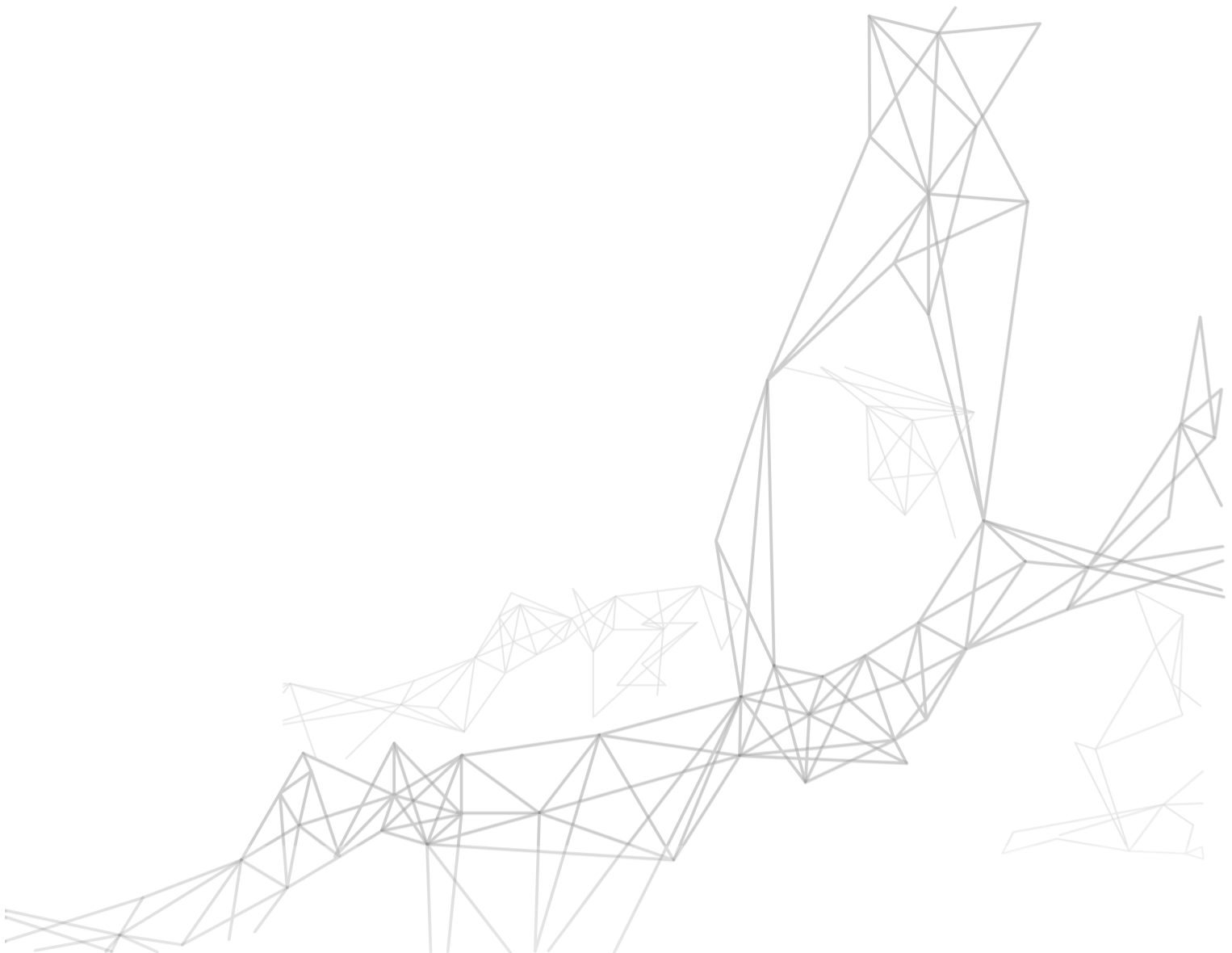
- [47] R. Samsó and J. Garcia. Bio_pore, a mathematical model to simulate biofilm growth and water quality improvement in porous media: Application and calibration for constructed wetlands. *Ecological Engineering*, 54:116–127, 2013. ISSN 0925-8574. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2013.01.021>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857413000360>.
- [48] D. Sanchez-Ramos, N. Agulló, R. Samsó, and J. García. Effect of key design parameters on bacteria community and effluent pollutant concentrations in constructed wetlands using mathematical models. *Science of The Total Environment*, 584-585:374 – 380, 2017. ISSN 0048-9697. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.01.014>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969717300141>.
- [49] H. Shepherd, G. Tchobanoglous, and M. Grismer. Time-dependent retardation model for chemical oxygen demand removal in a subsurface-flow constructed wetland for winery wastewater treatment. *Water Environment Research*, 73(5): 597–606, 2001. ISSN 10614303. doi: 10.2175/106143001x143321. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0035198092&doi=10.2175%2f106143001x143321&partnerID=40&md5=38269aa7e10a253610af308f61febc35>.
- [50] K. Stamatelatou and K. P. Tsagarakis. *Sewage Treatment Plants*. IWA Publishing, 02 2015. ISBN 9781780405025. doi: 10.2166/9781780405025. URL <https://doi.org/10.2166/9781780405025>.
- [51] A. Stefanakis, C. S. Akratos, and V. A. Tsihrintzis. Chapter 8 - modeling of vertical flow constructed wetlands. In A. Stefanakis, C. S. Akratos, and V. A. Tsihrintzis, editors, *Vertical Flow Constructed Wetlands*, pages 165–179. Elsevier, Boston, 2014. ISBN 978-0-12-404612-2. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-404612-2.00008-8>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780124046122000088>.
- [52] K. Stone, M. Poach, P. Hunt, and G. Reddy. Marsh-pond-marsh constructed wetland design analysis for swine lagoon wastewater treatment. *Ecological Engineering*, 23(2): 127–133, 2004. ISSN 09258574. doi: 10.1016/j.ecoleng.2004.07.008. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-6944235165&doi=10.1016%2fj.ecoleng.2004.07.008&partnerID=40&md5=a0f0884898956d6da12c3b162d1b70b4>.
- [53] G. Sun, Y. Zhao, and S. Allen. Enhanced removal of organic matter and

- ammoniacal-nitrogen in a column experiment of tidal flow constructed wetland system. *Journal of Biotechnology*, 115(2):189–197, 2005. ISSN 01681656. doi: 10.1016/j.jbiotec.2004.08.009. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-10644291617&doi=10.1016%2fj.jbiotec.2004.08.009&partnerID=40&md5=9c10f78eebcaf3607d37b079f4aae2c1>.
- [54] W. Van Echelpoel, P. Boets, D. Landuyt, S. Gobeyn, G. Everaert, E. Benetsen, A. Mouton, and P. L. Goethals. Chapter 6 - species distribution models for sustainable ecosystem management. In *Advanced Modelling Techniques Studying Global Changes in Environmental Sciences*, volume 27 of *Developments in Environmental Modelling*, pages 115–134. Elsevier, 2015. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63536-5.00008-9>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444635365000089>.
- [55] L. Vera, G. Martel, J. J. Salas, N. Sardón, R. Nogueira, A. G. Brito, J.-A. Faby, and A. Ramón. Depuranat project: sustainable management of wastewater in rural areas. *Desalination & Water Treatment*, 4(1-3):59 – 68, 2009. ISSN 19443994. URL <http://bibproxy.ulpgc.es/login?url=https://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&db=edo&AN=ejs27998592&lang=es&site=eds-live&scope=site>.
- [56] G. N. Walton. Thermal analysis research program reference manual. In *Office of Building Energy Research and Development*, NBSIR ; 83-2655. U.S. Department of Energy, Washington, DC : Springfield, VA, 1983.
- [57] B. Wu and Z. Chen. An integrated physical and biological model for anaerobic lagoons. *Bioresource Technology*, 102(8):5032 – 5038, 2011. ISSN 0960-8524. doi: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2011.01.076>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852411001489>.
- [58] P. Zhang. Chapter 1 - industrial control systems. In P. Zhang, editor, *Advanced Industrial Control Technology*, pages 3–40. William Andrew Publishing, Oxford, 2010. ISBN 978-1-4377-7807-6. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-1-4377-7807-6.10001-4>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9781437778076100014>.

Parte III

Publicaciones originales que conforma la Tesis Doctoral

4 Application of a model-based method for hydrodynamic processes in constructed wetland for the management of livestock wastewater based on finite elements method



Application of a model-based method for hydrodynamic processes in constructed wetland for the management of livestock wastewater based on finite elements method

AQ1

S. Brito-Espino^{a,*}, C.A. Mendieta-Pino^b, S.O. Pérez-Báez^a, A. Ramos-Martín^b

^a*Institute for Environmental Studies and Natural Resources (i-UNAT), University of Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas, Spain, emails: saulobrito09@gmail.com (S. Brito-Espino), sperez@dip.ulpgc.es (S.O. Pérez-Báez)*

^b*Department of Process Engineering, University of Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Las Palmas, Spain, emails: carlos.mendieta@ulpgc.es (C.A. Mendieta-Pino), alejandro.ramos@ulpgc.es (A. Ramos-Martín)*

Received 21 October 2018; Accepted 11 February 2019

ABSTRACT

In this article, a mechanistic process-based model is developed, for accurate predictions of pig farms wastewater behavior in free water constructed wetlands. Twenty-six variables were considered in order to simulate the simultaneous hydraulic, physical, biochemical and physico-chemical characteristics of different processes that are happening in this system. The proposed model was developed by optimization of the advection-diffusion-reaction equations. For that, Stokes equations and the Anaerobic Digestion Model No. 1 were implemented. The mathematical analysis of the model involves the use of a numerical model, the finite element method, and flowchart-based strategy planning. Numerical simulation in a two-dimensional model using open access software (FreeFem++) are presented to demonstrate the dynamic behavior of the proposed prototype.

Keywords: Free water constructed wetlands; Anaerobic Digestion Model No. 1; Advection-diffusion-reaction equation; Stokes; Anaerobic process

1. Introduction

Today, around 80% of all wastewater is discharged into the world's waterways due to poor water planning and extensive urbanization and industrialization [1,2]. Together with the increase in production and concentration of intensive livestock operations, wastewater treatment (WWT) mismanagements have raised the risk of contamination to the environment [3].

Increasingly strict environmental regulations have created the need to find solutions, which combine low-cost facilities and resource efficiency in WWT [4]. In this context, constructed wetlands (CWs) are now more widely applied than other technology as a WWT alternative, in developing countries [5–7]. However, the performance of CWs is still too difficult to predict, due to the diversity and simultaneousness

of the physical, chemical and biological processes involved, some of which are yet to be understood [8]. During the last decade, several mathematical models for the description of the behavior of CWs have been published [9]. Nowadays, most efforts in this specific field are centered on the development of mechanistic or process-based models (PBMs), which not only predict effluent pollutant concentrations but can also shed light on the treatment processes involved. For this reason, these kinds of models are gaining prevalence over simple black box [10] or first-order decay ones [11]. The vast majority of PBMs has been developed for simulating subsurface flow WWT systems, with CWM1 [12], CW2D [13] and BIO-PORE [14] some of the most robust and widely accepted models. However, these types of models are less abundant for the simulation of free water surface (FWS) systems, and

* Corresponding author.

those that are available often include a limited number of components and interactions [15–17].

In this paper, an original model is presented to describe the process of simultaneous physical, biochemical, hydraulic and physico-chemical characteristics in FWS CWs. The proposed model was developed from the basic advection-diffusion-reaction (ADR) equations [18], and the Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1) proposed by the International Water Association (IWA) [19]. A general finite element method (FEM) [20], based on a suitable stabilization of the Galerkin formulation, was used for the calculation.

The main goal of this paper is the introduction of free software, with a high-level programming language, for CWs simulation in anaerobic processes. The methodology enables the combination of several mathematical modellings in the form of a first order conservation law system, with inclusion of different kinetic models.

2. Model development

2.1. General formulation

The ADR equation is used to represent the processes involved in CWs. Transport phenomena are described with the Stokes equations, considering an incompressible Newtonian fluid in steady state, and the reaction system, which takes place in the anaerobic domain in CWs, is derived from basic structure of the ADM1, which includes biochemical and physico-chemical reactions. The numerical method used, FEM, plays a significant role in finding the numerical solutions for two classes of ADR. The ADR equation, in a finite domain, was studied taking a two-dimensional nonlinear problem with decay and source terms into account. The boundary value problem (BVP) admitted in this work, was the combination of the Dirichlet and Neumann boundary conditions. The BVP was defined by fully restraining the top, bottom and the left side. The general conditions of this study and the related finite element discretization with boundary conditions are presented in Fig. 2.

The transient transport equation for a scalar quantity $\varphi(x, y, z, t)$ undergoing constant ADR is given by Eq. (1):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \Delta \phi + u \nabla \phi + f \quad (1)$$

where φ is the field variable content in a unit area of the system, t is the time of exposure, D is the diffusion coefficient $D = D_x = D_y = D_z = \text{constant}$, the operator ' Δ ' is defined by $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, and the operator ' ∇ ' is defined by $\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$, the parameters $u(u_1, u_2, u_3)$ represent the velocity coefficients obtained by the Stoke equation (Eq. (2)), and the function f describes the anaerobic processes which include the growth and decay of biomass and substrates removal.

2.1.1. Stokes problem

The incompressible Stokes equation describes the velocity $\vec{u}$ in a bounded or unbounded domain of R^n , $n = 2, 3$ [21,22]. In this case (R^3), this equation, for steady flow, is given by:

To find $\vec{u} = (u_1, u_2)$ and p such that:

$$\begin{aligned} -v \Delta \vec{u} + \nabla p &= \vec{f} & \text{in } \Omega \\ \nabla \vec{u} &= 0 & \text{in } \Omega \\ \vec{u} &= g & \text{on } \partial \Omega \end{aligned} \quad (2)$$

where Ω is a polygonal domain in R^2 , $\vec{u} = (u_1, u_2)$ represents the velocity and p is the pressure, v is the viscosity coefficient, and $\vec{f}$ is an external force affecting the system. The Dirichlet boundary condition is Γ_D and the Neumann boundary condition Γ_N such that $\partial \Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$.

2.1.2. Anaerobic processes

The ADM1 is based on sewage sludge anaerobic digestion and gives a unified representation of disintegration, hydrolysis, acidogenesis, acetogenesis and methanogenesis [23]. This model, developed by the IWA task group, is a mathematical model mainly describing the biochemical processes (Fig. 1) involved in anaerobic digestion [19].

The model, which has been categorized into two biochemical and physico-chemical frameworks, contains a total of 30 dynamic state variables from substrates and cells.

2.1.2.1. First biochemical processes

ADM1 employs a set of 24 differential rate equations to describe the biochemical processes involved in anaerobic digestion. The disintegration, hydrolysis and bacterial decay steps are represented by first order kinetics, while all the other steps are represented by Monod-type kinetics [24] (Fig. 1). The equation, which was proposed by Monod in 1949, for describing microbial growth [25], is as follows:

$$\rho_j = \mu_{\max_j} \frac{S_i}{K_{S_i} + S_i} \times I_{\text{pH}} \quad (3)$$

where ρ_j (d^{-1}) is the specific growth rate, $\mu_{\max_j}$ (d^{-1}) is the maximum specific growth rate, S_i (kg m^{-3}) is the substrate concentration, K_{S_i} (kg m^{-3}) is the substrate saturation constant (i.e., substrate concentration at half $\mu_{\max_j}$) and I_{pH} is the inhibition function, which considers growth rate inhibition due to pH (Eq. (5)). The kinetic rate of each process is represented by ρ_j . The detailed expressions are given in the Supplementary material and the parameter values can be found in the works of Batstone et al. [19] and Zhang et al. [24].

To describe the consumption of substrate and microbial growth, the following expression was proposed

$$\frac{dS_i}{dt} = -\rho_j \frac{X_i}{Y_i}; \quad \frac{dX_i}{dt} = \rho_j X_{i\text{pH}} - K_d X_i \quad (4)$$

where $\frac{dS_i}{dt}$ ($\text{kg m}^{-3} \text{d}^{-1}$) is the change in substrate concentration, X_i is the biomass concentration (kgCOD m^{-3}), Y_i is the substrate yield coefficient, $\frac{dX_i}{dt}$ ($\text{kgCOD m}^{-3} \text{d}^{-1}$) is the change in cell concentration over time and K_d (d^{-1}) is the cell death rate.

AQ2

AQ3

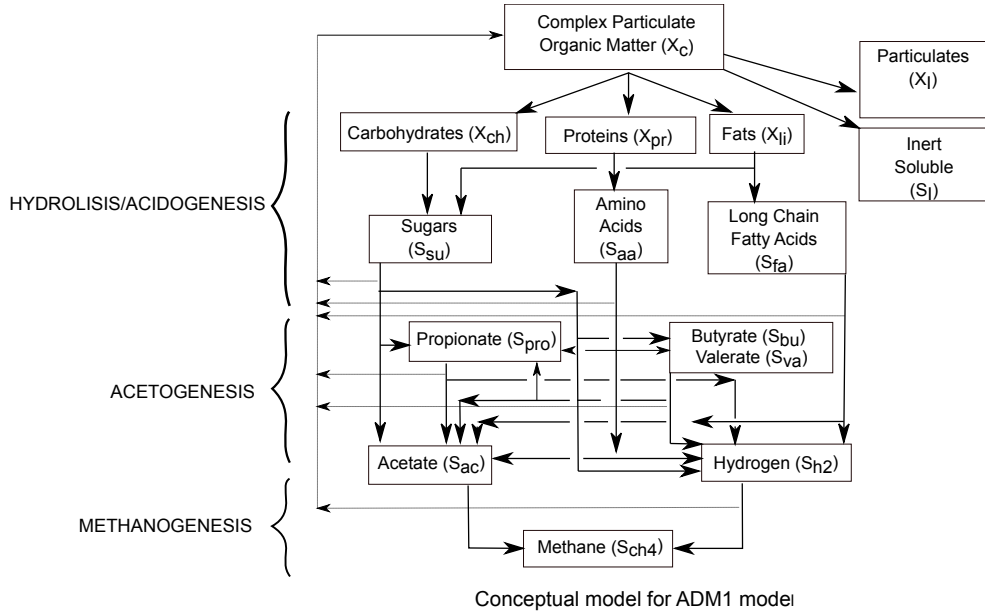


Fig. 1. Anaerobic processes flow chart, according to ADM1.

The growth rate inhibition due to pH is given by:

$$I_{pH} = \exp\left(-3\left(\frac{pH - pH_{LL}}{pH_{UL} - pH_{LL}}\right)\right) \quad (5)$$

The given values for the upper and lower pH are: $pH_{UL} = 7.35$ and $pH_{LL} = 4.77$, according to experimental data [19].

2.1.2.2. Second physico-chemical processes

The original ADM1 incorporated six acid–base reactions which describe the acid/base equilibria of acetic acid/acetate, propionic acid/propionate, butyric acid/butyrate, valeric acid/valerate, dissolved carbon dioxide/bicarbonate and ammonium/ammonia. The corresponding equation is:

$$z + [NH_4^+] + [H^+] - [HCO_3^-] - \frac{[Ace]}{64} - \frac{[Prop]}{112} - \frac{[But]}{160} - \frac{[Val]}{208} - [OH^-] = 0 \quad (6)$$

where the different terms ($kg\ m^{-3}$) of the equation are:

$$[HCO_3^-] = \frac{[CO_2]K_C}{[H^+]}, \quad [NH_4^+] = \frac{[NH_3][H^+]}{K_N}, \quad [AGV^-] = \frac{[AGV]K_{AGV}}{([H^+] + K_{AGV})M_{AGV}} \quad (7)$$

where K_C , K_N , K_{AGV} are the acid–base reactions equilibrium coefficients.

2.1.3. ADR for dynamic state variables

Dynamic state variables are those calculated at a specified time (t) by solution of the set of differential equations as defined by the ADM1 process rates [19].

The ADR equation for substrate is given by:

$$\begin{cases} D\Delta S_i + u\nabla S_i + \rho_j \frac{X_i}{Y_i} = \frac{\partial S_i}{\partial t} & \text{in } \Omega \\ S_i = S_{i_0} & \text{in } \Gamma_D; BC \\ \frac{\partial S_i}{\partial n} = 0 & \text{in } \Gamma_N; BC \end{cases} \quad (8)$$

where S_i is related to each one of cells included into the 24 state variables described by ADM1.

The ADR equation for cells is given by:

$$\begin{cases} D\Delta X_i + u\nabla X_i - (\rho_j X_{iPH} - K_d X_i) = \frac{\partial X_i}{\partial t} & \text{in } \Omega \\ X_i = X_{i_0} & \text{in } \Gamma_D; BC \\ \frac{\partial X_i}{\partial n} = 0 & \text{in } \Gamma_N; BC \end{cases} \quad (9)$$

where X_i is related to each one of substrates included in the 24 state variables described by ADM1

2.2. Variational form of the conservative equation

The transient and steady-state problems given by Eqs. (8) and (9), respectively, can be solved by the FEM. In this technique, termed the generalized integral transform technique (GITT), the unknown function is represented in terms of an eigen function series expansion. Basically, the GITT has the following steps:

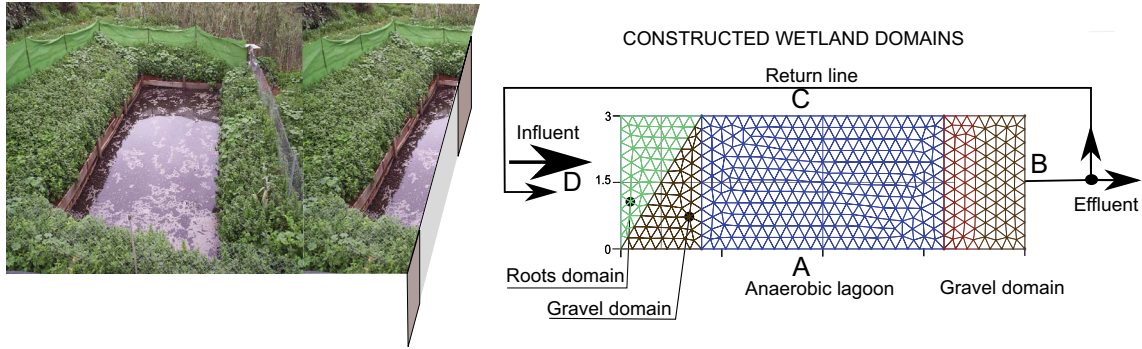


Fig. 2. Discretization of the domain triangle = 1,170; vertex = 643.

(i) Discretization of the domain (Fig. 2).

- Choose the appropriate domain and sub-domain

(ii) Formulation of the partial differential equations for the equivalent variational problem

- Develop the integral
- Transform the partial differential equation into a system of ordinary differential or algebraic equations
- Solve the ordinary differential or algebraic system. Use the inverse transform to obtain the unknown function

The variational form of the boundary-value problem is stated in terms of the following functions spaces.

(i) Velocity: the weak Galerkin method developed in 2.1.1 for the Stokes equations naturally has the form [26]: to find $u: \Omega \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ such that

$$\left\{ \begin{array}{ll} v \int_{\Omega} \nabla \bar{u} \nabla \bar{v} - \int_{\Omega} \operatorname{div} \bar{v} p = \int_{\Omega} \bar{f} \bar{v} & \text{for } \bar{v} \in [H_0^1(\Omega)]^2, \\ \int_{\Omega} (\operatorname{div} \bar{u}) q = 0 & \text{for } q \in L^2(\Omega) \text{ IC} \\ \int_{\Omega} p = 0 & \text{solubility condition} \\ \bar{u}(x) = \bar{h}_D(x) & \text{for } x \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, \text{ BC} \\ \bar{u}(x) \bar{n} = \bar{h}_N(x) & \text{for } x \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, \text{ BC} \end{array} \right. \quad (10)$$

where $\bar{v}, q$ are smooth functions.

(ii) Cells

To find $X_i: \Omega \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ such that

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mu \int_{\Omega} \frac{\partial X_i}{\partial t} W_i + D \int_{\Omega} \nabla X_i \nabla W_i d\Omega + \int_{\Omega} \bar{u} \nabla X_i \nabla W_i d\Omega = \int_{\Omega} (\rho_j X_{i\text{pH}} - K_d X_i) W_i d\Omega & \text{for } X_i \in [H_0^1(\Omega)]^2 \\ X_i(x, y, t) = g_D(x, y) & \text{for } x, y \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, t > 0 \\ \nabla X_i(x, y, t) \bar{n}(x, y) = g_N(x, y) & \text{for } x, y \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, t > 0 \\ X_i(0, x, y) = X_{i_0}(x, y) & \text{for } x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (11)$$

(iii) Substrate

To find $S_i: \Omega \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ such that

$$\left\{ \begin{array}{ll} \int_{\Omega} \frac{\partial S_i}{\partial t} W_i + D \int_{\Omega} \nabla S_i \nabla W_i + \int_{\Omega} u \nabla S_i W_i = \int_{\Omega} (\rho_j X_i) W_i & \text{for } S_i \in [H_0^1(\Omega)]^2 \\ S_i(x, y, t) = g_D(x, y) & \text{for } x, y \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, t > 0 \\ \nabla S_i(x, y, t) \bar{n}(x, y) = g_N(x, y) & \text{for } x, y \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, t > 0 \\ S_i(0, x, y) = S_{i_0}(x, y) & \text{for } x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (12)$$

where W_i is the smooth function.

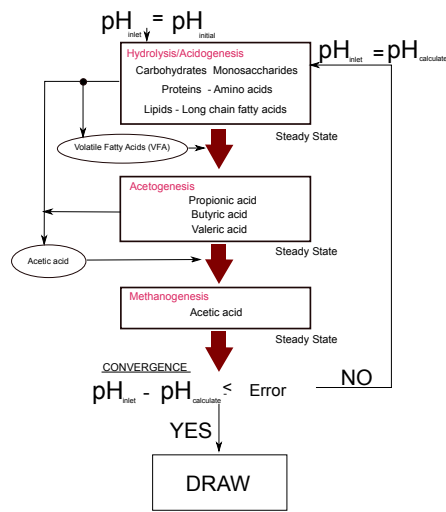


Fig. 3. Flowchart of the strategy used for the calculation.

2.3. Calculation

An algorithm, combined with the FEM is proposed in this study. Fig. 3 shows the strategy used for the calculation. The methodology is as follows: the biochemical processes of the anaerobic digestion are divided into three overall levels.

- (i) Steady state of each one of the biochemical steps of a level is attained before starting with the following.
- (ii) Finally, the resulting pH of the physico-chemical process is compared with the initial pH, and the difference gives the convergence to the final solution.

FreeFem++ was used to implement the algorithm for the calculation. It is a partial differential equation solver with its own high-level language [27]. FreeFem scripts can solve

multiphysics nonlinear systems in 2D and 3D. Space discretization was carried out using the Gmsh, a free finite element mesh generator [28].

3. Results and discussion

The resulting discretization of the problem has included 1,170 triangles and 643 vertices, organized into four domains (Fig. 2). The boundary conditions taken into account were the following: continuous flux, load and discharge in D and B, and part of the effluent in D is returned to influent. Along the top and bottom boundaries (sections A and B), we imposed a non-slip boundary condition for the Stokes equations and non-penetrable boundary condition for the ADR equation. We considered a continuous flux with the value shown in Table 1.

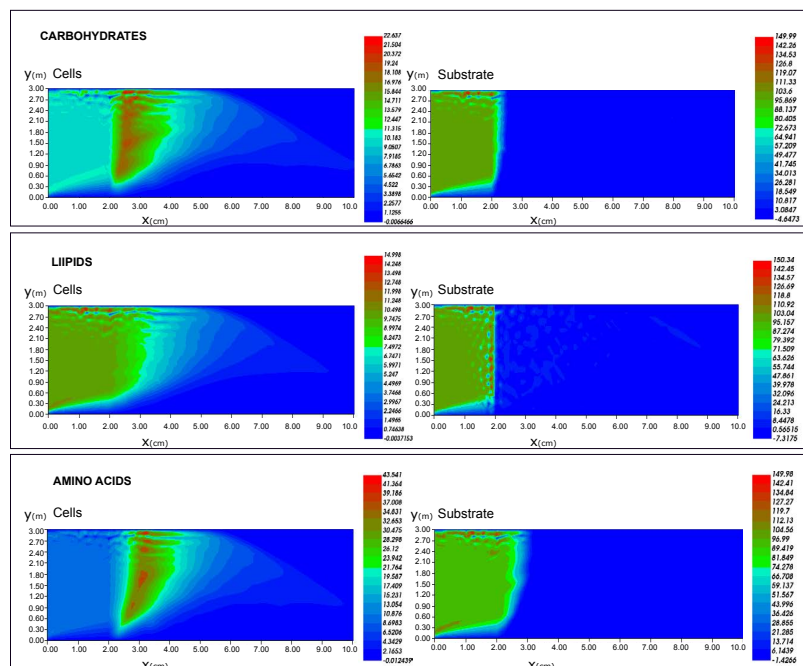
Several simulations with different rates of substrate and fluxes were carried out. We considered that specific growth rate (ρ) depends on the growth medium composition, substrate concentration and the acid/base equilibria.

As can be seen, the results agree with the theory, that is, we observe at least a first convergence rate for all variables.

Qualitatively, the ADR equation agrees with the flow. The concerned biological species tend to follow the flow according to the velocity field of Stokes equation because of the boundary conditions set. In this case, fluid is transported

Table 1
Boundary conditions

Concentration		A	B	C	D
Substrates (kg m^{-3})	$X_{i \text{ ent}}$	0	0	0	100
Cells (kg m^{-3})	$S_{i \text{ ent}}$	0	0	0	10
Flow ($\text{m}^3 \text{ d}^{-1}$)	Q	0	9	0	9

Fig. 4. Concentrations (kg m^{-3}) and distributions of biochemical steps for acidogenesis.

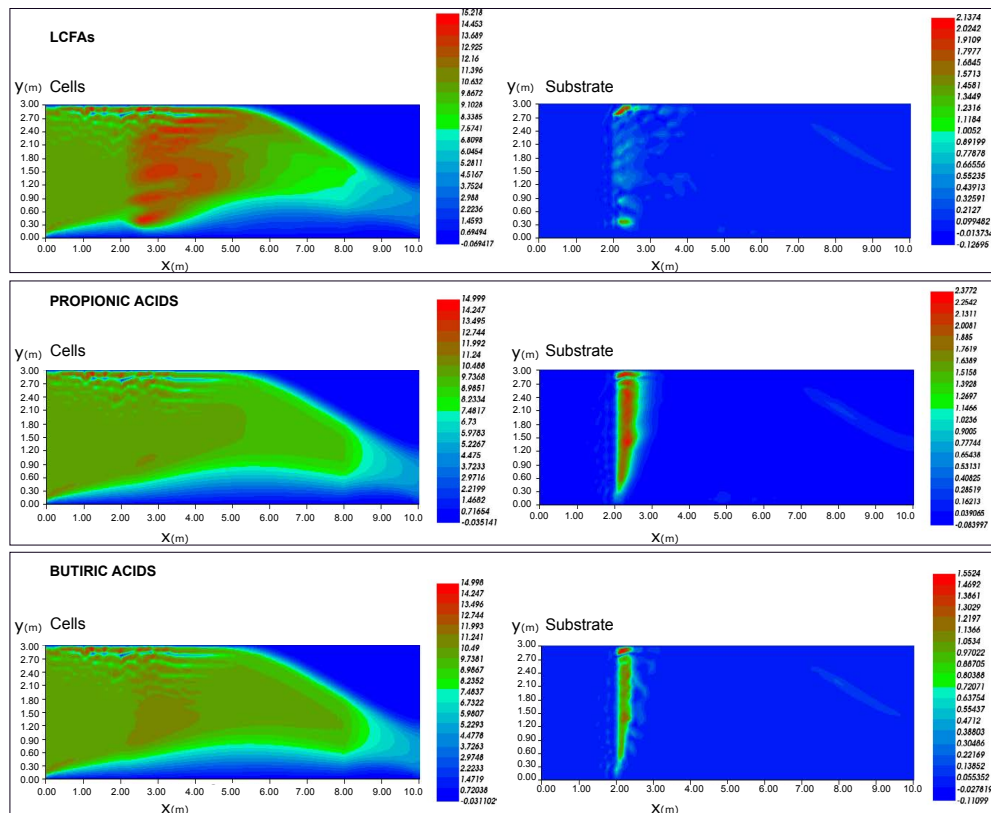


Fig. 5. Concentrations (kg m^{-3}) and distributions of biochemical steps for acetogenesis.

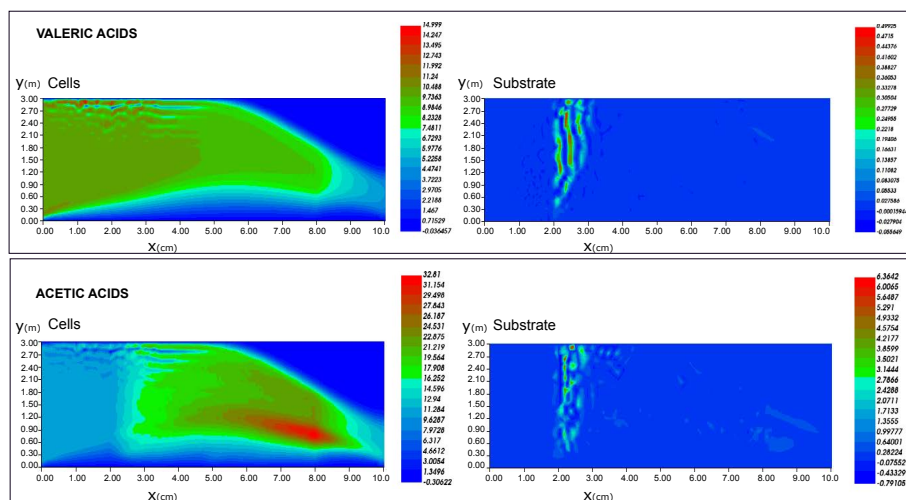


Fig. 6. Concentrations (kg m^{-3}) and distributions of biochemical steps for acetogenesis and methanogenesis.

toward the opening in the right boundary following the Stokes velocity profile and with little diffusion happening, which agrees with the parameters we set for the transport equation.

The boundary and initial conditions in this example are represented in Table 1.

The diffusion coefficient considered is $8.64 \times 10^{-3} (\text{m}^2 \text{d}^{-1})$.

The concentrations and distributions of solutions for the different biochemical steps in steady state are shown

in Figs. (4)–(6). Cells are represented on the left and contaminants on the right.

If we compare the different biochemical steps, we see:

- First, with respect to concentrations
- For the example of acidogenesis (Fig. 4), such that processes occur in a simultaneous way, domain group of cells is located in the amino acids step, nevertheless, in the lipids we find cells with a lower concentration.

- Second, with respect to distribution
- Comparing acidogenesis to acetogenesis (Figs. 4 and 5), we can see that distribution of cells depends on the product of the previous process, so microbial growth tends to occur near the source.

4. Conclusion

In this work, an original model is presented to describe the different processes that take place inside CWs. A free fluid in a system was considered, which operates in the same way as a plug-flow reactor, whose hydraulic, physical, biological and physico-chemical characteristics depend on time and position. In the latter, we considered growth-limiting functions which depended on factors such as growth medium composition, substrate concentration and pH. The ADR equation, including fluid flow and transport mathematical expressions, based on the Stokes equations in steady state, was used throughout the whole process. The ADM1 model was used for microbial kinetics. We obtained 26 variables to be solved.

The FEM was used to describe mathematical modelling approaches, allowing for robust and efficient numerical simulation of the processes. FreeFem++ and Gmsh were the tools used for the calculation.

An analysis of the model was performed, and it shows how cell behavior differed depending on the biochemical step involved.

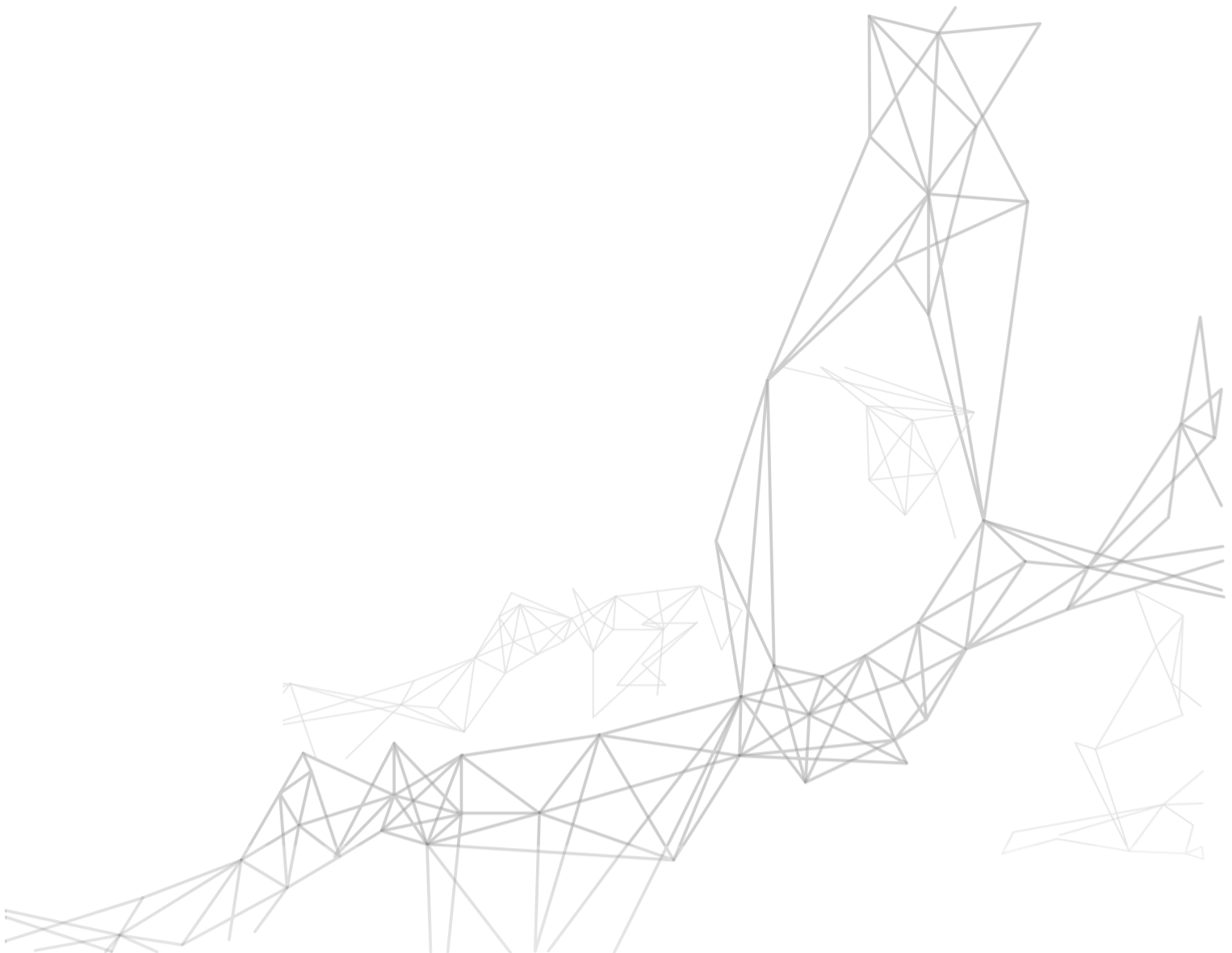
Finally, a realistic example, with a set boundary conditions values, is shown. In it, the flow and concentration of species and substrates is performed simultaneously.

The potential extensions of this work include a development of parallel non-overlapping domain decomposition methods and algorithms.

References

- [1] Sha, Esha, World Water Development Report, Coordinating the UN's Work on Water and Sanitation, UNs, 2016. Available at: <http://www.unwater.org/publications/world-water-development-report>.
- [2] Sustainable Development Goals-sanitation, United Nations. Available at: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/water>.
- [3] G.K. Kafle, L. Chen, Comparison on batch anaerobic digestion of five different livestock manures and prediction of biochemical methane potential (BMP) using different statistical models, *Waste Manage.*, 48 (2016) 492–502.
- [4] A. Hickey, J. Arnscheidt, E. Joyce, J. O'Toole, G. Galvin, M. O'Callaghan, K. Conroy, D. Killian, T. Shryane, F. Hughes, K. Walsh, E. Kavanagh, An assessment of the performance of municipal constructed wetlands in Ireland, *J. Environ. Manage.*, 210 (2018) 263–272.
- [5] D. Sanchez-Ramos, N. Agulló, R. Samsó, J. García, Effect of key design parameters on bacteria community and effluent pollutant concentrations in constructed wetlands using mathematical models, *Sci. Total Environ.*, 584–585 (2017) 374–380.
- [6] J. Laitinen, K. Moliis, M. Surakka, Resource efficient wastewater treatment in a developing area—Climate change impacts and economic feasibility, *Ecol. Eng.*, 103 (2017) 217–225.
- [7] M. Licata, T. Tuttolomondo, G. Virga, C. Leto, S. La Bella, The use of constructed wetlands for the treatment of agro-industrial wastewater – A case study in a dairy-cattle farm in Sicily (Italy), *Desal. Wat. Treat.*, 76 (2017) 300–310.
- [8] L. Fan, H. Reti, W. Wang, Z. Lu, Z. Yang, Application of computational fluid dynamic to model the hydraulic performance of subsurface flow wetlands, *J. Environ. Sci.*, 20 (2008) 1415–1422.
- [9] E. Llorens, M.W. Saaltink, M. Poch, J. García, Bacterial transformation and biodegradation processes simulation in horizontal subsurface flow constructed wetlands using CWM1-RETRASO, *Bioresour. Technol.*, 102 (2011) 928–936.
- [10] J. Xu, S.-L. Lo, L. Xu, R. Gong, Comparison of semi-natural and constructed wetlands for agricultural wastewater treatment, *Desal. Wat. Treat.*, 54 (2015) 2959–2968.
- [11] D.P.L. Rousseau, P.A. Vanrolleghem, N.D. Pauw, Model-based design of horizontal subsurface flow constructed treatment wetlands: a review, *Water Res.*, 38 (2004) 1484–1493.
- [12] G. Langergraber, D.P. Rousseau, J. García, J. Mena, CWM1: a general model to describe biokinetic processes in subsurface flow constructed wetlands, 59 (2009) 1687–1697.
- [13] G. Langergraber, J. Simunek, Modeling Variably Saturated Water Flow and Multicomponent Reactive Transport in Constructed Wetlands, 2005.
- [14] R. Samsó, J. García, BIO-PORE, a mathematical model to simulate biofilm growth and water quality improvement in porous media: application and calibration for constructed wetlands, 54 (2013) 116–127.
- [15] S. Gargallo, M. Martín, N. Oliver, C. Hernández-Crespo, Biokinetic model for nitrogen removal in free water surface constructed wetlands, *Sci. Total Environ.*, 587–588 (2017) 145–156.
- [16] J. Choi, M.C. Maniquiz-Redillas, J. Hong, L.-H. Kim, Development of a hybrid constructed wetland system for treating stormwater runoff from road, *Desal. Wat. Treat.*, 63 (2017) 397–403.
- [17] K. Gunes, B. Tuncsiper, A. Drizo, F. Masi, S. Ayaz, H. Tufekci, Constructed and riverine wetlands design considerations for domestic and agricultural diffuse pollution treatment—a case study from Turkey, *Desal. Wat. Treat.*, 57 (2016) 11988–11998.
- [18] E. Oñate, Derivation of stabilized equations for numerical solution of advective-diffusive transport and fluid flow problems, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 151 (1998) 233–265.
- [19] D.J. Batstone, J. Keller, I. Angelidaki, S.V. Kalyuzhnyi, S.G. Pavlostathis, A. Rozzi, W.T.M. Sanders, H. Siegrist, V.A. Vavilin, The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1), *Water Sci. Technol.*, 45 (2002) 65–73.
- [20] K. Morgan, J. Peraire, Unstructured grid finite-element methods for fluid mechanics, *Rep. Prog. Phys.*, 61 (1998) 569.
- [21] B. Cockburn, J. Gopalakrishnan, Incompressible finite elements via hybridization. Part I: The Stokes system in two space dimensions, *SIAM J. Numer. Anal.*, 43 (2005) 1627–1650.
- [22] L. Jiangguo, Penalty-factor-free discontinuous galerkin methods for 2-DIM Stokes problems, *SIAM J. Numer. Anal.*, 49 (2011) 2165–2181.
- [23] M.-N. Pons, N. Adouani, M. Luo, S. Pacaud, Dynamic simulation of anaerobic digestion of farm residues using ADM1, *IFAC Proc. Vol.*, 43 (2010) 347–352.
- [24] Y. Zhang, S. Piccard, W. Zhou, Improved ADM1 model for anaerobic digestion process considering physico-chemical reactions, *Bioresour. Technol.*, 196 (2015) 279–289.
- [25] J. Monod, The growth of bacterial cultures, *Annu. Rev. Microbiol.*, 3 (1949) 371–394.
- [26] J. Wang, X. Ye, A weak Galerkin finite element method for the stokes equations, *Adv. Comput. Math.*, 42 (2016) 155–174.
- [27] F. Hecht, New development in freefem++, *J. Numer. Math.*, 20 (2018) 251–266.
- [28] <http://gmsh.info/>.

5 Application of a mathematical model to predict simultaneous reactions in anaerobic plug-flow reactors as a primary treatment for constructed wetlands





Application of a mathematical model to predict simultaneous reactions in anaerobic plug-flow reactors as a primary treatment for constructed wetlands

S. Brito-Espino ^{a,*}, A. Ramos-Martín ^b, S.O. Pérez-Báez ^a, C. Mendieta-Pino ^b

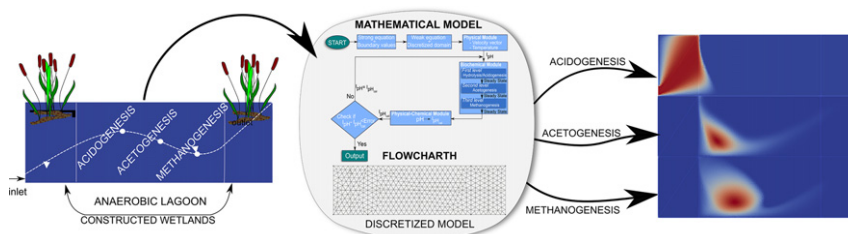
^a Institute for Environmental Studies and Natural Resources (i-UNAT) (ULPGC), Spain

^b Department of Process Engineering, University of Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), Spain

HIGHLIGHTS

- A spatial and temporal mathematical model for anaerobic processes is proposed.
- Numerical methods and algorithms are useful mathematical tool for calculating PDEs.
- Simultaneous performances of twenty-one biochemical and physicochemical reactions occur.
- This flexible methodology permits the integration of various anaerobic phenomena.

GRAPHICAL ABSTRACT



ARTICLE INFO

Article history:

Received 11 July 2019

Received in revised form 15 November 2019

Accepted 18 December 2019

Available online 3 January 2020

Editor: Jan Vymazal

Keywords:

Anaerobic digestion

ADM1

Finite elements method

Advection-diffusion-reaction

FreeFem++

ABSTRACT

Anaerobic digestion technologies offer a set of advantages when they are implemented as a primary treatment phase prior to the use of constructed wetland systems in low cost wastewater facilities. The aim of this study is to describe a model capable of reflecting the complex functioning of anaerobic lagoons, subject to continuous flux in the feed pipe, taking into account that physicochemical properties are subject to a concentration gradient and biochemical ones to simultaneous reactions which depend on each other. Based on both Stokes and advection-diffusion-reaction equations, the proposed model includes twenty-one variables to describe hydraulic, physical, biochemical and physicochemical characteristics that take place in different points of the system and at different moments of time. Drawn up by the International Water Association, the anaerobic digestion model ADM1 is included for the purpose of incorporating the anaerobic processes in the calculation. The finite element method was used to solve the nonlinear, second order partial differential equations of the model. The calculation strategy was designed using a flowchart. Using the open-source FreeFem++ software, a simulation of the mathematical model, in bi-dimensional space, is presented to demonstrate the dynamic behaviour of the proposed model. This yields essential information about the performance of the substrate, cells, and the biochemical reaction products in each of the points within the reactor. Simulations show the potential of this methodology to carry out studies of the behaviour of each of the variables contemplated in the model, as well as comparative studies of the various possible options. In addition, this methodology can be used to help modify the behaviour of the variables based on digester geometry and the boundary values the system is subject to. From the results, it can be concluded that the proposed methodology can be a useful tool for calculating and designing the aforementioned synergistic systems of anaerobic digester plug-flow reactors and constructed wetlands.

© 2020 Elsevier B.V. All rights reserved.

* Corresponding author.

E-mail address: saulo.brito101@alu.ulpgc.es (S. Brito-Espino).

1. Introduction

Constructed wetlands (CWs) are today considered a low-cost and eco-friendly technology and an alternative to conventional wastewater treatment systems especially in developing countries (Sanchez-Ramos et al., 2017; Laitinen et al., 2017). Although they have been widely used to treat different types of wastewater, this kind of technology is not efficient enough when it is the only method employed (Hartl et al., 2019). The use of anaerobic plug-flow reactors (APFR) as a primary treatment and constructed wetlands as a secondary treatment (Fig. 1), besides significantly reducing the sludge surplus, allows a decrease in the surface area required for CWs and, consequently, a reduction in building costs of up to the cost of 40% (Comino et al., 2013). Similarly, the clogging phenomenon in CWs is delayed as the organic load and suspended solids load are reduced by an APFR primary treatment (de la Varga et al., 2015; Alvarez et al., 2008). With these APFR-generated characteristics it is possible to extend the life of CWs to over 10 years (Wu et al., 2015).

There has been considerable interest on the part of the European Union and its member states with respect to the potential benefits of anaerobic digestion as an effective biotechnological tool, with financial incentives even being offered to farmers who proceed with the installation of these systems (Union, 2008; Kythreotou et al., 2014). In many cases, when there are no conventional means available, wastewaters are treated naturally. Often, for example, livestock farms may be orographically isolated as commonly occurs in the Canary Islands (Spain) (Mendieta-Pino et al., 2019; Brito-Espino et al., 2019). There is therefore a need for an in-depth analysis of these natural processes to allow a greater understanding and knowledge of how they function in order to optimize their design and efficiency (Lauwers et al., 2013).

The efficiency of anaerobic systems varies considerably due to the complex nature of all the physical, chemical and biological processes which take place within them (Kumar and Zhao, 2011; Imfeld et al., 2009). The elimination of pollutants depends on a number of variables including, among others, the wastewater application rate, the organic loading rate, the hydrologic regime, the hydraulic retention time and the operational mode (batch or continuous mode) (Wang et al., 2017). All of these are determined by a set of boundary values established in the system. Furthermore, hydrodynamic dispersion, as it is the result of the combination of the diffusion of the solute and the spatial and/or temporal variations of the local displacement velocity is therefore dependent on the type of flow, the geometry of the medium and the properties of the fluids (Rossi et al., 2017). The need to understand all these simultaneously occurring properties whose variables are closely interrelated requires the development of mathematical models that allow the internal workings of anaerobic digestion to be described (Donoso-Bravo et al., 2018).

Studies on anaerobic digestion have considered three different methodologies - 1. black-box models, in which, only the relationship between of the input and output variables is taken into account (Hu et al.,

2018) - 2. grey-box models, mechanistic models in which the parameters have a physical interpretation but are adjustable (Lauwers et al., 2013) - 3. white-box models, based on fundamental principles and a thorough knowledge of the underlying physical and chemical processes (Regmi et al., 2019).

Numerous white-box models have been developed since the 1970s. However as these models are limited in their design to a specific substrate or a small number of substrates with very similar compositions, they are not suitable for general use (Ivanovs et al., 2018). The anaerobic digester model No 1 (ADM1), proposed by the International Water Association (IWA) (Batstone et al., 2002) in 2002, was created to establish a common platform for modelling the anaerobic digestion processes (Kleerebezem, 2006). The challenger today is to develop mathematical models to understand the dynamics of the processes, improve system performance and the optimize digesters in their design stage (Lauwers et al., 2013). Although studies have recently been published to address these objectives, in the case of APFRs, due to their relatively recent implementation, there is an important gap in the literature (Donoso-Bravo et al., 2018).

The primary aim of this work is the application of a mathematical model for anaerobic plug flow reactors based on the use of tank reactors with simple geometry, continuous flux and an absence of turbulence, and with diffusion and advection the only transport mechanisms along the flow. The second aim is to assess the effectiveness of the model based on the results. A third aim is to consider the potential of this methodology for the localization of each of the model variables within the system, for the undertaking of comparative studies of the different variables, and for modification of their behaviour in accordance with the geometry of the reactor and the different boundary values.

The proposed problem has a significant complexity. A description of it is made using the advection-diffusion-reaction equation (ADRE) and the boundary value problem (BVP). The ADRE is a nonlinear, second-order partial differential equations (PDE) based on mass balance. The difficulty to obtain theoretical solutions of these transport equations is due, firstly, to the nonlinear coefficients and terms of the ADRE and, secondly, to the complexity of a process in which several reactions take place simultaneously and whose variables depend on both the point within the reactor and the time considered.

The use of Galerkin's formulation of the finite element method (FEM) offers a great advantage compared to other methods because of its efficient modelling of vector fields by computational calculations (Aragonés et al., 2019). This allows an analysis of the relationships between a large number of variables involved in the process in a reasonably short time (Aragonés et al., 2019; Brito-Espino et al., 2019). The FEM is one of the most popular and powerful numerical techniques for solving transient parabolic-type PDEs (Lin and Reutskiy, 2018; Bozkurt et al., 2000). FEMs typically incorporate (approximate) continuity/conformity of the state variable(s) directly into the finite element space in order to reproduce the respective properties of the corresponding continuous problem (Georgoulis and Pryer, 2018).

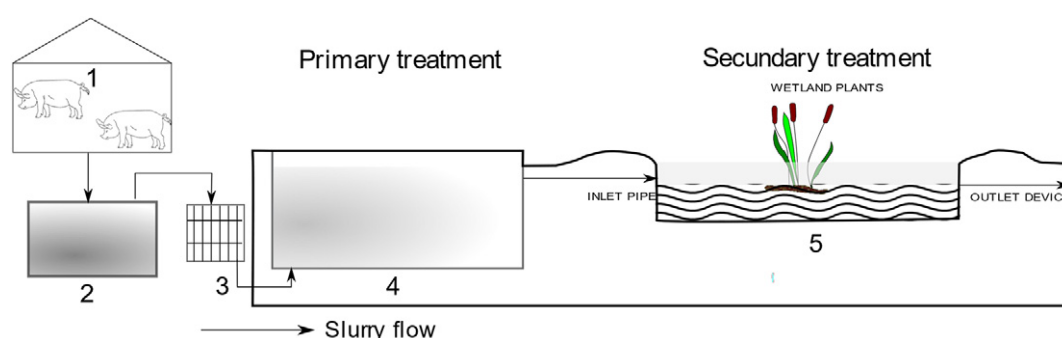


Fig. 1. Example of a systematic flow diagram of a farm wastewater treatment plant, based on both anaerobic digester and constructed wetlands systems, installed in different pig farms in Gran Canaria (Spain) (Mendieta-Pino et al., 2019). Pig house; (2) storage for raw swine slurry; (3) wire mesh; (4) anaerobic plug-flow reactor; (5) constructed wetland.

2. Mathematical model

2.1. Governing equations

As noted in the Introduction section, the joint use of anaerobic reactors and CWs (Fig. 1) improves the overall operating performance of these natural treatment systems. For these cases, a mathematical model is therefore proposed that includes the necessary physical, chemical and biological phenomena. It is intended as a useful tool in the design of these systems. The physical phenomenon corresponds to the transport of mass immersed in fluid by advection and diffusion, and the chemical and biological processes are essentially the kinetics of different metabolites. These phenomena may be defined or idealized by a set of relationships between multiple variables in the form of equations in partial derivatives. These variables are classified as dependent variables, such as fluid velocity ($\vec{v}$) or metabolites concentration (ϕ), and independent variables which are mainly connected with the geometry of the system and consequently, with the point of the physical space and with the time.

The mathematical model that describes the heterogeneous system is the ADRE. The ADRE problem consists of determining a function of scalar field, $\phi(x_i, t)$, which must satisfy the differential Eq. (1).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \mathcal{D} \Delta \phi + \vec{u} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + f(\phi) = F(x_i) \text{ for } x_i \in \Omega \quad (1)$$

where (ϕ) is a scalar field that represent concentrations of both substrates and cells of each of the biochemical reactions included in the anaerobic processes, $(\vec{u})$ is the velocity field associated with the advective process and is obtained through the steady-state Stokes equations in two dimensional domains (4), x_i are Cartesian coordinates, t is the time of exposure, Ω is a polygonal or polyhedral domain in $\mathbb{R}^d$; for this study a two-dimensional problem is considered and so $d = 2$, $\mathcal{D}$ is the diffusive coefficient; in this case the value considered $\mathcal{D} = \mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y =$ is a constant, Δ is the Laplace operator, a differential operator given by $\sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$, $f(\phi)$ is the external force applied to the system (>0 source, and <0 sink), $F(x_i)$ is a generation function.

Furthermore, ADRE must also satisfy the boundary values defined by Eqs. (2) and (3):

$$\phi(x_i, t) = g_D(x_i) \text{ for } x_i \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, t > 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \phi(x_i, t)}{\partial n} n(x_i) = g_N(x_i) \text{ for } x_i \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, t > 0 \quad (3)$$

where $g_D(x_i)$ is the function which describes the scalar field value on the boundary, the Dirichlet boundary value problem, $g_N(x_i)$ is the function which describe the flow value on the boundary, the Neumann boundary value problem (Fig. 2-a), $\partial\Omega$ is the boundary of the domain, and n is the (typically exterior) normal to the boundary.

The Dirichlet boundary value problem was defined in the model by fully restraining the top, bottom and in some areas, both sides (Fig. 2-b).

2.1.1. Stokes equations

The Stokes equation in two dimensions (1) is used to calculate the velocity vector ($\vec{u}$). This is a linear PDE system used to determine the flow of viscous fluids for very low Reynolds numbers. Its relationship with the Navier-Stokes equations is based on the Stokes equation being a stationary linearization of this.

The governing equations, or strong form, of the steady-state Stokes equation are shown in (4) and (5):

to find $\vec{u} = (u_1, u_2)$ and p such that:

$$-\nu \Delta \vec{u} + \nabla p = \vec{f} \text{ for } x, y \in \Omega \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \text{ for } x, y \in \Omega \quad (5)$$

where $\vec{u} = (u_1, u_2)$ represents the velocity, p is the pressure, ν the viscosity coefficient, and $\vec{f}$ an external force that affects the system. Eq. (5) expresses the continuity equation for a stationary flux.

Furthermore, Stokes equations must also satisfy both the Neumann and Dirichlet boundary value problems defined by Eqs. (6) and (7):

$$\vec{u} = \vec{u}_0 \text{ for } x, y \in \Gamma_D \quad (6)$$

$$\nabla \vec{u} \cdot \vec{n} + p \vec{n} = \vec{g} \text{ for } x, y \in \Gamma_N \quad (7)$$

A general analytical solution is not available for this equation, so the FEM is used to find an approximation of the solution.

2.1.2. Anaerobic processes. Kinetic model

The ADM1 is used for the description of the function $f(\phi)$ (1). In this model, ϕ refers to the scalar field, such as concentration of substrate (S_i) and active anaerobic biomass (X_i). The ADM1 is based on sewage sludge anaerobic digestion and gives a unified representation of disintegration, hydrolysis, acidogenesis, acetogenesis and methanogenesis. The model, which has been categorized into two biochemical and physicochemical frameworks, contains a total of 21 dynamic state variables from substrates and cells. The biochemical and physicochemical processes are represented in the Fig. 3.

The proposed expressions to describe the consumption of substrate and microbial growth for each biochemical process and for each point in the domain are given by:

$$f(S_i) = -\rho_j \frac{X_i}{Y_i}; f(X_i) = \rho_j X_i - K_d X_i \quad (8)$$

where, $f(S_i)$ ($\text{kg m}^{-3} \text{d}^{-1}$) is the change in substrate concentration, X_i is the biomass concentration (kg COD m^{-3}), Y_i is the substrate yield coefficient, $f(X_i)$ ($\text{kg COD m}^{-3} \text{d}^{-1}$) is the change in cell concentration over

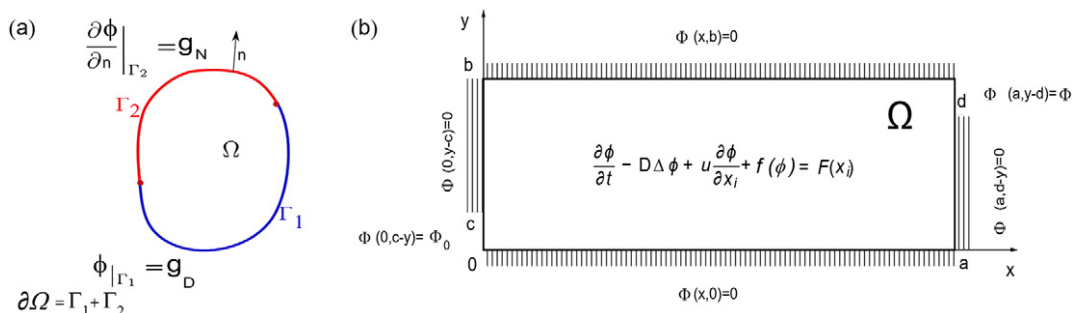


Fig. 2. (a) red: Neumann boundary value problem; blue: Dirichlet boundary value problem; boundary $\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$; ϕ_0 and g are given function defined on Γ_1 and Γ_2 ; n = unit normal vector. (b) Dirichlet boundary value problem for the ADRE in the proposed model.

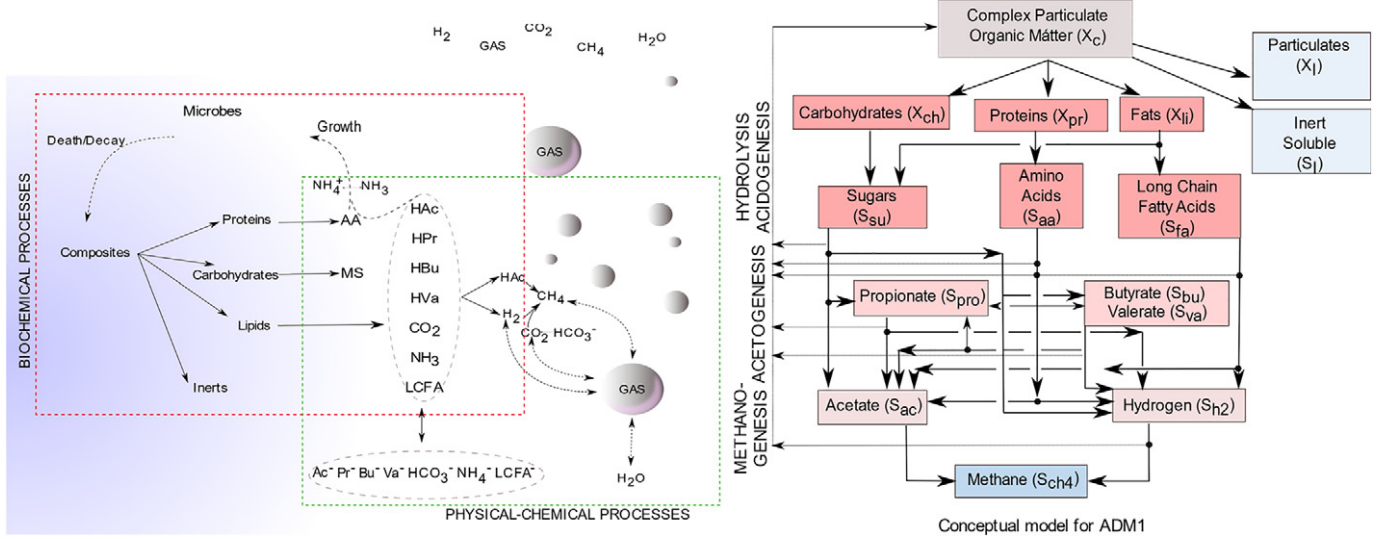


Fig. 3. Biochemical and physicochemical processes in anaerobic digestion (left), ADM1 conceptual model (right) (Batstone et al., 2002).

time, and $K_d(d^{-1})$ is the cell decay rate. The specific growth rate; $\rho_j(d^{-1})$, is based on the monod-type reaction kinetics (Batstone et al., 2002);

$$\rho_j = \mu_{max_i} \frac{S_i}{K_{s_i} + S_i} \cdot X_i \cdot I_1 \cdot I_2 \cdots I_n \quad (9)$$

where $\mu_{max_i}(d^{-1})$ is the maximum specific growth rate, $S_i(kg m^{-3})$ the substrate concentration, $K_{s_i}(kg m^{-3})$ is the substrate saturation constant (i.e. substrate concentration at half, and μ_{max_i}), I_i is the different inhibition function considered (Table 2).

2.2. The finite element method for the proposed model

Considering the transient and steady-state problems given by (1), for a general $F(x_i)$ it may be difficult or even impossible to find ϕ with analytical techniques, and so it is necessary to use numerical techniques and, in particular, the finite elements method (FEM).

The FEM method is a numerical technique based on the generation of a finite element geometric model on which the methodology is defined. The methodology consist of dividing the domain into a collection of subdomains, considering the differential equation of the problem as a variational equation defined in each of the subdomains. Next, in a rigorous order, all the equations of the each of the elements are linked into a global system of equations -weak formulations- for the final calculation (2.2.1).

2.2.1. Variational formulation

The variational equation is obtained:

- by multiplying (1) by the test functions (Y_i) and (4) and (5) by the test functions $\vec{v}$ and g , respectively. The test functions and solutions ϕ are assumed to belong to Hilbert spaces. A Hilbert space is an infinite-dimensional function space with functions of specific properties that can be suitably managed in the same way as ordinary vectors in a vector space.
- the next step consists of integrating both sides of equality in (1), in (4) and in (5). With the techniques of integration by parts and the boundary value problem, it is reasonable to get linear partial derivative equations.

In obtaining this weak formulation, the existence of solutions for Eqs. (1), (4) and (5) is ensured. This is known as the weak solution of the initial equation or strong formulation.

- The weak forms of the ADRE problems of (4) change as follow:

to find $\phi \in H_0^1$ such that:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} \cdot Y_i + \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \nabla Y_i + \int_{\Omega} u \nabla \phi \cdot Y_i + \int_{\Omega} f(\phi) \cdot Y_i &= F(x_i) \cdot Y_i \quad \text{for all } Y_i \in H_0^1(\Omega) \\ \phi(x_i, t) &= g_D(x_i) \quad \text{for } x_i \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, t > 0 \\ \frac{\partial \phi(x_i, t)}{\partial n} &= g_N(x_i) \quad \text{for } x_i \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, t > 0 \end{aligned} \quad (10)$$

where Y_i is the smooth function and H_0^1 is the Hilbert space.

- The weak forms of the Stokes equation of (4) are:

to find $\vec{u} = (u_1, u_2)$ and $p \in [H_0^1(\Omega)]^2$ and $p \in L^2(\Omega)$ such that:

$$\begin{aligned} \mu \int_{\Omega} \nabla \vec{u} \cdot \nabla \vec{v} - \int_{\Omega} (\text{div } \vec{v}) p &= \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} \quad \text{for all } \vec{v} \in [H_0^1(\Omega)]^2, \\ \int_{\Omega} (\text{div } \vec{u}) q &= 0 \quad \text{for all } q \in L^2(\Omega), \\ \vec{u}(x, y) &= \vec{h}_D(x, y) \quad \text{for } x, y \in \Gamma_D \\ \nabla \vec{u} \cdot n &= \vec{h}_N(x, y) \quad \text{for } x, y \in \Gamma_N \end{aligned} \quad (11)$$

where $\vec{v}$ and g are the smooth functions and H_0^1 is the Hilbert space.

2.2.2. Galerkin formulation and finite element approximation

To obtain Galerkin formulation it is necessary, first, to build a more or less regular triangulation τ^h quasi-uniform in the domain Ω . This triangulation is composed of the elements K_i and the vertices x_i (as shown in Fig. 4) in order to create an appropriate discrete space $\tau^h \subset \Omega$. The finite dimension spaces defined for the model are shown in (12);

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^1(\tau^h) &= \{v \in C(\Omega) : v|_K \text{ is a polynomial of total degree equal to 1 for } K \in \tau^h\} \\ &= \{v \in C(\Omega) : v|_K = a + bx + cy\}, \\ \mathbb{P}_0^1(\tau^h) &= \{v \in \mathbb{P}^1(\tau^h) : v(x) = 0 \text{ for } x \in \partial\Omega\} \\ \mathbb{P}^2(\tau^h) &= \{v \in C(\Omega) : v|_K \text{ is a polynomial of total degree equal to 2 for } K \in \tau^h\} \\ &= \{v \in C(\Omega) : v|_K = a + bx + cy + dxy + ex^2 + fy^2\} \\ \mathbb{P}_0^2(\tau^h) &= \{v \in \mathbb{P}^2(\tau^h) : v(x) = 0 \text{ for } x \in \partial\Omega\} \end{aligned} \quad (12)$$

For ADRE, ϕ_i must be located in the function space $\mathbb{P}^2(\tau^h)$, and the weak functions used are, $Y_i \in \mathbb{P}_0^2(\tau^h)$. For Stokes equation, $\vec{u}$ must be

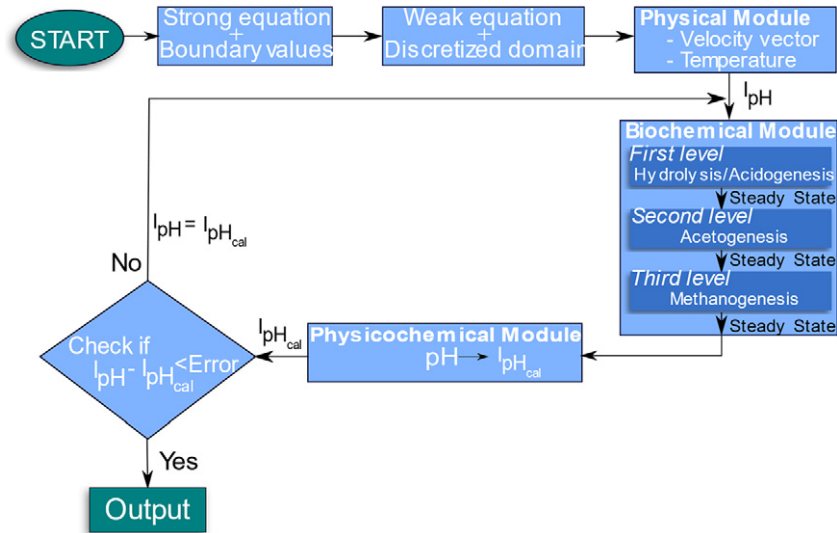


Fig. 4. Schematic representation of the anaerobic processes modelling framework.

located in the function space, $\mathbb{P}^2(\tau^h)$ and $p \in \mathbb{P}^1(\tau^h)$, and the weak functions used are, $v \in \mathbb{P}_0^2(\tau^h)$ and $q \in \mathbb{P}_0^1$, respectively (Zienkiewicz et al., 2000).

For all of this, and customizing ϕ_i = substrate (S_i) and cells (X_i), the Galerkin formulation is as follows:

- ADRE
- for substrate.

To find $S_i \in H_0^1(\Omega)$ such that:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} S_{im} \cdot Y_i + \mathcal{D} \int_{\Omega} \nabla S_{im} \cdot \nabla Y_i + \int_{\Omega} u \nabla S_{im} Y_i = \\ \int_{\Omega} (\rho_j X_i - K_d X_i) Y_i + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} S_{i(m-1)} Y_i \quad \text{for all } Y_i \in \mathbb{P}_0^2(\tau^h) \\ S_i(0, (x, y)) = S_{i0}(x, y) \quad \text{for } x, y \in \Omega_1 \text{ BC} \\ S_i(x, y, t) = g_D(x, y) \quad \text{for } x, y \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, t > 0 \\ \nabla S_i(x, y, t) n(x, y) = g_N(x, y) \quad \text{for } x, y \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, t > 0 \end{aligned} \quad (13)$$

- for cell.

To find $X_i \in H_0^1(\Omega)$ such that:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} X_{im} \cdot Y_i + \mathcal{D} \int_{\Omega} \nabla X_{im} \cdot \nabla Y_i + \int_{\Omega} u \nabla X_{im} Y_i = \\ \int_{\Omega} (\rho_j X_i - K_d X_i) Y_i + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} X_{i(m-1)} Y_i \quad \text{for all } Y_i \in \mathbb{P}_0^2(\tau^h) \\ X_i(0, (x, y)) = X_{i0}(x, y) \quad \text{for } x, y \in \Omega_1 \\ X_i(x, y, t) = g_D(x, y) \quad \text{for } x, y \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, t > 0 \\ \nabla X_i(x, y, t) n(x, y) = g_N(x, y) \quad \text{for } x, y \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, t > 0 \end{aligned} \quad (14)$$

Δt is the discretization of time obtained from the Taylor series;
 $\frac{\partial X_i}{\partial t}(t, x) \approx \frac{X_i(t + \Delta t, x) - X_i(t, x)}{\Delta t}$, $X_{im} = X_i(t + \Delta t, x)$, $X_{i(m-1)} = X_i(t, x)$.

- Stokes equations:

to find $\vec{u} = (u_1, u_2) \in \mathbb{P}^2(\tau^h)$ and $p \in \mathbb{P}^1(\tau^h)$ such that:

$$\begin{aligned} \mu \int_{\Omega} \nabla \vec{u} \cdot \nabla \vec{v} - \int_{\Omega} (\text{div } \vec{v}) p = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} \quad \text{for all } \vec{v} \in \mathbb{P}_0^2(\tau^h), \\ \int_{\Omega} (\text{div } \vec{u}) q = 0 \quad \text{for all } q \in \mathbb{P}_0^1(\tau^h), \\ \vec{u}(x, y) = \vec{h}_D(x, y) \quad \text{for } x, y \in \Gamma_D \\ \nabla \vec{u} \cdot \vec{n} = \vec{h}_N(x, y) \quad \text{for } x, y \in \Gamma_N \end{aligned} \quad (15)$$

2.3. Modelling: framework

The general framework used for the description of the model is shown in Fig. 4.

1. Once the governing equations and boundary values are defined, the next step is the development of the weak formulation and the building of the mesh for the different domains considered (Fig. 5).
2. In the physical module, calculation is made of the velocities and the temperature field in steady state.
3. The biochemical module is divided into three levels and the methodology is as follows:
 - (a) Substrate and cell concentrations are calculated at the first level until the steady state is reached: carbohydrate, proteins, fats, sugars, aminoacids and long-chain fatty acids.
 - (b) The product of the above reactions becomes a source for the calculation of substrate concentrations at the second level: propionate, butyrate, valerate.
 - (c) With the product of the reactions at the first and second levels the procedure continues in the same way as in the previous cases: acetate.

4. In the physicochemical module the pH values are calculated for each point in the system, I_{pH} , and then the resulting factor factors resulting ($I_{pH_{cal}}$). These values are compared with the initial I_{pH} and their convergence will give us the final result.

To select an optimal mesh it was decided to increase the number of nodes for the whole set of domains considered, since each of the processes is carried out in different parts of the system. For this reason, the total number of nodes chosen for the configuration of the mesh was 5399 (Fig. 5). This increase offers a more realistic simulation of the dispersion and the advection processes in the anaerobic reactor and, in addition, it can be assumed that pollutant removal and microbial kinetics is better represented.

2.4. Tools

There are many commercial software applications available for simulations. The vast majority have been developed for the simulation of specific cases. Among the most robust and widely accepted are CWM1, CW2D and BIO-PORE (Sams'o and Garcia, 2013) for constructed wetlands, and Matlab, BioWin and COMSOL Multiphysics for full-mix anaerobic fermentation systems. However, fewer models are available

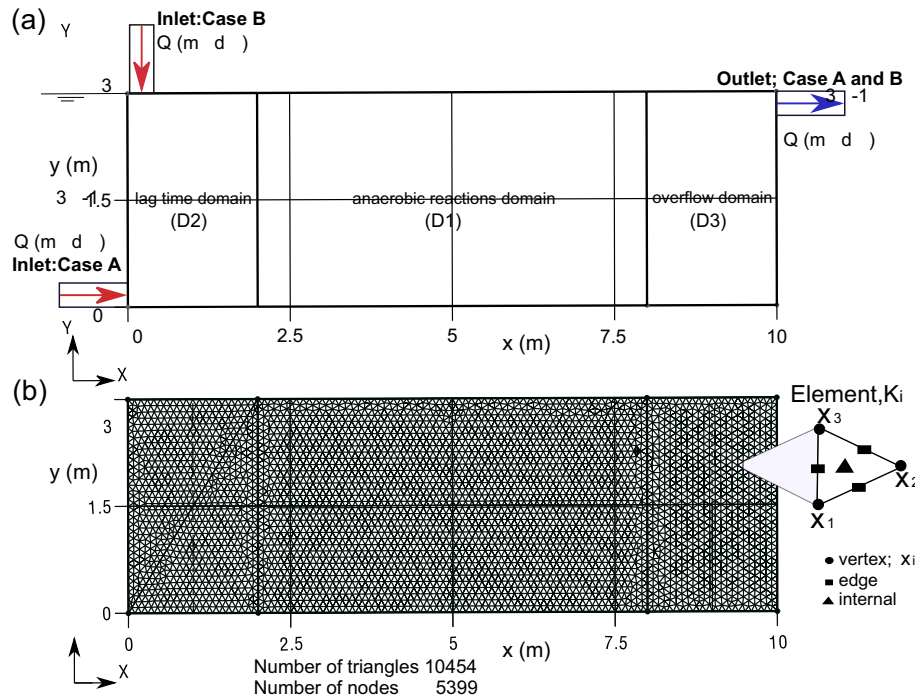


Fig. 5. (a) Geometric characteristics of the model under consideration and the different domains contemplated in it; (b) Polygonal discretization (H_0^1) showing an element (K_i) with the corresponding degrees of freedom.

for the simulation of free water surface wetlands and some of these include a limited number of components and interactions (Gargallo et al., 2017).

FreeFem++ was used to implement the algorithm for the calculation. It is a PDE solver which uses the FEM with its own high level language (Hecht, 2015). FreeFem++ has object-oriented programming language elements similar to C++. FreeFem++ has many advantages; it is an open access software, has a powerful generated mesh, and it has a large collection package to visualize approximate solutions. Its scripts can solve multiphysics non linear systems in 2D and 3D (Herus et al., 2018).

3. Results and discussion

The numerical simulations of the model were performed considering two different cases, according to the location of the flux inlet pipe and the direction of the flow (Fig. 5). Case A: location - lower left side, flow - parallel to the x-axis. Case B, location - top left side, flow - parallel to the y-axis. The outlet pipe, for both Cases A and B, was located on the top right side and was parallel to the x-axis.

The start-up conditions and boundary values considered are as follows;

1. The system is subject to a continuous and constant flow with a value of $Q = 9 \text{ m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$.
2. The operating time of the system is $T = 60$ days, a period in which the steady state of all the biochemical processes attained.
3. The diffusion coefficient is $\mathcal{D} = 8.64 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$.
4. The system consists of three domains (Fig. 5): D1 - anaerobic reaction domain, D2 - lag time domain (there is no microbial activity due to its adaptation to the environment), D3 - overflow domain (in which it is considered that there are no anaerobic reactions).
5. The kinetic and physicochemical parameters used are reported in Table 1, and the biological inhibition factors in Table 2.
6. The boundary value in the inlet for substrate concentrations is $S_i = 100 \text{ g(COD)} \cdot \text{l}^{-1}$ and for cells $X_i = 0.05 \text{ g(COD)} \cdot \text{l}^{-1}$ (Table 3).

7. Source values: propionate, butyrate, valerate, long-chain fatty acids and acetate are the products of biochemical reactions whose values are obtained from the stoichiometric relationship in which they form part (Table 3).

More detailed information about these expressions are given in the supplementary material and the parameter values can be found in the work of Batstone et al., 2002 and Zhang et al., 2015.

3.1. Hydraulic flow simulation

The flow simulation for Cases A and B after application of the steady-state Stokes equations (subsection 2.1.1) can be seen in Fig. 3. The maximum value of the velocity vector at the inlet and outlet points is $3 \text{ m} \cdot \text{d}^{-1}$, and in the rest of the domain an average velocity of $0.4 \text{ m} \cdot \text{d}^{-1}$ is maintained.

As can be seen, the trajectory drawn by the velocity vector is longer in Case A than in Case B.

Given that, for this model, the proposed geometric section is rectangular, regular meshing is proposed throughout the defined domains (see Fig. 5). As is clear in the simulations (Fig. 6), there is a regular distribution of the velocity vectors. If the geometry were to be changed, the methodology would remain the same, as the model is independent of the adopted geometry. In this case, the meshing can be refined with, for example, the nodes closer together in those areas where more definition is required (narrowing, singular points, etc).

It is important to reiterate that the advection-diffusion-reaction equation of the model describes the relationship between hydraulic, physical, biochemical and physicochemical properties. Using this methodology, by modifying the geometry it is possible to design flow so that the different processes take place in a certain location within the reactor, thereby improving biochemical reactions.

3.2. Distribution of the biomass and substrates

In this section, the behaviour of the biomass and substrates inside the system is evaluated. They are represented in steady state in Fig. 7

Table 1
Kinetic and physicochemical parameters.

Kinetic parameters	Sugar	Fats	Amino acids	Propionate	Butyrate	LCFA	Valerate	Acetate
$\mu_{max}d^{-1}$	6.9	3.9	6.9	0.49	0.67	6.1	1.1	7.5
$K_d d^{-1}$	0.9	1	1	0.04	0.03	0.25	0.04	0.037
$K_s kg(COD)/m^3$	0.5	0.8	3	1.145	0.176	0.8	0.5	0.037
Physicochemical parameters								
$K_a kmol/m^3$	CO_2	NH_3	Kw	propionate	butyrate	LCFA		
or $kgCOD/m^3$	6.35	9.25	14	4.88	4.82	4.86		

Table 2
Inhibition expressions used and constants according to the experimental data (Batstone et al., 2002). K_I =inhibition parameter; S = process substrate; S_I =inhibitor concentration; X = process biomass.

Description	Equation	Inhibition constant
free ammonia inhibition	$I_{IN} = \frac{S_I}{S_I + K_I}$	$K_I = 0.01$
total ammonia limitation	$I_{NH_3} = \frac{1}{1 + \frac{S}{K_1}}$	$K_I = 0.001$
pH inhibition	$I = \frac{1 + 2 \times 10^{0.5(pH_{UL} - pH_{LL})}}{1 + 10^{pH - pH_{UL}} + 10^{pH_{LL} - pH}}$	$pH_{LL} = 6; pH_{UL} = 8.5$
Butyrate and valerate competition for C_4	$I = \frac{1}{1 + \frac{S_I}{S}}$	

for the simultaneously occurring acidogenesis (a), acetogenesis (b) and methanogenesis (c), considering Case A. It can be seen how cell growth and total consumption of the substrate takes place within the anaerobic reaction domain (Fig. 5(a)).

The simulations show different locations in the substrate bulk for the acidogenesis of sugars, the acetogenesis of butyrate and the methanogenesis of acetate. Similarly, the bacteria groups operate in separate spaces. Sugar concentrations, with a value of $S_i = 100g(COD) \cdot l^{-1}$ at the inlet pipe, are completely removed, between the values of $x = 2$ and $x = 3$, while butyrate and acetate appear as products of the previous biochemical reactions (Fig. 3). The maximum values attained for butyrate and acetate are $S_{i_{but}} = 12g(COD) \cdot l^{-1}$ and $S_{i_{acet}} = 100g(COD) \cdot l^{-1}$, respectively. Both are removed in the mid-zone of the reactor.

The maximum biomass concentrations, due to the abundance of substrate, are located: in the acidogenesis between the value of $x = 2$ and $x = 3$, with a maximum value of $X_i = 0.21g(COD) \cdot l^{-1}$; in the acetogenesis between the value of $x = 4.5$ and $x = 8.4$, with a maximum value of $X_i = 0.7g(COD) \cdot l^{-1}$; and in the methanogenesis, between the value of $x = 4.8$ and $x = 8.4$, with a maximum value of $X_i = 7.4 g(COD) \cdot l^{-1}$. The inlet value for all of them is $X_i = 0.5g(COD) \cdot l^{-1}$ and the residual value are: $X_{i_{acidogenesis}} = 0$, $X_{i_{acetogenesis}} = 0.1$, $X_{i_{methanogenesis}} = 7.4 g(COD) \cdot l^{-1}$.

The higher concentration of bacteria benefits from the substrate intensification, the product of the biochemical reaction in the previous phases, acidogenesis/acetogenesis. Once the substrate has been removed, the bulk of the cells start to reduce due to their decay advection and diffusion (Fig. 7).

The results show the potential of the model, namely its ability to perform calculations for multiple processes, some occurring at the same time and others at different times, and whose results depend on each other. Evidence for this can be seen in Fig. 7 which allows identification of the different areas of the system where the biochemical and

physicochemical reactions take place, and whose distributions are influenced by the diffusion and advection processes. The shape of cell distribution (Fig. 7, Xi) indicates a reasonable relationship with the rest of the colonies and with its substrates. The methodology allows a representation to be made of the distribution of the colonies with some coherence. This enables actions to be carried out in areas of the digester where they are needed to achieve certain improvements including, for example, temperature control at specific points to regulate the growth of particular previously selected cells. In general, the model is able to predict, for all the points of the system, the concentrations of each of the biochemical variables, the pH and the biogas production.

3.3. Comparison of two specific cases

By comparing the results obtained in substrate simulations for Cases A and B, described above, and considering the acidogenesis, acetogenesis, and methanogenesis (Fig. 8 (a) and (b)), a higher efficiency can be observed for substrate removal in Case A. In Case B, especially in acetogenesis and methanogenesis, part of the substrate, butyrate and acetate, reaches the outlet without being removed. Their values are $S_{i_{but}} = 0.5g(COD) \cdot l^{-1}$ and $S_{i_{acet}} = 2g(COD) \cdot l^{-1}$.

A graphical representation of both Cases is shown in Fig. 8-(c) through the AA axis. It is located at a height of 1.5 m and parallel to the x-axis (Fig. 8 (c)). As can be seen, in acidogenesis, no significant difference is found between the two cases. However, in the other phases there is approximately a 17% of increase in the concentrations of substrate. The relative displacement between both curves, Case B vs. Case A, shows the bulk of the substrate dragged to the right of the domain, with maximum concentration values of $S_{i_{but}} = 12g(COD) \cdot l^{-1}$ and $S_{i_{acet}} = 100g(COD) \cdot l^{-1}$, respectively.

As is clear from Fig. 8, it can be deduced that the inlet pipe location in an anaerobic plug flow reactor has a significant impact on substrate removal efficiency. Changes in the boundary values have an important

Table 3
Boundary value problems and sources for anaerobic processes: $S_i = 100g(COD) \cdot l^{-1}$, $X_i = 0.05g(COD) \cdot l^{-1}$.

CASE	Sugar	Fats	Proteins	Propionate	Butyrate	LCFA	Valerate	Acetate
Inlet Substrate	S_i	S_i	S_i	–	–	–	–	–
Inlet Cells	X_i	X_i	X_i	X_i	X_i	X_i	X_i	X_i
Source	–	–	–	S_{ipro}	S_{ibu}	S_{ifa}	S_{iva}	S_{iac}

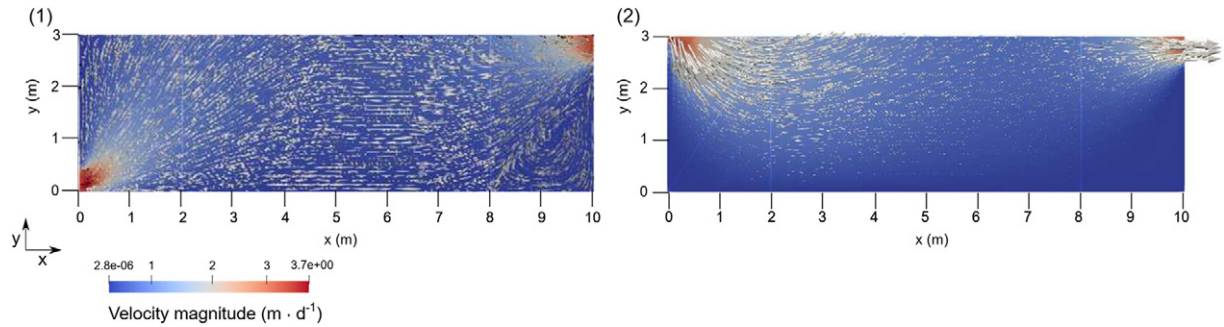


Fig. 6. Flow simulation results; (1) Case A and (2) Case B.

effect on the efficiency of microbial reactions in the removal of organic matter. One of the advantages of the model is that it can be used to compare different solutions to a problem, depending on the boundary values to which they are subject. The simulations allow a comparison of various situations and, in this way, enable improvements to the operating conditions of the reactor.

Freeform++ is an excellent tool for solving this kind of problem due to its calculating speed and accuracy, facilitating comparative studies of different options in a rapid and precise manner.

3.4. Effectiveness in the conservation of microorganisms

The simulations, along the axis AA, of the microorganisms involved in the different phases of the anaerobic processes are shown in Fig. 9. This axis is at a height of 1.5 m and in the direction of the x-axis (Fig. 9-(h)).

The values of the concentrations at the inlet pipe, of each of the microorganisms that take part in the anaerobic digestion process, are equal

to $X_i = 0.05 \text{g(COD)} \cdot \text{l}^{-1}$. The highest concentration values achieved in steady state in $\text{g(COD)} \cdot \text{l}^{-1}$ are: $X_{i\text{sugar}} = 7.5$, $X_{i\text{protein}} = 24$, $X_{i\text{triglyceride}} = 0.19$, $X_{i\text{butyrate}} = 0.65$, $X_{i\text{propionate}} = 0.65$, $X_{i\text{valerate}} = 0.23$, $X_{i\text{acetate}} = 0.5$. As shown in Fig. 9, the bulk concentrations in acidogenesis are located in the range of $x = 1\text{--}3$ ((a), (b), (c)), in acetogenesis $x = 5\text{--}8$ ((d), (e), (f)) and in methanogenesis $x = 6.5\text{--}8$ ((g)).

In order to preserve the survival of bacteria communities in the system, a feedback point could be established to return a portion of the fluid to the inlet pipe. Based on the results obtained from the graphs, the feeding points, selected for this case, are located at the distance of 2–3 m for the acidogenesis, 5–5.5 m for the acetogenesis and 6.5–8 m for the methanogenesis along the AA axis.

It should be pointed out that, in the present paper, the concentration profiles of the different variables are compared along the AA axis. The possibility of obtaining charts along different axes is available through this methodology. For this reason, with this approach, a systematic study of the stability of the cell colonies and its different survival areas can be made.

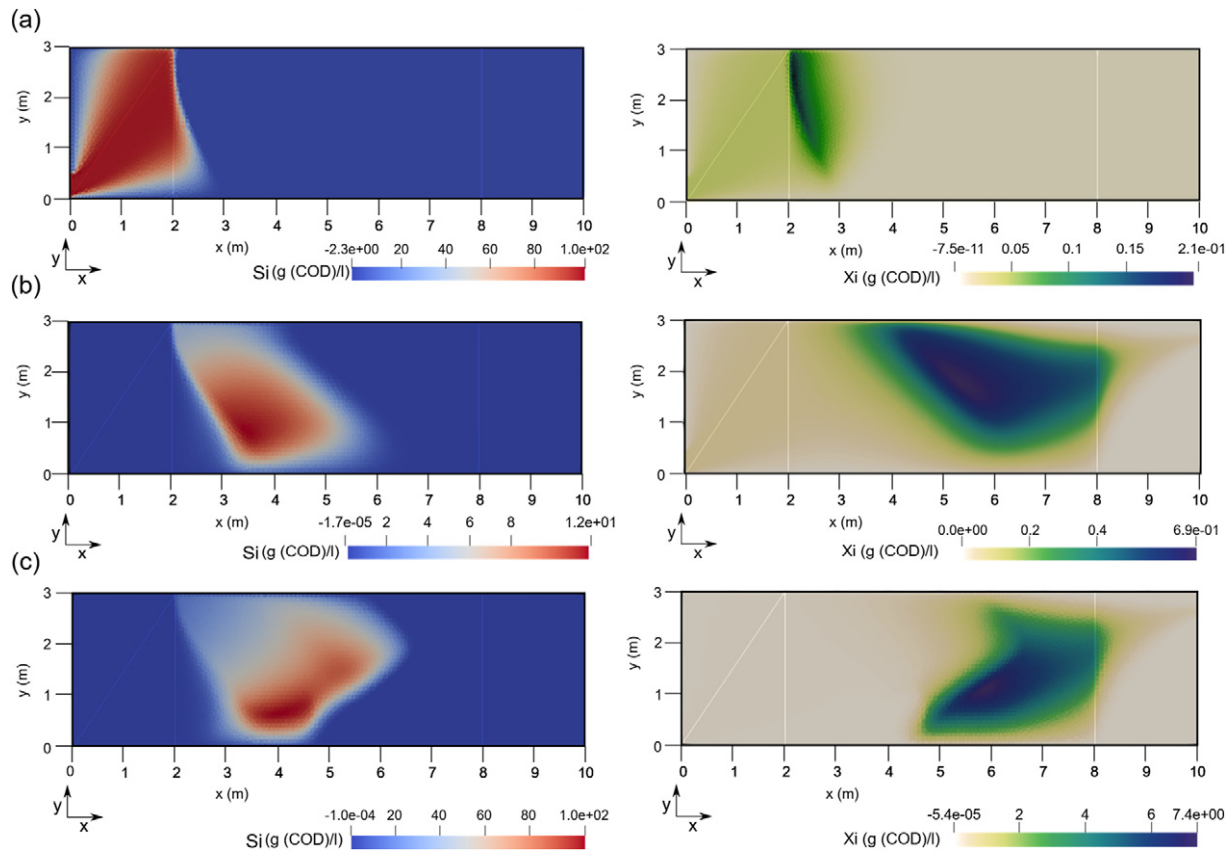


Fig. 7. Simulated substrates (Si) and cells (Xi) for (a) acidogenesis of sugar, (b) acetogenesis of butyrate, (c) methanogenesis of acetate.

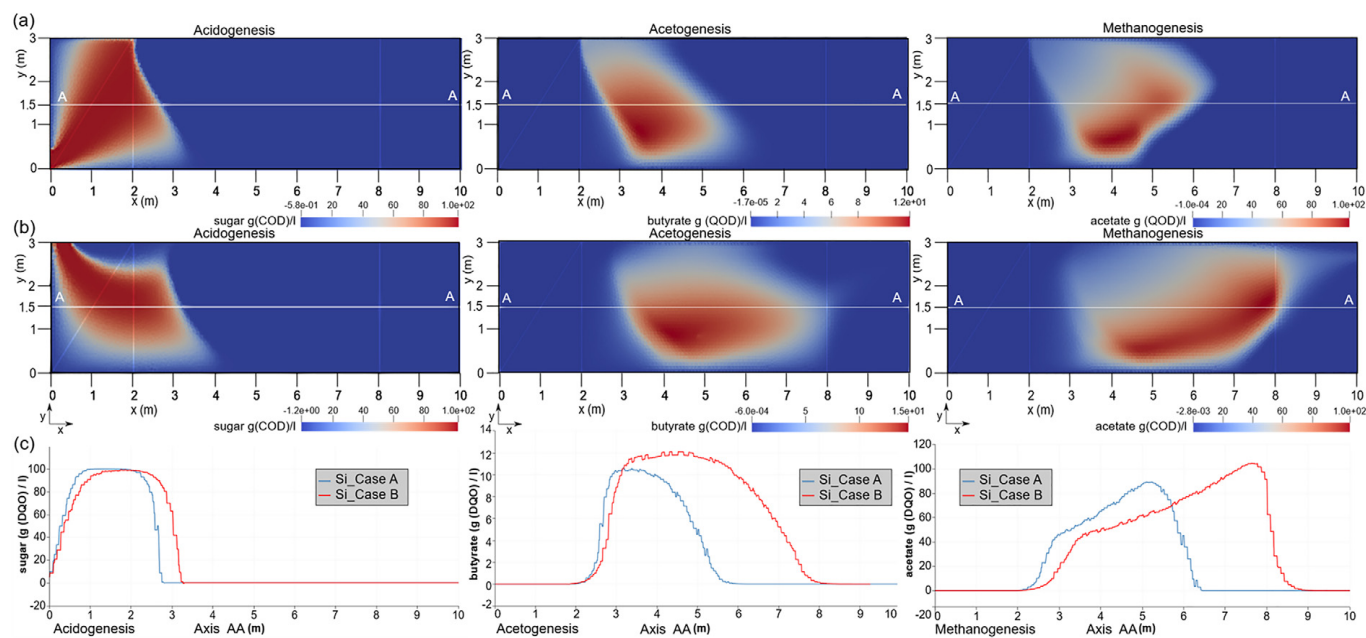


Fig. 8. Simulations of substrate in acidogenesis, acetogenesis and methanogenesis for two cases, according to the location of the inlet pipe; (a) Case A: on the lower left side (b) Case B: on the top left side.

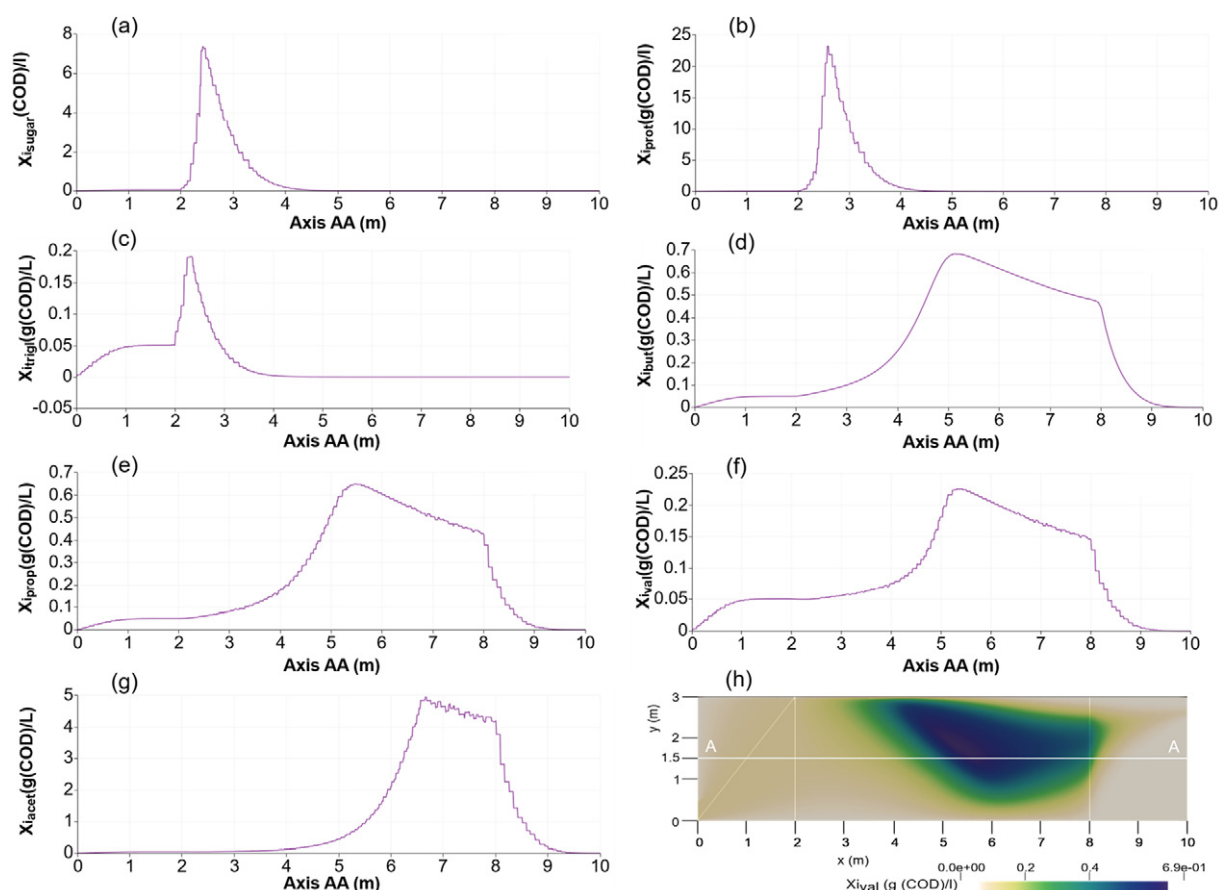


Fig. 9. Longitudinal profiles of the biomass along the AA axis (reflected in (h)) for the different processes. Acidogenesis for sugars (a), proteins (b) and fats (c); acetogenesis for butyrate (d), propionate (e) and valerate (f); and methanogenesis FOR acetate (g).

4. Conclusions

A mathematical model for wastewater treatment in anaerobic-plug flow reactors was developed in this work to describe the complex behaviour of a high number of simultaneous reactions in a heterogeneous fluid within a digester subject to continuous and constant flow. This model satisfactorily links biochemical and physicochemical reactions to the physical and hydraulic properties through Stokes equations and the advection-diffusion-reaction equations where ADM1 has been implemented. In total, 21 variables were considered. The resulting partial differential equations of the model, both linear and nonlinear, were treated by the Galerkin finite element formulation. The results were facilitated by the development of a flowchart and the use of the open access software Freefem++, an effective tool for applying the finite element method due to its calculating speed and accuracy. In the light of the results, the potential of this methodology for calculating multiple biochemical and physicochemical reactions is evidenced. By visualizing datasets through their simulations, it can show the different areas where these reactions take place within the system. With this methodology it is also possible to design flows according to the geometry of the reactor so that the chemical and physicochemical reactions can be carried out in certain suitable areas within the digester. The possibility, with this methodology, of representing the distribution of the anaerobic cells with some coherence enables actions to be carried out in some areas of the digester to improve their performance. In general, the model is able to predict, for all the points of the system, the concentrations of each of the biochemical variables, the pH and the biogas production. Another advantage of the model is that it can be used to compare different solutions of a problem, depending on the boundary values to which they are subject. Finally, the fundamentals of the model are

generally valid with a certain accuracy, even if the reality of the problem is not reflected. Future applications of the model include the possibility of optimizing the anaerobic digestion process through the incorporation in the model of the effects of radiation, temperature and wind.

Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgements

This research has been co-funded by the INTERREG V-A Cooperation, Spain-Portugal MAC (Madeira-Azores-Canarias) 2014-2020 programme, MITIMAC project (MAC2/1.1a/263)

Appendix A. Supplementary data

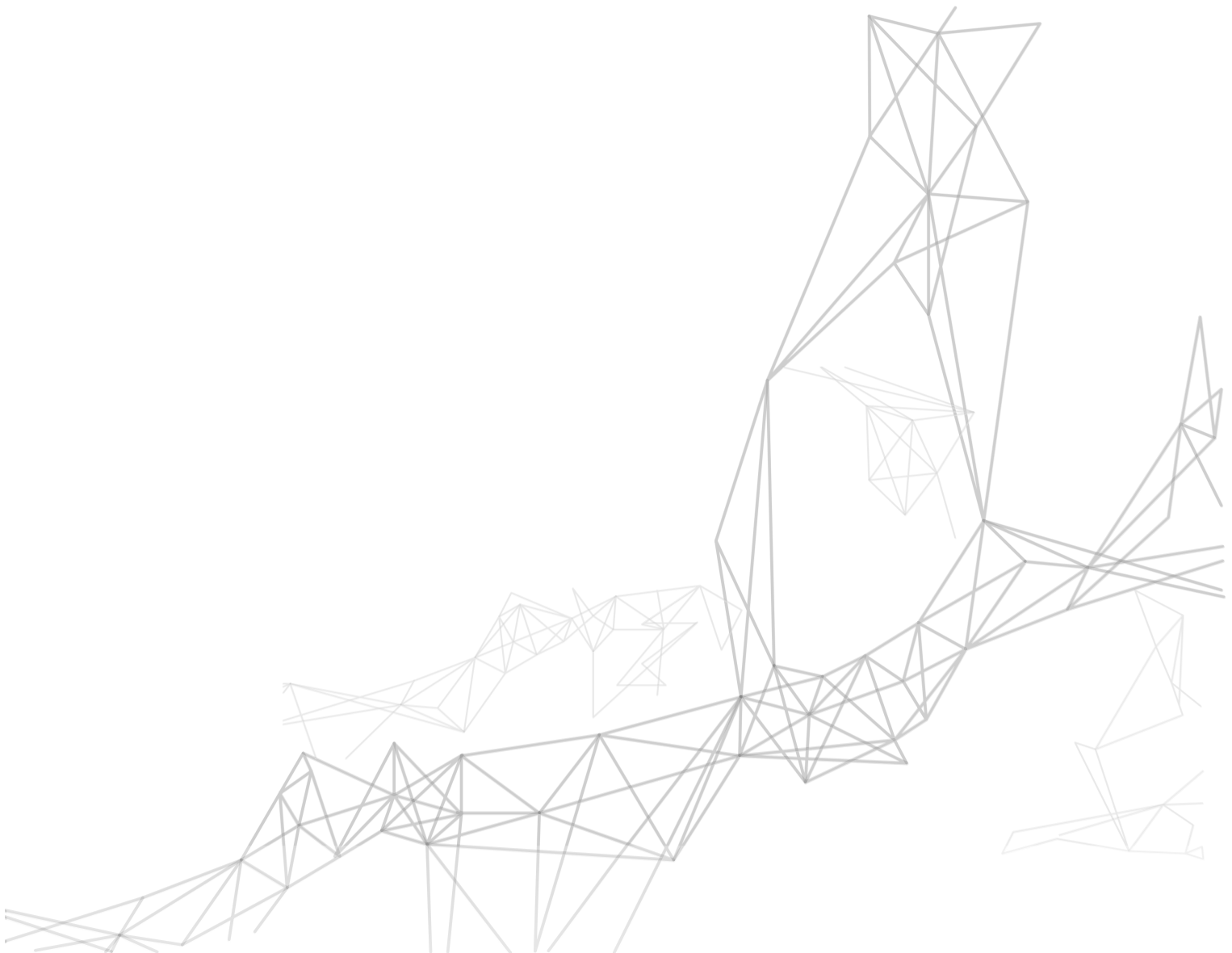
Supplementary data to this article can be found online at <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.136244>.

References

- Alvarez, J., Ruíz, I., Soto, M., 2008. Anaerobic digesters as a pretreatment for constructed wetlands. *Ecological Engineering* 33, 54–67 URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857408000293> <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2008.02.001>.
- Aragónés, L., Pagán, J., López, I., Navarro-González, F., Villacampa, Y., 2019. Galerkin's formulation of the finite elements method to obtain the depth of closure. *Science of The Total Environment* 660, 1256–1263 URL: <http://www.sciencedirect.com/>

- science/article/pii/S004896971930018X <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.01.017>.
- Batstone, D., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S., Pavlostathis, S., Rozzi, A., Sanders, W., Siegrist, H., Vavilin, V., 2002. The iwa anaerobic digestion model no 1 (adm1). *Water Sci. Technol.* 45, 65–73. URL: <http://wst.iwaponline.com/content/45/10/65>, arXiv:<http://wst.iwaponline.com/content/45/10/65.full.pdf>.
- Bozkurt, S., Moreno, L., Neretnieks, I., 2000. Long-term processes in waste deposits. *Science of The Total Environment* 250, 101–121. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969700003703> [https://doi.org/10.1016/S0048-9697\(00\)00370-3](https://doi.org/10.1016/S0048-9697(00)00370-3).
- Brito-Espino, S., Mendieta-Pino, C., Pérez-Báez, S., Ramos-Martín, A., 2019. Application of a model-based method for hydrodynamic processes in constructed wetland to management of livestock wastewater based on finite elements method. *Desalin. Water Treat.* 152, 92–98. <https://doi.org/10.5004/dwt.2019.23940>.
- Comino, Elena, Riggio, Vincenzo A., M.R., 2013. Constructed wetland treatment of agricultural effluent from an anaerobic digester. *Ecological Engineering* 54, 165–172 URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857413000426> <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2013.01.027>.
- Donoso-Bravo, A., Sadino-Riquelme, C., Gómez, D., Segura, C., Valdebenito, E., Hansen, F., 2018. Modelling of an anaerobic plug-flow reactor. process analysis and evaluation approaches with non-ideal mixing considerations. *Bioresource Technology* 260, 95–104. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852418304449> <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2018.03.082>.
- Gargallo, S., Martín, M., Oliver, N., Hernández-Crespo, C., 2017. Biokinetic model for nitrogen removal in free water surface constructed wetlands. *Science of The Total Environment* 587–588, 145–156. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969717303376> <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.02.089>.
- Georgoulis, E.H., Pryer, T., 2018. Recovered finite element methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 332, 303–324. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782517307764> <https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.12.026>.
- Hartl, M., Bedoya-Ríos, D.F., Fernández-Gatell, M., Rousseau, D.P., Laing, G.D., Garfi, M., Puigagut, J., 2019. Contaminants removal and bacterial activity enhancement along the flow path of constructed wetland microbial fuel cells. *Science of The Total Environment* 652, 1195–1208 URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969718341305> <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.10.234>.
- Hecht, F., 2015. *FreeFem++*. New development in freefem++. *J. Numer. Math.*, 20(3–4), pp. 251–266. (Retrieved 24 Sep. 2018, from d).
- Herus, V.A., Ivanchuk, Martyniuk, N., P.M., 2018. A system approach to mathematical and computer modeling of geomigration processes using freefem++ and parallelization of computations. *Cybern. Syst. Anal.* 54, 284–292 URL: <https://doi.org/10.1007/s10559-018-0030-3>.
- Hu, C., Yan, B., Jun Wang, K., Min Xiao, X., 2018. Modeling the performance of anaerobic digestion reactor by the anaerobic digestion system model (adsm). *J. Environ. Chem. Eng.* 6, 2095–2104 URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2213343718301398> <https://doi.org/10.1016/j.jece.2018.03.018>.
- Imfeld, G., Braeckvelt, M., Kusch, P., Richnow, H.H., 2009. Monitoring and assessing processes of organic chemicals removal in constructed wetlands. *Chemosphere* 74, 349–362. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653508012095> <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2008.09.062>.
- Ivanovs, K., Spalvins, K., Blumberga, D., 2018. Approach for modelling anaerobic digestion processes of fish waste. *Energy Procedia* 147, 390–396. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1876610218302650> <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2018.07.108> international Scientific Conference “Environmental and Climate Technologies”, CONECT 2018, 16–18 May 2018, Riga, Latvia.
- Kleerebezem, 2006. Critical analysis of some concepts proposed in adm1. *Water Sci. Technol.* 54 (4), 51–57.
- Kumar, J., Zhao, Y., 2011. A review on numerous modeling approaches for effective, economical and ecological treatment wetlands. *Journal of Environmental Management* 92, 400–406. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301479710004159> <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2010.11.012>.
- Kythreotou, N., Florides, G., Tassou, S.A., 2014. A review of simple to scientific models for anaerobic digestion. *Renew. Energy* 71, 701 – 714. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960148114003164>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.renene.2014.05.055>.
- Laitinen, J., Moliis, K., Surakka, M., 2017. Resource efficient wastewater treatment in a developing area—climate change impacts and economic feasibility. *Ecological Engineering* 103, 217–225. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857417301817> <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2017.04.017>.
- Lauwers, J., Appels, L., Thompson, I.P., Degre've, J., Impe, J.F.V., Dewil, R., 2013. Mathematical modelling of anaerobic digestion of biomass and waste: power and limitations. *Prog. Energy Combust. Sci.* 39, 383 – 402. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128513000178>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.pecs.2013.03.003>.
- Lin, J., Reutskiy, S., 2018. An accurate meshless formulation for the simulation of linear and fully nonlinear advection diffusion reaction problems. *Advances in Engineering Software*, 127–146. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0965997817308268> <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2018.08.012>.
- Mendieta-Pino, C.A., Ramos-Martín, A., Perez-Baez, S.O., Brito-Espino, S., 2019. Management of slurry in gran canaria island with full-scale natural treatment systems for wastewater (ntsw). one year experience in livestock farms. *Journal of Environmental Management* 232, 666–678. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301479718313380> <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2018.11.073>.
- Regmi, P., Stewart, H., Youri Amerlinck, E.A., 2019. The future of WRRF modelling- outlook and challenges. *Water Sci. Technol.* 79 (1), 3–14.
- Rossi, D., Gargiulo, L., Valitov, G., Gavrilidis, A., Mazzei, L., 2017. Experimental characterization of axial dispersion in coiled flow inverters. *Chemical Engineering Research and Design* 120, 159–170. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263876217300977> <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2017.02.011>.
- Sams'o, R., Garcia, J., 2013. Bio-pore, a Mathematical Model to Simulate Biofilm Growth and Water Quality Improvement in Porous Media: Application and Calibration for Constructed Wetlands. 54 pp. 116–127.
- Sanchez-Ramos, D., Agullo, N., Sams'o, R., García, J., 2017. Effect of key design parameters on bacteria community and effluent pollutant concentrations in constructed wetlands using mathematical models. *Science of The Total Environment* 584–585, 374–380 URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969717300141> <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.01.014>.
- Union, E., 2008. Green paper on the management of bio-waste in the European Union. URL: <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT>.
- de la Varga, D., Ruiz, I., Alvarez, J., Soto, M., 2015. Methane and carbon dioxide emissions from constructed wetlands receiving anaerobically pretreated sewage. *Science of The Total Environment* 538, 824–833 URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969715305933> <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.08.090>.
- Wang, M., Zhang, D.Q., Dong, J.W., Tan, S.K., 2017. Constructed wetlands for wastewater treatment in cold climate. a review. *Journal of Environmental Sciences* 57, 293–311 URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1001074217303108> <https://doi.org/10.1016/j.jes.2016.12.019>.
- Wu, H., Zhang, J., Ngo, H.H., Guo, W., Hu, Z., Liang, S., Fan, J., Liu, H., 2015. A review on the sustainability of constructed wetlands for wastewater treatment: Design and operation. *Bioresource Technology* 175, 594–601. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852414014904> <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2014.10.068>.
- Zhang, Y., Piccard, S., Zhou, W., 2015. Improved adm1 model for anaerobic digestion process considering physico-chemical reactions. *Bioresource Technology* 196, 279–289 URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852415010275> <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2015.07.065>.
- Zienkiewicz, O., Taylor, R., Taylor, R., Taylor, R., 2000. *The Finite Element Method: The basis. Fluid Dynamics*. Butterworth-Heinemann URL: <https://books.google.es/books?>.

6 A framework based on finite element method (FEM) for modelling and assessing the affection of the local thermal weather factors on the performance of anaerobic lagoons for the natural treatment of swine wastewater



Article

A Framework Based on Finite Element Method (FEM) for Modelling and Assessing the Affection of the Local Thermal Weather Factors on the Performance of Anaerobic Lagoons for the Natural Treatment of Swine Wastewater

Saulo Brito-Espino ^{*,†}, Alejandro Ramos-Martín [†] , Sebastian O. Pérez-Báez [†], Carlos Mendieta-Pino [†]  and Federico Leon-Zerpa [†] 

Department of Process Engineering, Institute for Environmental Studies and Natural Resources (i-UNAT), University of Las Palmas de Gran Canaria (ULPGC), 35017 Las Palmas, Spain; alejandro.ramos@ulpgc.es (A.R.-M.); sebastianovidio.perez@ulpgc.es (S.O.P.-B.); carlos.mendieta@ulpgc.es (C.M.-P.); federico.leon@ulpgc.es (F.L.-Z.)

* Correspondence: saulo.brito101@alu.ulpgc.es

† These authors contributed equally to this work.



Citation: Brito-Espino, S.; Ramos-Martín, A.; Pérez-Báez, S.O.; Mendieta-Pino, C.; Leon-Zerpa, F. A Framework Based on Finite Element Method (FEM) for Modelling and Assessing the Affection of the Local Thermal Weather Factors on the Performance of Anaerobic Lagoons for the Natural Treatment of Swine Wastewater. *Water* **2021**, *13*, 882. <https://doi.org/10.3390/w13070882>

Academic Editor: Bing-Jie Ni

Received: 1 February 2021

Accepted: 11 March 2021

Published: 24 March 2021

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2021 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Abstract: Anaerobic lagoons are natural wastewater treatment systems suitable for swine farms in small communities due to its low operational and building costs, as well as for the environmental sustainability that these technologies enable. The local weather is one of the factors which greatly influences the efficiency of the organic matter degradation within anaerobic lagoons, since microbial growth is closely related to temperature. In this manuscript, we propose a mathematical model which involves the two-dimensional Stokes, advection–diffusion–reaction and heat transfer equations for an unstirred fluid flow. Furthermore, the Anaerobic Digestion Model No1 (ADM1), developed by the International Water Association (IWA), has been implemented in the model. The partial differential equations resulting from the model, which involve a large number of state variables that change according to the position and the time, are solved through the use of the Finite Element Method. The results of the simulations indicated that the methodology is capable of predicting reasonably well the steady-state of the concentrations for all processes that take place in the anaerobic digestion and for each one of the variables considered; cells, organic matter, nutrients, etc. In view of the results, it can be concluded that the model has significant potential for the design and the study of anaerobic cells' behaviour within free flow systems.

Keywords: modelling; anaerobic digestion; ADM1; free flow reactors; finite elements analysis

1. Introduction

Anaerobic digestion (AD) is an eco-friendly biological process which is universally used for the treatment of agricultural, industrial and municipal wastewater around the world [1–4]. Its utilization is increasingly widely, due to its capacity for producing methane, which can be used afterwards as a heat source or for electricity generation, taking part within the low-carbon energy technologies and circular bio-economy [5]. In this context, anaerobic lagoons (AL) are natural wastewater treatment systems with a long hydraulic retention time, suitable for small communities due to the low energy demand and the operating costs [6–9]. By applying this kind of technology, the mechanical equipment, used for mixing processes in conventional plants, are avoidable. In addition, AL offer a number of advantages, such as the establishment of concentration profiles along the reactor, a buffering capacity in cases of overloads and greater protection against acidification [10]. However, due to the fact that AD is strongly influenced by temperature, there is a close dependence between AL and weather conditions, so its implementation may be limited in cold or low solar radiation areas [8,11].

The application of mathematical models builds understanding for both microbial-related dynamic and kinetic processes, reveals optimisation possibilities, which lastly improves the digester's performance [12,13]. The IWA Anaerobic Digestion Model No.1 (ADM1) [14], created in 2002 to establish a common platform for the modelling of AD processes [15], has been widely applied in waste treatment processes, due to its high feasibility, considering the fact that most of the processes of AD are included within ADM1 [16]. However this model has merely been applied to completely mixed reactors. The approach of models based on the ADM1 for unstirred waste water treatment systems has been little studied. In these models, complexity is increased and the effect of boundary conditions is essential. Moreover, the mathematical complexity required by these models does not entail a significant issue, due to the increasing technological and computational development [12].

In the past twenty years many researches based on mathematical models for treatment processes in lagoons have been carried out. Fleming [17] created the first models applying computational fluid dynamic (CFD) for the prediction of the performance of full-scale incompletely mixed anaerobic digesters. Wu and Chen [8] developed a CFD model for AL which combines physical and biological processes, and includes both heat conduction and solar radiation by a thermal model. In this model, a single-phase incompressible Newtonian fluid is considered. Goodarzi, Sookhak Lari, and Mossaiby [18] determined the effect of ambient and inlet temperature variations on the hydraulic performance of a typical rectangular pond. In all these described models, the biological processes are depicted by a single equation depending on the concentrations of the influent and effluent. Brito-Espino, Ramos-Martín, Pérez-Báez, and Mendieta-Pino [19] defined advection, diffusion and reaction phenomena for wastewater treatment in anaerobic plug flow reactors by non-linear, second order, partial differential equations. ADM1 is implemented within this model, and both biochemical and physical–chemical reactions of ADM1 are calculated by a flowchart for sequential processes. In this method, temperature is not considered. Nevertheless, very few researches have been conducted to develop a comprehensive model which integrates fluid flow, heat transfer, and cells behaviour in AL.

The aim of this work is to set-up a theoretical framework for wastewater treatment in unstirred flow anaerobic lagoons, by a model which allows the integration of fluid flow, heat transfer and cells behaviour, for the purpose of describing processes occurring in AL. The implementation of the ADM1 into the model and the consideration of the influence of the local thermal weather, identified with the boundary conditions, allows the model to portray the processes taking place in reality more precisely than [19]. In order to do this, an improved two dimensional mathematical model, based on the coupling of a set of parabolic partial differential equations (PDEs) and related to the phenomena associated to AL, has been developed. In addition, Dirichlet, Neumann and Robin boundary conditions have been established on the differential equations. This model combines the parametrization of different processes within the lagoon and its environment with the finite element analysis. Finally, the parallelization of the resulting algorithm has been performed in the simulation, therefore allowing an improved computational efficiency than the resulting form sequential processes in [19]. Thanks to the help of FreeFem++ and the parallel solver package, available for this software, the processing of each one of the variables related to AD processes and the simultaneous exchange of the data has been feasible. Having said this, we conclude that the novelty of this study resides in the following aspects. Firstly, in the implementation of the ADM1 and the heat transfer phenomenon in a mathematical model which describes a unstirred fluid flow, in order to predict the spatial distribution of the different variables that take part in the processes within the AL. Furthermore, secondly, in the optimisation and designing of the algorithm, by parallel method, providing an accurate forecast of the real behaviour of the process, as is shown in the ADM1. In the simulation, two different scenarios have been chosen as examples; the first corresponds to a conventional AL which is subjected to the ambient temperature, and the second includes

heat sources, induced by solar assisted [20] or through the biofuel recovery in the anaerobic process [21,22].

2. Materials and Methods

2.1. Overview

Pollutant is removed in AL through combination of physical, biochemical and physical–chemical phenomena. Advection, diffusion and heat transfer are the most common physical processes in these systems (Figure 1). Both the organic matter and the suspended microorganism within lagoons are subjected to the mechanical transport with the bulk flow of the water (advection). At the same time, they tend to spread out and diffuse from higher to lower concentration as time varies (diffusion). The energy transfer in the system, due to a temperature gradient (heat transfer), is performed by conduction and convection processes. Atmospheric factors associated with the borders of the model on the Earth's surface include, beside the two previous, radiation process. Digestion process is carried by anaerobic microorganism's activity, bacteria and archaea, through a number of sequential and parallel reactions. The biochemical reactions consist of irreversible five-stage processes; disintegration, hydrolysis, acidogenesis, acetogenesis and methanogenesis reactions. Physical–chemical reactions are those reversible processes where cells are not involved. They are, firstly, the ion association/dissociation, and gas–liquid transfer [14].

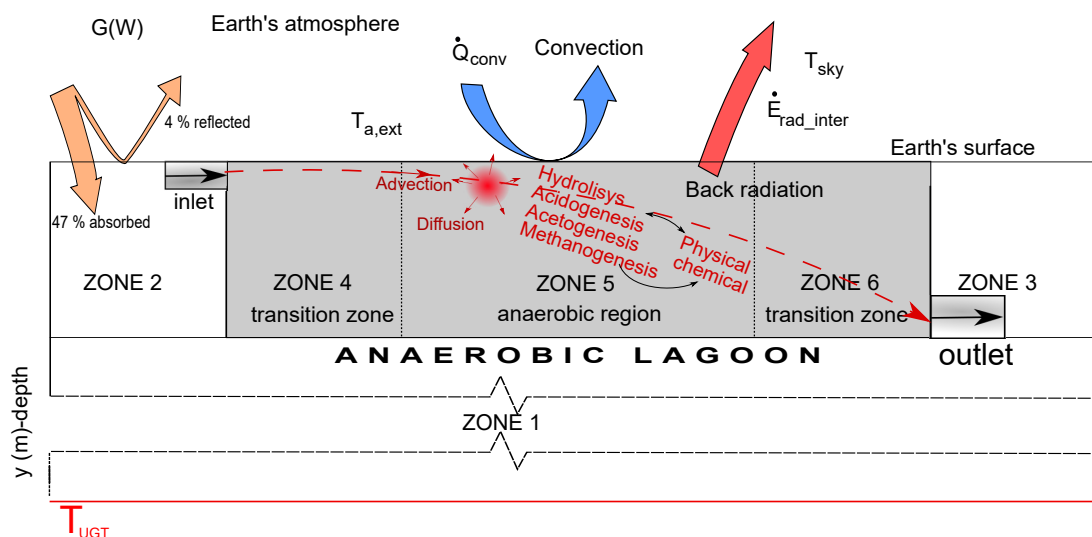


Figure 1. Scheme of the different phenomena that take places in AL and their environments.

Considering a system where the lagoon and its environment are included, different zones can be identified (Figure 1). Depending on the local parameters—thermal conductivity, specific heat, density, and where biological processes take place—they are considered different zones. Boundary conditions are located on the borders. Undisturbed ground temperature T_{UGT} is a ground thermal property situated at a depth where the ground temperature is approximately invariable, depth value depends on climatic conditions and is different in various regions of the Earth [23,24].

2.2. Governing Equations (Strong Formulations)

In this research, the mathematical model proposed is based on the two-dimensional advection–diffusion–reaction, Stokes, and heat transfer equations. This is accompanied by a series of boundary conditions. On the other hand, the IWA Anaerobic Digestion Model 1 (ADM1) has been implemented in the model.

The description of the model has been expressed in terms of primitive variables, mass, velocity, pressure, and temperature. In these equations it has been assumed that velocity and temperature field are in steady state conditions.

2.2.1. Advection–Diffusion Reaction Equation

Advection–diffusion–reaction Equation (ADRE) as numerical solution, widely used within mathematical modelling, to describe physical, biochemical and physical–chemical processes in AL [19,25–27].

Governing equations and boundary conditions are summarized below.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \phi}{\partial t} - \mathcal{D} \Delta \phi + \vec{u} \cdot \nabla \phi + f(\phi) &= F(x, y) \text{ for } x, y \in \Omega \\ \phi(x, y, t) &= g_D(x, y) \text{ for } x, y \in \Gamma_D \subset \partial \Omega, t > 0 \\ \frac{\partial \phi(x, y, t)}{\partial n} n(x, y) &= g_N(x, y) \text{ for } x, y \in \Gamma_N \subset \partial \Omega, t > 0\end{aligned}\quad (1)$$

where (ϕ) is a scalar field that represent concentrations of both substrates and cells of each of the biochemical reactions included in the anaerobic processes, $\vec{u} = (u_1, u_2)$ is given by Equations (2), $f(\phi)$ is the source function, which is positive $f(\phi) > 0$ for growth and production or negative $f(\phi) < 0$ for decay and consumption, biomass and metabolites, respectively, Γ_D and Γ_N are Dirichlet and Neumann boundary conditions, respectively. This term is developed in Equation (7), $F(x, y)$ is a generation function, which is zero (0) in this case.

2.2.2. Stokes Equation

Stokes equation, together with the ADR has been used to describe the flow. It is usually used for fluid with slowly motion and with high viscosity [28,29]. In this research, a constant density and incompressible Newtonian fluid flow has been considered. Strong formulation and Dirichlet Γ_D and Γ_N boundary conditions are as follow.

$$\begin{aligned}-\nu \Delta \vec{u} + \nabla p &= \vec{F} \text{ for } x, y \in \Omega \\ \nabla \vec{u} &= 0 \text{ for } x, y \in \Omega \\ \vec{u} &= \vec{u}_0 \text{ for } x, y \in \Gamma_D \\ \nabla \vec{u} \cdot \vec{n} + pn &= g \text{ for } x, y \in \Gamma_N\end{aligned}\quad (2)$$

2.2.3. The Energy Equation—Temperature Distribution

The energy equation is based on the conservation of energy and the Fourier heat conduction laws [30]. The internal energy balance equations, under a steady-state Eulerian description can be expressed as a function of temperature [30,31]

$$\begin{aligned}\rho_0 C_v (\vec{u} \cdot \nabla T) - \nabla \cdot (k_i \nabla T) &= 0 \text{ for } x, y \in \Omega \\ T(x, y) &= T_{aa}(x, y) \text{ for } x, y \in \Gamma_D \\ \frac{\partial T(x_i, t)}{\partial n} n(x_i) &= g_N(x_i) \text{ for } x, y \in \Gamma_N \\ k \frac{\partial T}{\partial n} &= h(T_{a,ext} - T) + \varepsilon_s \cdot \sigma \cdot (T^4 - T_{sky}^4) \text{ for } x, y \in \Gamma_R\end{aligned}\quad (3)$$

where Γ_D corresponds to Dirichlet condition. It is applied to the UGT (Figure 1); Γ_N is the Neumann condition. It describes the value of the gradient of the dependent field variable, normal to the boundary. Its calculation is based on Fourier Law; Γ_R is the Robin condition. It describes the Earth's surface heating and cooling Γ_R . This implied the use of Stefan–Boltzmann's law and Newton's law of cooling to model the heat exchange, related to radiation and convection processes, respectively [32,33]. Stefan–Boltzmann constant is $\sigma = 5.68 \cdot 10^{-8} (\text{W} \cdot \text{K}^{-4} \cdot \text{m}^{-2})$ [34]; $T_{a,ext}$ temperature of the externally surrounding surface; ε_s is the Earth's surface emissivity, where $0 \leq \varepsilon_s \leq 1$; T_{sky} is the sky radioactive temperature. These are used to estimate the radiative heat exchange with the Earth's

atmosphere [35]. T_{sky} and ε_{sky} is used to estimate the radiative heat exchange with the Earth's atmosphere [35].

$$T_{sky} = \left(\frac{\varepsilon_{sky} \cdot T_{a,ext}^4}{\sigma} \right)^{\frac{1}{4}} - 273.15 \quad (4)$$

$$\varepsilon_{sky} = \left(0.787 + 0.764 \ln \left(\frac{T_{dp}}{273} \right) \right) (1 + 0.0224N + 0.0035N^2 + 2.8 \cdot 10^{-4}N^3) \quad (5)$$

such $0 \leq \varepsilon_{sky} \leq 1$.

Here N are tenths cloud cover, and T_{dp} (K) is the dew-point temperature to which it must be cooled to become saturated. It is obtained by a correlation found in [33] (6) and

$$T_{dp} = T - \left(\frac{100 - RH}{5} \right) \quad (6)$$

In this work, heat sources from biochemical reactions have not been considered.

2.2.4. Kinetic Equations

ADM1 is used for the description $f(\phi)$ (Equation (1)). Biochemical rate coefficients and kinetic rate equations are represented in the Tables S1 and S2 within the Supplementary Materials Section. First order kinetic was considered for the hydrolysis, acidogenesis, acetogenesis and methanogenesis. The following equations based on common kinetic expressions describe anaerobic treatment processes:

$$f(S_i) = -\frac{\partial S_i}{\partial t} = -\rho_j \frac{X_i}{Y_i} ; f(X_i) = \frac{\partial X_i}{\partial t} = \rho_j X_i - K_d X_i ; \rho_j = \mu_{max_i} \frac{S_i}{K_{s_i} + S_i} \cdot I_1 \cdot I_2 \cdots I_n \quad (7)$$

$f(S_i)$ and $f(X_i)$ are the changes in substrates and cells concentration over time. These equations are based on the monod-type reaction kinetics [13,36]. In this model, it has been considered free ammonia and pH inhibitions, in addition to the butyrate and valerate competition [19].

The influence of temperature has been obtained by the Cardinal Temperature Model 1 (Appendix A) proposed by [37]

$$\mu_{max} = \mu_{opt} \frac{(T - T_{max})(T - T_{min})^2}{(T_{opt} - T_{min})[(T_{opt} - T_{min})(T - T_{opt}) - (T_{opt} - T_{max})(T_{opt} + T_{min} - 2T)]} \quad (8)$$

2.3. Solution Procedure

The finite element method, numerical technique based on the generation of a finite element geometric model, is used for the solution of the partial differential equations including in the problem.

In this methodology, the major steps include

1. The approach of the weak forms from the governing equations. The solutions are assumed to belong to Hilbert space, considering this as an infinite dimensional function space with functions of specific properties that can be suitably managed in the same way as ordinary vectors in a vector space. They are represented in Table 1.
2. Discretization of the domains, both physical with more or less regular triangulation and related to time. In Figure 2, the discretization of the different sub-domains, nodes and triangle, is showed.
3. Selection of the shape functions, essential to provide an approximation of the solution within an element. These relate the coordinates of every point of a finite element with the positions of its nodes,
4. Formulation of the system of equations.
5. Solving systems of equations. The free software FreeFem++ has been used to solve them. It is a PDE solver with its own high-level programming language and accurate

syntax for mathematical formulation. Freefem++ have high diversity of triangular finite elements (linear and quadratic, Lagrangian elements, discontinuous P^2 , etc.) to solve PDE in two (2D) and three (3D) dimensions.

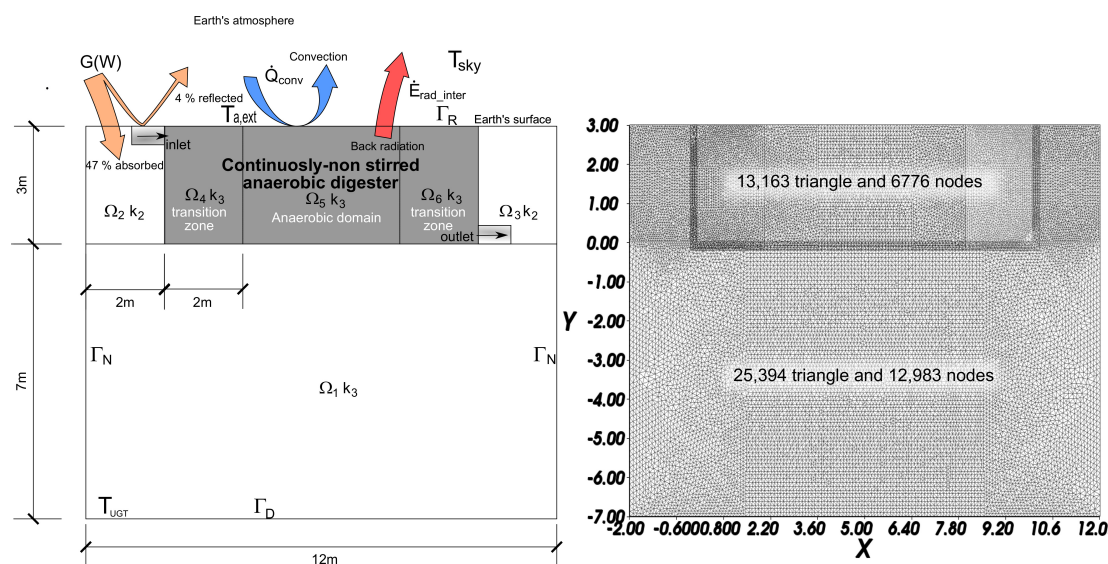


Figure 2. (left) geometric characteristics and boundary values; (right) discretization of the domains.

Table 1. Scheme of the weak equations used in the model, where $\vec{v}, q, Y_i, W$ are the smooth functions and $\mathbb{H}_0^1, \mathbb{P}_0^1, \mathbb{P}_0^2$ are the Hilbert space.

Model	Weak Equations	Hilbert Spaces
Stokes	$\mu \int_{\Omega} \nabla \vec{u} \cdot \nabla \vec{v} - \int_{\Omega} (\text{div } \vec{v}) p = \int_{\Omega} \vec{f} \vec{v}$ $\int_{\Omega} (\text{div } \vec{u}) q = 0$	for all $\vec{v} \in \mathbb{P}_0^2(\tau^h)$ for all $q \in \mathbb{P}_0^1(\tau^h)$
ADR	$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} \cdot Y_i + \mathfrak{D} \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \nabla Y_i + \int_{\Omega} u \nabla \phi \cdot Y_i + \int_{\Omega} f(\phi) \cdot Y_i = F(x_i) \cdot Y_i$	for all $Y_i \in \mathbb{H}_0^1(\Omega)$
Thermal	$\int_{\Omega} W \left[-\frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - q_c(x, y, x_j) \right] dx_i$	for all $T \in \mathbb{P}_0^2(\tau^h)$

2.4. Calculation

The partial differential equation solver FreeFem++ was used to implement the algorithm for the calculation. Due to its advantages, open access software with a powerful generated mesh and a large collection package to visualize approximate solutions, makes Freefem++ an ideal tool to solve complex partial differential equations [38]. Parallel calculation by parallel computing on clusters of personal computer has been achievable with a Message Passing Interface (MPI) within Freefem++.

3. Results and Discussion

3.1. Model's Considerations

In order to solve the formulated problem, fitted for a specific case, it has been necessary to establish geometric conditions, physical properties, initial conditions and boundary values. A summary of these characteristics is represented in Figure 2, Tables 2–4 and in the Supplementary Materials Section.

The system has been divided in different domains and subdomains. Ω_1, Ω_2 and Ω_3 are included within Ω_g and refer to the immediate ground around of lagoon; whereas Ω_4, Ω_5 and Ω_6 in Ω_r and concern the lagoon. AD occurs in Ω_5 considering Ω_4 and Ω_6 as transition zones (Figure 2).

In this case, the proposed anaerobic lagoon is located in temperate zones and is subjected to the environmental thermal conditions considering that there are no thermal loads on the sides of the domains, so the ground heat flow is transmitted vertically.

Table 2. General parameters considered. Q represents hydraulic flow in the inlet and outlet pipe. S_i and X_i represent substrate and cell concentrations in the inlet pipe.

Thermal Constants						Diffusion Coefficient	Boundary Values		
$\cos\Theta$ ($W \cdot m^{-2}$)	h_{int} ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$)	σ ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$)	k_1	k_2 ($m^2 \cdot d^{-1}$)	k_3	$\mathfrak{D}$ $m^2 \cdot d^{-1}$	Q ($m^3 \cdot d^{-1}$)	S_i ($mg(COD) \cdot L^{-1}$)	X_i
0.29	10	$5.67 \cdot 10^{-8}$	2.3	3	0.02	$8.64 \cdot 10^{-3}$	0.5	28,000	110–150

Table 3. Kinetic parameters [6].

Kinetic Parameters	Sugar	Fats	Amino Acids	Propionate	Butyrate	LFCA	Valerate	Acetic Acid
$\mu_{opt}(d^{-1})$	6.9	3.9	6.9	0.49	0.67	6.1	1.1	7.5
$K_d(d^{-1})$	0.9	1	1	0.04	0.03	0.25	0.04	0.037
$K_s(kg(COD)/m^3)$	0.5	0.8	3	1.145	0.176	0.8	0.5	0.037

3.2. Evaluation on Performance of Temperature

Figure 3 shows the temperature distribution in the proposed system under steady-state conditions for some examples of wastewater treatment plants whose information is included in Table 4. The lagoon contour has been illustrated in the first graphic. It is of interest to observe how the thermal behaviour within the lagoon depends on the boundary conditions, but also the hydraulic flow that is subject to the boundary values in the inlet and outlet pipe.

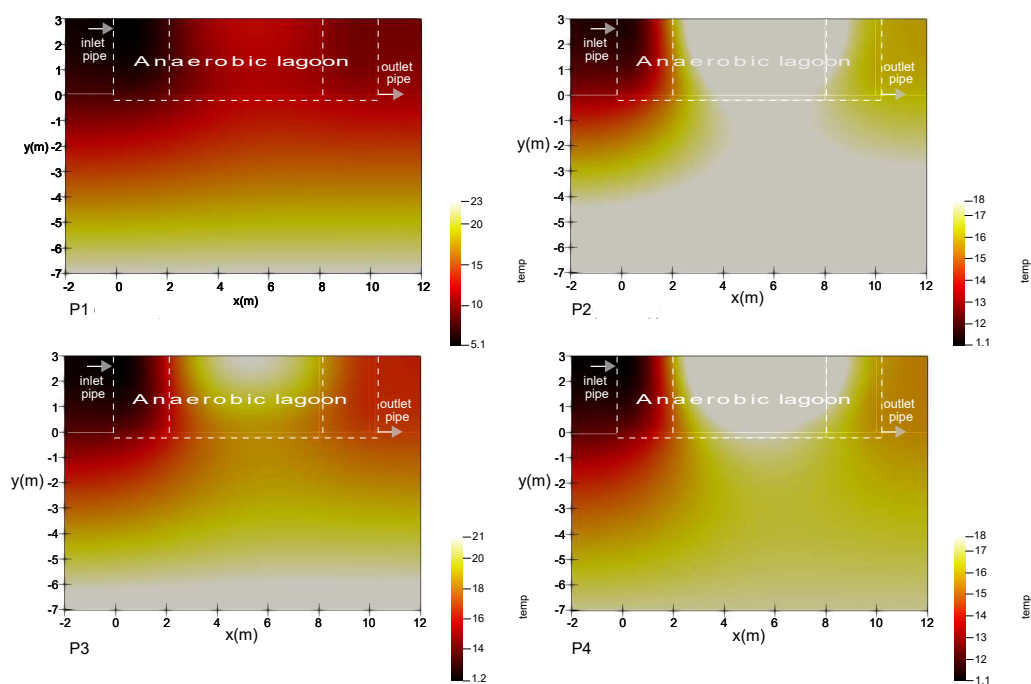


Figure 3. Temperature distribution under four different scenarios, according to the characteristic parameter exposed in Table 4.

Table 4. Specific weather parameters considered from four wastewater treatment plants (WWTP). It is provided the Universal Transverse Mercator (UTM) coordinates. T_{am} are the annual means temperatures and T_{mm} the monthly means. P1 and P3 are located in the coastal zones, while P2 and P4 are located in the mid-altitude zones.

WWTP	UTM Coordinate			wind ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	T_{am} °C	T_{mm}	RH (%)	G (W/m^2)	T_{dp} (°C)	ε	T_{sky} (°C)
	x	y	z								
P1	430,371	3,108,919	11.60	6.6	22.7	19.0	64	290.53	11.8	0.822	5.00
P2	444,484	3,108,895	511	6.6	19.8	16.6	82	278.80	13.0	0.824	2.95
P3	428,778	3,084,390	271.81	5.3	22.2	19.3	66	299.39	12.5	0.823	5.41
P4	447,661	3,098,525	831.51	5.3	17.3	12.9	80	292.68	8.9	0.813	−1.53

3.3. Organic Matter Removal and Behaviour of the Microbial Community

Figure 4 represents the variation on concentrations, in steady state, happening in some of the processes taking place within the lagoon. These simulations describe, in the case of P1 (Table 4), the variation of sugar, propionate, acetic acid and their corresponding bacterial biomass concentration, along of the pond's length and depth, according to the boundary conditions as shown in Table 2.

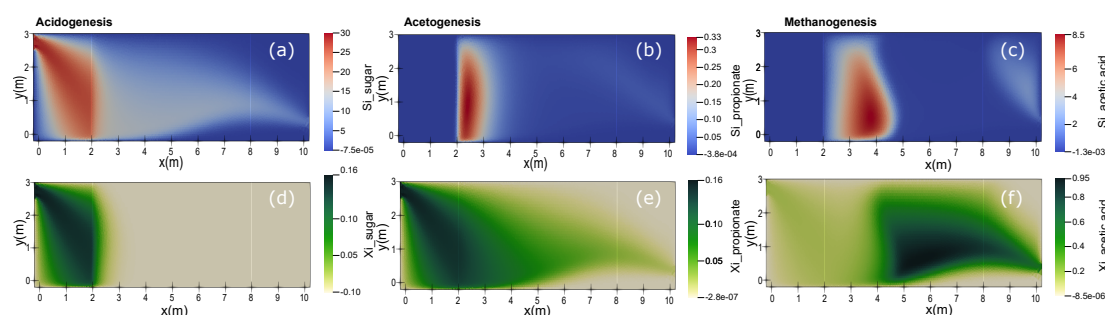


Figure 4. Concentrations' variation, together with the length and depth of the lagoon, for the example P1. (a–c) correspond to substrates, (d–f) to microorganisms.

As shown in these simulations, concentrations decreased throughout the pond length as a result of dispersion and biodegradation. The transition zones (Figure 2) have been considered as low microbial activity, so the net growth of cells is observable from the x-axis value equal to 2. As a result, propionate and acetic acid's source are located in this zone (Ω_5). The cells' growth is affected much more by the concentration of the substrates than the temperature's effects because temperature variations in this region differ very little from one point to another.

With respect to acidogenesis and methanogenesis, cells effectiveness on substrates removal is greater than in the acetogenesis due to the kinetic parameters. For the propionate μ_{max} and K_s are $0.49 \text{ (d}^{-1}\text{)}$ and $1.145 \text{ (mg(COD)} \cdot \text{m}^{-3}\text{)}$, respectively, (see Table 3). Thus, cells growth value and, therefore, the substrate removal is lower than in the previous two cases (see Equation (7)). The resulting value of substrate concentration in the outlet, after the wastewater treatment process, is between 600 and 500 (mg(COD)/L). In the case of acetic acid, this same concentration, next to the pond outlet, is smaller, due to the accumulation of organic matter that has not been reached by the microbial community.

Figure 5 shows charts representing substrate and propionic acid bacteria's concentrations for P1 (Table 4) along the axis AA. Cases 1 and 2, with different concentrations of microorganisms in the inlet pipe of the lagoon, $110 \text{ (mg(COD)} \cdot \text{L}^{-1}\text{)}$ and $115 \text{ (mg(COD)} \cdot \text{L}^{-1}\text{)}$, respectively, are compared. In both cases, the graphics share a similar trend, a downward slope which, at last, connects at the middle point of the axis. There is no net growth within the microbial population. The slope above mentioned is reduced, cells growth offsets the diffusion process in Ω_5 (Figure 2). Nevertheless, substrate removal in Case 2 is benefited by the highest concentration of cells at the inlet pipe $150 \text{ (mg(COD)} \cdot \text{L}^{-1}\text{)}$. The decrease in values from the last section, for both graphs, occurs as a result of the dispersion phenomenon since microbial activity in Ω_6 has not been considered.

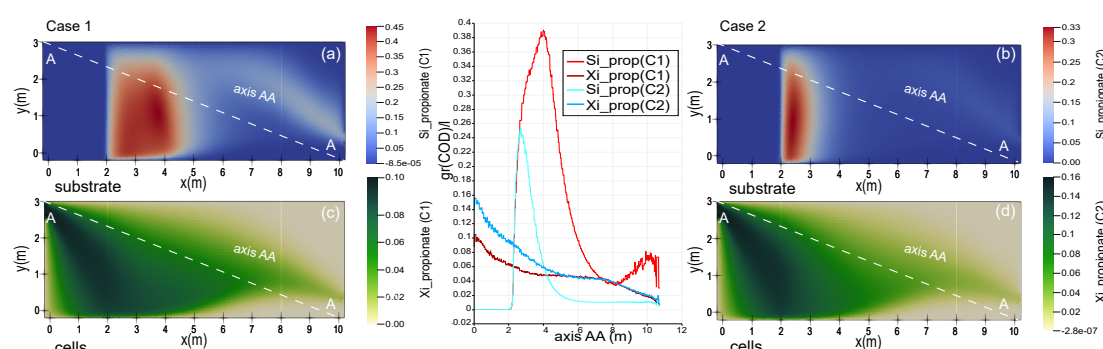


Figure 5. Performance of propionate, in steady state, for two different cases according to the initial concentration of propionic acetogenic bacteria and their graphic presentations along the axis AA. Case1; $110 \text{ (mg(COD)} \cdot \text{L}^{-1})$, Case2; $115 \text{ (mg(COD)} \cdot \text{L}^{-1})$.

Figure 6 depicts, as in the previous example, the chart of propionate along the axis AA as well as the distribution of temperature in the lagoon for three different examples. E-1; The lagoon is subjected to ambient temperature (see case P4 in Table 4 and Figure 3). E-2; It is included a bed heat source at the bottom of the lagoon, between 2 and 3 coordinates of the x axis with a temperature of 35°C . E-3; In this occasion, that same heat source is located between coordinates 4 and 8 of the x axis.

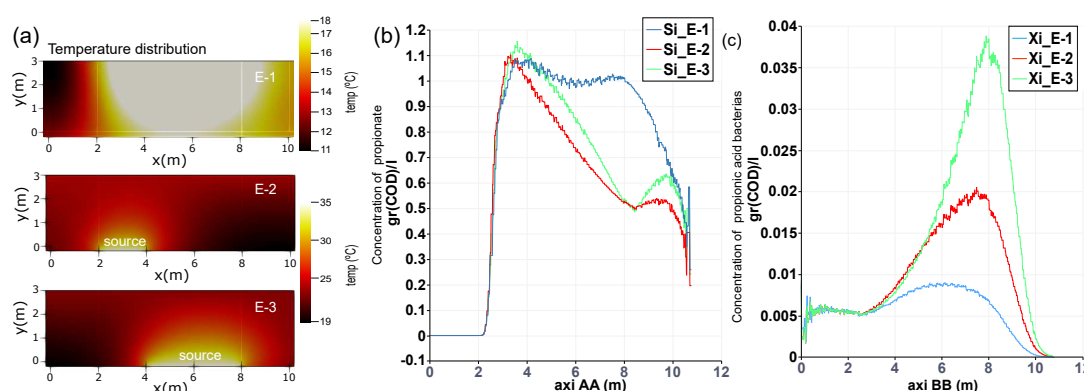


Figure 6. (a) Temperature distribution under three different scenarios; E-1 Ambient temperature, E-2 includes a heat source at the bottom of the lagoon, between coordinates 2 and 4, and the E-3 between 4 and 8, in the x axis. (b,c) Concentration of propionate and cells, respectively, along the axis AA (see Figure 5) for the different scenarios detailed in (a).

The distribution of temperature is showed in Figures 3 and 6. As expected, the removal efficiency is improved by the rising temperature of the heat source, as is observed in the cases 2 and 3. However, this graphic also shows that organic matter is eliminated more efficiently in case 2 than in 3 in a percentage of 10 %. Consequently a minor residual concentration in the outlet pipe is achieved.

Table 5 sums up the propionate removal information for the four examples above mentioned. It shows the source and effluent concentrations, as well as the percentage removed. Best values correspond with case 4.

Table 5. Values of propionate concentrations and the rate per 100 removed.

Case	Source Si (mg(COD)/L)	Effluent Si (mg(COD)/L)	Removed (mg(COD)/L)	Percentage Removed
1	1500	280	1220	81.33%
2	1500	265	1235	82.33%
3	1700	215	1485	87.35%
4	1400	135	1265	90.35%

By analysing the table, it can be said that the propionate concentration at the outlet of the lagoon, once acetogenic bacteria have removed a great part of substrate in the system, is among 280 and 135 mg·L^{−1}. By placing a heat source, strategically, at the bottom of the lagoon (E-2 and E-3) it is possible to reduce substrate concentrations at its outlet.

4. Conclusions

In this paper, we have proposed and assessed a methodology for anaerobic cells performance for wastewater treatment, in AL, under the influence of the temperature. It has been studied in terms of biomass and substrate concentrations. The model couples a series of PDEs, related to the phenomena associated to AL (ADRE, ADM1, Stokes and heat transfer), to each other.

Diffusion for horizontal and vertical directions, the movement of the bulk of the concentrations in accordance with a gradient, external temperature interactions, biochemical and physical–chemical reactions, and a set of boundary values were considered in this study.

This model builds understanding for microbial community's behaviour along the lagoon as a function of the temperature. Applying heat load in different points of the system, it has been possible to establish correlations through the graphics, as well as the comparison between diverse scenarios according to their corresponding boundary values. The results give us the possibility to obtain effective designs adapted to each circumstance, avoiding energy loss.

This methodology allows the optimization of unstirred flow systems, taking into account that the advantages of these systems make them more suitable for specific applications. The model can be used in the prediction of the effluent quality and in the design of AL to achieve better performances.

In view of the results, it can be concluded that this methodology has significant potential as a tool for both the design of AL, and the interactive learning of the microbial ecology in plug flow systems.

Supplementary Materials: The following are available online at <https://www.mdpi.com/2073-4441/13/7/882/s1>, Table S1: Biochemical rate coefficients and kinetic rate equations for soluble components. Table S2: Biochemical rate coefficients and kinetic rate equations for particulate components. Table S3: Dynamic state variables include in the stoichiometry matrix (Tables S1 and S2).

Author Contributions: Conceptualization, S.B.-E., A.R.-M., C.M.-P., S.O.P.-B. and F.L.-Z.; methodology, S.B.-E., S.O.P.-B. and A.R.-M.; software, S.B.-E. and A.R.-M.; formal analysis, S.B.-E. and A.R.-M.; investigation, S.B.-E., A.R.-M. and S.P.; resources, S.B.-E., A.R.-M., S.O.P.-B., C.M.-P. and F.L.; data curation, S.B.-E. and A.R.-M.; writing—original draft preparation, S.B.-E. and A.R.-M.; writing—review and editing, S.B.-E., and A.R.-M.; visualization, S.B.-E. and A.R.-M.; supervision, S.O.P.-B., C.M., F.L.-Z. and A.R.-M.; project administration, C.M.-P. and A.R.-M.; funding acquisition, S.O.P.-B. and A.R.-M. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research was co-funded by the INTERREG V-A Cooperation, Spain-Portugal MAC (Madeira-Azores-Canarias) 2014–2020 pro-gramme, MITIMAC project (MAC2/1.1a/263).

Institutional Review Board Statement: Not applicable.

Informed Consent Statement: Not applicable.

Data Availability Statement: Not applicable.

Acknowledgments: This research has been co-funded by the INTERREG V-A Cooperation, Spain-Portugal MAC (Madeira-Azores-Canarias) 2014–2020 pro-gramme, MITIMAC project (MAC2/1.1a/263).

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

Abbreviations

The following abbreviations are used in this manuscript:

ADM1	Anaerobic Digestion Model No1
IWA	International Water Association
AD	Anaerobic Digestion
AL	Anaerobic Lagoons
FEM	Finite element method
CFD	Computational fluid dynamic
PDE	Partial differential equation
ADRE	Advection–diffusion–reaction equation

Nomenclature

The following nomenclature are used in this manuscript

Δ	Laplace operator $\Rightarrow \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$
∇	Gradient operator $\Rightarrow \nabla = \frac{\partial}{\partial x_i}$
Ω_r	Reactor (lagoon) domain
Ω_g	Ground domain surrounding the lagoon
$\mathbb{H}_0^1, \mathbb{P}_0^1, \mathbb{P}_0^2$	Hilbert space
Γ_D	Dirichlet boundary condition
Γ_N	Neumann boundary condition
Γ_R	Robin boundary condition
$\vec{v}, q, Y_i, W$	Smooth functions
$\mathfrak{D}$	Diffusive coefficient
μ_{max_i}	Maximum specific growth rate
$\vec{u}$	Velocity vector
ν	Viscosity
T	Temperature
$T_{a,ext}$	Temperature of the externally surrounding surface
T_{max}	Maximum growth-temperature
T_{min}	Minimum growth-temperature
T_{dp}	Dew-point temperature
T_{UCT}	Undisturbed ground temperature
T_{opt}	Temperature for maximum specific growth
T_{sky}	Sky radiative temperature
G	Irradiance
RH	Average relative humidity
σ	Stefan-Boltzmann constant
ε	Emissivity
h_{int}	Internal convective heat transfer coefficient
k_i	Heat conductivity for Ω_i , where $i = 1, 2, 3, \dots$
n	Unit normal
Θ	Angle between the beam direction and the normal to the surface
μ_{opt}	Optimal value of the maximum specific growth rate
I_i	Inhibition coefficient
K_d	Specific microorganism decay rate
ρ_j	Kinetic rate of process j
K_{S_1}	Substrate saturation constant
S_i	Substrate concentrations
Y_1	Substrate yield coefficient
X_i	Biomass concentration
ϕ	Scalar field
p	Pressure
ρ_0	Density
Q	Flow
t	Time

Appendix A

Table A1. Cardinal temperature and maximum specific growth rate at the optimal temperature for representative cells of the different phases in the anaerobic digestion [10,39,40].

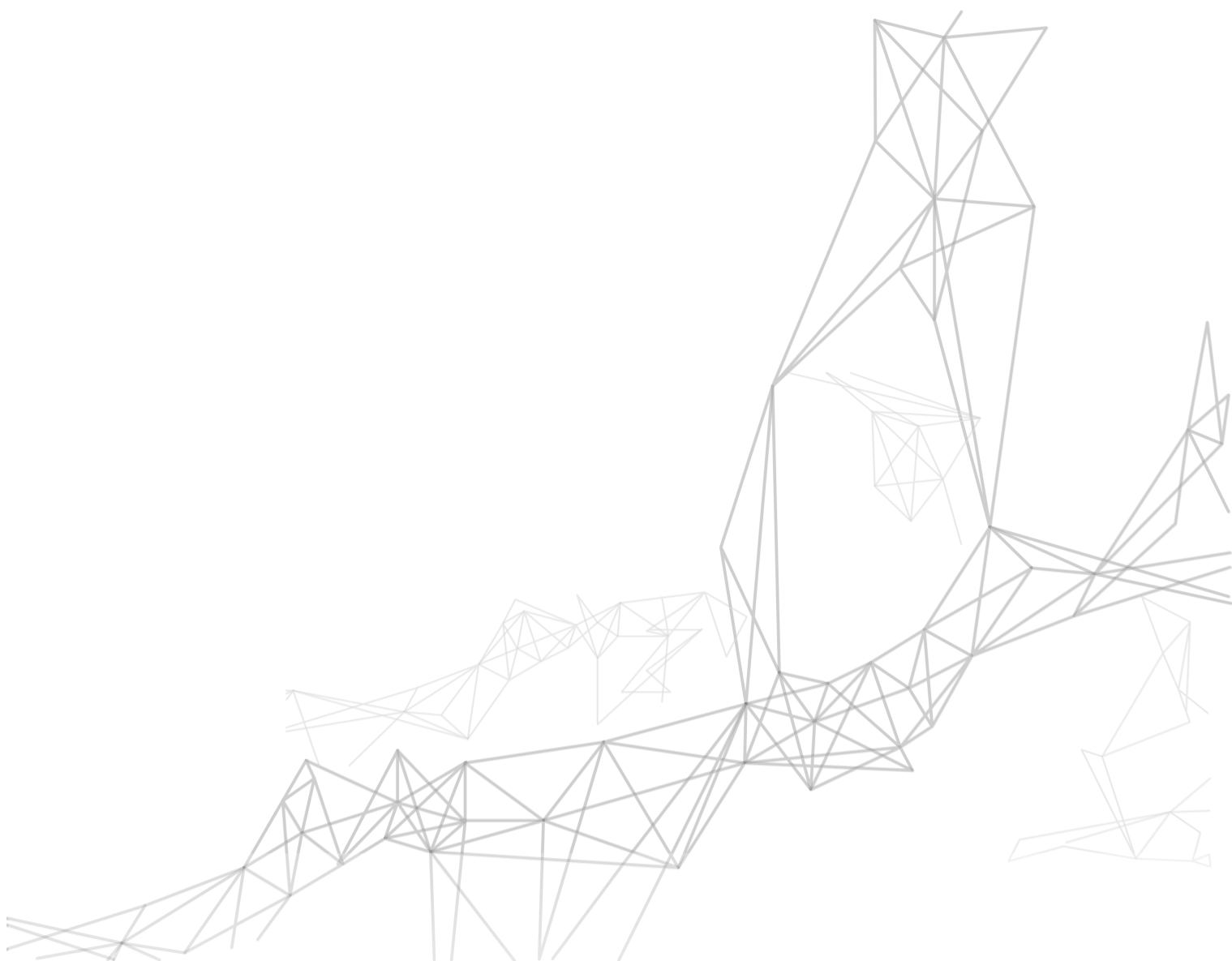
Process	$T_{min}(^{\circ}\text{C})$	$T_{op}(^{\circ}\text{C})$	$T_{max}(^{\circ}\text{C})$	$\mu_{opt}(\text{hr}^{-1})$
Hydrolysis/acidogenesis	11	39.3	45.8	1.1
Acetogenesis	5.6	40.3	47.3	1.4
Methanogenesis	11.1	34.1	46.3	1.1

References

- Parralejo, A.; Royano, L.; González, J.; González, J. Small scale biogas production with animal excrement and agricultural residues. *Ind. Crops Prod.* **2019**, *131*, 307–314. [CrossRef]
- Holm-Nielsen, J.; Seadi, T.A.; Oleskowicz-Popiel, P. The future of anaerobic digestion and biogas utilization. *Bioresour. Technol.* **2009**, *100*, 5478–5484. [CrossRef]
- Park, J.H.; Park, J.H.; Lee, S.H.; Jung, S.P.; Kim, S.H. Enhancing anaerobic digestion for rural wastewater treatment with granular activated carbon (GAC) supplementation. *Bioresour. Technol.* **2020**, *315*, 123890. [CrossRef] [PubMed]
- Jiang, Y.; Bebee, B.; Mendoza, A.; Robinson, A.K.; Zhang, X.; Rosso, D. Energy footprint and carbon emission reduction using off-the-grid solar-powered mixing for lagoon treatment. *J. Environ. Manag.* **2018**, *205*, 125–133. [CrossRef] [PubMed]
- Duan, N.; Zhang, D.; Khoshnevisan, B.; Kougias, P.G.; Treu, L.; Liu, Z.; Lin, C.; Liu, H.; Zhang, Y.; Angelidaki, I. Human waste anaerobic digestion as a promising low-carbon strategy: Operating performance, microbial dynamics and environmental footprint. *J. Clean. Prod.* **2020**, *256*, 120414. [CrossRef]
- Mendieta-Pino, C.A.; Ramos-Martin, A.; Perez-Baez, S.O.; Brito-Espino, S. Management of slurry in Gran Canaria Island with full-scale natural treatment systems for wastewater (NTSW). One year experience in livestock farms. *J. Environ. Manag.* **2019**, *232*, 666–678. [CrossRef]
- Muga, H.; Mihelcic, J. Sustainability of wastewater treatment technologies. *J. Environ. Manag.* **2008**, *88*, 437–447. [CrossRef]
- Wu, B.; Chen, Z. An integrated physical and biological model for anaerobic lagoons. *Bioresour. Technol.* **2011**, *102*, 5032–5038. [CrossRef]
- Wu, B. Advances in the use of CFD to characterize, design and optimize bioenergy systems. *Comput. Electron. Agric.* **2013**, *93*, 195–208. [CrossRef]
- Donoso-Bravo, A.; Sadino-Riquelme, C.; Gómez, D.; Segura, C.; Valdebenito, E.; Hansen, F. Modelling of an anaerobic plug-flow reactor. Process analysis and evaluation approaches with non-ideal mixing considerations. *Bioresour. Technol.* **2018**, *260*, 95–104. [CrossRef]
- Rajeshwari, K.; Balakrishnan, M.; Kansal, A.; Lata, K.; Kishore, V. State-of-the-art of anaerobic digestion technology for industrial wastewater treatment. *Renew. Sustain. Energy Rev.* **2000**, *4*, 135–156. [CrossRef]
- Lauwers, J.; Appels, L.; Thompson, I.P.; Degreè, J.; Impe, J.F.V.; Dewil, R. Mathematical modelling of anaerobic digestion of biomass and waste: Power and limitations. *Prog. Energy Combust.* **2013**, *39*, 383–402. [CrossRef]
- Wade, M.; Harmand, J.; Benyahia, B.; Bouchez, T.; Chaillou, S.; Cloez, B. Perspectives in mathematical modelling for microbial ecology. *Ecol. Model.* **2016**, *321*, 64–74. [CrossRef]
- Batstone, D.; Keller, J.; Angelidaki, I.; Kalyuzhnyi, S.; Pavlostathis, S.; Rozzi, A.; Sanders, W.; Siegrist, H.; Vavilin, V. The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). *Water Sci. Technol.* **2002**, *45*, 65–73. Available online: <http://xxx.lanl.gov/abs/http://wst.iwaponline.com/content/45/10/65.full.pdf> (accessed on 1 september 2020). [CrossRef] [PubMed]
- Kleerebezem, R.; van Loosdrecht, M.C.M. Critical analysis of some concepts proposed in ADM1. *Water Sci. Technol.* **2006**, *54*, 51–57. [CrossRef]
- Li, D.; Lee, I.; Kim, H. Application of the linearized ADM1 (LADM) to lab-scale anaerobic digestion system. *J. Environ. Chem. Eng.* **2021**, *9*, 105193. [CrossRef]
- Fleming, J.G. Novel Simulation of Anaerobic Digestion Using Computational Fluid Dynamics. Ph.D. Thesis, North Carolina State University, Raleigh, NC, USA, 2002.
- Goodarzi, D.; Sookhak Lari, K.; Mossaiby, F. Thermal effects on the hydraulic performance of sedimentation ponds. *J. Water Process. Eng.* **2020**, *33*, 101100. [CrossRef]
- Brito-Espino, S.; Ramos-Martín, A.; Pérez-Báez, S.; Mendieta-Pino, C. Application of a mathematical model to predict simultaneous reactions in anaerobic plug-flow reactors as a primary treatment for constructed wetlands. *Sci. Total Environ.* **2020**, *713*, 136244. [CrossRef] [PubMed]
- Mahmudul, H.; Rasul, M.; Akbar, D.; Narayanan, R.; Mofijur, M. A comprehensive review of the recent development and challenges of a solar-assisted biogas digester system. *Sci. Total Environ.* **2021**, *753*, 141920. [CrossRef]
- Atelge, M.; Atabani, A.; Banu, J.R.; Krisa, D.; Kaya, M.; Eskicioglu, C.; Kumar, G.; Lee, C.; Yildiz, Y.; Unalan, S.; et al. A critical review of pretreatment technologies to enhance anaerobic digestion and energy recovery. *Fuel* **2020**, *270*, 117494. [CrossRef]

22. Tumilar, A.S.; Milani, D.; Cohn, Z.; Florin, N.; Abbas, A. A Modelling Framework for the Conceptual Design of Low-Emission Eco-Industrial Parks in the Circular Economy: A Case for Algae-Centered Business Consortia. *Water* **2021**, *13*, 69. [\[CrossRef\]](#)
23. Haßler, S.; Ranno, A.M.; Behr, M. Finite-element formulation for advection–reaction equations with change of variable and discontinuity capturing. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **2020**, *369*, 113171. [\[CrossRef\]](#)
24. Mirza, I.A.; Akram, M.S.; Shah, N.A.; Imtiaz, W.; Chung, J.D. Analytical solutions to the advection-diffusion equation with Atangana-Baleanu time-fractional derivative and a concentrated loading. *Alex. Eng. J.* **2021**, *60*, 1199–1208. [\[CrossRef\]](#)
25. Singh, S.; Bansal, D.; Kaur, G.; Sircar, S. Implicit-explicit-compact methods for advection diffusion reaction equations. *Comput. Fluids* **2020**, *212*, 104709. [\[CrossRef\]](#)
26. Zeng, L.; Chen, G. Ecological degradation and hydraulic dispersion of contaminant in wetland. *Ecol. Model.* **2011**, *222*, 293–300. [\[CrossRef\]](#)
27. Bozkurt, S.; Moreno, L.; Neretnieks, I. Long-term processes in waste deposits. *Sci. Total Environ.* **2000**, *250*, 101–121. [\[CrossRef\]](#)
28. Song, L.; Li, P.W.; Gu, Y.; Fan, C.M. Generalized finite difference method for solving stationary 2D and 3D Stokes equations with a mixed boundary condition. *Comput. Math. Appl.* **2020**, *80*, 1726–1743. [\[CrossRef\]](#)
29. Ukai, S. A solution formula for the Stokes equation in R^n . *Commun. Pure Appl. Math.* **1987**, *40*, 611–621. [\[CrossRef\]](#)
30. Reddy, J.; Gartling, D. *The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics*, 3rd ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 2010; pp. 1–483.
31. Alvarez-Hostos, J.C.; Bencomo, A.D.; Puchi-Cabrera, E.S.; Fachinotti, V.D.; Tourn, B.; Salazar-Bove, J.C. Implementation of a standard stream-upwind stabilization scheme in the element-free Galerkin based solution of advection-dominated heat transfer problems during solidification in direct chill casting processes. *Eng. Anal. Bound. Elem.* **2019**, *106*, 170–181. [\[CrossRef\]](#)
32. Guldentops, G.; Van Dessel, S. A numerical and experimental study of a cellular passive solar façade system for building thermal control. *Sol. Energy* **2017**, *149*, 102–113. [\[CrossRef\]](#)
33. Lawrence, M.G. The Relationship between Relative Humidity and the Dewpoint Temperature in Moist Air: A Simple Conversion and Applications. *Bull. Am. Meteorol. Soc.* **2005**, *86*, 225–234. [\[CrossRef\]](#)
34. Çengel, Y. *Heat Transfer: A Practical Approach*. In *McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering*; McGraw Hill Books: London, UK, 2003.
35. Walton, G.N. *Thermal Analysis Research Program Reference Manual*; NBSIR, Department of Energy, Office of Building Energy Research and Development: Washington, DC, USA, 1983.
36. Monod, J. The Growth of Bacterial Cultures. *Annu. Rev. Microbiol.* **1949**, *3*, 371–394. [\[CrossRef\]](#)
37. Rosso, L.; Lobry, J.; Flandrois, J. An Unexpected Correlation between Cardinal Temperatures of Microbial Growth Highlighted by a New Model. *J. Theor. Biol.* **1993**, *162*, 447–463. [\[CrossRef\]](#)
38. Herus, V.A.; Ivanchuk, N.V.; Martyniuk, P.M. A System Approach to Mathematical and Computer Modeling of Geomigration Processes Using Freefem++ and Parallelization of Computations. *Cybern Syst. Anal.* **2018**, *54*, 284–292. [\[CrossRef\]](#)
39. Donoso-Bravo, A.; Bandara, W.; Satoh, H.; Ruiz-Filippi, G. Explicit temperature-based model for anaerobic digestion: Application in domestic wastewater treatment in a UASB reactor. *Bioresour. Technol.* **2013**, *133*, 437–442. [\[CrossRef\]](#) [\[PubMed\]](#)
40. Donoso-Bravo, A.; Retamal, C.; Carballa, M.; Ruiz-Filippi, G.; Chamy, R. Influence of temperature on the hydrolysis, acidogenesis and methanogenesis in mesophilic anaerobic digestion: Parameter identification and modeling application. *Water Sci. Technol.* **2009**, *60*, 9–17. [\[CrossRef\]](#) [\[PubMed\]](#)

7 Resúmenes de los Artículos



7.1. Application of a model-based method for hydrodynamic processes in constructed wetland for the management of livestock wastewater based on finite elements method

□

Resumen En este artículo se presenta un MBP en 2D, para predecir el comportamiento de un humedal artificial con laguna anaerobia para el tratamiento de aguas residuales procedentes de granjas porcinas. Se considera veintiséis variables para la simulación de las propiedades hidráulicas, física, bioquímica y fisicoquímica. Estas se describen a través de los diferentes procesos de advección, difusión y reacción, que tienen lugar dentro del sistema y que actúan de manera simultáneas. El modelo planteado está basado en la optimización de las ecuaciones de ADR y las ecuaciones de Stokes, y se completa mediante la implementación del ADM1 para la descripción de los procesos anaerobios. Para la resolución del problema ha sido necesario el uso de un método numérico, el MEF, y el empleo de una metodología basada en un diagrama de flujo que ha servido de base para el diseño del algoritmo que permita el cálculo del problema planteado. Se procede, finalmente, con el cálculo y simulación del modelo a través del software de código abierto FreeFem++ cuyos resultados nos muestra el comportamiento del prototipo proyectado. Finalmente, a través de un postproceso llevado a cabo con el software ParaView se exportan las gráficas donde queda reflejado el comportamiento dinámico del modelo expuesto.

Objetivos Los principales objetivos de este estudio son;

- Implantación de un modelo que describa los procesos hidráulicos, físicos, bioquímicos y fisicoquímicos, que se efectúan de manera simultánea en un humedal artificial de flujo libre.
- El planteamiento de un método de aproximación, MEF, que facilite la resolución del problema.
- El diseño de una metodología de cálculo que permita armonizar los distintos fenómenos que acontecen en el interior del humedal, teniendo en cuenta la interrelación existente entre todos ellos.
- El desarrollo de un algoritmo que permita la simulación del modelo.

Modelo Se ha planteado un modelo en dos dimensiones basado en las ecuaciones ADR, ver Anexo B, eq. (B.3) y (B.4), en las de Stokes, ver B.8. Además, se ha implementado el modelo ADM1 para la descripción de los procesos anaerobios, bioquímicos y fisicoquímicos. Las condiciones de contorno definidas en el problema son las de Dirichlet y las de Neumann, en los puntos, de entrada y salida del flujo en el del sistema.

Metodología Debido a la complejidad del modelo, veintiséis variables dispuestas en un conjunto de EDP no lineales y de tipo parabólica, se ha empleado el MEF para la resolución del problema. Se trata de una herramienta muy potente y versátil que permite resolver problemas en estados estacionario y transitorio, lineal y no lineal, en sistemas homogéneos y heterogéneos. Dado que se trata de un método de aproximación, su precisión dependerá de la calidad del proceso de discretización del dominio, es decir, de la cantidad de nodos y elementos, y del tamaño y tipos de elementos de la malla. La aplicación de este método se ha llevado a cabo a través de los siguientes pasos:

1. Elección del dominio y de los subdominios, y discretización de estos
2. Formulación de las ecuaciones EDP para un problema variacional, formulación débil, a partir de la formulación fuerte planteadas en el modelo.
3. Transformación de las EDP en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias o algebraicas.
4. Resolución de dichas ecuaciones

Cálculo A través del **FreeFem++** se ha diseñado un algoritmo para el cálculo del sistema de ecuaciones del modelo mediante un diagrama de flujo, ver Figura 7.1. La metodología empleada, esquematizada en dicho gráfico, es la siguiente;

1. Cada una de las etapas que forma parte del proceso de digestión anaerobia, hidrólisis/acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis, es tratada de manera singular, y los cálculos de los subprocesos que forman parte de éstas, son realizados de forma secuencial. Este cálculo se hace de forma reiterativa hasta alcanzar el estado estacionario de cada uno de los subprocesos.
2. En el caso de la primera etapa, hidrólisis/acidogénesis, el sustrato y la biomasa se incorporan al sistema a través del punto de alimentación, condición de contorno de Dirichlet. Sin embargo, en la segunda etapa, acetogénesis, aunque el microorganismo es añadido de igual forma que la anterior, con el sustrato no ocurre lo mismo, condición de Dirichlet igual a cero. Son los diferentes productos de las reacciones anteriores los que pasan a conformar un nuevo sustrato para cada uno de los subprocesos que forman parte de la acetogénesis. De igual modo se procede con la metanogénesis

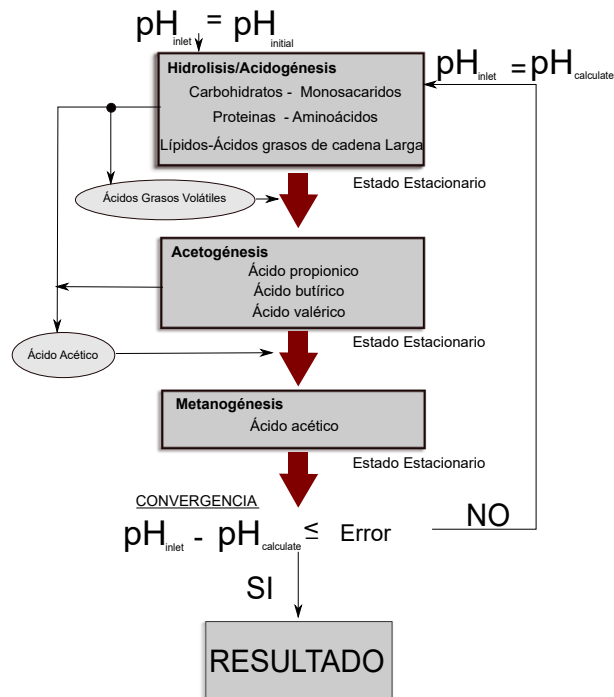


Figura 7.1: Diagrama de flujo de la estrategia cálculo aplicada para su resolución

- Superada todas estas etapas, se entra en una nueva fase donde se lleva a cabo el cálculo del conjunto de ecuaciones que componen el proceso fisicoquímico. El pH resultante del cálculo, $pH_{calculate}$, es comparado con el inicial, pH_{inlet} , condición de inicio. En el caso de que la diferencia entre ambos valores, en valor absoluto, sea mayor al valor de "error estimado", previo al cálculo, se retornará al inicio del diagrama otorgando el valor $pH_{inlet} = pH_{calculate}$. El procedimiento se repite hasta que la aproximación converja a la solución del problema.

Resultados La discretización de las distintas regiones del humedal artificial resulta un total de cuatro subdominios y una malla de 1.170 triángulos y 643 vértices.

Se llevó a cabo simulaciones del modelo variando las concentraciones y el caudal del influente en la entrada del sistema. Se representaron las concentraciones de los distintos sustratos, tanto los procedentes del influente como de las distintas reacciones bioquímicas previas, productos disponibles para su remoción. También se simularon las concentraciones correspondientes a las distintas especies de microorganismos que intervenían en dichos procesos.

Los resultados demuestran la potencialidad del modelo para poder simular el comportamiento de cada una de las variables, veintiséis, que intervienen en el proceso de

DA para un sistema asimilable a un Reactor Flujo Pistón (RFP) condicionado a las condiciones de carga y descarga, con una mezcla heterogénea sujeta a un gradiente de concentración. Teniendo en cuenta la originalidad del modelo, basado principalmente en la inclusión del modelo ADM1 y en el planteamiento de una metodología orientada al diseño de un diagrama de flujo que permita reproducir el comportamiento de las distintas etapas que compone la digestión anaerobia, es viable la concepción de futuros trabajos que comprenda el desarrollo en algoritmos, discretización de dominios y cálculos en paralelos.

7.2. Application of a mathematical model to predict simultaneous reactions in anaerobic plug-flow reactors as a primary treatment for constructed wetlands

Resumen El uso de reactores anaerobios como sistemas complementarios a los humedales artificiales donde se les confiere un tratamiento biológico previo, dentro de la línea de depuración, va a proporcionar al humedal una serie de ventajas, tales como: 1. Disminución del exceso de lodos. 2. Reducción de la superficie de construcción, consecuentemente, reducción del coste de construcción del humedal hasta el 40 %. 3. Descenso del fenómeno de colmatación en el lecho filtrante del humedal incrementando así su vida por encima de los 10 años.

Bajo la consideración de ausencia de mecanización en un biorreactor anaerobio, su comportamiento se asemeja al de un reactor flujo pistón donde las propiedades físico-químicas están sujetas a un gradiente de concentración, y las bioquímicas, a las diferentes reacciones que se desarrollan en su interior y que forman parte del proceso de digestión anaerobia. Es por ello por lo que el modelo propuesto, basado en las ecuaciones de ADR, la de Stokes y en el modelo ADM1, considera un fluido que circula en régimen libre, cuyo caudal es inducido por las condiciones de contorno consideradas en los puntos de alimentación y evacuación del sistema. En este estudio, el modelo incluye veintiuna variables de las que cinco de ellas tienen que ver con factores de inhibición. Todas ellas se encuentran integradas en un conjunto de EDP de segundo grado y tipo parabólica que describe la distribución de las distintas variables contenidas en el fluido, a lo largo del recorrido y en el transcurso del tiempo. La aplicación del MEF, junto con la configuración de un diagrama de flujo para el cálculo secuencial fueron esenciales para la resolución del problema.

Objetivos Los principales objetivos de este estudio son los siguientes:

- La aplicación de un modelo matemático para un reactor anaerobio tipo flujo pistón con geometría rectangular y sometida a flujo laminar y continuo.
- La evaluación de la eficacia del modelo a través de los resultados obtenidos.
- La valoración del potencial de la metodología empleada para realizar estudios comparativos entre variables, así como para el diseño óptimo del funcionamiento del sistema.

Modelo Partiendo de la ecuación ADR (Anexo B, eq. (B.3), (B.4)) y de las ecuaciones de Stokes (B.8), en estado estacionario, se plantea un modelo matemático en cuyo diseño se contempla la implementación del modelo ADM1. Éste, representado en el

término reactivo $f(\phi)$ de la ecuación ADR, describe el proceso anaerobio que se lleva a cabo dentro del sistema. Para definición de la cinética de crecimiento se empleó los modelos de cinética de primer orden y de Monod (eq. B.15) [5]. En este estudio se ha considerado, además de la influencia del pH, asociado a la ocurrencia de fenómenos de acidificación (eq B.17), la inhibición por presencia de amoníaco libre, por presencia de amonio, y debido al consumo competitivo entre el butirato y valerato (Anexo B Tabla B.1). Las condiciones de contorno definidas en el problema son las de Dirichlet y las de Neumann, en los puntos, del sistema, de entrada y salida del flujo.

Metodología Para la geometría propuesta, el dominio fue dividido en 3 partes, subdominios. Los subdominios D2 y D3, Fig. 7.2, fueron considerados como zonas de transición, donde no existe actividad microbiana, mientras que el subdominio D1 fue la región designada para que se llevara a cabo todos los procesos relacionados con la digestión anaerobia. La formulación de Galerkin y el método de aproximación de los elementos

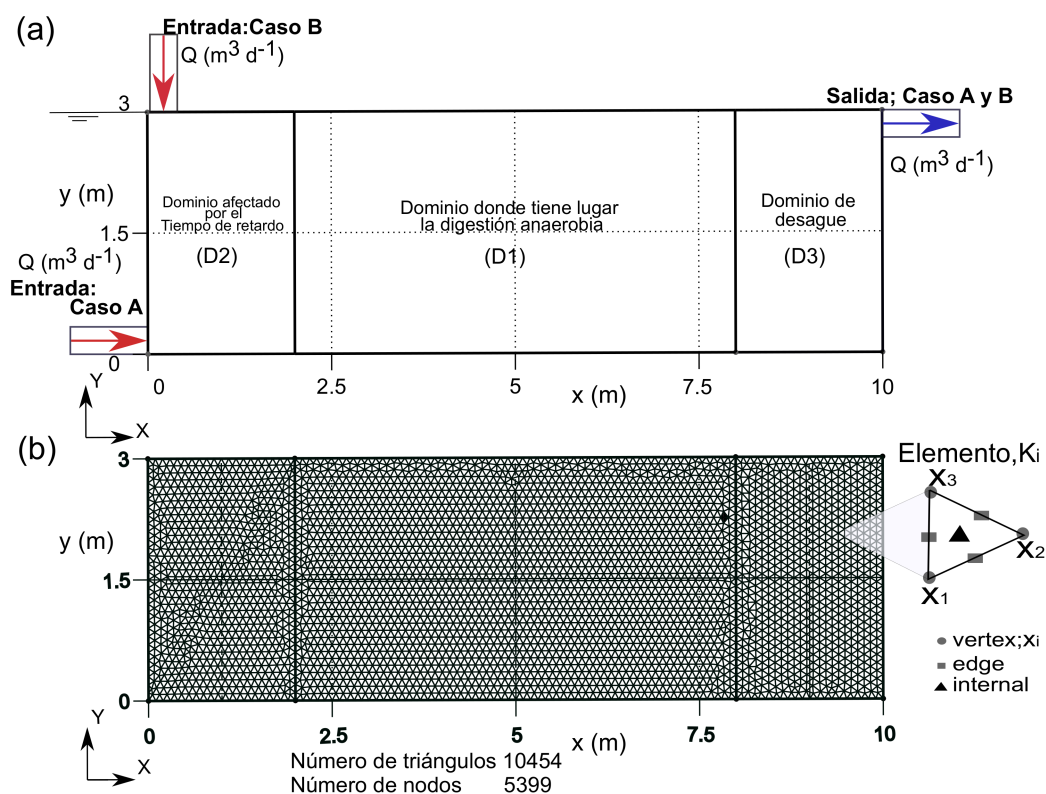


Figura 7.2: (a) Características geométricas del modelo y los diferentes Dominios considerados. (b) Discretización del dominio(H_0^1) donde se muestra el elemento del mallado (Ki) y sus grados de libertad

finitos fue empleado para la resolución del problema. El proceso de discretización dio

como resultado un mallado con un total de 10.454 triángulos y 5.399 vértices. La estrategia utilizada para el cálculo fue la misma que la empleada para el artículo anterior, ver 7.1.

Resultados Las simulaciones del modelo se llevaron a cabo considerando dos casos diferentes A y B, que varían según la localización de la entrada del influente al sistema, Fig. 7.2. Las condiciones iniciales y de contornos fueron las siguientes;

- El sistema está sujeto a un flujo continuo y constante con valor de $Q = 9 \text{ m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$
- El tiempo de simulación, hasta alcanzar el estado estacionario, es de 60 días
- El coeficiente de difusión es $\mathfrak{D} = 8.64 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$
- El sistema ha sido dividido en tres dominios, D1, D2 y D3, donde el proceso anaerobio se presenta, únicamente, en el D1 (ver Fig. 7.2)
- Las condiciones de contorno, referente a las concentraciones, en la entrada del sistema son las siguientes; $100 \text{ g}(\text{COD}) \cdot \text{l}^{-1}$ para los carbohidratos, proteínas y grasas, y $0.05 \text{ g}(\text{COD}) \cdot \text{l}^{-1}$ para las distintas bacterias y arqueas que intervienen en el proceso de digestión anaerobia.

Los resultados muestran, primeramente, las simulaciones de los flujos de los dos casos estudiados, casos A y B, y supeditados a las condiciones de contorno impuestas previamente. En éstos se ven reflejado los vectores velocidad asociados a cada uno de los puntos del dominio establecido. Dichos vectores son los que determinarán la distribución de las distintas variables dentro del sistema.

El potencial del modelo queda patente ante la posibilidad de poder simular un gran número de variables relacionadas con las concentraciones de sustratos y microorganismos, específicos para cada uno de los procesos, así como de compuestos inorgánicos resultante de las diferentes reacciones bioquímicas y fisicoquímicas de la DA. Los resultados del análisis comparativo de estas variables, para los dos casos estudiados, demuestran, además, la capacidad de la metodología para realizar estudios de contrastes que tienen que ver con el diseño y el funcionamiento del digestor. A través de diagramas lineales, trazados a lo largo del reactor, es posible determinar localizaciones estratégicas con valores de concentraciones, de microorganismos específicos, óptimos para operaciones de retorno de fluido hacia el punto de entrada. De este modo queda

garantizada la supervivencia de las colonias. Del mismo modo, con este tipo de diagrama es posible comparar las cargas residuales de los distintos casos a fin de poder valorar el diseño más idóneo.

7.3. A framework based on finite element method (FEM) for modelling and assessing the affection of the local thermal weather factors on the performance of anaerobic lagoons for the natural treatment of swine wastewater

Resumen La DA es un proceso biológico, respetuoso con el medio ambiente, que cada vez más se viene empleando para el tratamiento de aguas residuales agrícolas, urbanas e incluso industriales. Esto se debe a la facultad de los digestores anaerobios de generar biogás que puede ser empleado, posteriormente, como fuente de calor o de energía eléctrica. Se contribuye, por un lado, al principio de energía sostenible que aprovecha fuentes de energía de baja o nula emisión de carbono, y por otro, al uso de la economía circular.

Los SDN-A son infraestructuras apropiadas para pequeñas comunidades gracias a sus bajos costes de construcción y explotación, así como a su sostenibilidad ambiental. Las condiciones climatológicas son uno de los factores de mayor influencia en la eficiencia de las lagunas anaerobias para la degradación de la materia orgánica, ya que existe una estrecha relación entre la actividad microbiana, que intervienen en los procesos metabólicos de degradación, con la temperatura.

En este artículo se propone un modelo matemático que describa el comportamiento de los SDN-A teniendo en cuenta todos aquellos fenómenos asociados a los mismos y considerando una LA que funciona como un reactor heterogéneo no ideal tipo flujo pistón. Este modelo, obtenido a partir de las ecuaciones de ADR, la ecuación de Stokes, y del modelo ADM1, contempla además los efectos de la temperatura en el medio a través de las ecuaciones de la energía y unos operadores de fronteras asociados a las condiciones de contorno de Dirichlet, Neumann y Robin. Las EDP que determina el modelo, son parametrizadas a través del método de los elementos finitos.

Uno de los aspectos más relevantes en este trabajo está relacionado con el diseño de la metodología de cálculo, basada en el MPI. Con la inserción de la computación paralela, MPI, en el método se ha podido llevar a cabo numerosos procesos indispensable para el cálculo. Con ello ha sido posible simular, por separado, los estados transitorios de cada una de las fases incluidas dentro de la DA y definida en el ADM1, reflejando así un mayor realismo de todo este proceso. Gracias a estos dos aspectos, la inclusión de las variables termodinámicas y la paralelización del cálculo se ha podido representar todos estos procesos de una forma más precisa que en los artículos previos y expuestos hasta ahora.

Objetivos El principal objetivo de este estudio es la creación de un marco conceptual, donde

se recoja una serie de procedimientos para la integración de todos aquellos procesos que se presentan en el interior de los SDN-A y que influyen, principalmente, en el comportamiento interno de los distintos ecosistemas bacterianos. Se pretende que a través de este entorno pueda desarrollarse modelos de SDN-A para el tratamiento de aguas residuales con alta carga orgánica. Éste ha de contemplar las propiedades físicas relacionadas con la dispersión de las sustancias y el movimiento masivo del líquido, la transferencia de energía y el comportamiento de las distintas especies que forman parte de la biomasa anaerobia. Todo ello teniendo en cuenta que la mezcla no es homogénea y que el comportamiento del sistema se asemeja al de un reactor de flujo pistón.

Modelo Para este trabajo, se ha considerado un modelo gráfico en 2D definido por una laguna de sección rectangular y su entorno inmediato. Este dominio fue dividido en 6 regiones o subdominios (ver Fig. 7.3). Aquellas regiones que estaban localizadas en el terreno anexo a la laguna fueron clasificadas en función de su conductividad térmica, 1, 2 y 3, y las comprendidas dentro de la laguna por la presencia o no de actividad anaerobia, 5 y 6.

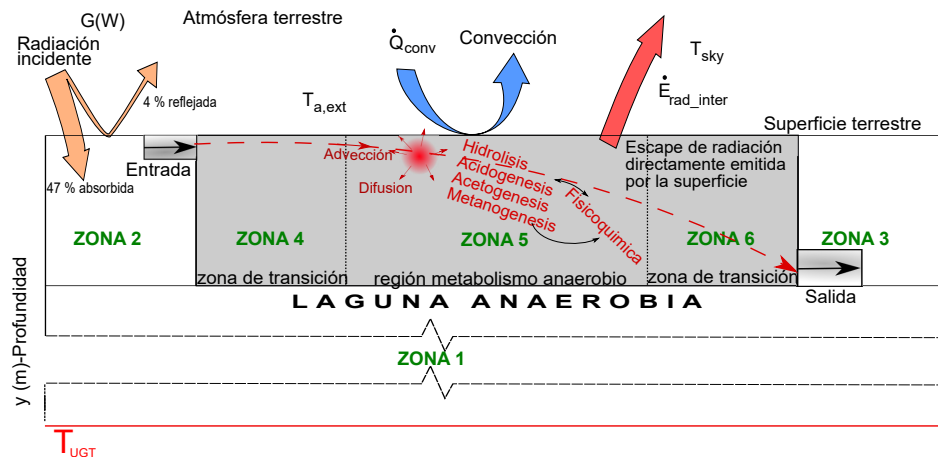


Figura 7.3: Esquema de los diferentes fenómenos que aparecen en las lagunas anaerobias y su entorno

Las condiciones de partida fueron las siguientes:

- La laguna es alimentada de forma continua y con caudal constante en la entrada y salida de la balsa.
- Los factores atmosféricos asociados con el contorno del sistema en la superficie terrestre incluye conducción, convección y radiación

- Se define T_{UGT} (Undisturbed Ground Temperature), cuyo valor de la temperatura, asociada al terreno a una cierta profundidad $y(m)$, permanece invariable frente a las condiciones atmosféricas. La profundidad donde se encuentra localizada la T_{UGT} va a depender de la zona geográfica donde se lleve a cabo el estudio.

Se definieron los siguientes procesos:

1. Fenómenos físicos

- Proceso de difusión; de mayor a menor concentración
- Proceso de advección; movimiento del fluido que tiene lugar en el interior de la laguna, y que está relacionado con las condiciones de bordes establecidas en la entrada y salida de estas.
- Proceso de transferencia de energía; debido a la existencia de un gradiente de temperatura

2. Procesos bioquímicos; reacciones químicas irreversibles llevadas a cabo través de la actividad microbiana, bacterias y arqueas.

3. Procesos fisicoquímicos; reacciones químicas donde no están involucrados los microorganismos.

Para la descripción del modelo fueron considerada tres ecuaciones constitutivas, ADR, Stokes y la de la Energía, junto con una serie de condiciones de contorno y con la implementación del modelo ADM1 (ver Anexo B eq (B.3) -(B.15))

Metodología El método de aproximación aplicado para la resolución del problema fue el MEF cuya triangulación generada en el proceso de discretización resultó un total de 13.163 triángulos y 6.776 vértices en la parte de la laguna (zonas 4, 5 y 6), y 25.394 triángulos y 12.983 vértices en su entorno (zonas 1, 2 y 3) (ver fig 7.3).

El cálculo fue llevado a cabo mediante la herramienta computacional Freefem++. La razón de ello se debe: 1^o. Se trata de un software libre para el cálculo de EDP a través del método de los elementos finitos, y 2. Es posible realizar cálculos en paralelos, MPI, puesto que viene implementado en este software, FreeFem++-MPI. De esta forma es posible realizar cálculos independientes en varios procesadores y en el mismo instante de tiempo

Por ese motivo, se diseñó un flujograma basado en el MPI, en contraste con los diagramas de tipo secuencial aplicado en los trabajos anteriores. Con ello fue posible determinar las distintas variables del modelo para cada uno de los vértices, nodos, del mallado en cualquier instante, donde cada procesador que conformaba el hardware de la computadora fue el encargado de ejecutar el cálculo de cada una de estas variables de forma independiente, teniendo en cuenta que aquella información relevante podría ser compartida por los otros procesadores a través del intercambio de información simultáneo y sincronizado que ofrece el MPI.

Resultados Con el fin de comprobar el potencial del modelo, se seleccionaron distintos parámetros meteorológicos (P1-P4) correspondiente a diferentes emplazamientos terrestres. Con estos datos se realizaron estudios comparativos de las simulaciones de distribución de temperatura en el modelo. Del mismo modo, simularon, para cada uno de los escenarios planteado, las concentraciones de sustratos y microorganismos de las distintas fases establecidas en el ADM1, hidrólisis/acidogenesis, acetogénesis y metanogénesis. En los resultados se ha representado la distribución de dichas variables una vez hubieron alcanzado el estado estacionario. La comparación entre ellos nos muestra la variación del comportamiento de cada una de las comunidades microbianas contenidas en el líquido a lo largo de la laguna en función de la distribución de temperatura en el medio. También se llevó a cabo la simulación de las variables consideradas estableciendo fuentes de calor en distintas localizaciones dentro del sistema. El modelo nos indica que es posible establecer una correlación entre distintos diseños referentes a la inducción de calor en ciertas zonas y el comportamiento de los microorganismos como respuesta a este nuevo escenario. Conforme a ello, cabe la posibilidad obtener patrones a medidas para aumentar el rendimiento y optimizar la energía invertida, en el caso de suministro de calor al sistema.

Teniendo en cuenta la capacidad que tienen los SDN-A para generar metano (biogás) que puede ser utilizado posteriormente para suministrar fuentes de calor al sistema, esta metodología permite la optimización del diseño de un SDN-A adaptado a las circunstancias del momento y lugar, contribuyendo, así, al desarrollo de la economía circular.

Parte IV

Conclusiones Finales

8 Conclusiones

El planteamiento de un modelo matemático, basado en procesos, que describiese los diferentes fenómenos que se presentan en los SDN-A, ha sido el objetivo principal de este trabajo. Por eso se ha analizado la capacidad de depuración de estos SDN a través del comportamiento dinámico de los distintos grupos de microorganismo anaerobios que intervienen en la remoción de la materia orgánica procedente de residuos ganaderos. El principal reto de este estudio ha consistido en la habilidad de poder caracterizar las variables de estados vinculadas a los distintos procesos que se desarrollan en los SDN-A, ya que, al tratarse de mezclas heterogéneas, existe una dependencia con el punto y con el instante considerado. Por su parte, debido a la complejidad del modelo propuesto, fue necesario establecer, como objetivo adicional, el desarrollo de una metodología de cálculo que posibilitara unos resultados idóneos para la caracterización cuantitativa y cualitativa del comportamiento dinámico de los distintos fenómenos contemplados en el modelo.

Para ello, se tomó en consideración, como idea básica de partida, la necesidad de tener una adecuada comprensión de los fenómenos que rigen el proceso de DA en un SDN de flujo libre. Esta idea, en si misma, no es posible si no se traduce convenientemente en un modelo matemático que permita la simulación de la evolución de las variables de los distintos procesos que tienen lugar en el SDN-A de manera convincente. La mayoría de las investigaciones llevadas a cabo acerca de SDN están fundamentadas en estudios empíricos, y aquellas que se sustentan sobre modelos matemáticos se aplican a reactores con mezclas homogéneas o casi homogénea. Aunque existen algunos estudios desarrollados para digestores tipo flujo pistón con mezclas heterogéneas, estos están basados en el uso de unas pocas variables donde no existe una descripción de la conducta de los microorganismos de forma concreta, sino que suele utilizarse un parámetro efectivo que recoge de manera agregada la contribución de todos los parámetros presentes en la zona de estudio.

En este trabajo, se diseñó un modelo en 2D basado en procesos y construido sobre las

ecuaciones de ADR, de Stokes y la ecuación de la energía, donde se reflejan estos fenómenos físicos, así como aquellos fenómenos bioquímicos y fisicoquímicos relacionados con los procesos de DA. Estos último formulado a través de la implementación del modelo ADM1, en la ecuación ADR, que se establece como uno de los aspectos más innovadores del modelo. El uso del MEF y la aplicación de una metodología de cálculo, a través del diseño de un algoritmo complejo, supeditado a la necesidad de resolver un gran número de variables dependientes entre sí, fueron otros aspectos originales de este trabajo. Dicha metodología fue expuesta desde dos perspectivas diferentes; a través de un planteamiento inicial con un diagrama de flujo lineal y secuencial hasta el diseño final de un flujograma basado en el cálculo en paralelo. Con este último fue posible incrementar el número de variables, aumentar la densidad del mallado, y con ello, obtener una mayor aproximación de la solución del problema.

Para la simulación se propuso un SDN-A con geometría regular, sometido a las condiciones ambientales del entorno y sujeto a procesos de carga/descarga de forma permanente, con caudales continuos y constantes a la entrada y salida del sistema. A la vista de los resultados se pudo comprobar la capacidad del método para poder representar las distintas variables incluidas en el modelo; velocidad, temperatura y concentraciones de los distintos componentes que intervienen en cada una de las etapas metabólicas de la digestión. Estas concentraciones conciernen a los diferentes sustratos, productos y microorganismos, así como a los parámetros fisicoquímico que influyen en la eficiencia del proceso, tales como: efecto del pH, balance de nutrientes, inhibidores y estimuladores.

A través de la representación de los resultados, en estado estacionario, se pudo comprobar la capacidad del modelo y de la metodología para el diseño de perfiles de concentraciones a lo largo del digestor, siendo posible localizar aquellas zonas del sistema idóneas para extraer y retornar parte de la biomasa hacia el influente con el propósito de a garantizar la supervivencia de las especies dentro del sistema. Por otro lado, se simuló la distribución de la temperatura en el SDN-A así como su afección al crecimiento de las distintas especies. Las simulaciones mostraron la capacidad del modelo para diseñar la distribución de las diferentes colonias de microorganismos estableciendo distintos focos de calor en determinados puntos del sistema.

Como punto fuerte de este trabajo cabe destacar la utilización de herramientas computacionales de código abierto (Open-Access), tanto para el diseño del cálculo como para el

pre y postproceso de este, ofreciendo así una mayor libertad para poder plantear modelos ajustados a cualquier tipo de situación y con un gran número de variables que van a depender de la capacidad del sistema informático que se disponga. La mayoría de los modelos publicados se han sustentados en paquetes informáticos comerciales y por ello mucho más limitado para poder abordar problemas singulares. Sin embargo, se considera la necesidad de confrontar los datos con modelos experimentales a efectos de validación del modelo y de la metodología propuesta.

Las principales aportaciones de la investigación pueden resumirse en:

- El desarrollo de un marco teórico original, basados en procesos, para el diseño de modelos matemáticos de sistemas de depuración natural con mezclas heterogéneas formados por SDN-A. La idoneidad de este tipo de estudio radica en la capacidad de poder incorporar, a cada uno de los proyectos, una serie de propiedades que tienen que ver con los criterios y necesidades de cada instalación de manera personal e individualizada; características del influente, modo de operación, peculiaridades del terreno, etc. De este modo es posible diseñar SDN autónomos en donde la mano de obra esté limitada a los procesos de carga y descarga y su eficiencia esté sujeta al propio diseño del sistema.
- La implementación del modelo ADM1 en el estudio para la descripción de los procesos bioquímicos y fisicoquímicos que se llevan a cabo dentro de las LA. Son pocos los estudios sobre tratamiento de aguas residuales mediante SDN-A donde el modelo ADM1 haya sido aplicado. Este modelo se emplea de forma universal en digestores anaerobios en el tratamiento de aguas para mezclas homogéneas con sistemas mecanizados. Aunque la incorporación del ADM1 a esta investigación ha dificultado cálculo a una escala mucho mayor, la posibilidad de poder reflejar el comportamiento interno de cada una de las colonias de microorganismos, que participan en el proceso, ofrece la posibilidad de establecer un nivel de conocimiento del funcionamiento interno del SDN-A mayor de los planteados hasta el momento.
- El empleo del MEF como uno de los métodos de aproximación idóneo, por su capacidad para tratar problemas no homogéneos, con geometrías muy complejas y con un gran número de variables, algunas de ellas dependientes entre sí. Debido a la complejidad del modelo planteado, con gran cantidad de variables dinámicas y con EDP de

tipo parabólica, resulta casi imposible de resolver sin el empleo de procedimientos matemáticos, métodos numéricos, que nos ofrezcan una solución aproximada al problema planteado. El uso del MEF para la resolución del problema complejo propuesto ha permitido subdividirlo en otros más simples permitiendo realizar cálculos computacionales mucho más eficientes.

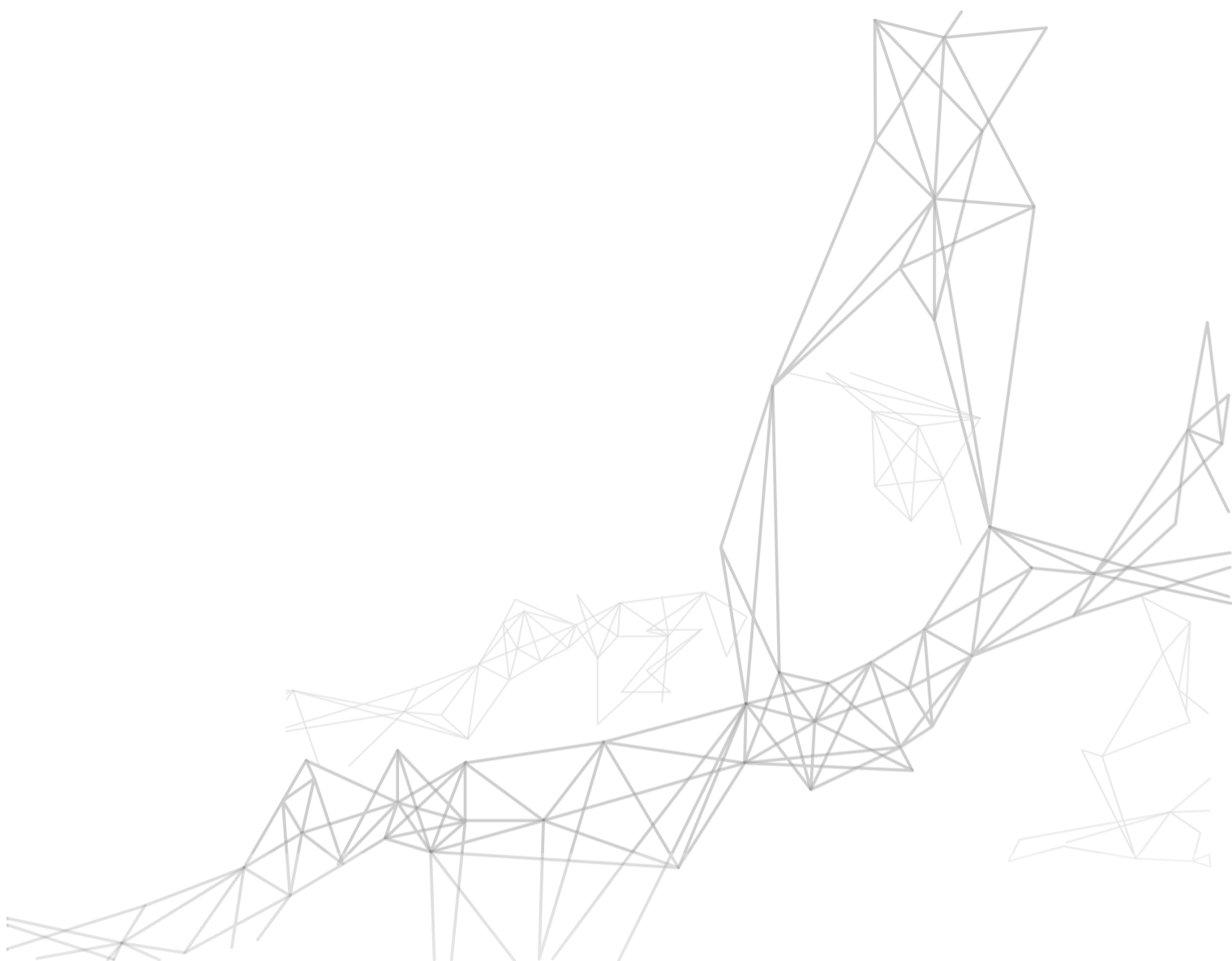
- El establecimiento de una metodología rápida e intuitiva a través del diseño de un algoritmo basado en la aplicación informática de Cálculos en Paralelo. La programación en paralelo basada en MPI es posible gracias al empleo de computadoras tipo multiprocesador. Con ellos se puede realizar los cálculos de las distintas variables de forma independientes, y al mismo tiempo compartir información, variables resultantes de los cálculos o constantes, entre todos ellos. De este modo se incrementa al máximo en rendimiento del computador dando una mayor estabilidad al sistema y aprovechando al máximo su capacidad.
- El uso de software de código abierto, tanto para el cálculo, FreeFem++, como para el pre y postproceso, GMSH y Paraview. A través de estas herramientas, útil y al alcance de cualquier usuario, fue posible acometer un problema, a priori, complicado y extenso en los cálculos. El potencial de este tipo de software estriba en su capacidad para poder diseñar modelos adaptados a cualquier tipo de circunstancia, y la posibilidad de poder compartir la información, geometría, mallado y código, para usos sucesivos en otras investigaciones.

Como líneas futuras para este trabajo se propone;

- Extender el planteamiento del modelo y de la metodología para el caso de las 3 dimensiones espaciales, con el fin de poder relacionar el rendimiento del sistema con la geometría del digestor. Un adecuado diseño es garantía de un buen funcionamiento posterior.
- Formular el estudio para flujos discontinuos, carga y descarga por impulso, con el propósito de simular, de forma fidedigna, el funcionamiento de los SDN-A en la práctica. El proceso de mezclado es logrado por efecto del arrastre del flujo, en el momento de la alimentación y evacuación del sistema.

- La configuración e implementación de un sistema de monitorización de variables múltiples para la medición de aquellos valores numéricos, asociados con las condiciones ambientales y las relacionadas con la DA, en los SDN en explotación, a efectos de poder establecer estudios comparativos con los resultados del modelo planteado.
- La validación del modelo mediante la construcción de un biodigestor de flujo pistón a escala de laboratorio donde puede confrontarse los resultados de las pruebas experimentales obtenidas con los de la simulación.

A Simbología



Símbolos

Δ Laplaciano $\Rightarrow \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$

μ_{max_i} Tasa de crecimiento específica máxima de los microorganismos

$\nabla\phi$ Gradiente $\Rightarrow \nabla = \frac{\partial\phi}{\partial x_i}$

σ Constante de Stefan-Boltzmann

ε Emisividad

$\vec{u}$ Velocidad

$\vec{v}, q, Y_i, W$ Función suave o infinitamente diferenciable

C_v Calor específico efectivo

$\cos\Theta$ Ángulo entre la dirección de irradiación y la normal a la superficie

$div\vec{\phi}$ Divergencia $\Rightarrow \nabla = \frac{\partial\vec{\phi}}{\partial x_i}$

I_i Coeficiente de inhibición

Kd Tasa de descomposición del microorganismo

n Vector normal unitario

p Presión

T temperatura

$T_{a,ext}$ Temperatura ambiente

T_{dp} Temperatura de rocío

T_{max} Valor de temperatura para un crecimiento máximo

T_{min}	Es la temperatura por debajo de la cual ya no se observa crecimiento C
T_{opt}	Valor de temperatura donde la tasa máxima de crecimiento toma su valor óptimo
T_{sky}	Temperatura de cielo
X_i	Concentración de biomasa
Γ_D	Condición de frontera de Dirichlet
Γ_N	Condición de frontera de Neumann
Γ_R	Condición de frontera de Robin
$\mathbb{H}_0^1, \mathbb{P}_0^1, \mathbb{P}_0^2$	Espacio de Hilbert
$\mathfrak{D}$	Coeficiente de difusión
ν	Viscosidad
Ω_g	Dominio del junto a laguna
Ω_r	Dominio del reactor (laguna)
ϕ	Campo de escalares. Representa la concentración de un determinado sustrato, compuesto inorgánico o de la biomasa
ρ_0	Densidad
ρ_j	Coeficiente de crecimiento específico
h_{int}	Coeficiente de transferencia de calor por convección interna
K_{S_1}	Constante de saturación de sustrato
k_i	Conductividad calorífica para Ω_i cuando $i=1,2,3\dots$
S_i	Concentración de sustrato
T_{UCT}	Undisturbed ground temperature. Valor de la temperatura a una profundidad donde existe un equilibrio entre la radiación solar en la superficie y el flujo del calor geotérmico
Y_1	Tasa de conversión de sustrato en biomasa

G Irradiancia

Q Caudal

RH Promedio de humedad relativa

t Tiempo (d)

B Descripción de las Ecuaciones del Modelo

B.1. Ecuación Advección-Difusión-Reacción (ADR)

B.1.1. Formulación fuerte

* Para un dominio acotado Ω , que tiene conexión con el entorno, y con frontera Γ . El problema de la advección-difusión-reacción, consiste en determinar una función escalar $\phi(x, y, t)$ la cual debe satisfacer la ecuación diferencial B.1;

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \mathfrak{D} \Delta \phi + \vec{u} \nabla \phi + f(\phi) = F \text{ para } x, y \in \Omega \quad (\text{B.1})$$

Así como unas condiciones iniciales y de contorno, definidas por las expresiones que se exponen en B.2

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial (x, y)} \Big|_{t=0} &= \phi_0 \text{ para } x, y \in \Omega \text{ condiciones iniciales} \\ \phi(x, y, t) &= g_D(x, y) \text{ para } x, y \in \Gamma_D \subset \partial \Omega, t > 0 \\ \frac{\partial \phi(x, y, t)}{\partial n} n(x, y) &= g_N(x, y) \text{ para } x, y \in \Gamma_N \subset \partial \Omega, t > 0 \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

donde $f(\phi)$ es el término reactivo; siendo positivo $f(\phi) > 0$ para el crecimiento o producción, y negativo $f(\phi) < 0$ para la lisis y consumición de biomasa y metabolitos, F es el término fuente/sumidero, Γ_D y Γ_N son las condiciones de contorno de Dirichlet y Neumann respectivamente cuyo esquema viene representado en la figura B.1.

La ecuación ADR queda definida, para el sustrato, metabolitos y biomasa, de la siguiente forma:

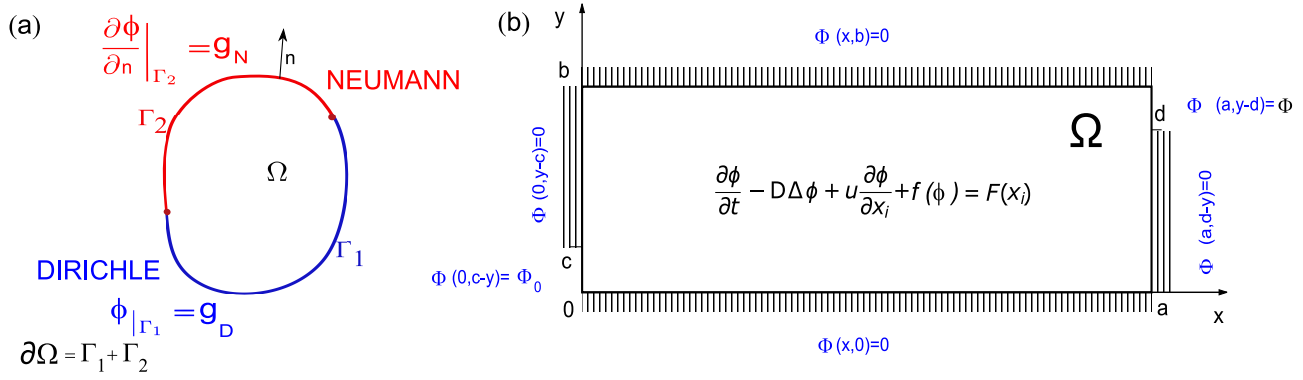


Figura B.1: Representación de las Condiciones de Contorno de Dirichlet y Neumann. a) Esquema genérico. b) Esquema detallado para el modelo gráfico definido.

1. Para el sustrato y metabolitos

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathfrak{D}\Delta Si + \vec{u}\nabla Si + \rho_j Xi_{pH} = \frac{\partial Si}{\partial t} & \text{en } \Omega \\ \frac{\partial Si}{\partial(x,y)} \Big|_{t=0} = Si_0 & \text{para } x,y \in \Omega \text{ condiciones iniciales} \\ Si = Si_{cont} & \text{en } \Gamma_D \subset \partial\Omega, t \text{ CC Dirichlet} \\ \frac{\partial Si}{\partial n} = 0 & \text{en } \Gamma_N \subset \partial\Omega, t \text{ CC Neumann} \end{array} \right. \quad (B.3)$$

donde Si representa las concentraciones de los sustratos y metabolitos que intervienen en el proceso, δ es el coeficiente de difusión con valor constante, el operador Δ viene definido por $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, y los operadores ∇ por $\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$, los parámetros $\vec{u}(\vec{u}_1, \vec{u}_2)$ representa los vectores de velocidad obtenidos a través de la ecuación de Stokes (B.8), Γ_D es la condición de contorno de Dirichlet y Γ_N la de Neumann (Figura B.1).

2. Para el microorganismo

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathfrak{D}\Delta Xi + \vec{u}\nabla Xi - (\rho_j Xi_{pH} - K_d Xi) = \frac{\partial Xi}{\partial t} & \text{en } \Omega \\ \frac{\partial Xi}{\partial(x,y)} \Big|_{t=0} = Xi_0 & \text{para } x,y \in \Omega \text{ condiciones iniciales} \\ Xi = Xi_{cont} & \text{en } \Gamma_D \subset \partial\Omega, t \text{ CC Dirichlet} \\ \frac{\partial Xi}{\partial n} = 0 & \text{en } \Gamma_N \subset \partial\Omega, t \text{ CC Neumann} \end{array} \right. \quad (B.4)$$

donde Xi representa las concentraciones de cada uno de los microorganismos que intervienen el proceso de digestión.

B.1.2. Formulación débil

La formulación débil para la ecuación ADR (B.5) estriba en encontrar $\phi \in H_0^1(\Omega)$ tal que:

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} \cdot Y_i + \mathfrak{D} \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \nabla Y_i + \int_{\Omega} \vec{u} \nabla \phi \cdot Y_i + \int_{\Omega} f(\phi) \cdot Y_i &= 0 \text{ para todo } Y_i \in H_0^1(\Omega) \\
 \frac{\partial \phi}{\partial(x,y)} \Big|_{t=0} &= \phi_0 \text{ para } x, y \in H_0^1(\Omega) \text{ CI} \\
 \phi(x, y, t) &= g_D(x, y) \text{ para } x, y \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, t > 0 \\
 \frac{\partial \phi(x, y, t)}{\partial n} n(x, y) &= g_N(x, y) \text{ para } x, y \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, t > 0
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

donde Y_i es la función de prueba y H_0^1 es el espacio de Hilbert.

1. Para el sustrato y metabolitos

$$\left\{ \begin{array}{ll}
 \int_{\Omega} \frac{\partial Si}{\partial t} \cdot Y_i + \mathfrak{D} \int_{\Omega} \nabla Si \cdot \nabla Y_i + \int_{\Omega} \vec{u} \nabla Si \cdot Y_i + \dots & \\
 \dots + \int_{\Omega} f(Si) \cdot Y_i = 0 & \text{para todo } Y_i \in H_0^1(\Omega) \\
 \frac{\partial Si}{\partial(x,y)} \Big|_{t=0} = Si_0 & \text{para } x, y \in H_0^1(\Omega) \text{ CI} \\
 Si(x, y, t) = Si_{cont} & \text{para } x, y \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, t > 0 \\
 \frac{\partial Si(x, y, t)}{\partial n} n(x, y) = 0 & \text{para } x, y \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, t > 0
 \end{array} \right. \tag{B.6}$$

2. Para el microorganismo

$$\left\{ \begin{array}{ll}
 \int_{\Omega} \frac{\partial Xi}{\partial t} \cdot Y_i + \mathfrak{D} \int_{\Omega} \nabla Xi \cdot \nabla Y_i + \int_{\Omega} \vec{u} \nabla Xi \cdot Y_i + \dots & \\
 \dots + \int_{\Omega} f(Xi) \cdot Y_i = 0 & \text{para todo } Y_i \in H_0^1(\Omega) \\
 \frac{\partial Xi}{\partial(x,y)} \Big|_{t=0} = Xi_0 & \text{para } x, y \in H_0^1(\Omega) \text{ CI} \\
 Xi(x, y, t) = Xi_{cont} & \text{para } x, y \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, t > 0 \\
 \frac{\partial Xi(x, y, t)}{\partial n} n(x, y) = 0 & \text{para } x, y \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, t > 0
 \end{array} \right. \tag{B.7}$$

B.2. Ecuación de Stokes, para flujos estacionarios

B.2.1. Formulación fuerte

Se trata de encontrar un vector $\vec{u} = (u_1, u_2)$ y un escalar p tal que:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\mu \Delta \vec{u} + \nabla p = 0 & \text{para } x, y \in \Omega \\ \int_{\Omega} p = 0 & \text{condición de solubilidad} \\ \vec{u}(x, y) = \vec{h}_D(x, y) & \text{para } x, y \in \Gamma_D \subset \partial\Omega \text{ CC Dirichlet} \\ \vec{u}(x, y) \vec{n} = \vec{h}_N(x, y) & \text{para } x, y \in \Gamma_N \subset \partial\Omega \text{ CC Neumann} \end{array} \right. \quad (\text{B.8})$$

donde $\vec{u} = (u_1, u_2)$ representa la velocidad, y p la presión, μ es el coeficiente de viscosidad, Γ_D es la condición de contorno de Dirichlet y Γ_N la de Neumann (Figura B.1).

B.2.2. Formulación débil

Encontrar $\vec{u} = (u_1, u_2) \in H_0^1(\Omega)$ y $p \in L^2(\Omega)$ tal que:

$$\begin{aligned} \mu \int_{\Omega} \nabla \vec{u} \cdot \nabla \vec{v} - \int_{\Omega} (\text{div } \vec{v}) p &= 0 \quad \text{para todo } \vec{v} \in H_0^1(\Omega) \\ \int_{\Omega} (\text{div } \vec{u}) q &= 0 \quad \text{para todo } q \in L^2(\Omega) \\ \vec{u}(x, y) &= \vec{u}_{cont} \quad \text{para } x, y \in \Gamma_D \\ \nabla \vec{u} \cdot \vec{n} &= 0 \quad \text{para } x, y \in \Gamma_N \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

donde $\vec{v}$ y q son funciones de prueba y H_0^1 es el espacio de Hilbert.

B.3. Ecuación de la Energía. Distribución de la temperatura

B.3.1. Formulación fuerte

La ecuación de la energía está basada en la ley de conservación de la energía y en las leyes de conducción de calor de Fourier. El balance interno de la energía, a través de una

descripción Euleriana, en estado estacionario, puede ser expresada como una función de la temperatura.

$$\begin{aligned}
 \rho_0 C_v (\vec{u} \cdot \nabla T) - \nabla \cdot (k_i \nabla T) &= 0 \text{ para } x, y \in \Omega \\
 T(x, y) &= T_{aa}(x, y) \text{ para } x, y \in \Gamma_D \\
 \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial n} n(x, y) &= g_N(x, y) \text{ para } x, y \in \Gamma_N \\
 k \frac{\partial T}{\partial n} &= h(T_{a,ext} - T) + \varepsilon_s \cdot \sigma \cdot (T^4 - T_{sky}^4) \text{ para } x, y \in \Gamma_R
 \end{aligned} \tag{B.10}$$

donde Γ_D se corresponde con las condiciones de frontera de Dirichlet, siendo aplicable en cierta profundidad del terreno en el que la temperatura permanece invariable (Undisturbed Ground Temperature-UGT) ; Γ_N es la condición de contorno de Neumann. Describe el valor del gradiente de la variable del campo dependiente; Γ_R es la condición de contorno de Robin, donde se describe el calentamiento y enfriamiento de la superficie terrestre Γ_R (Figura B.2).

Para modelar el intercambio de calor debido a los fenómenos de radiación y los procesos de convección se aplica la ley de Stefan-Boltzmann y la ley de enfriamiento de Newton [16, 34] siendo el valor de la constante de Stefan-Boltzmann $\sigma = 5.68 \cdot 10^{-8} (W \cdot K^{-4} \cdot m^{-2})$ [6]; $T_{a,ext}$ es la temperatura externa, en el entorno del SDN; ε_s es la emisividad en la superficie de la tierra, donde $0 \leq \varepsilon_s \leq 1$; T_{sky} es la temperatura radiactiva del cielo, siendo utilizada para estimar el intercambio de calor radiactivo con la atmósfera terrestre. [56]. T_{sky} y ε_{sky} se usa para estimar el intercambio de calor radiactivo con la atmósfera terrestre. [56].

$$T_{sky} = \left(\frac{\varepsilon_{sky} \cdot T_{a,ext}^4}{\sigma} \right)^{\frac{1}{4}} - 273.15 \tag{B.11}$$

$$\varepsilon_{sky} = \left(0.787 + 0.764 \ln \left(\frac{T_{dp}}{273} \right) \right) (1 + 0.0224N + 0.0035N^2 + 2.8 \cdot 10^{-4}N^3) \tag{B.12}$$

donde $0 \leq \varepsilon_{sky} \leq 1$, N es el valor de la nubosidad en décimas, y $T_{dp}(K)$ es la temperatura del punto de rocío a la que debe enfriarse para saturarse. Estos valores son obtenidos mediante una correlación contemplada en Lawrence [34] (B.13) y a través de la ecuación (B.13)

$$T_{dp} = T - \left(\frac{100 - RH}{5} \right) \tag{B.13}$$

Para este modelo no se ha considerado las fuentes de calor de los procesos metabólicos, debido a las reacciones bioquímicas.

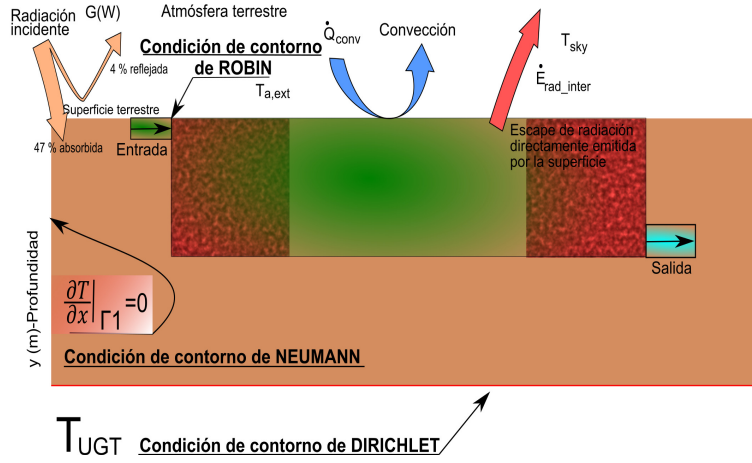


Figura B.2: Condiciones de contorno para la ecuación de la Energía

B.3.2. Formulación débil

Encontrar $T \in H_0^1(\Omega)$ tal que:

$$\begin{aligned} \rho_0 C_v \int_{\Omega} \vec{u} \cdot \nabla T \cdot W + k_i \int_{\Omega} \nabla T \cdot \nabla W &= 0 \quad \text{para todo } T \in H_0^1(\Omega) \\ T(x, y) &= T_{aa}(x, y) \quad \text{para } x, y \in \Gamma_D \\ \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial n} n(x, y) &= g_N(x, y) \quad \text{para } x, y \in \Gamma_N \\ k \frac{\partial T}{\partial n} &= h(T_{a,ext} - T) + \varepsilon_s \cdot \sigma \cdot (T^4 - T_{sky}^4) \quad \text{para } x, y \in \Gamma_R \end{aligned} \quad (B.14)$$

donde W es la función de prueba y H_0^1 es el espacio de Hilbert.

B.4. Modelo ADM1

El modelo ADM1 describe los principales procesos relacionados con la transformación de sustratos orgánicos complejos en CH_4 y CO_2 y subproductos inertes. Comporta una serie de reacciones complejas y una gran cantidad de reacciones simultáneas y secuenciales, bioquímicas y fisicoquímicas, Fig. B.3 - Izda. [5].

- Procesos bioquímicos

ADM1 incluye 24 ecuaciones diferenciales donde se describe las diferentes etapas del proceso de digestión anaerobia, Fig - B.3 - Dcha., en total 24 ecuaciones diferenciales.

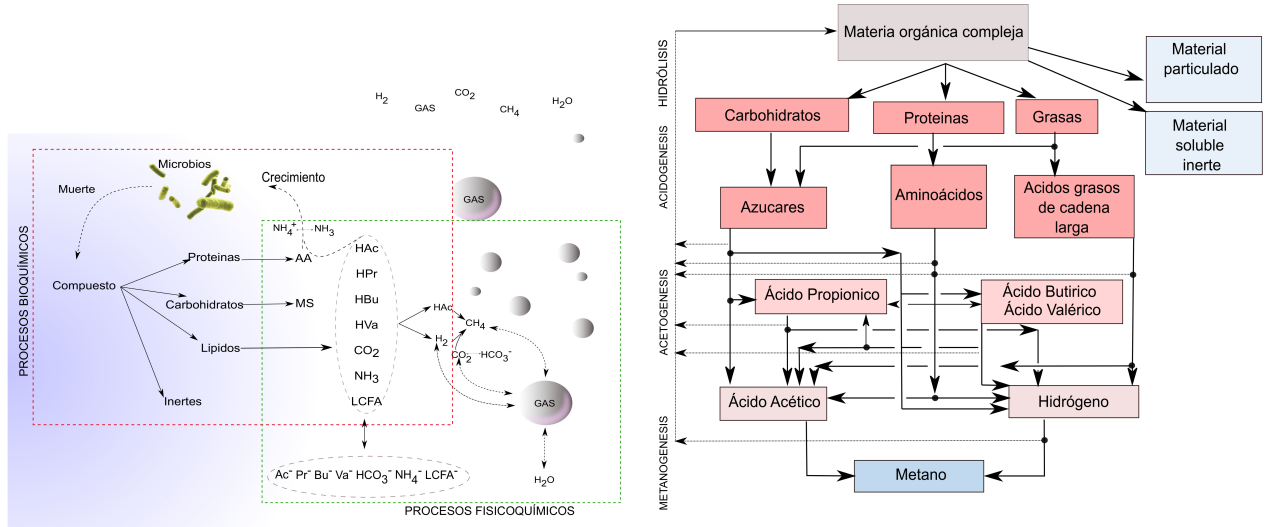


Figura B.3: Izda.: Esquema de los procesos bioquímicos y fisicoquímicos en la digestión anaerobia según ADM1. Dcha.: Diagrama de flujo donde están representada las distintas etapas de las reacciones bioquímicas que tienen lugar en el proceso de digestión anaerobia según ADM1 [5]

Tanto la hidrólisis como la lisis bacteriana están representadas por una cinética de primer orden, mientras que el resto a través de la Cinética de Monod (eq. B.15).

$$\rho_j = \mu_{max_i} \frac{S_1}{K_{s_1} + S_1} \cdot I_1 \cdot I_2 \cdots I_n \quad (B.15)$$

donde ρ_j (d^{-1}) es el coeficiente de crecimiento específico, μ_{max_i} (d^{-1}) es el coeficiente específico de crecimiento máximo, $S(kg\ m^{-3})$ la concentración de sustrato y K_{S_1} ($Kg\ m^{-3}$) es la constante de saturación para el sustrato, y I_{pH} es la función de inhibición considerando, en este caso, como un factor asociado al pH (Eq.B.17).

La remoción de sustrato y el crecimiento y lisis bacteriana viene expresada en la ecuación (B.16) .

$$\frac{dS_i}{dt} = -\rho_j \frac{X_i}{Y_i} \quad ; \quad \frac{dX_i}{dt} = \rho_j X_i I_{pH} - K_d X_i \quad (B.16)$$

Donde, ρ_j (d^{-1}) es la tasa de crecimiento específico, Y_1 es el rendimiento de la biomasa sobre el sustrato, K_d (d^{-1}) es el coeficiente de lisis del microorganismo.

El coeficiente de inhibición para el crecimiento debido al pH viene dado por (B.17)

$$I_{pH} = exp \left(-3 \left(\frac{pH - pH_{LL}}{pH_{UL} - pH_{LL}} \right)^2 \right) \quad (B.17)$$

Cuadro B.1: Funciones de inhibición y constantes conforme a datos recopilados de manera experimental [5]. Donde K_I =parámetro inhibitorio; S =sustrato para el proceso considerado; S_I =concentración del inhibidor ; X =biomasa para el proceso considerado.

Descripción	Ecuación	Constante
Factor inhibición por amoníaco libre	$I_{IN} = \frac{S_I}{S_I + K_I}$	$K_I = 0.01$
Factor de inhibición por presencia de amonio	$I_{NH_3} = \frac{1}{1 + \frac{S}{K_1}}$	$K_I = 0.001$
Factor de inhibición por nivel de pH	$I = \frac{1 + 2 \times 10^{0.5(pH_{LL} - pH_{UL})}}{1 + 10^{pH - pH_{UL}} + 10^{pH_{LL} - pH}}$	$pH_{LL} = 6; pH_{UL} = 8.5$
Factor de inhibición competitiva entre el Butirato y Valerato	$I = \frac{1}{1 + \frac{S_I}{S}}$	

La influencia de la temperatura es obtenida a través de la ecuación propuesta por Rosso et al. [44] en el modelo Cardinal temperature model with inflection (CTMI).

$$\mu_{max} = \mu_{opt} \frac{(T - T_{max})(T - T_{min})^2}{(T_{opt} - T_{min})[(T_{opt} - T_{min})(T - T_{opt}) - (T_{opt} - T_{max})(T_{opt} + T_{min} - 2T)]} \quad (B.18)$$

- Procesos fisicoquímicos

En la ecuación de equilibrio ácido/base (B.19) se representa las distintas reacciones de equilibrio; ácido acético/acetato, ácido propiónico/propionato, ácido butírico/butirato, ácido valérico/valerato, carbón dióxido disuelto/ bicarbonato y amonio/amoniaco.

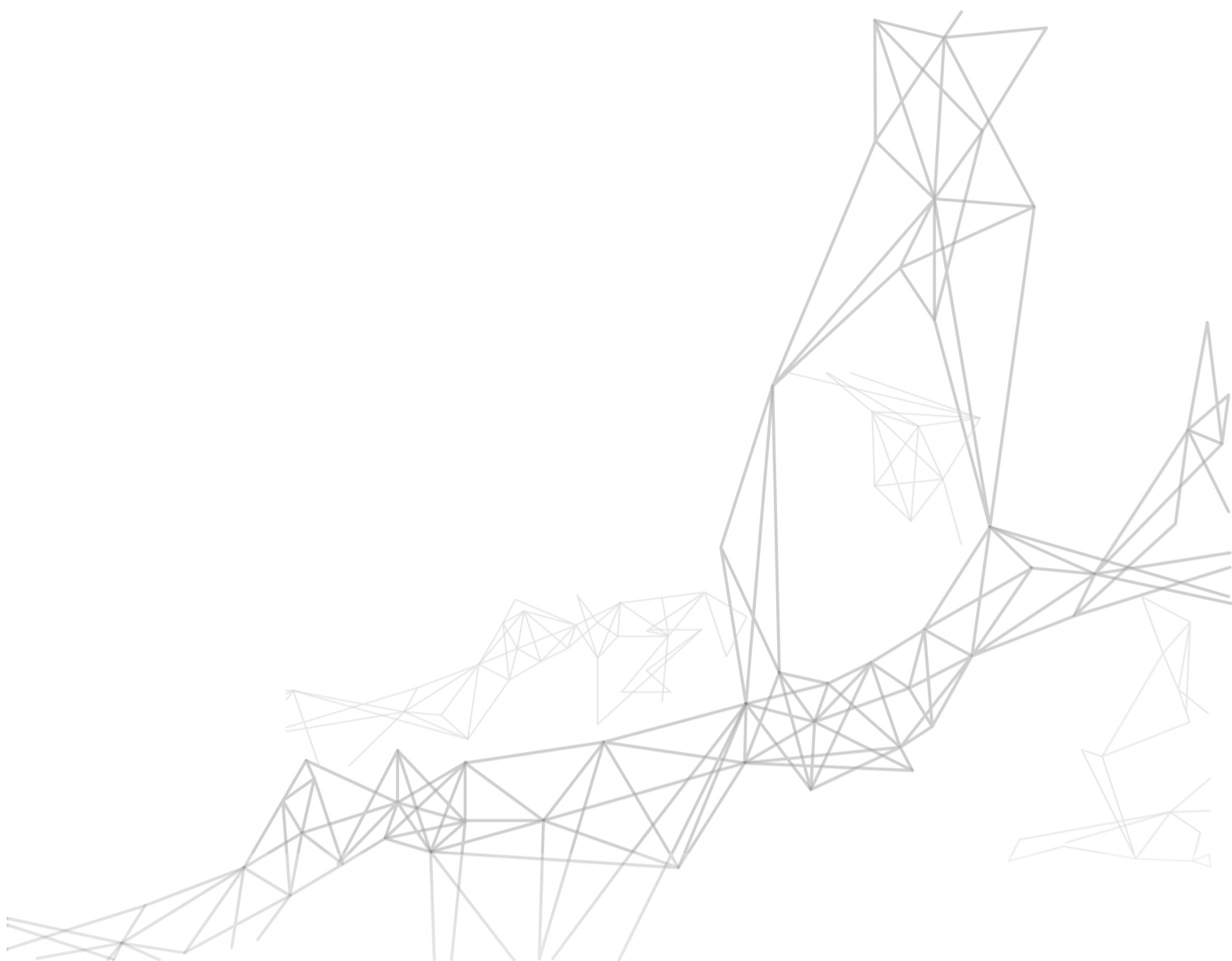
$$z + [NH_4^+] + [H^+] - [HCO_3^-] - \frac{[Ace]}{64} - \frac{[Prop]}{112} - \frac{[But]}{160} - \frac{[Val]}{208} - [OH^-] = 0 \quad (B.19)$$

Donde los diferentes términos de la ecuación son;

$$[HCO_3^-] = \frac{[CO_2]K_C}{[H^+]}; \quad [NH_4^+] = \frac{[NH_3][H^+]}{K_N}; \quad [AGV^-] = \frac{[AGV]K_{AGV}}{([H^+] + K_{AGV})M_{AGV}} \quad (B.20)$$

donde K_C, K_N, K_{AGV} son los coeficientes de las reacciones de equilibrio ácido/base

C Código FreeFem++



```

//2D CFM for anaerobic processes i natural wastewater treatment systems
//Autor :Saulo M. Brito

if ( mpisize != 5 ) { // exactly n processors cout << " sorry, num-
ber of processors !=5 " << endl;
exit(1);}

load "medit"
load "iovtk"
load "gmsh"
load "tetgen"
load "MUMPS_FreeFem"
include "MPIGMRESmacro.idp"
int[int] ffordert=1;
int[int] ffordert1=[1,1,1];
int worldrank;

mpiComm comm(mpiCommWorld, 0, 0);
int MPICommSize=mpiSize(comm);
int MPIRank=mpiRank(comm);
//*****
//-----MESH-----
//*****
int ug=1,side=2,sky=3,ug2=4,inter=5,exit=6,inlet=7,imp=8,ground=9,heat=10;//boundary de-
scription

// 1- the ground
border s01(t=-2,12){x=t;y=-7;label=ug;} //undergrown
border s02(t=-7,0){x=12;y=t;label=side;}
border s02b(t=0,3){x=12;y=t;label=side;}
border s03(t=12,10){x=t;y=3;label=sky;}
border s06(t=3,0){x=10;y=t;label=ug2;}
border s07(t=10,0){x=t;y=0;label=ug2;}
border s08(t=0,3){x=0;y=t;label=ug2;}
border s10(t=0,-2){x=t;y=3;label=sky;}
border s11(t=3,0){x=-2;y=t;label=side;}
border s12(t=0,-7){x=-2;y=t;label=side;}
border s13(t=-2,0){x=t;y=0;inter=2;}
border s14(t=10,12){x=t;y=0;inter=2;}
// insulating material
border m05(t=10.2,10){x=t;y=3;label=imp;}
border m01(t=0,-0.2){x=t;y=3;label=imp;}

// 2- the SDN

```

```

border c01(t=-0.2,2){x=t;y=-0.2;label=ground;}
border c02(t=2,4){x=t;y=-0.2;label=heat;}
border c02b(t=4,8){x=t;y=-0.2;label=ground;}
border c03(t=8,10.2){x=t;y=-0.2;label=ground;}
border c04(t=-0.2,0.5){x=10.2;y=t;label=exit;}
border c05(t=0.5,3){x=10.2;y=t;label=imp;}
border c06(t=10.2,8){x=t;y=3;label=sky;}
border c07(t=8,2){x=t;y=3;label=sky;}
border c08(t=2,-0.2){x=t;y=3;label=sky;}
border c09(t=3,2.5){x=-0.2;y=t;label=inlet;}
border c10(t=2.5,-0.2){x=-0.2;y=t;label=imp;}
border c11(t=-0.2,3){x=2;y=t;label=inter;}
border c12(t=-0.2,3){x=8;y=t;label=inter;}
// Plastic cover
border p01(t=3,4.5){x=10.2;y=t;label=sky;}
border p02(t=10.2,-0.2){x=t;y=4.5;label=sky;}
border p03(t=4.5,3){x=-0.2;y=t;label=sky;}

int n=10;

mesh th1 = buildmesh(s01(15*n)+s02(5*n)+s02b(4*n)+s03(3*n)+s06(4*n)+s07(10*n)+
s08(4*n)+s10(3*n)+s11(4*n) +s12(5*n)+s13(3*n)+s14(3*n));
mesh th2 = buildmesh(c01(4*n)+c02(4*n)+c02b(6*n)+c03(4*n)+c04(3)+c05(4*n)+
c06(4*n)+c07(7*n)+c08(4*n) +c09(3)+c10(4*n)+c11(4*n)+c12(4*n));
mesh TH=th1+th2;
plot(TH, wait=true);

//*****
//-----description of the cinetic constans-----
//*****

//maximum rate of microbial growth (day-1);Ks(kg COD/m3);Kd(day-1)
real Numax1=6.9,Ks1=0.5,Kd1=0.9; //for sugars
real Numax2=3.9,Ks2=0.8,Kd2=1; //for triglycerides
real Numax3=6.9,Ks3=3,Kd3=1; //for amino acid
real Numax4=0.49 , Ks4=1.145,Kd4=0.04; //for propionic acid
real Numax5=0.67,Ks5=0.176,Kd5=0.03; //for butiric acid
real Numax6=6.1,Ks6=0.8,Kd6=0.25; //for LCA
real Numax7=1.1,Ks7=0.5,Kd7=0.04; //for valeric acid
real Numax8=7.5,Ks8=0.93,Kd8=0.037; //for acetic acid

real Xlent=0.15,Slent=28,XIcont,SIcont,Hcont=1e-7; //inpuy data for microor-
ganism concentration
//g/0.0929-0.05=kg/m3(Mendienta estudio)

real Df=8.64e-3; //diffusion rate m2/d

```

```

real Q=0.5; //flow 3 m3/d
int conteo=0, cpu=clock();

//---timeframe---
real T=30,dt=1.5e-2; // T (d), dt(d)

//*****
//-----Description of the fespaces-----
//*****
//-- --
fespace Vhg(th1,P2);
Vhg uh,vh,uhold=24.7+273.15,B,error;
fespace PHg(th1,P0);
PHg REG=region;
fespace PH(th2,P0);
PH reg=region;
fespace Vh(th2,P2);
Vh Uh=0,Bh,Uhold=24.7+273.15,b;
fespace Nh(th2,[P2,P2,P1]);
Nh [u1,u2 ,pp1],[v1,v2,pp2];

Vh si,xi,yi,qi,TNH3,TCO2;
Vh[int] Nu(mpisize),Ks(mpisize),siold(mpisize),xiold(mpisize),SiPac(mpisize),
SiPac2(mpisize), SiPp(mpisize),SiPb(mpisize),SiPva(mpisize),SiPcl(mpisize),CO2(mpisize),
NH3(mpisize), sifont(mpisize),sifontb(mpisize),siV(mpisize),siB(mpisize),CC1(mpisize),
tco21(mpisize), tnh31(mpisize),CC2(mpisize),tco22(mpisize),tnh32(mpisize);

real[int] Kd(mpisize),Alpha(mpisize),XiaciZ(mpisize),SiaciZ(mpisize),XiaceZ(mpisize),
SiaceZ(mpisize), XimethZ(mpisize),SimethZ(mpisize); // source coefficient
// each one of this variables is included in one microprocessor

//---Variables---
Vh NuT,NuT1,NuT2,NuT3,TSiPac,TSiPb,TSiPva,TSiPp,IpH=1,INH3,KINH3=7.5;

//-----Temperature-----
real alfa=0.3,G=292.68;// G=Irradiance, alfa = absorption coefficient(
//considering terrestrial albedo=0.3.ver ITE))
real sigma=5.67e-8,emisivityl=0.813;// epsilon=emisity
real vviento=5.3;// (m/seg) DOC-DB-HE-O CLIMAS DE REFERENCIA
real he=5.7+3.8*vviento;// Convection
real uext=12.9+273.15;//external temperature (ambient)
real umed=17.3+273.15;// ambiente average tenoeratyre — underground temper-
ature
real ur=-1.53+273.15;//sky temperature
real k1=2.3,k2=3,k3=0.02,k4=0.7,k5=0.75;//ground rate 1,2,3, for isulation sys-
tems,slurry, biogas

```

```
real tmax1=45.8,tmin1=11,topt1=39.3,tmax2=47.3,tmin2=5.6,topt2=40.3,tmax3=46.3,
    tmin3=11.1,topt3=34.1;
```

```
//—domains definitions—
```

```
int terr1=REG(5,-2.4); //
int terr2=REG(-1,1); //
int terr3=REG(11,1); //
int wet1= reg(1,1);
int wet2= reg(5,1);
int wet3= reg(9,1);
```

```
func ft=0;
```

```
PHg COEF1=0.5+0.5*(region==terr1)-0.5*(region==terr2)-0.5*(region==terr3);
PHg COEF2=0.5-0.5*(region==terr1)+0.5*(region==terr2)-0.5*(region==terr3);
PHg COEF3=0.5-0.5*(region==terr1)-0.5*(region==terr2)+0.5*(region==terr3);
PHg COEF4=0.5-0.5*(region==terr1)-0.5*(region==terr2)-0.5*(region==terr3);
PH COEF5=0.5+0.5*(region==wet1)-0.5*(region==wet2)-0.5*(region==wet3);
PH COEF6=0.5-0.5*(region==wet1)+0.5*(region==wet2)-0.5*(region==wet3);
PH COEF7=0.5-0.5*(region==wet1)-0.5*(region==wet2)+0.5*(region==wet3);
```

```
PHg k=k1*(region==terr1)+k2*(region==terr2)+k2*(region==terr3);
```

```
//*****
//—————CALCULATION—————
//*****
```

```
//—Macros—
```

```
macro Grad(u) [dx(u),dy(u)]//
macro div(u1,u2) (dx(u1)+dy(u2)) //EOM
macro grad(si) (dx(si)+dy(si))//
macro cosc(Kaac)(Kaac/(Kaac+Hcat))//
macro scan()
{ for (int i=0;i<Vh.ndof;i+=1)
{if(xi[i]<=0.1e-9){xi[i]=0;}
if(si[i]< 0){si[i]=0;}
if(si[i]>=500){si[i]=500;}
if (TNH3[i]<0){TNH3[i]=0;};}
} //
macro NuTemp(tmax1,tmin1,topt1) ((Uh[i]-tmax1)*(Uh[i]-tmin1)^2/((topt1-
tmin1)*
```

```
((topt1-tmin1)*(Uh[i]-topt1)-(topt1-tmax1)*(topt1+tmin1-2*Uh[i]))); //
```

```
//---Calculus of the temperature---
```

```
G=G*1e-4;sigma=sigma*1e-4; he=he*1e-4;
```

```
int i=0;
```

```
problem heatg(uh,vh,init=i,solver=GMRES,tgv=1e5) = // problem definition
```

```
int2d(th1)(k*(Grad(uh)*Grad(vh))) // bilinear form
```

```
-int1d(th1,sky)(alfa*G*vh) //BC Neumann ; Radiación absorbed
```

```
+int1d(th1,sky)(sigma*emisivityl*B*uh*vh) //BC Radiative
```

```
-int1d(th1,sky)(sigma*emisivityl*B*ur*vh) //BC Radiative
```

```
+int1d(th1,sky)(he*uh*vh) //BC Convective
```

```
-int1d(th1,sky)(he*uext*vh) //BC Convective
```

```
+on (ug2,uh=Uh)+on(ug,uh=umed); //BC Dirichlet
```

```
problem heatw(Uh,Bh,init=i,solver=Cholesky)= int2d(th2)(1/dt*(Uh*Bh))
```

```
+int2d(th2)(k4*(Grad(Uh)*Grad(Bh))) // bilinear form
```

```
+int2d(th2)(-1/dt*convect([u1,u2],-dt,Uhold)*Bh)
```

```
-int1d(th2,sky)(alfa*G*Bh) //BC Neumann ; Radiación absorbed
```

```
+int1d(th2,sky)(sigma*emisivityl*b*Uh*Bh) //BC Radiative
```

```
-int1d(th2,sky)(sigma*emisivityl*b*ur*Bh) //BC Radiative
```

```
+int1d(th2,sky)(he*Uh*Bh) //BC Convective
```

```
-int1d(th2,sky)(he*uext*Bh) //BC Convective
```

```
+on(imp,exit,inlet,ground, Uh=uh)+on(heat,Uh=35); //BC Dirichlet
```

```
func vel=Q/0.25; // velocity function (Q/m2)[m/dia]
```

```
solve stokes([u1,u2,pp1],[v1,v2,pp2]) =
```

```
+int2d(th2)((Grad(u1)*Grad(v1) + Grad(u2)*Grad(v2)
```

```
+0.000000001*pp1*pp2
```

```
-pp1*div(v1,v2) + pp2*div(u1,u2)))
```

```
+on(imp,sky,u1=0,u2=0) + on(inlet,exit,u1=vel,u2=0);
```

```
real ErrorL2 = 1.;
```

```
real ErrorH1 = 1.;
```

```
while(sqrt(ErrorL2+ErrorH1) > 1.e-1){
```

```
B=(uhold^2 + ur^2)*(uhold+ur);
```

```
b=(Uhold^2 + ur^2)*(Uhold+ur);
```

```
heatg;
```

```
heatw;
```

```
error=uh-uhold;
```

```
ErrorH1 = int2d(th1)(dx(error)^2+dy(error)^2);
```

```
ErrorL2 = int2d(th1)(error^2);
```

```
cout << " Error seminorma H1 = " << sqrt( ErrorH1) << endl;
```

```
cout << " Error L2 = " << sqrt(ErrorL2) << endl;
```

```

cout << " Error norma H1 = " << sqrt(ErrorL2+ErrorH1) << endl;
uhold=uh;
Uhold=Uh;
} // end while

Uh=Uh-273.15;uh=uh-273.15;
savevtk( "tempcw.vtk",th2,Uh, order=ffordert, dataname="temp");
savevtk( "tempgr.vtk",th1,uh, order=ffordert, dataname="temp");

//—Calculus NuT (function of the temperature)—

for (int i=0;i<Vh.ndof;i+=1){NuT1[i]=NuTemp(tmax1,tmin1,topt1);
NuT2[i]=NuTemp(tmax2,tmin2,topt2);
NuT3[i]=NuTemp(tmax3,tmin3,topt3);
};// end for

//*****Acidogenesis - PHASE 1*****
//-----

XIcont=XIent;SIcont=SIent; //boundary value

XiaciZ[0]=0;XiaciZ[1]=0;XiaciZ[2]=0;SiaciZ[0]=0;SiaciZ[1]=0;SiaciZ[2]=0;XiaceZ[0]=0;
XiaceZ[1]=0;XiaceZ[2]=0;XiaceZ[3]=0;SiaceZ[0]=0;SiaceZ[1]=0;SiaceZ[2]=0;SiaceZ[3]=0;
XimethZ[4]=0;SimethZ[4]=0;

while (1){
int of=0;
TNH3=0.1; // initial value

//2) generic
problem bich1(xi,yi,init=i,solver=Cholesky,tolpivot=1e-1)=int2d(th2)(1/dt*(xi*yi))
+int2d(th2)(Df*(grad(xi)*grad(yi)))/bilineal part
+int2d(th2)(-1/dt*convect([u1,u2],-dt,xiold[mpirank])*yi)
-int2d(th2)(COEF6*(Nu[mpirank]*siold[mpirank]/(Ks[mpirank]+siold[mpirank]))*
IpH*NuT-Kd[mpirank])*xi*yi)
+on(inlet,xi=XIcont)+on(sky,imp,ground,heat,xi=0)+on(exit,xi=xiold[mpirank]);

problem sust1(si,qi,init=i,solver=Cholesky,tolpivot=1e-1)= int2d(th2)(1/dt*(si*qi))
+int2d(th2)(Df*(grad(si)*grad(qi)))/bilineal part
+int2d(th2)(-1/dt*convect([u1,u2],-dt,siold[mpirank])*qi)
+int2d(th2)(COEF6*Nu[mpirank]*siold[mpirank]/(Ks[mpirank]+siold[mpirank]))*
Alpha[mpirank]*xiold[mpirank]*qi) //
-int2d(th2)(COEF6*of*sifont[mpirank]*qi)
+on(inlet,si=SIcont)+on(sky,imp,ground,heat,si=0)+on(exit,si=siold[mpirank]);

```

//2) for the valeric acid

```
problem bich2(xi,yi,init=i,solver=Cholesky,tolpivot=1e-1)=int2d(th2)(1/dt*(xi*yi))
+int2d(th2)(Df*(grad(xi)*grad(yi)))/parte bilineal
+int2d(th2)(-1/dt*convect([u1,u2],-dt,xiold[mpirank])*yi)
-int2d(th2)(COEF6*(Nu[mpirank]*siold[mpirank]/(Ks[mpirank]+siold[mpirank])*
siV[mpirank]/(siV[mpirank]+siB[mpirank+1]+1e-9)*IpH*NuT-Kd[mpirank])*xi*yi)
+on(inlet,xi=XIcont)+on(sky,imp,ground,heat,xi=0)+on(exit,xi=xiold[mpirank]);
```

```
problem sust2(si,qi,init=i,solver=Cholesky,tolpivot=1e-1)=int2d(th2)(1/dt*(si*qi))
+int2d(th2)(Df*(grad(si)*grad(qi)))/bilineal part
+int2d(th2)(-1/dt*convect([u1,u2],-dt,siold[mpirank])*qi)
+int2d(th2)(COEF6*Nu[mpirank]*siold[mpirank]/(Ks[mpirank]+siold[mpirank])*
siV[mpirank]/(siV[mpirank]+siB[mpirank+1]+1e-9)*IpH*NuT*
Alpha[mpirank]*xiold[mpirank]*qi) //
-int2d(th2)(COEF6*of*sifont[mpirank]*qi)
+on(inlet,si=SIcont)+on(sky,imp,ground,heat,si=0)+on(exit,si=siold[mpirank]);
```

//3) for the butiric acid

```
problem bich3(xi,yi,init=i,solver=Cholesky,tolpivot=1e-1)=int2d(th2)(1/dt*(xi*yi))
+int2d(th2)(Df*(grad(xi)*grad(yi)))/bilineal part
+int2d(th2)(-1/dt*convect([u1,u2],-dt,xiold[mpirank])*yi)
-int2d(th2)(COEF6*(Nu[mpirank]*siold[mpirank]/(Ks[mpirank]+siold[mpirank])*
siB[mpirank]/(siV[mpirank-1]+siB[mpirank]+1e-9)*IpH*NuT-Kd[mpirank])*
xi*yi)
+on(inlet,xi=XIcont)+on(sky,imp,ground,heat,xi=0)+on(exit,xi=xiold[mpirank]);
```

```
problem sust3(si,qi,init=i,solver=Cholesky,tolpivot=1e-1)=int2d(th2)(1/dt*(si*qi))
+int2d(th2)(Df*(grad(si)*grad(qi)))/bilineal part
+int2d(th2)(-1/dt*convect([u1,u2],-dt,siold[mpirank])*qi)
+int2d(th2)(COEF6*Nu[mpirank]*siold[mpirank]/(Ks[mpirank]+siold[mpirank])*
siB[mpirank]/(siV[mpirank-1]+siB[mpirank]+1e-9)*IpH*NuT*
Alpha[mpirank]*xiold[mpirank]*qi) //
-int2d(th2)(COEF6*of*sifont[mpirank]*qi)
+on(inlet,si=SIcont)+on(sky,imp,ground,heat,si=0)+on(exit,si=siold[mpirank]);
```

//4) for the acetic acid

```
problem bich4(xi,yi,init=i,solver=Cholesky,tolpivot=1e-1)=int2d(th2)(1/dt*(xi*yi))
+int2d(th2)(Df*(grad(xi)*grad(yi)))/parte bilineal
+int2d(th2)(-1/dt*convect([u1,u2],-dt,xiold[mpirank])*yi)
-int2d(th2)(COEF6*(Nu[mpirank]*siold[mpirank]/(Ks[mpirank]+siold[mpirank])*
KINH3/(KINH3+TNH3)*IpH*NuT-Kd[mpirank])*xi*yi)
+on(inlet,xi=XIcont)+on(sky,imp,ground,heat,xi=0)+on(exit,xi=xiold[mpirank]);
```

```
problem sust4(si,qi,init=i,solver=Cholesky,tolpivot=1e-1)=int2d(th2)(1/dt*(si*qi))
+int2d(th2)(Df*(grad(si)*grad(qi)))/parte bilineal
+int2d(th2)(-1/dt*convect([u1,u2],-dt,siold[mpirank])*qi)
+int2d(th2)(COEF6*(Nu[mpirank]*siold[mpirank]/(Ks[mpirank]+siold[mpirank])*
KINH3/(KINH3+TNH3)*IpH*NuT)*Alpha[mpirank]*xiold[mpirank]*qi) //
```

```

-int2d(th2)(COEF6*of*sifont[mpirank]*qi)
+on(inlet,si=SIcont)+on(sky,imp,ground,heat,si=0)+on(exit,si=siold[mpirank]);

int nn=T/dt+2,ii;    // loop

//assignment coefficient and variables
if (mpirank==0){
Kd[0]=Kd1;Alpha[0]=10.76;xiold[mpirank]=XiaciZ[mpirank];
siold[mpirank]=SiaciZ[mpirank]; Nu[0];SiPac[0];SiPp[0];SiPb[0];CO2[0];NH3[0];
Nu[mpirank]=Numax1;Ks[mpirank]=Ks1;
};// end if -sugar
if (mpirank==1){
Kd[1]=Kd2;Alpha[1]=393.0478;xiold[mpirank]=XiaciZ[mpirank];
siold[mpirank]=SiaciZ[mpirank]; Nu[1];SiPp[1];SiPel[1];CO2[1];NH3[1];
Nu[mpirank]=Numax2;Ks[mpirank]=Ks2;
};// end if -triglycerides
if (mpirank==2){
Kd[2]=Kd3;Alpha[2]=11.54734411;xiold[mpirank]=XiaciZ[mpirank];
siold[mpirank]=SiaciZ[mpirank]; Nu[2];SiPac[2];SiPp[2];SiPb[2];SiPva[2];CO2[2];NH3[2];
Nu[mpirank]=Numax3;Ks[mpirank]=Ks3;
};// end if -proteins

i=0;    // below nomenclature, bich=microorganism, sust= sustrate

NuT=NuT1;
for(real tt=0; tt<=T;tt+=dt)
{ii=(tt+dt)/dt;

if (mpirank==0){                                //SUGAR
bich1;sust1;
scan
siold[mpirank]=si;xiold[mpirank]=xi;
}
if (mpirank==1){                                //TRIGLICERIDES
bich1;sust1;
scan
siold[mpirank]=si;xiold[mpirank]=xi;
}
if (mpirank==2){                                //PROTEINS
bich1;sust1;
scan
siold[mpirank]=si;xiold[mpirank]=xi;
};
};// end for

```

```

// PRODUCTS OF THE REACTIONS (aplication of the reactions ratios)
if (mpirank==0)//sugar
{SiPac[mpirank]=siold[mpirank]*2.669537137/10.76426265;
SiPp[mpirank]=siold[mpirank]*3.139935414/10.76426265;
SiPb[mpirank]=siold[mpirank]*3.954790097/10.76426265;
CO2[mpirank]=siold[mpirank]*0.038707212/10.76426265;
XiaciZ[mpirank]=xiold[mpirank];SiaciZ[mpirank]=siold[mpirank];//it is set equal to Siprod
NH3[mpirank]=siold[mpirank]*0.006251884/10.76426265;

for (int i=0;i<Vh.ndof;i+=1){
if(siold[mpirank][i]/10.76426265>=xiold[mpirank][i]){
SiPac[mpirank][i]=2.669537137*xiold[mpirank][i];
SiPp[mpirank][i]=3.139935414*xiold[mpirank][i];
SiPb[mpirank][i]=3.954790097*xiold[mpirank][i];
CO2[mpirank][i]=0.038707212*xiold[mpirank][i];
NH3[mpirank][i]=0.006251884*xiold[mpirank][i];} // end if

processor(3) << SiPb[mpirank][i] ;processor(4) << SiPac[mpirank][i]<< //ex-
change of information
CO2[mpirank][i]<<NH3[mpirank][i];
} //end for
savevtk("Acidsugar.vtk",th2,siold[mpirank],xiold[mpirank],order=ffordert,
dataname="Si_hidrol Xi_hidrol");

if (mpirank==1)//triglycerides
{SiPp[mpirank]=siold[mpirank]*16.1957/393.0478;
SiPcl[mpirank]=siold[mpirank]*375.853/393.0478;
CO2[mpirank]=siold[mpirank]*4.4678e-3/393.0478;
NH3[mpirank]=siold[mpirank]*6.25e-3/393.0478;
XiaciZ[mpirank]=xiold[mpirank];SiaciZ[mpirank]=siold[mpirank];

for (int i=0;i<Vh.ndof;i+=1){
if(siold[mpirank][i]/393.0478>=xiold[mpirank][i]){
SiPp[mpirank][i]=16.1957*xiold[mpirank][i];
SiPcl[mpirank][i]=375.853*xiold[mpirank][i];
CO2[mpirank][i]=4.4678e-3*xiold[mpirank][i];
NH3[mpirank][i]=6.25e-3*xiold[mpirank][i];} //end if
//exchange of information
processor(0) << SiPp[mpirank][i] ;processor(4) << CO2[mpirank][i]<<NH3[mpirank][i];
} //end for / savevtk("Acidtrigli.vtk",th2,siold[mpirank],xiold[mpirank],order=ffordert,
dataname="Si_trigli Xi_trigli");

if (mpirank==2)// proteins
{SiPac[mpirank]=siold[mpirank]*6.994226328/11.54734411;
SiPp[mpirank]=siold[mpirank]*1.195034642/11.54734411;
SiPb[mpirank]=siold[mpirank]*1.342263279/11.54734411;
CO2[mpirank]=siold[mpirank]*0.027667436/11.54734411;

```

```

NH3[mpirank]=siold[mpirank]*0.103926097/11.54734411;
SiPva[mpirank]=siold[mpirank]*1.009237875/11.54734411;
XiaciZ[mpirank]=xiold[mpirank];XiaciZ[mpirank]=siold[mpirank];

for (int i=0;i<Vh.ndof;i+=1){
if(siold[mpirank][i]/11.54734411>=xiold[mpirank][i]){
SiPac[mpirank][i]=6.994226328*xiold[mpirank][i];
SiPp[mpirank][i]=1.195034642*xiold[mpirank][i];
SiPb[mpirank][i]=1.342263279*xiold[mpirank][i];
CO2[mpirank][i]=0.027667436*xiold[mpirank][i];
NH3[mpirank][i]=0.006251884*xiold[mpirank][i];
SiPva[mpirank][i]=1.009237875*xiold[mpirank][i];} // end if
//exchange of information
processor(3) << SiPb[mpirank][i];processor(0) << SiPp[mpirank][i];
processor(4) << SiPac[mpirank][i]<<CO2[mpirank][i]<<NH3[mpirank][i];
} //end for
savevtk("Acidprotein.vtk",th2,siold[mpirank],xiold[mpirank], order=ffordert,
        dataname="Si_protein Xi_protein");

} // end mpirank

//*****Acetogenesis and Methanogenesis PHASE 2*****
//-----}

SIcont=0;of=1; //of= source term = 1 (on)
NuT=NuT2;
//assignment coeficient and variables
if (mpirank==0){ // PROPIONIC
processor(1) >> SiPp[1][i];processor(2) >> SiPp[2][i]; //exchange of information
Kd[mpirank]=Kd4;Alpha[mpirank]=11.29943503;xiold[mpirank]=XiaceZ[mpirank];
siold[mpirank]=SiaceZ[mpirank];Nu[mpirank];SiPac[mpirank];
sifontb[mpirank]=SiPp[mpirank]+SiPp[1]+SiPp[2];Nu[mpirank]=Numax4;Ks[mpirank]=Ks4;
} // end mpirank

if (mpirank==1){ // LCFA
Kd[mpirank]=Kd6;Alpha[mpirank]=0.19082495;xiold[mpirank]=XiaceZ[mpirank];
siold[mpirank]=SiaceZ[mpirank];Nu[mpirank];SiPac[mpirank];
sifont[mpirank]=SiPcl[mpirank];Nu[mpirank]=Numax6;Ks[mpirank]=Ks6;
} // end mpirank

if (mpirank==2){ // VALERIC ACID
Kd[mpirank]=Kd7;Alpha[mpirank]=14.7928994;xiold[mpirank]=XiaceZ[mpirank];
siold[mpirank]=SiaceZ[mpirank];Nu[mpirank];SiPac[mpirank];
sifont[mpirank]=SiPva[mpirank];Nu[mpirank]=Numax7;Ks[mpirank]=Ks7;
siV[mpirank];
} // end mpirank

```

```

if (mpirank==3){ //BUTIRIC ACID
processor(0) >> SiPb[0]; processor(2) >> SiPb[2]; //exchange of informa-
tion
Kd[mpirank]=Kd5; Alpha[mpirank]=10; xiold[mpirank]=XiaceZ[mpirank];
siold[mpirank]=SiaceZ[mpirank]; Nu[mpirank]; SiPac[mpirank];
sifont[mpirank]=SiPb[0]+SiPb[2]; Nu[mpirank]=Numax5; Ks[mpirank]=Ks5;
siB[mpirank];
} // end mpirank

if (mpirank==4){ // ACETIC ACID
processor(0) >> SiPac[0]; >> CO2[0]; >> NH3[0]; //exchange of information
processor(1) >> CO2[1]; >> NH3[1];
processor(2) >> SiPac[2]; >> CO2[2]; >> NH3[2];
CC1[mpirank]=SiPac[0]+SiPac[2]; TCO2= CO2[0]-CO2[1]+CO2[2]; //summative
TNH3=TNH3-NH3[0]-NH3[1]+NH3[2];
} // end mpirank

//—Calculus—
for(real tt=0; tt<=T; tt+=dt)
{ii=(tt+dt)/dt;
if (mpirank==0){ //PROPIONIC ACID
processor(2) >> SiPp[2];
sifont[mpirank]=sifontb[mpirank]+SiPp[2];
bich1;sust1;
scan
siold[mpirank]=si; xiold[mpirank]=xi;
savevtk("Acetoprop"+ii+".vtk",th2,siold[mpirank],xiold[mpirank],order=ffordert,
dataname="Si_pro Xi_pro");
}; // end if

if (mpirank==1){ //LCFA
bich1;sust1;
scan
siold[mpirank]=si; xiold[mpirank]=xi;
}; // end if

if (mpirank==2){ //VALERIC ACID
bich2;sust2;
scan
siold[mpirank]=si; xiold[mpirank]=xi; siV[mpirank]=si;
processor(3) << siV[mpirank]; //exchange of information
processor(3) >> siB[3]; //exchange of information
SiPp[mpirank]=siold[mpirank]*0.31129/14.776;
for (int i=0; i<Vh.ndof; i+=1){
if(siold[mpirank][i]/14.776>=xiold[mpirank][i]){SiPp[mpirank][i]=
0.31129*xiold[mpirank][i];} // end if
} // end for
processor(0) << SiPp[mpirank];

```

```

} // end if mpirank

if (mpirank==3){ //BUTIRIC ACID
  bich3;sust3;
  scan
  siold[mpirank]=si;xiold[mpirank]=xi;siB[mpirank]=si;
  savevtk("Acetobut"+ii+".vtk",th2,siold[mpirank],xiold[mpirank],
  order=ffordert, dataname="Si_but Xi_but");
  processor(2) >> siV[2]; //exchange of information
  processor(2) << siB[mpirank]; //exchange of information
}; // end if

}; // end for

// PRODUCTS OF THE REACTIONS (aplication of the reactions ratios)
if (mpirank==0)
{SiPac2[mpirank]=siold[mpirank]*6.0307/11.294;CO2[mpirank]=siold[mpirank]*...
0.0162/11.294; NH3[mpirank]=siold[mpirank]*6.2501e-3/11.294;TSiPp=siold[mpirank];
XiaceZ[mpirank]=xiold[mpirank]; SiaceZ[mpirank]=siold[mpirank];

if(siold[mpirank][i]/11.294>=xiold[mpirank][i]){SiPac2[mpirank][i]=6.0307*...
xiold[mpirank][i]; CO2[mpirank][i]=0.0162*xiold[mpirank][i];
NH3[mpirank][i]=6.2501e-3*xiold[mpirank][i];}; for (int i=0;i<Vh.ndof;i+=1){
if(siold[mpirank][i]*6.2501e-3/11.294>=TNH3/4){SiPac2[mpirank][i]=6.0307/6.25e-
3*
NH3/4;CO2[mpirank][i]=0.0162/6.25e-3*TNH3/4;NH3[mpirank][i]=6.2501e-
3/6.25e-3*
TNH3/4;}} // end if
}; //end for
processor(4) << SiPac2[mpirank]<< CO2[mpirank]<< NH3[mpirank]; //ex-
change of information
ofstream KK3("SiPac2a.txt"); KK3<< SiPac2[mpirank]; // save .txt
savevtk("AcetoProp.vtk",th2,siold[mpirank],xiold[mpirank],order=ffordert,
dataname="Si_prop Xi_prop");
} // end mpirank

if (mpirank==1)
{SiPac2[mpirank]=siold[mpirank]*13.716/20.105;CO2[mpirank]=siold[mpirank]*...
0.1006/20.105; NH3[mpirank]=siold[mpirank]*6.2504e-3/20.105;
XiaceZ[mpirank]=xiold[mpirank]; SiaceZ[mpirank]=siold[mpirank];
for (int i=0;i<Vh.ndof;i+=1){
if(siold[mpirank][i]/20.105>=xiold[mpirank][i]){SiPac2[mpirank][i]=13.716*
xiold[mpirank][i];CO2[mpirank][i]=0.1006*xiold[mpirank][i];NH3[mpirank][i]=6.2504e-
3*
xiold[mpirank][i];};
} //end for
processor(4) << SiPac2[mpirank]<< CO2[mpirank]<< NH3[mpirank]; //ex-
change of information

```

```

savevtk("LCFA.vtk",th2,siold[mpirank],xiold[mpirank],order=ffordert, // print par-
view
dataname="Si_LCFA_Xi_LCFA");
ofstream KK3("SiPac2b.txt"); KK3<< SiPac2[mpirank][]; // save .txt

} // end mpirank

if (mpirank==2)
{SiPac2[mpirank]=siold[mpirank]*5.4588/14.776;CO2[mpirank]=siold[mpirank]*...
0.053/14.776; NH3[mpirank]=siold[mpirank]*6.2504e-3/14.776;TSiPva=siold[mpirank];
XiaceZ[mpirank]=xiold[mpirank]; SiaceZ[mpirank]=siold[mpirank];
for (int i=0;i<Vh.ndof;i+=1){
if(siold[mpirank][](i)/14.776>=xiold[mpirank][](i)){SiPac2[mpirank][](i)=5.4588*
xiold[mpirank][](i);CO2[mpirank][](i)=0.053*xiold[mpirank][](i);NH3[mpirank][](i)=6.2504e-
3*
xiold[mpirank][](i);}
} // end for
processor(4) << SiPac2[mpirank][] << CO2[mpirank][] << NH3[mpirank][]; //ex-
change of information
savevtk("Valeri_acid.vtk",th2,siold[mpirank],xiold[mpirank],order=ffordert, // print par-
view
dataname="Si_va_Xi_va");
ofstream KK3("SiPac2c.txt"); KK3<< SiPac2[mpirank][]; // save .txt
} // end mpirank

if (mpirank==3)
{SiPac2[mpirank]=siold[mpirank]*11.5824/9.9811;CO2[mpirank]=siold[mpirank]*...
0.053/9.9811; NH3[mpirank]=siold[mpirank]*6.2504e-3/9.9811;TSiPb=siold[mpirank];
XiaceZ[mpirank]=xiold[mpirank]; SiaceZ[mpirank]=siold[mpirank];
for (int i=0;i<Vh.ndof;i+=1){
if(siold[mpirank][](i)/9.9811>=xiold[mpirank][](i)){SiPac2[mpirank][](i)=11.5824*
xiold[mpirank][](i);CO2[mpirank][](i)=0.053*xiold[mpirank][](i);}
} // end for
processor(4) << SiPac2[mpirank][] << CO2[mpirank][] << NH3[mpirank][];
savevtk("AcetoBut.vtk",th2,siold[mpirank],xiold[mpirank],order=ffordert, // print par-
view
dataname="Si_but_Xi_but");
ofstream KK3("SiPac2d.txt"); KK3<< SiPac2[mpirank][]; // save .txt
} // end mpirank

if (mpirank==4){ //ofstream KK6("TSiPp.txt"); KK6<<TSiPp[0][];

processor(0) >> SiPac2[0][] >> CO2[0][] >> NH3[0][];
processor(1) >> SiPac2[1][] >> CO2[1][] >> NH3[1][];
processor(2) >> SiPac2[2][] >> CO2[2][] >> NH3[2][];
processor(3) >> SiPac2[3][] >> CO2[3][] >> NH3[3][];

```

```

// ACETIC ACID
CC2[4]=SiPac2[0]+SiPac2[1]+SiPac2[2]+SiPac2[3];
TCO2=TCO2+CO2[0]-CO2[1]-CO2[2]-CO2[3];
TNH3=TNH3-NH3[0]-NH3[1]-NH3[2]-NH3[3];

Kd[mpirank]=Kd8;Alpha[mpirank]=18.1812;xiold[mpirank]=XimethZ[mpirank];...;
siold[mpirank]=SimethZ[mpirank]CO2[mpirank];NH3[mpirank];...;
sifont[mpirank]=CC1[mpirank]+CC2[mpirank];Nu[mpirank]=Numax8;Ks[mpirank]=Ks8;

for(real tt=0; tt<=T;tt+=dt)
{ii=(tt+dt)/dt;
bich4;sust4;
scan
siold[mpirank]=si;xiold[mpirank]=xi;siB[mpirank]=si;
};// end for
savevtk("Methanog.vtk",th2,si,xi,order=ffordert, dataname="Si_acet Xi_acet");

} // end if (mpirank==4)

//*****
//-----PHYSICAL-CHEMICAL PROCESSES-----
//*****
//ctes pKa ( log(ki)) 4.1 IWA (kg/m3)
real Kap=4.88,Kabut=4.82,Kaval=4.86,Kaac=4.76,Kaco2=6.35,KaNH3=9.25,Kw=14;

Vh dU,VH,U;
Vh EpH1,EpH2,EpH3,IpHant=0,pHll=6,pHul=8.5,pHcat,IpHcal;

U=7;

macro scan2(TSiPac)
{ for (int i=0;i<Vh.ndof;i+=1)
{if(TSiPac[i]<=1e-14)TSiPac[i]=1;
if (TSiPac[i]>=500)TSiPac[i]=500
};
} //
scan2(TSiPac);scan2(TSiPb);scan2(TSiPva);scan2(TSiPp);scan2(TNH3);scan2(TCO2)

TSiPac=-log10(TSiPac/64);
TSiPp=-log10(TSiPp/112);
TSiPb=-log10(TSiPb/160);
TSiPva=-log10(TSiPva/208);
TNH3=-log10(TNH3);
TCO2=-log10(TCO2);

macro Hn(TSiPac,Kaac,U)(TSiPac*Kaac/(Kaac+U))//
macro UgradV(U,V)(U'*grad(V))//
macro f(dU) (Hn(TSiPac,Kaac,U)-Hn(TSiPp,Kap,U)-Hn(TSiPb,Kabut,U)-

```

```

Hn(TSiPva,Kaval,U)+
TNH3/(KaNH3+U)-Kw/(U+1e-7)- Hn(TCO2,Kaco2,U))//

real err=0;
for (n=0;n<15;n++){//Newton llop
solve vhj(dU,VH)=int2d(th2)(Df*(grad(dU) '*grad(VH)))/parte bilineal
-int2d(th2)(f(dU)*VH)
+int2d(th2)(UgradV(dU,U) '*VH+UgradV(U,dU) '*VH)
-int2d(th2)(Df*(grad(U) '*grad(VH))+UgradV(U,U) '*VH)
+on(inlet,dU=0)+on(sky,imp,ground,heat,dU=0)+on(exit,dU=0);

U[]-=dU[];
real LU=U[].linfty;
err=dU[].linfty/LU;

} // end for

EpH1=pow(10,0.5*(pHll-pHul));
EpH2=pow(10,U-pHul);
EpH3=pow(10,pHll-U);
IpHcal=(1+2*EpH1)/(1+EpH2+EpH3);

real error=0;
error=square((IpHcal[].linfty-IpH[].linfty)^2);
if (error<0.001){
cout<<"conteo="<<conteo<<"\n";
cout << " - CPU time schwarz-gc:" << (clock()-cpu)/60 << endl;

savevtk("pH.vtk",th2,U,IpH, order=ffordert, dataname="Hcat IpH");
break;
} // en if
}; //end if (mpirank==5)
IpH=IpHcal; T=5; // the timeframe valued is modified
} // end while (251)

```