

Modelación matemática del tratamiento del efluente de un Biorreactor Anaerobio de Membranas (AnMBR)

Yeste, P.^{a1} y Barat, R.^{a2}

^{a1}Instituto de Ingeniería del Agua y Medio Ambiente (IIAMA). Universidad Politécnica de Valencia. Camino de Vera s/n. 46022 Valencia, España. E-mail: ^{a1}patyesdo@posgrado.upv.es, ^{a2}rababa@dihma.upv.es

Línea temática C | Agua y ciudad

RESUMEN

En este trabajo se ha desarrollado un modelo matemático que ha tenido en cuenta las características físico-químicas propias del efluente de un reactor AnMBR con objeto de ser aplicado en el diseño de un tratamiento posterior mediante un sistema de fangos activados. Se han definido la estequiometría y las expresiones cinéticas de los procesos físico, químicos y biológicos que permiten eliminar los contaminantes presentes en este tipo de efluentes. Los procesos de eliminación de materia orgánica y nutrientes han sido implementados en el software MatLab, y los cálculos se han comparado con los del software DESASS, obteniendo resultados prácticamente idénticos. Por su parte, los procesos de oxidación biológica del sulfuro han sido calibrados con datos experimentales, siendo el ajuste satisfactorio. Sobre estos últimos procesos también se ha aplicado un análisis de sensibilidad. La buena capacidad predictiva del modelo valida la posibilidad de ser empleado en tareas de diseño.

Palabras clave | AnMBR; Modelación matemática; Sulfuro; Análisis de sensibilidad

INTRODUCCIÓN

Las aguas residuales, que tradicionalmente han sido concebidas como un residuo con un elevado impacto sobre la salud pública y el medio ambiente, han comenzado a ser consideradas en gran parte del mundo como un recurso tanto desde un punto de vista energético como para la producción de fertilizantes y de un efluente listo para su reutilización (Mei et al., 2016). En el caso de la obtención de fertilizantes, las dificultades existentes a la hora de encontrar fuentes naturales de nitrógeno y fósforo hace que la recuperación de nutrientes en las depuradoras esté cobrando cada vez mayor importancia frente a la eliminación de nutrientes convencional. Este cambio de paradigma, por el que se ha pasado de una filosofía de gestión de residuos a una filosofía de gestión de recursos, hace necesario que el objetivo de las plantas de tratamiento vaya más allá de la simple eliminación de los contaminantes en el agua residual. Ahora, a este propósito se añade el de la mejora de su sostenibilidad global mediante la recuperación de recursos y el incremento de la eficiencia energética (Mo y Zhang, 2013).

En este contexto, los tratamientos anaerobios representan una opción muy interesante que ha captado la atención de la comunidad científica debido a sus ventajas con respecto a los tratamientos aerobios convencionales (Henze et al., 2008; Giménez et al., 2011). En comparación con los procesos aerobios, los procesos anaerobios suponen un menor consumo energético, generan biogás y la producción de fangos es del orden de 10 veces menor. Esta menor producción de fangos es debida al bajo rendimiento de los microorganismos anaerobios, es decir, los gramos de biomasa producidos por gramo de sustrato consumido son menores que en el caso de los microorganismos aerobios (Ferrer et al., 2015). La Figura 1 resume de manera gráfica el conjunto de ventajas que se acaban de mencionar:

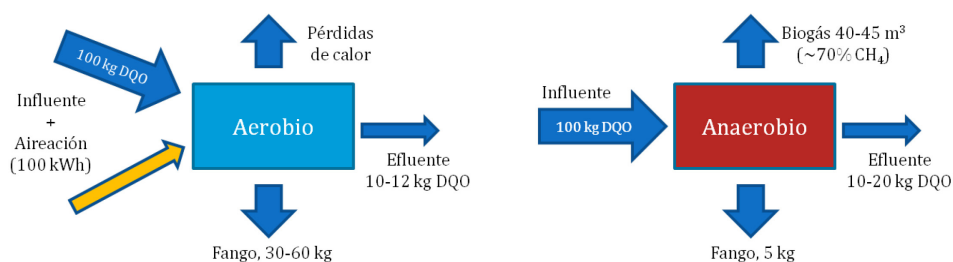


Figura 1 | Ventajas de los procesos anaerobios frente a los procesos aerobios (adaptado de Henze et al. (2008)).

Por lo general, este tipo de tratamientos se aplican en aguas residuales con una elevada carga orgánica, siendo la digestión de fangos y el tratamiento de aguas residuales industriales las aplicaciones más típicas. Pero los tratamientos anaerobios no ha quedado relegados únicamente a estos ámbitos, y cada vez con mayor profusión se aplican en la línea de agua de algunas EDARs urbanas situadas en países caracterizados por un clima tropical o subtropical, como ocurre en Brasil y en India (Chernicharo, 2007). El motivo es que los procesos anaerobios se ven muy influidos por la temperatura del agua residual que se vaya a tratar, pues por debajo de los 20°C los microorganismos anaerobios ven muy reducida su actividad (Ferrer y Seco, 2007). Para aquellas zonas en las que la temperatura del agua no sea suficiente, será necesario aplicar calor al sistema para mantener una determinada temperatura, y esto podría conseguirse mediante la combustión del propio biogás generado durante el proceso.

Entre las tecnologías que permiten aplicar un tratamiento anaerobio a las aguas residuales, los Biorreactores Anaerobios de Membranas (AnMBR) constituyen una alternativa prometedora para ser aplicada en la línea de aguas de las plantas de tratamiento de aguas residuales urbanas (Giménez et al., 2011). Con esta tecnología se pueden conseguir reducciones de la producción de fangos de hasta un 90%, y si las condiciones de operación son las adecuadas, el fango puede llegar a estabilizarse en el propio reactor sin necesidad de una etapa de digestión posterior (Ferrer et al., 2015). La principal característica de este tipo de aplicaciones es que permiten un adecuado desacople del tiempo de retención celular del tiempo de retención hidráulico, quedando el primero totalmente controlado por la purga del fango que se realice desde el propio reactor durante la fase de operación.

El efluente de un reactor AnMBR se caracteriza por una alta concentración de nutrientes (NH_4^+ , PO_4^{3-}) como consecuencia de la mineralización de los compuestos orgánicos, una concentración moderada de ácidos grasos volátiles y metano disuelto y una concentración de sulfuro elevada (Henze et al., 2008). Los principales motivos que hacen que en muchos casos el efluente de este tipo de reactores no pueda ser vertido a un medio receptor o reutilizado son: (i) la existencia de límites de vertido para el nitrógeno y el fósforo fijados en la legislación; (ii) los efectos perniciosos del sulfuro, como son los malos olores, la corrosión de equipos mecánicos y la inhibición de la actividad biológica, y (iii) las emisiones de metano a la atmósfera. En estos casos será necesario plantear un tratamiento posterior adecuado. Sin embargo, el post-tratamiento de efluentes anaerobios, hasta el momento, se ha centrado casi exclusivamente en la eliminación biológica de materia orgánica, nitrógeno y fósforo por separado, por lo que resulta conveniente plantear otros esquemas en los que se consideren todos los procesos para tratar un efluente anaerobio.

La modelación matemática del tratamiento de aguas residuales supone una herramienta muy potente que permite entender el comportamiento del sistema y facilita el diseño de plantas de tratamientos y de experimentos. Así, el objetivo principal de este trabajo ha consistido en el desarrollo de un modelo matemático que tenga en cuenta aquellos procesos que involucren a los distintos contaminantes presentes en un efluente anaerobio para ser aplicado en el diseño de un sistema de fangos activados. El modelo matemático será implementado en un software y finalmente se llevará a cabo un análisis de sensibilidad.

METODOLOGÍA

Desarrollo del modelo matemático

El modelo matemático tendrá en cuenta todos aquellos procesos físicos, químicos y biológicos que, debido a las características físico-químicas propias de los efluentes anaerobios, puedan verse involucrados y que por tanto es necesario considerar. De este modo, el desarrollo del modelo girará en torno a los siguientes puntos:

1) *Eliminación biológica de materia orgánica y nutrientes*: se ha tomado como referencia el modelo de Barat et al. (2013), concretamente los procesos relacionados con los microorganismos heterótrofos, los microorganismos amonio-oxidantes, los microorganismos nitrato-oxidantes y los microorganismos PAO.

2) *Oxidación biológica del sulfuro*: es llevada a cabo por dos tipos de microorganismos: los microorganismos sulfuro-oxidantes y los microorganismos autótrofos desnitrificantes. Se ha tomado como referencia el modelo de Mora et al. (2016) para los microorganismos sulfuro-oxidantes y los modelos de Mora et al. (2015a) y Mora et al. (2015b) en el caso de los microorganismos autótrofos desnitrificantes.

3) *Eliminación biológica de metano*: se encuentra relacionada con el metabolismo de los microorganismos metanotróficos, que emplean metano como fuente de carbono y de energía en sus procesos de crecimiento. Únicamente se considerarán los procesos propios de los microorganismos DAMO, que emplean el nitrato y el nitrato como aceptor de electrones. Se ha tomado como referencia el modelo de Chen et al. (2015).

4) *Oxidación química del sulfuro*: además de la vía biológica, existe una vía química por la que el sulfuro es oxidado. Se ha tomado como referencia el modelo de Nielsen et al. (2006).

5) *Desabsorción de gases*: el flujo entre la fase líquida y la fase gaseosa está gobernado por la ley de Henry, y va a afectar a varios de los componentes del modelo. En este caso también se ha tomado como referencia el modelo de Barat et al. (2013).

Así, para el conjunto de procesos anteriores se definirán una matriz estequiométrica y las expresiones cinéticas correspondientes siguiendo los estándares de notación del modelo ASM1 (Henze et al., 2000), que han sido ampliamente utilizados en el ámbito de la modelación matemática del tratamiento de aguas residuales.

Implementación del modelo matemático

Para aplicar el modelo matemático se ha empleado la técnica del balance de materia sobre cada uno de sus componentes. La expresión matemática depende del tipo de reactor que se esté analizando, y en el caso de un *Reactor Continuo de Tanque Agitado* (RCTA) ésta vendría dada por la Ecuación 1:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{Q \cdot C_{i-e}}{V} - \frac{Q \cdot C_i}{V} + \sum_{j=1}^n \theta_{i,j} \cdot r_j \quad (1)$$

Donde C_i es la concentración del componente i en el reactor, C_{i-e} es la concentración del componente i a la entrada del reactor, Q es el caudal de entrada y de salida del reactor en m^3/d , V es el volumen del reactor en m^3 , $\theta_{i,j}$ es el coeficiente estequiométrico del componente i en el proceso j , r_j es la expresión cinética del proceso j y n es el número de procesos definidos en el modelo matemático. En el caso de un *Reactor Secuencial* (SBR) la expresión anterior quedaría reducida al último término, pues no hay entradas ni salidas.

La implementación del modelo matemático se realizará en los software Excel y MatLab, y se llevará a cabo para aquellos procesos que pueden ser verificados con datos experimentales o con los resultados calculados mediante otro software. Esta condición se ha considerado de suma importancia, pues va a ser la que permite determinar (i) si el modelo se ajusta adecuadamente a los datos experimentales tras calibrar los parámetros que correspondan, y (ii) si la implementación se ha

realizado correctamente en el caso de existir un software con el que se puedan comparar los resultados obtenidos. Con esto, la implementación del modelo se ha reducido a los siguientes puntos:

- *Eliminación biológica de materia orgánica y nutrientes*: se compararán los resultados del modelo con los obtenidos mediante el software DESASS. En este software se ha implementado el modelo de Barat et al. (2013).
- *Oxidación biológica del sulfuro*: se calibrarán los parámetros cinéticos del modelo con los datos experimentales presentados en Mora et al. (2016) para los microorganismos sulfuro-oxidantes, y con los de Mora et al. (2015a) y Mora et al. (2015b) para los microorganismos autótrofos desnitrificantes.

Análisis de sensibilidad

El análisis de sensibilidad del modelo se realizará sobre aquellos procesos para los que los parámetros cinéticos han sido calibrados, y que constituyen lo que podría denominarse como procesos “más novedosos”. Para ello se empleará el software MatLab. Dicho esto, el análisis de sensibilidad del modelo se ha centrado en los procesos de oxidación biológica del sulfuro llevados a cabo por los microorganismos sulfuro-oxidantes y los microorganismos autótrofos desnitrificantes.

El objetivo de aplicar un análisis de sensibilidad al modelo consiste en identificar qué parámetros son responsables de la incertidumbre observada en las salidas del modelo y en qué medida lo son. Para conseguirlo, el análisis de sensibilidad ha sido planteado como un problema de análisis de la varianza siguiendo lo establecido en Sin et al. (2011). Así, la varianza de las salidas del modelo será descompuesta en tantas partes como parámetros se escojan para estudiar la sensibilidad del modelo. Este esquema de trabajo es lo que se conoce con el nombre de análisis de sensibilidad global, y consta de dos grandes elementos: en primer lugar un análisis de Monte-Carlo y en segundo lugar el denominado “método de los coeficientes de regresión estandarizados”.

Análisis de Monte-Carlo

El punto de partida para aplicar un análisis de Monte-Carlo consiste en el conjunto de valores de los parámetros sobre los que se quiera analizar la sensibilidad del modelo. Para cada uno de estos parámetros hay que definir un intervalo acotado de valores. El conjunto de todos los intervalos asociados a los distintos parámetros constituye el espacio paramétrico.

Sobre el espacio paramétrico definido en el paso anterior se va a extraer un conjunto de muestras aleatorias. Siguiendo la metodología de Sin et al. (2011), la técnica de muestreo empleada es el Hipercubo Latino. Esta técnica conduce a la obtención de una matriz de muestreo Θ de dimensiones $m \times n$, donde m es el número de muestras aleatorias extraídas del espacio paramétrico y n es el número de parámetros para los que se ha definido dicho espacio.

El último paso del análisis de Monte-Carlo consiste en realizar simulaciones con el modelo a partir de las muestras incluidas en la matriz de muestreo. Esto dará lugar a un conjunto de m simulaciones que se pueden graficar conjuntamente en lo que se denomina un gráfico de espagueti. La Figura 2 recoge de manera gráfica e intuitiva los pasos que se deben seguir para la realización de un análisis de Monte-Carlo.

Método de los coeficientes de regresión estandarizados

El análisis de Monte-Carlo realizado anteriormente arroja como resultado para cada componente del modelo un conjunto de tantos perfiles temporales como simulaciones se hayan especificado. Para cada uno de esos perfiles hay que extraer un valor escalar representativo, y siguiendo la metodología de Sin et al. (2011) ese valor será la media del perfil temporal. Con esto será posible aplicar un análisis de regresión lineal múltiple que relacione, para cada componente del modelo, los valores medios de los perfiles con los parámetros sobre los que se está analizando la sensibilidad del modelo. En otras palabras, para cada componente, se realizará un ajuste de un hiperplano de n dimensiones, donde n es el número de parámetros que definen el espacio paramétrico sobre el que se extrajeron muestras aleatorias. La Ecuación 2 muestra la ecuación de regresión para el componente i .

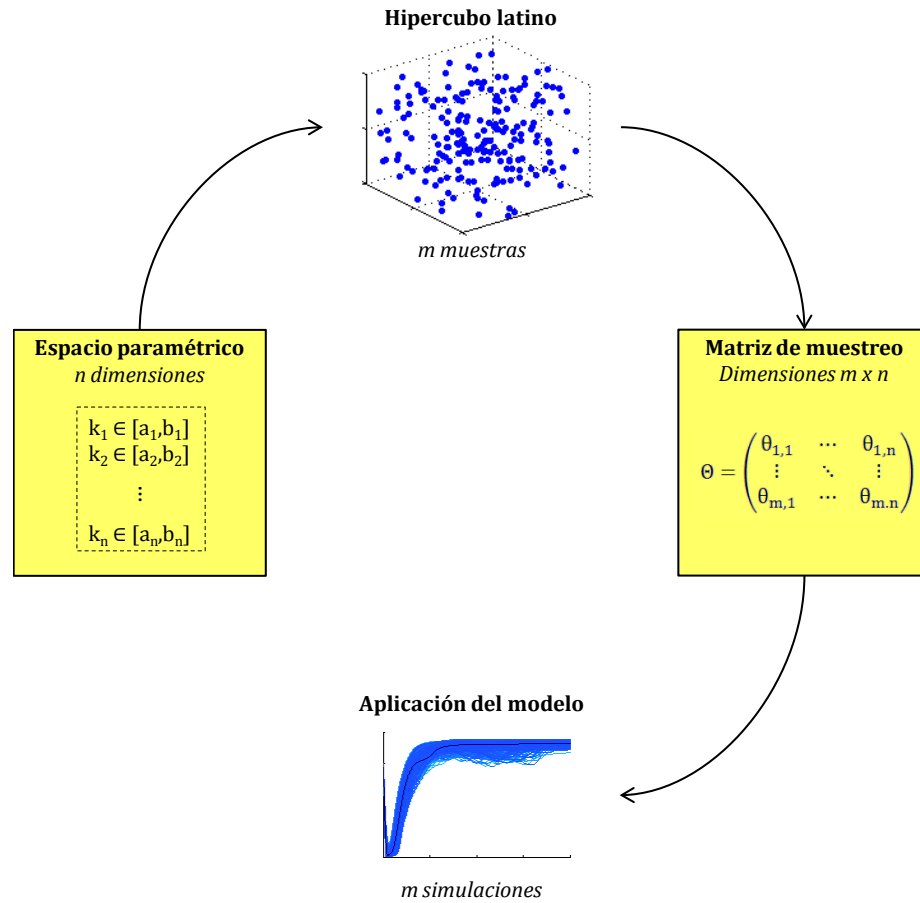


Figura 2 | Esquema de trabajo para la realización del análisis de Monte-Carlo

$$y_{i,est} = a_i + \sum_{j=1}^n b_{i,j} \cdot \theta_j \quad (2)$$

Donde θ_j es el parámetro j-ésimo, $b_{i,j}$ el coeficiente de regresión correspondiente al parámetro j-ésimo, a_i el intercepto e $y_{i,est}$ el valor estimado del componente i. La obtención de los coeficientes de regresión estandarizados, $\beta_{i,j}$, se realiza a partir de los coeficiente de regresión aplicando la Ecuación 3:

$$\beta_{i,j} = \frac{\sigma_{\theta_j}}{\sigma_{y_i}} \cdot b_{i,j} \quad (3)$$

Donde σ_{θ_j} es la desviación estándar de los valores muestreados para el parámetro θ_j y σ_{y_i} es la desviación estándar de los valores medios de los perfiles temporales obtenidos durante el análisis de Monte-Carlo para el componente i.

$\beta_{i,j}$ puede tomar valores entre -1 y 1, y su significado es el siguiente (Sin et al., 2011):

- Cuando mayor sea el valor absoluto de $\beta_{i,j}$ mayor será la sensibilidad del componente al parámetro θ_j .
- Un valor negativo de $\beta_{i,j}$ indica una disminución de la concentración del componente i al aumentar el valor del parámetro θ_j , y un valor positivo de $\beta_{i,j}$ indica un aumento de la concentración del componente i al aumentar el valor del parámetro θ_j .
- Un valor de $\beta_{i,j}$ próximo a cero indica que el componente i apenas es sensible al parámetro θ_j .

Para que el coeficiente de regresión estandarizado β_{ij} pueda considerarse una buena medida de la sensibilidad del modelo, debe cumplirse que el coeficiente de determinación del ajuste de regresión lineal múltiple sea $R^2 \geq 0.7$, lo que implica que el modelo es lo suficientemente lineal.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El desarrollo del modelo matemático ha dado como resultado un conjunto de procesos representados por una matriz estequiométrica y sus correspondientes expresiones cinéticas. Una revisión crítica de los modelos consultados en la bibliografía ha conducido al planteamiento de unas expresiones cinéticas ligeramente diferentes en algunos casos, como ha ocurrido con la oxidación biológica del sulfuro y la eliminación biológica de metano. Para aquellos procesos que han podido verificarse mediante datos experimentales o con los resultados obtenidos mediante otro modelo se ha procedido con la implementación en los software MatLab y Excel, dependiendo del caso. Los resultados obtenidos a la hora de implementar el modelo de eliminación de materia orgánica y nutrientes en MatLab han sido comparados con los obtenidos mediante el software DESASS. Para ello se ha propuesto un caso práctico se han comparado las concentraciones, obteniéndose unas diferencias mínimas entre los valores calculados. En relación con la oxidación biológica del sulfuro, el modelo desarrollado ha permitido poner de relieve las virtudes y los inconvenientes de los distintos modelos consultados en Mora et al. (2015a), Mora et al. (2015b) y Mora et al. (2016). En este caso los parámetros cinéticos han sido calibrados con los datos experimentales de las referencias consultadas mediante un proceso semiautomático realizado en el software Excel. Las predicciones del modelo se ajustan adecuadamente a los datos de los ensayos de laboratorio. Finalmente, para los procesos de oxidación biológica del sulfuro se ha llevado a cabo un análisis de sensibilidad a partir de los valores calibrados, permitiendo conocer la sensibilidad del modelo a los distintos parámetros.

Estequiometría y cinéticas

El modelo global desarrollado en este trabajo consta de un total de 30 componentes y 47 procesos. Cada uno de los componentes puede participar en más de un proceso, y el desglose por categorías de los distintos procesos es el que se especifica a continuación:

- 1) *Eliminación biológica de materia orgánica y nutrientes*: 24 procesos
- 2) *Oxidación biológica del sulfuro*: 12 procesos
- 3) *Eliminación biológica de metano*: 4 procesos
- 4) *Oxidación química del sulfuro*: 1 procesos
- 5) *Desabsorción de gases*: 6 procesos

La tamaño de la matriz estequiométrica (47 x 30), así como el conjunto de 47 expresiones cinéticas han hecho que se haya optado por presentar en este apartado únicamente la estequiometría y las cinéticas de algunos de los procesos, concretamente de los de oxidación biológica del sulfuro, que han sido empleadas en la calibración del modelo.

Microorganismos sulfuro-oxidantes

Existen tres vías de crecimiento para este tipo de microorganismos, en función de si emplean sulfuro, azufre elemental acumulado intracelularmente o tiosulfato como dadores de electrones. En todos los casos el oxígeno actúa como aceptor de electrones. El tiosulfato en los ensayos de laboratorio de Mora et al. (2016) era producido por oxidación química del sulfuro. También se tuvo en cuenta el proceso de desabsorción de oxígeno.

El modelo para los microorganismos sulfuro-oxidantes empleado en la implementación del modelo está formado, en consecuencia, por un total de 5 procesos. La estequiometría de estos procesos es la que se muestra en la Tabla 1:

Tabla 1 | Estequiometría de los procesos asociados a los microorganismos sulfuro-oxidantes.

Componentes → Procesos ↓	S _{O2} (mg O ₂ /l)	S _{S2} (mg S/l)	S _{TS} (mg S/l)	S _{SO4} (mg S/l)	X _{S0} (mg S/l)	X _{SOB} (mg DQO/l)
Crec. X _{SOB} - S _{S2}	1-1/2·1/Y _{SOB,1}	-1/Y _{SOB,1}	-	-	1/Y _{SOB,1}	1
Crec. X _{SOB} - X _{S0}	1-3/2·1/Y _{SOB,2}	-	-	1/Y _{SOB,2}	-1/Y _{SOB,2}	1
Crec. X _{SOB} - S _{TS}	1-1/Y _{SOB,3}	-	-1/Y _{SOB,3}	1/Y _{SOB,3}	-	1
Ox. química S _{S2}	-3/2	-1	1/2	1/2	-	-
Desabsorción de S _{O2}	-1	-	-	-	-	-

Donde S_{O2} es la concentración de oxígeno, S_{S2} es la concentración de sulfuro, S_{TS} la concentración de tiosulfato, S_{SO4} la concentración de sulfato, X_{S0} la concentración de azufre elemental acumulado intracelularmente y X_{SOB} la concentración de microorganismos sulfuro-oxidantes. Y_{SOB,1}, Y_{SOB,2} e Y_{SOB,3} son los rendimientos de los microorganismos sulfuro-oxidantes en las tres vías de crecimiento, y sus valores son 0.08 mg DQO/mg S, 0.285 mg DQO/mg S y 0.1775 mg DQO/mg S, respectivamente. En comparación con los microorganismos heterótrofos, cuyo rendimiento es 0.63 mg DQO/mg DQO (Barat et al., 2013), los rendimientos de los microorganismos sulfuro-oxidantes son bajos, lo que quiere decir que la producción de fangos asociada a estos procesos es reducida.

Las Ecuaciones 4-8 se corresponde con las expresiones cinéticas de los 5 procesos anteriores:

$$\frac{dX_{SOB}}{dt} = \mu_{SOB} \cdot \frac{S_{O2}}{k_{O2} + S_{O2}} \cdot \frac{S_{S2}}{k_{S2} + S_{S2}} \cdot \left(1 - \left(\frac{X_{S0}/X_{SOB}}{[X_{S0}/X_{SOB}]_{max}} \right)^\alpha \right) \cdot X_{SOB} \quad (4)$$

$$\frac{dX_{SOB}}{dt} = \mu_{SOB} \cdot \frac{S_{O2}}{k_{O2} + S_{O2}} \cdot \frac{k_{iS2}}{k_{iS2} + S_{S2}} \cdot \frac{X_{S0}/X_{SOB}}{k_{S0} + X_{S0}/X_{SOB}} \cdot \frac{X_{S0}/X_{SOB}}{X_{S0}/X_{SOB} + S_{TS}} \cdot X_{SOB} \cdot \eta_{S0} \quad (5)$$

$$\frac{dX_{SOB}}{dt} = \mu_{SOB} \cdot \frac{S_{O2}}{k_{O2} + S_{O2}} \cdot \frac{k_{iS2}}{k_{iS2} + S_{S2}} \cdot \frac{S_{TS}}{k_{TS} + S_{TS}} \cdot \frac{S_{TS}}{\frac{X_{S0}}{X_{SOB}} + S_{TS}} \cdot X_{SOB} \cdot \eta_{TS} \quad (6)$$

$$\frac{dS_{S2}}{dt} = k_{ox} \cdot S_{S2}^\delta \quad (7)$$

$$\frac{dS_{O2}}{dt} = K_{La,O2} \cdot (S_{O2}^* - S_{O2}) \quad (8)$$

Donde μ_{SOB} (d⁻¹) es la velocidad de crecimiento de los microorganismos sulfuro oxidantes, η_{S0} y η_{TS} son factores de corrección energéticos para los procesos de crecimiento empleando azufre elemental acumulado intracelularmente y tiosulfato, respectivamente, k_{O2} (mg O₂/l), k_{S2} (mg S/l), k_{S0} (mg S/ mg DQO) y k_{TS} (mg S/l) son las constantes de semisaturación del oxígeno, del sulfuro, del azufre elemental acumulado intracelularmente y del tiosulfato, respectivamente, $[X_{S0}/X_{SOB}]_{max}$ (mg S/mg DQO) expresa el máximo contenido de azufre elemental que se puede acumular intracelularmente, α es un exponente, k_{iS2} (mg S/l) es la constante de inhibición del sulfuro, k_{ox} (d⁻¹) es la velocidad de oxidación química del sulfuro, δ es el orden de reacción del sulfuro en el proceso de oxidación química del sulfuro, $K_{La,O2}$ (d⁻¹) es el coeficiente de transferencia del oxígeno y S_{O2}^* (mg O₂/l) es la concentración de oxígeno en saturación. Los parámetros cinéticos de las Ecuaciones 4-6 han sido calibrados al implementar el modelo, mientras que para las Ecuaciones 7-8 se han adoptado los valores presentados en Mora et al. (2016).

Microorganismos autótrofos desnitrificantes

Hay seis vías de crecimiento para este tipo de microorganismos, siendo el sulfuro, el azufre elemental extracelular y el tiosulfato los dadores de electrones, y el nitrito y el nitrato los aceptores de electrones. En este caso, el tiosulfato en los ensayos de Mora et al. (2015a) y Mora et al. (2015b) fue añadido al comienzo de los mismos. El modelo para los microorganismos autótrofos desnitrificantes empleado en la implementación del modelo está formado por un total de 6 procesos, siendo la estequiometría la recogida en la Tabla 2:

Tabla 2 | Estequiometría de los procesos asociados a los microorganismos autótrofos desnitrificantes

Componentes → Procesos ↓	S _{NO2} (mg N/l)	S _{NO3} (mg N/l)	S _{S2} (mg S/l)	S _{S0} (mg S/l)	S _{TS} (mg S/l)	S _{SO4} (mg S/l)	X _{AD} (mg DQO/l)
Crec. X _{AD} - S ²⁻ - NO ₃ ⁻	-	28/80·(1-1/2·1/Y _{AD1,1})	-1/Y _{AD1,1}	1/Y _{AD1,1}	-	-	1
Crec. X _{AD} - S ⁰ - NO ₃ ⁻	-	28/80·(1-3/2·1/Y _{AD1,2})	-	-1/Y _{AD1,2}	-	1/Y _{AD1,2}	1
Crec. X _{AD} - S ²⁻ - NO ₂ ⁻	28/48·(1-1/2·1/Y _{AD1,3})	-	-1/Y _{AD1,3}	1/Y _{AD1,3}	-	-	1
Crec. X _{AD} - S ⁰ - NO ₂ ⁻	28/48·(1-3/2·1/Y _{AD1,4})	-	-	-1/Y _{AD1,4}	-	1/Y _{AD1,4}	1
Crec. X _{AD} - S _{TS} - NO ₃ ⁻	-14/16·(1-1/Y _{AD2,1})	14/16·(1-1/Y _{AD2,1})	-	-	-1/Y _{AD2,1}	1/Y _{AD2,1}	1
Crec. X _{AD} - S _{TS} - NO ₂ ⁻	28/48·(1-1/Y _{AD2,2})	-	-	-	-1/Y _{AD2,2}	1/Y _{AD2,2}	1

Donde S_{NO2} es la concentración de nitrito, S_{NO3} es la concentración de nitrato, S_{S0} la concentración de azufre elemental extracelular y X_{AD} la concentración de microorganismos autótrofos desnitrificantes. Y_{AD1,1}, Y_{AD1,2}, Y_{AD1,3}, Y_{AD1,4}, Y_{AD2,1} e Y_{AD2,2} son los rendimientos de los microorganismos autótrofos desnitrificantes en las seis vías de crecimiento, y sus valores son 0.065 mg DQO/mg S, 0.4 mg DQO/mg S, 0.06 mg DQO/mg S, 0.17 mg DQO/mg S, 0.3425 mg DQO/mg S y 0.2225 mg DQO/mg S, respectivamente. Aunque para el azufre elemental extracelular y para el tiosulfato los rendimientos son ligeramente superiores, en general se puede afirmar que siguen siendo reducidos en comparación con los rendimientos típicos en los procesos de depuración convencionales, y que por tanto es de esperar que la producción de fangos se vea reducida.

Las ecuaciones 9-14 son las expresiones cinéticas de los 6 procesos de crecimiento:

$$\frac{dX_{AD}}{dt} = \mu_{AD} \cdot \eta_{AD1,1} \cdot \frac{k_{iO2}}{k_{iO2} + S_{O2}} \cdot \frac{S_{NO3}}{k_{NO3,1} + S_{NO3}} \cdot \frac{S_{NO3}}{S_{NO3} + S_{NO2}} \cdot \frac{S_{S2}}{k_{S2} + S_{S2}} \cdot X_{AD} \quad (9)$$

$$\frac{dX_{AD}}{dt} = \mu_{AD} \cdot \eta_{AD1,2} \cdot \frac{k_{iO2}}{k_{iO2} + S_{O2}} \cdot \frac{S_{NO3}}{k_{NO3,1} + S_{NO3}} \cdot \frac{S_{NO3}}{S_{NO3} + S_{NO2}} \cdot \frac{k_{iS2}}{k_{iS2} + S_{S2}} \cdot \frac{S_{S0}}{k_{S0} + S_{S0}} \cdot \frac{S_{S0}}{S_{S0} + S_{TS}} \cdot X_{AD} \quad (10)$$

$$\frac{dX_{AD}}{dt} = \mu_{AD} \cdot \eta_{AD1,3} \cdot \frac{k_{iO2}}{k_{iO2} + S_{O2}} \cdot \frac{S_{NO2}}{k_{NO2,1} + S_{NO2}} \cdot \frac{S_{NO2}}{S_{NO3} + S_{NO2}} \cdot \frac{S_{S2}}{k_{S2} + S_{S2}} \cdot X_{AD} \quad (11)$$

$$\frac{dX_{AD}}{dt} = \mu_{AD} \cdot \eta_{AD1,4} \cdot \frac{k_{iO2}}{k_{iO2} + S_{O2}} \cdot \frac{S_{NO2}}{k_{NO2,1} + S_{NO2}} \cdot \frac{S_{NO2}}{S_{NO3} + S_{NO2}} \cdot \frac{k_{iS2}}{k_{iS2} + S_{S2}} \cdot \frac{S_{S0}}{k_{S0} + S_{S0}} \cdot \frac{S_{S0}}{S_{S0} + S_{TS}} \cdot X_{AD} \quad (12)$$

$$\frac{dX_{AD}}{dt} = \mu_{AD} \cdot \eta_{AD2,1} \cdot \frac{k_{iO2}}{k_{iO2} + S_{O2}} \cdot \frac{S_{NO3}}{k_{NO3,2} + S_{NO3}} \cdot \frac{S_{NO3}}{S_{NO3} + S_{NO2}} \cdot \frac{k_{iS2}}{k_{iS2} + S_{S2}} \cdot \frac{S_{TS}}{k_{TS} + S_{TS}} \cdot \frac{S_{TS}}{S_{S0} + S_{TS}} \cdot X_{AD} \quad (13)$$

$$\frac{dX_{AD}}{dt} = \mu_{AD} \cdot \eta_{AD2,2} \cdot \frac{k_{iO2}}{k_{iO2} + S_{O2}} \cdot \frac{S_{NO2}}{k_{NO2,2} + S_{NO2}} \cdot \frac{S_{NO2}}{S_{NO3} + S_{NO2}} \cdot \frac{k_{iS2}}{k_{iS2} + S_{S2}} \cdot \frac{S_{TS}}{k_{TS} + S_{TS}} \cdot \frac{S_{TS}}{S_{S0} + S_{TS}} \cdot X_{AD} \quad (14)$$

Donde μ_{AD} (d⁻¹) es la velocidad de crecimiento de los microorganismos sulfuro oxidantes, $\eta_{AD1,1}$, $\eta_{AD1,2}$, $\eta_{AD1,3}$, $\eta_{AD1,4}$, $\eta_{AD2,1}$ y $\eta_{AD2,2}$ son los factores de corrección energéticos para los seis procesos de crecimiento, $k_{NO3,1}$ (mg N/l) y $k_{NO2,1}$ son las constantes de semisaturación del nitrato y del nitrito, respectivamente, en los procesos de crecimiento empleando sulfuro y azufre elemental extracelular, $k_{NO3,2}$ (mg N/l) y $k_{NO2,2}$ son las constantes de semisaturación del nitrato y del nitrito, respectivamente, en los procesos de crecimiento empleando tiosulfato, k_{S2} (mg S/l), k_{S0} (mg S/ mg DQO) y k_{TS} (mg S/l) son las constantes de semisaturación del sulfuro, del azufre elemental extracelular y del tiosulfato, respectivamente, y k_{iS2} (mg S/l) es la constante de inhibición del sulfuro. Los parámetros cinéticos de las Ecuaciones 9-14 han sido calibrados al implementar el modelo.

Implementación del modelo para la eliminación biológica de materia orgánica y nutrientes

Para verificar que el modelo se ha implementado correctamente se ha desarrollado un caso práctico consistente en un esquema de tratamiento A²O en los software MatLab y DESASS. La Figura 3 muestra el esquema empleado:

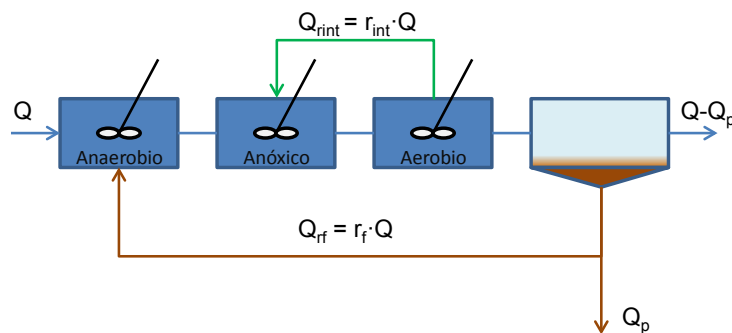


Figura 3 | Esquema A²/O del caso práctico implementado en los software MatLab y DESASS

La Tabla 3 recoge las características físico-químicas del agua residual a tratar:

Tabla 3 | Características físico químicas del agua residual a tratar

Parámetro	Q (m ³ /d)	T (°C)	S _A (mg DQO/l)	S _F (mg DQO/l)	S _{NH4} (mg N/l)	S _{PO4} (mg P/l)	X _S (mg DQO/l)
Valor	10000	20	100	20	50	7	100

Donde Q es el caudal, T la temperatura, S_A la concentración de ácido acético, S_F la concentración del resto de compuestos orgánicos solubles biodegradables, S_{NH4} la concentración de amonio, S_{PO4} la concentración de fósforo y X_S la concentración de compuestos orgánicos particulados biodegradables.

Los parámetros de operación de la planta y los volúmenes de los reactores son los indicados en la Tabla 4:

Tabla 4 | Parámetros de operación de la planta y volúmenes de los reactores

Parámetro	θ _c (d)	r _{int} -	V _{anaerobio} (m ³)	V _{anóxico} (m ³)	V _{aerobio} (m ³)	S _{O2-aer} (mg O ₂ /l)
Valor	10	2	500	2000	2500	2

Donde θ_c es el tiempo de retención celular, r_{int} la recirculación interna entre el reactor aerobio y el reactor anóxico, V_{anaerobio}, V_{anóxico} y V_{aerobio} son los volúmenes del reactor anaerobio, anóxico y aerobio, respectivamente, y S_{O2-aer} es la concentración de oxígeno en el reactor aerobio suministrada por las soplantes.

Los resultados de la implementación del modelo para la eliminación biológica de materia orgánica y nutrientes se han expresado como las concentraciones de los componentes solubles a la salida de la planta obtenidas en ambos software. Las concentraciones de los componentes particulados en el efluente es mínima debido a la incorporación de un proceso de decantación tras el tratamiento biológico, y a efectos de cálculo han sido consideradas nulas. Los valores obtenidos se recogen en la Tabla 5. La presencia de nitrito y nitrato en el efluente es debida a la actividad de los microorganismos amonio-oxidantes y nitrito-oxidantes, respectivamente. Las diferencias entre ambos software han sido expresadas en tanto por ciento tomando como referencia los valores calculados con DESASS. A la vista de los resultados se concluye que el modelo desarrollado en este trabajo reproduce satisfactoriamente los resultados obtenidos con DESASS, por lo que la implementación se considera válida. Ciertamente, existen unas ligeras diferencias debido a que en DESASS se han tenido en cuenta los procesos de desabsorción de gases, mientras que en MatLab no ha sido así. El motivo es que el coeficiente de transferencia de los gases, K_{La} (d⁻¹), depende de la superficie de contacto entre la fase líquida y la fase gaseosa y de la agitación de la fase líquida. Por lo tanto, no presenta un

valor constante o un valor que se haya podido extraer de una referencia bibliográfica. De todos modos, cabe esperar que su influencia sea mínima en comparación con los procesos biológicos que suceden en los reactores.

Tabla 5 | Concentraciones de los componentes solubles en el efluente de la planta

Componente	S_A (mg DQO/l)	S_F (mg DQO/l)	S_{NH_4} (mg N/l)	S_{NO_2} (mg N/l)	S_{NO_3} (mg N/l)	S_{PO_4} (mg P/l)
MatLab	0.079	0.582	0.901	3.954	11.607	4.860
DESASS	0.072	0.569	0.861	3.919	11.689	4.824
Diferencia (%)	9.987	2.155	4.633	0.884	-0.701	0.749

Implementación del modelo para la oxidación biológica del sulfuro

Microorganismos sulfuro-oxidantes

Los datos experimentales para la calibración de modelo se han obtenido de Mora et al. (2016) y se corresponden con un ensayo realizado en un reactor SBR con una concentración de carbono inorgánico y nutrientes suficiente como para no limitar los procesos de crecimiento. Se realizó un monitoreo de las concentraciones de sulfuro, tiosulfato y sulfato, con un pH igual a 7 y una temperatura de 25°C. La Figura 4 muestra los perfiles de concentración de los componentes S_{S_2} , X_{SO} , S_{TS} Y S_{SO_4} junto con los valores determinados experimentalmente. Los valores de los parámetros cinéticos calibrados son los indicados en la Tabla 6. Como se puede apreciar, las concentraciones predichas por el modelo y los datos observados se ajustan adecuadamente. El modelo es capaz de reproducir satisfactoriamente las tendencias observadas en las distintas concentraciones durante los ensayos. Desafortunadamente, no ha sido posible validar con datos experimentales el perfil de concentración del azufre elemental acumulado intracelularmente. Esto es debido a que en Mora et al. (2016) no se realizó un monitoreo de la concentración de dicho componente. De este modo se ha decidido comparar visualmente el perfil obtenido con el de Mora et al. (2016) de manera que fueran lo suficientemente parecidos.

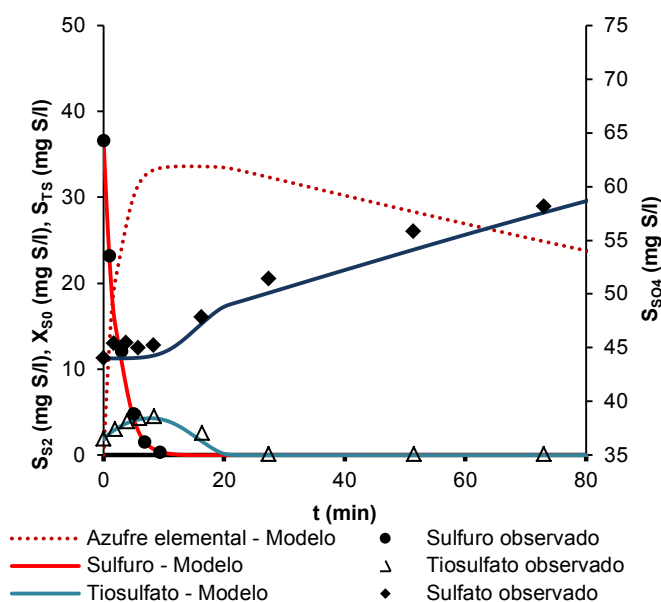


Figura 4 | Calibración del modelo de los microorganismos sulfuro-oxidantes con los datos de Mora et al. (2016)

Tabla 6 | Valores de los parámetros cinéticos calibrados para los microorganismos sulfuro-oxidantes

Parámetro	Valor	Unidades
μ_{SOB}	7.5	d^{-1}
k_{O_2}	0.146	mg O_2/l
k_{S_2}	1	mg S/l
$[X_{S_0}/X_{SOB}]_{max}$	0.141	mg S/mg DQO
α	1.71	-
k_{iS_2}	0.25	mg S/l
k_{S_0}	0.1	mg S/l
η_{S_0}	0.07	-
k_{TS}	0.1	mg S/l
η_{S_0}	0.08	-

Microorganismos autótrofos desnitrificantes

En Mora et al. (2015a) y en Mora et al. (2015b) se llevaron a cabo tres ensayos en un reactor SBR sin limitación por fuente de carbono y nutrientes a un pH de 7.5 y una temperatura de 30°C. En el primer ensayo se empleó nitrato como aceptor de electrones y se realizó un monitoreo de las concentraciones de nitrato, sulfuro y sulfato. En el segundo se empleó nitrito como aceptor de electrones y el monitoreo se realizó sobre las concentraciones de nitrito, sulfuro y sulfato. En el tercero se emplearon nitrato y nitrito como aceptores de electrones, y tiosulfato como dador de electrones. Se midieron las concentraciones de nitrato, nitrito, tiosulfato y sulfato durante el ensayo. En la Figura 5 se recogen los resultados de las tres calibraciones y en la Tabla 7 los valores de los parámetros calibrados. El ajuste obtenido es satisfactorio

Tabla 7 | Valores de los parámetros cinéticos calibrados para los microorganismos autótrofos desnitrificantes

Parámetro	Valor	Unidades	Parámetro	Valor	Unidades
$\mu_{AD} \cdot \eta_{AD1,1}$	1.625	d^{-1}	$k_{NO3,2}$	0.79	mg N/l
$\mu_{AD} \cdot \eta_{AD1,2}$	5.943	d^{-1}	$k_{NO2,1}$	1.109	mg N/l
$\mu_{AD} \cdot \eta_{AD1,3}$	1.311	d^{-1}	$k_{NO2,2}$	1.856	mg N/l
$\mu_{AD} \cdot \eta_{AD1,4}$	1.205	d^{-1}	k_{S_2}	1.948	mg S/l
$\mu_{AD} \cdot \eta_{AD2,1}$	1.9	d^{-1}	k_{iS_2}	3.437	mg S/l
$\mu_{AD} \cdot \eta_{AD2,2}$	0.7	d^{-1}	k_{S_0}	0.789	mg S/l
$k_{NO3,1}$	0.79	mg N/l	k_{TS}	16.1	mg S/l

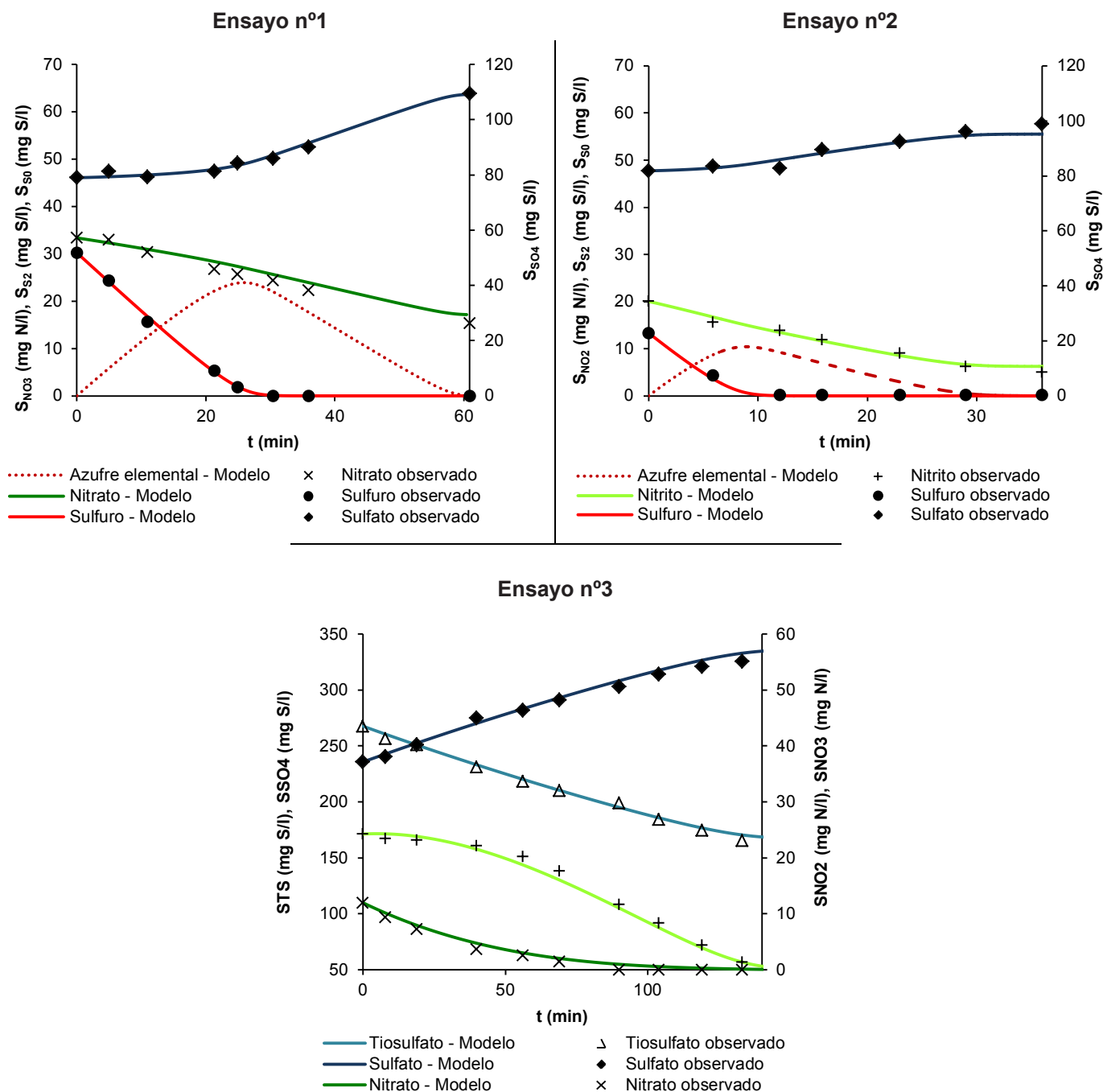


Figura 5 | Calibración del modelo de los microorganismos sulfuro-oxidantes con los datos de Mora et al. (2015a) y Mora et al. (2015b)

Análisis de sensibilidad

Análisis de Monte-Carlo

A partir de todos los valores calibrados para los microorganismos sulfuro-oxidantes y para los microorganismos autótrofos desnitrificantes se ha definido un intervalo para cada parámetro asignando una variación del $\pm 20\%$ a cada valor, constituyendo de este modo el espacio paramétrico. Se han extraído 500 muestras mediante el método del hipercubo latino se han llevado a cabo 500 simulaciones en cada caso, obteniendo un gráfico de espagueti para cada uno de los componentes. A modo de ejemplo la Figura 6 muestra los resultados del análisis de Monte-Carlo para el tiosulfato en el caso de los

microorganismos sulfuro-oxidantes y para el sulfato con los datos del primer ensayo en el caso de los microorganismos autótrofos desnitrificantes. En azul oscuro se ha resaltado el perfil correspondiente a la calibración.

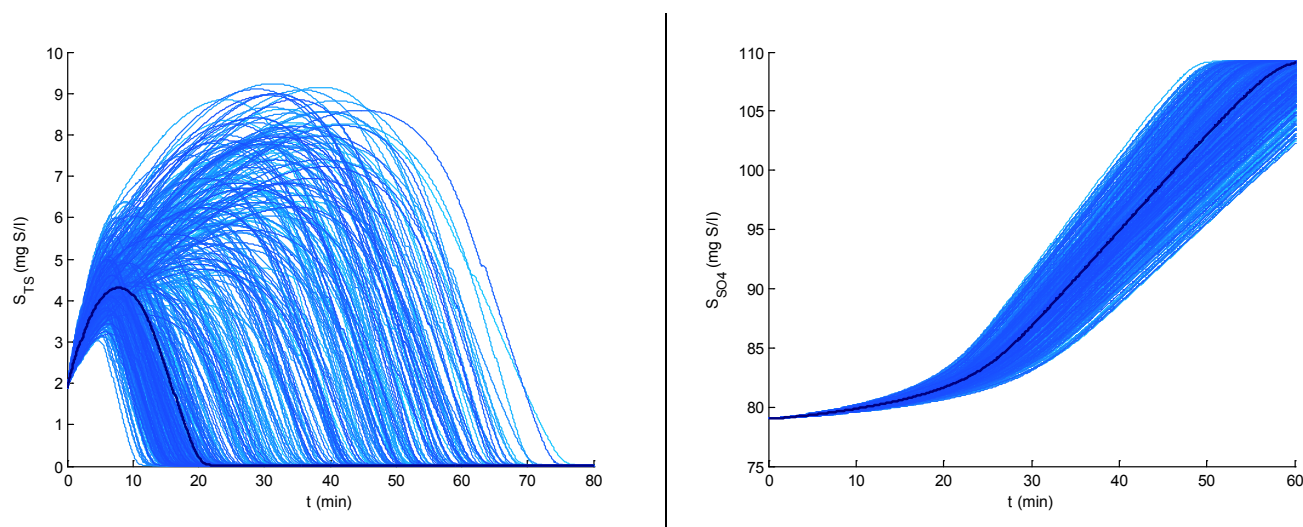


Figura 6 | Gráficos de espagueti para la concentración de tiosulfato (izquierda) y para la concentración de sulfato (derecha)

Método de los coeficientes de regresión estandarizados

El cálculo de los coeficientes β se ha realizado a partir de los perfiles del análisis de Monte-Carlo, y los resultados han sido interpretados. Tabla 8 recoge los valores de los coeficientes β para el modelo de los microorganismos sulfuro-oxidantes. En negrita se han resaltado para cada componente los dos parámetros a los que es más sensible.

Tabla 8 | Coeficientes de regresión estandarizados para el modelo de los microorganismos sulfuro-oxidantes

Componentes → Parámetros ↓	S_{O_2}	S_{S_2}	S_{TS}	S_{SO_4}	X_{S_0}	X_{SOB}
μ_{SOB}	-0.3020	-0.1144	-0.0897	0.3786	-0.3767	0.2932
k_{O_2}	0.0070	0.0049	-0.0045	-0.0078	0.0150	-0.0085
k_{S_2}	0.0042	-0.0074	-0.0106	0.0011	0.0162	-0.0022
$[X_{S_0}/X_{SOB}]_{max}$	-0.0389	-0.8421	-0.8795	0.7378	0.5147	0.8597
α	-0.0066	-0.0092	0.0176	-0.0203	0.0105	-0.0112
k_{iS_2}	-0.0110	-0.0310	-0.0596	0.0631	0.0031	0.0489
k_{S_0}	0.1220	-0.0096	-0.0182	-0.0923	0.1638	-0.0548
η_{S_0}	-0.2332	-0.0091	-0.0131	0.2289	-0.3123	0.1696
k_{TS}	0.0012	-0.0072	-0.0087	0.0010	0.0137	0.0027
η_{TS}	-0.0649	0.0007	-0.0671	0.1498	-0.1288	0.0951
k_{ox}	-0.1229	-0.1392	-0.0645	0.2684	-0.2377	0.1219
δ	-0.0920	-0.1290	-0.0156	0.2080	-0.2203	0.0743
k_{L,O_2}	0.9053	-0.1224	-0.0355	-0.0144	0.1281	0.0298
R^2	0.9708	0.7458	0.7853	0.8698	0.6924	0.8605

Los valores de R^2 obtenidos al aplicar el ajuste de regresión lineal múltiple indican que en el caso del componente X_{S_0} los coeficientes de regresión lineal estandarizados no son una buena medida de la sensibilidad del modelo porque está porque R^2

< 0.7 . En líneas generales se puede decir que el modelo de los microorganismos sulfuro-oxidantes es sensible a los parámetros μ_{SOB} y $[X_{SO}/X_{SOB}]_{max}$ principalmente:

- μ_{SOB} tiene un efecto positivo sobre los componentes S_{SO4} y X_{SOB} , lo cual tiene sentido, pues cuanto más grande sea la velocidad de crecimiento de los microorganismos sulfuro-oxidantes cabe esperar una mayor producción de sulfato y una mayor concentración de biomasa. Este parámetro tiene un efecto negativo sobre los componentes S_{O2} y S_{TS} . Una mayor velocidad de crecimiento conlleva un mayor consumo de oxígeno como aceptor de electrones y de tiosulfato como dador de electrones, hecho que concuerda con los valores calculados.

- $[X_{SO}/X_{SOB}]_{max}$ tiene un efecto positivo sobre los componentes S_{SO4} y X_{SOB} . Cuanto mayor sea este ratio cabe esperar una mayor producción de sulfato en el proceso de crecimiento empleando azufre elemental acumulado intracelularmente, y también cabe esperar una mayor concentración de biomasa. El efecto negativo en este caso tiene lugar sobre los componentes S_{S2} y S_{TS} . En el caso del sulfuro, al poder acumularse intracelularmente una mayor cantidad de azufre elemental, también se podrá oxidar una mayor cantidad de sulfuro. Para el tiosulfato, si el aumento de este ratio supone una mayor disminución en la concentración de sulfuro, esto hará que haya menos sulfuro disponible para ser oxidado químicamente y que por tanto la producción de tiosulfato sea menor.

En el caso de los microorganismos autótrofos desnitrificantes, como la calibración se llevó a cabo para un total de 3 ensayos, también ha habido que realizar un total de tres análisis de sensibilidad, pues en cada uno de los ensayos se calibraron unos parámetros determinados. El volumen de información ha desaconsejado incorporar todos estos resultados y se ha optado por presentar y analizar con mayor detalle únicamente los resultados obtenidos para los microorganismos sulfuro-oxidantes. En resumidas cuentas, el modelo de los microorganismos autótrofos desnitrificantes es fundamentalmente sensible a las velocidades de crecimiento de los distintos procesos.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos al implementar el modelo de eliminación biológica de materia orgánica y nutrientes demuestran que las diferencias con respecto a los valores calculados mediante el software DESASS son mínimas, y que por tanto la implementación se ha llevado correctamente. Por lo tanto, el código desarrollado en MatLab puede ser empleado para el diseño de una depuradora de fangos activados con la que se lleve a cabo una eliminación adecuada tanto de materia orgánica como de nutrientes, cumpliendo de este modo con los límites de vertido exigidos por la legislación.

El modelo de oxidación biológica del sulfuro reproduce adecuadamente los datos experimentales consultados en la bibliografía una vez realizada la calibración de los parámetros cinéticos. La sensibilidad a los mismos ha sido estudiada, llegando a la conclusión de que las velocidades de crecimiento de los distintos procesos, así como el máximo contenido de azufre son los parámetros a los que el modelo de oxidación biológica del sulfuro es más sensible. En cualquier caso, el buen ajuste a los datos observacionales le confiere una capacidad de predicción suficiente como para ser aplicado en el diseño de ensayos de laboratorio, el dimensionamiento de plantas piloto o incluso de plantas de tratamiento a mayor escala. Además, los resultados ponen de relieve las limitaciones de los modelos consultados para la oxidación biológica del sulfuro y la eliminación biológica del metano, lo que sugiere que debe realizarse una mayor investigación al respecto antes de su incorporación a un modelo global.

AGRADECIMIENTOS

La elaboración de este trabajo no habría sido posible sin la financiación por parte del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte, que se ha realizado a través de una beca general para estudiar el segundo curso del Máster en Ingeniería Hidráulica y Medio Ambiente en la Universidad Politécnica de Valencia.

REFERENCIAS

- Barat, R.; Serralta, J.; Ruano, M.V.; Jiménez, E.; Ribes, J.; Seco, A.; Ferrer, J. (2013). Biological Nutrient Removal Model N°2 (BNRM2): A general model for Wastewater Treatment Plants. *Water Science and Technology* 67(7): 1481-1489.
- Chen, X.; Guo, J.; Shi, Y.; Xie, G.; Yuan, Z.; Ni, B. (2015). Achieving complete nitrogen removal by coupling nitrification-anammox and methane-dependent denitrification: A model-based study. *Biotechnology & Bioengineering* 113, 1035-1045.
- Chernicharo, C. (2007). *Anaerobic Reactors*. IWA Publishing, London, UK.
- Ferrer, J.; Pretel, R.; Durán, F.; Giménez, J.; Robles, A.; Ruano, M.V.; Serralta, J.; Ribes, J.; Seco, A. (2015). Design methodology for submerged anaerobic membrane bioreactors (AnMBR): A case study. *Separation and Purification Technology* 141: 378-386.
- Ferrer, J.; Seco, A. (2007). *Tratamientos biológicos de aguas residuales*. Editorial UPV.
- Giménez, J.B.; Robles, A.; Carretero, L.; Durán, F.; Ruano, M.V.; Gatti, M.N.; Ribes, J.; Ferrer, J.; Seco, A. (2011). Experimental study of the anaerobic urban wastewater treatment in a submerged hollow-fibre membrane bioreactor at pilot scale. *Bioresource Technology* 102: 8799-8806.
- Henze, M.; Gujer, W.; Mino, T.; van Loosdrecht, M.C.M. (2000). *Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. IWA Publishing, London, UK.
- Henze, M.; van Loosdrecht, M.C.M.; Ekama, G.; Brdjanovic, D. (2008). *Biological Wastewater Treatment. Principles, Modelling and Design*. IWA Publishing, London, UK.
- Mei, X.; Wang, Z.; Miao, Y.; Wu, Z. (2016). Recover energy from domestic wastewater using anaerobic membrane bioreactor: Operating parameters optimization and energy balance analysis. *Energy* 98: 146-154.
- Mo, W.; Zhang, Q. (2013). Energy-nutrients-water nexus: Integrated resource recovery in municipal wastewater treatment plants. *Journal of Environmental Management* 127: 255-267.
- Mora, M.; Fernández, M.; Gómez, J.; Cantero, D.; Lafuente, J.; Gamisans, X.; Gabriel, D. (2015a). Kinetic and stoichiometric characterization of anoxic sulfide oxidation by SO-NR mixed cultures from anoxic biotrickling filters. *Applied Microbiology and Biotechnology* 99: 77-87.
- Mora, M.; Dorado, A.; Gamisans, X.; Gabriel, D. (2015b). Investigating the kinetics of autotrophic denitrification with thiosulfate: Modeling the denitrification mechanisms and the effect of the acclimation of SO-NR cultures to nitrite. *Chemical Engineering Journal* 262: 235-241.
- Mora, M.; López, L.; Lafuente, J.; Pérez, J.; Kleerebezem, R.; van Loosdrecht, M.C.M.; Gamisans, X.; Gabriel, D. (2016). Respirometric characterization of aerobic sulfide, thiosulfate and elemental sulfur oxidation by S-oxidizing biomass. *Water Research* 89: 282-292.
- Nielsen, A.; Vollertsen, J.; Hvitved-Jacobsen, T. (2006). Kinetics and stoichiometry of aerobic sulfide oxidation in wastewater from sewers - Effects of pH and temperature. *Water Environment Research* 78: 275-283.
- Sin, G.; Gernaey, K.; Neumann, M.; van Loosdrecht, M.C.M.; Gujer, W. (2011). Global sensitivity analysis in wastewater treatment plant model applications: Prioritizing sources of uncertainty. *Water Research* 45: 639-651.