

CAPÍTULO 4. MODELO PROPUESTO



ÍNDICE DEL CAPÍTULO

4. MODELO PROPUESTO	4-1
4.1. Introducción	4-1
4.2. Modelo hidrológico	4-3
4.2.1. Balance hidrológico superficial.....	4-3
4.2.1.1. Algoritmo general	4-3
4.2.1.2. Modelo de evaporación-evapotranspiración	4-5
4.2.1.3. Infiltración.....	4-11
4.2.1.4. Escorrentía superficial.....	4-13
4.2.2. Flujo en el interior del vertedero.....	4-15
4.2.2.1. Introducción.....	4-15
4.2.2.2. Modelo de flujo vertical.....	4-16
4.2.2.3. Modelo de flujo hacia el dren.	4-19
4.2.2.4. Modelo de flujo horizontal	4-23
4.3. Módulo de biodegradación	4-32
4.3.1. Caracterización del residuo.....	4-32
4.3.2. Procesos de degradación	4-35
4.3.2.1. Bioquímica.....	4-35
4.3.2.2. Cinéticas.....	4-41
4.3.2.3. Resolución numérica.....	4-44
4.3.3. Transporte de contaminantes.....	4-47
4.3.4. Resultados del modelo.....	4-48
4.3.5. Equilibrio de gases.....	4-51
4.3.6. Simulación de una celda cerrada.....	4-55
4.3.7. Equilibrio carbónico.....	4-62
4.3.7.1. Aproximación de Tchobanoglous <i>et al.</i> (1994).....	4-62
4.3.7.2. Aproximación de El-Fadel <i>et al.</i> (1996a).....	4-63
4.3.7.3. Discusión.....	4-64
4.3.1. Resumen de los cambios en el modelo de biodegradación.....	4-65
4.4. Resumen de parámetros del modelo	4-67
4.5. Referencias	4-70

4. MODELO PROPUESTO

4.1. INTRODUCCIÓN

En este capítulo se presentan las modificaciones del modelo MODUELO inicial (MODUELO 1) que han dado lugar a MODUELO 2, objeto de este trabajo.

Se mantiene la configuración original del modelo de vertedero: división en malla tridimensional sobre la cual se definen las celdas de tipo terreno, vertedero, vertedero sellado, relleno permeable (celdas dren) y relleno impermeable, que conservan las características con que se concibieron. Varía sin embargo la forma de definir la red de drenaje.

El algoritmo general de cálculo tampoco sufre modificación. Las operaciones se estructuran en tres bloques de “gestión de datos” (“de clima”, “configuración actual del vertedero” y de “producción de residuos”) y dos módulos principales de cálculo (hidrológico y de biodegradación) que conservan una estructura independiente. Y, como en el modelo inicial, el esquema de resolución de las ecuaciones diferenciales se plantea en una malla de diferencias finitas centrada en las celdas en que se divide el vertedero.

El motivo de las modificaciones es en unos casos adecuar el modelo a la disponibilidad real de datos caracterizadores de las instalaciones, en otros corregir errores en la formulación inicialmente planteada y en otros replantear la idealización de los procesos a representar. Los cambios más significativos afectan a los modelos empleados en la simulación de los balances hidrológicos y la biodegradación. Los bloques de producción de residuos y configuración actual del vertedero sólo han ido adaptándose a las necesidades planteadas por estos mismos cambios (introducción de nuevas variables, nuevos parámetros a definir por el usuario, etcétera).

Se han abordado las siguientes modificaciones, según la lista resultante del diagnóstico de MODUELO 1 presentada en el capítulo anterior:

CONFIGURACIÓN DEL TERRENO

3. Modificar totalmente la definición de la red de drenaje, de acuerdo con el nuevo modelo de flujo al dren propuesto.

BLOQUE DE CLIMA

4. Añadir la posibilidad de introducir series meteorológicas “simplificadas”, según los datos disponibles en el vertedero.

BLOQUE DE RESIDUOS

8. Redefinición de las características de biodegradabilidad del residuo para una descripción “real”.

BLOQUE HIDROLÓGICO

9. Perfeccionamiento de los modelos de balance superficial existentes.

10. Inclusión del recuento de la escorrentía superficial conectada a la red de recogida de lixiviados.

11. Reformulación del modelo de flujo horizontal.

12. Incorporación correcta del modelo de flujo vertical.

13. Replanteamiento del modelo de flujo al dren.

14. Consideración de la variación en el vertedero de otros parámetros hidrológicos.

BLOQUE BIODEGRADACIÓN

16. Reformulación del modelo de hidrólisis

17. Reformulación del modelo de metanización

Como se comentaba también en el capítulo anterior los cambios que afectan fundamentalmente a la programación no son objeto de este trabajo.

Los siguientes apartados presentan las nuevas propuestas organizadas según los modelos afectados. En primer lugar se describe el modelo hidrológico (balance superficial y flujo en el terreno) incluyendo las modificaciones a la definición de la red de drenaje que deben realizarse en el bloque de configuración del terreno. Finalmente se presenta el nuevo modelo de biodegradación del residuo en el que se reformula la caracterización del mismo, lo que implica variación en los datos a introducir en el bloque de residuos, y los procesos implicados. En esta parte se incluyen los resultados de un primer ensayo de aplicación del modelo en condiciones sencillas (“celda cerrada”).

4.2. MODELO HIDROLÓGICO

4.2.1. Balance hidrológico superficial

4.2.1.1. Algoritmo general

Los modelos matemáticos a emplear para simular los fenómenos del vertedero han de ser un compromiso entre los datos disponibles y la búsqueda de una aproximación adecuada para los valores estimados.

Estudiando el balance hidrológico superficial han de considerarse dos condicionantes principales: la disponibilidad de datos climatológicos y de caracterización de las capas superficiales por una parte y el intervalo de cálculo o paso de tiempo por otra. Frente a estudios hidrológicos con el mismo fundamento (balances para la evaluación de recursos hídricos, para el estudio de aprovechamientos agrícolas,...), la simulación de estos fenómenos como condicionantes de la degradación en el vertedero hace necesaria su evaluación en períodos de tiempo mucho menores (diario e incluso horario). Y sin embargo la mayor parte de las expresiones del balance de agua en la superficie del vertedero se basan en el empleo de formulaciones desarrolladas en estudios agronómicos, lo que conduce a valores decenales, mensuales, pocas veces diarios. Todo ello no impide su empleo en el caso contemplado, pero sí ha de ser tenida muy en cuenta la aplicabilidad de cada modelo y su interés en este campo.

La Figura 4.1 presenta el nuevo algoritmo de cálculo adoptado para cuantificar el balance hidrológico superficial. En cada paso de tiempo la demanda de evaporación (EVP) o evapotranspiración (EVTP) se ejerce en primer lugar sobre el agua precipitada sobre el área del vertedero (P) y la almacenada superficialmente (ALMSUP). El volumen evaporado desde estas dos fuentes constituye la evaporación superficial (EVS).

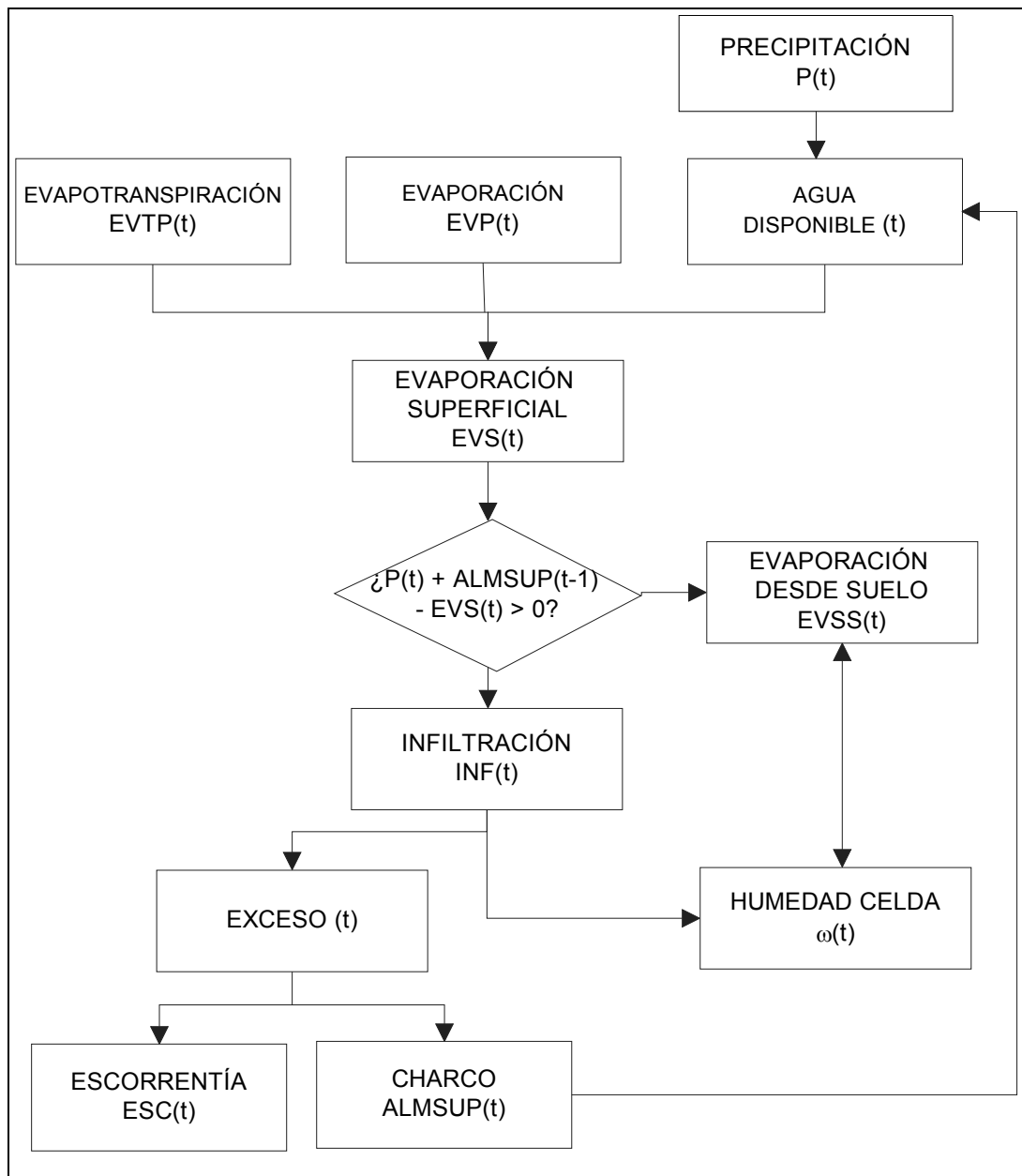


Figura 4.1. Algoritmo adoptado en el balance hidrológico superficial

Si tras este fenómeno de evaporación en superficie queda agua disponible, es decir, si $(P + ALMSUP - EVS)$ es mayor que cero, se infiltrará una parte, INF , dada por la ley de Horton. Este volumen INF aumenta el contenido de humedad de la celda, ω . El resto formará charcos ($ALMSUP$) hasta que supere una “altura máxima de charco”, a partir de la cual se produce escorrentía superficial (ESC), que es agua que no intervendrá en cálculos posteriores. El volumen acumulado en superficie ($ALMSUP$) permanece disponible para la infiltración o evapotranspiración en el paso de tiempo siguiente.

Si por el contrario las demandas EVP o EVTP son mayores que $(P + ALMSUP)$ entonces desaparecerá en forma de evaporación subsuperficial (EVSS) parte de la humedad presente en la “profundidad de evaporación”, interior a la celda superficial [EVP ó EVTP menos $(P + ALMSUP)$]. Si con el volumen contenido en la profundidad de evaporación no fuera suficiente, parte de la demanda de evaporación quedaría insatisfecha.

Las expresiones matemáticas adoptadas en cada caso se describen detalladamente en los siguientes puntos.

4.2.1.2. Modelo de evaporación-evapotranspiración

La elección de los modelos de evaporación y evapotranspiración está condicionada por el paso de tiempo en que se aplica el balance y los datos disponibles. Siendo el intervalo de tiempo de cálculo adoptado el horario, todas las expresiones habitualmente empleadas cuantifican estos fenómenos en períodos mucho mayores de manera que es obligado repartir los valores obtenidos en partes iguales correspondientes a tiempos más reducidos. Ante esta situación para emplear modelos contrastados han de adoptarse los que cuantifican la evaporación (EV) – evapotranspiración (EVT) diariamente, basados en los trabajos de Penman (1963). El problema es que al acortar el período considerado aumenta la información necesaria para su modelización, lo que obliga, como en otras ocasiones, a buscar un compromiso entre aproximación requerida en las estimaciones y datos disponibles. Considerando distintos niveles de información meteorológica posibles en las instalaciones de vertido, se han diferenciado tres casos:

- a) Existe un registro diario de evaporación en lisímetro situado en el lugar, tal y como exige la normativa (Directiva 1999/31/CE, Real Decreto 1481/2001).
- b) No existe tal registro, en cuyo caso se recurrirá a datos meteorológicos indirectos, bien obtenidos in situ bien en estaciones cercanas.
- c) Sólo se dispone de los datos de temperatura máxima y mínima diarias in situ (registro meteorológico básico).

Aunque sería deseable disponer de los datos a) o b), el caso c) es el esperable mayoritariamente, sobre todo cuando se pretenda simular la evolución de vertederos que ya están siendo explotados desde hace tiempo.

El esquema general de cálculo adoptado, común para todos, se presenta en Figura 4.2. Se calcula una evaporación potencial (EVP) o evapotranspiración potencial (EVTP) en el caso de celda sellada, que representan la pérdida por paso a la atmósfera en caso de disponibilidad ilimitada de agua. La evaporación se va produciendo sucesivamente a partir del agua llovida en ese paso de tiempo o almacenada en superficie en intervalos anteriores y del agua almacenada por el suelo, hasta completar el volumen potencial. Si el agua disponible para estos procesos no es suficiente una parte de la EVP (ó EVTP) no será ejercida. Si la suma del volumen precipitado más el almacenado en superficie es mayor que la demanda de evapotranspiración, quedará una parte disponible para infiltración (DISPINF). En caso de que la EVP (ó EVTP) supere (P+ALMSUP) pero no la humedad disponible en la profundidad de evaporación, $V\omega_{eva}$, el almacenamiento de la celda, $V\omega$, se verá reducido en una cantidad igual a la demandada.

Para mantener cierta uniformidad y coherencia entre los modelos utilizados para estimar las pérdidas de agua en los distintos casos, se ha modificado la formulación del modelo inicial. En la versión previa se hacía uso de gran cantidad de información (expresión de Penman) para el cálculo de evaporación en caso de disponibilidad total de agua, mientras que en el resto se optó por formulaciones empíricas mucho más simples y por ello menos adaptables a condiciones diferentes a aquellas en las que fueron obtenidas (fórmulas de Thornthwaite o Turc). Ahora se propone uniformizar la aproximación, haciendo uso del mismo tipo de modelo para todas las situaciones.

$ \begin{array}{l} \text{Si } EVP \text{ (ó EVTP)} < (P + ALMSUP) \left\{ \begin{array}{l} \text{ent. } DISPINF = (P + ALMSUP) \text{ EVP} \\ \text{si no } \text{ si } EVP - (P + ALMSUP) > V\omega_{eva} \end{array} \right. \\ \left. \begin{array}{l} \text{ent. } V\omega = V\omega - V\omega_{eva}; \\ EV = P + ALMSUP + V\omega_{eva}; \\ \text{si no } V\omega = V\omega - [EVP - (P + ALMSUP)]; \\ EV = EVP; \end{array} \right. \end{array} $
--

Figura 4.2. Algoritmo de cálculo de la evapotranspiración.

Los valores potenciales se calculan con las fórmulas de Penman, contrastadas por su aplicación en muchas situaciones. El método de estimación de los valores reales, que se presenta a continuación, coincide con el recomendado por el Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación del Reino Unido (Shaw, 1994) y pertenece

además al grupo de expresiones cuyo uso aconseja el CEDEX (Estrela, 1993) para la evaluación de los recursos hídricos en nuestro país.

EVAPORACIÓN POTENCIAL

a. Si sólo se dispone de los registros diarios de temperatura mínima y máxima.

La energía disponible para evaporación, E_0 , se estima mediante la ecuación de Hargreaves (Hargreaves y Samani, 1982), desarrollada precisamente para su empleo en casos de escasez o poca fiabilidad de los datos disponibles. La Sociedad Americana de Ingenieros Civiles (ASCE, 1996) recomienda este método como alternativa a la estimación de las variables climáticas necesarias en el método de Penman.

$$E_0 = \frac{0'0023 \cdot (T_{\max} - T_{\min})^{0.5} \cdot \left(\frac{T_{\max} + T_{\min}}{2} + 17'8 \right) \cdot Ra}{\lambda} \quad (4.1)$$

Donde T_{\max} : temperatura máxima del día; T_{\min} : temperatura mínima del día; Ra = radiación solar media, fija por latitud y estación ($\text{cal/cm}^2/\text{d}$); λ = calor latente de vaporización del agua ($\text{cal/cm}^2/\text{mm}$).

$$\lambda = 59'732 - 0'0564 \cdot \left(\frac{T_{\max} + T_{\min}}{2} \right) \quad (4.2)$$

b. Si se dispone de registros diarios meteorológicos “completos”.

Se emplea la fórmula de Penman resultante de la combinación de los métodos aerodinámico y de balance de energía para el cálculo de la evaporación potencial.

$$EVP = \frac{\Delta}{\Delta + \gamma} E_r + \frac{\gamma}{\Delta + \gamma} E_a \quad (4.3)$$

Donde EVP: evaporación potencial (mm de agua); E_r : energía neta de radiación (mm de agua); E_a : energía aerodinámica para la evaporación (mm de agua); Δ : pendiente de la curva de tensión de saturación-temperatura ($\text{mmHg}/^\circ\text{C}$); γ : constante psicrométrica = $0'485 \text{ mm Hg}/^\circ\text{C}$

$$E_r = \frac{R_l \cdot (1 - r) - R_o}{\lambda} \quad (4.4)$$

R_i : Radiación incidente (cal/cm²/d); R_o : radiación reflejada (cal/cm²/d); r : albedo, relación entre la radiación reflejada de onda corta y la radiación global incidente, 0'14 para suelo sin vegetación.

$$\lambda = 59'732 - 0'0564.T \quad (4.5)$$

T : temperatura media diaria del aire (°C).

$$R_f = R_a \cdot (0'18 + 0'55 \cdot \frac{n}{N}) \quad (4.6)$$

R_a : radiación solar, fija por latitud y época del año (cal/cm²/d); n/N : relación horas reales de sol / máximo periodo de insolación.

$$R_o = \sigma \cdot (T + 273)^4 \cdot (0'56 - 0'09 \cdot \sqrt{e}) \cdot (0'1 + 0'9 \cdot \frac{n}{N}) \quad (4.7)$$

σ : constante de Stefan-Boltzmann = $1'18944 \cdot 10^{-7}$ (cal/cm²/d/°K); e : tensión de vapor del aire (mmHg).

$$e = \varepsilon \cdot \frac{e_a}{100} \quad (4.8)$$

ε : humedad relativa (tanto por uno); e_a : tensión de vapor de saturación a la temperatura T (mm Hg).

$$e_a = 7'501 \cdot \exp\left(\frac{16'78.T - 116'9}{237'3 + T}\right) \quad (4.9)$$

$$E_a = 0'35 \cdot (0'5 + 0'54 \cdot v) \cdot (e_a - e) \text{ (mm/d)} \quad (4.10)$$

$$v = \frac{R \cdot 1000}{3600 \cdot 24} \quad (4.11)$$

v = velocidad del viento a 2 m sobre la superficie (m/s); R : recorrido del viento en 24 h (km).

$$\Delta = \frac{4098}{(T + 237'3)^2} \cdot 7'5 \cdot \exp\left(\frac{16'78.T - 116'9}{237'3 + T}\right) \quad (4.12)$$

EVAPOTRANSPIRACIÓN POTENCIAL

- a. Sólo se dispone de los registros diarios de temperatura mínima y máxima.

La evaporación potencial desde una superficie con vegetación puede estimarse como una fracción de la evaporación máxima desde una superficie libre de agua. A partir de los trabajos de Penman (Shaw, 1994) se adopta una fracción variable en cada mes de la evaporación estimada según (4.1): 60% en enero, febrero, noviembre y diciembre, 70% en marzo, abril, septiembre y octubre y 80% el resto.

- b. Se dispone de registros diarios “completos”.

Para cuantificar la evaporación y transpiración desde una superficie con vegetación la expresión empleada es similar a la empleada para superficies de agua libre, con las modificaciones que se expresan a continuación.

El valor del albedo, r , es 0'25, para tener en cuenta la variación en las propiedades reflectivas de la vegetación respecto al suelo desnudo.

$$E_a = 0'35.(1 + 0'54.v).(e_a - e) \quad (4.13)$$

Donde el factor 0'5 de la expresión (4.10) ha sido sustituido por 1 para tener en cuenta el efecto de rugosidad introducido por la vegetación.

Por último se introduce un coeficiente reductor (0'95) de la radiación reflejada que tiene en cuenta que la vegetación no radia como un cuerpo negro perfecto, de manera que la radiación reflejada en este caso se estima según (4.14).

$$R_0 = 0'95.\sigma.(T_a + 273'16)^4.(0'56 - 0'09.\sqrt{e}).(0'1 + 0'9.\frac{n}{N}) \quad (4.14)$$

EVAPORACIÓN SOBRE AGUA ALMACENADA

La evaporación potencial se ejerce directamente sobre el agua almacenada sobre la superficie.

EVAPORACIÓN DESDE EL SUELO

La profundidad de evaporación dependerá del tipo de suelo (sobre todo de la capilaridad, creciente cuanto menor sea el tamaño de los poros) y la vegetación

implantada (cantidad, profundidad de raíces, etc.), e incluso del estado de humedad previo a la evaporación.

Se define la “profundidad de evaporación” como el espesor de capa superior del vertedero cuya humedad puede abastecer el proceso de evapotranspiración. Experimentalmente, Schroeder *et al.* (1994) establecieron una relación entre la conductividad hidráulica saturada de un suelo y la profundidad máxima de evaporación (4.15). Con esta expresión se obtienen profundidades de evaporación entre fracciones de metro y varios metros, según el material considerado.

$$H_{eva} = 4'6068.1'5952^{-\log_{10} K} \quad (4.15)$$

H_{eva} : máxima profundidad de evaporación (pulgadas); K: conductividad saturada de la superficie (cm/s).

Para tener en cuenta que la profundidad de evaporación así obtenida no siempre abarca un material homogéneo sino que puede afectar a varias capas de conductividad diferente (cobertura intermedia y parte de residuos, por ejemplo), se sustituye en (4.16) la conductividad del material homogéneo por una equivalente al conjunto. La permeabilidad equivalente de un estrato formado por dos materiales de conductividades hidráulicas K1 y K2 y espesores en la dirección del flujo L1 y L2, respectivamente, para el caso de flujo transversal es K_{eq} .

$$K_{eq} = \frac{(L1 + L2).K1.K2}{K2.L1 + K1.L2} \quad (4.16)$$

Puesto que en el vertedero cabe esperar que la evaporación actúe sucesivamente sobre capas de menos (cobertura intermedia o final) a más permeables y que la diferencia entre los valores de permeabilidad suele ser de varios órdenes de magnitud, se simplifica en (4.16) despreciando el término K1.L2. Considerando además que la suma de L1 y L2 suele ser cercana al metro, se llega a (4.17), que es la expresión adoptada.

$$H_{eva} = 0'04615.1'5952^{-\log_{10} \left(\frac{K1}{L1} \right)} \quad (4.17)$$

K1: conductividad hidráulica de la capa superior (m/s); L1: espesor de la capa superior (m).

La humedad evapotranspirable en esta profundidad será la presente menos una fracción que queda retenida en el suelo en todo caso. Por similitud con los términos agronómicos se puede denominar “humedad disponible para evapotranspiración”, limitándola a la diferencia entre la humedad y un porcentaje de la capacidad de campo (H_{lim}) de la celda (como aproximación a la humedad higroscópica o al punto de marchitez; Revilla *et al.* (1982) proponen un 50%). Así, el volumen disponible para evapotranspiración será (4.18).

$$V_{eva} = H_{eva} \cdot (\omega - H_{lim} \cdot \omega_{CC}) \quad (4.18)$$

$H_{eva}(L)$: máxima profundidad de evaporación; ω : humedad de la celda; $H_{lim} \cdot \omega_{CC}$: humedad mínima en la celda.

4.2.1.3. Infiltración

Para cuantificar la velocidad de infiltración se conserva el modelo de Horton adoptado en la versión inicial. La expresión de Horton (4.19) reproduce el fenómeno de infiltración de una manera muy simplificada y ha sido ampliamente contrastada de forma experimental (es uno de los modelos empleados en el SWMM, por ejemplo), lo que facilita la elección fiable de los valores paramétricos en cada caso particular. Por otro lado se ajusta especialmente al paso de tiempo base del modelo (horario), que permite recalcular la capacidad de infiltración a medida que transcurre la lluvia.

$$f(t) = f_c + (f_0 - f_c) e^{-k \cdot t} \quad (4.19)$$

Donde $f_0(L \cdot T^{-1})$: velocidad de infiltración inicial, máxima; $f_c(L \cdot T^{-1})$: valor asintótico de la tasa de infiltración del suelo, empírico; $k(T^{-1})$: constante de disminución de f , función del terreno; t : tiempo.

El algoritmo de cálculo del volumen infiltrado se recoge en la Figura 4.3. En un paso de tiempo el volumen infiltrado (INF) será el dado por esta velocidad de infiltración $f(t)$ si la cantidad de agua disponible (DISPINF) tras los procesos de evapotranspiración es suficiente. En caso contrario el incremento de humedad interior vendrá dado por DISPINF y no quedará almacenamiento superficial de humedad.

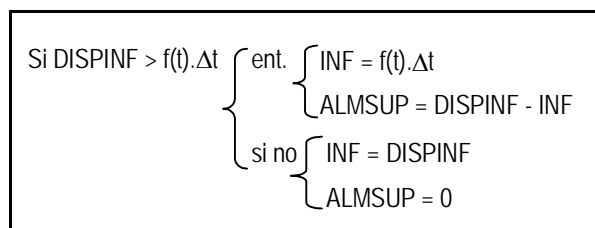


Figura 4.3. Algoritmo de cálculo de la infiltración

Huber y Dickinson (1988) recogen valores de las constantes del modelo propuestos por varios autores. Para f_c proponen emplear los valores de la Tabla 4.1, en función del tipo de suelo considerado. Para k , a falta de ensayos *in situ* proponen un valor de $4'14 \text{ h}^{-1}$ y para f_0 , que depende del tipo de suelo, su estado de humedad y vegetación, los de la Tabla 4.2.

Tabla 4.1. Valores orientativos de f_c (Musgrave, 1955)

Tipo de suelo	f_c (mm/h)
Arenas	11'4 – 7'6
Limo – arenoso	7'6 – 3'8
Limo – arcilloso	3'8 – 1'3
Arcillas	1'3 - 0

Tabla 4.2. Valores aproximados para f_0 (Huber y Dickinson, 1988)

Tipo, estado y vegetación del suelo	f_0 (mm/h)
Seco, con escasa o nula vegetación	
Arenoso	127
Limoso	76
Arcilloso	25
Seco, con vegetación densa	Valores anteriores x 2
Húmedo	
Cerca de la capacidad de campo	Anteriores/3
Cerca de la saturación	Valor cercano a f_c
Bajo la capacidad de campo	Anteriores/1'5 – 2'5

4.2.1.4. Escorrentía superficial

El agua que circula sobre la superficie del vertedero antes de ser recogida en los sistemas de drenaje superficial (cunetas perimetrales, canalizaciones centrales instaladas para reducir la longitud de drenaje y aumentar la capacidad de transporte, etc.), puede aumentar significativamente la infiltración.

Como ejemplo se analizó el efecto de la escorrentía sobre una celda vertedero con cobertura intermedia con características hidrológicas medias¹ y longitud de drenaje superficial de 200 m (lo que podría representar una red de cunetas perimetral en una anchura de vertido de 400 m). Sometida a un régimen de lluvias similar al de Santander en un año elegido al azar (con 786 mm de precipitación total), la infiltración calculada con los modelos propuestos sin considerar la escorrentía es de 621 mm. Simulando el escurrimiento superficial con el modelo de embalse no lineal, la altura de infiltración total es de 633 mm, un 2% mayor. El error que se cometería al calcular los volúmenes infiltrados en este caso será mayor cuanto mayor sea el área superficial. Y en general más importantes serán estas diferencias cuanto mayor sea la longitud de drenaje y menor la pendiente, lo que aumentaría el tiempo de permanencia del agua sobre el vertedero.

El sistema empleado para evacuar las aguas superficiales varía entre unas instalaciones y otras. Puede, desde conducirse las aguas sobre la capa de cobertura hacia las cunetas perimetrales dispuestas para su recogida conjuntamente con la escorrentía exterior (a), hasta aprovechar las conducciones de drenaje de lixiviado antes de ser cubiertas por el residuo (b). En este último caso existe el riesgo de que las conexiones al sistema de lixiviados se efectúen antes de tiempo, añadiendo el agua superficial al flujo contaminado del interior del vertedero, lo cual habrá que tener en cuenta también al evaluar los caudales correspondientes. Cuando las distancias recorridas por el agua son grandes, como pueden llegar a serlo en (a), el volumen lixiviado también aumentará como consecuencia de una mayor infiltración. Estas dos situaciones han de ser tenidas en cuenta en el modelo para reducir las fuentes de error en el mismo.

¹ Pendiente del 2% hacia las cunetas, coeficiente de rugosidad de Manning $n=0.02$, velocidades de infiltración máxima y mínima de 37.5 mm/h y 7.5 mm/h respectivamente, variando linealmente a lo largo de la primera hora de lluvia.

Estos efectos pueden simularse mediante una altura de acumulación de agua sobre la superficie en forma de “charco”. El agua así almacenada está sometida a los fenómenos de evaporación e infiltración.

Volviendo al ejemplo, en la celda con cobertura intermedia y 200 m de longitud de drenaje sometida a la pluviosidad descrita durante un año se produciría un volumen infiltrado igual al “real” si se permite que el agua no infiltrada alcance una altura máxima de acumulación o encharcamiento de 2,4 mm. Pero este valor variará, en un mismo vertedero, según la serie de lluvias que se considere.

A pesar de esta variabilidad, como primera aproximación a la simulación de los fenómenos de acumulación sobre la superficie, se incorpora al modelo el parámetro altura de acumulación máxima, dp , al que se dará un valor constante. Esta altura de encharcamiento simula la de un depósito sobre el área superficial del vertedero. El agua almacenada en él estará sometida a los efectos de evaporación e infiltración. Como en la “altura de encharcamiento” del modelo de Huber y Dickinson (1988) descrito en el capítulo 2, la lluvia puede ir acumulándose hasta que el volumen de agua supera el disponible, provocando la escorrentía (ver Figura 4.4). En este caso el agua sobrante (ESC) “desaparece” del balance de la celda pasando a formar parte del registro de caudales de escorrentía globales (agua recogida por los sistemas de evacuación o salida del vertedero). En estos volúmenes escurridos se diferenciará entre los recogidos en celdas cuya red de drenaje superficial es independiente (celdas “no conectadas”) y los procedentes de celdas con drenaje conectado al sistema de lixiviados (celdas “conectadas”), bien por práctica inadecuada, bien por decisión de gestión, para aumentar el caudal a recircular, etc.

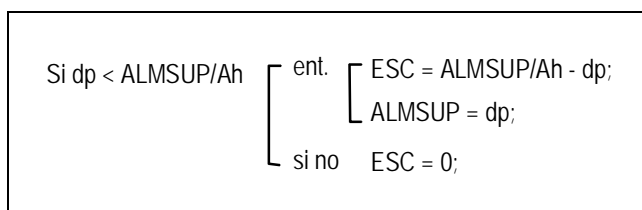


Figura 4.4. Algoritmo de cálculo de la escorrentía superficial. (Ah es la superficie horizontal de la celda).

Con el concepto de altura de acumulación se evita incorporar la complejidad de un nuevo modelo de transporte que transmita el caudal de escorrentía de unas celdas a otras, además del algoritmo iterativo para la obtención del caudal producido en cada una de ellas. A cambio se introduce la incertidumbre del nuevo parámetro dp , que, a

falta de simulaciones complementarias, deberá determinarse por ajuste de los resultados (parámetro “de calibración”).

4.2.2. Flujo en el interior del vertedero

4.2.2.1. Introducción

Aceptadas las hipótesis principales del modelo original (modelización del flujo en condiciones saturadas y tratamiento independiente de los movimientos horizontales y vertical), se ha replanteado el desarrollo y simplificación de las ecuaciones de transporte de humedad en el vertedero para corregir las expresiones inicialmente propuestas.

Una vez calculada la recarga a través del balance superficial, entre las celdas del vertedero se produce flujo vertical y horizontal (en ambas direcciones principales) y, en las celdas donde se haya definido un sistema de drenaje (sumidero), “flujo hacia el dren”. En cada paso de tiempo a partir de la altura de humedad libre inicial, conocida en cada celda, se propone calcular estos flujos sucesivamente: primero se determinan los flujos verticales y hacia el dren y finalmente el horizontal entre celdas. En cada paso las condiciones iniciales de humedad son las resultantes del cálculo anterior (ver Figura 4.5).

Salvo la nueva definición de la “altura de humedad libre” o “espesor saturado” las fórmulas del flujo vertical no sufren variación. El flujo horizontal se modifica corrigiendo signos y eliminando el “parámetro de calibración” R_h , sin significado físico directo. Finalmente se establece un nuevo modelo de transporte hacia los drenes radicalmente diferente al anterior, pues surge del análisis como proceso de transporte horizontal, tal y como ha sido observado por muchos autores [Wong (1977), McBean *et al.* (1982), Schroeder *et al.* (1994), Bagchi y Ganguli (1990)], y no vertical como se propone en MODUELO 1.

El modelo se completa con las expresiones de variación del almacenamiento y transmisividad del agua en los residuos a lo largo del tiempo, para simular más ajustadamente la historia del vertedero.

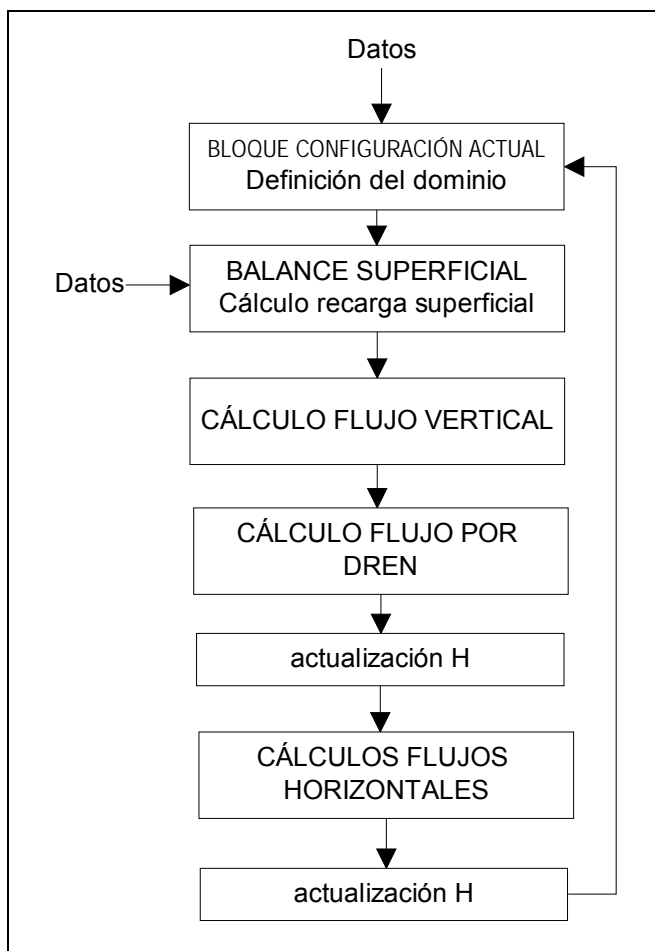


Figura 4.5. Esquema del algoritmo general de cálculo.

4.2.2.2. Modelo de flujo vertical

La hipótesis fundamental del modelo es que el flujo vertical se produce siempre en condiciones saturadas. Puesto que en su trayectoria vertical el agua atraviesa un espesor menos permeable (bien una capa de cobertura, bien una interfase o superficie de compactación) se asume que, una vez superada esta separación, la humedad presente en cada celda se acumula instantáneamente sobre su fondo. Este modelo responde a las grandes diferencias entre las conductividades hidráulicas de las capas que conforman el vertedero, que provocan una acumulación de agua sobre la cobertura a través de la cual se transmite más lentamente. Estos fenómenos se ven favorecidos por la existencia de canales preferenciales en el residuo que aumentan la velocidad de paso del agua a través de él.

Pueden darse dos casos: flujo hacia celda con cobertura y flujo hacia celda sin cobertura. Si la celda no tiene cobertura la permeabilidad condicionante será la de la

celda superior. Si tiene cobertura será la permeabilidad de la misma, varios órdenes de magnitud menor que la del residuo. En ambos casos se aplica la ley de continuidad a la humedad de una celda durante el paso de tiempo del modelo, suponiendo que no hay aportación externa de agua.

CASO 1. Flujo hacia celda con cobertura.

Introduciendo Darcy en la ley de conservación de la masa de agua en la celda ijk se tiene (4.20). El término de la izquierda representa la variación del contenido de humedad a lo largo del tiempo, que es igual a la velocidad con que se transmite hacia abajo (término a la derecha de la igualdad). La solución (4.21) se obtiene integrando (4.20) en el paso de tiempo Δt . El volumen transportado durante Δt será V_{vijk} . El resultado está limitado por las condiciones de humedad mínima de la celda igual a su capacidad de campo (4.23) y humedad máxima igual a su humedad de saturación (4.24).

$$n_e \frac{d\bar{H}_{ijk}}{dt} \cdot A_h = -K_v^c \frac{\bar{H}_{ijk} + e_c}{e_c} \cdot A_h \quad (4.20)$$

n_e : "porosidad drenable" del material de la capa, volumen de huecos disponibles para el movimiento del agua por unidad de volumen.

$$n_e = \omega_{SAT} - \omega_{CC}$$

\bar{H}_{ijk} : "espesor saturado" o "altura de humedad libre" (espesor de material cuyos poros están llenos de agua) sobre el plano inferior de la celda ijk .

$$\bar{H}_{ijk} = \frac{\omega - \omega_{CC}}{\omega_{SAT} - \omega_{CC}} \cdot H_{CELDA}$$

H_{CELDA} : altura de la celda considerada [L]; A_h : área en planta de la celda [L²]; K_v^c : permeabilidad de la cobertura de la celda inferior a la celda ijk [L.T⁻¹]; e_c : espesor de la cobertura de la celda inferior [L].

$$\bar{H}_{ijk}(t + \Delta t) = \left(\bar{H}_{ijk}(t) + e_c \right) \exp \left[- \frac{K_v^c \cdot \Delta t}{e_c \cdot n_e} \right] - e_c \quad (4.21)$$

$$V_{vijk} = \frac{\bar{H}_{ijk}(t) - \bar{H}_{ijk}(t + \Delta t)}{\Delta t} \cdot A_h \cdot n_e \quad (4.22)$$

$$\bar{H}_{ijk}(t + \Delta t) \geq 0 \quad (4.23)$$

$$\bar{H}_{ijk}(t + \Delta t) - \bar{H}_{ijk}(t) \leq H_{CELDA_{ijk-1}} - \bar{H}_{ijk-1}(t) \quad (4.24)$$

CASO 2. Flujo hacia celda sin cobertura.

Siendo el gradiente la unidad, (4.20) se transforma en (4.25). Las condiciones limitantes de las alturas de humedad son las mismas (4.23 y 4.24).

$$n_e \cdot \frac{d\bar{H}_{ijk}}{dt} = -K_v \quad (4.25)$$

$$\bar{H}_{ijk}(t + \Delta t) = \bar{H}_{ijk}(t) - \frac{K_v}{n_e} \cdot \Delta t \quad (4.26)$$

$$V_{vijk} = \frac{K_v}{n_e} \cdot \Delta t \quad (4.27)$$

K_v : permeabilidad vertical del material de la celda ijk [$L \cdot T^{-1}$].

Así, según el contenido de humedad de la celda inferior se calcula, en el paso de tiempo, el volumen de agua transportado verticalmente desde cada celda. Estas ecuaciones se aplican en todas las celdas interiores del vertedero. En el contorno inferior, que se ha asumido impermeable ($K_v = 0$) V_{vijk} es siempre nulo (no hay transmisión vertical). Las celdas en superficie transmiten la humedad como se ha descrito y además reciben la “recarga” por infiltración calculada en cada momento por el módulo “balance superficial”. En cada paso de tiempo los cálculos se realizan de manera consecutiva desde las capas inferiores hasta las superiores, actualizando sucesivamente las alturas de humedad transmisible (o “espesores saturados”) y obteniendo los V_{vijk} .

4.2.2.3. Modelo de flujo hacia el dren.

Cuando existe una conducción de drenaje sobre una superficie impermeable o de permeabilidad mucho menor que la capa considerada, la superficie libre del agua toma la forma representada en la Figura 4.6. Esta figura esquematiza la distribución de la altura de material saturado a lo largo del eje x, horizontal y normal a la dirección del dren, bajo una recarga de agua r [$L \cdot T^{-1}$] y en condiciones de flujo libre (altura de agua nula en el dren). Para calcular el caudal afluente a la conducción se considera la situación estacionaria en que el caudal de recarga es igual al caudal evacuado por el dren. El análisis se realiza por unidad de longitud de conducción, considerando que el flujo hacia el dren es unidimensional según la dirección transversal al mismo en el plano de drenaje, que forma un ángulo α con el horizontal. En estas condiciones y aplicando la ley de continuidad y de Darcy bajo la hipótesis de Dupuit (las superficies equipotenciales son verticales, $h = h(x)$ y no $h(x,z)$) en un espesor dx se cumple (4.28).

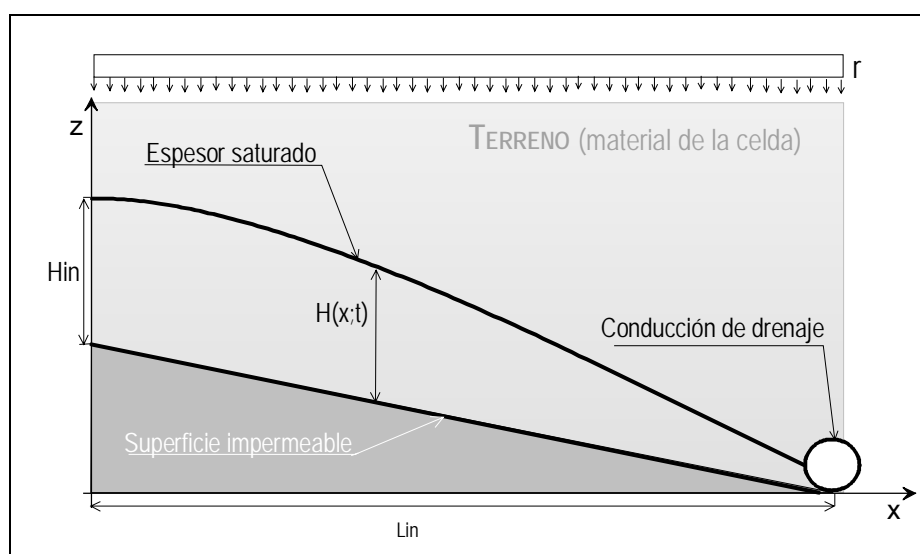


Figura 4.6. Esquema de definición del modelo de flujo al dren.

$$r \cdot dx = \cos \alpha \cdot K \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(H(x;t) \left(-\frac{\partial H(x;t)}{\partial x} + \tan \alpha \right) \right) dx \quad (4.28)$$

Integrando en toda la longitud de influencia de la conducción se llega a (4.29).

$$q_D [L^2 \cdot T^{-1}] = r \cdot L_{in} = \cos \alpha \cdot K \cdot \left(H(x;t) \left(-\frac{\partial H(x;t)}{\partial x} + \tan \alpha \right) \right) \Big|_0^{L_{in}} \quad (4.29)$$

Donde q_D : caudal evacuado por unidad de longitud del dren [$L^2 \cdot T^{-1}$]; r : velocidad de recarga [$L \cdot T^{-1}$], volumen aportado por unidad de superficie y tiempo; α : ángulo del plano de drenaje con el horizontal, hacia el dren; K : permeabilidad del material saturado [$L \cdot T^{-1}$]; H : altura saturada [L]; L_{in} : longitud de influencia (distancia a los puntos más alejados que drenan hacia el conducto considerado, medida en un plano transversal al mismo).

Aceptando flujo libre en el dren ($x=L_{in}$) se tiene que el término a la derecha de la igualdad es nulo en ese punto. En el otro extremo de la longitud de influencia ($x=0$) la altura libre es \bar{H}_{in} y el gradiente puede aproximarse como $\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\bar{H}_{in}}{L_{in}}$ (variación lineal entre el punto más alejado y el dren). Queda entonces (4.30).

$$q_D = \bar{H}_{in} \cdot K \cdot \left[\cos \alpha \cdot \frac{\bar{H}_{in}}{L_{in}} + \text{sen} \alpha \right] \quad (4.30)$$

Recordando el modelo de vertedero, la definición del sistema de drenaje se realiza según la discretización en celdas (ver Figura 4.7). Entre las celdas que constituyen la capa donde hay un sistema de drenaje se definen aquellas que contienen conducción, que puede ser de tipo Principal, Secundario 1 ó Secundario 2. Para cada tipo se caracteriza el drenaje mediante: área equivalente de conducción (A_{eq}), inclinación de la misma (i), ángulo de drenaje o del terreno hacia el dren (α), dirección del dren respecto al eje x (β) y longitud de influencia (L_{in}). El caudal afluente a la conducción será, según lo visto, (4.31).

$$Q_D [L^3 \cdot T^{-1}] = \bar{H}_{in} \cdot K \cdot \left[\cos \alpha \cdot \frac{\bar{H}_{in}}{L_{in}} + \text{sen} \alpha \right] \cdot L_{CELDA} \quad (4.31)$$

Este será el caudal evacuado por el dren siempre que la capacidad de la conducción de drenaje lo permita. Si se trata de un tubo la capacidad puede estimarse según la fórmula de Manning, mientras que en el caso de una zanja drenante su capacidad de transporte se aproxima con la ley de Darcy. En ambos casos se asume que la pendiente de la línea piezométrica es paralela a la de la propia conducción. Las expresiones (4.32) y (4.33) cuantifican el caudal máximo de transporte en cada caso, que no es directamente el volumen que la conducción puede extraer de cada celda de la malla. Teniendo en cuenta que el dren deberá transportar la suma de los caudales recogidos en todas las celdas servidas, la máxima capacidad de evacuación de la

conducción en cada celda se toma como Q_{MAX}/N , siendo N el número de celdas recorridas por el dren.

$$Q_{MAX} = \frac{4 \cdot \pi}{n} \cdot i^{1/2} \cdot \left(\frac{\phi}{4}\right)^{8/3} \tag{4.32}$$

$$Q_{MAX} = K_D \cdot i \cdot A_D \tag{4.33}$$

Q_{MAX} : máximo caudal admitido por la sección drenante [$L^3 \cdot T^{-1}$]; n: coeficiente de rugosidad de Manning del tubo; i: pendiente de la conducción.; Φ : diámetro del tubo [L]; K_D : permeabilidad de la zanja drenante [$L \cdot T^{-1}$]; A_D : área transversal de la zanja drenante [L^2].

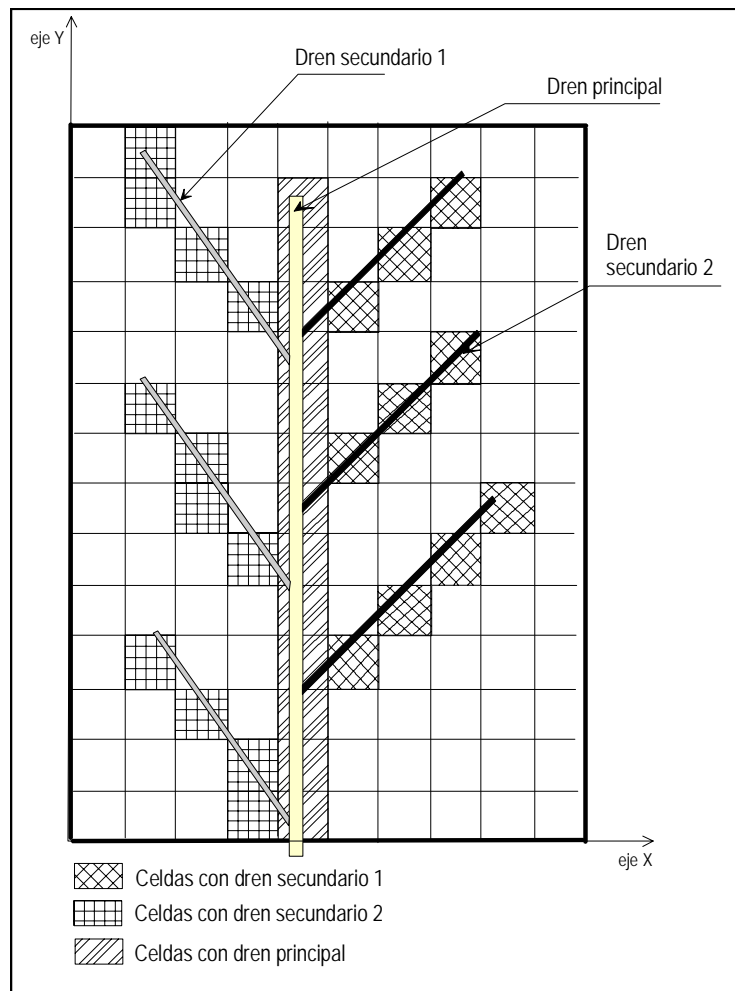


Figura 4.7. Esquema de definición del sistema de drenaje en MODUELO.

El programa calcula el caudal máximo de desagüe en cada celda a partir del área equivalente introducida, empleando la fórmula de Manning. Según lo expuesto, independientemente de cuál sea el tipo de conducción para evacuación de los lixiviados, fijados los parámetros i y n , el área equivalente puede calcularse con la fórmula (4.34). El caudal desaguado en la celda en cada paso de tiempo es el menor entre Q_D y el Q_{MAX} correspondiente.

$$A_{eq} = \left(\frac{Q_{MAX} \cdot \pi^{1/3} \cdot n}{N \cdot 4 \cdot i^{1/2}} \right)^{3/4} \quad (4.34)$$

La variación del almacenamiento de agua debida al caudal desaguado sólo se aplica a la celda que contiene el dren. Así, en el modelo de drenaje la altura libre de la celda disminuye, provocando afluencia de agua desde las celdas adyacentes al aplicar el modelo de flujo horizontal. De esta manera se logra reproducir el fenómeno que sucede realmente compatibilizando la “longitud de influencia” con la discretización en celdas, que pueden tener dimensiones diferentes a esta longitud. La variación de la altura libre en la celda con dren se calcula a partir de (4.35) que es la ecuación de continuidad de la humedad en una celda sin intercambio de agua aparte del drenaje durante el paso de tiempo.

$$n_e \cdot \Delta \bar{H}_{ijk} \cdot A_h = \bar{Q}_{Dijk} \cdot \Delta t \quad (4.35)$$

$\Delta \bar{H}_{ijk}$: variación de la altura saturada media en la celda ijk durante el paso de tiempo Δt .

Cuando el material saturado no es homogéneo, sino que la altura de saturación abarca varias capas diferentes se asume que el flujo horizontal hacia el dren sólo tiene lugar en la capa inferior, más permeable y de espesor D , de manera que (4.31) queda (4.36). Esta hipótesis se aplica en el caso más frecuente en el vertedero, en el que existe una capa de drenaje inferior completamente compuesta por gravas (de permeabilidad dos órdenes de magnitud mayor que la del residuo) a través de la cual el flujo horizontal se ve muy favorecido respecto a las capas superiores, en las que predominaría el transporte vertical.

$$Q_D [L^3 / T] = D \cdot K \cdot \left[\cos \alpha \cdot \frac{\bar{H}_{in}}{L_{in}} + \text{sen} \alpha \right] \cdot L_{CELDA} \quad (4.36)$$

4.2.2.4. Modelo de flujo horizontal

El modelo de flujo horizontal pretende obtener en cada paso de tiempo el volumen de agua transmitido de unas celdas a otras dentro de una misma capa.

Para plantear este modelo se analiza en primer lugar el transporte en una dimensión. En la Figura 4.8 se representa la curva de espesor de saturación o de altura de agua libre $H(l)$ en el terreno a lo largo de l , dirección del flujo sobre la superficie inferior. Según el esquema puede aplicarse el principio de conservación de la masa de agua en un volumen de control del terreno de anchura unidad y espesor dx . En este elemento se cumplirá que la variación del volumen de agua almacenada, correspondiente todo a agua libre, es debida al balance entre el caudal entrante $Q_{l-dl/2}$ y el saliente $Q_{l+dl/2}$. Tomando una anchura unidad perpendicular al plano del dibujo el volumen de agua en el elemento de control es $n_e.H(l).dl$. Supuesta aplicable la ley de Darcy los caudales son proporcionales al producto entre el gradiente de la carga hidráulica $h(l)$ y la sección transversal al flujo (en este caso $H(l).1$). Planteando la continuidad en términos de H y h se llega a (4.39).

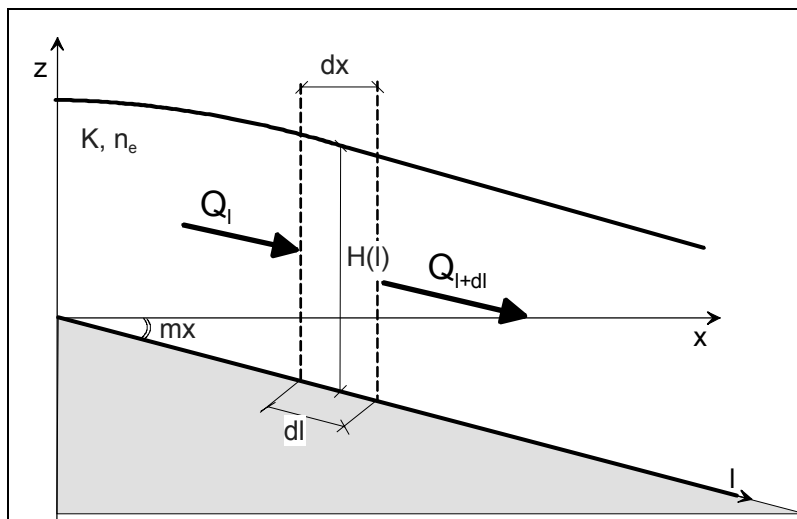


Figura 4.8. Esquema del flujo de humedad en una dirección.

$$Q_{l-dl/2} = -K.H(l) \frac{\partial h(l)}{\partial l} - \frac{\partial}{\partial l} \left(K.H(l) \cdot \frac{\partial h(l)}{\partial l} \right) \cdot \left(-\frac{dl}{2} \right) \quad (4.37)$$

$$Q_{l+dl/2} = -K.H(l) \frac{\partial h(l)}{\partial l} - \frac{\partial}{\partial l} \left(K.H(l) \cdot \frac{\partial h(l)}{\partial l} \right) \cdot \left(\frac{dl}{2} \right) \quad (4.38)$$

$$n_e \cdot \frac{\partial H(l)}{\partial t} \cdot dl = Q_{l-dl/2} - Q_{l+dl/2} = \frac{\partial}{\partial l} \left(K.H(l) \frac{\partial h(l)}{\partial l} \right) \cdot dl \quad (4.39)$$

K: permeabilidad del material saturado [L.T⁻¹]; H(l): espesor saturado en l [L]; h(l): altura piezométrica en l [L]; l: dirección del flujo, supuesto paralelo al plano inferior que define la superficie impermeable.

Por definición la altura piezométrica es (4.40).

$$h(l) = H(l) + z(l) = H(l) - l \cdot \text{sen}(mx) \quad (4.40)$$

mx: proyección del ángulo que forma el plano inferior con el horizontal en el plano xz.

Introduciendo el valor de h(l), sustituyendo l por x en (4.39) y considerando que la permeabilidad es constante en el medio se tiene (4.41).

$$n_e \cdot \frac{\partial H(x;t)}{\partial t} = \cos^2 mx \cdot K \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(H(x;t) \frac{\partial H(x;t)}{\partial x} - \tan mx \right) \quad (4.41)$$

Planteando lo mismo en dos dimensiones se llega a (4.42), ecuación que ha de cumplirse en todos los puntos interiores al vertedero en cada instante t.

$$n_e \cdot \frac{\partial H(x, y; t)}{\partial t} = \cos^2 mx \cdot K \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[H(x, y; t) \cdot \left(\frac{\partial H(x, y; t)}{\partial x} - \text{tg}mx \right) \right] + \cos^2 my \cdot K \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[H(x, y; t) \cdot \left(\frac{\partial H(x, y; t)}{\partial y} - \text{tg}my \right) \right] \quad (4.42)$$

my: proyección del ángulo que forma el plano inferior con el horizontal en el plano yz.

Las condiciones de contorno del problema son de dos tipos: en las zonas donde el residuo está en contacto con el aire (Γ1) el flujo es libre (altura de agua libre nula), y donde se apoya en el terreno (Γ2), que se supone impermeable, el flujo unitario normal a la superficie de contacto es nulo.

$$H(x, y, t) = 0 \quad \text{en} \quad (x, y) \in \Gamma1 \quad (4.43)$$

$$\frac{\partial H(x, y, t)}{\partial n} = 0 \quad \text{en } (x, y) \in \Gamma_2 \quad (4.44)$$

$\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma$, frontera del dominio constituido por la superficie del vertedero sobre la cual se calculan los flujos.

Por otro lado y recordando que el modelo se plantea desacoplado de los flujos verticales y hacia el dren, las condiciones iniciales vendrán dadas por los valores de las alturas saturadas obtenidas para cada punto a partir de los modelos aplicados previamente.

$$H(x, y; 0) = H_0(x, y) \quad (4.45)$$

El dominio puede variar en cada paso de tiempo (variando entonces también $\Gamma_i(t)$), como consecuencia del crecimiento del vertedero. Pero es conocido, dado por el Módulo "Configuración del terreno" y formado por la malla rectangular en cuyos nodos se discretiza H.

Para solucionar la ecuación (4.42) se plantean dos alternativas: "integrarla" celda a celda o resolverla planteando directamente un esquema de diferencias finitas. En MODUELO se ha adoptado directamente la malla que modeliza el vertedero en celdas para la resolución numérica de los modelos de transporte. Una malla más tupida ralentizaría la ejecución del programa (en cada nodo han de resolverse también en cada paso de tiempo las ecuaciones de degradación) y no aumenta la precisión de la solución, que ya viene condicionada por hipótesis anteriores como la discretización del vertedero o el propio algoritmo global de resolución de flujos. Una discretización grosera como la elegida puede hacer inestable un esquema de diferencias finitas "puras" y por ello se ha escogido la primera opción planteada: resolver la ecuación de transporte por integración en cada celda.

En el esquema que se describe a continuación se parte de los valores iniciales (en el tiempo t) de la altura media de saturación en cada celda $\bar{H}(i; t)$ que se define según (4.46). El desarrollo de la formulación se realiza en una dimensión para facilitar su comprensión, aunque posteriormente se extienda a las dos direcciones principales horizontales.

$$\bar{H}(i;t) = \frac{\int_{i-1/2}^{i+1/2} H(i;t).dx}{\int_{i-1/2}^{i+1/2} dx} \quad (4.46)$$

i: coordenada del punto central de la celda estudiada; i-1/2, i+1/2: coordenadas de los extremos izquierdo y derecho de la celda.

Introduciendo esta variable en la ecuación (4.41) al integrar entre (i-1/2) y (i+1/2) ambos miembros de la misma queda (4.47).

$$L_x.n_e.\frac{\partial \bar{H}(i;t)}{\partial t} = \cos^2 mx.K.\left(H(i;t)\left[\frac{\partial H(i;t)}{\partial x} - \tan mx \right] \right) \Bigg|_{i-1/2}^{i+1/2} \quad (4.47)$$

Aproximando los valores de la función y sus derivadas según (4.48), (4.49) y (4.50) (4.47) queda (4.51), de donde se puede obtener explícitamente una aproximación de $\bar{H}_i^{t+\Delta t}$.

$$\frac{\partial \bar{H}(i;t)}{\partial t} = \frac{\bar{H}_i^{t+\Delta t} - \bar{H}_i^t}{\Delta t} \quad (4.48)$$

$$H(i-1/2;t) = \frac{\bar{H}_i^t + \bar{H}_{i-1}^t}{2} \quad (4.49)$$

$$\frac{\partial H(i-1/2;t)}{\partial x} = \frac{\bar{H}_i^t - \bar{H}_{i-1}^t}{L_x} \quad (4.50)$$

$$L_x.n_e.\frac{\bar{H}_i^{t+\Delta t} - \bar{H}_i^t}{\Delta t} = \cos^2 mx.K.\left(\frac{\bar{H}_i^t + \bar{H}_{i+1}^t}{2} \left[\frac{\bar{H}_{i+1}^t - \bar{H}_i^t}{L_x} - \tan mx \right] - \frac{\bar{H}_i^t + \bar{H}_{i-1}^t}{2} \left[\frac{\bar{H}_i^t - \bar{H}_{i-1}^t}{L_x} - \tan mx \right] \right) \quad (4.51)$$

El valor de $\bar{H}_{ij}^{t+\Delta t}$, considerando ya el flujo en las dos dimensiones, será (4.52).

$$\begin{aligned} \overline{H}_{ij}^{t+\Delta t} = \overline{H}_{ij}^t + \frac{\cos^2 mx.K.\Delta t}{n_e.L_x} \cdot \left[\frac{\overline{H}_{i+1,j}^t + \overline{H}_{i,j}^t}{2} \cdot \left(\frac{\overline{H}_{i+1,j}^t - \overline{H}_{i,j}^t}{L_x} - \tan mx \right) - \right. \\ \left. - \frac{\overline{H}_{i,j}^t + \overline{H}_{i-1,j}^t}{2} \cdot \left(\frac{\overline{H}_{i,j}^t - \overline{H}_{i-1,j}^t}{L_x} - \tan mx \right) \right] + \\ + \frac{\cos^2 my.K.\Delta t}{2.n_e.L_y} \cdot \left[\frac{\overline{H}_{i,j+1}^t + \overline{H}_{i,j}^t}{2} \cdot \left(\frac{\overline{H}_{i,j+1}^t - \overline{H}_{i,j}^t}{L_y} - \tan my \right) - \right. \\ \left. - \frac{\overline{H}_{i,j}^t + \overline{H}_{i,j-1}^t}{2} \cdot \left(\frac{\overline{H}_{i,j}^t - \overline{H}_{i,j-1}^t}{L_y} - \tan my \right) \right] \end{aligned} \quad (4.52)$$

La ecuación se aplica en cada capa a cada punto central de las celdas que representan el vertedero, siendo los valores iniciales las \overline{H}_{ij}^t resultantes tras ejecutar el algoritmo de drenaje. Para establecer las condiciones de contorno se definen también las celdas exteriores adyacentes a las extremas del vertedero. Así, cuando la condición de contorno a la izquierda de una celda ij es de impermeabilidad se toma $\overline{H}_{i-1,j}^t = \overline{H}_{i,j}^t - L_x \cdot \tan mx$, si la condición es por la derecha $\overline{H}_{i+1,j}^t = \overline{H}_{i,j}^t + L_x \cdot \tan mx$, y lo equivalente cuando son condiciones en el eje y. Si la condición es de celda adyacente vacía se toma $\overline{H}_{i-1,j}^t = 0$, $\overline{H}_{i+1,j}^t = 0$, $\overline{H}_{i,j+1}^t = 0$ ó $\overline{H}_{i,j-1}^t = 0$ según en qué lado de la celda ij sea el límite. Cada término de la ecuación (4.42) se calcula por separado, de manera que las posibles complicaciones en la aplicación de las condiciones tipo Neumann en algoritmos de diferencias finitas desaparecen.

Los volúmenes transportados hacia la celda ij desde las contiguas en el paso de tiempo serán los siguientes:

$$V_{ij}^{i+1,j} = L_y \frac{\cos^2 mx.K.\Delta t}{2} \cdot (\overline{H}_{i+1,j}^t + \overline{H}_{i,j}^t) \left(\frac{\overline{H}_{i+1,j}^t - \overline{H}_{i,j}^t}{L_x} - \tan mx \right) \quad (4.53)$$

$$V_{ij}^{i-1,j} = -L_y \frac{\cos^2 mx.K.\Delta t}{2} \cdot (\overline{H}_{i,j}^t + \overline{H}_{i-1,j}^t) \left(\frac{\overline{H}_{i,j}^t - \overline{H}_{i-1,j}^t}{L_x} - \tan mx \right) \quad (4.54)$$

$$V_{ij}^{i,j+1} = L_x \frac{\cos^2 my.K.\Delta t}{2} \cdot (\overline{H}_{i,j+1}^t + \overline{H}_{i,j}^t) \left(\frac{\overline{H}_{i,j+1}^t - \overline{H}_{i,j}^t}{L_y} - \tan my \right) \quad (4.55)$$

$$V_{ij}^{i,j-1} = -L_x \frac{\cos^2 my.K.\Delta t}{2} \cdot (\overline{H}_{i,j}^t + \overline{H}_{i,j-1}^t) \left(\frac{\overline{H}_{i,j}^t - \overline{H}_{i,j-1}^t}{L_y} - \tan my \right) \quad (4.56)$$

El desarrollo realizado hasta este punto sólo considera la existencia de una capa horizontal dentro de la cual se establecen dos zonas, una saturada (por debajo de H(l) en la Figura 4.8) y una no saturada en la que, según el modelo planteado, la humedad coincide con la capacidad de campo. En MODUELO las expresiones han de aplicarse en el modelo discretizado verticalmente. El vertedero queda dividido en capas horizontales en las que el transporte puede producirse entre celdas saturadas donde, al superar el espesor saturado la altura de la propia celda, la altura piezométrica correspondiente también es mayor que ésta última. En estos casos la sección útil de transporte al considerar el flujo entre celdas de una misma capa está limitada por la altura de la celda. Mientras, la energía dada por el gradiente piezométrico ha de calcularse a partir del espesor saturado real sobre la celda. Por este motivo la altura libre de las celdas saturadas ha de ser sustituida por su altura “física” en los factores que en (4.42) representan la sección media de transporte $\left(\frac{\bar{H}_{i+1,j}^t + \bar{H}_{i,j}^t}{2}, \frac{\bar{H}_{i,j}^t + \bar{H}_{i-1,j}^t}{2}, \text{ etc.}\right)$. La altura libre continúa siendo la total en los factores de gradiente $\left[\left(\frac{\bar{H}_{i+1,j}^t - \bar{H}_{i,j}^t}{L_x} - \tan mx\right), \left(\frac{\bar{H}_{i,j+1}^t - \bar{H}_{i,j}^t}{L_y} - \tan my\right), \text{ etc.}\right]$, que ahora será la suma de las alturas de las celdas situadas sobre la considerada (ésta incluida) que están saturadas más el espesor saturado de la primera celda no saturada (avanzando hacia la superficie).

4.2.2.5. Variación de las condiciones de transporte de la humedad

Como se adelantaba en el capítulo 2, para simular el flujo de humedad en el vertedero hay que considerar la variación de sus propiedades hidráulicas en el tiempo.

A medida que el vertedero crece en altura y se degrada las capas inferiores, más antiguas, se van compactando, reduciendo su capacidad de retención y almacenamiento de agua y haciendo su transmisión más lenta. En el modelo presentado estos fenómenos se traducen en una disminución de la humedad de saturación, la capacidad de campo y la permeabilidad del residuo.

La variación de las características hidráulicas del resto de materiales se considera despreciable frente a la de los residuos, en los que la compactación y degradación tienen mucha más importancia.

- La humedad de saturación

La cantidad de agua que el residuo puede ir acumulando depende directamente del volumen de huecos accesibles en relación a la masa o volumen total (huecos más sólido). Por tanto, estudiar cómo varía la humedad de saturación o contenido de agua por unidad de masa o volumen cuando todos los poros están llenos de líquido equivale a seguir la evolución de la porosidad (n). Y ésta a su vez está estrechamente ligada a los fenómenos de asentamiento de los residuos. En la versión de MODUELO objeto de este trabajo no se contemplan estos fenómenos, pero sí se expone a continuación un breve análisis sobre su posible modelización que permite comprender qué efecto tiene el no considerarlos.

Aceptando que los asentamientos son consecuencia de dos causas principales, la variación de la porosidad tendrá también dos componentes: una función de la sobrecarga, que da lugar a la compresión del residuo y otra función de la degradación, que elimina masa de sólido y modifica su estructura.

A.- COMPONENTE DE “COMPRESIÓN” O “PRIMARIA”

Se corresponde con la reducción del volumen de huecos como consecuencia de una mayor presión sobre la celda. En un paso de tiempo la variación primaria de la porosidad, Δn_{1^a} , será (4.57), donde ΔV_{1^a} es la reducción de volumen como consecuencia de la compresión.

$$\Delta n_{1^a} = \frac{\Delta V_{1^a}}{V} \quad (4.57)$$

B.- COMPONENTE DE “DEGRADACIÓN” O “SECUNDARIA”

La degradación y disolución del sólido produce una doble pérdida de volumen. Se pierde masa sólida con el lixiviado y además se genera una variación en la n que puede ser positiva o negativa (Manassero *et al.*, 1997). En residuos con buen nivel de compactación la pérdida de masa se traduce en un aumento de la n , pues el esqueleto principal en la celda se conserva, siendo mínima la reducción de volumen. En otros casos la degradación provoca no sólo un arrastre de masa sino también una reordenación de la masa remanente, disminuyendo el espacio libre entre sólidos (4.58). ρ_{sol} , densidad del sólido, también puede sufrir variaciones por cambio en la estructura del residuo al degradarse, pero en primera aproximación, aceptando que

esta variación no es importante, se asume constante. Podrá entonces hallarse ρ_{sol} a partir de las características iniciales del residuo (4.59).

$$\Delta n_{2^a} = \frac{\Delta V_{2^a}}{V} - \frac{\Delta M}{\rho_{sol}} \quad (4.58)$$

$$\rho_{sol} = \frac{\rho_{ap} - \omega}{1 - n} \quad (4.59)$$

Donde ρ_{ap} y ω son la densidad aparente y humedad inicial del residuo respectivamente.

Con estas condiciones y conocidos los asentamientos, la variación de $\omega_{SAT,VOL}(z;t)$, la humedad de saturación expresada en fracción volumétrica, será igual a la suma de la evolución primaria y secundaria de la porosidad, para cuyo seguimiento es necesario calibrar el modelo de asentamientos.

El no incorporar estos modelos en el programa equivale a asumir que la pérdida de masa por disolución contrarresta los efectos de la compactación primaria.

- La capacidad de campo

Siguiendo la primera versión del programa, se ha adaptado el modelo de Huitric *et al.* (1980), que relaciona la capacidad de campo de la masa de residuos en una capa *i* con el peso de las capas que la cubren a la forma de expresión de la humedad en MODUELO (% en volumen). Teniendo en cuenta la relación entre la humedad expresada como porcentaje del peso de agua sobre el peso del sólido, ω_{ps} , y la expresada como porcentaje en volumen, ω_{VOL} , (4.60), el modelo de capacidad de campo será (4.61).

$$\omega_{ps} = \frac{\omega_{VOL}}{\gamma_{seco}} = \frac{\omega_{VOL}}{M(t)/V(t)} \quad (4.60)$$

γ_{seco} : peso específico del residuo seco, peso de sólido por unidad de volumen aparente; $M(t)$: masa de residuo seco; $V(t)$: volumen aparente ocupado por la masa $M(t)$.

$$\omega_{CC} = \left[CCa_{ps} - \frac{CCa_{ps} - CCb_{ps}}{1 + CCc/W} \right] \cdot \frac{M(t)}{V(t)} \quad (4.61)$$

Donde ω_{CC} : humedad de capacidad de campo, como fracción volumétrica; CCa_{ps} , CCb_{ps} y CCc : parámetros del modelo tal y como los presenta el autor. $CCa_{ps}(\%)$, y $CCb_{ps}(\%)$ son las capacidades de campo (peso de agua sobre peso de residuo seco) inicial y final respectivamente y $CCc(\text{kg}/\text{m}^2)$ el parámetro de variación de ω_{CC} con la sobrecarga; W : sobrecarga existente sobre el residuo (kg/m^2).

Así se incorporan en la capacidad de campo los efectos de compactación (variación de la masa por unidad de volumen). Si el modelo de vertedero no incorpora el asentamiento, como ocurre en la versión presentada, $\frac{M(t)}{V(t)}$ se mantiene constante e igual a la densidad seca inicial.

.- La permeabilidad de los residuos.

Siguiendo con las expresiones que simplifican el efecto de la compactación en el tiempo en una sola variable, se ha adopta el modelo publicado por Demirekler *et al.* (1999), en el que la permeabilidad varía con la sobrecarga sobre el residuo según la ley (4.62).

$$K_i = K_0 \cdot \exp(-a_K \cdot W_i) \quad (4.62)$$

Esta ley deberá ser ajustada según observaciones experimentales en cada vertedero, pero por defecto en este trabajo se adapta la constante de variación de K con la profundidad propuesta por Rowe y Nadarajah (1996). Estos autores determinan un valor para el parámetro de disminución exponencial de la permeabilidad en profundidad cuya aplicabilidad fue contrastada en los trabajos de Landva *et al.* (1998). El valor de esa constante es de 0'269, así que el de a_K será (4.63), donde γ es el peso específico medio de los materiales sobre la capa considerada.

$$a_K = 0'269 / \gamma \quad (4.63)$$

4.3. MÓDULO DE BIODEGRADACIÓN

4.3.1. Caracterización del residuo

Para modelizar la degradabilidad del residuo en el vertedero se mantiene el concepto del modelo original, pero se redefine la forma de establecer qué partes pueden ser descompuestas y de especificar las restricciones locales a la degradación.

Si bien el residuo está formado por compuestos orgánicos e inorgánicos, el modelo de biodegradación se centra sólo en procesos que afectan a los primeros. La materia orgánica está formada por dos fracciones: una biodegradable y una no biodegradable. En la fracción biodegradable una parte es rápidamente hidrolizable (MS_{rhb}) y otra lentamente hidrolizable (MS_{lhb}). Ambas se caracterizan por su “fórmula química” ($Cc_{rhb}Hh_{rhb}Oo_{rhb}Nn_{rhb}Ss_{rhb}$ y $Cc_{lhb}Hh_{lhb}Oo_{lhb}Nn_{lhb}Ss_{lhb}$).

Para identificar cada una puede darse la situación en que se disponga de una caracterización del residuo por clasificación en grandes componentes (papel, cartón, residuos de alimento, plásticos, metales, etc.) o no. En cualquier caso sólo un ensayo de biodegradación de la masa establecería claramente la división entre fracciones, pero pueden realizarse algunas aproximaciones.

Conociendo la masa que de cada componente llega al vertedero se puede llegar a estimar su biodegradabilidad a partir de estudios de potencial bioquímico de metano (PBM), en los que se obtiene la cantidad de metano a que puede dar lugar el residuo estudiado al degradarse completamente en condiciones de laboratorio.

Por otro lado se dispone también de las “fórmulas químicas” representativas de cada componente ya recogidas en MODUELO 1 (Tabla 2.4). Con esta formulación y siguiendo las reacciones teóricas de degradación total (2.24) se llega a cantidades de metano superiores a las experimentales, lo cual es lógico si se recuerda que no toda la masa que forma cada componente es biodegradable.

La relación PBM observado (experimental) / PBM teórico de cada componente es el factor “ f_{bio} ”, que aplicado a la masa total del mismo que llega a vertido permite obtener la fracción que podría degradarse (“fracción biodegradable o gasificable”) en condiciones ideales. “ f_{bio} ” se aplica a todos los elementos químicos de cada componente, de manera que la fórmula química de la fracción biodegradable del mismo conserva las proporciones entre elementos de la fórmula original. Las masas biodegradables obtenidas para cada componente con igual velocidad de hidrolización

(Tabla 4.3), se suman elemento a elemento hasta dar lugar a las fórmulas globales de toda la materia biodegradable ($C_{c_{rhb}}H_{h_{rhb}}O_{o_{rhb}}N_{n_{rhb}}S_{s_{rhb}}$ y $C_{c_{lhb}}H_{h_{lhb}}O_{o_{lhb}}N_{n_{lhb}}S_{s_{lhb}}$). Haciendo lo mismo con el factor complementario ($1 - f_{bio}$) se obtienen las masas de materia no biodegradable. De esta manera cobra sentido el parámetro “ f_{bio} ” original, eliminando además el uso innecesario de “ f_{hidro} ”.

En la Tabla 2.4 se muestran los valores de biodegradabilidad final (fracción gasificable, $f_{hidro} \cdot f_{bio}$) que se proponían en MODUELO 1, junto a los valores publicados por otros autores. Para su comparación se muestran en estos últimos el PBM y la biodegradabilidad correspondiente al mismo, expresada como porcentaje de masa biodegradable respecto al total. Esta última se obtiene por aplicación de la transformación teórica (expresión 2.24) “a la inversa” (a partir de la cantidad de metano producido se obtiene la proporción degradable del componente). Se observa que los valores propuestos en MODUELO 1 quedan muy por debajo del resto, moviéndose éstos en rangos muy similares. Promediando los valores publicados por Tchobanoglous *et al.* (1994) y Bonori *et al.* (2001), Barlaz *et al.* (1997) y Harries *et al.* (2001) se obtienen las propuestas para f_{bio} en MODUELO 2.

Tabla 4.3. Clasificación propuesta en MODUELO para los componentes principales del residuo según su biodegradabilidad.

RÁPIDAMENTE BIODEGRADABLES	LENTAMENTE BIODEGRADABLES	INERTES
Papel	Madera	Plásticos
Cartón	Textiles	Vidrio
Residuos de comida	Goma y cuero	Metales
	Residuos de poda y siega	Otros inorgánicos
	Materiales celulósicos	

A la masa “gasificable”, definida por “ f_{bio} ”, se añade, en la primera etapa de degradación, otro tipo de sustancias no incluidas en el primer modelo: aquellas que, no siendo degradables por los microorganismos, pueden ser “arrastradas” por efecto de la hidrólisis de los componentes de su entorno o consecuencia directa de procesos

físico-químicos como arrastre con el agua en su percolación y/o disolución química. Esta parte trata de modelizar los compuestos orgánicos no biodegradables que aparecen en el lixiviado y muchas veces se agrupan bajo la denominación "compuestos húmicos" o DQO "refractaria". Se ha incluido a través de un coeficiente " f_{ar} ", "fracción de arrastre", tal que la materia orgánica inerte que irá pasando al lixiviado acompañando a la sustancia rápidamente hidrolizada y a la hidrolizada lentamente serán, respectivamente, $f_{ar} \cdot MS_{rhd}$ y $f_{ar} \cdot MS_{lhb}$.

Los "parámetros locales de calibración" k_{hidro} y k_{bio} propuestos en la versión inicial se sustituyen por un nuevo factor único, "de accesibilidad", que separa la parte de la fracción biodegradable que será disuelta en el vertedero de la que no podrá serlo por diversas razones, como quedar encerrada en zonas aisladas del agua. Este factor " f_{ac} ", "fracción degradable accesible", aplicado a la masa degradable en condiciones ideales, expresa la parte de la misma que será realmente hidrolizada en las condiciones específicas del vertedero estudiado. Su valor variará de unos lugares a otros entre 0 (los microorganismos no pueden acceder a ninguna fracción del residuo y el vertedero se mantendría "momificado") y 1 (la situación ideal en que toda la materia degradable puede ser descompuesta).

La Figura 4.9 resume la nueva conceptualización del residuo según su biodegradabilidad en vertedero. Se trata de un esquema del reparto de masa de un componente en las distintas clases.

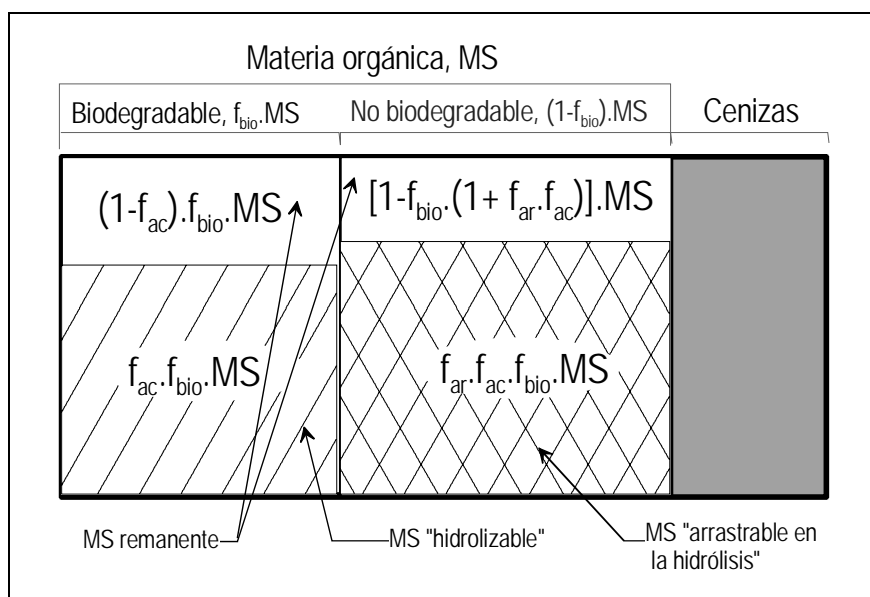


Figura 4.9. Descomposición de un componente del residuo según fracciones de biodegradabilidad

Si no se conoce la composición por clases de un residuo ya depositado deberá recurrirse a ensayos de degradación que podrían completarse con estudios de simulación. El resultado será una división de la masa orgánica en tres fracciones de las cuales las dos degradables (la rápida y la lentamente hidrolizable) los son en su totalidad. Para definir las se establece la composición química global del residuo (carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, azufre y cenizas) y dos factores " f_{bio} ", " f_{biorap} " y " f_{biolen} ", que definen las dos fracciones degradables. El resto del modelo no sufre variación. Esta vez el material no biodegradable que se arrastrará en la hidrólisis tiene la misma fórmula para la hidrólisis rápida y la lenta.

4.3.2. Procesos de degradación

4.3.2.1. Bioquímica

Para simular la aparición sucesiva de materia contaminante en el lixiviado y de biogás la secuencia de descomposición de los residuos se simplificó inicialmente, como en MODUELO 1, en dos etapas: la "hidrólisis" y la "gasificación". Ambas etapas se redefinían incorporando además un nuevo fenómeno de gasificación "consumidora de hidrógeno". Sin embargo las modificaciones propuestas entonces, detalladas en el Anejo I, conducían a emisiones de hidrógeno muy por encima de las esperadas y si, para "evitarlas" se imponían tasas de metanización a partir de hidrógeno altas se obtenían máximos de generación de CH_4 anormalmente tempranos. Por este motivo se ha replanteado de nuevo el modelo.

Este nuevo planteamiento pretende resolver los problemas principales encontrados en las aplicaciones del modelo anterior, relacionados con la simulación de la contaminación nitrogenada y la composición del biogás. En MODUELO 1 el nitrógeno disuelto permanece en forma orgánica hasta que se produce la metanización. Esto da lugar a concentraciones de amonio menores que las observadas. En realidad la amonificación no es simultánea con la generación de metano, sino que se produce mucho antes. La etapa que retrasa la aparición del nitrógeno amoniacal disuelto es la hidrólisis de la materia orgánica y así se ha asumido en el nuevo modelo. En la "hidrólisis" se genera directamente NH_3 a partir del material biodegradable, mientras que el nitrógeno orgánico lixiviado solo corresponde a los compuestos no biodegradables arrastrados.

Por otro lado, al simular en una sola etapa todos los fenómenos de generación de gas que en realidad tienen lugar secuencialmente la composición del biogás resultante

solo era sensible a los cambios en la "fórmula química" del material biodegradable. No se podían simular variaciones temporales y además se despreciaba la masa perdida como gas antes de la metanización, lo que conducía a valores de producción de metano por encima de los reales. El nuevo modelo, cuyas reacciones se resumen en las tablas de las páginas C4-39 y C4-40, trata de resolver esa dificultad introduciendo la generación de gas (CO_2 y H_2) en etapas previas dentro de la "hidrólisis" y la "acetogénesis".

Tratando de resolver estas dificultades y mejorar la estimación de la contaminación orgánica del lixiviado y del biogás a lo largo del tiempo, se ha llegado a la formulación del modelo que se presenta a continuación. Las dos etapas de "hidrólisis" y "gasificación" se redefinen, incorporando una etapa intermedia que podría equivaler a la acetogénesis a partir de compuestos intermedios productos de la hidrólisis. En los siguientes párrafos se describe cada una, cuyas expresiones matemáticas se reúnen en la Tabla 4.6.

.- Hidrólisis.

La "hidrólisis" representa el paso de la materia sólida al lixiviado por degradación biológica de los compuestos orgánicos o por acciones de "arrastre" químico o físico. Se distinguen dos reacciones, según el tipo de materia que sufra el proceso: biodegradable o no biodegradable.

Mientras en MODUELO 1 no se especifican los compuestos que van apareciendo en el proceso de descomposición de la materia biodegradable, ahora las sustancias sólidas de este tipo dan lugar directamente a "compuestos intermedios", ácido acético, dióxido de carbono e hidrógeno, y amonio y ácido sulfhídrico consecuencia de la degradación de la materia nitrogenada y el azufre. Los "compuestos intermedios" son mayoritariamente ácidos carboxílicos de la descomposición de carbohidratos, pero su "fórmula química global" dependerá de la proporción de carbohidratos/proteínas/grasas del residuo, así como de las vías biológicas predominantes.

Las etapas se definen tomando como base el balance de sustrato en ecosistemas anaerobios similares al fango en digestión publicado por Zhender *et al.* (1982). Estos autores estiman que en estos ecosistemas anaerobios un 70% del metano es producido a partir de acetato. Siguiendo el esquema de la figura 2.1 cada mol de carbono a descomponer generará en primer lugar aproximadamente 0'76 mol de carbono en forma de "compuestos intermedios", 0'20 mol de carbono en forma de acetato y 0'04 de dióxido de carbono.

Para dotar de mayor generalidad al programa, considerando que las vías de degradación variarán entre unos vertederos y otros, las proporciones estequiométricas en que van apareciendo los distintos productos de descomposición son parámetros a confirmar en cada caso, en función del tipo de compuestos en degradación y las condiciones ambientales. Se ha denominado " f_{AC} " a la fracción de carbono que se convierte en acetato en las etapas de hidrólisis y fermentación (20% en el esquema de la Figura 2.1). f_{CHO} (76% en el esquema) es la fracción de carbono convertido en compuestos intermedios, y por tanto $(1 - f_{AC} - f_{CHO})$ será la proporción que genera CO_2 en esta fase. Su valor es fijo en cada simulación pero podrá variarse si se dispone de información sobre los mismos o se desea realizar un análisis de sensibilidad. En todo caso por defecto se propone la distribución publicada en Zhender *et al.* (1982).

Como se recoge en la Tabla 4.4, el planteamiento matemático de este paso varía según la composición del residuo original. Las hipótesis fundamentales para el mismo son:

- Se establecen las vías metabólicas observadas por Zhender *et al.* (1982).
- El nitrógeno y el azufre orgánicos son totalmente reducidos en esta etapa a NH_3 y SH_2 .
- Si el residuo original tiene hidrógeno suficiente los compuestos intermedios pueden ser representados por la fórmula general de los ácidos carboxílicos $C_nH_{2n}O_m$.

Pueden presentarse dos casos: si existe hidrógeno suficiente para satisfacer la demanda de reducción del nitrógeno y el azufre, puede haber cierta liberación de este gas (primer valor de h_{bb} en la Tabla 4.4). En caso contrario, aceptando la hipótesis de que el nitrógeno y el azufre se reducen por completo en este paso, la "fórmula global" de los compuestos intermedios varía (contenido en hidrógeno menor que el de un conjunto formado sólo por ácidos grasos) (segundo valor de e_{hb} en la Tabla 4.4).

Por su parte la materia no biodegradable que es arrastrada no varía su composición, no dando lugar a subproductos específicos (3 y 4 en Tabla 4.4), como se proponía para todos los compuestos en MODUELO 1.

- Acetogénesis

Consiste en la transformación de los "productos intermedios" en acetato, dióxido de carbono e hidrógeno. La proporción de carbono de los compuestos intermedios que

se transforma en acetato se ha denominado " f_{AC} ", que en el esquema de Zehnder *et al.* (1982). Adoptaría un valor de 0'68 (0'52x0'76), que es el que se propone por defecto.

.- Gasificación

El proceso final de descomposición transforma la materia en biogás y por eso se ha denominado "gasificación". La creación de metano en sistemas biológicos se produce a través de dos vías: por utilización del acetato (metanógenos acetófilos) y por reducción del CO_2 con H_2 (metanógenos hidrogenófilos). Lee *et al.* (1993) y El-Fadel *et al.* (1996a) proponen simular la generación de metano por reducción del dióxido de carbono como una fracción de la producida a partir de acetato. Para ello se basan en el esquema de la Figura 2.1 según el cual el 28% del metano total en un sistema cerrado es generado en la vía hidrogenofílica, proviniendo el resto de la acetofílica. Esto no significa que las cinéticas de metanización sean simultáneas. Cada una tendrá lugar en función de la presencia de los compuestos origen y las especies consumidoras, y por tanto de manera independiente. En este modelo se proponen dos transformaciones independientes (5 y 6 en la Tabla 4.5), una para cada proceso de generación de metano.

Tabla 4.4. Reacciones de degradación del residuo según MODUELO 2 (I). Hidrólisis.

Nº	DESCRIPCIÓN	TRANSFORMACIÓN	VELOCIDAD
1	Hidrólisis del material rápidamente hidrolizable biodegradable	$Cc_{rhb}Hh_{rhb}Oo_{rhb}Nn_{rhb}Ss_{rhb} \rightarrow f_{CHO} \cdot c_{rhb} \cdot C_{CHO} + e_{rhb} \cdot H_{CHO} + [o_{rhb} + (-2 + 2 \cdot f_{CHO} + f_{AC}) \cdot c_{rhb}] O_{CHO}$ $f_{AC} \cdot c_{rhb} \cdot CH_3COOH + (1 - f_{AC} - f_{CHO}) \cdot c_{rhb} \cdot CO_2 +$ $+ a_{rhb} \cdot H_2 + n_{rhb} \cdot NH_3 + s_{rhb} \cdot SH_2$	kh _r . MS _{rhb}
2	Hidrólisis del material lentamente hidrolizable biodegradable	$Cc_{lhb}Hh_{lhb}Oo_{lhb}Nn_{lhb}Ss_{lhb} \rightarrow f_{CHO} \cdot c_{lhb} \cdot C_{CHO} + e_{lhb} \cdot H_{CHO} + [o_{lhb} + (-2 + 2 \cdot f_{CHO} + f_{AC}) \cdot c_{lhb}] O_{CHO}$ $f_{AC} \cdot c_{lhb} \cdot CH_3COOH + (1 - f_{AC} - f_{CHO}) \cdot c_{lhb} \cdot CO_2 +$ $+ a_{lhb} \cdot H_2 + n_{lhb} \cdot NH_3 + s_{lhb} \cdot SH_2$	kh _l . MS _{lhb}
3	Arrastre de material no biodegradable en la hidrólisis rápida	$Cc_{rnb}Hh_{rnb}Oo_{rnb}Nn_{rnb}Ss_{rnb} \rightarrow Cc_{nb}Hh_{nb}Oo_{nb}Nn_{nb}Ss_{nb} \text{ (disueltos)}$	f _{ar} ·kh _r . MS _{rhb}
4	Arrastre de material no biodegradable en la hidrólisis lenta	$Cc_{lnb}Hh_{lnb}Oo_{lnb}Nn_{lnb}Ss_{lnb} \rightarrow Cc_{nb}Hh_{nb}Oo_{nb}Nn_{nb}Ss_{nb} \text{ (disueltos)}$	f _{ar} ·kh _l . MS _{lhb}

$$(1) e_{hb} = 2 \cdot f_{CHO} \cdot c_{hb} \text{ si } h_{hb} > 2(f_{AC} + f_{CHO})c_{hb} + 3n_{hb} + 2s_{hb}; e_{hb} = h_{hb} - 2 \cdot f_{AC} \cdot c_{hb} - 3 \cdot n_{hb} - 2 \cdot s_{hb} \text{ si } h_{hb} \leq 2(f_{AC} + f_{CHO})c_{hb} + 3n_{hb} + 2s_{hb}$$

$$(2) a_{hb} = \frac{h_{hb} - 2 \cdot (f_{AC} + f_{CHO}) \cdot c_{hb} - 3 \cdot n_{hb} - 2 \cdot s_{hb}}{2} \text{ si } h_{hb} > 2(f_{AC} + f_{CHO})c_{hb} + 3n_{hb} + 2s_{hb} \text{ y } a_{hb} = 0 \text{ si } h_{hb} \leq 2(f_{AC} + f_{CHO})c_{hb} + 3n_{hb} + 2s_{hb}$$

Tabla 4.5. Reacciones de degradación del residuo según MODUELO 2 (II). Acetogénesis y metanogénesis.

Nº	DESCRIPCIÓN	TRANSFORMACIÓN	VELOCIDAD
5	Acetogénesis	$C_{CHO}H_{CHO}O_{CHO} + [(2 - f'_{AC}) \cdot C_{CHO} - O_{CHO}] \cdot H_2O \rightarrow \frac{f'_{AC}}{2} \cdot C_{CHO} \cdot CH_3COOH + (1 - f'_{AC}) \cdot C_{CHO} \cdot CO_2 + \frac{4 \cdot (1 - f'_{AC}) \cdot C_{CHO} + H_{CHO} - 2 \cdot O_{CHO}}{2} \cdot H_2$	$k_A \cdot CHO$
6	Metanogénesis acetofílica	$CH_3COOH \rightarrow CH_4 + CO_2$	$k_{AC} \cdot AC$
7	Metanogénesis hidrogenofílica	$CO_2 + 4H_2 \rightarrow CH_4 + 2H_2O$	$k_{H_2} \cdot H_2$

4.3.2.2. Cinéticas

Siguiendo MODUELO 1, todas las reacciones presentadas se desarrollan según cinéticas de primer orden respecto a la masa de sustancia a degradar. La Tabla 4.6 presenta la matriz de procesos propuesta.

Hidrólisis de las fracciones biodegradables rápidamente y lentamente hidrolizables con arrastre de una fracción no biodegradable.

$$\frac{dMS_{rnb}}{dt} = -kh_r \cdot MS_{rnb} \quad (4.64)$$

$$\frac{dMS_{lnb}}{dt} = -kh_l \cdot MS_{lnb} \quad (4.65)$$

$$\frac{dMS_{rnb}}{dt} = -f_{ar} \cdot \frac{dMS_{rnb}}{dt} = -f_{ar} \cdot kh_r \cdot MS_{rnb} \quad (4.66)$$

$$\frac{dMS_{lnb}}{dt} = -f_{ar} \cdot \frac{dMS_{lnb}}{dt} = -f_{ar} \cdot kh_l \cdot MS_{lnb} \quad (4.67)$$

Donde MS_{rnb} y MS_{lnb} : materia sólida biodegradable, rápidamente hidrolizable y lentamente hidrolizable respectivamente; kh_r y kh_l sus respectivas tasas de hidrólisis (d^{-1}); MS_{rnb} : materia sólida orgánica no biodegradable de los componentes rápidamente hidrolizables; MS_{lnb} : materia sólida orgánica no biodegradable de los componentes lentamente hidrolizables; f_{ar} : coeficiente de arrastre de materia inerte en la hidrólisis.

Las tasas de hidrólisis, como en el modelo original, tendrán la forma (4.68), donde kh es la tasa máxima de hidrólisis y FH el factor de influencia de la humedad. Se ha modificado el factor de variación de este parámetro para acotar la hidrólisis entre valores de humedad que realmente puedan darse en vertederos. Otras expresiones contemplan valores de la humedad “no reales”, como las propuestas por Williams *et al.* (1987) o Young (1995), que sólo anulan la hidrólisis para contenido de humedad nulo, que no puede darse nunca.

La ley de variación de FH , en tres tramos lineales se mantiene, dependiendo ahora del porcentaje de humedad sobre la mínima relativo al intervalo total de variación de la misma (humedad de saturación menos la mínima, que en MODUELO se ha aproximado como un porcentaje de la capacidad de campo). En la Figura 4.10 se presenta un ejemplo de esta variación de FH con el factor P (4.69), para un residuo de

humedad de saturación 75% y humedad mínima de 25%, ambas expresadas en peso seco, según la ley propuesta por Arias *et al.* (1995) para el vertedero de Meruelo (Tabla 3.2).

$$kh = kh'.FH. \tag{4.68}$$

$$P = \frac{\omega - \omega_{cc}}{\omega_{SAT} - \omega_{CC}} \tag{4.69}$$

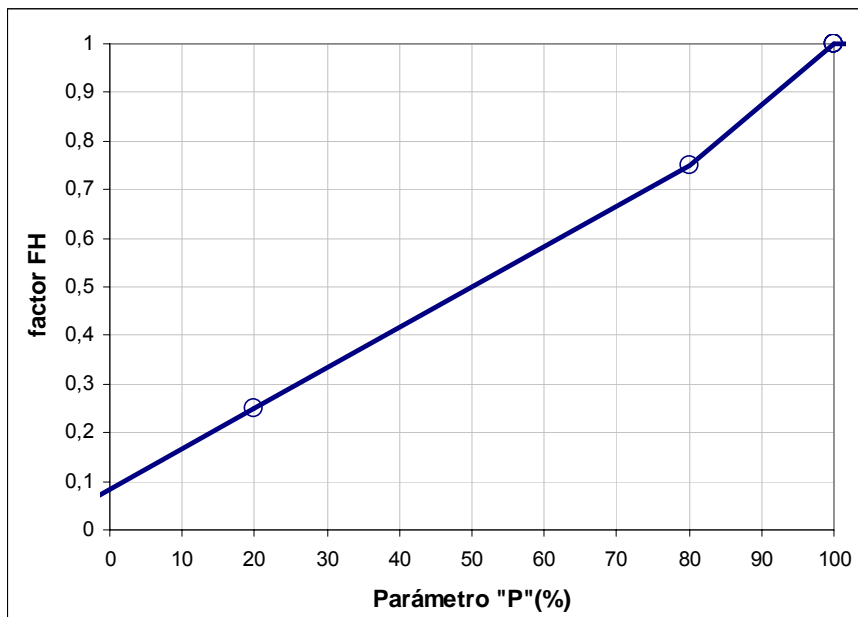


Figura 4.10. Variación de FH con la humedad del residuo (ejemplo para $H_{lim} \cdot \omega_{cc} = 25\%$ y $\omega_{SAT} = 75\%$)

De acuerdo con los resultados de Young (1995) y El Fadel *et al.* (1996b), comentados en el capítulo 2, se ha eliminado el factor de influencia de la temperatura en las cinéticas.

Se conserva además del modelo original el concepto de “tiempo de activación”, que representa dos realidades que se dan en el vertedero. Existe cierto retraso en los procesos de degradación respecto a la situación ideal en que el sólido está completamente rodeado de agua y microorganismos que realizan un ataque enzimático inmediato. Los residuos han de ser colonizados una vez depositados (Pohland, 1975), y no siempre pueden serlo con igual facilidad (dependerá de su estado de mezcla con antiguos residuos, trituración, encerramiento en bolsas, existencia o no de recirculación en el vertedero). Este retardo inicial se ve incrementado por un período de aclimatación, tiempo que los microorganismos

necesitan para adaptarse al nuevo sustrato, que variará según el residuo sea más o menos fácilmente degradable. La suma de estos dos períodos para las sustancias rápidamente y lentamente hidrolizables respectivamente, da como resultado el parámetro “tiempo de activación” correspondiente (“ $t_{act,r}$ ” y “ $t_{act,l}$ ”).

Acetogénesis a partir de compuestos intermedios

Se ha supuesto también una reacción con velocidad de primer orden respecto a los reactivos:

$$\begin{aligned} \frac{dC_{CHO}}{dt} &= f_{CHO} \cdot c_{rhb} \cdot kh_r \cdot MS_{rhb} + f_{CHO} \cdot c_{lhb} \cdot kh_l \cdot MS_{lhb} - k_A \cdot C_{CHO} \\ \frac{dH_{CHO}}{dt} &= e_{rhb} \cdot kh_r \cdot MS_{rhb} + e_{lhb} \cdot kh_l \cdot MS_{lhb} - k_A \cdot H_{CHO} ; \end{aligned} \quad (4.70)$$

Siendo $e_{rhb} = 2 \cdot f_{CHO} \cdot c_{rhb}$ si $h_{rhb} > 2(f_{AC} + f_{CHO})c_{rhb} + 3n_{rhb} + 2s_{rhb}$, es decir, si “existe suficiente hidrógeno para que todos los compuestos intermedios de la hidrólisis rápida sean ácidos grasos” ó $e_{rhb} = h_{rhb} - 2 \cdot f_{AC} \cdot c_{rhb} - 3 \cdot n_{rhb} - 2 \cdot s_{rhb}$ en caso contrario. En la materia lentamente biodegradable e_{lhb} se define de manera similar.

$$\begin{aligned} \frac{dO_{CHO}}{dt} &= (o_{rhb} + (-2 + 2 \cdot f_{CHO} + f_{AC}) \cdot c_{rhb}) \cdot kh_r \cdot MS_{rhb} + \\ &+ (o_{lhb} + (-2 + 2 \cdot f_{CHO} + f_{AC}) \cdot c_{lhb}) \cdot kh_l \cdot MS_{lhb} - k_A \cdot O_{CHO} \end{aligned} \quad (4.71)$$

C_{CHO} , H_{CHO} , O_{CHO} : contenido (moles) de carbono, hidrógeno y oxígeno en el conjunto de compuestos intermedios presentes en el agua; CHO: masa de compuestos intermedios presentes en el agua; k_A : tasa de acetogénesis (d^{-1}).

Gasificación

El biogás está formado por H_2 , CO_2 y CH_4 generados en las distintas etapas por consumo biológico de sustancias disueltas en el agua. Las cinéticas de generación y consumo de estos compuestos dependen de la presencia de H_2 en el sistema. El H_2 generado es producto de la hidrólisis y la acetogénesis (Tabla 4.4 y Tabla 4.5). La cantidad de H_2 utilizado por los metanógenos (H_{2met}) en el paso de tiempo depende de la concentración del mismo en el líquido (4.73).

$$\frac{dH_2 \text{ generado}}{dt} = \left\{ a_{rhb} \cdot kh_r \cdot MS_{rhb} + \right. \\ \left. + a_{lhb} \cdot kh_l \cdot MS_{lhb} \right\} + \\ + k_A \cdot \left[\frac{4 \cdot (1 - f'_{AC})}{2} \cdot C_{CHO} + \frac{1}{2} \cdot H_{CHO} - O_{CHO} \right] \quad (4.72)$$

Siendo $a_{rhb} = \frac{h_{rhb} - 2 \cdot (f_{AC} + f_{CHO}) - 3 \cdot n_{rhb} - 2 \cdot s_{rhb}}{2}$ si $h_{rhb} > 2 \cdot (f_{AC} + f_{CHO}) \cdot c_{rhb} + 3 \cdot n_{rhb} + 2 \cdot s_{rhb}$ y 0

en caso contrario. Para la materia lentamente hidrolizable a_{lhb} se define de igual manera.

$$\frac{dH_2 \text{ met}}{dt} = 4 \cdot kH_2 \cdot H_{2 \text{ disuelto}} \quad (4.73)$$

La variación neta en el tiempo de las cantidades de gas generado será:

$$\frac{dCH_4}{dt} = k_{ac} \cdot AC + \frac{1}{4} \frac{dH_2 \text{ met}}{dt} \quad (4.74)$$

$$\frac{dCO_2}{dt} = \left(\begin{array}{l} (1 - f_{AC} - f_{CHO}) \cdot c_{rhb} \cdot kh_r \cdot MS_{rhb} + \\ + (1 - f_{AC} - f_{CHO}) \cdot c_{lhb} \cdot kh_l \cdot MS_{lhb} + \\ + (1 - f'_{AC}) \cdot k_A \cdot CHO + k_{AC} \cdot AC \end{array} \right) - \frac{1}{4} \frac{dH_2 \text{ met}}{dt} \quad (4.75)$$

$$\frac{dH_2}{dt} = \frac{dH_2 \text{ generado}}{dt} - \frac{dH_2 \text{ met}}{dt} \quad (4.76)$$

CH₄, CO₂, H₂ y AC: cantidad de metano, dióxido de carbono, hidrógeno y acetato en la celda; k_{AC}: tasa de producción de metano a partir de acetato (d⁻¹); kH₂: tasa de producción de metano a partir de hidrógeno (d⁻¹).

4.3.2.3. Resolución numérica

Para la resolución numérica en MODUELO de las ecuaciones planteadas se parte de la necesidad de no complicar los cálculos del vertedero. Hay que recordar que un vertedero puede estar formado por gran cantidad de celdas cuya evolución puede interesar durante muchos años. En cada paso de tiempo se realiza el cálculo para cada celda, de manera que el tiempo de ejecución de cada simulación podría alargarse excesivamente, por lo que es preciso realizar simplificaciones.

Por eso se adopta directamente el esquema general de MODUELO 1, con un paso de tiempo diario para los cálculos de biodegradación, frente al horario del módulo

hidrológico. En esta parte se toman las condiciones iniciales de humedad como representativas del paso de tiempo correspondiente, pero ya no se puede aceptar la misma hipótesis para las sustancias disueltas, porque aparecen especies gaseosas cuyo equilibrio interfacial se da muy rápidamente. Esta dinámica interfacial se ha resuelto suponiendo que el equilibrio entre concentraciones de cada sustancia en las distintas fases (descrito por la ley de Henry) se establece inmediatamente al final de cada paso de tiempo del modelo de biodegradación. Como este paso es diario y según las tasas de transferencia de los tres gases el equilibrio se alcanza mucho más rápido, ésta simplificación no afectará notablemente los resultados. El modelo de equilibrio, desarrollado en un próximo apartado, da como resultado las cantidades de H_2 , CO_2 y CH_4 que en cada paso de tiempo, se encuentran disueltas, así como las que están en la fase gaseosa de los poros del vertedero y los que son “liberados” fuera del mismo.

Incorporando esta dinámica no se resuelve adecuadamente el balance de hidrógeno, que es el único gas que además de producto es reactivo en la serie de ecuaciones planteadas. Suponer que sólo está disponible para reaccionar el H_2 inicialmente disuelto implicaría despreciar el H_2 que se va generando a lo largo del intervalo de cálculo, la mayoría del cual se perdería “gasificado” al simular el equilibrio entre fases. Esto es poco probable dado que, al ser el H_2 un compuesto muy energético varias especies compiten por él cuando aparece disuelto y es rápidamente consumido. Al simplificar el proceso al cálculo diario ha de tenerse en cuenta que producción y consumo del gas en realidad están acoplados. A medida que se va produciendo H_2 éste va siendo consumido, según el incremento de concentración que se produzca, antes de que se libere a la atmósfera. Por otro lado un paso de tiempo tan grande no permite considerar la transferencia hacia el líquido de H_2 del gas de los poros en caso de ser consumido más rápidamente que producido.

Para tener en cuenta estos fenómenos se plantean dos alternativas extremas: reducir el paso de tiempo para aumentar la aproximación del cálculo llegando incluso a simular la cinética de transferencia interfacial de gases o, suponiendo que las condiciones iniciales son representativas del intervalo, añadir al hidrógeno inicial el generado durante el paso de tiempo para evaluar el disponible para metanización. La primera solución obligaría a pasos de tiempo muy cortos, aumentando mucho el tiempo de ejecución. Por otro lado la precisión buscada con esta solución no se corresponde con la alcanzada en el módulo hidrológico previo. La otra alternativa da lugar a inestabilidades en el cálculo (obtención de consumos de H_2 mayores que generaciones, con la consecuente necesidad de limitar artificialmente los valores

calculados) y valores no reales de las tasas. En MODUELO 2 se ha adoptado una aproximación intermedia, que es realizar los cálculos en función de los valores medios del intervalo (semisuma de valores iniciales y finales).

Las cantidades iniciales de sólidos y gases disueltos se toman directamente del resultado del modelo de transporte de contaminantes. Con estos valores, sustituyendo los elementos diferenciales por incrementos en las ecuaciones del apartado anterior y el valor de cada variable por la semisuma de valor inicial y final se obtienen las expresiones de variación de cada cantidad de sustancia en la celda durante el paso de tiempo, que se recogen a continuación.

$$\Delta MS_{rhh} = -kh_r \cdot \frac{MS_{rhh}}{1 + \frac{kh_r \cdot \Delta t}{2}} \cdot \Delta t \quad (4.77)$$

$$\Delta MS_{lhb} = -kh_l \cdot \frac{MS_{lhb}}{1 + \frac{kh_l \cdot \Delta t}{2}} \cdot \Delta t \quad (4.78)$$

$$\Delta C_{CHO} = \frac{-f_{CHO} \cdot c_{rhh} \cdot \Delta MS_{rhh} - f_{CHO} \cdot c_{lhb} \cdot \Delta MS_{lhb} - k_A \cdot C_{CHO} \cdot \Delta t}{1 + \frac{k_A \cdot \Delta t}{2}} \quad (4.79)$$

$$\bar{C}_{CHO} = C_{CHO} + \frac{\Delta C_{CHO}}{2} \quad (4.80)$$

$$\Delta H_{CHO} = \frac{-e_{rhh} \cdot \Delta MS_{rhh} - e_{lhb} \cdot \Delta MS_{lhb} - k_A \cdot H_{CHO} \cdot \Delta t}{1 + \frac{k_A \cdot \Delta t}{2}} \quad (4.81)$$

$$\bar{H}_{CHO} = H_{CHO} + \frac{\Delta H_{CHO}}{2} \quad (4.82)$$

$$\begin{aligned} \Delta O_{CHO} = & \frac{-(o_{rhh} + (-2 + 2 \cdot f_{CHO} + f_{AC}) \cdot c_{rhh}) \cdot \Delta MS_{rhh}}{1 + \frac{k_A \cdot \Delta t}{2}} + \\ & + \frac{-(o_{lhb} + (-2 + 2 \cdot f_{CHO} + f_{AC}) \cdot c_{lhb}) \cdot \Delta MS_{lhb} - k_A \cdot O_{CHO} \cdot \Delta t}{1 + \frac{k_A \cdot \Delta t}{2}} \end{aligned} \quad (4.83)$$

$$\bar{O}_{CHO} = O_{CHO} + \frac{\Delta O_{CHO}}{2} \quad (4.84)$$

$$\Delta AC = \frac{-\frac{f_{AC}}{2} \cdot c_{rhh} \cdot \Delta MS_{rhh} - \frac{f_{AC}}{2} \cdot c_{lhb} \cdot \Delta MS_{lhb} - k_{AC} \cdot AC \cdot \Delta t + \frac{f'_{AC}}{2} \cdot k_A \cdot \bar{C}_{CHO} \cdot \Delta t}{1 + \frac{k_{AC} \cdot \Delta t}{2}} \quad (4.85)$$

$$\overline{AC} = AC + \frac{\Delta AC}{2} \quad (4.86)$$

$$\Delta NH_3 = -n_{rhh} \cdot \Delta MS_{rhh} - n_{lhb} \cdot \Delta MS_{lhb} \quad (4.87)$$

$$\Delta SH_2 = -s_{rhh} \cdot \Delta MS_{rhh} - s_{lhb} \cdot \Delta MS_{lhb} \quad (4.88)$$

$$H_{2gen} = -a_{rhh} \cdot \Delta MS_{rhh} - a_{lhb} \cdot \Delta MS_{lhb} + \left[\frac{4 \cdot (1 - f'_{AC})}{2} \cdot \bar{C}_{CHO} + \bar{H}_{CHO} - \bar{O}_{CHO} \right] \cdot k_A \cdot \Delta t \quad (4.89)$$

$$H_{2met} = \frac{H_{2L} \cdot \left(2 + \frac{\theta(t + \Delta t)}{K_{HH2} \cdot \omega(t + \Delta t)} \right) + H_{2g} + H_{2gen} - H_{2lib}(t)}{2 \cdot \left(1 + \frac{\theta(t + \Delta t)}{K_{HH2} \cdot \omega(t + \Delta t)} + \frac{kH_2 \cdot \Delta t}{2} \right)} \cdot kH_2 \cdot \Delta t \quad (4.90)$$

$$\Delta H_2 = H_{2gen} - H_{2met} \quad (4.91)$$

$$\Delta CO_2 = -(1 - f_{AC} - f_{CHO}) \cdot c_{rhh} \cdot \Delta MS_{rhh} - (1 - f_{AC} - f_{CHO}) \cdot c_{lhb} \cdot \Delta MS_{lhb} + (1 - f'_{AC}) \cdot k_A \cdot \bar{C}_{CHO} \cdot \Delta t + k_{AC} \cdot \overline{AC} \cdot \Delta t - \frac{H_{met}}{4} \quad (4.92)$$

$$\Delta CH_4 = k_{AC} \cdot \overline{AC} \cdot \Delta t + \frac{H_{2met}}{4} \quad (4.93)$$

4.3.3. Transporte de contaminantes

Para simular el movimiento de los contaminantes en el agua se conservan los modelos de mezcla completa adoptados en el algoritmo original. Ahora las sustancias transportadas son los “nuevos” compuestos sólidos disueltos y los gases generados que no han pasado a la fase gaseosa.

4.3.4. Resultados del modelo

Como resultado de los cálculos presentados se obtiene la carga de cada contaminante (toneladas/día) presente en el lixiviado recogido (todos los elementos de la materia no biodegradable arrastrada, el carbono, hidrógeno y oxígeno que forman compuestos orgánicos distintos del acetato, es decir, C_{CHO} , H_{CHO} y O_{CHO} , acetato ó "AC", amonio, NH_4^+ , ácido sulfhídrico, SH_2 , y gases disueltos), su concentración diaria de DBO y DQO y los volúmenes de cada gas emitido.

Las concentraciones de DBO y DQO se calculan a partir de (4.94) y (4.95), que representan las reacciones que tienen lugar en los ensayos respectivos.

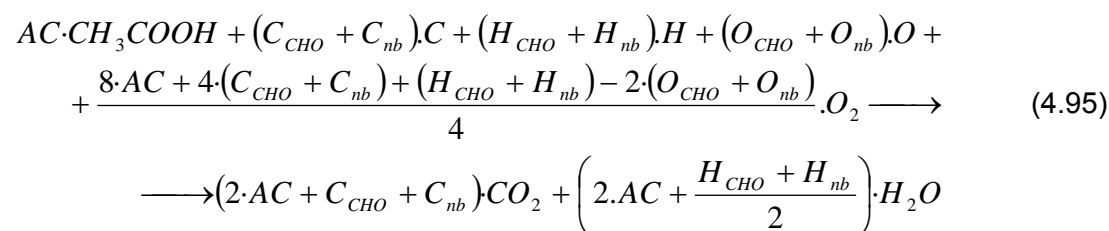
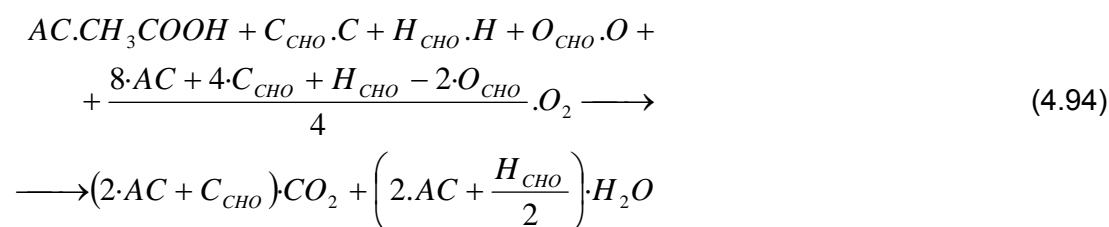


Tabla 4.6. Matriz de procesos del modelo de degradación en MODUELO 2 (I).

Procesos/Variables	Materia Sólida Biodeg. Rápidamente Hidrolizable	Materia Sólida Biodeg. Lentamente Hidrolizable	M. S. No Biodegradable de componentes rápidamente hidrolizables	M. S. No Biodegradable de componentes lentamente hidrolizables	Compuestos intermedios			Acetato	Dióxido de carbono gas	Hidrógeno gas	Amonio disuelto	Ácido sulfhídrico disuelto	Metano gas	Materia disuelta no biodegradable	Tasa
	MS _{rhb}	MS _{lhb}	MS _{rhn}	MS _{lhn}	C _{CHO}	H _{CHO}	O _{CHO}	CH ₃ COOH	CO ₂	H ₂	NH ₃	SH ₂	CH ₄	MD _{nb}	
Hidrólisis rápida	-1	-	- f _{ar}	-	f _{CHO} ·C _{rhb}	e _{rhb} (1)	d _{rhb} (2)	$\frac{f_{AC}}{2} \cdot c_{rhb}$	(1-f _{CHO} -f _{AC})·C _{rhb}	a _{rhb} (3)	n _{rhb}	s _{rhb}	-	f _{ar}	kh _r ·MS _{rhb}
Hidrólisis lenta	-	-1	-	- f _{ar}	f _{CHO} ·C _{lhb}	e _{lhb} (1)	d _{lhb} (2)	$\frac{f_{AC}}{2} \cdot c_{lhb}$	(1-f _{CHO} -f _{AC})·C _{lhb}	a _{lhb} (3)	n _{lhb}	s _{lhb}	-	f _{ar}	kh _l ·MS _{lhb}

$$(1) e_{hb} = 2 \cdot f_{CHO} \cdot c_{hb} \text{ si } h_{hb} > 2(f_{AC} + f_{CHO})c_{hb} + 3n_{hb} + 2s_{hb}; e_{hb} = h_{hb} - 2 \cdot f_{AC} \cdot c_{hb} - 3 \cdot n_{hb} - 2 \cdot s_{hb} \text{ si } h_{hb} \leq 2(f_{AC} + f_{CHO})c_{hb} + 3n_{hb} + 2s_{hb}$$

$$(2) d_{hb} = o_{hb} + (-2 + 2 \cdot f_{CHO} + f_{AC}) \cdot c_{hb};$$

$$(3) a_{hb} = \frac{h_{hb} - 2 \cdot (f_{AC} + f_{CHO}) \cdot c_{hb} - 3 \cdot n_{hb} - 2 \cdot s_{hb}}{2} \text{ si } h_{hb} > 2(f_{AC} + f_{CHO})c_{hb} + 3n_{hb} + 2s_{hb} \text{ y } a_{hb} = 0 \text{ si } h_{hb} \leq 2(f_{AC} + f_{CHO})c_{hb} + 3n_{hb} + 2s_{hb}$$

Tabla 4.7. Matriz de procesos del modelo de degradación en MODUELO 2 (y II).

Procesos/Variables	Materia Sólida Biodeg. Rápidamente Hidrolizable	Materia Sólida Biodeg. Lentamente Hidrolizable	M. S. No Biodegradable de componentes rápidamente hidrolizables	M. S. No Biodegradable de componentes lentamente hidrolizables	Compuestos intermedios			Acetato	Dióxido de carbono gas	Hidrógeno gas	Amonio disuelto	Ácido sulfhídrico disuelto	Metano gas	Materia disuelta no biodegradable	Tasa
	MS _{rnb}	MS _{lnb}	MS _{rlnb}	MS _{lnnb}	C _{CHO}	H _{CHO}	O _{CHO}	CH ₃ COOH	CO ₂	H ₂	NH ₃	SH ₂	CH ₄	MD _{nb}	
Acetogénesis	-	-		-	$-\frac{C_{CHO}}{CHO}$	$-\frac{H_{CHO}}{CHO}$	$-\frac{O_{CHO}}{CHO}$	$\frac{f'_{AC}}{2} \frac{C_{CHO}}{CHO}$	$(1-f'_{AC}) \frac{C_{CHO}}{CHO}$	g (1)	-	-	-	-	k _A .CHO
Metanogénesis acetofílica	-	-	-	-	-	-	-	-1	1	-	-	-	1	-	k _{AC} .AC
Metanogénesis hidrogenofílica	-	-	-	-	-	-	-	-	-1	-4	-	-	1	-	k _{H₂} .H ₂

$$(1) \quad g = \frac{4 \cdot (1 - f'_{AC})}{2} \cdot \frac{C_{CHO}}{CHO} + \frac{1}{2} \cdot \frac{H_{CHO}}{CHO} - \frac{O_{CHO}}{CHO}$$

4.3.5. Equilibrio de gases

La concentración de equilibrio de un gas disuelto en agua en contacto con una fase gaseosa viene dada por la ley de Henry (4.96).

$$C_{Li} = C_{gi} \cdot K_H \quad (4.96)$$

Donde C_{Li} : concentración del gas i disuelto en el líquido en condiciones de equilibrio (mol/L); C_{gi} : concentración del gas i en la fase gaseosa (mol/L); K_H : constante de Henry (mol/L/mol/L, en este caso).

La concentración de cada gas en el líquido, por tanto, dependerá de su participación en la mezcla gaseosa y la presión total a que ésta se encuentre.

Aplicando la ley de continuidad o de conservación de la masa del gas en una celda del vertedero modelizado, se tiene (4.97) para la fase gaseosa y (4.98) en la fase líquida, donde los términos de la izquierda representan la variación de la masa (o número de moles) de gas presente en el tiempo y el de la derecha el flujo neto de sustancia en la fase considerada.

$$\frac{d(\theta \cdot C_{gi})}{dt} = \theta \cdot \frac{dC_{gi}}{dt} + C_{gi} \cdot \frac{d\theta}{dt} = gi - li \quad (4.97)$$

$$\frac{d(\omega \cdot C_{Li})}{dt} = \omega \cdot \frac{dC_{Li}}{dt} + C_{Li} \cdot \frac{d\omega}{dt} = bi - gi \quad (4.98)$$

θ es la porosidad "libre de agua" ($\omega_{SAT} - \omega$); C_{gi} : concentración del gas i en la fase gaseosa (mol/m³); gi : tasa de gasificación del gas disuelto i (mol/m³/d); li : tasa a la que el gas i es liberado (mol/m³/d); ω : humedad de la celda (vol/vol); C_{Li} : concentración del gas disuelto i en la fase líquida (mol/m³); bi : tasa de generación de la sustancia gaseosa i (mol/m³/d);

A falta de un modelo de flujo que considere las dos fases se asume que la presión total en la fase gaseosa, saturada de vapor de agua, se mantiene constante e igual a la atmosférica. Esto provoca que el número total de moles gaseosos por unidad de volumen en fase gaseosa se mantenga constante (4.99).

$$\Sigma \left(\frac{dC_{gi}}{dt} \right)_t = 0 \quad (4.99)$$

Para incorporar este desarrollo en MODUELO hay que referirlo a la discretización temporal elegida en el mismo. El gas generado en cada paso de tiempo desplaza la mezcla existente en los poros, provocando una liberación total de “L” moles, que se asume instantánea. Este volumen L estará formado por fracciones de los distintos gases, en la proporción en que participaron en el gas de cada celda (4.100).

$$L_i(t) = \frac{C_{gi}(t)}{\Sigma C_{gi}(t)} \cdot L(t) \quad (4.100)$$

En el programa los cálculos se plantean en términos de moles de sustancia por celda. Según el algoritmo general, del módulo hidrológico (“transporte de contaminantes”) se obtiene la variación de masa de cada sustancia gaseosa disuelta como consecuencia del flujo líquido, así como la variación en el contenido de agua y el volumen de poros libre. En el “paso de tiempo de equilibrio gaseoso” $\Delta\theta = \Delta\omega = 0$, y por tanto se conocen las $\omega(t+\Delta t)$ y $\theta(t+\Delta t)$ correspondientes al final del paso global, siendo las iniciales $\omega(t)$ y $\theta(t)$. La conservación de la sustancia gaseosa en el volumen de la celda implica que la cantidad de moles disueltos más los de la mezcla gaseosa al final del paso de tiempo resultan de sumar a las cantidades presentes previamente la generada menos la liberada (4.101).

$$\begin{aligned} M_{gi}(t + \Delta t) + M_{Li}(t + \Delta t) &= M_{gi}(t + \Delta t) \left(1 + \frac{K_{Hi} \cdot \omega(t + \Delta t)}{\theta(t + \Delta t)} \right) = \\ &= M_{gi}(t) + M_{Li}(t) + B_i(t) - L_i(t) \end{aligned} \quad (4.101)$$

M_{gi} : moles de sustancia i en la fase gaseosa; M_{Li} : moles de sustancia i disueltos en la fase líquida. B_i : moles de sustancia generados en el paso de tiempo; L_i : moles de sustancia liberados en el paso de tiempo.

Las condiciones de contorno en estos términos son que el número de moles presente en la fase gaseosa por unidad de volumen se mantiene constante y la cantidad liberada de cada sustancia es proporcional a su participación en la mezcla (4.102) y (4.103).

$$\Sigma M_{gi}(t + \Delta t) = \frac{\theta(t + \Delta t)}{\theta(t)} \Sigma M_{gi} \quad (4.102)$$

$$L_i = \frac{M_{gi}}{\Sigma M_{gj}} L \quad (4.103)$$

Expresando L como sumatorio de las cantidades liberadas de cada compuesto (a partir de (4.100) y teniendo en cuenta (4.104) se llega a (4.105), donde R es la constante universal de los gases (L.atm/mol/°K) y T la temperatura absoluta (°K)².

$$\Sigma M_{gi}(t + \Delta t) = \frac{\theta(t + \Delta t).V}{R.T} \quad (4.104)$$

$$L(t) = \Sigma M_{gi}(t) + \Sigma Bi(t) + \Sigma M_{Li}(t) - \frac{\theta(t + \Delta t).V}{R.T} - \Sigma M_{Li}(t + \Delta t) \quad (4.105)$$

Para calcular L(t) explícitamente, huyendo así del cálculo iterativo a costa de una menor precisión, es necesario aproximar de alguna manera el valor de $\Sigma M_{Li}(t + \Delta t)$. Podría aceptarse que la proporción que cada gas representa en la mezcla de gases es igual al principio y final del paso de tiempo, pero esto provocaría que cuando se estuviera generando una especie predominantemente el sumando correspondiente a ésta quedaría subestimado. Otra posible hipótesis es que la proporción del gas en la mezcla al final del paso va a ser similar a la proporción en que se han generado cada uno, pero entonces el gas generado en mayor cantidad estaría siendo sobreestimado. Por ello se ha tomado una solución de compromiso, que es suponer que la fracción de la mezcla de gases que cada uno representará al final del intervalo considerado es la media entre la que representa inicialmente y la fracción que de ese gas se ha generado respecto al total creado en ese tiempo.

$$\frac{M_{gi}(t + \Delta t)}{\Sigma M_{gi}(t + \Delta t)} = \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{Bi(t)}{\Sigma Bi(t)} + \frac{M_{gi}(t)}{\Sigma M_{gi}(t)} \right] \quad (4.106)$$

Y entonces se tiene $\Sigma M_{Li}(t + \Delta t)$ y también L(t).

² Para el planteamiento del modelo se ha tomado R = 0'082057 L.atm/mol/°K y una temperatura a definir por el usuario.

$$\Sigma M_{Li}(t + \Delta t) = \Sigma \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{Bi(t)}{\Sigma Bi(t)} + \frac{M_{gi}(t)}{\Sigma M_{gi}(t)} \right] \cdot \frac{\omega(\Delta t) \cdot V}{R \cdot T} \cdot K_{Hi} \quad (4.107)$$

$$L(t) = \Sigma M_{gi}(t) + \Sigma Bi(t) + \Sigma M_{Li}(t) - \frac{\theta(t + \Delta t) \cdot V}{R \cdot T} - \Sigma \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{Bi(t)}{\Sigma Bi(t)} + \frac{M_{gi}(t)}{\Sigma M_{gi}(t)} \right] \cdot \frac{\omega(\Delta t) \cdot V}{R \cdot T} \cdot K_{Hi} \quad (4.108)$$

Despejando la cantidad gaseosa de la ecuación de continuidad se obtienen los moles en fase gaseosa (4.109) y, por equilibrio, en fase líquida (4.110) de cada gas al final del paso de tiempo.

$$M_{gi}(t + \Delta t) = \frac{M_{gi} - L_i + Bi + M_{Li}}{1 + \frac{K_{Hi} \cdot \omega(t + \Delta t)}{\theta(t + \Delta t)}} \quad (4.109)$$

$$M_{Li}(t + \Delta t) = M_{gi}(t + \Delta t) \cdot \frac{K_{Hi} \cdot \omega(t + \Delta t)}{\theta(t + \Delta t)} \quad (4.110)$$

Al analizar los resultados que se obtienen con este modelo hay que tener en cuenta la hipótesis fundamental, de mantenimiento de la presión en todos los poros constante e igual a 1 atmósfera. En el vertedero se producen variaciones locales de presión en zonas aisladas y también en el seno de espesores saturados, pero para aumentar significativamente la solubilidad de los gases deberían producirse situaciones excepcionales de inundación de grandes alturas, lo cual es poco probable³.

Tampoco se ha modelizado el equilibrio entre especies carbónicas en el agua. Simularlo implicaría representar (previamente cuantificadas de algún modo) las sustancias que pueden reaccionar con el ácido carbónico, aumentando la cantidad del CO₂ generado que puede quedar en el líquido. Puesto que la representación del residuo en MODUELO se reduce a la descripción de su parte orgánica, se ha preferido asumir el error de esta simplificación, que conducirá a valores de CO₂ liberado por

³ La solubilidad es directamente proporcional a la presión parcial de gas y una atmósfera equivale aproximadamente a 10 metros columna de agua, de manera que para doblar la cantidad disuelta de equilibrio ha de darse una profundidad de 10 m de agua.

encima de los reales. En apartados posteriores se presenta una estimación de lo que estas desviaciones pueden representar.

Para los valores de solubilidad de los gases en el lixiviado se han adoptado las constantes de Henry. En la Tabla 4.8 se presentan los valores de estas constantes a 25°C de temperatura.

Tabla 4.8. Valores de las constantes de solubilidad de los distintos gases adoptados en MODUELO 2 (Stumm y Morgan, 1996).

Gas	$K_{H25^{\circ}\text{C}}$ (M/atm)	$H^*_{25^{\circ}\text{C}}$ (sin dimensiones)
O ₂	1,26E-03	3,08E-02
N ₂	6,61E-04	1,62E-02
CO ₂	3,39E-02	8,29E-01
H ₂	7,87E-04	1,92E-02
CH ₄	1,29E-03	3,15E-02

(*) $H=K_H \cdot R \cdot T$, siendo $R = 0,082057 \text{ L}\cdot\text{atm}/\text{mol}/^{\circ}\text{K}$ y $T = 298 \text{ }^{\circ}\text{K}$.

Las condiciones iniciales de las celdas residuo al colocarse la celda en el vertedero se basan en suponer que la etapa aerobia ha terminado y se ha consumido todo el oxígeno presente inicialmente. El gas presente en la porosidad libre inicial está compuesto por nitrógeno en un 80% y dióxido de carbono en un 20%. Y además se acepta que la fase gaseosa está siempre saturada de vapor de agua, lo que implica que del volumen de poros no ocupados por el agua está disponible para ocupación de los gases generados un 96'87% (valor fijo porque en esta versión por simplificación se está trabajando a condiciones de temperatura y presión constantes).

4.3.6. Simulación de una celda cerrada

Para ir contrastando los modelos de biodegradación que se plantean se ha simulado la degradación de los residuos urbanos en un caso ideal, en condiciones más sencillas que las de un vertedero real. Para ello se ha tomado una celda cerrada, en la que no existen aportes (ni extracción) de agua ni residuos, de 14x14 m en planta

y 1'9 m de altura de residuos con densidad 0'9 T/m³ y humedad del 48% en peso seco, que puede representar la capacidad de campo de los residuos. Se tienen en este ejemplo, por tanto, 226459 T de residuo con 108701 T de agua. Se ha supuesto una composición del residuo similar a la de Meruelo 1 (Tabla 5.10), quedando definida su biodegradabilidad por las proporciones que se resumen en la Tabla 4.9. A continuación se presenta el estudio realizado con la formulación elegida finalmente.

Tabla 4.9. Composición del residuo en Meruelo I. Moles de cada elemento químico correspondientes a las fracciones biodegradables por peso de residuo seco (RS).

Elemento químico	Rápidamente biodegradables	Lentamente biodegradables
Carbono (moles/gRS)	1'74E-02	7'28E-04
Hidrógeno (moles/gRS)	2'80E-02	1'05E-03
Oxígeno (moles/gRS)	1'08E-02	3'48E-04
Nitrógeno (moles/gRS)	6'71E-04	4'05E-05
Azufre (moles/gRS)	4'97E-05	6'99E-07

Los parámetros del modelo de biodegradación se han ido variando para ajustar los resultados a datos de tendencia general encontrados en la bibliografía. Los criterios de evaluación del resultado pueden resumirse en los siguientes puntos:

- Ajuste de las curvas de evolución de la contaminación generada a las publicadas por Tchobanoglous *et al.* (1994), elaboradas a partir de observaciones de otros autores. Esta gráficas, comentadas en el capítulo 2, muestran de forma "semicuantitativa" (se cuantifican los porcentajes relativos pero no se acota el tiempo ni las concentraciones en el líquido) la evolución de la composición del biogás y las sustancias disueltas generadas en la degradación anaerobia de los residuos.

- Las tasas de producción de biogás están en el rango de las publicadas por otros autores (Tabla 2.8). A los 30 años las emisiones han de estar ya muy atenuadas, como es habitual en vertederos reales (Ehrig y Kruempelbeck, 2001).

- El CH₄ generado vía hidrógeno al cabo de ese tiempo (30 años) es aproximadamente el 30% del CH₄ total, de acuerdo a las proporciones en que se distribuye la materia en la Figura 2.1 (Zhender *et al.*, 1982).

- Las velocidades de degradación resultantes se mueven en los rangos encontrados en publicaciones de otros autores (Tabla 2.14⁴).

Tras varias pruebas, se adoptaron los valores que aparecen en la Tabla 4.10. Hay que considerar que los resultados obtenidos variarían si el residuo fuese más degradable o su composición fuese diferente: por ello en esta calibración se han adoptado criterios generales de tendencias más que valores absolutos.

Tabla 4.10. Parámetros de calibración de la degradación en la celda.

Parámetro	Valor de calibración
kh_r (d^{-1})	0,01
kh_l (d^{-1})	0,0005
K_A (d^{-1})	0,0005
k_{AC} (d^{-1})	0,001
kH_2 (d^{-1})	50
t_{actrap} (d)	0
t_{actlen} (d)	365

Seguidamente se muestran los resultados de dos simulaciones de 4000 días (casi 11 años), una con el modelo MODUELO inicial (MODUELO 1) y otra con el nuevo (MODUELO 2), que permiten comparar ambos planteamientos. En la Figura 4.11 se recogen las gráficas de evolución de la materia sólida y sustancias disueltas en el lixiviado. Se comprueba que el descenso en la masa de residuo en fase sólida es igual en ambas gráficas, puesto que los modelos de hidrólisis son iguales. La contaminación en el lixiviado no es directamente comparable, ya que los compuestos generados en el proceso han variado. Lo que sí se observa en ambas gráficas es el ascenso pronunciado de las sustancias generadas en la hidrólisis (todas las disueltas en

⁴ Como se recoge en esa tabla los intervalos de variación de las velocidades de degradación de primer orden son de varios órdenes de magnitud: el orden de la velocidad de hidrólisis varía entre 10^{-7} y 10^2 , la de acetogénesis entre 10^{-4} y 10^3 y la de metanogénesis entre 10^{-5} y 10^5 .

MODUELO 1, C_{bio} , H_{bio} , O_{bio} y N_{bio} , y el C_{CHO} en MODUELO 2). C_{CHO} , que representa el carbono en forma de compuestos intermedios, alcanza un máximo menor que C_{bio} porque va siendo consumido en la acetogénesis (con la consecuente aparición del acetato) previa a la metanización.

En cuanto al biogás (Figura 4.12) las tendencias son muy diferentes. En el modelo anterior su aparición se va incrementando a medida que aumenta la materia orgánica disuelta para su metanización, mientras que en el nuevo se genera CO_2 desde el principio de la biodegradación (de ahí la punta inicial tan pronunciada). Por otro lado en el primero CH_4 y CO_2 aparecen simultáneamente (lo que constituyó una de las razones para modificar el modelo) siendo siempre, para la composición simulada en este caso, el volumen de metano superior al CO_2 , lo cual en realidad sólo se produce una vez alcanzada la fase de metanización. En el nuevo modelo la punta de generación de CO_2 coincide con el período de máxima liberación de compuestos orgánicos al lixiviado: en las gráficas de Tchobanoglous *et al.* (1994) coincide con la punta de concentración de DQO, pero en este caso hay que considerar el efecto de acumulación de los compuestos (no hay circulación del agua).

Para comparar con las gráficas de referencia se han representado las proporciones de metano, dióxido de carbono e hidrógeno en el biogás a lo largo del tiempo. En los tres casos las proporciones evolucionan como se esperaba. El CO_2 alcanza un valor máximo alrededor del 85% para luego descender hasta valores cercanos al 50%, donde se mantiene hasta el final de la degradación. El metano asciende gradualmente hasta el entorno del 50% y permanece en esa proporción en el tiempo como el CO_2 . El H_2 aparece en proporciones por debajo del 20% (en este caso alcanza un 10% como máximo), de acuerdo con lo encontrado en la literatura (Young, 1995).

Las gráficas representadas no incluyen los tramos iniciales de las de referencia, correspondientes a las etapas de "ajuste" a las condiciones anaerobias. En MODUELO no se incluyen las etapas iniciales en que se produce consumo de oxígeno y generación de dióxido de carbono. Las gráficas presentadas se corresponderían con las etapas ácida y de metanización en el residuo, que en el modelo se pueden retrasar, cuando los períodos aerobios iniciales cobren importancia, mediante los parámetros "tiempo de activación", " t_{act} ".

Las máximas producciones de biogás se generan durante los primeros años y se encuentran dentro de los rangos presentados. Se emiten 22 Lgas/kgMS, de los cuales

7 L son de CH₄ el primer año, 20 Lgas/kgMS de los cuales 10 L son de CH₄ el segundo, por ejemplo. La liberación de biogás al cabo de treinta años ha sido de 170 L/KgMS de los cuales 84 L (un 49%) son CH₄, el 69% producido por metanogénesis del acetato (588000 moles en total) siendo el resto H₂ transformado.

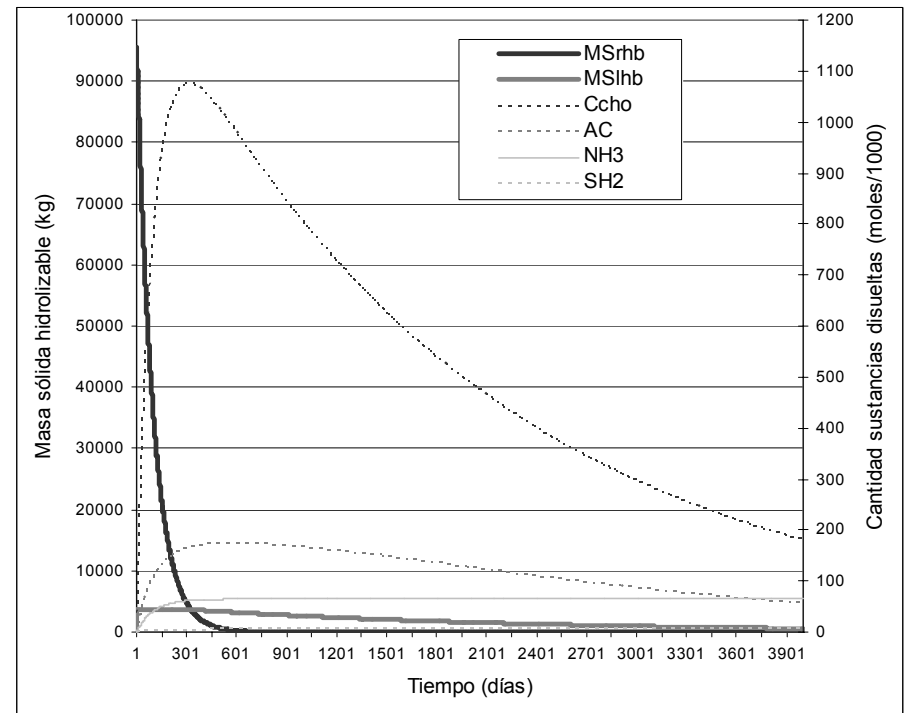
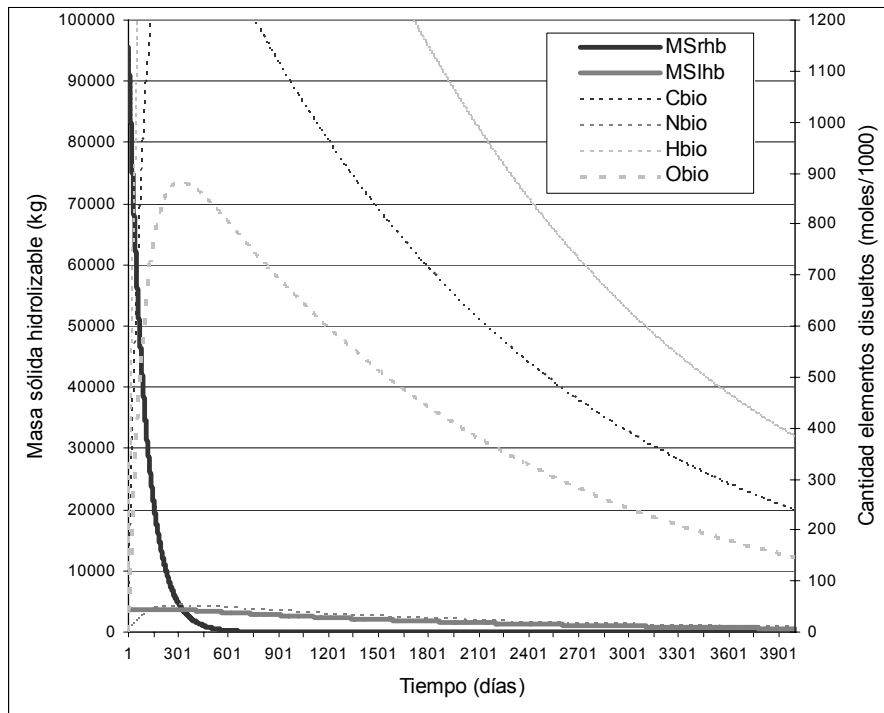


Figura 4.11. Resultados de las simulaciones de una celda cerrada con MODUELO 1 (a la derecha) y MODUELO 2 (a la izquierda): materiales sólidos y disueltos.

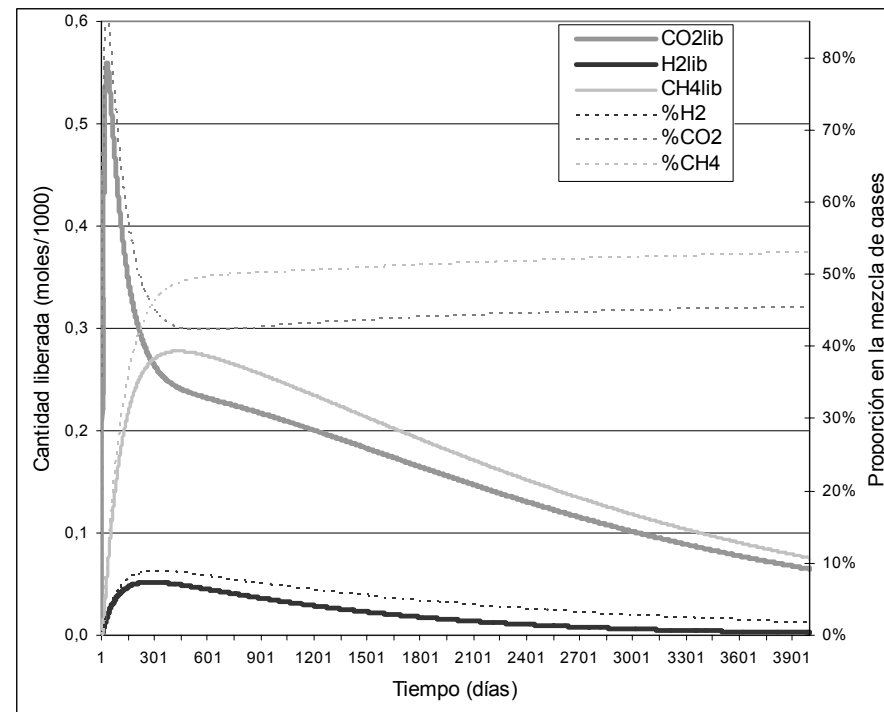
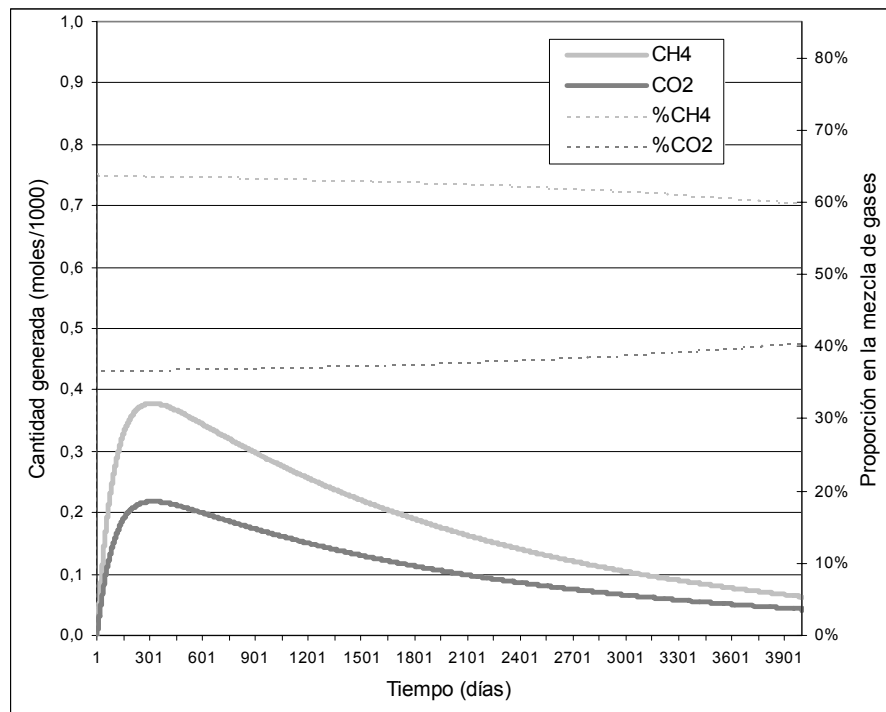


Figura 4.12. Resultados de las simulaciones de una celda cerrada con MODUELO 1 (a la derecha) y MODUELO 2 (a la izquierda): sustancias gaseosas.

4.3.7. Equilibrio carbónico

El CO₂ que se va generando puede pasar a la fase gaseosa, quedar disuelto (H₂CO₃) en el agua interior del vertedero, o formar bicarbonato (HCO₃⁻) o carbonato (CO₃²⁻). La concentración de CO₂ o H₂CO₃ disuelto en el agua depende directamente de la presión parcial del mismo en la fase gaseosa en contacto con el líquido (ley de Henry). Las otras dos especies estarán en equilibrio con la primera, en función del contenido de protones en la disolución. Cuanto menor sea el pH en el lixiviado el equilibrio carbónico estará más desplazado hacia el CO₂, lo que implica una menor capacidad de “almacenamiento” de CO₂, puesto que habrá menor cantidad de carbonatos o bicarbonatos, y la concentración de CO₂ disuelto es fija para una presión parcial determinada.

Para estimar aproximadamente la influencia que tiene despreciar el aumento en la capacidad de disolver CO₂ en el agua debido al equilibrio de cargas sobre los resultados de simulación de gases emitidos, se han realizado dos cálculos a partir de sendas simplificaciones: la propuesta en Tchobanoglous *et al.* (1994) y la presentada en El-Fadel *et al.* (1996a).

4.3.7.1. Aproximación de Tchobanoglous *et al.* (1994)

La alcalinidad carbonatada del lixiviado, cuyo pH suele oscilar entre valores de 4'5 y 7'5, es principalmente debida al bicarbonato (a esas concentraciones de protones la concentración de carbonato es despreciable). Supuesto que no existen otros compuestos alcalinos en el agua, la concentración de bicarbonato es directamente la alcalinidad, expresada en equivalentes por litro (4.111). La concentración global de especies carbónicas (C_T) será entonces (4.112), siendo el pH (4.113).

$$[HCO_3^-] (mol / L) = alcalinidad (eq / L) \quad (4.111)$$

$$C_T (M) = alcalinidad (eq / L) + PpCO_2 \cdot K_{HCO_2} (M) \quad (4.112)$$

$$pH = -\log \left[\frac{[CO_2] K_1}{[HCO_3^-]} \right] \quad (4.113)$$

En esta misma publicación se reúnen las características de los lixiviados en vertederos jóvenes y “maduros”. En los primeros las alcalinidades observadas varían

entre 1000 y 10000 ppm CaCO₃, siendo 3000 ppm CaCO₃ el valor más frecuente, mientras que en los segundos el rango se reduce a 200 – 1000 ppm.

Tomando el valor típico de vertederos jóvenes (3000 ppmCaCO₃ ó 60 meq/L de alcalinidad) se tiene una concentración 0'06 M de HCO₃⁻. Si la presión total de la fase gaseosa saturada de vapor de agua es de 1 atm y la proporción de CO₂ en la mezcla es del 85% (máxima) la cantidad de H₂CO₃ disuelto, suponiendo una temperatura de 50°C, es 0'02 M. La concentración global de especies carbónicas en el agua sería C_T = 0'08 M.

En el ejemplo desarrollado en el apartado anterior la fase líquida tiene un volumen de 108'7 m³, de manera que en las condiciones supuestas podrían quedar disueltos 9063 moles de C_T de los cuales 6524 son de bicarbonato.

4.3.7.2. Aproximación de El-Fadel *et al.* (1996a)

Siguiendo la expresión propuesta por El-Fadel *et al.* (1996a), el equilibrio de cargas (4.114) en el lixiviado respecto a la presión parcial de CO₂ y una fase sólida de carbonato cálcico puede escribirse, despreciando la presencia de otras especies alcalinas, como en (4.115). Entrando en esta ecuación con el valor de PpCO₂ se obtiene [H⁺], y con ella la concentración de CO₃²⁻ y HCO₃⁻.

$$\Sigma(Cation^{+}) + [H^{+}] - \Sigma(Acido^{-})_t - \frac{K_w}{[H^{+}]} = 0 \quad (4.114)$$

$$\frac{K_s \cdot \alpha 0}{K_H \cdot Pp_{CO_2}} + [H^{+}] - \left(\frac{\alpha 1 + 2\alpha 2}{\alpha 0} \right) \cdot K_H \cdot Pp_{CO_2} - [CH_3COO^{-}] - \frac{K_w}{[H^{+}]} = 0 \quad (4.115)$$

$$\alpha 0 = \left[1 + \frac{K_1}{[H^{+}]} + \frac{K_1 \cdot K_2}{[H^{+}]^2} \right]^{-1} \quad (4.116)$$

$$\alpha 1 = \left[\frac{[H^{+}]}{K_1} + 1 + \frac{K_2}{[H^{+}]} \right]^{-1} \quad (4.117)$$

$$\alpha 2 = \left[\frac{[H^{+}]^2}{K_1 \cdot K_2} + \frac{[H^{+}]}{K_2} + 1 \right]^{-1} \quad (4.118)$$

$$C_T = \frac{K_H}{\alpha_0} \cdot P p_{CO_2} \quad (4.119)$$

$$[CO_2 \text{ disuelto}] = \alpha_0 \cdot C_T \quad (4.120)$$

$$[HCO_3^-] = \alpha_1 \cdot C_T \quad (4.121)$$

$$[CO_3^{2-}] = \alpha_2 \cdot C_T \quad (4.122)$$

Considerando las condiciones del caso anterior (gas saturado de agua, con concentración 85% de CO₂ y 50°C) se obtiene un pH de 6, lo que supone 0'01 M de H₂CO₃. En la celda “cabrían” 3570 moles de C_T, de los cuales 1031 serían bicarbonatos.

4.3.7.3. Discusión

La capacidad de disolución y reacción del dióxido de carbono en agua permite un almacenamiento del mismo mayor que el calculado si se supone que es una especie no reactiva, como se ha asumido en el modelo propuesto. Frente a lo simulado, en la realidad además del ácido carbónico parte de la generación de CO₂ quedará disuelta en agua en forma principalmente de bicarbonato. Esta parte será más importante cuanto mayor sea el pH. Sobrepasada la capacidad de disolución en determinadas condiciones todo el CO₂ generado tenderá a formar gas y ser liberado, de forma que las reacciones químicas comentadas tienen un efecto de almacén limitado.

Según las tasas de emisión obtenidas en el caso de la celda cerrada (una media de 347 moles/día durante el primer año) la capacidad de almacén enseguida es superada por el CO₂ generado (en una semana en los primeros cálculos y en tres en los segundos). A partir de entonces el CO₂ que se va generando se libera o queda disuelto por equilibrio entre fases y las concentraciones calculadas varían también al cambiar la presencia de otros compuestos con carga iónica.

En este caso, por tanto, la desviación introducida al no simular los fenómenos comentados no resulta de gran importancia. En un vertedero real hay además otras sustancias que aportan alcalinidad y en cantidades muy importantes (NH₄⁺ fundamentalmente) lo cual reduciría las capacidades calculadas. Pero también se va renovando el agua entre los residuos, admitiendo y arrastrando más CO₂ que si permaneciese estancada. Siguiendo con el caso anterior, suponiendo una infiltración anual de 200 mm (valor habitual en climas húmedos) los moles de CO₂ “arrastrados”

por el lixiviado generado en un año, suponiendo la “celda vertedero” en estado estacionario, serían 39'2 m³ por la concentración de C_T admitida. Con los valores hallados se arrastrarían 3136 moles/año [según los basados en Tchobanoglous *et al.* (1994)] ó 1287 moles/año [calculados según El-Fadel *et al.* (1996a)]. Estas cantidades comparadas con la media emitida en los 30 años (26267 moles/año), indican que el error cometido en las tasas de emisión de CO₂ al no considerar los fenómenos de reacción del carbonato en el agua puede ser del orden del 10 %.

4.3.1. Resumen de los cambios en el modelo de biodegradación

En la Tabla 4.11 y Tabla 4.12 se resumen los cambios realizados en el modelo de degradación de los residuos en el vertedero.

Tabla 4.11. Resumen de cambios en el modelo MODUELO de degradación (I).

CONCEPTO	MODUELO 1	MODUELO 2
CARACTERIZACIÓN DEL RESIDUO		
Fracciones según biodegradabilidad	Inerte Hidrolizable gasificable Hidrolizable no gasificable	Biodegradable No biodegradable
Fracciones según biodegradabilidad	Lentamente hidrolizable Rápidamente hidrolizable	= =
“Fórmula química”	CHONS cenizas	CHONS (no considera fracciones inorgánicas)
Fracción “lixiviable” no “gasificable”	f _{hidro}	f _{ar}
Fracción “gasificable”	f _{hidro} ·f _{bio}	f _{bio}
Limitación “local” a la degradación	khidro, kbio	f _{ac}

Tabla 4.12. Resumen de cambios en el modelo MODUELO de degradación (II).

CONCEPTO	MODUELO 1	MODUELO 2
PROCESOS DE DEGRADACIÓN		
<i>Hidrólisis (primer orden)</i>		
Productos	CHONS biod. disuelto CHONS no biod. disuelt	CHO, CH ₃ COOH, CO ₂ , H ₂ , NH ₃ , SH ₂ CHONS no biod. dis.
<i>Acetogénesis (primer orden)</i>		
Cinética	No se plantea	Se plantea.
<i>Gasificación (primer orden)</i>		
Producción de metano	Conversión total de CHONS biod. disueltos	Consumo de acetato y de CO ₂ y H ₂
EQUILIBRIO DE GASES		
Modelo	No se plantea	Se plantea

4.4. RESUMEN DE PARÁMETROS DEL MODELO

La Tabla 4.13, Tabla 4.14 y Tabla 4.15 reúnen los parámetros a introducir en el programa para la simulación hidrológica del vertedero.

Tabla 4.13. Lista de parámetros de los modelos hidrológicos (I).

Modelo	Parámetro	Descripción
INFILTRACIÓN (HORTON)	$f_c^{(1)}$ (mm/h)	Tasa mínima de infiltración
	$f_0^{(1)}$ (mm/h)	Tasa máxima de infiltración, al comienzo de la lluvia
	$k^{(1)}$ (h^{-1})	Variación de la tasa de infiltración con el tiempo
EVAPO(TRANSPI)RACIÓN	$H_{EVA}^{(2)}$ (m)	Profundidad hasta la que se produce evaporación
	$H_{limite}^{(2)}$ (%)	Porcentaje de la humedad de capacidad de campo que no puede ser evapo(transpi)rada
ESCORRENTÍA SUPERFICIAL	$dp^{(2)}$ (mm)	Altura de acumulación máxima de agua sobre la superficie
	“conexión” ⁽¹⁾	Conexión de la escorrentía superficial a la red de drenaje
FLUJO HORIZONTAL	$Kh(1)$ (m/s)	Permeabilidad horizontal de la celda
	$m_x(2)$ (rad)	Pendiente de la capas de residuos según el eje x
	$m_y(2)$ (rad)	Pendiente de las capas de residuos según el eje y
FLUJO VERTICAL	$KV(1)$ (m/s)	Permeabilidad vertical de la celda
	$Kc(1)$ (m/s)	Permeabilidad vertical de la cobertura
	$ec(1)$ (m)	Espesor de la cobertura
FLUJO POR DREN	“tipo dren” (1)	Tipo de conducción existente en la celda
	$\beta(1)$ (rad)	Ángulo de la dirección del dren con el eje x
	$\alpha(1)$ (rad)	Inclinación de la superficie inferior de la capa hacia el dren
	$L_{in}(1)$ (m)	Longitud de influencia del dren
	$AD(1)$ (m ²)	Área equivalente del dren por celda
	$i(1)$	Pendiente de la conducción de drenaje
	$n(1)$	Coefficiente de rozamiento de Manning del conducto de drenaje

⁽¹⁾ Parámetros característicos de cada tipo de celda.

⁽²⁾ Parámetros generales del modelo.

Tabla 4.14. Lista de parámetros de los modelos hidrológicos (II).

Modelo	Parámetro	Descripción
CAPACIDAD DE CAMPO	$CCa_{ps}^{(1)}$ (%)	Máxima capacidad de campo expresada en cantidad de agua por peso seco
	$CCb_{ps}^{(2)}$ (%)	Mínima capacidad de campo (a presión infinita) expresada en cantidad de agua por peso seco
	$CCc^{(2)}$ (Kg/m ²)	Influencia de la sobrecarga sobre la capacidad de campo
PERMEABILIDAD	$K_0^{(1)}$ (m/s)	Permeabilidad inicial del residuo
	$a_K^{(2)}$ (m ⁻¹)	Variación de la permeabilidad del residuo con la profundidad
	$b_K^{(2)}$ (m ⁻¹)	Variación de la permeabilidad de la cobertura con la profundidad
PARÁMETROS GENERALES	$\omega_{SAT}^{(1)}$ (%)	Humedad de saturación
	$\omega^{(1)}$ (%)	Humedad del material
	$\rho^{(1)}$ (T/m ³)	Densidad aparente del material

⁽¹⁾ Parámetros característicos de cada tipo de celda.

⁽²⁾ Parámetros generales del modelo

Tabla 4.15. Parámetros del modelo de degradación propuesto

Modelo	Parámetro	Descripción
CARACTERIZACIÓN RESIDUO	T (°K)	Temperatura de simulación
	f_{bio}	Fracción biodegradable del componente considerado
	f_{ac}	Fracción de la parte biodegradable accesible al ataque de los microorganismos
HIDRÓLISIS	f_{ar}	Factor de arrastre: fracción de material inerte arrastrada por unidad de masa de material biodegradable hidrolizada
	kh_r (d^{-1})	Máxima velocidad de hidrólisis rápida
	kh_l (d^{-1})	Máxima velocidad de hidrólisis lenta
	$FH(P)$	Factor de influencia de la humedad en la hidrólisis
	$t_{\text{act},r}$ (años)	Tiempo de activación de la hidrólisis de los compuestos rápidamente biodegradables
	$t_{\text{act},l}$ (años)	Tiempo de activación de la hidrólisis de los compuesto lentamente biodegradables
	f_{AC}	Fracción del carbono del residuo que da lugar a acetato en la hidrólisis
ACETOGÉNESIS	f_{CHO}	Fracción del carbono del residuo que da lugar a compuestos intermedios disueltos
	k_A (d^{-1})	Velocidad de descomposición de los "compuestos orgánicos intermedios"
METANOGENÉNESIS ACETOCLÁSTICA	f_{AC}	Fracción del carbono de los compuestos intermedios que da lugar a acetato en la acetogénesis
	k_{AC} (d^{-1})	Velocidad de producción de metano a partir de acetato
METANOGENÉNESIS HIDROGENOFÍLICA	k_{H_2} (d^{-1})	Velocidad de producción de metano a partir de hidrógeno

4.5. REFERENCIAS

- ARIAS, A.; GIL, J. L.; SANCHEZ, J. M.; TEJERO, I.; SZANTO, M.; FANTELLI, M. y PALMA, J. H. (1995). "Estimating material losses in sanitary landfills through biological degradation". Actas del congreso "Sardinia 1995, Fifth International Waste Management and Landfill Symposium". 2 – 6 de octubre de 1995, CISA, Centro de Ingeniería Sanitaria y Ambiental, Cagliari, Italia. pp. 203-208.
- ASCE. American Society of Civil Engineers. Task committee on hydrology handbook. (1996). Hydrology handbook. ASCE, Nueva York.
- BAGCHI, A. y GANGULI, A. (1990). "Leachate apportionment in active landfills". Actas del congreso "13th Madison Waste Conference", septiembre de 1990, University of Wisconsin-Madison, Estados Unidos. pp.14 – 27.
- BARLAZ, M. A.; ELEAZER, W. E.; ODLE, W. S.; QIAN, X. y WANG, Y. S. (1997). "Biodegradative Analysis of Municipal Solid Waste in Laboratory-Scale Landfills", EPA/600/SR-97/071. Estados Unidos.
- BONORI, B.; PASQUALI, G. y BERGONZONI, M. (2001). "Landfill gas production valued with a mathematical method". Actas del congreso "Sardinia 2001, Eighth International Waste Management and Landfill Symposium". 1 – 5 de octubre de 2001, CISA, Centro de Ingeniería Sanitaria y Ambiental, Cagliari, Italia. pp. 443 – 450.
- DEMIREKLER, E.; ROWE, R. K. y UNLU, K. (1999). "Modeling leachate production from municipal solid waste landfills". Actas del congreso "Sardinia 99, Seventh International Waste Management and Landfill Symposium". 4 – 8 de octubre de 1999, CISA, Centro de Ingeniería Sanitaria y Ambiental, Cagliari, Italia. pp. 17 – 24.
- Directiva 1999/31/CE del Consejo de 26 de abril de 1999 relativa al vertido de Residuos (DOCE L nº182, de 16-7-1999).
- EHRIG, H.J. y KRUEMPELBECK, I. (2001). "The emission behaviour of old landfills in the aftercare phase" Actas del congreso "Sardinia 2001, Eighth International Waste Management and Landfill Symposium". 1 – 5 de octubre de 2001, CISA, Centro de Ingeniería Sanitaria y Ambiental, Cagliari, Italia. pp. 313 – 323.
- ESTRELA, T. (1993). *Metodologías y recomendaciones para la evaluación de recursos hídricos*. Centro de Estudios y Experimentación de Obras Públicas, Madrid.
- EL-FADEL, M.; FINDIKAKIS, A. N. y LECKIE, J. O. (1996a). "Transport of gas and heat in sanitary landfills I. Model Formulation." *Waste Management and Research*, 14(6), pp. 483 - 504.

- EL-FADEL, M.; FINDIKAKIS, A. N. y LECKIE, J. O. (1996b). "Temperature effects in modelling solid waste biodegradation". *Environmental Technology*, 17, pp. 915-935.
- HARGREAVES, G. H. y SAMANI, Z. A. (1982). "Estimating potential evapotranspiration". *Journal of Irrigation and drainage Engineering*. ASCE. 108 (3). pp. 225 – 230.
- HARRIES, C. R.; CROSS, C. J. y SMITH, R. (2001). "Development of a biochemical methane potential (BMP) test and application to testing of municipal solid waste samples". *Actas del congreso "Sardinia 2001, Eight International Waste Management and Landfill Symposium"*. 1 – 5 de octubre de 2001, CISA, Centro de Ingeniería Sanitaria y Ambiental, Cagliari, Italia. pp. 579 – 588.
- HUBER, W. C. y DICKINSON, R. E. (1988). *Storm water management model, version 4*. Environmental Protection Agency, Estados Unidos.
- HUITRIC, R. L.; RAKSIT, S. y HAUG, R. T. (1980). *Moisture retention of landfilled solid waste*. County Sanitation Districts of Los Angeles County, Los Angeles, Estados Unidos.
- LANDVA, A. O.; PELKEY, S. G. y VALSANGKAR, A. J. (1998). "Coefficient of permeability of municipal refuse". En *Environmental Geotechnics*, Sêco e Pinto Ed., Balkema, Rotterdam, Holanda.
- LEE, J. J.; JUNG, I. H.; LEE, W. B. y KIM, J. O. (1993). "Computer and experimental simulations of the production of methane gas from municipal solid waste". *Water Science and Technology*, 27(2), pp 225-234.
- MANASSERO, M; VAN IMPE, W. F. y BOUAZZA, A. (1997). "Waste disposal and containment". En *Environmental Geotechnics*. Kamon (ed) Rotterdam, Holanda.
- McBEAN, E.A.; POHLAND, R.; ROVERS y F. CRUTCHER, A. (1982). "Leachate collection design for containment landfills". *Journal of the environmental engineering division*, ASCE, 108, pp. 204 – 209.
- MUSGRAVE, G. W. (1955). *How much water enter the soils*. Departamento de Agricultura de Estados Unidos, Washington DC, pp. 151 – 159.
- PENMAN, H. L. (1963). "Vegetation and hydrology". *Comentario técnico N° 53*. Commonwealth Bureau of Soils, Harpenden, Gran Bretaña.
- POHLAND, F. G. (1975). "Sanitary Landfill Stabilization with Leachate Recycle and Residual Treatment". EPA/600/2-75-043. Environmental Protection Agency, Cincinnati, OH, Estados Unidos.

- POHLAND, F. G.; DERTIEN, J. T. y GHOSH, S. B. (1985). "Leachate and gas quality changes during landfill stabilization of municipal refuse" Actas del Tercer Congreso Internacional sobre Digestión Anaerobia. Massachusetts, Estados Unidos. pp. 185 – 201.
- Real Decreto 1481/2001, de 27 de diciembre, por el que se regula la eliminación de residuos mediante depósito en vertedero. (BOE núm. 25 de 29/01/2002).
- REVILLA, J. A.; LIAÑO, A. y SAINZ, J. A. (1982). *Apuntes de Hidrología Superficial Aplicada*. E.T.S.I.C.C.P. de la Universidad de Cantabria, Santander.
- ROWE, R. K. y NADARAJAH, P. (1996). "Estimating leachate drawdown due to pumping wells in landfills". Canadian Geotechnical Journal, 33(1), pp. 1-10.
- SCHROEDER, P. R.; DOZIER, T. S.; ZAPPI, P. A.; McENROE, B. M.,; SJOSTROM, J. W. y PEYTON, R. L. (1994). *The hydrologic evaluation of landfill performance (HELP) model. Engineering documentation for version 3*. EPA/600/R-94/168b. Environmental Protection Agency, Cincinnati, OH, Estados Unidos.
- SHAW, E. M. (1994). *Hydrology in Practice*. Chapman & Hall, Londres.
- STUMM, W. y MORGAN, J. J. (1996). *Aquatic Chemistry: chemical equilibria and rates in natural waters*. John Wiley and sons, Nueva York, Estados Unidos.
- TCHOBANOGLIOUS, G.; THEISEN, H. y VIGIL, S. (1994). *Gestión Integral de Residuos Sólidos*. McGraw Hill, Madrid.
- YOUNG, A. (1995). "Mathematical modelling of the methanogenic ecosystem". En SENIOR, Eric (1995). *Microbiology of landfill sites*. Lewis Publisher, Estados Unidos.
- WILLIAMS, N. D.; POHLAND, F. G.; MCGOWAN, K. C. y SAUNDERS, F. M. (1987). *Simulation of leachate generation from municipal solid waste*. Hazardous waste engineering laboratory office of research and development. EPA/600/2-87/059, Cincinnati, OH, Estados Unidos.
- WONG, J. (1977). "The design of a system for collecting leachate from a lined landfill site". Water Resources Research, 13(2), pp. 404 – 410.
- ZHENDER, A. J. B.; INGVORSEN, K. y MARTI T. (1982). "Microbiology of methane bacteria". En *Anaerobic digestion: second international symposium*. Hughes et al., Eds., Elsevier biomedical Press, Amsterdam. pp 45 – 66.