



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y BIOTECNOLOGÍA

ESTUDIO DE LA GENERACIÓN Y TRANSPORTE DE GAS SULFHÍDRICO EN LAS REDES
DE AGUAS SERVIDAS

MEMORIA PARA OPTAR AL TITULO DE INGENIERO CIVIL QUÍMICO

ARI ROBERTO NUDMAN GUENDELMAN

PROFESOR GUÍA:

LEANDRO HERRERA ZEPPELIN

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:

FRANCISCO GRACIA CAROCA

LUIS FELIPE SALAZAR CANALA-ECHEVERRÍA

SANTIAGO DE CHILE,

2009

No sólo a los que más me
quieren, sino que
especialmente a los que más
quiero.

Agradecimientos

En primer lugar, corresponde agradecer a Fepe y Ale, quienes pensaron en mí para realizar este trabajo de memoria hace ya más de un año. Quiero agradecer también a mis amigos, que estuvieron constantemente para escuchar mis penurias sufridas por el arduo trabajo realizado y dándome apoyo siempre. A mi novia por supuesto, quizás por ser la que más confió en mí, en todo momento y por su enconado e irrestricto apoyo cuando más complicado se veía el panorama. También quiero agradecer a mi familia, que aunque los dejé un tanto de lado durante este período, sé que mi madre, mis hermanos y (quizás inconscientemente) la pequeña Mayita siempre estuvieron pendientes de mi y confiados en que este proyecto terminaría de la mejor manera posible para coronar el esfuerzo de años. No puedo dejar de lado a toda la gente de Aguas Andinas, tanto por darme la posibilidad de realizar mi trabajo de memoria como por el financiamiento, además de la ayuda de todos en el área en la que trabajé y la compañía de toda la gente de Riles, que me hicieron sentir uno más entre ellos. Tampoco puedo dejar de mencionar a mi comisión, no solo en particular a Luis Felipe por su permanente ayuda sino que también al profesor Herrera por curtirme en las áridas artes de la ingeniería.

Pero no corresponde agradecer sólo a los que estuvieron durante el año que duró el trabajo de memoria, sino que también a quienes estuvieron durante los largos años de universidad, aquellos compañeros que hicieron que las clases fueran menos aburridas, que los estudios fueran menos tediosos, que las horas de almuerzo fueran un espacio de distensión y relajó, y por supuesto, aquellos que hicieron que cada fin de semestre se pudiera celebrar como se merecía. A quienes estuvieron en aquellos lejanos años de mechones, compartiendo sueños y esperanzas que se materializarían en tantos años después, y que entonces se veían casi inalcanzables, correspondientes a un futuro que, como buen mechón iluso, pensaba que quizás no sería capaz de llegar a él. El haber conocido a tanta gente, y el haber compartido con tantos pudo haber traído alguna merma académica, pero todo lo vivido lo recompensa y con creces. Algunos dicen que la ingeniería es la carrera más árida que se puede cursar, gracias a la gente que conocí, puedo afirmar todo lo contrario.

No son necesarias más palabras, pues a cada quién que corresponda, le agradeceré personalmente y le recordaré por siempre por haber sido parte de esta particular aventura a través de la Escuela de Ingeniería de la Universidad de Chile.

“No sólo no hubiera sido nada sin ustedes, sino con toda la gente que estuvo desde el comienzo. Algunos, siguen hasta hoy...”

Resumen

El presente trabajo de memoria tuvo como principal objetivo implementar un modelo matemático predictivo para la concentración de sulfuro de hidrógeno gaseoso en las redes de aguas servidas de la ciudad de Santiago.

El modelamiento se realizó para un sector dentro de la comuna de Puente Alto, que posee una red de 1867 tramos de colectores de aguas servidas, de los cuales sólo se ingresaron al programa los 317 tramos de colectores que poseían un diámetro mayor a 250 milímetros, con sus respectivos diámetros, largos, pendientes y variación de nivel de agua a lo largo del tiempo. El perfil de temperaturas utilizado fue idéntico para todos los colectores, de carácter sinusoidal con un promedio de 17 °C, un mínimo de 15 °C y un máximo de 19 °C, basado en datos empíricos. Las observaciones en terreno requeridas fueron encargadas a un laboratorio certificado.

El modelo generado describe el proceso como colectores herméticos y descarta fenómenos y particularidades que existen en las redes de aguas servidas tales como singularidades hidráulicas, caídas de agua y escapes de gas a través de las tapas de cámara, y también considera algunas simplificaciones tales como la existencia de H₂S como el único gas presente (además del aire), el descarte de flujo de H₂S a las paredes de los colectores y la no existencia de descarga de riles.

Para contrastar el modelamiento con datos empíricos, se usaron mediciones en terreno tanto de calidad de agua como de aire, en cinco puntos específicos seleccionados de la red, que recibían el flujo de cuencas más acotadas dentro de la red. Los parámetros fueron DBO₅, S², SO₄⁻² (agua) y H₂S gaseoso. En particular, además, las mediciones de DBO₅ observadas fueron utilizadas para construir perfiles que fueron ingresados al modelo para considerar variación de concentración de DBO₅ a lo largo del día.

Para las predicciones de concentración de sulfuro disuelto en agua en los cinco puntos, se realizaron calibraciones independientes entre sí, variando dos parámetros que controlan la generación de sulfuro. Con dichos valores calibrados, se procede nuevamente a contrastar, para cada punto, las mediciones con las predicciones. Como resultado final se obtiene un modelo que se puede utilizar para predecir la concentración de sulfuro total disuelto en agua para 4 de los 5 puntos, necesitando ingresar como variables en función del tiempo solamente un perfil de DBO₅ y el nivel del agua, sin embargo esta calibración no logró ser útil para la predicción de concentración de sulfuro de hidrógeno gaseoso, pero este trabajo puede constituir una buena base a partir de la cual generar un modelo predictivo de la concentración de gas a partir de las predicciones de sulfuro disuelto.

Finalmente, posterior a la calibración se obtuvieron los siguientes errores cuadráticos medios (unidades en mg/l) para cada punto respectivamente: 0,47; 2,25; 4,52; 0,37; 1,54. Los dos parámetros ajustados (M y N) tuvieron una variación que se expresa a continuación, para cada punto, como la razón entre el valor calibrado y el valor original: 0,91 (M) y 0,85 (N); 0,87 y 0,99; 0,59 y 1,16; 0,71 y 1,15; 1,03 y 1,07

Abstract

The present work had as a main objective to implement a mathematical predictive model for the concentration of gaseous hydrogen sulfide on the sewage networks at the city of Santiago.

The modeling was developed for a sector inside the commune of Puente Alto, which has a network of 1867 sewers, of which only the 317 that had a diameter of over 250 millimeters were added to the program, with their respective diameters, lengths, slopes and water level variation along the time. The temperatures were entered as a sinusoidal time function, equal to every sewer, with an average of 17 °C, a minimum of 15 °C and a maximum of 19 °C, based on empirical data. The on-terrain required measures were requested to a certified lab.

The model generated describes the process as hermetic sewers and discards phenomena and particularities that may exist in the networks such as hydraulic singularities, waterfalls and gas escapes through the manholes, and also considers simplifications such as the existence of H₂S as the only gas present (besides air), the discarding of H₂S flux to the sewer walls and the non-existence of liquid industrial waste discharges.

For contrasting the modeling with empirical data, on-terrain measures were used, both of air and of water quality, on five specified points of the network, which received water flow from more enclosed zones inside the network. The parameters were BOD₅, S⁻², SO₄⁻² and gaseous H₂S. Specifically, the BOD₅ measures were used to build functions to be added into the model in order to consider BOD₅ variations along the day.

For the predictions of dissolved sulfide concentrations on water on the five points, independent calibrations were made for each point, varying two parameters that control the sulfide generation. With those values calibrated, a new contrast is made, again for each point, for sulfide predictions and measures. As a final result, a model that can be used for predicting total dissolved sulfide in water concentration is obtained for 4 of the 5 points, which uses as input data the time-variable functions of BOD₅ and water level. However, this calibration wasn't useful for predicting the gaseous hydrogen sulfide concentration, but this work may constitute a good base from which a gaseous H₂S predictive model can be developed.

Finally, after the calibration, the following values for the square mean error for each of the five points were obtained (units in mg/l): 0,47; 2,25; 4,52; 0,37; 1,54. The two adjusted parameters (M and N) had the following variation as stated for each point, considered as the rate between the adjusted value and the original value: 0,91 (M) and 0,85 (N); 0,87 and 0,99; 0,59 and 1,16; 0,71 and 1,15; 1,03 and 1,07

Tabla de Contenidos

Agradecimientos.....	iii
Resumen	iv
Abstract.....	v
Tabla de Contenidos.....	vi
1. Introducción.....	1
1.1. Antecedentes Bibliográficos.....	1
1.2. Modelos de generación de sulfuro.....	6
1.3. Descripción del proyecto y Justificación	10
1.4. Zona de estudio	12
1.5. Objetivos.....	15
Objetivos Generales	15
Objetivos Específicos.....	15
2. Metodología	16
3. Resultados	17
Simulaciones.....	25
Punto 1 (Concha y Toro – Domingo Tocornal)	27
Punto 2 (Ernesto Alvear – Eyzaguirre)	30
Punto 3 (Ejército Libertador – Rafael Alberti).....	32
Punto 4 (Ejército Libertador – La Conquista)	35
Punto 5: T-11 (extremo aguas abajo o punto de salida del sistema)	38
4. Discusiones	42
Punto 1 (Concha y Toro – D. Tocornal)	42
Punto 2 (Ernesto Alvear – Eyzaguirre)	43
Punto 3 (Ejército Libertador – Rafael Alberti).....	44
Punto 4 (Ejército Libertador – La Conquista)	46

Punto 5 (T-11, salida del sistema)	46
5. Conclusiones	48
6. Referencias	51
Anexos	53
1. Perfil de temperaturas (único para toda la red)	53
2. Perfiles DBO ₅	54
Datos DBO ₅ punto 1 (Concha y Toro – Tocornal)	54
Datos DBO ₅ punto 2 (Ernesto Alvear – Eyzaguirre).....	55
Datos DBO ₅ Punto 3 (Ejército Libertador – Rafael Alberti).....	57
Datos DBO ₅ punto 4 (Ejército Libertador – La Conquista)	58
Datos DBO ₅ Punto 5 (T-11, punto de salida del sistema)	59
3. Observaciones Sulfato.....	61
Datos sulfato punto 1 (Concha y Toro – Domingo Tocornal)	61
Datos sulfato punto 2 (Ernesto Alvear – Eyzaguirre)	61
Datos sulfato punto 3 (Ejército Libertador – Rafael Alberti).....	62
Datos sulfato punto 4 (Ejército Libertador – La Conquista)	62
Datos sulfato punto 5 (T-11, salida del sistema)	63
4. Programa de simulación	63
5. Código programa de calibración	84
6. Nomenclatura.....	86

1. Introducción

1.1. Antecedentes Bibliográficos

Los problemas de emisión de malos olores y de corrosión en los sistemas de recolección de aguas servidas han sido algo frecuente desde el siglo pasado, afectando a las mismas empresas sanitarias que transportan las aguas servidas descargadas y a la comunidad.

La historia de la ingeniería sanitaria y ambiental indica que desde que han existido sistemas de transporte de aguas de desecho doméstico, han existido emisiones de compuestos con malos olores y nocivos para el organismo humano. Por otra parte, la infraestructura que conforma dichos sistemas se ha visto deteriorada, corroída, e incluso en algunas ocasiones con daño estructural severo, cuya razón no era evidente. A comienzos del siglo XIX en la ciudad de Londres se podían contar más de 200.000 fosas sépticas domiciliarias, sin embargo, a mediados del mismo siglo se introdujo masivamente la instalación de inodoros en las casas, lo que incrementó insospechadamente el flujo de agua que debía descargar al río Támesis. Así, el sistema de drenaje de aguas lluvia comenzó a verse colapsado por aguas servidas sin tratar que tributaban al río. El verano del año 1858 fue inusualmente caluroso, lo que derivó en que las aguas servidas produjeran una pestilencia insoportable para la ciudad. El problema alcanzó una magnitud tal que los honorables de la Cámara Baja del parlamento británico y las cortes de justicia se vieron imposibilitados de realizar sus labores, por lo que la Cámara de los Comunes decidió promulgar una ley, en un tiempo récord de 18 días, que financiaba totalmente el diseño y la construcción de una red de colectores de aguas servidas acorde a las necesidades sanitarias de la ciudad de Londres, que aún hasta la actualidad permanece operativa. El ingeniero Sir Joseph Bazalgette fue el encargado de liderar la obra, considerada de una magnitud titánica para la ingeniería de la época. Este suceso histórico es conocido como el “The London’s Great Stink” [1].

El sulfuro de hidrógeno es un gas inorgánico que adquiere dicho nombre cuando el ácido sulfhídrico (H_2S) se transfiere a fase gas. Este gas se reconoce con facilidad por tener un desagradable olor a huevos en descomposición, además de ser el gas natural más venenoso que se conozca, teniendo una $LC50^1$ de 800 ppm por 5 minutos en humanos, de acuerdo a su ficha MSDS [2]. Se puede encontrar este compuesto en el ambiente en concentraciones que oscilan entre 0,0001 y 0,0003 ppm. Es perceptible por el olfato humano a partir de 0,02 ppm y en rangos de entre 0,1 y 0,5 ppm puede comenzar a provocar irritación en las mucosas nasales y eventualmente asfixia. En concentraciones superiores a 50 ppm comienza a provocar daños en los ojos “paraliza” el nervio olfatorio si la concentración de este gas supera las 150 ppm, por lo que se deja de sentir olor, constituyendo un escenario extremadamente peligroso para una persona que esté expuesta. Puede provocar edemas pulmonares (que eventualmente terminarán en muerte) para una exposición de 350 ppm, y en concentraciones superiores a 1000 ppm,

¹ $LC50$: Concentración que resulta letal para el 50% de las muestras estudiadas para un período de tiempo especificado

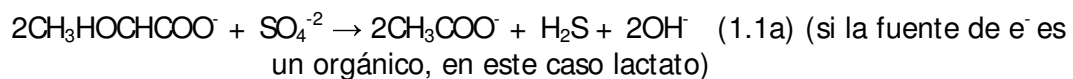
puede causar la muerte instantánea. El sulfuro ocupa el ligando del ión ferroso de la hemoglobina, inhibiendo la unión del oxígeno en el mismo ligando y el posterior transporte de oxígeno en la sangre.

Con una densidad de 1,36 g/l a 20 °C y pH de 7.0, es un gas más pesado que el aire. Para condensarse, necesita alcanzar su punto de ebullición, que se encuentra en los -62 °C. A 20 °C, su solubilidad en agua pura es de 3850 mg/l.

El sulfuro de hidrógeno se encuentra en las aguas servidas como residuo de algunos procesos industriales o se genera a partir de putrefacción o reducción de sulfatos presentes en las aguas.

Por hipótesis las aguas servidas domiciliarias en la ciudad de Santiago ingresan a los colectores libres de sulfuro, pero con una alta concentración de sulfato, por lo que el ácido sulfhídrico que se encuentra disuelto en las aguas servidas es generado mayoritariamente por la reducción anaeróbica del sulfato, debido a la acción de bacterias reductoras de sulfato (SRB, por sus siglas en inglés) como *Desulfovibrio* y *Desulfotomaculum* [3]. Estas bacterias pueden llevar a cabo reducción de sulfato asimilatoria o no asimilatoria. La reducción asimilatoria de sulfato tiene como fin la obtención de sulfuro para la síntesis de nutrientes de las mismas bacterias (aminoácidos como cisteína o metionina, o algunas proteínas), mientras que en la reducción no asimilatoria, o desasimilatoria, el sulfuro producido es excretado por las bacterias. El fenómeno de generación de H₂S en las aguas servidas es de carácter no asimilatorio. La energía involucrada en la reducción de las especies sulfatadas por parte de las bacterias proviene de las fuentes de carbono que ellas dispongan, tales como lactatos o piruvatos (presentes en las aguas servidas debido a su carácter orgánico) en caso de que las bacterias crezcan heterotróficamente, sin embargo en otras condiciones o ambientes también podrían extraerlos de hidrógeno gaseoso (H₂) creciendo autotróficamente [4].

El proceso puede seguir las diferentes reacciones electroquímicas, dependiendo de qué compuesto será el donador de electrones:



Dado que la generación de sulfuro sólo ocurre en condiciones anaeróbicas, es inhibida en presencia de oxígeno disuelto, o algún otro componente más termodinámicamente propenso a aceptar electrones como el nitrato o el mismo oxígeno disuelto. Por otra parte, el sulfuro de hidrógeno también puede ser producido debido a la desulfuración de la cisteína. Este compuesto es un aminoácido no esencial cuya estructura es la siguiente:

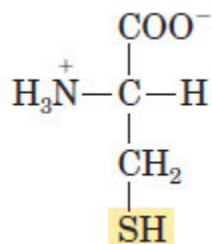


Figura 1: Estructura de la cisteína

Está presente en las carnes animales de consumo masivo (como pollo y cerdo), en derivados de productos animales (huevos, lácteos, suero de leche, etc.) y también en algunos vegetales (como cebolla, pimentón y ajo), por lo que se puede encontrar en las aguas de desecho domiciliaria. En presencia de la enzima cisteína desulfhidrasa, pierde el átomo de azufre, produciendo piruvato, amoníaco y ácido sulfhídrico [5].

La mayor parte de las bacterias y microorganismos se fijan a las superficies cercanas. Las SRB no son una excepción y forman colonias adheridas a las paredes de los ductos del alcantarillado formando un biofilm, por lo que se puede asumir que no realizan la acción reductora de sulfato en el seno de la fase líquida de la corriente de agua que circula por el alcantarillado. Más específicamente, estas bacterias se encuentran tanto en el biofilm como en los depósitos que existan en los colectores debido a que tienden a agruparse en colonias de mayor tamaño. El biofilm es una sustancia relativamente gelatinosa, compuesta por sólidos inertes y bacterias de diverso tipo (no sólo SRB). Cuando ya se ha desarrollado y formado por completo, se pueden distinguir en el biofilm tres zonas distintas, con diferentes condiciones oxidativas o reductoras debido a la concentración de oxígeno disuelto presente en cada una de ellas. Es lógico pensar entonces que en cada una de estas zonas se tendrán bacterias diferentes, aunque algunas de ellas son capaces de vivir en cualquiera de las capas del biofilm [6]. La siguiente figura esquematiza la naturaleza del biofilm en la pared de un colector:

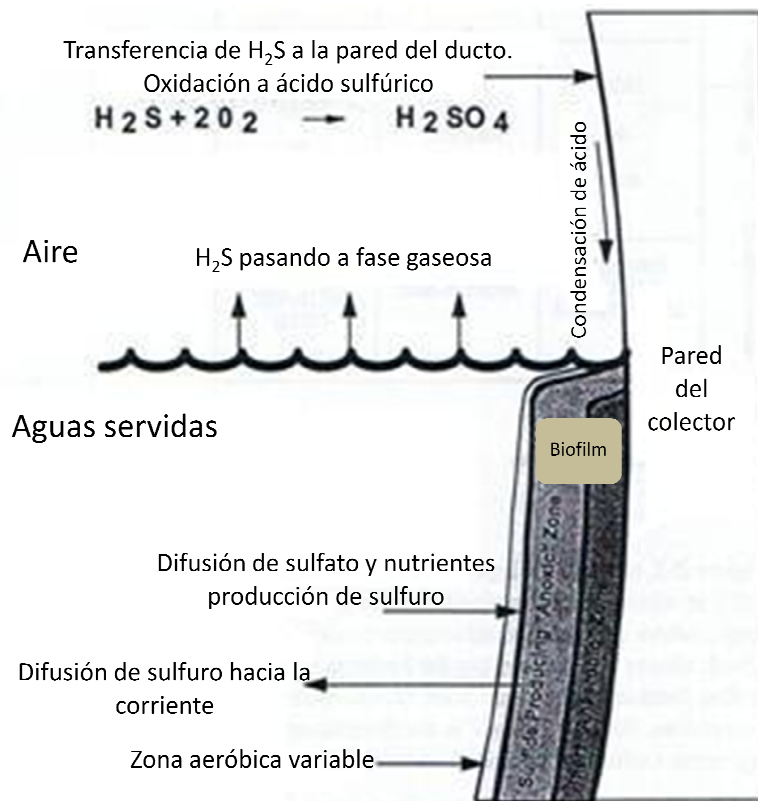


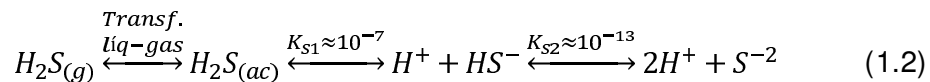
Figura 2: esquema de biofilm en un colector de aguas servidas

La primera región que se aprecia de izquierda a derecha es llamada “zona aeróbica” ya que es la que contiene la mayor concentración de oxígeno disuelto con respecto a las otras zonas, posee bacterias facultativas que utilizan éste oxígeno para degradar compuestos orgánicos y generar nueva biomasa, mientras que CO_2 y H_2O son transferidos de vuelta a la corriente. Esta capa es la más delgada que puede poseer el biofilm, y en algunos casos puede ni siquiera estar presente [6].

La segunda región que se ve corresponde a la “zona anóxica”, que recibe ese nombre debido a que no presenta oxígeno disuelto, por lo que las bacterias facultativas que existen, encuentran en compuestos como nitrato (NO_3^-), nitrito (NO_2^-), sulfato (SO_4^{2-}) y sulfito (SO_3^{2-}) aceptores terminales de electrones para llevar a cabo la respiración celular. Cada uno de estos compuestos es reducido, formando nitrógeno gaseoso o sulfuro, dependiendo de la especie involucrada. Cuando las bacterias en esta zona producen sulfuro, éste es transferido de vuelta a la corriente de agua, y de existir una zona aeróbica, esta puede oxidar el sulfuro nuevamente a sulfato. Cabe mencionar que, en el caso de que existan compuestos tanto nitrogenados como sulfatados, estas bacterias favorecen los nitratos y nitritos como fuente de O_2 por sobre sulfato y sulfito debido a que obtendrán mayor cantidad de energía disponible al utilizar dichas sustancias como sustrato. Sin embargo, las aguas servidas residenciales rara vez contienen concentraciones importantes de nitrato, no así de sulfato [6].

Finalmente, se encuentra la zona anaeróbica, que es la que está adyacente a las paredes del colector. Las bacterias que residen en esta parte contribuyen en menor manera a la reducción de sulfato ya que muy poca DBO soluble (y otros sustratos en general) es capaz de alcanzar esta región debido a la alta resistencia a la transferencia que oponen las porciones previas de biofilm. Como aceptor de electrones acá se encuentran compuestos orgánicos que contengan carbono, y se produce por lo general metano [6].

De todo lo expuesto recientemente, se infiere que la producción de sulfuro en las aguas servidas se genera exclusivamente en la porción mojada de las paredes de un colector por las aguas servidas, y dependiendo en un principio de factores como la concentración de orgánicos, oxígeno disuelto, presencia de nitrato, concentración de sulfato y el área húmeda de la pared del colector, entre otros. Además, al tratarse de un proceso biológico, es natural que se presente una dependencia con la temperatura de las aguas, en términos de que, hasta una cierta cota máxima, la actividad metabólica y por ende la generación de sulfuro se incrementarán conforme aumenta la temperatura. A su vez, independiente de la tasa de producción de sulfuro, de no existir nitrato ni oxígeno presentes en el agua, no se generará una zona aeróbica en el biofilm que se encargue de reoxidar el sulfuro cuando éste esté siendo transportado nuevamente a la corriente desde la zona anóxica. Éste alcanzará un equilibrio químico entre cuatro especies distintas: ión sulfuro (S^{2-}), ión bisulfuro o sulfhidrato (HS^-), ácido sulfhídrico o sulfuro de hidrógeno acuoso ($H_2S_{(aq)}$) y sulfuro de hidrógeno gaseoso ($H_2S_{(g)}$), tal como se puede diagramar en el siguiente balance [7]:



Por otra parte, se desprende que las emisiones de H_2S que son liberadas a la atmósfera dependen de la concentración del mismo compuesto en su fase acuosa y no de la concentración de H^+ ni de HS^- (ya que éstas son especies ionizadas y por ende no pueden ser transferidas a fase gaseosa), reafirmando lo propuesto en la ecuación (1.2). El equilibrio entre dos especies de sulfuro presentes en las aguas servidas está controlada por el pH de la solución, y experimentalmente se ha determinado que para un pH en torno a 7.0 y una temperatura de 20 °C ambas especies tienen la misma actividad [8], por lo que en equilibrio no se favorece la generación de ninguna de ellas. Este punto de equilibrio coincide con el valor promedio del pH de las aguas servidas domiciliarias, considerando que puede fluctuar entre 6 y 8. Para un pH cercano a 14 se alcanza el equilibrio entre HS^- y S^{2-} , en la figura 2 se puede notar gráficamente la variación de la fracción de cada una de las tres especies de sulfuro en el agua con respecto al pH de la solución [9]:

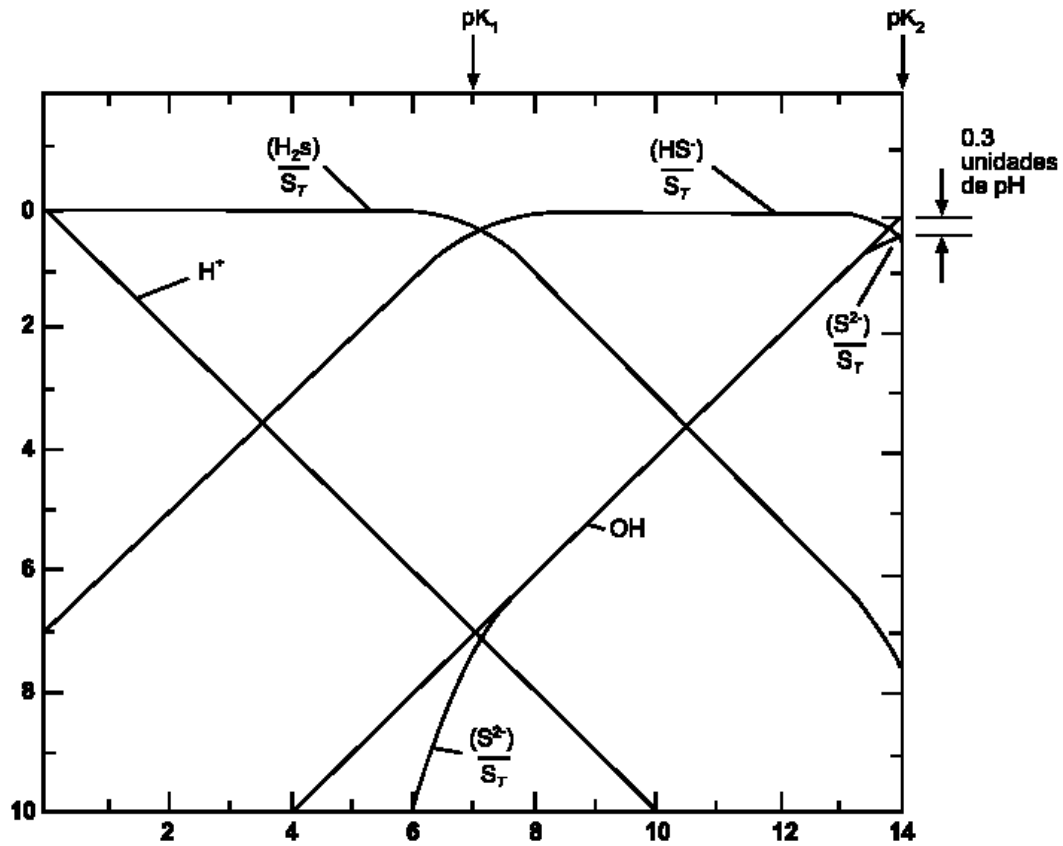


Figura 3: diagrama de la distribución logarítmica de las especies solubles de sulfuros. Eje vertical: $-\log$ (fracción de la concentración de sulfuros totales), eje horizontal: unidades de pH

1.2. Modelos de generación de sulfuro

Los modelos de generación de sulfuro para colectores de aguas servidas, pueden separarse en dos grupos según si los colectores operan llenos o no. La diferencia radica principalmente en que en un colector lleno no habrá fase gaseosa. Para el estudio realizado en la presente memoria, sólo se abordarán los modelos para colectores no llenos debido a que de esa forma operan las redes en estudio.

Las tasas de emisión de ácido sulfhídrico pueden determinarse a través del estudio de diversos modelos empíricos o semi empíricos ya existentes. Todos ellos se basan en la ecuación general de transferencia de masa,

$$-\frac{d[H_2S_{(aq)}]}{dt} = K_L \frac{A_s}{V} ([H_2S_{(aq)}] - K_H P_{H_2S}) \quad (1.3)$$

La cual propone que el ácido sulfhídrico en fase acuosa es transferido desde las aguas servidas a fase gaseosa, a una velocidad que depende de la concentración del ácido sulfhídrico en fase acuosa. Los parámetros de la ecuación que no cambian son el

coeficiente global de transferencia líquido-gas, el área de intercambio entre ambas fases, el volumen de la fase acuosa, la constante de Henry y la presión parcial del sulfuro de hidrógeno en la fase gaseosa dentro del ducto. Diversas consideraciones dependiendo de la naturaleza de los estudios, harán que a partir de dicha expresión se puedan desarrollar distintos modelos para diversas condiciones de cada problema, los cuales podrán considerar el efecto de la temperatura, demanda bioquímica de oxígeno, y constantes termodinámicas de equilibrio para las reacciones que involucren H₂S en el sistema.

A priori se puede pensar que los modelos que describen esta serie de fenómenos en su conjunto, dependen de tres grupos de factores distintos: la topografía de las redes (diámetro, largo, pendiente), la microbiología (bacterias presentes en las aguas y en el biofilm en los colectores) la calidad de las aguas (carga orgánica, oxígeno disuelto, concentración de sulfato) y las condiciones fluidodinámicas en las aguas (velocidad, presión, etc). En efecto, esto es así, sin embargo los modelos desarrollados anteriormente y que serán implementados en este trabajo, han sido realizados de manera empírica, y por ende han descartado algunas de las variables mencionadas previamente de modo de minimizar los grados de libertad.

En primera instancia, es necesario disponer de una ecuación que describa el fenómeno de generación de sulfuros totales en el agua. Pomeroy y Parkhurst [10] desarrollaron un modelo empírico que describe la acumulación de sulfuros totales disueltos en el agua:

$$\frac{d[S_T]}{dt} = \frac{M[DBO_5](1,07)^{(T-20)}}{r_h} - \frac{N(mu)^{3/8}[S_T]}{d_m} \quad (1.4)$$

En este modelo,

- $d[S_T]/dt$: acumulación de sulfuro total en el tiempo para un tramo de colector, [mg/l-h]
- $[DBO_5]$: demanda bioquímica de oxígeno en el agua al quinto día, [mg/l]
- T : temperatura, [°C]
- r_h : radio hidráulico (razón entre el área mojada y el perímetro mojado), [m]
- m : pendiente del colector, [m/100m]
- u : velocidad promedio del agua, [m/s]
- $[S_T]$: concentración de sulfuro total disuelto, [mg/l]
- d_m : profundidad hidráulica (razón entre el área mojada y el ancho de la interfase agua-aire), [m]

La siguiente figura permite identificar mejor los términos relativos a la topografía de los colectores (el diámetro D , el ancho de interfase agua-aire w , el perímetro mojado P_m y el área mojada A_m):

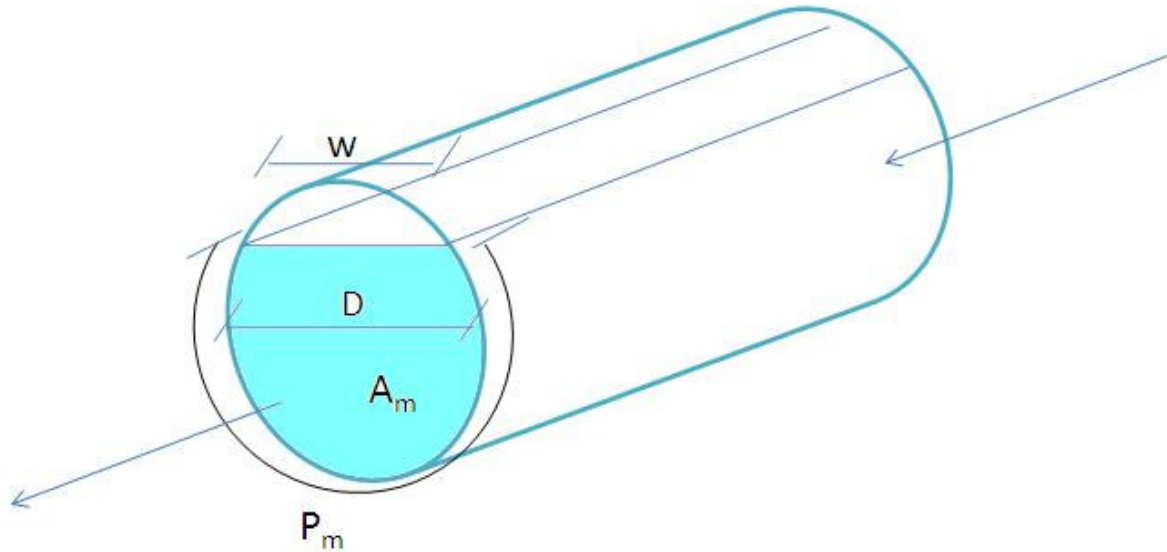


Figura 4: esquema de un colector

A su vez, M y N son parámetros adimensionales que se pueden calibrar para ajustar la respuesta del modelo a los datos reales. Los autores sostienen que un valor de $32 \cdot 10^{-5}$ es un valor adecuado para M, y uno de 0,64 para N. Este modelo es válido para colectores parcialmente llenos, y que sean de descarga gravitacional. Es claro que el primer término representa la generación de sulfuro, ya que esta depende de la concentración de orgánicos, efecto temperatura y porción mojada del colector. El otro término caracteriza la cantidad de sulfuros totales que sale de dicho tramo y pasa al siguiente, debido a las características fluidodinámicas del agua: velocidad, pendiente del colector y profundidad hidráulica. Es claro que para que esta ecuación pueda ser usada de manera adecuada, es necesario incluir otros términos para completar un balance de masa que permita la inclusión de este modelo en un algoritmo, que tomando la concentración de sulfuro presente en el tramo anterior a un tramo dado y en el instante inmediatamente previo, permita conocer la acumulación real que ocurre en los colectores tomando en cuenta otros fenómenos que hasta este punto no han sido considerados. El planteamiento de dicho balance es el siguiente:

$$\frac{d[S_r]}{dt}_{t,x} = F^S_{t-1,x-1} + \text{Generación}_{t,x} - F^S_{t,x} - F^{(g)}_{t,x} \quad (1.5)$$

Es decir, la acumulación de sulfuros totales en la fase acuosa para cada nodo en cada instante, es igual (en orden según aparecen en la ecuación) al flujo de sulfuros totales que ingresa del nodo anterior, más lo que se genera (dado por el primer término de la ecuación (1.4)), menos lo que se consume (dado por el segundo término de la

misma ecuación), menos el flujo de sulfuro total que sale hacia el nodo siguiente, menos el término $F^{(9)}$, que corresponde al H_2S que fue transferido desde la fase acuosa a la fase gaseosa. Por lo tanto, en este punto se deben comenzar a incluir nuevas consideraciones para conocer los otros términos del balance.

Las distintas especies de sulfuro disueltas en el agua se pueden desglosar como sigue (en unidades molares o másicas):

$$S_T = H_2S_{(aq)} + HS^- + S^{-2} \quad (1.6)$$

Se hace necesario entonces utilizar alguna expresión que relacione la concentración de sulfuros totales con la concentración del sulfuro en forma de $H_2S_{(aq)}$. La siguiente ecuación representa una solución para ello [11]:

$$[H_2S]_{aq} = \frac{[S_T]}{1 + \frac{K_{S1}}{10^{-pH}} + \frac{K_{S1}K_{S2}}{10^{-2pH}}} \quad (1.7)$$

Es lógico pensar que exista una dependencia de la concentración de este compuesto con el pH y con las constantes termodinámicas de equilibrio, pues como se mencionó previamente, son las variables que rigen el equilibrio de estos 3 compuestos en una solución acuosa. Conocida la concentración de $H_2S_{(aq)}$, ésta se emplea en la ecuación de transferencia de masa (1.3) y finalmente determinar la concentración de H_2S gaseoso presente en los colectores. En dicha ecuación, el término de coeficiente global de transferencia de masa se puede reemplazar como sigue:

$$\frac{-d[H_2S_{(aq)}]}{dt} = K_L a_{H_2S} ([H_2S_{(aq)}] - K_H P_{H_2S}) \quad (1.8)$$

Esto se sustenta en la teoría de doble capa de Lewis y Whitman [12], la cual sostiene que el coeficiente global de transferencia de masa se puede expresar así:

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{k_L} + \frac{RT}{Hk_G} \quad (1.9)$$

Donde k_L corresponde a la velocidad de transferencia de masa en la fase líquida (m/h), k_G a la velocidad de transferencia de masa en la fase gaseosa (m/h), R a la constante universal de los gases ($8,2057 \times 10^{-5}$ atm·m³/mol·K), T a la temperatura (K) y H la constante de Henry (atm·m³/mol).

La literatura indica que si el valor de la constante de Henry en uso es mayor a $4,5 \times 10^{-3}$ atm·m³/mol, entonces el film en la fase líquida del sistema controla al menos el 95% del proceso de transferencia de masa [13]. Como el K_H que se usa en este trabajo es de 0,121 mol/atm·l, entonces su valor en unidades de atm·m³/mol es de $8,3 \times 10^{-3}$, por lo tanto se puede asumir como hipótesis de trabajo que el fenómeno es controlado en su totalidad por la resistencia de la fase acuosa, y por ende el coeficiente global de transferencia de masa será igual a la tasa de transferencia en fase líquida.

Así, el coeficiente global de transferencia de masa está dado por las siguientes relaciones [14]:

$$K_L a_{H_2S} = (1,736 - 0,196 \times pH) K_L a_{O_2} \quad (1.10)$$

$$K_L a_{O_2} = \frac{0,86(1 + 0,2Fr^2)(\mu)^{3/8} \theta_r^{(T-20)}}{d_m} \quad (1.11)$$

Estas dos ecuaciones son válidas para un rango de pH que oscile entre 4.5 y 8.0, y a una temperatura en torno a 20 °C, y ambas están en unidades de h⁻¹, por lo que las unidades de la ecuación (1.8) están balanceadas. En estas dos ecuaciones, el término θ_r corresponde al coeficiente de reaireación, que los autores fijan en un valor de 1,024. A su vez, Fr corresponde al número de Froude,

$$Fr = \frac{u}{(gd_m)^{0,5}} \quad (1.12)$$

Siendo g la constante de aceleración de gravedad. Este número adimensional representa la razón entre las fuerzas inerciales y las fuerzas gravitacionales en una corriente líquida, o en otras palabras, caracteriza la resistencia del transporte de sólidos en flujos líquidos.

Con todo lo detallado previamente, se han señalado todas las herramientas necesarias para poder determinar, estudiar y analizar la acumulación y transporte de gas sulfhídrico en los ductos de aguas servidas, a partir de variables conocidas (DBO, dimensiones de los colectores), de variables que se puedan obtener a partir de modelamiento para ciertas condiciones en los colectores (nivel de las aguas, caudal) y de variables que se puedan estimar (temperatura, presión parcial del H₂S en su fase gaseosa).

1.3.Descripción del proyecto y Justificación

En algunos sectores del Gran Santiago se han identificado emisiones objetables de H₂S, por lo que ha surgido la necesidad de la empresa de servicios sanitarios Aguas Andinas S.A. de solucionar este problema, por lo que se ha decidió realizar un estudio que pretende modelar la generación de ácido sulfhídrico y su transporte en los ductos de aguas residuales de la ciudad.

Estas emisiones han sido medidas de manera puntual (es decir, no durante campañas de medición) mediante equipos de detección de gases, llegando a detectarse concentraciones de hasta 10 ppm de H₂S gaseoso en horario de bajo caudal de aguas

(cercano a las 14:00 horas). Asimismo, dichas mediciones han arrojado la presencia de otros gases como amoníaco, metil mercaptano, etil mercaptano y dimetil sulfuro.

Los malos olores detectados en las cercanías de algunos puntos de la red se deben a una alta concentración de ácido sulfhídrico en el alcantarillado que circula por dichos lugares. De acuerdo a los D.S. N°s 72 y 745, la norma chilena establece que el límite máximo permitido de emisión de H_2S a la atmósfera es de 21 ppm.

El siguiente diagrama de bloques esquematiza la evolución en el transporte de los compuestos que contienen azufre presentes en las aguas servidas y sus emisiones hacia la atmósfera [9]:

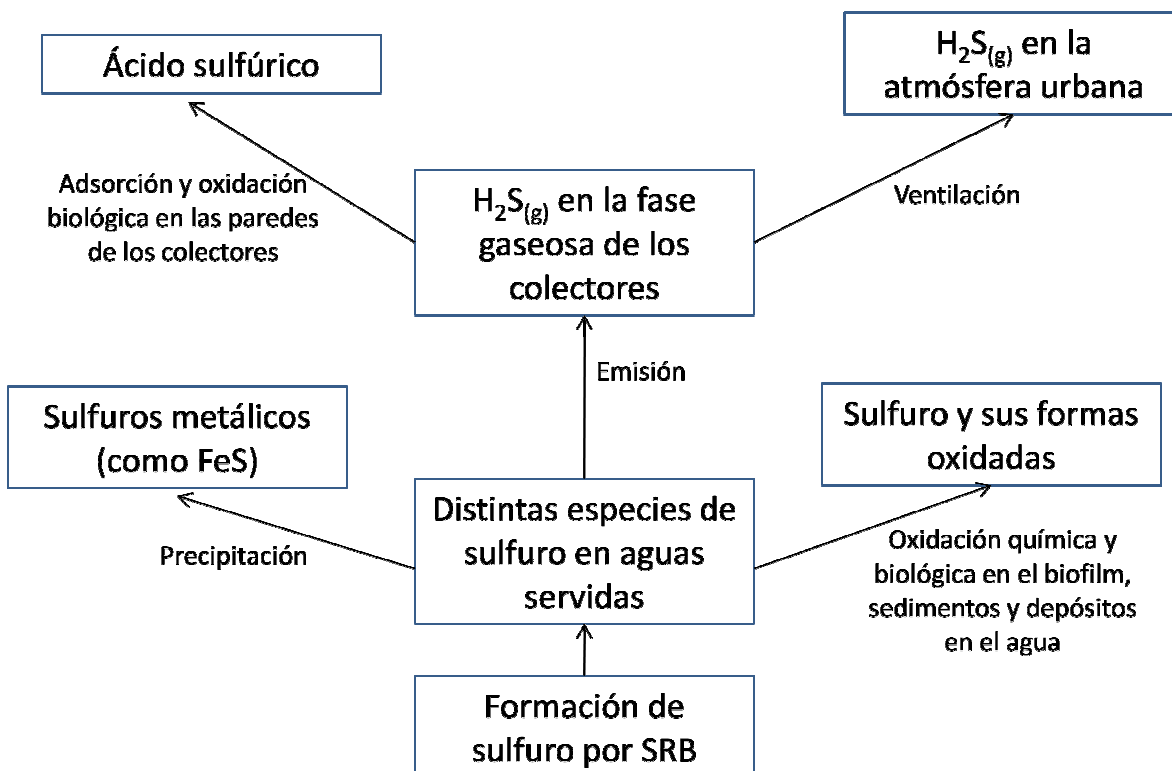


Figura 5: transporte de sulfuro producido por bacterias, desde las aguas servidas hasta la atmósfera

1.4.Zona de estudio

Se seleccionó una zona específica dentro de la ciudad de Santiago donde llevar a cabo el presente estudio, llamada T-11 según la sectorización interna que Aguas Andinas maneja sobre el plano general de la Región Metropolitana. Dicho sector está emplazado íntegramente en la comuna de Puente Alto (ver detalles de calles y orientación en página siguiente), posee 1797 tramos de colectores de aguas servidas, 66 de colectores unitarios y 4 canales abovedados, dando un total de de 116.7 kilómetros de ductos para transporte de aguas servidas. Fue escogido este sector para el estudio debido a que es de una superficie bastante pequeña en comparación a otras zonas tributarias (fácil ingreso de datos al modelo), es principalmente residencial (se limitan al máximo las perturbaciones que puedan inducir descargas de riles) y ha presentado problemas de alta concentración de H₂S en sus colectores.

A continuación se muestra un mapa de Santiago con la ubicación de T-11:



Figura 6: Ubicación de zona en estudio dentro de Santiago

Se definieron cinco puntos de muestreo que recogeran las aguas provenientes de sub-cuencas más pequeñas dentro del mismo sector T-11. El mapa detallado de los

puntos se muestra a continuación, y la denominación de estos puntos será la misma durante toda la extensión de la presente memoria:

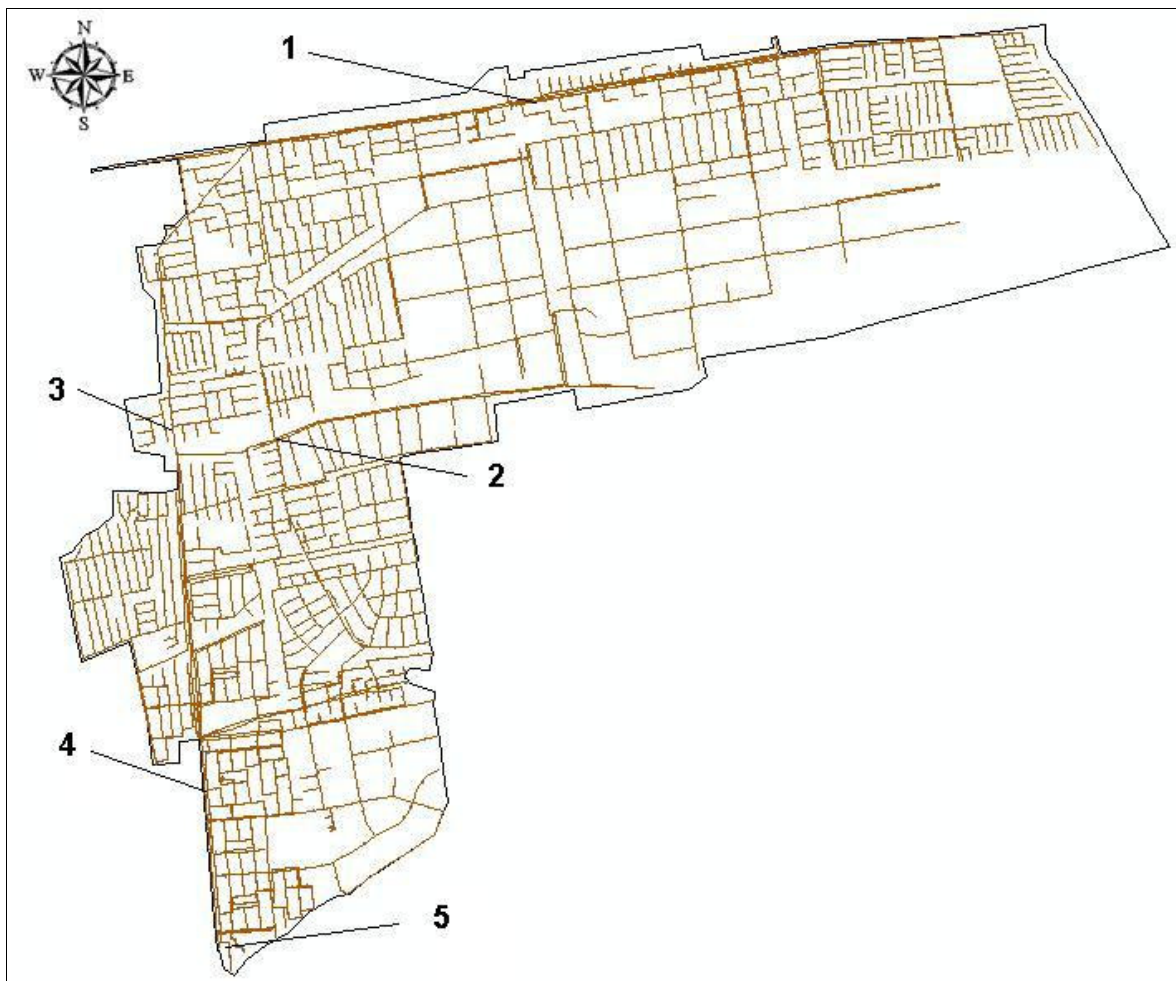


Figura 7: ubicación de los cinco puntos de muestreo definidos en el plano de colectores de la cuenca

Ubicación de los puntos:

- Punto 1: Intersección avenidas Concha y Toro y Domingo Tocornal
- Punto 2: Intersección avenidas Ernesto Alvear y Eyzaguirre
- Punto 3: Intersección de Av. Ejército Libertador y Rafael Alberti
- Punto 4: Intersección de Av. Ejército Libertador y La Conquista
- Punto 5: Punto de medición "T-11", extremo sur de Av. Ejército Libertador

De modo de comprender mejor el dibujo, cabe mencionar que los flujos de agua tienden a ir en dirección sur-oeste, hacia el punto número 5.

1.5.Objetivos

Objetivos Generales

- Desarrollar un modelo de generación y transporte de sulfuro de hidrógeno gaseoso, a través de software de resolución numérica y datos empíricos.
- Evaluar diversos postulados de condiciones de ventilación óptimas que mitiguen el problema de emisiones de H₂S en las inmediaciones de puntos seleccionados de la red.

Objetivos Específicos

- Establecer las bases fenomenológicas de la generación y emisión de H₂S desde la fase acuosa a la atmósfera y valores esperados para implementar el modelo teórico.
- Mostrar los modelos matemáticos existentes de generación y transporte en colectores de aguas servidas de gran diámetro. Establecer las bases fenomenológicas de la generación y emisión de H₂S desde la fase acuosa a la atmósfera y sus valores esperados para las condiciones imperantes.
- Implementar del modelo en un programa de resolución numérica usando condiciones de borde reales en redes de colectores.
- Simular el impacto de modificaciones de las condiciones de ventilación de los colectores o de ventilación forzada. Estudiar el fenómeno frente a las modificaciones de las condiciones de ventilación.
- Calibración del modelo desarrollado mediante mediciones para colectores de diámetro superior a 500 mm

2. Metodología

La metodología empleada durante el desarrollo de este trabajo se puede desglosar como sigue:

1. **Revisión del Estado del Arte.** Tuvo como finalidad determinar a cabalidad el estado del arte relativo al problema de generación bacteriana de ácido sulfhídrico en los alcantarillados de aguas servidas domiciliarias y su transferencia a fase gaseosa. También se recopilaron y estudiaron diversos modelos matemáticos teóricos para predecir este fenómeno, de manera de seleccionar el más apropiado considerando las condiciones existentes en el presente estudio
2. **Selección de un modelo teórico y recopilación de datos.** A través de la recopilación bibliográfica señalada en el punto anterior, se consideró aquel modelo que tomara en cuenta las tasas de transferencia líquido-gas, concentración acuosa y condiciones de flujo de las aguas. Por otra parte, se identificaron todos los datos que era necesario tener para implementar el modelo y se recopilaron de acuerdo a lo existente en las bases de datos de la empresa y de valores sugeridos en bibliografía.
3. **Implementación del modelo.** Identificar una cuenca que cumpla con ciertos requisitos (superficie no muy extensa, altas concentraciones de sulfuro de hidrógeno gaseoso comprobadas y de carácter principalmente residencial, para evitar la existencia de perturbaciones provenientes de descargas industriales). Dentro de dicha zona identificar los puntos de medición para obtener los datos necesarios. Para todos los colectores de la zona en estudio ingresar al programa de modelamiento las constantes relativas a su geometría (largo, diámetro, pendiente), los datos hidráulicos (dinámica del agua), y los datos fisicoquímicos necesarios (pH, Constante de Henry, constantes de equilibrio, extraídos de la literatura; DBO_5 implementada como una curva de variación diaria construida a partir de datos empíricos registrados en los puntos de medición mencionados previamente, al igual que la temperatura). De esta forma, poder simular la concentración dinámica de sulfuro total disuelto, ácido sulfhídrico acuoso y sulfuro de hidrógeno gaseoso para todos los colectores.
4. **Calibración del modelo.** Desarrollar un programa que permita comparar los resultados predichos por el modelo con los datos empíricos de concentraciones de S^2 y de $H_2S_{(g)}$ que registró ANAM. Calibrar utilizando el método de minimización de la suma de los errores cuadráticos, entre los valores obtenidos en terreno y las predicciones del modelo

3. Resultados

El modelo utilizado en este trabajo se desglosa en las siguientes ecuaciones, ya descritas en el capítulo 1:

$$\frac{d[S_T]}{dt} = \frac{M[DBO_5](1,07)^{(T-20)}}{r_h} - \frac{N(\mu)^{3/8}[S_T]}{a_m} \quad (3.1)$$

$$S_T = H_2S + HS^- + S^{2-} \quad (3.2)$$

$$[H_2S_{(aq)}] = \frac{[S_T]}{1 + \frac{K_{S1}}{10^{-pH}} + \frac{K_{S1}K_{S2}}{10^{-2pH}}} \quad (3.3)$$

$$\frac{-d[H_2S_{(aq)}]}{dt} = K_L a_{H_2S} ([H_2S_{(aq)}] - K_H P_{P_{H_2S}}) \quad (3.4)$$

$$K_L a_{H_2S} = (1,736 - 0,196 \times pH) K_L a_{O_2} \quad (3.5)$$

$$K_L a_{O_2} = \frac{0,86(1+0,2Fr^2)(\mu)^{3/8}\theta_r^{(T-20)}}{d_m} \quad (3.6)$$

Además de las ecuaciones de balance de masa para las dos fases presentes en el sistema:

$$\left(\frac{dS_{liq}}{dt}\right)_x = S_{liq,x-1} + \left(\frac{M[DBO_5](1,07)^{(T-20)}}{r_h}\right)_x - \left(\frac{N(\mu)^{3/8}[S_T]}{a_m}\right)_x - (K_L a_{H_2S} ([H_2S_{(aq)}] - K_H P_{P_{H_2S}}))_x - S_{liq,x} \quad (3.7)$$

$$\left(\frac{dH_2S_{(g)}}{dt}\right)_x = F_{H_2Sg,x-1} + (K_L a_{H_2S} ([H_2S_{(aq)}] - K_H P_{P_{H_2S}}))_x - F_{H_2S(g),x} \quad (3.8)$$

Los datos requeridos para la implementación del modelo se obtuvieron, cada uno, como se detalla a continuación:

- DBO₅: se utilizó un registro de la variación de la DBO₅ a lo largo de un día en cinco puntos seleccionados de la red estudiada. Los resultados permitieron trazar perfiles para la DBO₅ realizando regresión sobre los datos poseídos, obteniendo polinomios que describieran el fenómeno. Cada curva fue llevada a su correspondiente Serie de Fourier, de modo de obtener una función 24 horas-periódica (ver anexos). Si

bien lo ideal es tener perfiles de carga orgánica para lapsos mayores a un día para poder identificar posibles variaciones de importancia entre los diferentes días, al disponer solo de mediciones para un día se considera que el fenómeno es 24 horas-periódico y que no hay variaciones entre los días.

- Temperatura: se construyó un perfil de temperaturas, igual para todos los colectores simulados, basado en datos reales históricos de variación de temperatura de aguas a lo largo del tiempo, entregados por la empresa. La función ingresada considera un promedio diario de 17 °C, un mínimo de 15 °C y un máximo de 19 °C (ver ecuaciones (A.1) y (A.2) en anexos). Es importante señalar que el programa desarrollado permite ingresar perfiles de temperatura arbitrarios.
- pH: se fijó en 6.7, valor acorde a lo registrado por ANAM para las aguas servidas domiciliarias en Santiago. Al igual que con la temperatura, el programa permite ingresar valores arbitrarios para el pH.
- M: se presenta en la literatura con un valor sugerido de $32 \cdot 10^{-5}$. Lo mismo ocurre con el parámetro N, en la literatura se recomienda utilizar un valor de 0.64
- K_{S1} y K_{S2} : la literatura reporta valores experimentales de 10^{-7} para la primera constante [11][13][15], y para la segunda de entre 10^{-12} y 10^{-14} . Como input al modelo, se tomó un valor de 10^{-7} para K_{S1} y de 10^{-13} para K_{S2} .
- Constante de Henry: el valor de K_H para el sulfuro de hidrógeno fue extraído de la literatura [16], la cual explicita valores de dicha constante para temperaturas que van desde 0 °C a 50 °C, con un incremento de 5 °C. Es decir, se debe realizar una interpolación lineal para obtener la constante de Henry a 17 °C. Ingresando los valores mostrados en dicha fuente en función de la temperatura, se obtiene una relación lineal entre K_H y temperatura, por lo que para una temperatura de 17 °C el valor de la constante de Henry es de 0.121 mol/(atm-l). La literatura indica además que existe un valor de K_H para las aguas servidas en función del valor de la misma constante correspondiente a agua pura a la misma temperatura y para la misma solución (el término de ajuste se ha descrito en la literatura como *factor beta*), sin embargo representa una variación en torno a un 1.5% del valor nominal de la constante de Henry para agua pura [15], por lo que se decidió no tomarlo en consideración para la formulación del modelo
- Variación de la presión parcial del $H_2S_{(g)}$: la siguiente ecuación modela la variación de la presión parcial del sulfuro de hidrógeno gaseoso en función del volumen seco dentro de cada colector y la concentración del mismo gas,

$$P_{H_2S} = P_T \cdot x_{H_2S} \quad (3.9)$$

$$x_{H_2S} = \frac{n_{H_2S}}{n_{O_2} + n_{N_2} + n_{H_2S}} = \frac{\frac{[H_2S(g)] \cdot V_{aire}}{PM_{H_2S}}}{n_{O_2} + n_{N_2} + \frac{[H_2S(g)] \cdot V_{aire}}{PM_{H_2S}}} \quad (3.10)$$

Dentro de esta ecuación, se considera que la presión total del sistema es constante e igual a 1 atm y que el peso molecular del H₂S es de 34 g/mol. La cantidad de moles de N₂ y O₂ se toma como constante, y se calcula como sigue:

$$n_{N_2} = \frac{x_{N_2,aire} \cdot V_{total} \cdot \rho_{N_2}}{PM_{N_2}} = \frac{0,79 \cdot V_{total} \cdot 1,251 \text{ g/m}^3}{28 \text{ g/mol}} = 0,0353 \cdot V_{total} \quad (3.11)$$

$$n_{O_2} = \frac{0,21 \cdot V_{total} \cdot 1,43 \text{ g/m}^3}{32 \text{ g/mol}} = 0,00938 \cdot V_{total} \quad (3.12)$$

Se incluye el volumen total para calcular los moles de nitrógeno y oxígeno, ya que se parte del supuesto que con o sin agua, existiría la misma cantidad de moles de ambos gases, así no es necesario ocupar su concentración (que es desconocida) para determinar la presión parcial del H₂S.

- Largo, diámetro y pendiente de los colectores: fueron extraídos directamente de las bases de datos de Aguas Andinas. No se detallan dentro del presente informe debido a que son considerados por la empresa como datos internos.
- Datos hidráulicos: si bien el modelo requiere el uso de los términos correspondientes a radio hidráulico y profundidad hidráulica, estos valores son calculados dentro del programa. El input del modelo es el nivel de aguas para todos los colectores a lo largo de todo un día en intervalos de 10 minutos. A partir de ese ingreso de datos, el programa interpola entre los valores, y así calcular el radio hidráulico y la profundidad hidráulica para todos los colectores en cada paso de integración, además de la velocidad de las aguas utilizando la ecuación empírica de Manning para determinar velocidad en un ducto parcialmente lleno (de uso aceptado en la empresa):

$$u = \frac{\sqrt{m} \cdot r_h}{n} \quad (3.13)$$

donde m es la pendiente del colector, r_h el radio hidráulico (m) y n la rugosidad del material. La empresa utiliza un valor (adimensional) de 0.0133 para la rugosidad en colectores de hormigón simple y de 0.0125 para colectores tanto de PEAD como de PVC [17]. El perfil de nivel de llenado dentro de los colectores se puede ver en el gráfico 1, que muestra la variación del nivel de agua promedio para la cuenca. Todos los colectores tienen el mismo perfil, salvo que la magnitud difiere, pero la tendencia es exactamente la misma, por lo que solo basta incluir un perfil para mostrar cual es el comportamiento del nivel de agua ingresado al modelo.

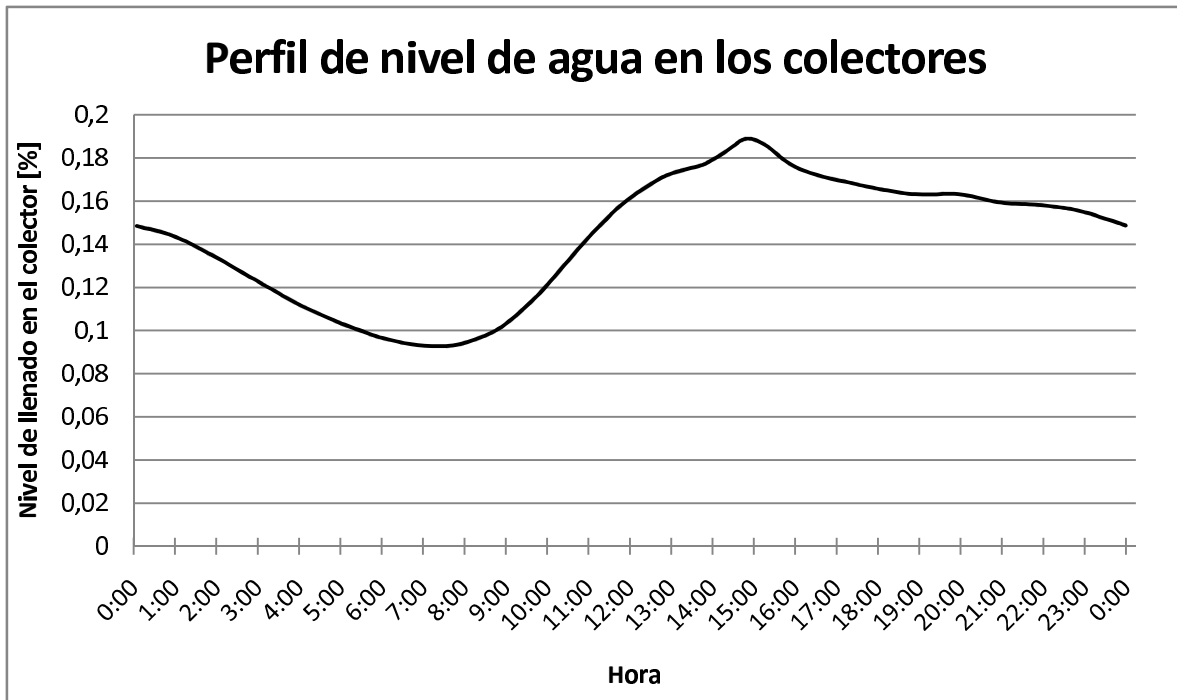


Gráfico 1: Perfil de nivel de llenado en los colectores

Asimismo, algunas de las consideraciones que se tomaron para la implementación del modelo fueron las siguientes:

- La atmósfera superior dentro del colector sólo contiene una mezcla de gases ideales compuesta por aire (21% oxígeno y 79% nitrógeno, en volumen) y sulfuro de hidrógeno, de modo de poder calcular en todo instante la presión parcial del H_2S gaseoso, factor que incide en la transferencia de masa tal como se puede apreciar en la ecuación (3.4), despreciando así la presencia de otros gases como amoníaco, mercaptanos o dimetil sulfuro
- Presión de la atmósfera superior dentro del colector constante e igual a 1 atm. Fijar esto permite calcular la variación de la presión parcial de $H_2S_{(g)}$ dentro de los colectores
- Nivel de agua uniforme dentro de los colectores, esto es, que la variación de la altura del agua de un instante al siguiente se produce de manera idéntica a lo largo de todo el colector. Es necesario imponer esto debido a que el software que entrega las simulaciones de nivel de agua, retorna valores únicamente para el comienzo y el fin de cada colector, es decir, no un perfil de altura a lo largo del colector. Consecuentemente, el asumir esto derivará en que la atmósfera superior dentro de los colectores también sea un bloque uniforme a lo largo de ellos para

cada paso. Esto sustenta conceptualmente el uso de una velocidad promedio tanto para el agua como para el aire

- No existe flujo de H_2S a las paredes de los colectores que se condense y oxide para producir ácido sulfúrico, ya que en tal caso habría que considerar una tasa de flujo de H_2SO_4 desde las paredes de la atmósfera superior del colector hacia el agua, y que se reduzca nuevamente a sulfuro dentro del agua.
- Las colonias bacterianas tanto en el biofilm como en los depósitos en el fondo de los colectores están completamente desarrolladas, en términos de que se puede considerar que existe una renovación permanente
- Luego de que el sulfuro es producido por las SRB y es transferido a la corriente de agua, El equilibrio termodinámico entre las distintas especies de sulfuro disuelto en agua (H_2S , HS^- , S^{2-}) se alcanza de manera instantánea una vez que el sulfuro, luego de ser producido por las SRB y transferido al seno de la fase líquida, se disuelve en ella. Dada la naturaleza de las aguas servidas de Santiago, se consideró que no aportaría mayor precisión el incluir una cinética de disolución entre estas especies en relación a la complejidad que podría significar incluir dicho fenómeno en la formulación del modelo
- Se considera un retardo tanto en transporte de sulfuro total en fase acuosa como en el de sulfuro gaseoso de un tramo de colector al siguiente, de modo de tomar en cuenta el tiempo de residencia en ellos. En otras palabras, de no considerar este retardo, se estaría asumiendo que el sulfhídrico generado en un colector llega al siguiente de manera instantánea y sin diferenciar el largo del colector en el que fue generado. Es de importancia puesto que de la red modelada, existen tramos de colectores de largos cercanos a 10 metros, y otros que superan los 130 metros. El retardo se calcula como la razón entre el largo de un colector y su velocidad media en cada instante
- Las cámaras que se encuentran al comienzo de cada ramificación de la red y que en la realidad reciben el flujo de redes de diámetros inferiores a 250 milímetros, se considera que ingresan al modelo con una condición inicial de 0,5 ppm de sulfuro total disuelto en agua, 0 ppm de ácido sulfhídrico y 0 ppm de H_2S gaseoso. Esta consideración es válida en términos de que la empresa maneja información acerca de las concentraciones típicas para dichos colectores en sectores residenciales reducidos, tal como es el caso de las ramificaciones de diámetros pequeños que se encuentran en la cuenca
- La única diferencia ingresada al modelo entre los colectores de PVC y los de hormigón es la rugosidad de cada material, sin embargo se sabe que las bacterias reductoras de sulfato no tienden a reproducirse en las paredes de PVC o HDPE

(que en la actualidad están reemplazando al hormigón como material para la fabricación de colectores de aguas servidas), como sí lo hacen en las de hormigón. Dado que dentro de la Región Metropolitana cerca de un 85% de los colectores operados por Aguas Andinas son de hormigón, no es necesario establecer una diferencia entre lo que pueden generar los colectores de uno u otro material dentro de la red modelada.

Así, primero se implementó la red completa de la cuenca T-11 según la denominación de la distribución zonal que la empresa maneja para la ciudad, descartando todos los colectores con diámetro menor a 250 milímetros ya que el software que simula los caudales de aguas servidas domiciliarias sólo está programado para entregar resultados para ductos con diámetro mayor o igual a ese valor. Esto es debido a que la empresa determinó que incluir los colectores más pequeños que dicha dimensión haría que el modelamiento del nivel de las aguas fuera excesivamente engorroso y lento, sin necesariamente retornar mejores resultados dado el bajo flujo de agua que circula por ductos de tan pequeños diámetros.

Con este descarte, ingresan al modelo 317 tramos de colectores, con largos que van desde los 3.4 metros hasta un máximo de 273.5 metros, y un promedio de 64.8 metros dando un largo total de 20,423 kilómetros de colectores. El mínimo diámetro de los colectores es de 250 milímetros, y el máximo diámetro es de 1000 milímetros, y la pendiente va entre un mínimo de 0.0002 y un máximo de 0.05 m/km. La siguiente tabla resume generalidades acerca de los datos de los colectores:

	Largo [m]	Diámetro [mm]	Pendiente [m/km]
Mínimo	3,4	250	0,00024
Máximo	273,5	1000	0,049
Promedio	64,8	387,1	0,0077

Tabla 1: Datos de colectores ingresados al modelo

Los datos presentados en la tabla anterior se distribuyen de la siguiente manera:

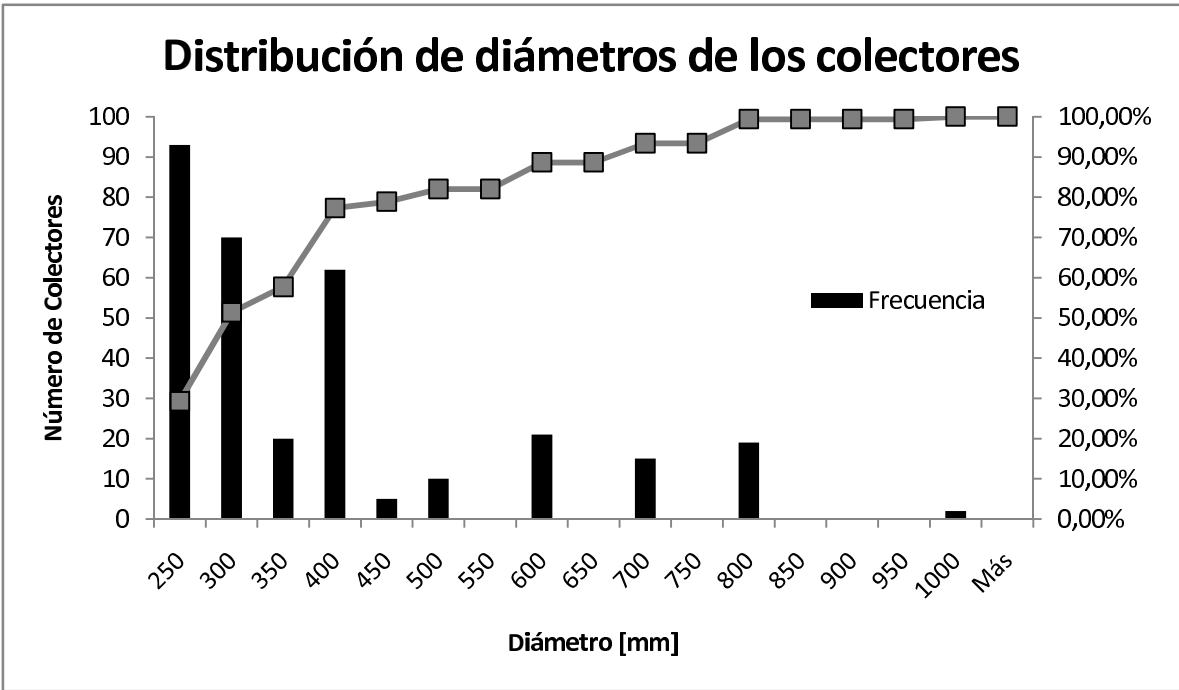


Gráfico 2: Histograma de diámetros de los colectores modelados

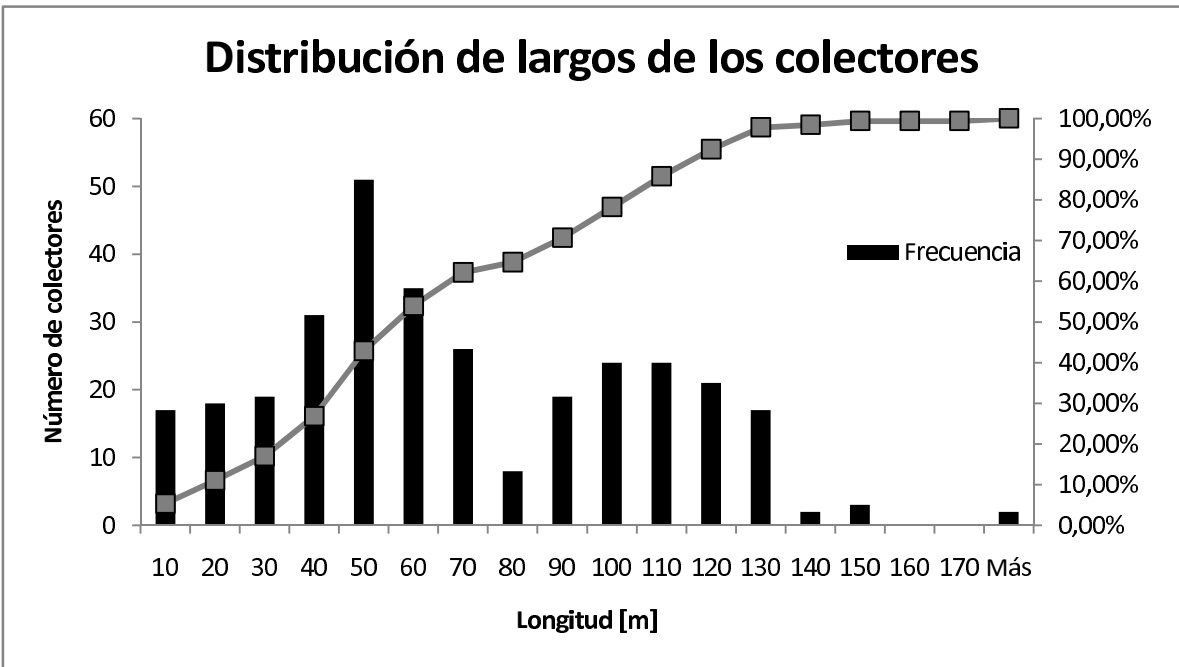


Gráfico 3: Histograma de los largos de los colectores modelados

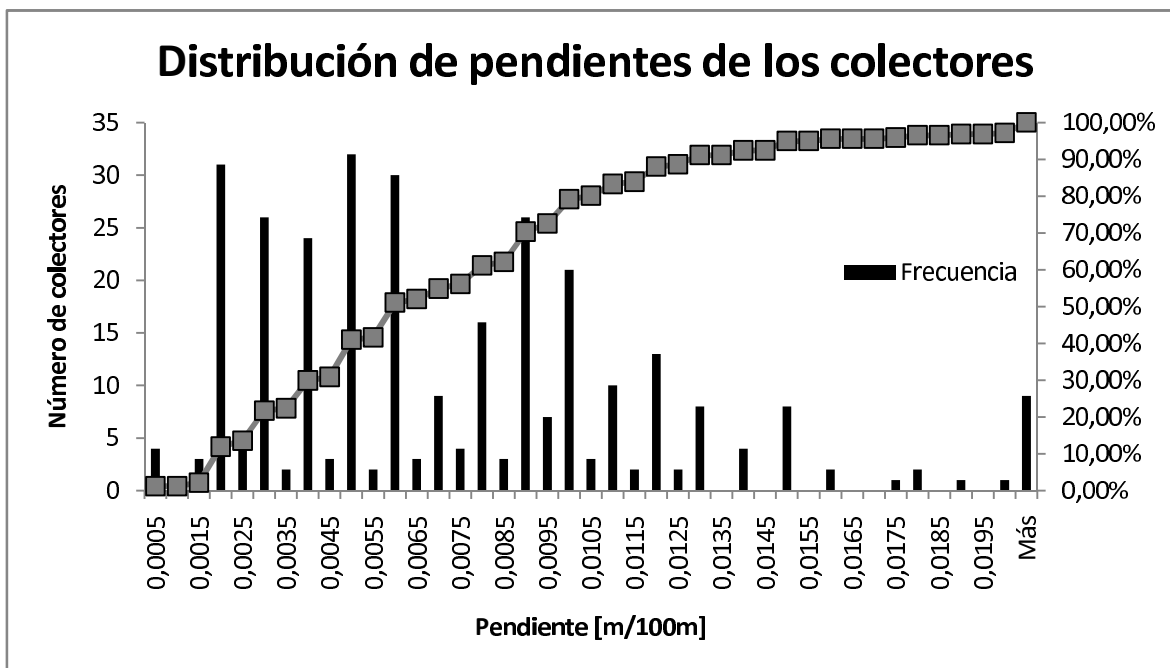


Gráfico 4: Histograma de las pendientes de los colectores modelados

Para la atmósfera superior dentro los ductos, la literatura indica que en el caso de colectores de descarga gravitacional, la única fuerza motriz que provoca flujo de aire es la proporcionada por el movimiento de las aguas, cuyo roce con el aire provoca un esfuerzo de corte tal que induce un movimiento del aire [18], es decir, abordar el problema enfocándolo conceptualmente como un flujo de Couette. A través de un modelamiento utilizando CFD para resolver las ecuaciones RANS (Reynolds-averaged-Navier-Stokes) los autores predicen la naturaleza de los campos de velocidad del aire en colectores. Luego de obtener los resultados, desarrollan una relación entre las velocidades medias de aire y agua y algunos parámetros geométricos de los colectores, tanto para régimen laminar como turbulento. Debido a que el modelamiento de los niveles de agua, que constituye el principal input del modelo, es de tal forma que considera movimiento en bloque dentro de los ductos, es que se consideran las ecuaciones relativas a dicho caso que se expresan en el documento. Así, para flujo laminar, postulan la siguiente ecuación:

$$\frac{U_{aire}}{U_{agua}} = 1,028 \frac{w}{w+P_s} \quad (3.14)$$

Donde U_{aire} es la velocidad promedio del aire (m/s), U_{agua} la velocidad de la superficie del agua en el centro del ducto (m/s), w el ancho de la interfase agua-aire (m) y P_s el perímetro de la atmósfera superior del colector (m)

Así, teniendo una expresión continua para la velocidad promedio del aire dentro de los colectores, se puede llegar de manera sencilla al flujo de aire dentro de los mismos, lo que permitirá conocer el flujo másico de sulfuro de hidrógeno gaseoso de un tramo de colector a otro. Si bien la velocidad de aire que se conoce corresponde a un valor

promedio y no se tiene un perfil de velocidades que permita dar más precisión a este tópico, se puede considerar como un supuesto aceptable.

Simulaciones

Las simulaciones del modelo fueron desarrolladas en el software Simulink (versión R2008a), mientras el código para el programa de calibración fue escrito en Matlab (misma versión). Para las resoluciones de las ecuaciones diferenciales, se empleó el algoritmo ODE45, que se basa en el método de Runge-Kutta de cuarto orden para integración numérica (dentro de los métodos de resolución de EDOs que dispone el software, es éste el más recomendado por su precisión y considera paso de integración variable).

Como ya se mencionó antes, los datos de ingreso al modelo son los siguientes: DBO₅, pH, temperatura, K_{s1}, K_{s2}, nivel de agua, rugosidad, pendiente del colector, diámetro del colector y largo del colector. Al comienzo de cada iteración, el programa se encarga de calcular las siguientes incógnitas:

- Radio hidráulico:

$$r_h = \frac{r^2(\theta - \text{sen}\theta)}{r \cdot 2\theta} \quad (3.15)$$

- Ancho de la interfase líquido-gas²:

$$w = \sqrt{h \cdot r - h^2} \quad (3.16)$$

- Ángulo del nivel de agua:

$$\theta = 2 \cdot \arcsen\left(\frac{2 \cdot w}{D}\right); \text{ si } h/D < 0.5 \quad (3.17)$$

$$\theta = 2\pi - 2 \cdot \arcsen\left(\frac{2 \cdot w}{D}\right); \text{ si } h/D \geq 0.5 \quad (3.18)$$

² *w* calculado corresponde a la mitad del ancho de la interfase, el ancho completo es 2 · *w*

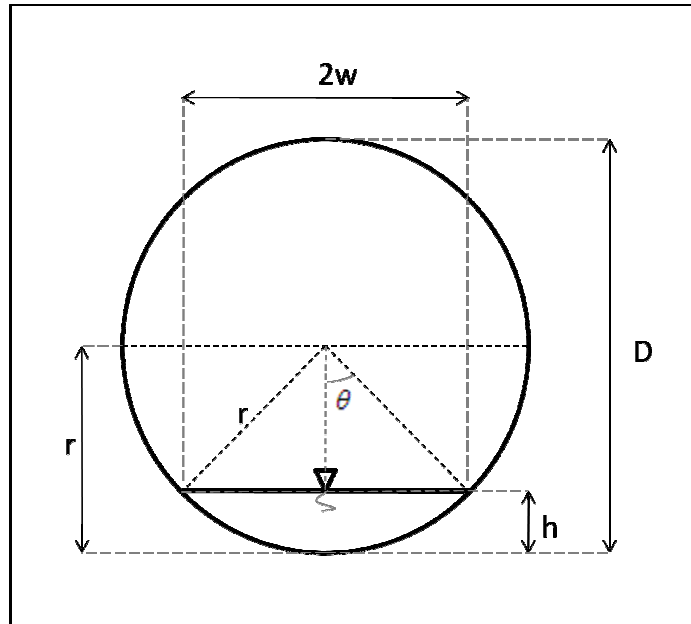


Figura 8: vista frontal de un colector con sus respectivos parámetros (diámetro D , radio r , ancho $2w$, nivel de agua h , ángulo de abertura θ)

- Profundidad hidráulica:

$$d_h = \frac{r^2(\theta - \text{sen}\theta)}{2w} \quad (3.19)$$

- Velocidad del agua:

$$u_{\text{agua}} = \frac{r h^{2/3} \sqrt{S}}{n} \quad (3.20)$$

- Volumen de agua:

$$V_{\text{agua}} = \pi r^2 L - V_a \quad (3.21)$$

- Volumen de atmósfera superior:

$$V_a = L \left(\pi r^2 - r^2 \arcsen \left(\frac{2w}{D} \right) - w(r - h) \right) \quad (3.22)$$

- Velocidad del aire: se calcula según la ecuación (3.14)

Teniendo todos estos parámetros, el programa procede con los cálculos de las ecuaciones mencionadas al comienzo de este capítulo. Los resultados se expresan comparando en cada punto las observaciones y las predicciones correspondientes.

Punto 1 (Concha y Toro - Domingo Tocornal)

Todas las mediciones en este punto fueron registradas por 24 horas entre los días lunes 12 y martes 13 de enero de 2009.

Observaciones y predicciones de sulfuro total disuelto en fase acuosa:

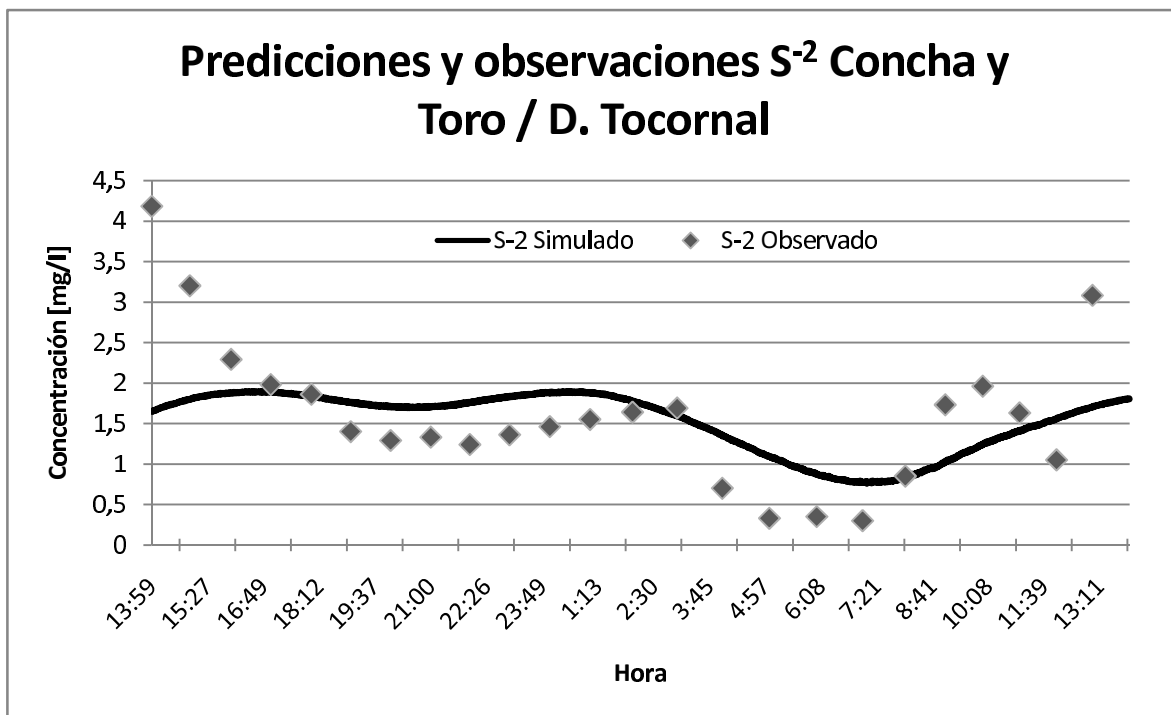


Gráfico 5: Predicciones y observaciones de sulfuro total disuelto en el punto Concha y Toro y Domingo Tocornal

Observaciones y predicciones sulfuro de hidrógeno gaseoso:

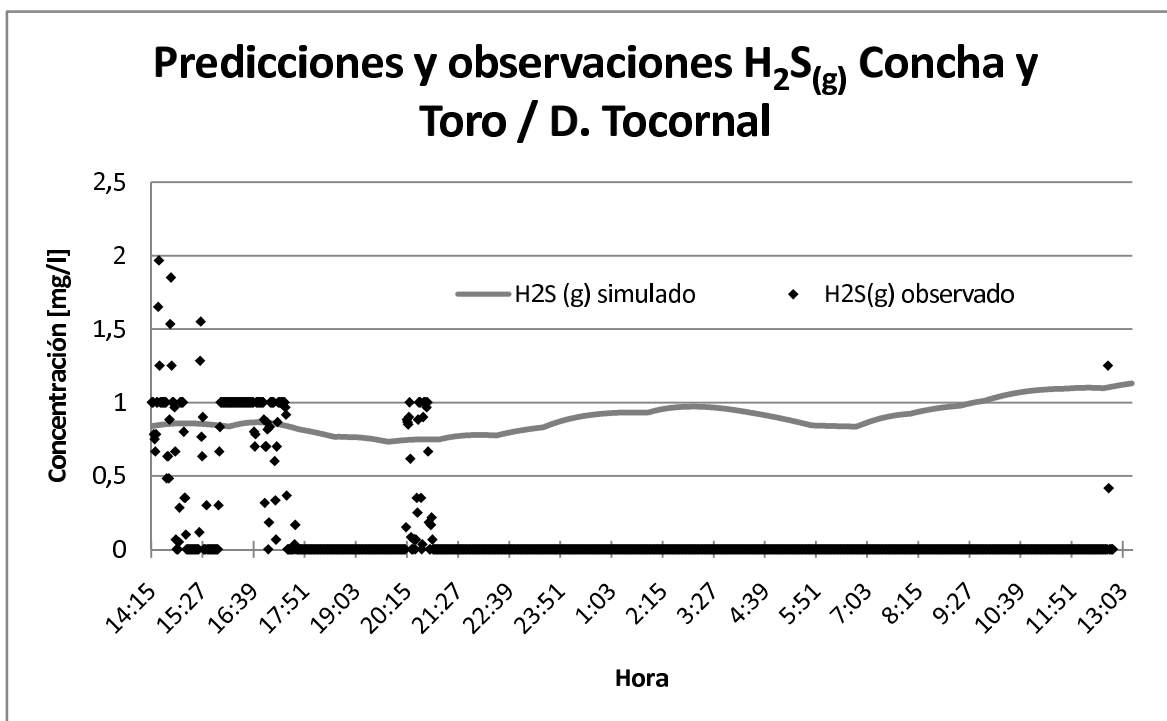


Gráfico 6: Observaciones de H₂S(g) para el punto Concha y Toro y Domingo Tocornal. Las mediciones en terreno fueron tomadas hasta las 12:49 horas

De modo de poder comparar las predicciones con las observaciones para el caso del H₂S gaseoso, se considerarán sólo para las discusiones los datos comprendidos entre las 14:00 y las 17:30 horas, puesto que después de esa hora, puede considerarse que los registros son anómalos dado el perfil que se ve en el gráfico 6.

La calibración del modelo se realizará tomando dos casos: a) descartando el primer punto observado (14:15 horas) y b) descartando los primeros 3 puntos, ambos casos con el fin de no incluir en la calibración puntos que puedan ser estadísticamente inválidos. En los dos casos se calibra para el sulfuro disuelto sin considerar el gas debido a las anómalas mediciones registradas (ver gráfico 6). La posibilidad de descartar datos se sustenta en el hecho de que para las primeras tres mediciones experimentales de sulfuro, se tienen elevados valores de S²⁻ con respecto al promedio, sin embargo no se tienen altos valores de sulfato que expliquen la alta concentración de sulfuro, y los valores para la DBO₅ registrados a las mismas horas tampoco muestran concentraciones elevadas (ver anexos).

Para el caso a), la suma de los errores cuadráticos antes de calibrar es de 7,66 (0,33 en promedio y error cuadrático medio de 0,57 mg/l), y se obtiene que el valor mínimo para la suma de mínimos cuadrados es de 6,88 (promedio de 0,3 y error cuadrático medio de 0,55 mg/l), lo que implica que este ajuste entre predicciones y observaciones tiene un coeficiente r² de 0.64 y los valores óptimos para los parámetros ajustados son los siguientes:

Parámetro	Valor Original	Valor Calibrado
M	$32 \cdot 10^{-5}$	$31,18 \cdot 10^{-5}$
N	0,64	0,556

Tabla 2: Parámetros ajustados caso a), punto Concha y Toro y Domingo Tocornal

Para el caso b) la suma de los errores cuadráticos antes de realizar el ajuste de parámetros es de 5,63 (0,27 promedio y error cuadrático medio de 0,52 mg/l), y se obtiene que la mínima suma de errores cuadráticos es de 4,6254 (0,22 promedio y error cuadrático medio de 0,47 mg/l), lo que retorna un r^2 de 0,76 y los siguientes valores óptimos para los parámetros ajustados:

Parámetro	Valor Original	Valor Calibrado
M	$32 \cdot 10^{-5}$	$28,96 \cdot 10^{-5}$
N	0,64	0,546

Tabla 3: Parámetros ajustados caso b), punto Concha y Toro y Domingo Tocornal

La comparación entre predicciones y observaciones con parámetros ajustados se puede visualizar a continuación:

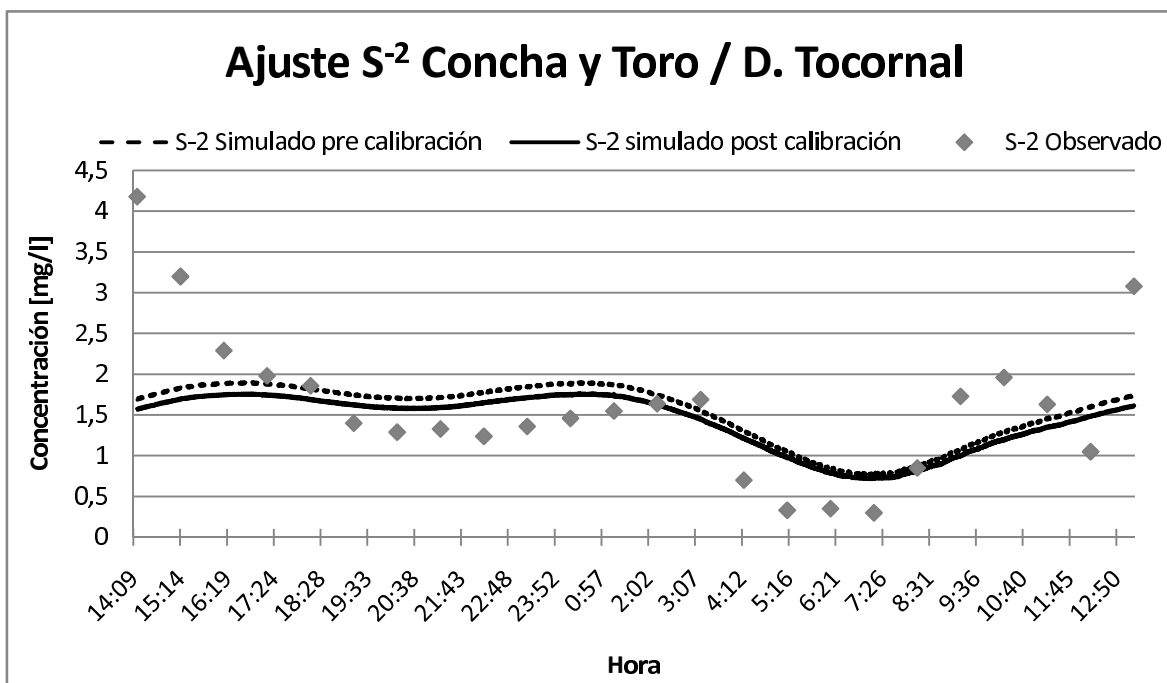


Gráfico 7: ajuste para sulfuro disuelto calibrado en el punto Concha y Toro y Domingo Tocornal, caso b)

Punto 2 (Ernesto Alvear - Eyzaguirre)

Todas las mediciones para este punto fueron registradas durante 24 horas entre los días martes 13 y miércoles 14 de enero de 2009.

Predicciones y observaciones de sulfuro total disuelto en fase acuosa:

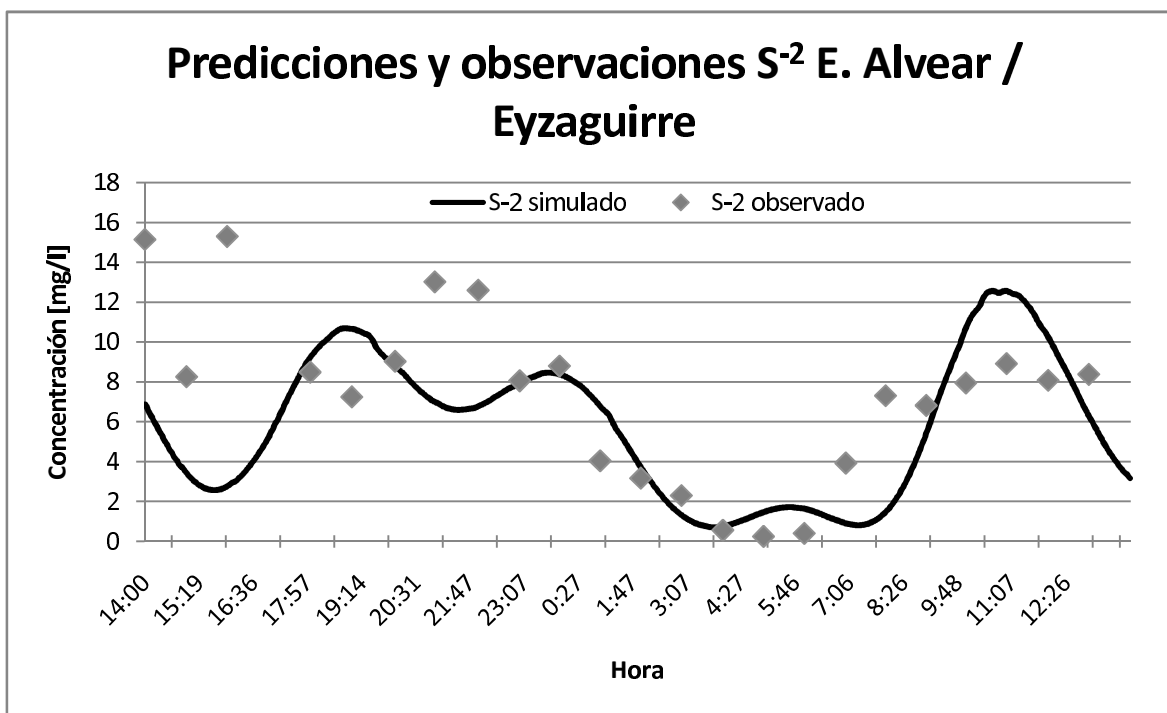


Gráfico 8: Observaciones y predicciones de sulfuro total disuelto en el punto E. Alvear y Eyzaguirre

El punto correspondiente a la medición de las 17:00 horas fue descartado ya que se encuentra completamente fuera de la tendencia (29,7 mg/l sobre un promedio de 8 mg/l), más aún considerando que la DBO₅ registrada a la misma hora no sufre un alza tal que justifique este alto valor de sulfuro. A continuación se exhiben las predicciones entregadas por la simulación y las observaciones de sulfuro gaseoso en este mismo punto:

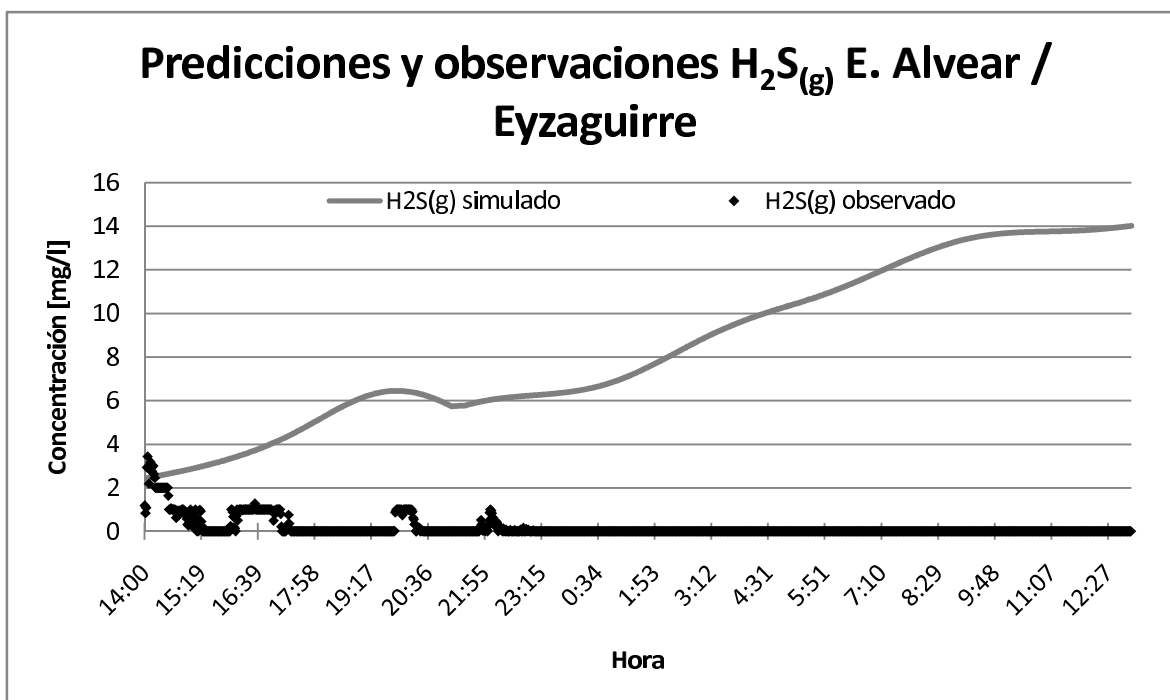


Gráfico 9: Observaciones y predicciones H₂S(g) para el punto Ernesto Alvear y Eyzaguirre

De igual manera que en el caso anterior, sólo se discutirá acerca de las observaciones comprendidas entre las 14:00 y las 17:30 horas, debido a que los datos restantes no entregan información útil para este estudio.

En base a lo notado en el gráfico 8, se procede a realizar la calibración para optimizar los parámetros M y N de modo de minimizar el error cuadrático entre las predicciones y las observaciones (sólo de sulfuro disuelto, no se calibra para sulfhídrico gaseoso dada la naturaleza de los valores observados, como se puede notar en el gráfico 9, pues no arrojaría ningún resultado coherente) tomando en cuenta sólo el lapso comprendido entre las 23:00 y las 13:00 (para minimizar el error cuadrático y así el ajuste de parámetros opere mejor). Considerando solo ese set de datos, el coeficiente r^2 entre predicciones y mediciones, previo a la calibración, es de 0,43 y la suma de los errores cuadráticos asciende a 87,23 (promedio de 5,83 y error cuadrático medio de 2,41 mg/l). Hecha la calibración, la mínima suma de errores cuadráticos es de 75,885 (promedio de 5,06 y error cuadrático medio de 2,25 mg/l) para los siguientes valores de los parámetros calibrados:

Parámetro	Valor original	Valor calibrado
M	$32 \cdot 10^{-5}$	$27,73 \cdot 10^{-5}$
N	0,64	0,634

Tabla 4: Parámetros ajustados para el punto E. Alvear y Eyzaguirre

Finalmente, con estos valores se ejecuta de nuevo la simulación y se obtienen los siguientes resultados

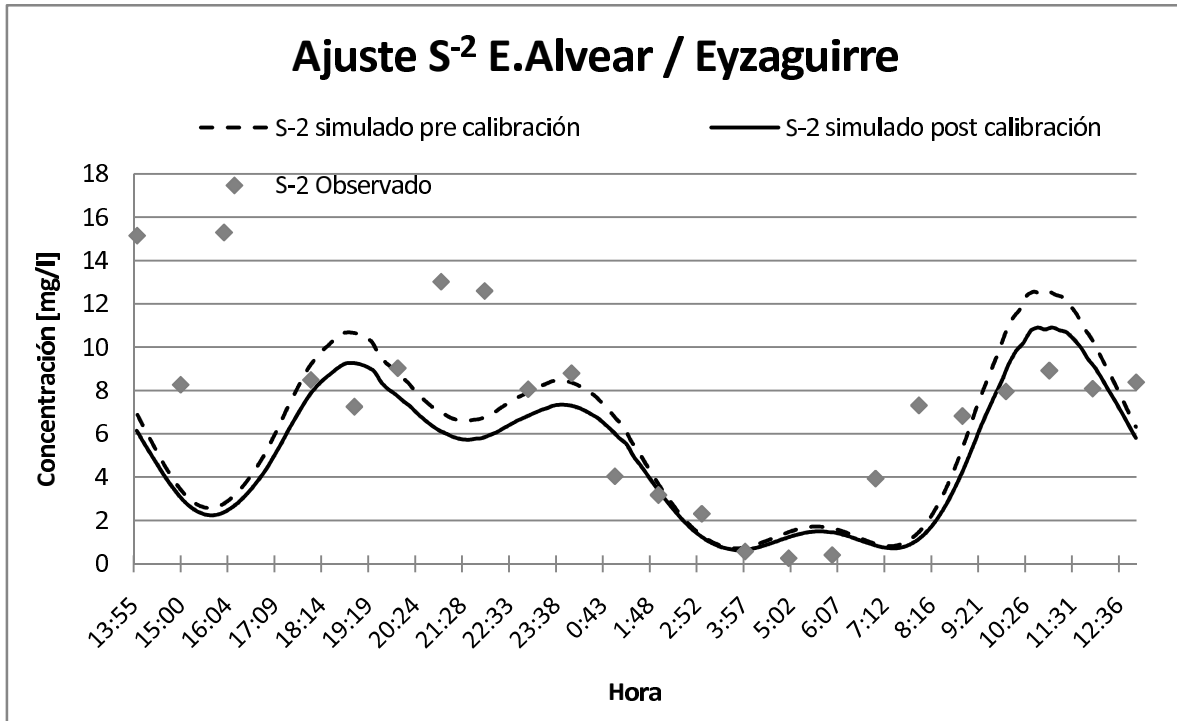


Gráfico 10: ajuste para sulfuro disuelto calibrado en punto Ernesto Alvear y Eyzaguirre

Para los datos calibrados (desde el punto de las 23:00 en adelante) se obtiene un r^2 de 0,50

Punto 3 (Ejército Libertador - Rafael Alberti)

Todas las mediciones en este punto fueron registradas por 24 horas entre los días lunes 19 y martes 20 de enero de 2009.

Observaciones y predicciones de sulfuro total disuelto en fase acuosa:

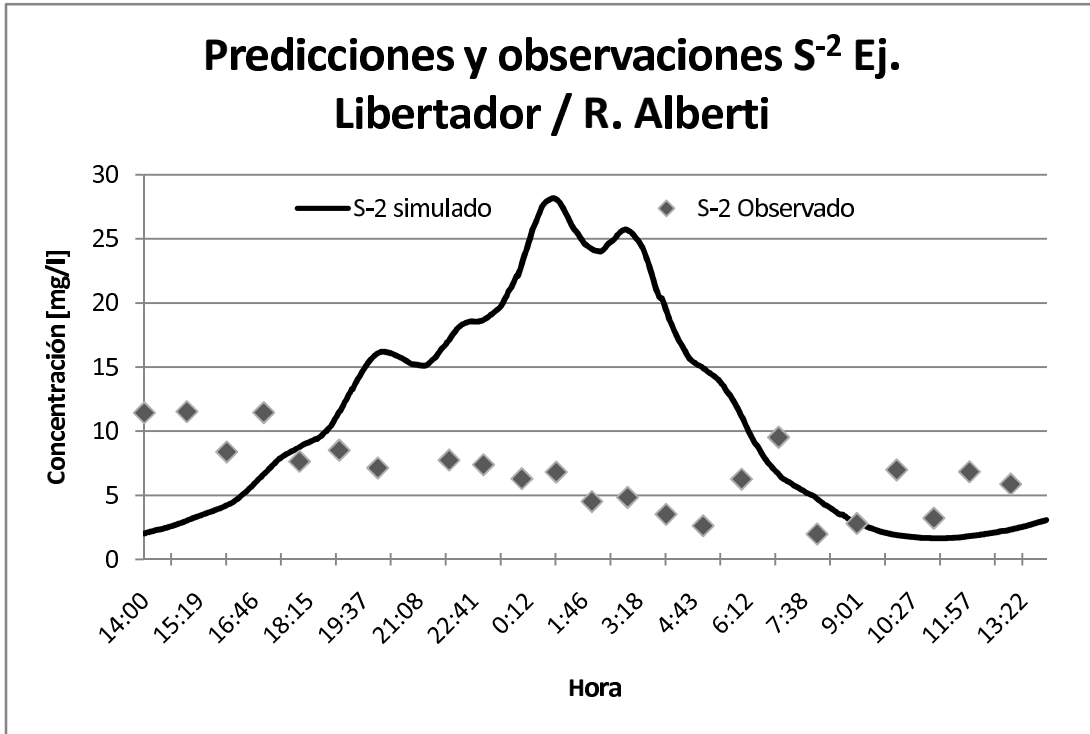


Gráfico 11: Observaciones y predicciones de sulfuro total disuelto en el punto Ej. Libertador y R. Alberti

La medición correspondiente a las 21:00 horas se encuentra fuera de rango (15,38 mg/l) por lo que se decide descartarla del estudio dado que la DBO₅ registrada a la misma hora no sufre un alza que permita justificar el comportamiento aquí visto del sulfuro disuelto (el registro indica 164 mg/l sobre un promedio de 163 mg/l, ver anexos), por lo que se considera una medición no válida para este estudio. Sin tomar en cuenta ese dato, la suma de errores cuadráticos luego de la simulación es de 2572,67 (promedio de 107,2 y error cuadrático medio de 10,35 mg/l)

Predicciones y observaciones de sulfuro de hidrógeno gaseoso:

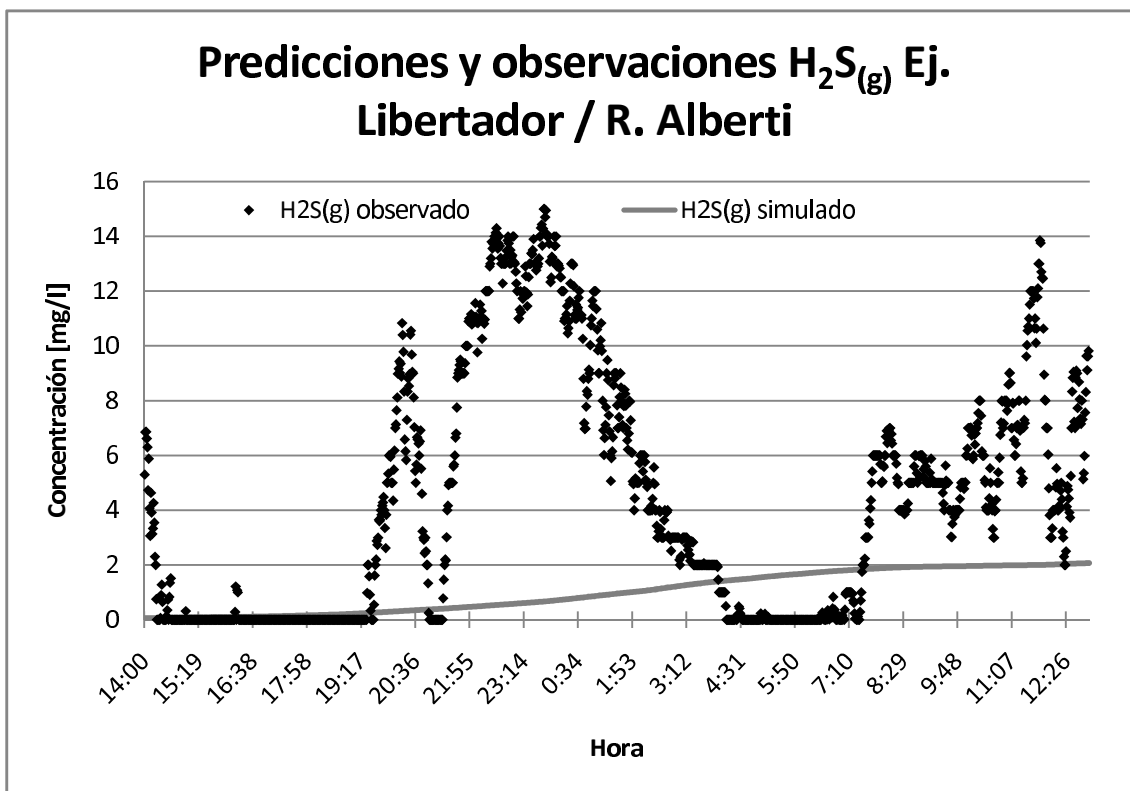


Gráfico 12: Observaciones y predicciones para H₂S_(g) en el punto Ejército Libertador y Rafael Alberti

El ajuste de parámetros para este punto retorna los siguientes resultados:

Parámetro	Valor Original	Valor Calibrado
M	$32 \cdot 10^{-5}$	$19 \cdot 10^{-5}$
N	0,64	0,74

Tabla 5: Parámetros ajustados para el punto Ejército Libertador y Rafael Alberti

Empleando los parámetros calibrados, se tiene el siguiente ajuste entre predicciones y observaciones de sulfuro disuelto para este punto:

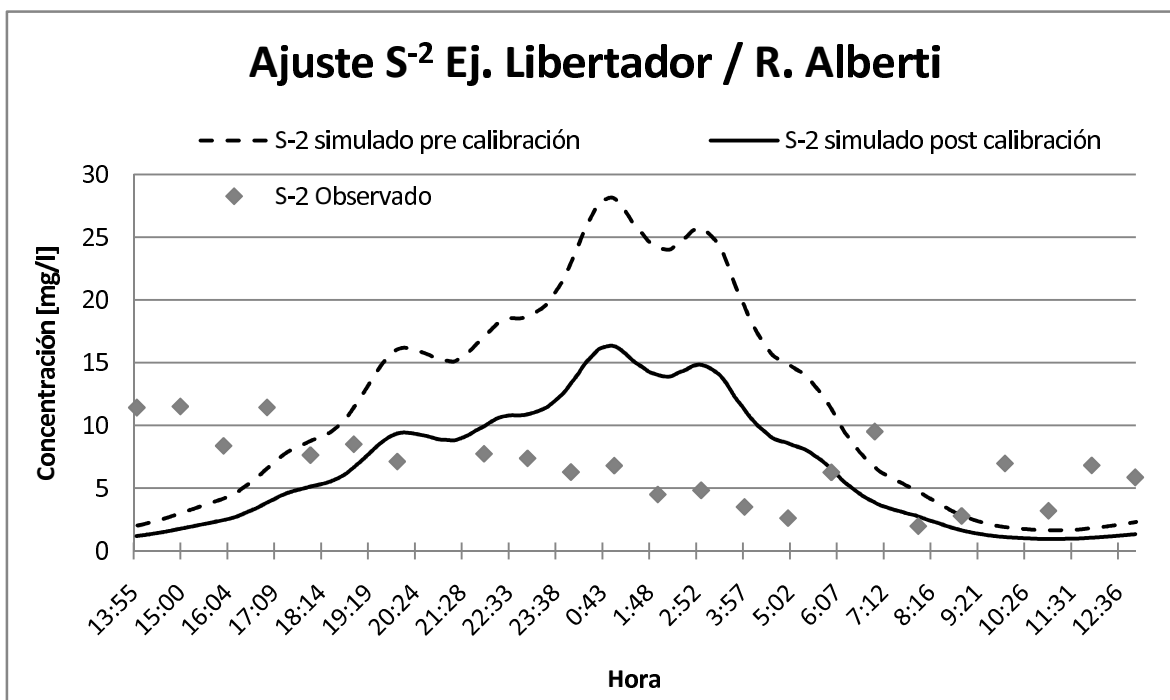


Gráfico 13: ajuste para sulfuro disuelto calibrado en punto Ejército Libertador y Rafael Alberti

Esta mejor aproximación entre predicciones y mediciones luego de la calibración se refleja en la suma de los errores cuadráticos mínima que entregó el ajuste de parámetros: 490,34 y un promedio de 20,43 (error cuadrático medio de 4,52).

Punto 4 (Ejército Libertador - La Conquista)

Todas las mediciones en este punto fueron registradas por 24 horas entre los días miércoles 28 y jueves 29 de enero de 2009.

Observaciones y predicciones de sulfuro total disuelto en fase acuosa:

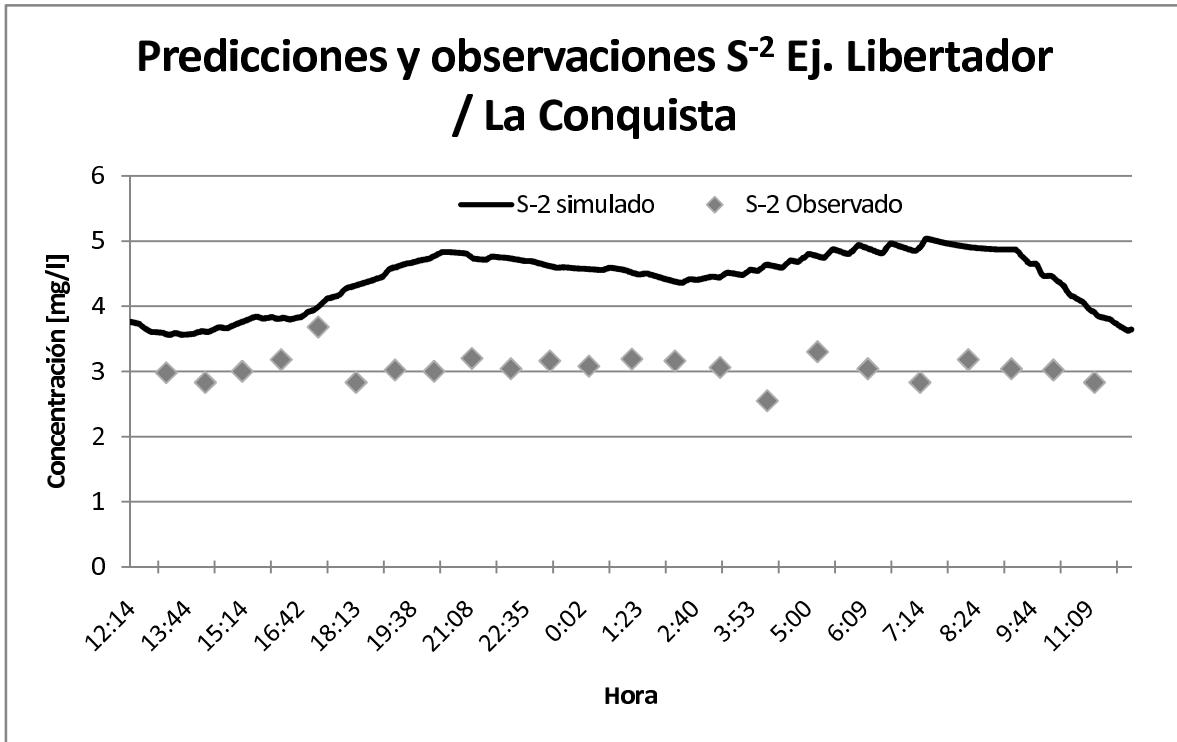


Gráfico 14: Observaciones y predicciones de sulfuro total disuelto para el punto Ej. Libertador y La Conquista

En este punto de muestreo se descartó una medición fuera de toda tendencia a las 12:15 horas (primera toma de muestra, 12,83 mg/l). Sin embargo, al contrario de los casos descritos en los puntos 2 y 3 previamente, en este caso también existe un alza notoria en la DBO₅ a la misma hora que puede justificar la alta concentración de sulfuro observada (674 mg/l sobre un promedio de 315 mg/l), aunque por ser muestras estadísticamente poco válidas se decide descartarlas.

Predicciones y observaciones sulfhídrico gaseoso:

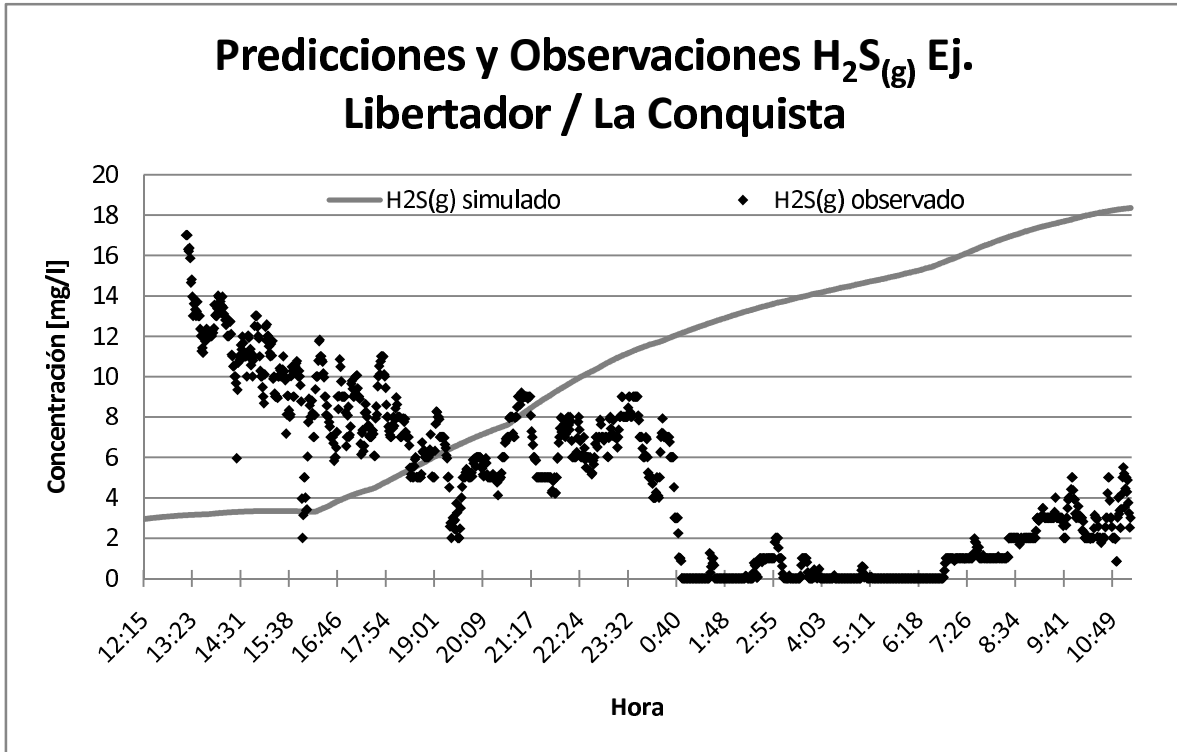


Gráfico 15: Predicciones y observaciones de H₂S(g), para el punto Ejército Libertador y La Conquista

La calibración para el sulfuro se realizó descartando el punto correspondiente a las 12:15 horas. Así, el ajuste de los parámetros dio los siguientes resultados:

Parámetro	Valor Original	Valor Calibrado
M	$32 \cdot 10^{-5}$	$22,62 \cdot 10^{-5}$
N	0,64	0,735

Tabla 6: parámetros ajustados para el punto Ejército Libertador y La Conquista

Finalmente se muestran las predicciones de sulfuro disuelto empleando los parámetros ajustados:

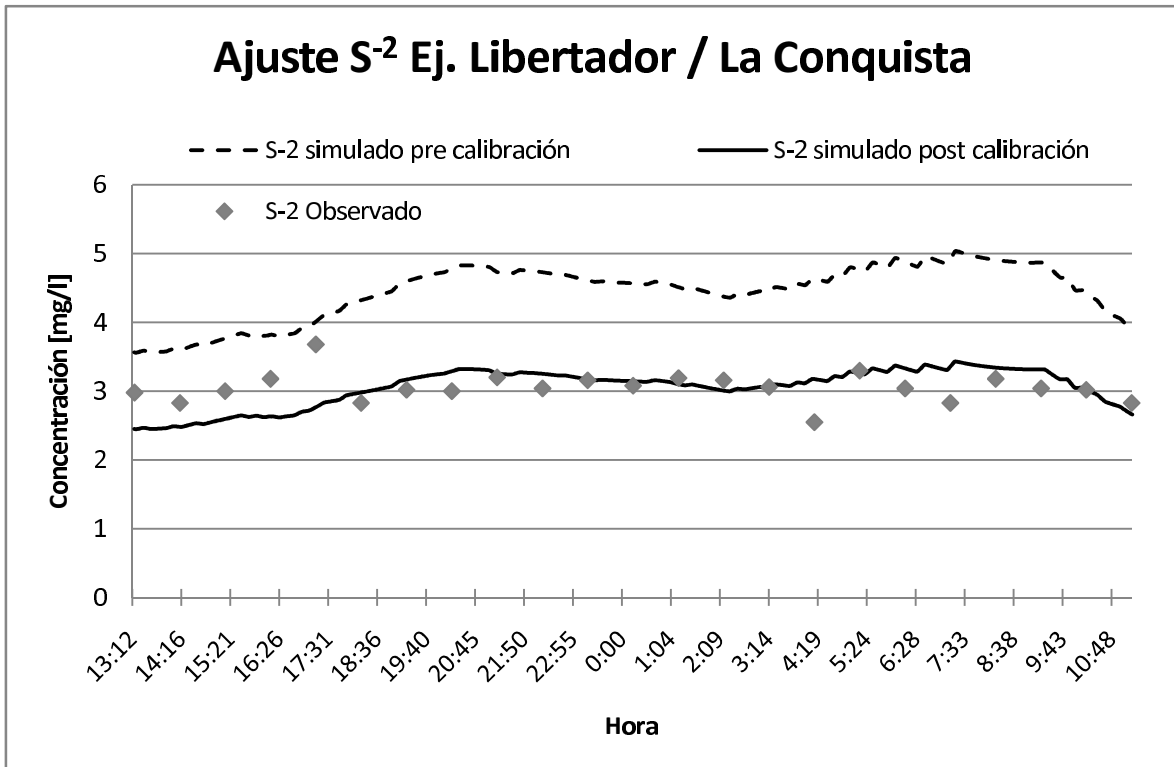


Gráfico 16: ajuste para sulfuro disuelto calibrado en punto Ejército Libertador y La Conquista

El ajuste de parámetros logró reducir la suma de los errores cuadráticos de 48,3 (2,36 promedio y error cuadrático medio de 1,54 mg/l) a 3,1 (0,14 promedio y error cuadrático medio de 0,37 mg/l).

Punto 5: T-11 (extremo aguas abajo o punto de salida del sistema)

Todas las mediciones para este punto fueron registradas por 24 horas entre los días miércoles 14 y jueves 15 de enero de 2009.

Observaciones y predicciones de sulfuro total disuelto en agua:

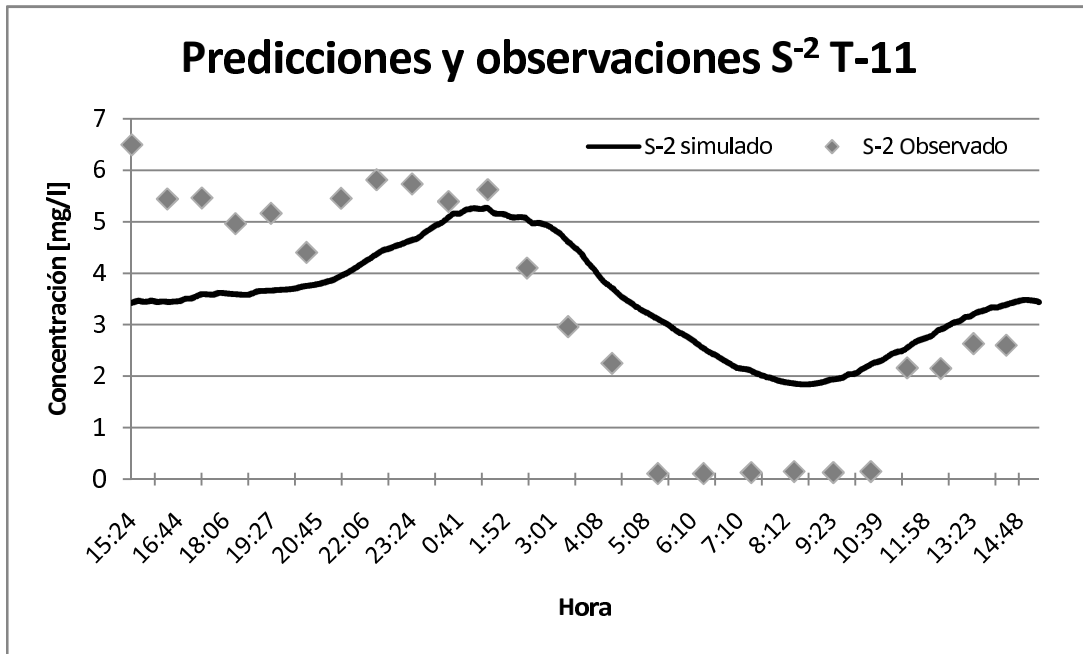


Gráfico 17: Observaciones y predicciones de sulfuro total disuelto para el punto T-11

La suma de los errores cuadráticos entre las predicciones y las observaciones en este punto asciende a 63,9 (con un promedio de 2,66 y un error cuadrático medio de 1,63 mg/l)

Predicciones y observaciones sulfuro de hidrógeno gaseoso:

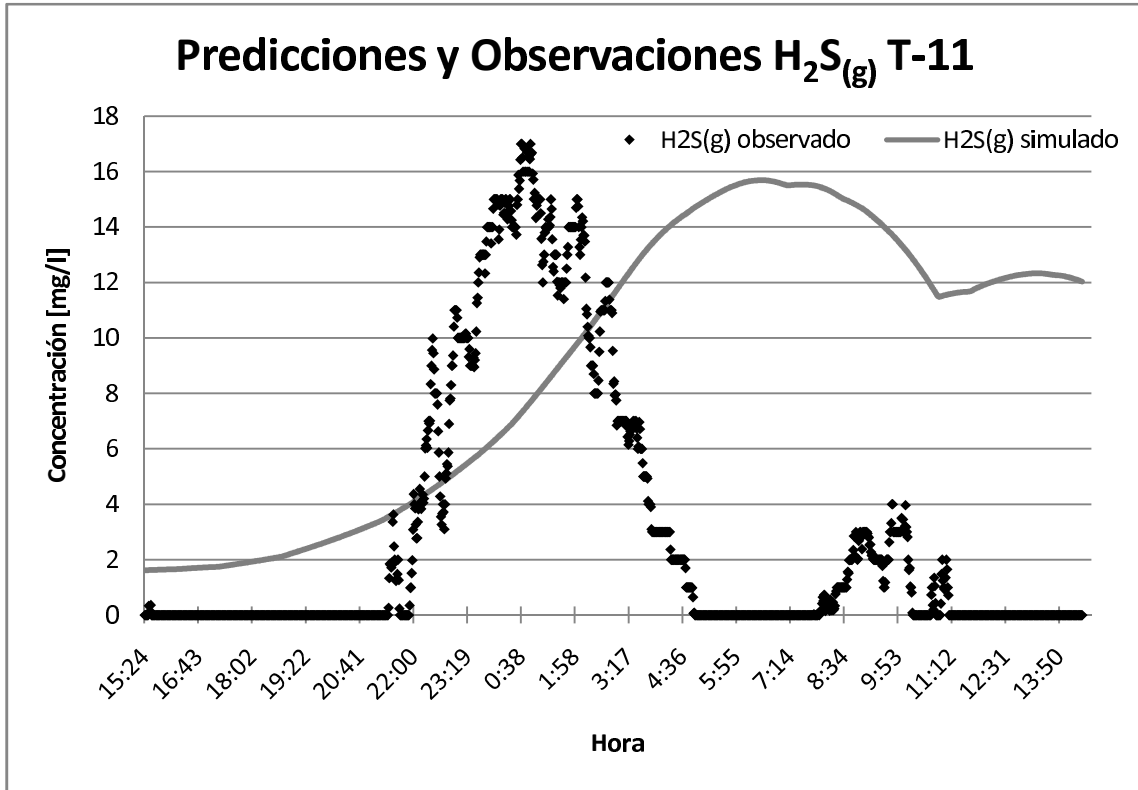


Gráfico 18: Predicciones y observaciones H₂S(g) punto T-11

El ajuste de parámetros entrega los siguientes resultados:

Parámetro	Valor Original	Valor Calibrado
M	$32 \cdot 10^{-5}$	$33,09 \cdot 10^{-5}$
N	0,64	0.684

Tabla 7: Parámetros ajustados para el punto T-11

Comparación entre predicciones y observaciones de sulfuro disuelto utilizando los parámetros calibrados:

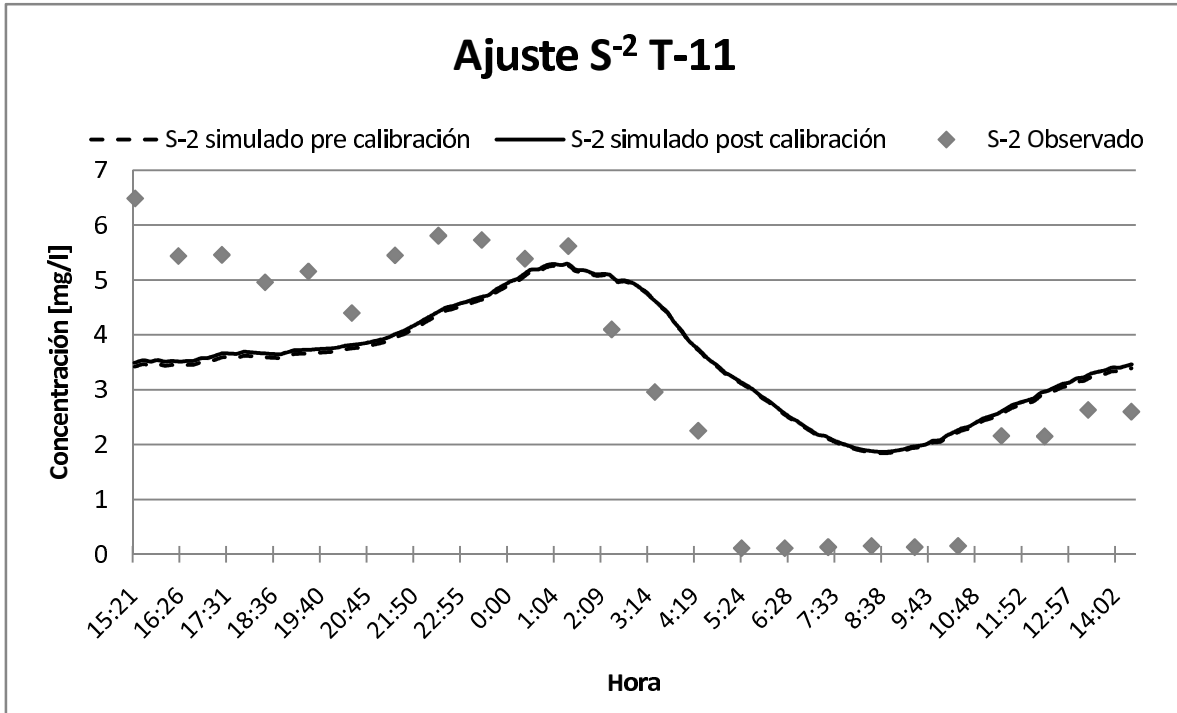


Gráfico 19: ajuste para sulfuro disuelto calibrado en punto T-11

Luego del ajuste, la suma de errores cuadráticos entre los valores simulados y los valores experimentales alcanzó un mínimo de 56,8 (2,37 promedio, y un error cuadrático medio de 1,54 mg/l)

4. Discusiones

Debido a que se detectaron valores anómalos en algunos set de datos empíricos de sulfuro disuelto, sería adecuado realizar análisis estadístico de significancia sobre los datos, de manera de validarlos. Sin embargo, sólo se dispuso de datos para períodos de 24 horas, lo que impide llevar a cabo lo antes descrito. Sin duda esto implica una limitación para el trabajo que se hizo. De todas formas, es posible estudiar las mediciones de otros parámetros en agua (como sulfato disuelto o DBO_5) para analizar si un dato de sulfuro es válido o no, o para estudiar si las tendencias se asemejan.

La calibración permitió reducir en todos los puntos la suma de errores cuadráticos y el error cuadrático medio correspondiente, llegando a un promedio, entre los ECM calculados en los cinco puntos, de sólo 1,83 mg/l.

Punto 1 (Concha y Toro – D. Tocornal)

Se observa que tanto las predicciones como las observaciones de sulfuro total disuelto presentan una tendencia similar en el lapso comprendido entre las 16:00 y las 02:00 horas, en el que la concentración tiende a bajar levemente, permaneciendo bajo los 2 mg/l. A partir de dicha hora y hasta las 08:00 horas se encuentra, tanto en los valores entregados por la simulación como en los medidos experimentalmente el mínimo diario para el sulfuro total (lo cual cae dentro de lo esperado debido al muy bajo flujo de agua a esa hora), sin embargo en las observaciones se alcanza un mínimo de 0,33 mg/l a las 05:15 horas, mientras que el mínimo predicho es de 0,76 mg/l a las 07:08 horas, e incluso el promedio de concentración según las predicciones entre las 04:00 y las 08:00 horas es de 0,96 mg/l, mientras que para el mismo intervalo de tiempo, las observaciones indican que el promedio alcanza sólo los 0,51 mg/l. En tanto, entre las 16:00 y las 02:00 horas, si bien la tendencia global de la concentración de S^2 puede ser algo diferente, las magnitudes son muy similares, pues en este lapso, los valores predichos se sitúan en torno a un promedio de 1,8 mg/l y 1,6 mg/l en el caso de las mediciones en este mismo intervalo de tiempo. También es compartida en ambos casos la tendencia al alza entre las 12:00 y las 14:00 horas.

Los resultados de la calibración para ambos casos (descartando el primer punto y descartando los tres primeros) indican que existe un gran ajuste entre las predicciones y las observaciones. En particular, para el caso b), teniendo un coeficiente de determinación de 0,89 por lo que se puede considerar que el fenómeno está correctamente modelado, y que las diferencias entre predicciones y mediciones empíricas son sin problemas atribuibles a los fenómenos que el programa no ha modelado (como singularidades hidráulicas o descargas de riles).

Al comparar los gráficos correspondientes a las observaciones y predicciones de gas, entre las 14:00 y las 17:30 horas se ve una tendencia poco clara en los datos

experimentales, que oscilan en torno a un promedio de 0,71 mg/l de $H_2S_{(g)}$ (y una desviación estándar de 0,45), mientras que la simulación retorna para el mismo lapso de tiempo, un promedio de 0,85 mg/l (y una desviación estándar de 0,009 calculada de acuerdo a los valores simulados para todo el rango). Ambos valores están bastante cercanos, pero los mayores datos teóricos concuerdan con el hecho de que la red se modeló como colectores sin ventilación alguna, mientras que en la realidad existe un pequeño flujo de gas desde los colectores hacia la superficie a través de las tapas de las cámaras. La diferencia de dos órdenes de magnitud en la dispersión de los datos se explica por el hecho de que el modelamiento no considera fenómenos que en ocasiones ocurren en las redes como el flujo de bolsones de gas o “chiflones” de aire (que aumentan la concentración de gas de manera puntual y súbita), ni tampoco de singularidades dentro de los ductos, en particular resaltos (que aumentan el área de transferencia líquido-gas), embanques (que aumentan el área de contacto entre el agua y el biofilm) o ensanche al pasar de un colector a otro de mayor diámetro. Todo esto hace que aunque las concentraciones promedio sean semejantes entre mediciones y predicciones, las tendencias pueden ser muy diferentes.

La calibración permitió bajar el error cuadrático medio, para el caso b), de 0,52 a 0,47 mg/l, es decir la imprecisión del modelo es muy baja, y ratifica lo que se puede apreciar en el gráfico 7, en el que las curvas de simulación de sulfuro disuelto son muy semejantes y sólo difieren en pequeñas magnitudes.

Punto 2 (Ernesto Alvear – Eyzaguirre)

Se observa que las predicciones coinciden con la tendencia de mínimas concentraciones observadas entre las 02:00 y las 07:00. En particular entre las 04:00 y las 06:00 se observa un promedio de 0,4 mg/l de sulfuro total disuelto, mientras que a la misma hora, las predicciones se sitúan en torno a un promedio de 1,4 mg/l. A pesar de estar un orden de magnitud por encima de las observaciones, la tendencia a lo largo del tiempo es similar, tanto en ese lapso de 2 horas como en el lapso mencionado previamente, por lo tanto las predicciones son aceptables ya que en ambos casos existe concordancia con el hecho de que esas son las horas de menor flujo de agua y de menor carga orgánica (ver gráfica de perfil de DBO_5 para este punto en anexos).

Aunque el máximo global se alcanza en torno a las 11:00 horas según la simulación, los datos empíricos indican que el máximo global tiende a estar entre las 20:00 y las 22:00 horas, lo cual es esperable debido a que entre las 21:00 y las 23:00 se registraron los mayores valores de DBO (hasta 874 mg/l). En torno a las 15:30 horas se aprecia un mínimo local, tendencia que ocurre entre las 15:00 y las 16:00 horas alcanzando un mínimo de 2,6 mg/l, que no se condice con las mediciones efectuadas en terreno. Entre las 18:00 y las 00:00 horas se nota una tendencia oscilante en las observaciones, en la que los mínimos y máximos que se registran no son globales dentro de todo el dominio, sin embargo en estas fluctuaciones los datos empíricos muestran valores de magnitudes cercanas a los resultados de la simulación, puesto que la

concentración promedio de sulfuro disuelto para este período es de 9,6 mg/l para las mediciones en terreno y de 8,4 mg/l según el resultado de la simulación.

Como resultado del ajuste de parámetros, se obtienen nuevas predicciones (gráfico 10) que cuentan con un coeficiente de determinación r^2 de 0,50. Si bien no es un dato que permita con certeza afirmar que estos resultados son válidos, se puede apreciar en el mismo gráfico que el ajuste es correcto, y que diferencias puntuales a ciertas horas hacen que los errores cuadráticos se incrementen mucho sin esto significar que el ajuste, globalmente, es impreciso. Todo esto se reafirma al verificar que el ECM es reducido de 2,41 a 2,25 mg/l.

En lo que respecta al sulfuro de hidrogeno gaseoso, considerando el lapso entre las 14:00 y las 17:30 horas, no existe para este punto similitud entre predicciones y mediciones, tanto en magnitudes como en tendencias. De hecho, para dicho intervalo de tiempo las predicciones tienen un promedio de 4,9 mg/l y una desviación estándar de 1,4, mientras que las observaciones de gas poseen un promedio de 0,85 mg/l y una desviación estándar de 0,76. Mientras que entre las 14:00 y las 15:30 horas se aprecia que la tendencia de la simulación es de tipo creciente en torno a los 3 mg/l de gas, las observaciones indican que la tendencia es que la concentración de gas va disminuyendo, hasta una concentración promedio de 1 mg/l. Entre las 16:00 y las 17:30 horas, la simulación indica que existe un incremento sostenido de la concentración del gas, desde 3,3 mg/l a 4,5 mg/l y a su vez las mediciones experimentales sufren pocas variaciones y la concentración se mantiene en torno a 1 mg/l. Si bien siguen siendo válidas las justificaciones expuestas en el punto anterior (no consideración de singularidades ni perturbaciones) de modo de entender el resultado de mayores predicciones de gas con respecto a las mediciones observadas, las diferencias registradas son muy altas.

Punto 3 (Ejército Libertador - Rafael Alberti)

Entre las 14:00 y las 18:00 la concentración de sulfuro total disuelto observado tiende a descender, de 11,4 a 7,6 mg/l, mientras que en el mismo lapso, las predicciones de concentración muestran una marcada tendencia al alza, que va desde 2 mg/l a 8,8 mg/l. De estos dos comportamientos, es más esperable un descenso en el sulfuro disuelto debido a la disminución registrada (y esperada) en la DBO_5 para este punto en el mismo intervalo de tiempo (ver anexos), sin embargo el alza en las predicciones se puede justificar debido a la disminución del caudal de agua, frente a lo cual se incrementa la concentración de sulfuro en fase acuosa. Entre las 18:00 y las 23:00 horas las observaciones se mantienen estables en torno a un promedio de 7,7 mg/l pero las predicciones nuevamente muestran un alza importante y permanente (salvo un pequeño lapso de una hora entre las 18:30 y las 19:30, cuando se percibe un pequeño descenso en la concentración, pero que no alcanza a incidir en la tendencia global) hasta llegar a 28 mg/l a las 00:55 horas. A partir de este punto y hasta mediodía, las predicciones disminuyen sistemáticamente (salvo entre la 01:50 y las 02:45, cuando se produce una leve alza) hasta llegar a un mínimo global de 1,6 mg/l de S^2 a las 11:00 horas. Durante las mismas horas, las observaciones también manifiestan una tendencia a decrecer, salvo

las mediciones de las 06:00 y 07:00 horas que rompiendo la tendencia aumentan abruptamente para luego volver a los valores previos. Así, las mediciones en terreno bajan desde 7,4 mg/l a las 23:00 hasta 1,9 mg/l a las 08:00 (mínimo global registrado), para volver a aumentar hasta valores cercanos a 7 mg/l. La misma tendencia de aumentar durante la mañana se puede notar en las predicciones, sólo que ocurre un poco más tarde (a partir de las 11:00 horas) y es bastante menos pronunciado ya que para el último dato graficado (14:00 horas) se tiene una concentración de S^2 de 3 mg/l. Si bien este punto se encuentra aguas abajo del punto 1 (Concha y Toro – D. Tocornal), no se encuentra aguas abajo del punto 2 (E. Alvear – Eyzaguirre) por lo que no es atribuible el sobredimensionamiento de las predicciones a la alta carga orgánica medida en el punto 2. Sin embargo sí se puede considerar que la larga distancia entre los puntos 1 y 3 significó en el fenómeno real un amplio tiempo de retención y suficientes singularidades como para que el sulfuro fuera transferido de fase acuosa a fase gaseosa y de esta manera atenuar la acumulación que se puede notar en los valores predichos.

Con todo esto, se desprende del gráfico 11 que no existe concordancia en las tendencias de los valores experimentales y los valores modelados, por lo que una calibración podría no retornar un buen ajuste, lo cual se ratifica en el gráfico 13, donde la variación de parámetros no lo logró asemejar la tendencia del resultado de la simulación con las observaciones, sin embargo la magnitud de las predicciones descendió notoriamente, acercándose bastante a los datos obtenidos experimentalmente, lo cual se aprecia en la reducción de la suma de errores cuadráticos que se mostró previamente. En efecto, el ECM logró ser reducido luego de la calibración, de 10,35 a 4,52 mg/l. A pesar de esta drástica reducción, sigue siendo un error bastante alto, por cuanto una diferencia de esa magnitud en la concentración de sulfuro puede significar que se pueda operar en un colector o no.

Con respecto al gas, las predicciones tienen una tendencia única y claramente apreciable, que es de incremento sostenido en la concentración y en todo intervalo, partiendo desde un mínimo global de 0,06 mg/l a las 14:00 (comienzo) hasta un máximo global de 2,1 mg/l a las 14:00 (fin). El promedio en este intervalo es de 1,1 mg/l. A su vez, las observaciones tienen comportamientos dispares a lo largo de las mismas 24 horas, pues descartando los datos entre las 14:00 y las 19:30 horas por ser considerados anómalos, a partir de esa hora existe una clara tendencia en la cual la concentración de gas aumenta hasta llegar a un máximo local de 14,3 mg/l a las 22:35 horas, luego de oscilar en torno a los 13 mg/l, se produce un descenso definitivo a partir de las 00:00 desde el peak global de 14 mg/l que ninguna similitud tiene con respecto a las predicciones a partir de esa misma hora (que siguen aumentando), salvo entre las 03:15 y las 04:00, cuando se produce una estabilización en 2 mg/l, bastante más cercanos a los 1,3 mg/l promedio que existen durante ese mismo período según la simulación. Descartando los datos empíricos entre las 04:15 y las 06:30 (en cero, con variación casi nula), no existen más tendencias parecidas entre predicciones y observaciones, lo cual se reafirma con el hecho de que de 08:00 en adelante el promedio de las predicciones tiene un valor de 1,96 mg/l y una desviación estándar de datos de 0,078 (es decir, muy poca oscilación en torno al promedio), mientras que las observaciones en el mismo intertanto tienen un promedio de 5,4 mg/l, pero una desviación estándar de 2,7, un valor suficientemente alto como para reafirmar algo que salta a la vista al ver el gráfico correspondiente: no se puede determinar una tendencia con precisión, lo que dificulta mucho el contraste entre los datos predichos y los datos registrados en terreno.

En este punto se aprecia que el máximo global de sulfuro disuelto alcanza concentraciones bastantes altas, explicadas por el arrastre generado por un gran número de colectores aguas arriba, lo cual no ocurre en los puntos 1 y 2, lo que explica tal diferencia de magnitud (este efecto también será apreciable en los puntos 4 y 5, según se discutirá a continuación).

Punto 4 (Ejército Libertador - La Conquista)

La evolución en el tiempo del sulfuro disuelto presenta una alta semejanza entre las predicciones y las mediciones, apreciando que los valores simulados tienen un promedio de 4,4 mg/l contra 3,1 mg/l por parte de las observaciones. Sin embargo, la desviación estándar de los valores predichos para el S^2 es de 0,43 y de 0,22 para los valores experimentales, lo que implica que en ambos casos existe poca dispersión de los datos, a pesar de lo cual los mínimos y máximos globales no coinciden en el tiempo, pues mientras en las predicciones el máximo global se sitúa en 5 mg/l a las 07:20 horas, a la misma hora las observaciones indican un mínimo local de 2,8 mg/l, y el máximo global observado está a las 17:15 horas (3,7 mg/l).

El gráfico 16 muestra que se consiguió un buen ajuste entre predicciones y observaciones luego del ajuste de parámetros, reduciendo las diferencias entre las magnitudes de ambas series de datos. Antes de la calibración el error cuadrático medio alcanzaba un valor de 1,54 mg/l, considerado bajo, y posterior al ajuste fue reducido a 0,37 mg/l, pudiendo considerarse este punto como el mejor ajustado.

Las predicciones de gas muestran tendencias absolutamente opuestas a las presentadas por las observaciones, por lo que carece de sentido realizar la calibración sobre el gas. En este punto se tienen altos valores de gas medido, puesto que en las cercanías de la cámara donde se hizo el muestreo, existe una confluencia de 3 colectores, generando resalto, turbulencia y agitación en las aguas, lo que deriva en que aumente la transferencia del sulfuro de hidrógeno hacia fase gaseosa por un incremento en el área de interfase.

Punto 5 (T-11, salida del sistema)

Se aprecia que entre las predicciones y observaciones de sulfuro disuelto, existe semejanza en una tendencia hacia un máximo local entre las 23:30 y las 01:30 horas, aunque las cantidades medidas de manera experimental muestran una mayor magnitud de manera permanente desde el comienzo del muestreo hasta las 02:30, cuando se comienza a producir el esperable período de menor concentración de sulfuro (debido al bajo flujo de agua y a que la carga orgánica va disminuyendo de manera clara, ver anexos) llegando a concentraciones cercanas a cero (pero no nulas) desde las 05:30 hasta las 10:30. Sin duda no es esperable que estas bajas concentraciones de sulfuro se extiendan por tanto tiempo, sobretodo al comparar lo que ocurre en los puntos de muestreo previos, por lo que se puede pensar que en el lapso comprendido entre las

08:30 y las 10:30 hubo error de muestreo o bien alguna dilución importante en las aguas previo a ser muestreadas. Más aún, en la predicción retornada, el mínimo se encuentra a las 09:00 horas y corresponde a 1,8 mg/l de sulfuro, hora a partir de la cual empieza un aumento sostenido de esta especie.

Desde el comienzo del muestreo hasta antes de comenzar el brusco descenso a partir de las 02:15 horas, las observaciones presentan un promedio de 5,4 mg/l de sulfuro y una desviación estándar de 0,52, ratificando la baja dispersión que se aprecia gráficamente, y ello se puede explicar en el hecho de que al ser el punto de salida de toda la cuenca T-11, o bien el extremo aguas abajo de toda la zona modelada, es esperable que posea baja oscilación en la concentración debido a que recibe mucho material orgánico producto del arrastre de toda la red, y que estará constantemente participando en la reducción de sulfato para producir sulfuro. Durante el mismo período de tiempo, el modelamiento arrojó un promedio de 4 mg/l de sulfuro y una desviación estándar de 0,59, es decir, también se modelan concentraciones con baja dispersión entre sí, solo que con magnitud subestimada. Este subdimensionamiento del sulfuro generado puede explicarse en el hecho de que como se explicó en el capítulo 3, el modelamiento no incluye colectores de diámetros inferiores a 250 milímetros por su, por lo general, bajo aporte al flujo total, sin embargo al estar analizando el extremo aguas debajo de la red, puede ser un factor a considerar todos los colectores desechados por no cumplir con este criterio, que al ser cerca de 1500, pueden en su conjunto aportar con sulfuro que no está siendo considerado por este modelamiento.

Los últimos 4 puntos del muestreo en terreno presentan una mayor concordancia con las simulaciones, ya que tienen un promedio de 2,4 mg/l (para una desviación estándar de 0,27) mientras que en el mismo lapso, los valores modelados tienen un promedio de 3 mg/l y una desviación estándar de 0,25, indicando entonces esto que las tendencias son similares y en promedio existe una leve sobreestimación del sulfuro disuelto.

El gráfico 19 muestra que el ajuste de parámetros deriva en una buena aproximación de la simulación sobre los datos empíricos, lo que queda explícito con el r^2 calculado de 0,83 correspondiente a la diferencia entre ambos perfiles. Sin embargo también se puede apreciar que las dos curvas de predicción (antes y después de la calibración) son extremadamente similares, y se ven casi superpuestas, lo que se condice con la poca reducción del ECM entregada por el ajuste de parámetros: de 1,63 a 1,54 mg/l.

Con respecto al sulfhídrico gaseoso en este punto, se puede notar que solamente existe una relativa similitud entre predicciones y observaciones en cuanto a la magnitud que se alcanza en el máximo global en ambos casos. Para los datos experimentales, se pueden considerar válidos para este estudio sólo aquellos comprendidos entre las 22:00 y las 03:30 horas aproximadamente, ya que es sumamente extraño un comportamiento como el mostrado en gráfico 18 de tener incrementos y disminuciones tan pronunciadas en tiempos tan cortos, y tener mediciones de cero gas por tantas horas, por lo que nuevamente se confirma que no tiene sentido realizar calibración sobre el gas.

5. Conclusiones

Se logró implementar un programa computacional capaz de modelar los fenómenos de generación y transporte de H_2S gaseoso a lo largo de una red en particular dentro de la ciudad de Santiago, utilizando como entrada datos conocidos sobre los colectores (largo, diámetro y pendiente), una matriz de variación de nivel de agua en los colectores (aportada por un programa de simulación de flujo de aguas servidas que posee la empresa) y otros datos relevantes extraídos de la literatura (constante de Henry, pH, constantes termodinámicas de equilibrio). La salida del modelo retorna concentraciones a lo largo del tiempo, que pueden visualizarse para cualquier colector que esté ingresado en el programa, para tres compuestos: H_2S gaseoso, H_2S acuoso y sulfuro total disuelto en agua.

El modelo implementado deja de lado ciertos fenómenos que puedan ocurrir dentro de los colectores de modo de simplificar el modelamiento, o bien porque no se manejaban los datos requeridos. Algunos de estos fenómenos son flujo de gas sulfhídrico hacia las paredes de los colectores que pueda condensarse y oxidarse a ácido sulfúrico; turbulencia de las líneas de flujo; resaltos y embanques en el flujo de agua; generación de otros gases aparte del H_2S .

Se modeló el problema de emisiones de H_2S a través de software de resolución numérica empleando modelos matemáticos ya existentes. La necesidad de realizar esto se sustenta en las altas concentraciones de gas detectadas en algunos puntos de la red, capaces de provocar severos daños al organismo de quienes trabajen en la red así como de la gente expuesta a emisiones de gas desde los colectores, además de ser un gas cuyas altas concentraciones deriven en posible daño estructural en los colectores. Las bases fenomenológicas que explican tanto la generación como la emisión de este compuesto gaseoso desde las aguas a la atmósfera pudieron ser precisadas y entendidas luego de un exhaustivo estudio de la vasta literatura relacionada con el tema. Con respecto a ello, se logró constatar a través de mediciones que existen correlaciones entre DBO_5 y sulfuro total disuelto, lo cual permite reafirmar lo que indican las ecuaciones de generación de sulfuro acerca de que la producción de sulfuro disuelto en agua como consecuencia de la reducción bacteriana del sulfato, es una función de la DBO_5 . Asimismo, la variación de DBO_5 observada a lo largo de todo un día permitió obtener perfiles del mismo parámetro en función del tiempo, para poder ser ingresados al modelamiento. Como los perfiles eran polinomiales, se pudieron llevar a series de Fourier de modo de generar funciones 24 horas-periódicas para toda la red modelada.

Además de los datos de DBO_5 , los datos sobre sulfato en los cinco puntos de medición entregados por ANAM sirvieron para determinar si en algún caso dado correspondía o no descartar algún valor experimental de sulfuro que pareciera inválido.

Debido a lo anómalas que resultaron de las observaciones de gas con respecto a las predicciones, se decidió realizar calibración sólo sobre sulfuro disuelto y no sobre gas, más aún considerando que, sin calibrar, había buenas concordancias entre los valores retornados por la simulación y los datos empíricos. Así, se realizaron calibraciones

independientes para sulfuro en los cinco puntos de medición, ajustando los parámetros M y N.

De los cinco puntos analizados, aquellos dos con menor cantidad de colectores aguas arriba (puntos 1 y 2) fueron los que presentaron mejores concordancias entre las predicciones y las observaciones, tanto en tendencias como en magnitudes, para sulfuro disuelto, lo cual puede encontrar explicación en el hecho de que reciben menos carga orgánica, menos sulfato y menos sulfuro de los colectores aguas arriba, con respecto a los colectores en los tres puntos restantes. En particular para el punto 1 se consiguió calibrar el modelo para sulfuro disuelto en agua y ajustar los parámetros para lograr un coeficiente r^2 de 0,89 entre el modelo calibrado y las observaciones, y un muy bajo error cuadrático medio de 0,47 mg/l, lo que significa que el programa logra modelar correctamente el fenómeno. Para el punto 2, la calibración lograda retorna un coeficiente r^2 de 0,50 entre predicciones del modelo calibrado y los datos experimentales y un ECM de 2,25, a pesar de que logró bajar poco el ECM de 2,41 previo al ajuste. La calibración de parámetros para el punto 4 entrega una buena aproximación para los datos experimentales, lo que se puede apreciar gráficamente y viendo también la reducción del ECM que logra alcanzar un bajísimo valor de 0,37 mg/l, y también el punto 5 (salida del sistema) permite calibrar las predicciones de sulfuro disuelto por tener un bajo ECM.

El punto 3 mostró tendencias y magnitudes algo similares entre mediciones y predicciones de sulfuro disuelto sólo en las últimas horas de registro, pero el gráfico 13 reafirma que no es posible realizar un ajuste significativo entre valores experimentales y teóricos para el sulfuro disuelto en este punto, sin embargo de la comparación para sulfhídrico gaseoso no se obtiene ningún análisis válido debido al descarte de los datos observados por considerarlos anómalos. Aunque el ajuste de parámetros logró reducir notoriamente el ECM en este punto (de 10,35 a 4,52 mg/l), la tendencia de ambas curvas (experimental y simulada) es considerablemente diferente.

En los cinco puntos es posible apreciar el desfase existente entre resultados predichos y mediciones empíricas. Lo anterior es adjudicable a los fenómenos que el modelamiento no considera: ausencia de singularidades como resaltos o embanques (mayor transferencia de sulfhídrico a fase gaseosa), ausencia de orificios en las tapas de las cámaras (disminución puntual de concentración de gas), descarga de riles (shock de DBO_5 o de flujo de agua), materiales resistentes a formación de biofilm (disminución de generación de sulfuro, a pesar de que son ingresados con una rugosidad diferente). Para una mejor aproximación de las predicciones a las observaciones podría ser útil en un estudio futuro incluir un factor de corrección para el coeficiente global de transferencia de masa para el H_2S , ya que es sabido que para aguas servidas es menor que para agua pura, sin embargo por simplificación en este trabajo se utilizó el $K_L a$ estándar para sulfuro de hidrógeno en agua pura

Se debe continuar este trabajo incluyendo más fenómenos o particularidades que ocurran dentro de la red, como incluir escapes de gas por las tapas de las cámaras o flujo de gas hacia las paredes de los colectores que se condense y genere ácido sulfúrico. En ese sentido, el trabajo realizado constituye una base para continuar trabajando en el tema de flujo de gas en los colectores de aguas servidas. En particular, constituiría un gran avance incluir eventuales puntos de descarga de riles existentes en la red y también actualizar los datos que la empresa posee acerca de la red, ya que pueden estar

desactualizados luego de renovaciones de colectores que han ocurrido en los últimos años, obras en las cuales se reemplazan colectores de hormigón por colectores de PVC o PEAD (menos propensos a tener biofilm en sus paredes)

6. Referencias

1. BBC History – London's 'Great Stink' and Victorian Urban Planning, http://www.bbc.co.uk/history/trail/victorian_britain/social_conditions/victorian_urban_planning_04.shtml
2. Ficha MSDS ácido sulfhídrico, versión en inglés. http://msds.chem.ox.ac.uk/HY/hydrogen_sulfide.html
3. Delgado, S., Alvarez, M., and Rodriguez-Gomez, L. E. (1998). "H₂S generation in a reclaimed urban wastewater pipe. Case study: Tenerife (Spain)." *Water Res.*, 33(2), 539–547
4. Ciencia Abierta N°4, "Opciones Tecnológicas Asociadas a las Bacterias Reductoras del Sulfato", <http://www.ing.uchile.cl/~leherrer/BT53A/reduc sulf/azufre1.htm>, por L. Herrera, J. Hernández y C. Sáez
5. Mejía, G., De Urbina, S., 2007. "Polipéptidos linforeticulares – El tratamiento de apoyo metabólico para el cáncer y otras patologías". D.C. Prometeus S.A.
6. Apgar, D., Witherspoon, J., 2008. "Minimization of odors and corrosion in collection systems". Water Environment Research Foundation
7. Steudel, R., 2000. "The chemical sulfur cycle". *Environmental Technologies to Treat Sulfur Pollution – Principles and Engineering*, IWA Publishing, p.1
8. Pomeroy, R. D., 1990. "The problem of hydrogen sulfide in sewers", 2nd Ed., A. G. Boon, ed., Clay Pipe Development Association Limited, London, 1–24
9. Moreno, M., 2002. "Proyecto de implementación de herramienta de diagnóstico estructural de tuberías de alcantarillado", Memoria de Ingeniería Civil de Industrias con Diploma en Ingeniería Química, PUC Chile.
10. Pomeroy, R.D., Parkhurst, J.D., 1977. "The forecasting of sulfide buildup rates in sewers." *Progr. Water Technol.* 9 (3), pp. 621–628.
11. Lahav O., Lu Y., Shavit, U., Loewenthal, R.E., 2004. "Modeling H₂S_(g) emission rates in gravity sewage collection systems", *J. Environ. Eng.* 130, pp. 1382–1389
12. Lewis, W.K., Whitman, W.G., 1924. "Principles of gas absorption". *Ind. Eng. Chem.*, 16, 1215.

13. Yongsiri, Ch., Vollertsen, J., Rasumussen, M., Hvitved-Jacobsen, Th., 2004. "Air-Water Transfer of Hydrogen Sulfide: An Approach for Application in Sewer Networks". Water Environment Research, 76, p. 1
14. Lahav, O., Sagiv, A., Friedler, E., 2006. "A different approach for predicting $H_2S_{(g)}$ emission rates in gravity sewers." Water Research, Vol. 40, Issue 2, pp. 259-266
15. Yongsiri, Ch., Vollertsen, J., Hvitved-Jacobsen, T., 2005. "Influence of wastewater constituents on hydrogen sulfide emission in sewer networks". J. Environ. Eng., Vol. 131, No. 12
16. Perry, R.H., Green, D.W., 1999. "Perry's Chemical Engineers' Handbook". Ed. McGraw Hill, Cap. 2, p. 127
17. Martinez, F., Fernández, J. F., 2005. "Pérdidas de carga en tuberías: coeficientes de rugosidad". IV Jornada sobre tuberías de hormigón armado y postesado, CEDEX, Madrid, 15-3-2005
18. Edwini-Bonsu, S., Steffler, P.M., 2004. "Air flow in sanitary sewer conduits due to wastewater drag: a computational fluid dynamics approach". J. Environ. Eng. Sci. 3: pp. 331-342

Anexos

1. Perfil de temperaturas (único para toda la red)

El perfil de temperaturas se modeló según una ecuación de la siguiente forma:

$$y = A + B\text{sen}(\omega t + \varphi) \quad (\text{A.1})$$

Donde A es el desplazamiento vertical de la onda (promedio diario de temperaturas fijado), B la amplitud de la oscilación (temperaturas máximas y mínimas del día), ω a la frecuencia normal de oscilación (equivalente a $2\pi/T$, tomando en cuenta el período T de oscilación de un día completo), t el tiempo, y φ al desfase (ajustado de acuerdo a las horas donde tienden a estar los mínimos y máximos diarios de temperatura). Así, con los datos poseídos, el perfil de temperaturas queda como sigue:

$$y = 17 + 2 \cdot \text{sen}\left(\frac{2\pi \cdot t}{1440} + 500\right) \quad (\text{A.2})$$

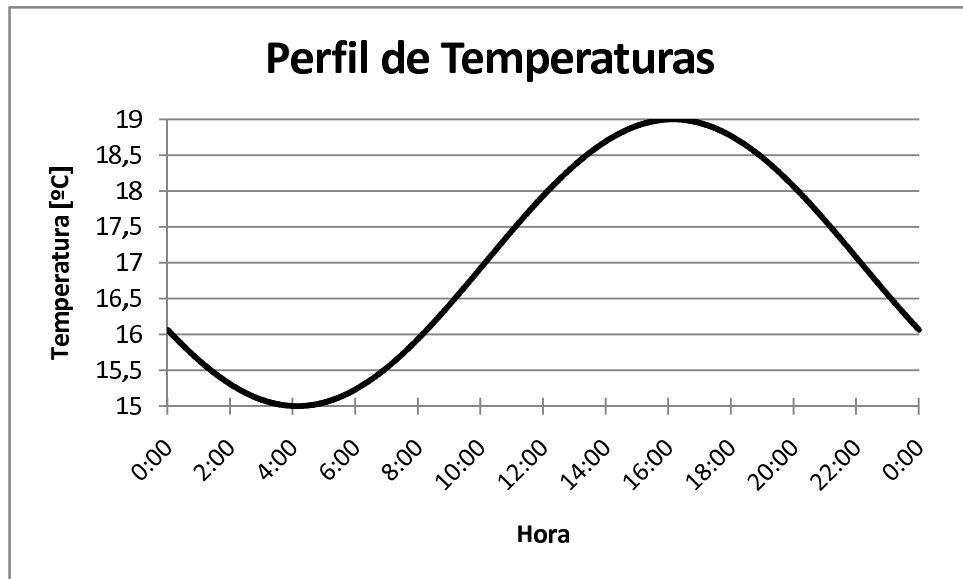


Gráfico 20: Perfil diario de temperaturas utilizado para toda la red

2. Perfiles DBO₅

Datos DBO₅ punto 1 (Concha y Toro – Tocornal)

El siguiente gráfico muestra los datos registrados (puntos) para la DBO₅ en la cámara simple de inspección en la intersección de las avenidas Concha y Toro y Domingo Tocornal, y su correspondiente curva de tendencia, que en este caso corresponde a un polinomio de octavo grado.

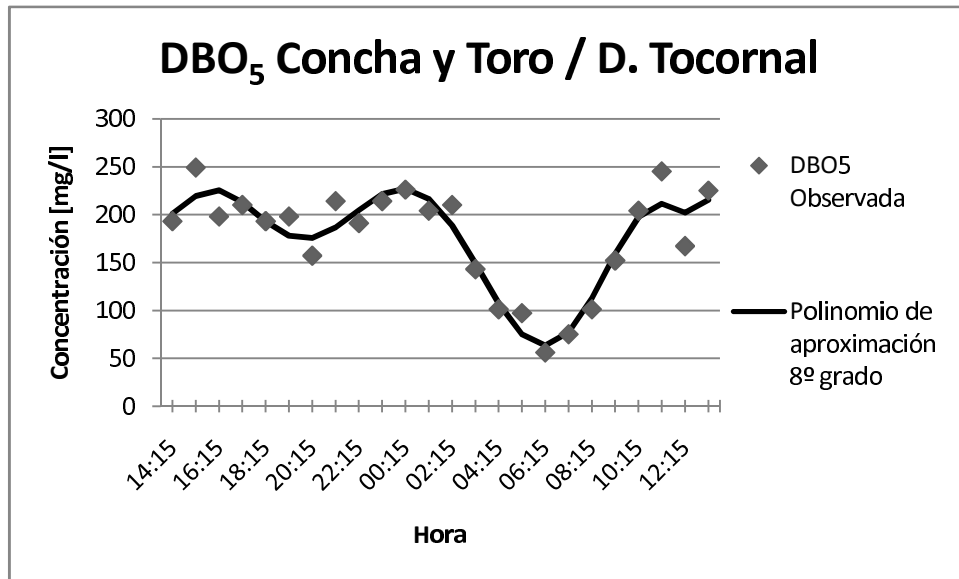


Gráfico 21: Perfil de DBO₅ en el punto de Concha y Toro y Dgo. Tocornal

Esta aproximación entrega un r^2 calculado de 0.887, por lo que se decide tomar esta función como la mejor aproximación para los datos de DBO₅ en el punto ya expresado, y será a ella a la cual se calcule su Serie de Fourier. La ecuación de dicho polinomio, la de su Serie de Fourier y todas las correspondientes a los perfiles de los otros 4 puntos medidos, se omiten debido a su larga extensión.

Para determinar si esta expresión para f es adecuada de usar, se muestra cómo aproxima esta curva los datos experimentales:

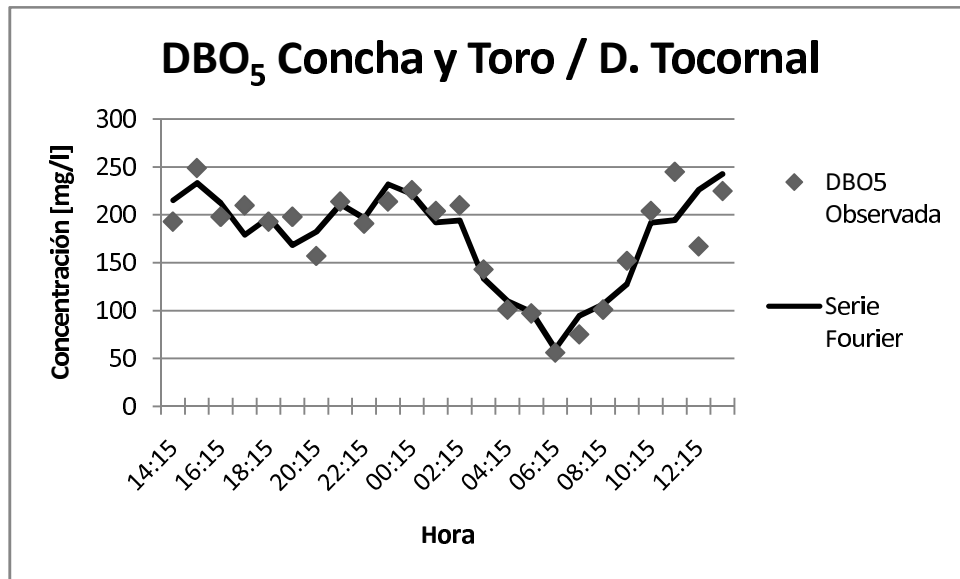


Gráfico 22: Curva de la Serie de Fourier correspondiente a la línea de tendencia presentada en el gráfico anterior

Como se aprecia que la curva efectivamente refleja la tendencia de los puntos experimentales, se puede ocupar dicha función para representar el perfil diario de DBO₅ en el punto ya mencionado, tomando en consideración que, finalmente, la regresión mediante esta Serie de Fourier posee un r^2 calculado de 0.819.

Datos DBO₅ punto 2 (Ernesto Alvear - Eyzaguirre)

Mediciones en terreno de DBO₅ en este punto y su correspondiente curva de tendencia:

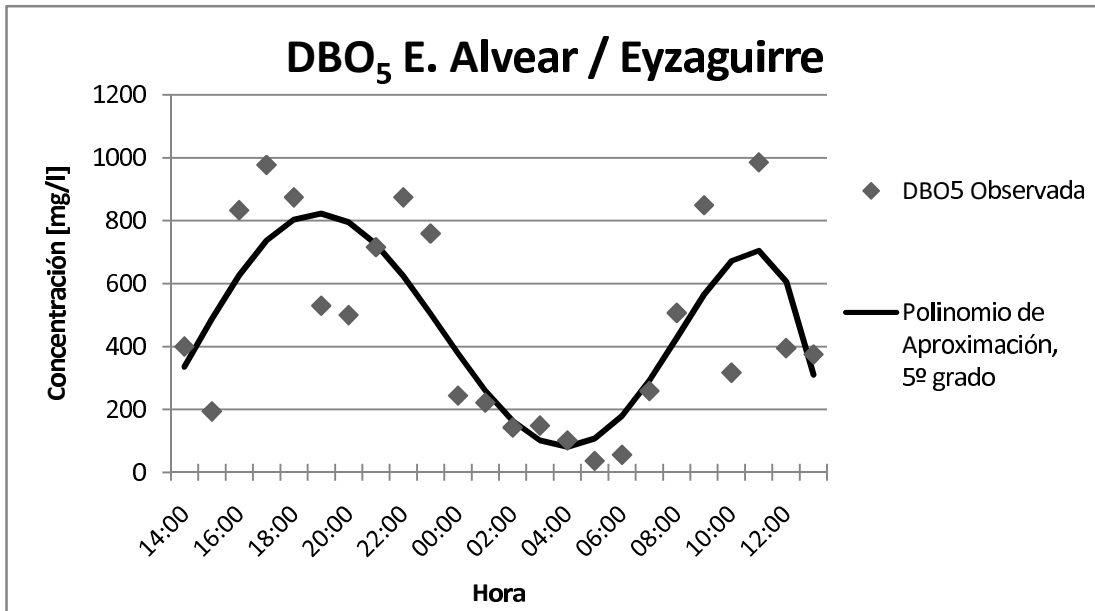


Gráfico 23: Perfil de DBO₅ en el punto de E. Alvear y Eyzaguirre

Esta aproximación logra un coeficiente r^2 de 0.647, con lo que se acepta para utilizarla como perfil de DBO₅ en el modelo para ese punto. La representación gráfica de su Serie de Fourier se muestra a continuación:

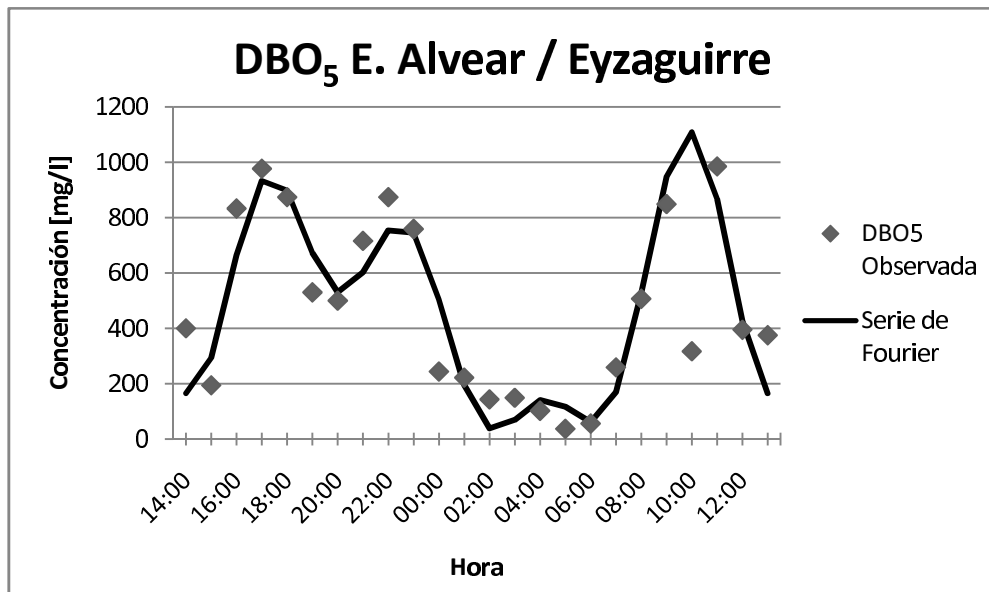


Gráfico 24: Curva de la Serie de Fourier correspondiente a la línea de tendencia presentada en el gráfico anterior

El coeficiente r^2 calculado para esta Serie de Fourier con respecto a las observaciones es de 0.840, lo que permite utilizarla en el modelo para representar las variaciones diarias de DBO₅ en dicho punto

Datos DBO₅ Punto 3 (Ejército Libertador - Rafael Alberti)

Mediciones en terreno de DBO₅ en este punto:

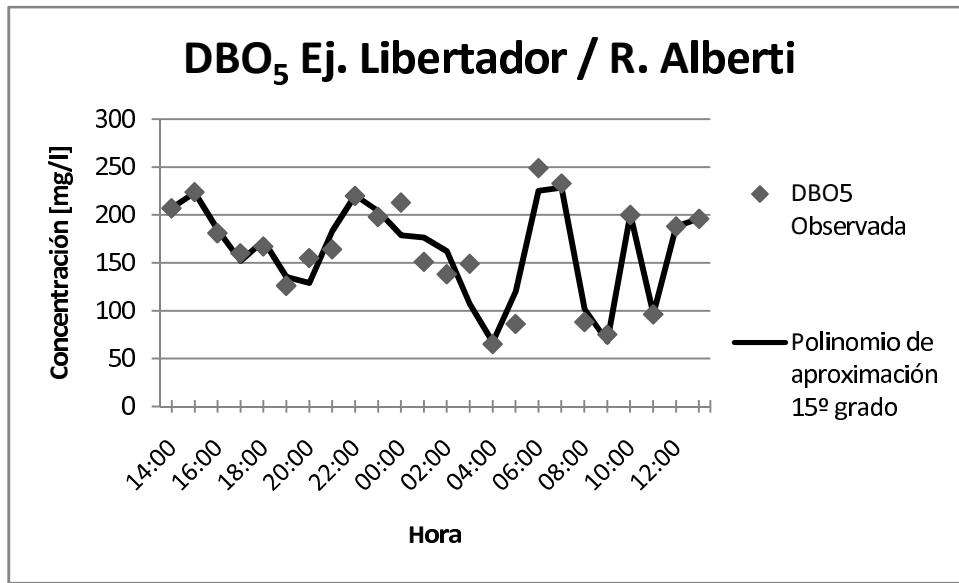


Gráfico 25: Perfil de DBO₅ en el punto Ej. Libertador y Rafael Alberti

El coeficiente de determinación r^2 de éste polinomio con respecto a los datos experimentales es de 0.896.

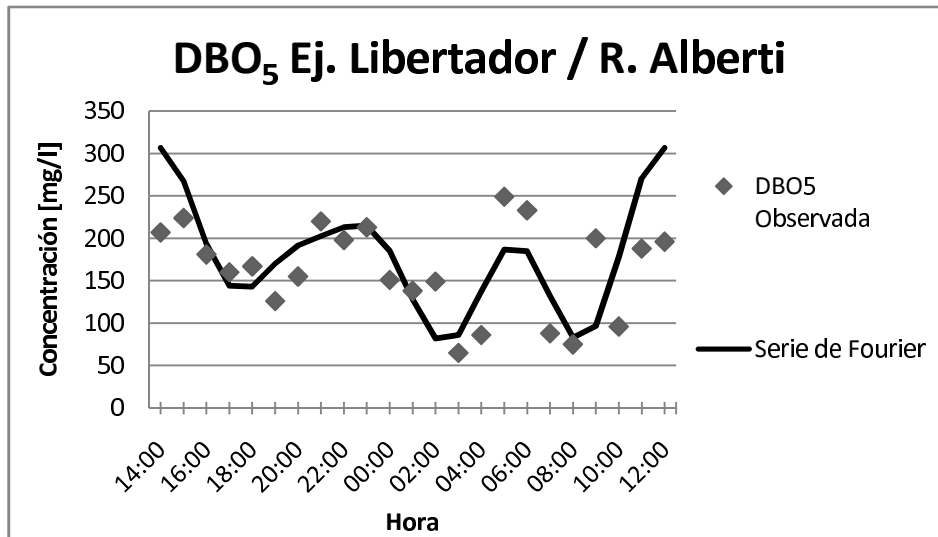


Gráfico 26: Curva de la Serie de Fourier correspondiente a la línea de tendencia presentada en el gráfico anterior

Datos DBO₅ punto 4 (Ejército Libertador - La Conquista)

Mediciones en terreno de DBO₅ en este punto:

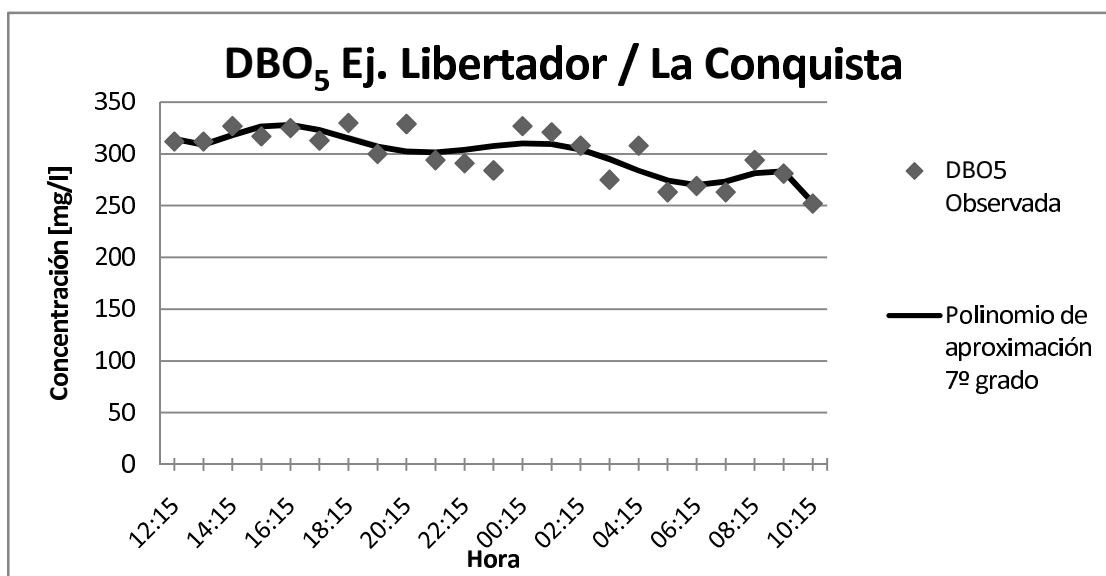


Gráfico 27: Perfil de DBO₅ en el punto de Ej. Libertador y La Conquista

El r^2 correspondiente a este ajuste es de 0.691, lo que ratifica que es una buena aproximación de las observaciones experimentales. La Serie de Fourier correspondiente a dicho polinomio se muestra en el siguiente gráfico junto a las observaciones de DBO₅:

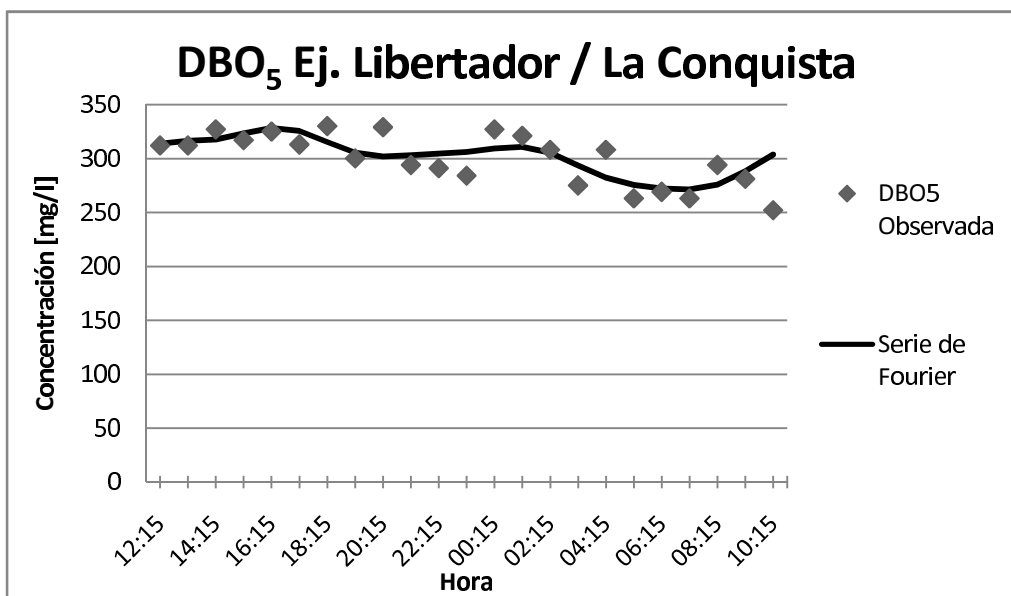


Gráfico 28: Curva de la Serie de Fourier correspondiente a la línea de tendencia presentada en el gráfico anterior

Este ajuste presenta un r^2 de 0.459, que si bien no es un gran valor para este estadístico, gráficamente se puede notar que representa una aproximación válida para ser ingresada al modelo.

Datos DBO₅ Punto 5 (T-11, punto de salida del sistema)

Mediciones en terreno de DBO₅ en este punto:

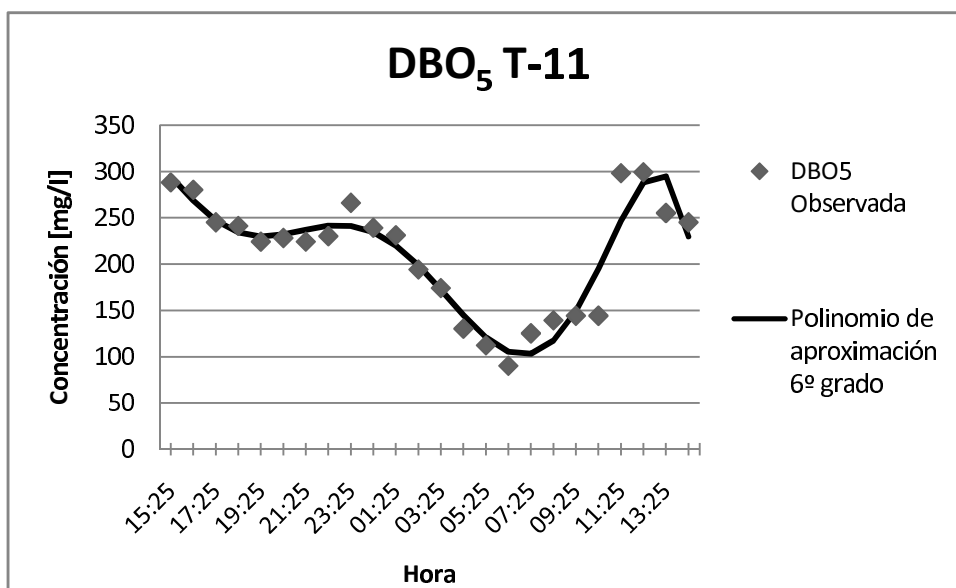


Gráfico 29: Perfil de DBO₅ en el punto T-11

Es apreciable el que existe un buen ajuste de esta curva a las observaciones, lo cual se ratifica con su r^2 calculado de 0.889

La Serie de Fourier correspondiente al polinomio presentado en el gráfico anterior es la siguiente:

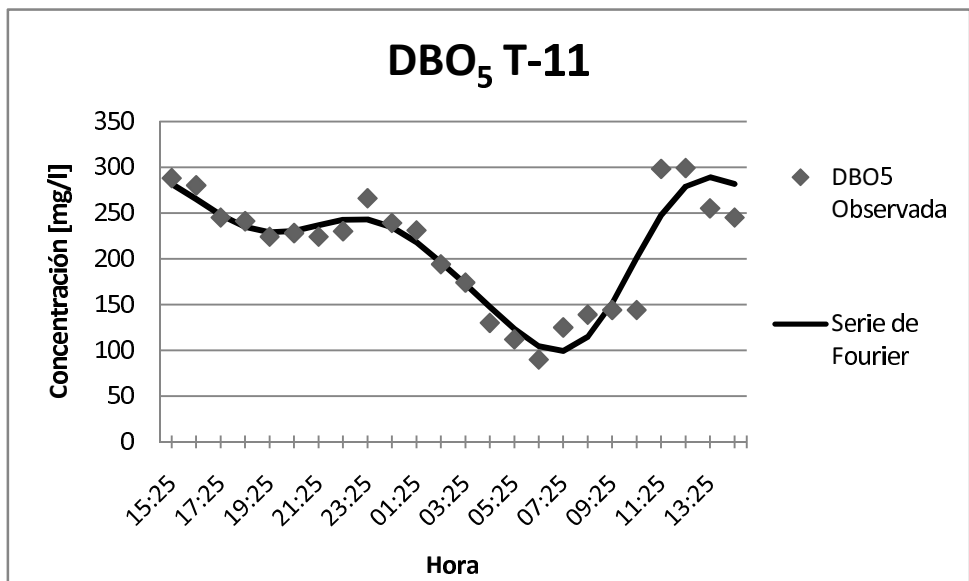


Gráfico 30: Curva de la Serie de Fourier correspondiente a la línea de tendencia presentada en el gráfico anterior

Se puede notar también que representa adecuadamente la tendencia de las observaciones de DBO_5 , y su r^2 calculado es de 0.868

3. Observaciones Sulfato

Datos sulfato punto 1 (Concha y Toro - Domingo Tocornal)

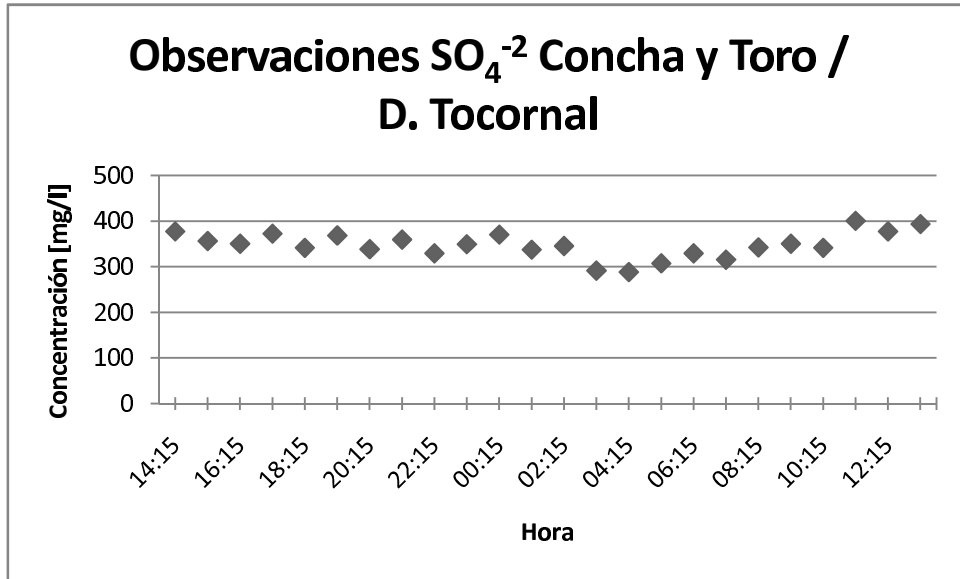


Gráfico 31: Observaciones de sulfato en punto Concha y Toro y Domingo Tocornal

Datos sulfato punto 2 (Ernesto Alvear - Eyzaguirre)

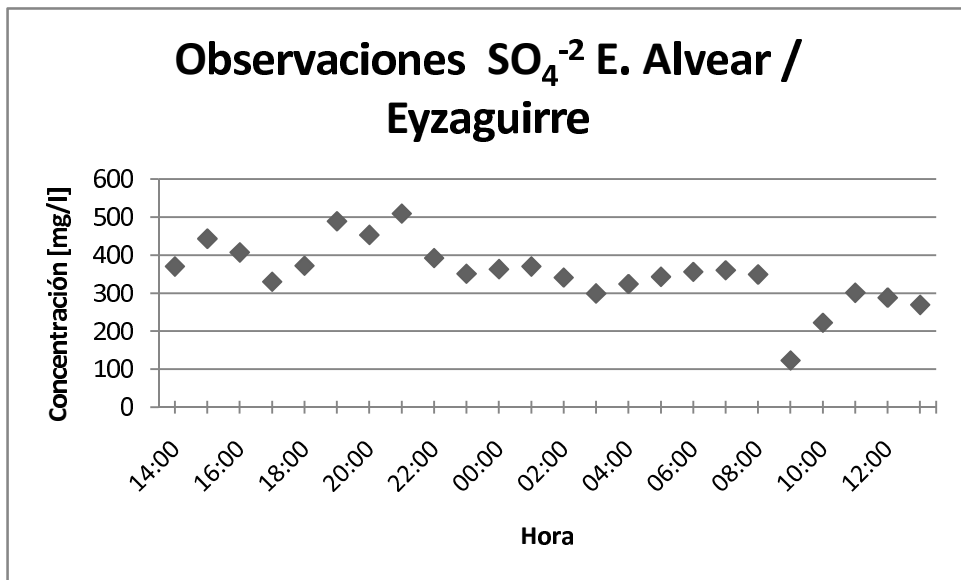


Gráfico 32: Observaciones de sulfato en punto Ernesto Alvear y Eyzaguirre

Datos sulfato punto 3 (Ejército Libertador - Rafael Alberti)

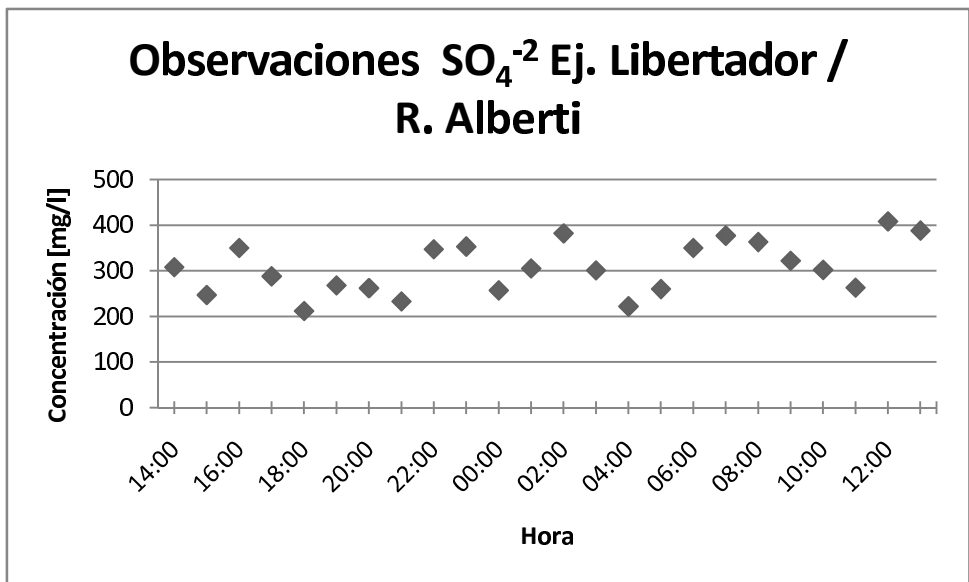


Gráfico 33: Observaciones de sulfato en punto Ejército Libertador y Rafael Alberti

Datos sulfato punto 4 (Ejército Libertador - La Conquista)

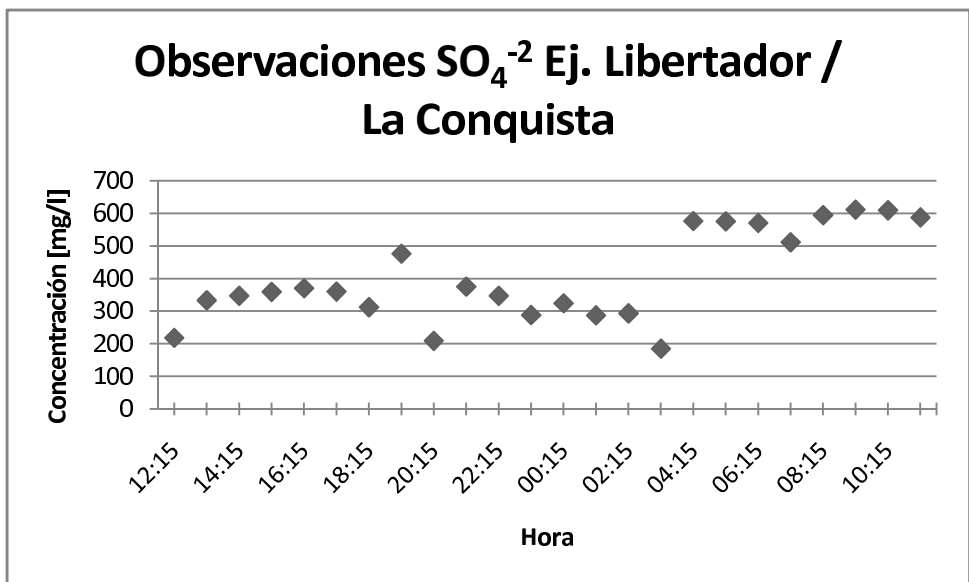


Gráfico 34: Observaciones de sulfato en punto Ejército Libertador y La Conquista

Datos sulfato punto 5 (T-11, salida del sistema)

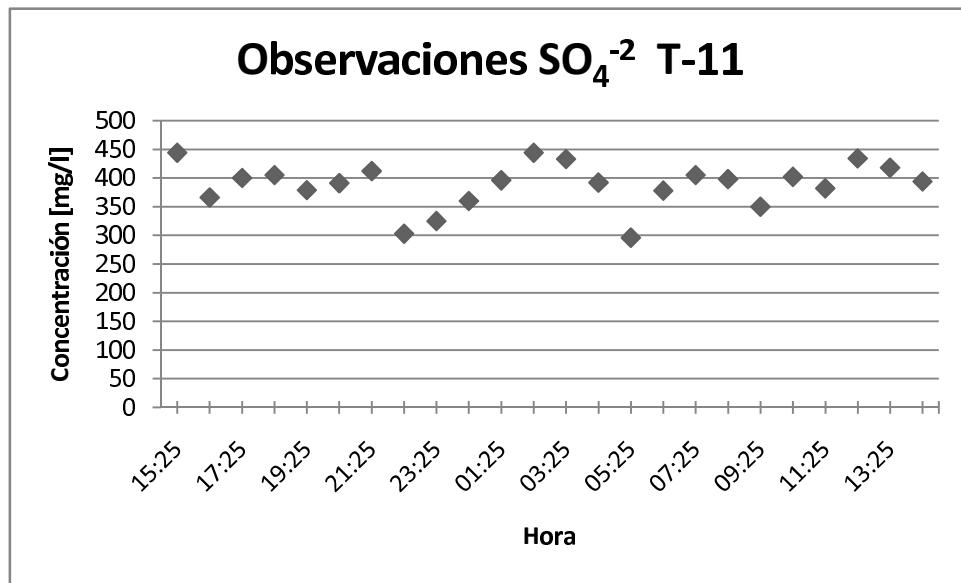


Gráfico 35: observaciones de sulfato en punto T-11

4. Programa de simulación

Las siguientes imágenes muestran el programa desarrollado en Simulink. La primera de ellas corresponde al sistema principal a partir del cual se distribuyen los subsistemas que realizan las diferentes tareas del programa

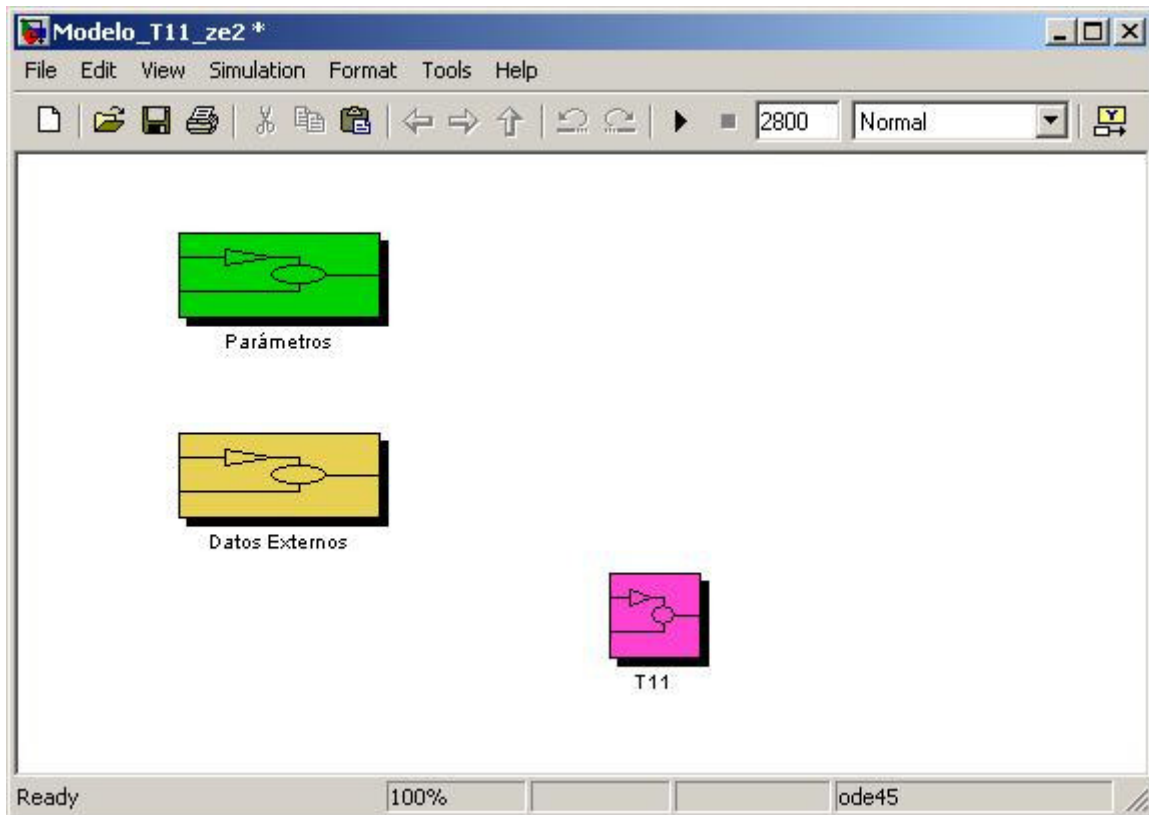


Figura 9: Sistema principal del programa de simulación

El bloque “Parámetros” contiene inputs del sistema (constantes, perfil de DBO_5 y perfil de temperaturas). Los delays incluidos son para ajustar el tiempo de simulación al inicio y fin de los perfiles de DBO mostrados en la parte anterior de los anexos.

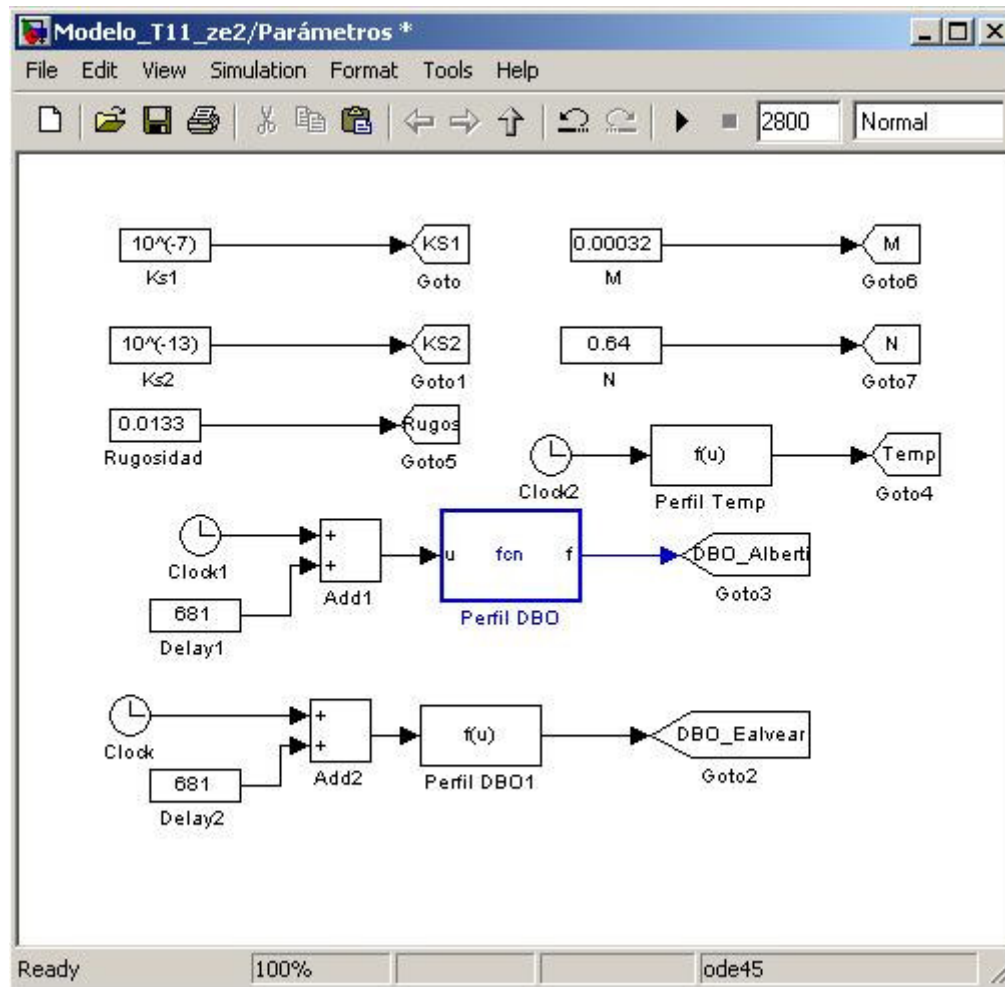


Figura 10: Subsistema "Parámetros"

El bloque "Perfil Temp" calcula el perfil de temperaturas según la ecuación (A.2). El código de MATLAB existente dentro del bloque "Perfil DBO" se muestra a continuación:

```
function f = fcn(u)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

f =
173.7661767+26.61436734*COS(0.004553032831*u)+29.93788866*SIN(0.004553032
831*u)+25.45460797*COS(0.0091060565665*u)-
15.9091579*SIN(0.0091060565665*u)+47.499994305*COS(0.0136590985*u)+23.459
71171*SIN(0.0136590985*u)+33.21289131*COS(0.01821213133*u)-
20.87340037*SIN(0.01821213133*u);
```

Y la ecuación contenida en el bloque "Perfil DBO1" es la siguiente:

$$497.445 + 211.9314171 \cdot \cos(0.004553032831 \cdot u) + 156.2852761 \cdot \sin(0.004553032831 \cdot u) - 132.4172679 \cdot \cos(0.0091060565665 \cdot u) - 204.6674163 \cdot \sin(0.0091060565665 \cdot u) - 174.5360864 \cdot \cos(0.0136590985 \cdot u) + 2.18588906 \cdot \sin(0.0136590985 \cdot u) - 237.2463392 \cdot \cos(0.01821213133 \cdot u) - 4.145955344 \cdot \sin(0.01821213133 \cdot u)$$

El subsistema “Datos Externos” es el siguiente:

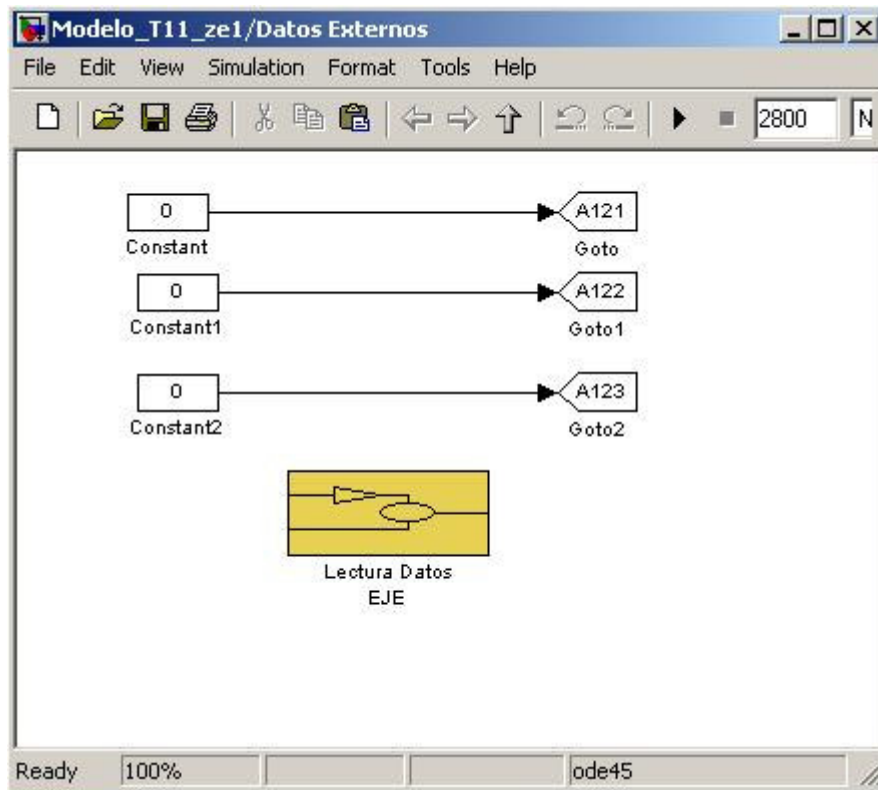


Figura 11: subsistema "Datos Externos"

El bloque “Lectura Datos EJE” es en el cual el programa lee la planilla de Excel que corresponde a la matriz de variación de niveles de agua para todos los colectores a lo largo del tiempo. Este bloque es igual para todos los colectores ya que en él están ingresadas las alturas de todos los ductos, y cada colector sólo lee la que le corresponde según la etiqueta (cada etiqueta es una columna de la matriz).

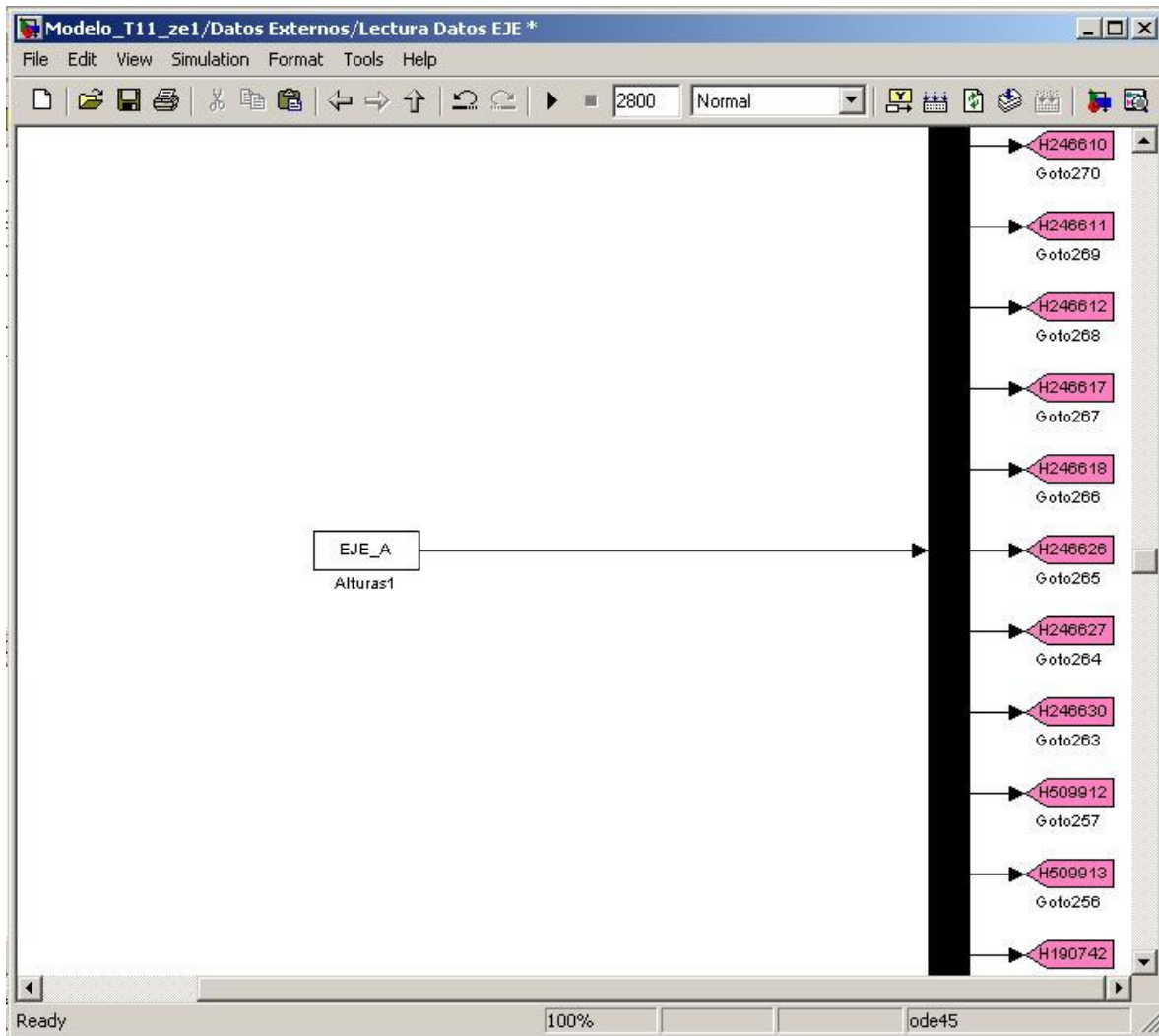


Figura 12: Bloque "Lectura Datos EJE"

El bloque "T-11" contiene el siguiente subsistema:

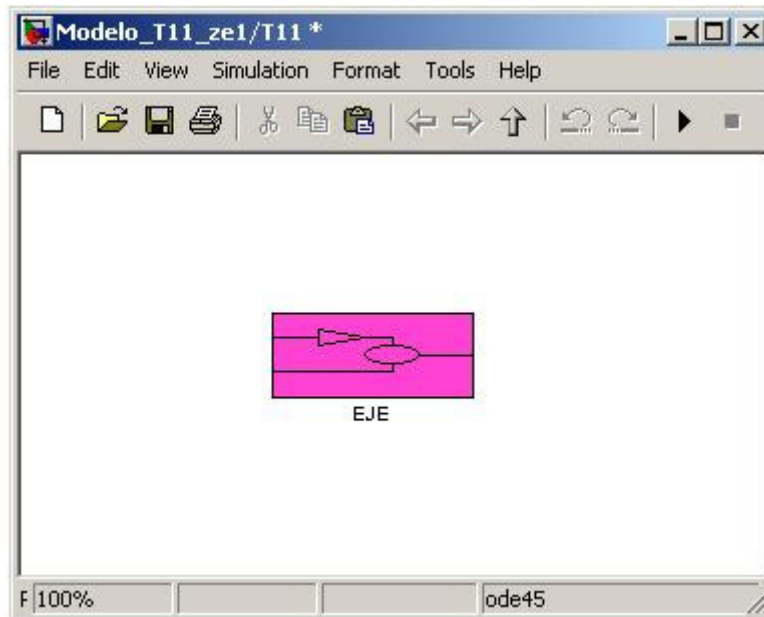


Figura 13: Subsistema "T-11"

El bloque "EJE" que ahí aparece, corresponde al subsistema mismo que representa una sub-cuenca de la zona T-11 que consta de varios colectores. Como por lo mismo es un subsistema extenso, sólo se muestran dos figuras que representan parte de lo que contiene cada subsistema "EJE":

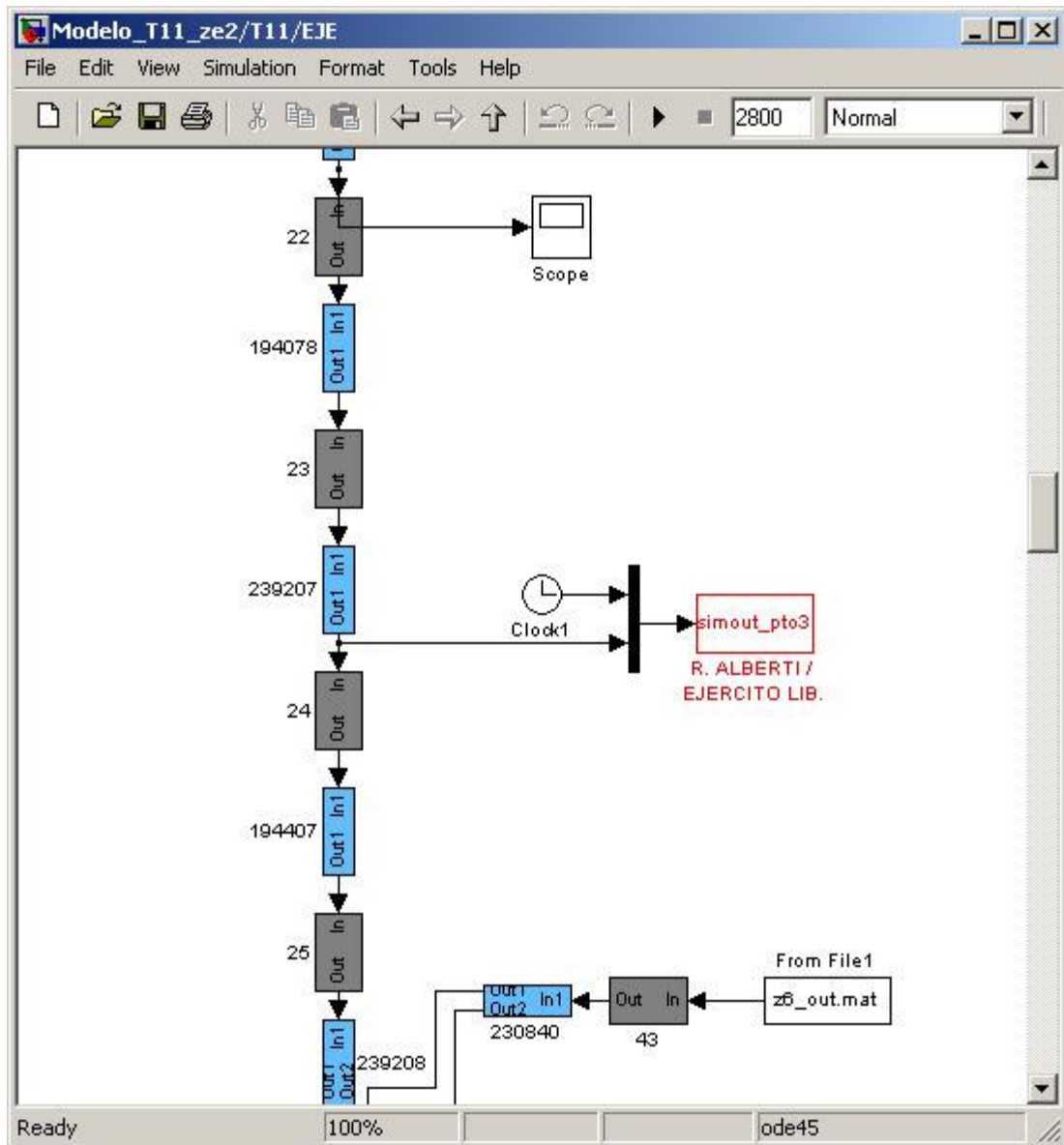


Figura 14: parte de subsistema "EJE"

Cada bloque de color azul es un colector, y cada bloque gris es una cámara. La denominación que aparece adjunta a cada colector corresponde a su ID dentro del sistema interno de Aguas Andinas. En este caso se puede notar el bloque que corresponde a la salida de datos de uno de los 5 puntos de muestreo (en particular el punto de Rafael Alberti y Ejército Libertador). También se puede notar que existe un bloque de entrada llamado "From File1", en el cual ingresan los datos desde otra subcuenca que por extensión se separó en otro archivo. La salida de una cuenca para luego ingresar a la que le precede, se puede ver en la siguiente imagen:

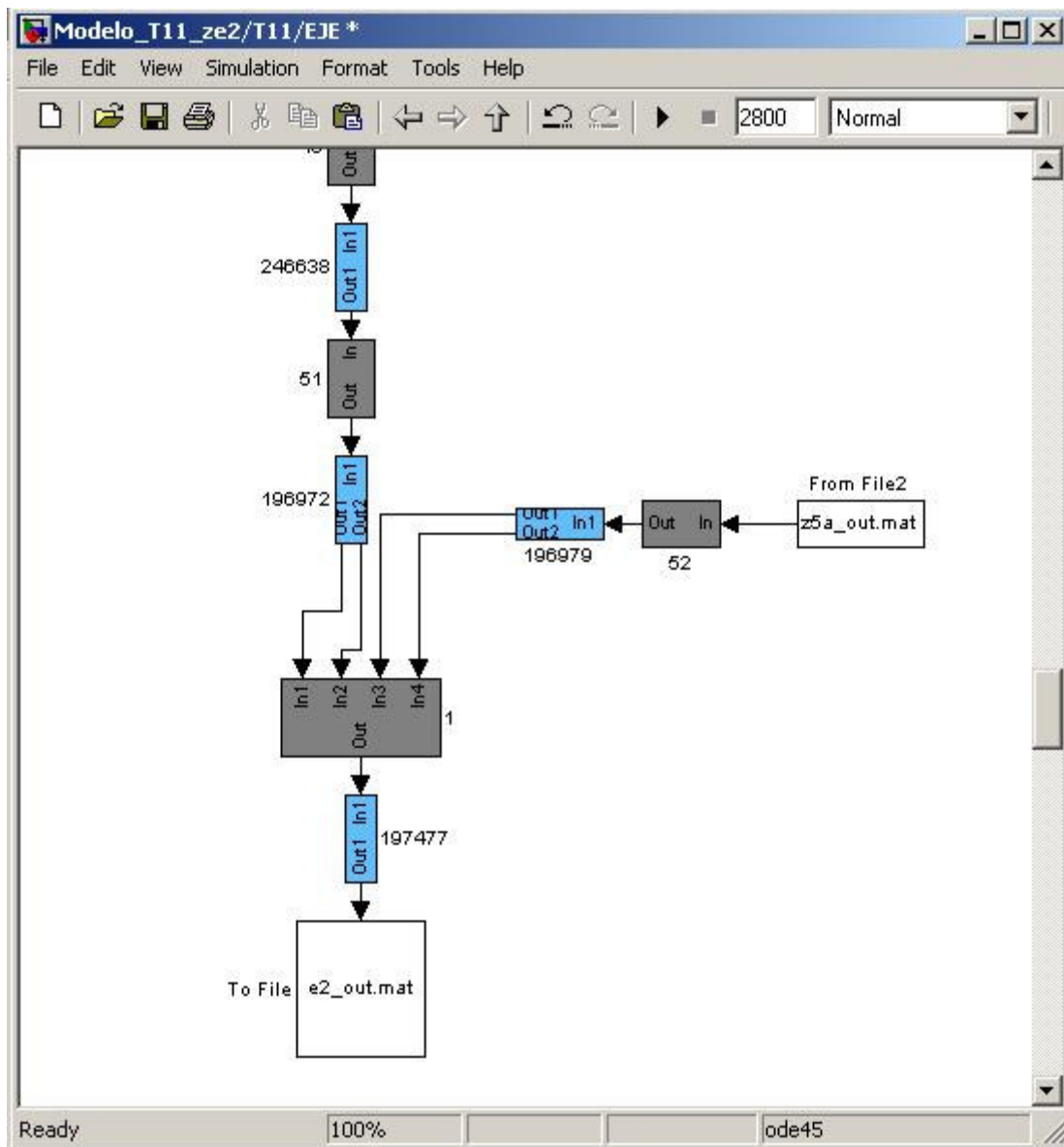


Figura 15: parte de subsistema "EJE"

El bloque "To File" permite exportar los datos de esta subcuenca y poder ser rescatados por la que continúa aguas abajo. Dentro de cada cámara existe el siguiente subsistema:

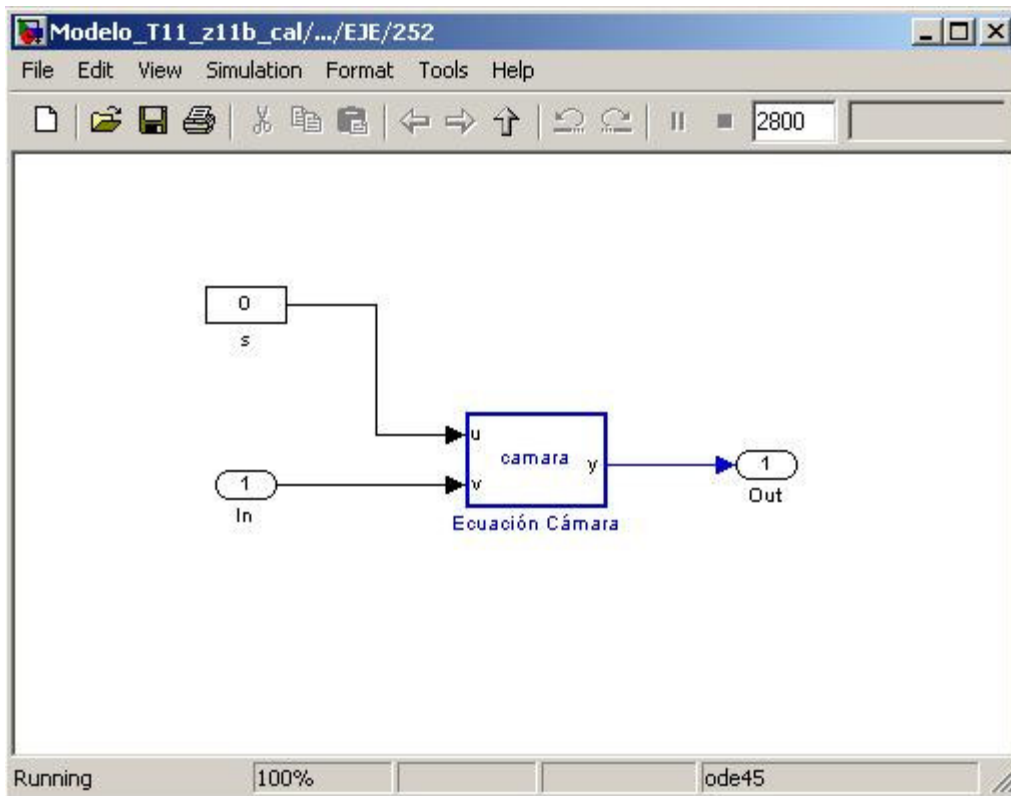


Figura 16: subsistema correspondiente a una cámara

A cada cámara ingresan los datos del colector previo (sulfuro disuelto, ácido sulfhídrico y gas sulfhídrico) y salen los mismos datos para el colector siguiente. El bloque con la constante “s” que se aprecia permite ingresar alguna perturbación puntual en alguna cámara (como por ejemplo un shock de sulfuro). El bloque “Ecuación Cámara” permite sumar los flujos mediante el siguiente código de MATLAB:

```
function y = camara(u,v)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

y = zeros(3,1);

for i = 1:3
    y(i) = u + v(i); //suma de cada término por separado
end
```

En el caso que dos colectores empalmen en una cámara, ésta tiene un bloque diferente:

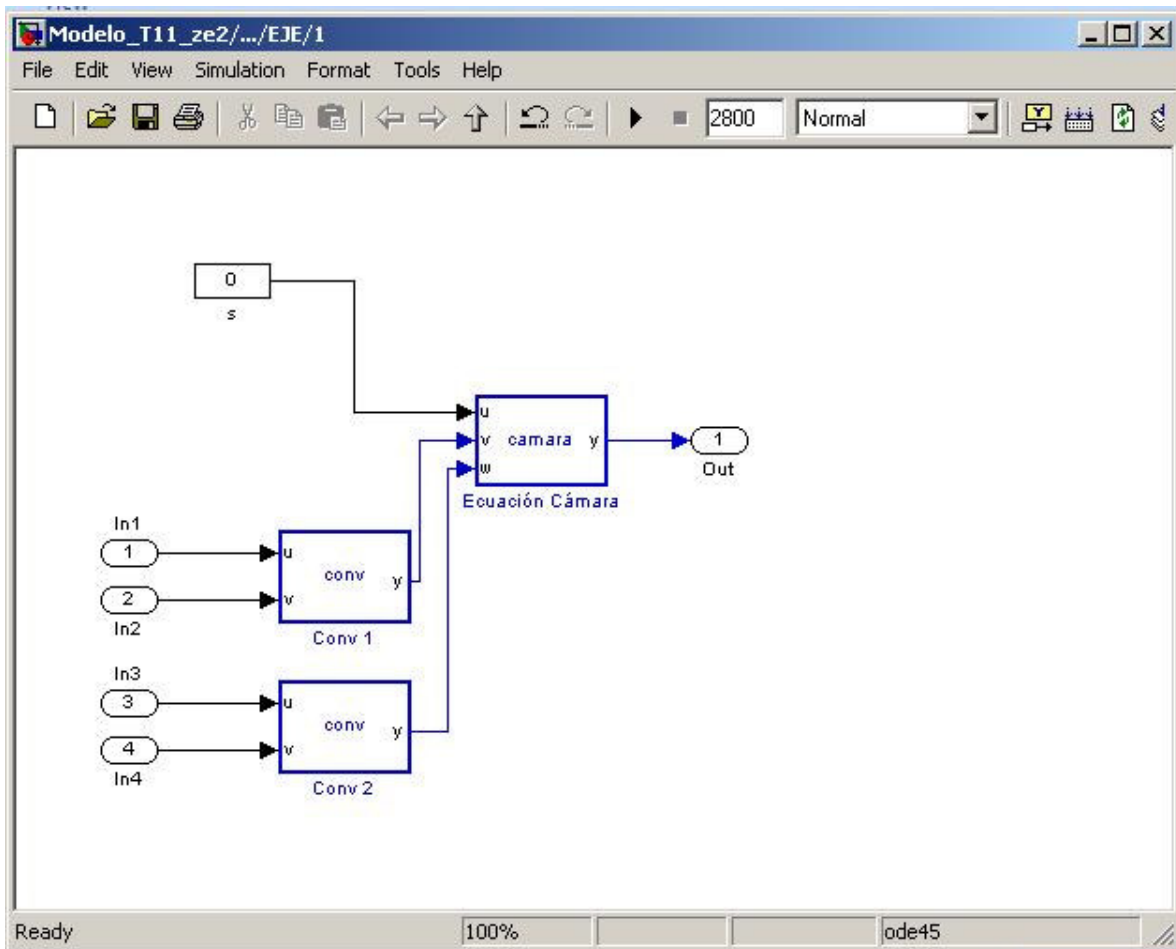


Figura 17: subsistema correspondiente a una cámara que recibe más de un flujo

En este caso es necesario convertir primero las entradas de concentración a masa para poder sumar los flujos. Cada bloque de conversión posee el siguiente código de MATLAB:

```
function y = conv(u,v)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

y = zeros(3,1);

%u(1): ST [ppm]
%u(2): H2Saq [ppm]
%u(3): H2Sg [ppm]
%v(1): vol agua [m3]
%v(2): vol aire [m3]

y(1) = u(1)*v(1)*1000;
y(2) = u(2)*v(1)*1000;
y(3) = u(3)*v(2)*1000;
```

Y el bloque “Ecuación Cámara” posee el siguiente código de MATLAB:

```
function y = camara(u,v,w)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

%u,v entran y salen como masa de este bloque

y = zeros(3,1);

for i = 1:3
    y(i) = u + v(i)+w(i);
end
```

A su vez, cada colector consiste en el siguiente subsistema:

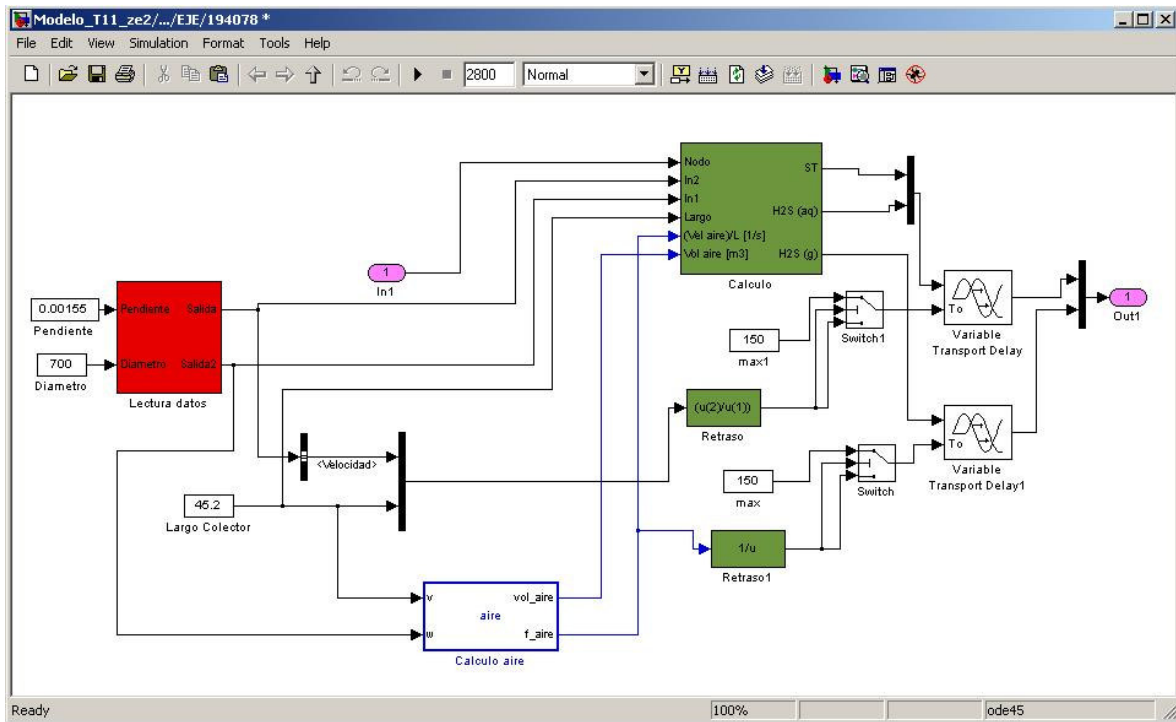


Figura 18: subsistema correspondiente a un colector

El bloque “Cálculo Aire” retorna el volumen de aire para cada colector y para cada instante, con el siguiente código de MATLAB:

```
function [vol_aire,f_aire] = aire(v,w)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

% v(1): largo colector [m]
% w(1): velocidad agua [m/s]
```



```

% w(2): ancho [m]
% w(3): ángulo
% w(4): diámetro [mm]
% w(5): altura [m]

u_aire = 0;

u_aire = 1.028*w(1)*(2*w(2))/((2*w(2))+(2*pi*w(4)/2000-
(w(4)/2000)*w(3))); %velocidad aire [m/s]
f_aire = u_aire/v(1); %U/L, [1/s]
vol_aire = v(1)*(pi*(w(4)/2000)^2 -
((w(4)/2000)^2)*asin(2*w(2)/(w(4)/1000)) - w(2)*(w(4)/2000-w(5))) ;
%volumen seco [m3]

```

El bloque "Lectura Datos" ingresa diferentes parámetros y calcula los términos hidráulicos necesarios:

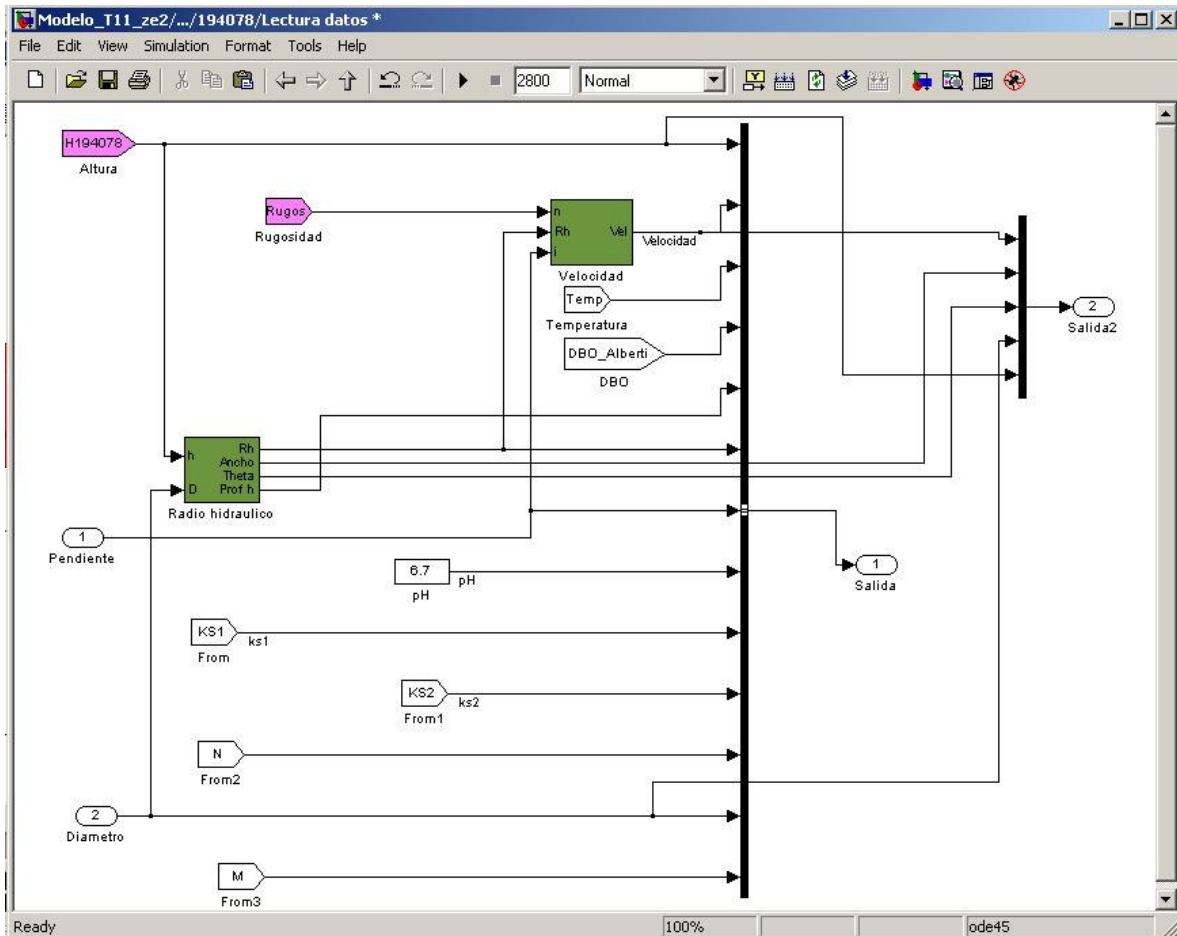


Figura 19: subsistema "Lectura Datos"

Se aprecia que ingresan como datos la altura, rugosidad, pendiente, pH , M , N , K_{S1} , K_{S2} , diámetro, temperatura, DBO_5 , y se calculan el radio hidráulico, la velocidad del agua, la profundidad hidráulica, el ancho de interfase y el ángulo de apertura entre los radios que unen el centro del colector y los extremos de la interfase (ver figura 6). El bloque “Radio Hidráulico” corresponde al siguiente subsistema:

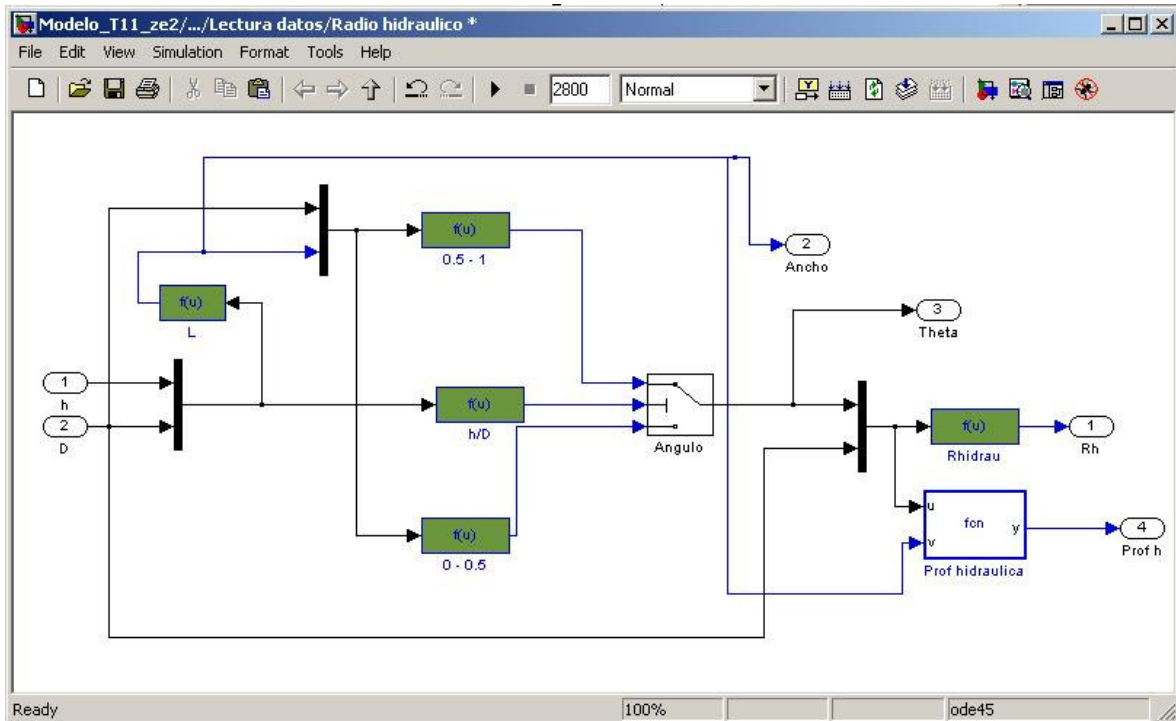


Figura 20: subsistema "Radio Hidráulico"

Las entradas que se observan corresponden al nivel de agua h y al diámetro de colector D . El ancho es calculado por el bloque L según la ecuación (3.16). Los 2 bloques “ $f(u)$ ” de los extremos (superior e inferior) calculan el ángulo según si el nivel de aguas es mayor o menor a la mitad del colector (respectivamente), el bloque “ $f(u)$ ” central dispone del criterio para el bloque de switch “Angulo”. El bloque “Rhidrau” calcula el radio hidráulico según la ecuación (3.15) y el bloque “Prof hidráulica” calcula la profundidad hidráulica utilizando el siguiente código MATLAB que describe la ecuación (3.19):

```
function y = fcn(u,v)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

y = (((u(2)/2000)^2)/2) * (u(1) - sin(u(1))) / v;
```

Por otra parte, el bloque “Velocidad” incluido en “Lectura Datos” corresponde al siguiente subsistema:

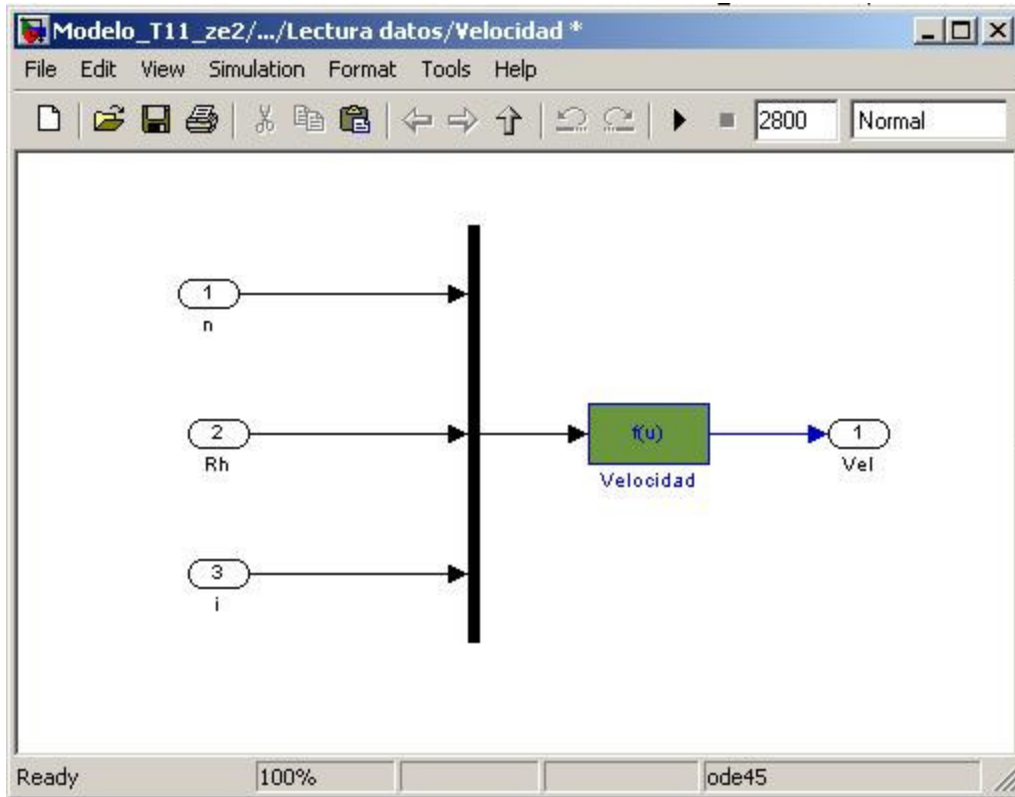


Figura 21: subsistema "Velocidad"

El bloque "Velocidad" simplemente calcula la velocidad promedio del agua en todo instante utilizando la ecuación de Manning para ductos no llenos (3.13).

Dentro de cada colector, está el bloque "Cálculo" que es en el cual se hacen los cálculos correspondientes a la generación de sulfuro y de gas, que se exhibe en dos partes de modo de favorecer la lectura:

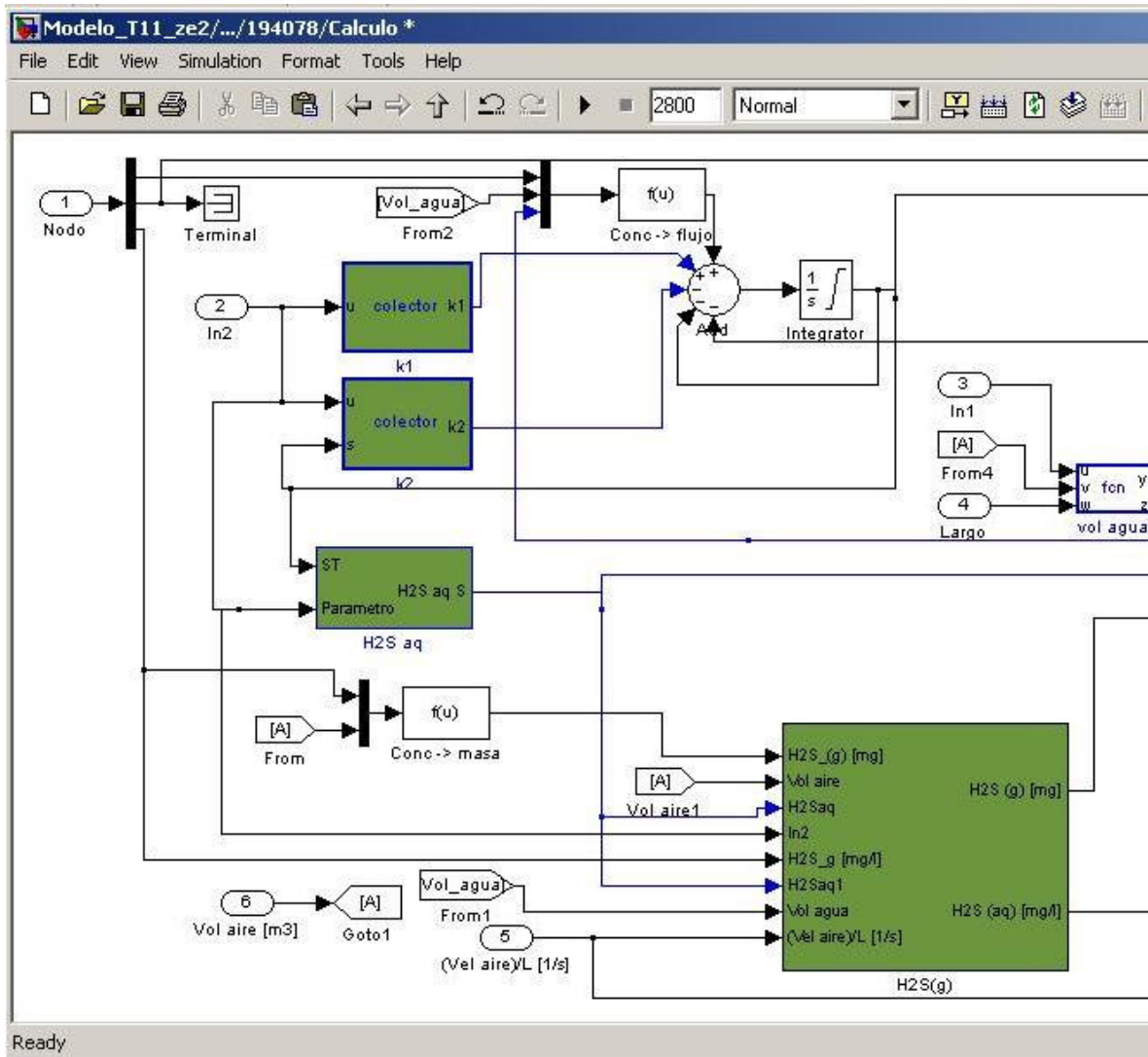


Figura 22: subsistema "Cálculo", parte izquierda

El bloque "k1" contiene el siguiente código MATLAB:

```
function k1 = colector(u)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

% El vector de entrada cuenta con los siguientes parametros
% u(1): Altura
% u(2): Velocidad
% u(3): Temperatura
% u(4): DBO5
% u(5): Profundidad Hidraulica
% u(6): Radio Hidraulico
% u(7): Pendiente
% u(8): pH
% u(9): Ks1
```

```

% u(10): Ks2
% u(11): N
% u(12): Diametro
% u(13): M

% El vector de salida cuenta con los siguientes parámetros
% y(1): Sulfuro total
% y(2): Acido Sulfhídrico acuoso
% y(3): Acido Sulfhídrico gas

% Calculo de Sulfuro Total

k1 = 0;
k1 = (u(13)*u(4)*((1.07)^(u(3)-20))/u(6));

```

El bloque “k2” tiene el siguiente código MATLAB:

```

function k2 = colector(u,s)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

% El vector de entrada cuenta con los siguientes parametros
% u(1): Altura
% u(2): Velocidad
% u(3): Temperatura
% u(4): DBO5
% u(5): Profundidad Hidraulica
% u(6): Radio Hidraulico
% u(7): Pendiente
% u(8): pH
% u(9): Ks1
% u(10): Ks2
% u(11): N
% u(12): Diametro

% El vector de salida cuenta con los siguientes parametros
% y(1): Sulfuro total
% y(2): Acido Sulfhidrico acuoso
% y(3): Acido Sulfhidrico gas

k2 = 0;
k2 = ((u(11)*s(1)*(u(7)/10*u(2))^(3/8))/u(5));

```

El bloque “H2S aq” contiene el siguiente subsistema:

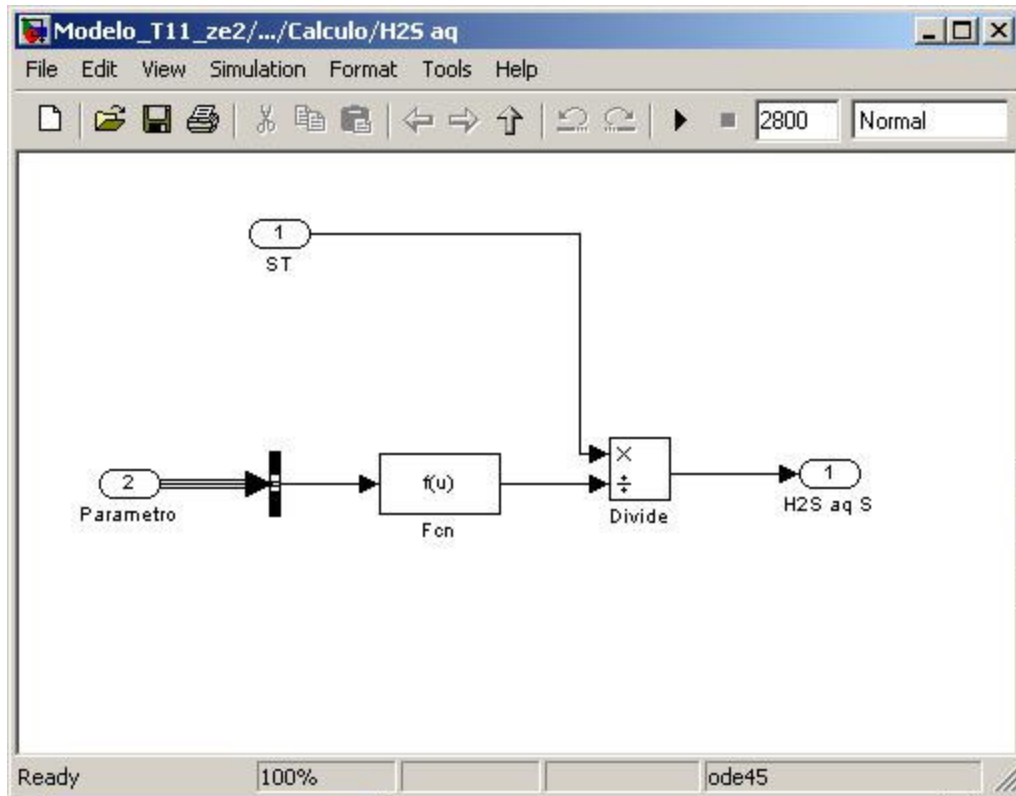


Figura 23: subsistema "H2S aq"

El bloque "Fcn" calcula la fracción de sulfuro total que corresponde a $H_2S_{(aq)}$, de acuerdo a la ecuación (3.3)

Por otro lado, el bloque "H2S(g)" calcula la generación de gas, y se muestra a continuación, también separada en dos partes para facilitar la lectura:

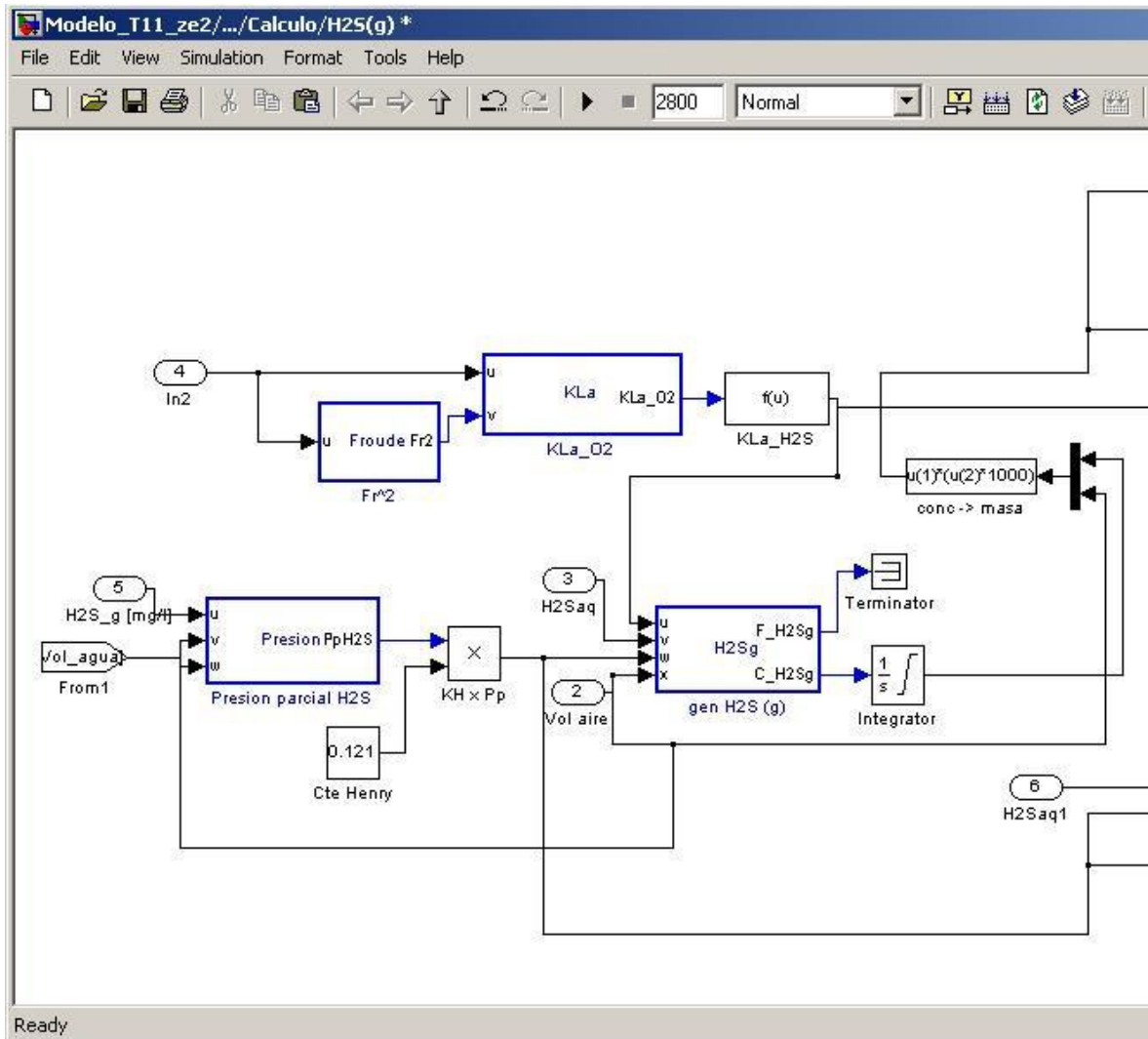


Figura 24: subsistema "H2S(g)", parte izquierda

El bloque "Fr^2" calcula el número de Froude según el siguiente código de MATLAB:

```
function Fr2 = Froude(u)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

%u(2): Velocidad [m/s]
%u(5): Profundidad hidráulica [m]
Fr2 = u(2)^2/(9.81*u(5)); %Numero de Froude^2
```

El bloque “KLa_O2” calcula el $K_L a$ para el oxígeno disuelto según el siguiente código de MATLAB que corresponde a la ecuación (3.6):

```
function KLa_O2 = KLa(u,v)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

%v: Fr^2
%u(2): velocidad [m/s]
%u(3): temperatura [°C]
%u(5): radio hidráulico [m]
%u(7): pendiente

KLa_O2 = 0.86*(1+0.2*v)*((u(7)/10)*u(2)^(3/8))*(1.024^(u(3)-20))/u(5);
```

El bloque “KLa_H2S” calcula el $K_L a$ para el sulfuro de hidrógeno dado por la ecuación (3.5). El bloque “Presión parcial H2S” calcula la variación de la presión parcial del H₂S gaseoso según lo mostrado en las ecuaciones (3.9) – (3.12). Su código de MATLAB es el siguiente:

```
function PpH2S = Presion(u,v,w)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

% Ptotal = 1 atm
% PM H2S = 34 g/mol
% n_O2, n_N2 ctes = V0(0.0353+0.00938), V0 = 14200 lt (vol sin H2S)
% v: volumen de aire [m3]
% w: volumen de agua [m3]

vol_aire = v*1000; %volumen en litros
vol_agua = w*1000; %volumen en litros
Vt = vol_aire + vol_agua; %volumen total del colector en litros
PpH2S = (1*u*vol_aire/34000)/(0.0353*Vt + 0.00938*Vt + u*vol_aire/34000);
```

El bloque “gen H2S (g)” calcula la transferencia de H₂S desde la fase líquida a la fase gaseosa mediante el siguiente código de MATLAB:

```
function [F_H2Sg,C_H2Sg] = H2Sg(u,v,w,x)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

% C_H2Sg : Concentracion de H2S [ppm]
% M_H2Sg : Masa de H2S [mg]
% u: KLa_H2S [1/s]
% v: H2S(aq) [mg/lt]
% w: Pp_H2S*KH
% x: volumen seco [m3]
% Para usar ec de transferencia de masa, pasar de mg a mol
% KH: [mol/lt-atm]
% Pp_H2S: [atm]
% PM(H2S) = 34 g/mol = 34000 mg/mol
```



```

C_H2Sg = u*(v-w*34000); %flujo de H2S (g), [mg/lt-s]
F_H2Sg = C_H2Sg*(x*1000); %flujo masico de H2S(g) [mg/s]

```

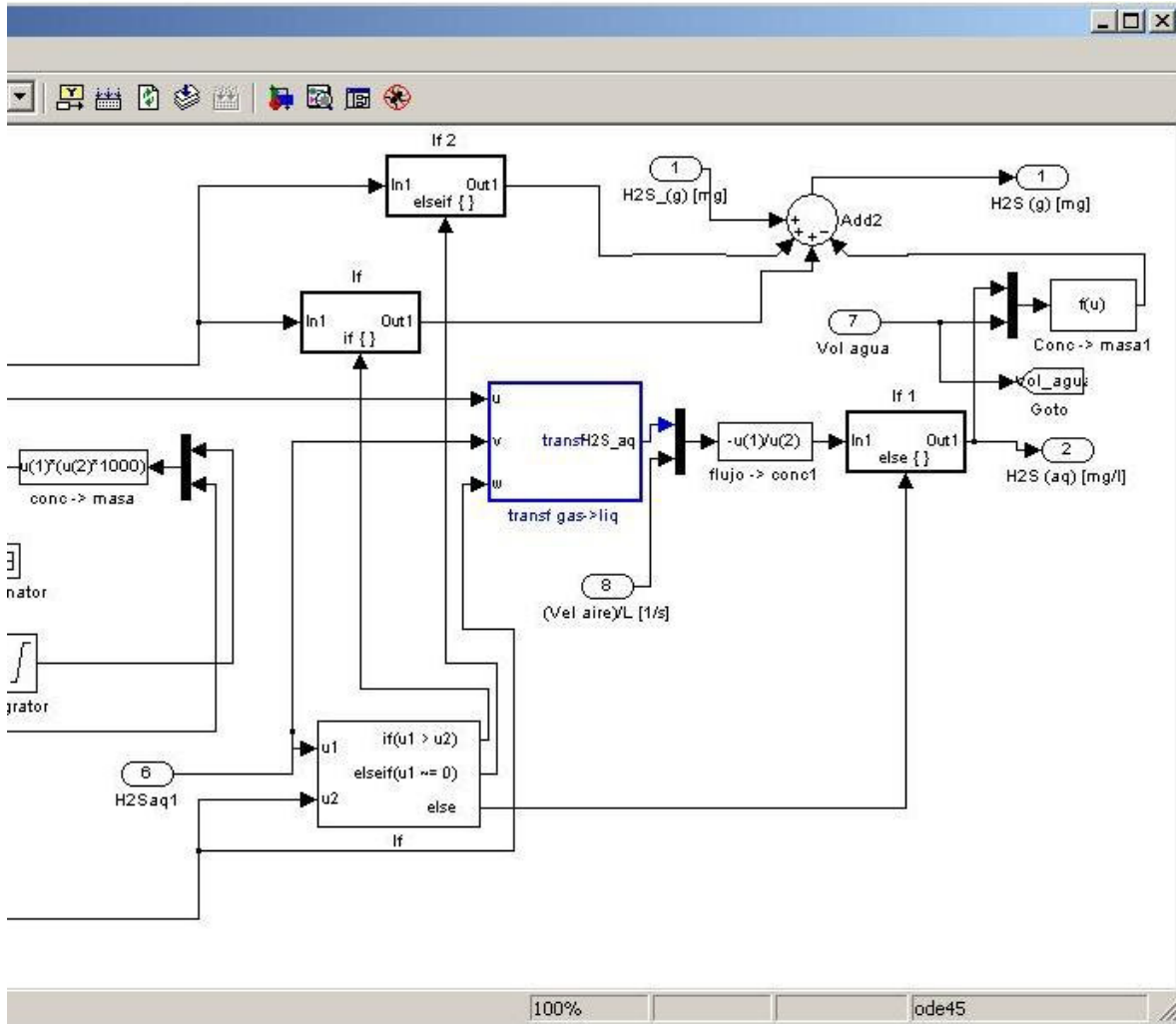


Figura 25: subsistema "H2S(g)", parte derecha

El bloque “transf gas → liq” calcula la transferencia de fase gaseosa a líquida si es que se da el caso (descrito en el bloque “If”) de que $K_H \cdot P_{H_2S}$ sea menor a la concentración de H₂S en fase líquida.

Siguiendo con el subsistema “Cálculo”, ahora se muestra la parte derecha

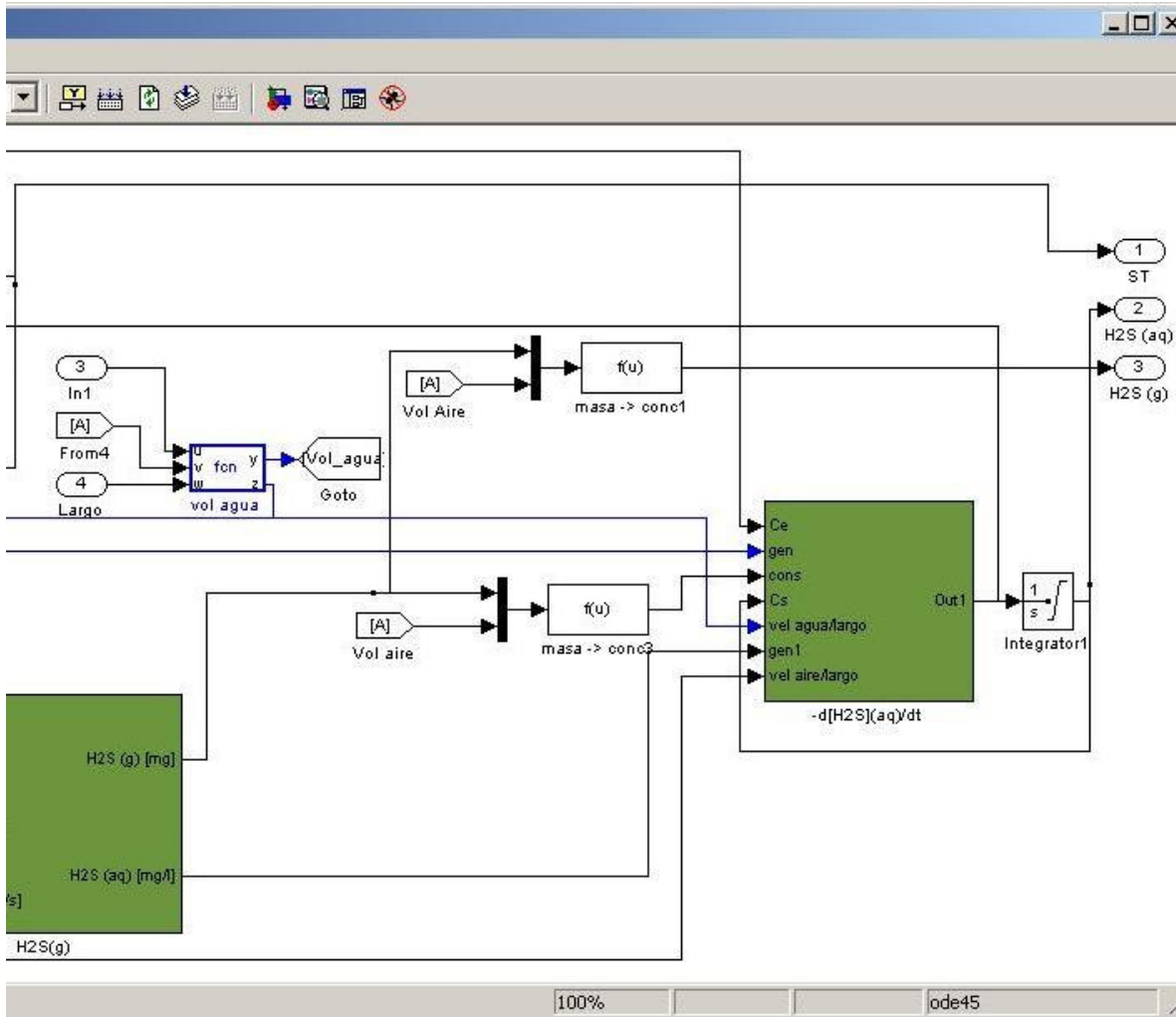


Figura 26: subsistema "Cálculo", parte derecha

El bloque "vol agua" determina el volumen de agua en cada instante de acuerdo a la ecuación (3.21) y contiene el siguiente código MATLAB:

```
function [y,z] = fcn(u,v,w)
% This block supports the Embedded MATLAB subset.
% See the help menu for details.

% u(1): velocidad agua [m/s]
% u(2): ancho [m]
% u(3): angulo
% u(4): diametro [mm]
% u(5): altura [m]
% v: volumen de aire [m3]
% w: largo [m]
```

```

y = (w*pi*(u(4)/2000)^2 - v); %volumen de agua [m3]
z = u(1)/w;

```

Y el bloque “-d[H2S](aq)/dt” calcula el balance de masa para el H₂S acuoso:

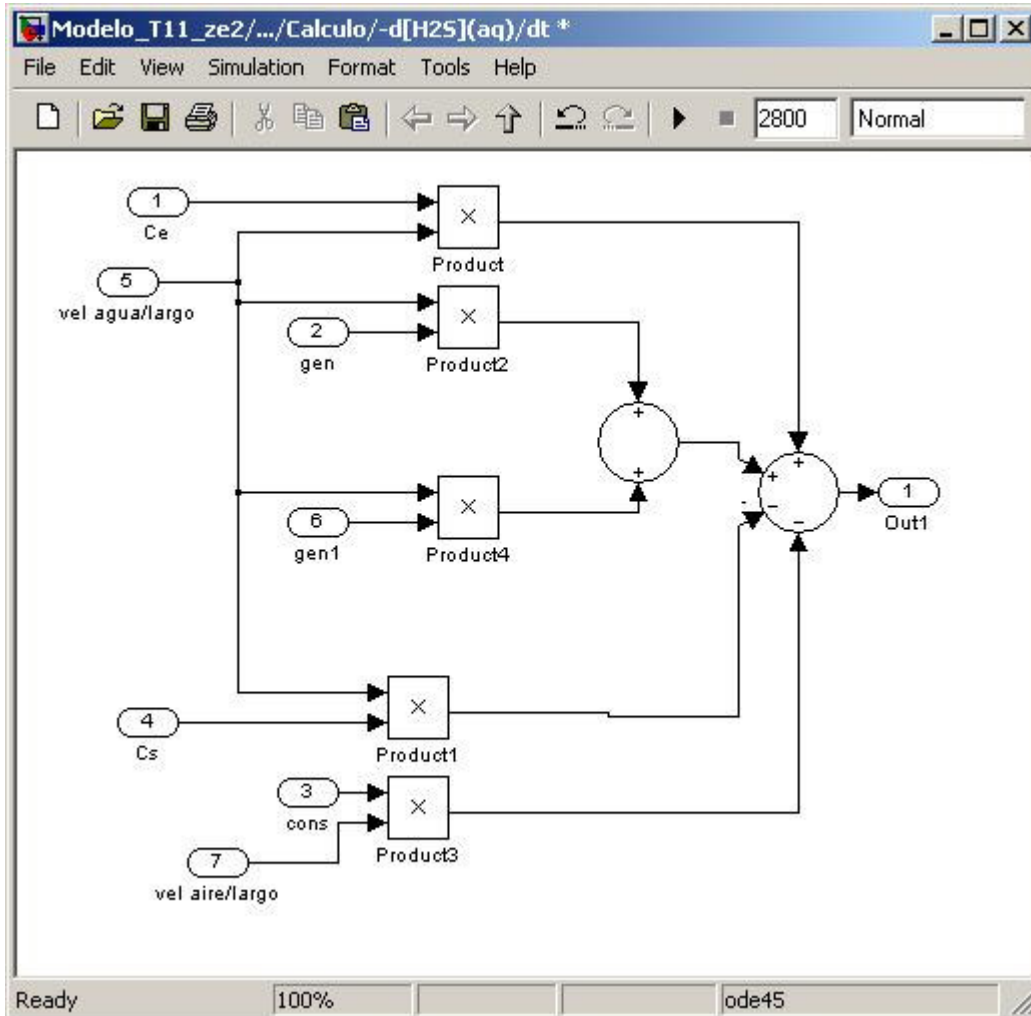


Figura 27: subsistema “-d[H2S]/dt”

5. Código programa de calibración

El programa de calibración es igual para todos los puntos, solo cambian el nombre de las variables asociadas a los vectores que contengan los datos de cada subcuenca. Así, a continuación se muestra a modo de ejemplo el código correspondiente a la calibración del punto 2 (E. Alvear – Eyzaguirre)

Programa de calibración:

```

clc
clear all

global base Ks1 Ks2 M N params

base = xlsread ('base_sulfuro_ealvear.xlsx'); %Observaciones
EJE_A = xlsread('altura_T11.xlsx'); %Matriz de nivel de aguas

Ks1 = 10^(-7);
Ks2 = 10^(-13);
M = 32*(10^(-5));
N = 0.64;

f = fminsearch (@ajuste_param_EAlvear, [M N]);

```

Función de cálculo de mínimos cuadrados:

```

function ditto = ajuste_param_EAlvear(P)
global base Ks1 Ks2 M N params

M = P(1);
N = P(2);

params = [0 P(1) P(2)]; % Ingreso de parámetros ajustados al modelo

sim ('Modelo_T11_z6_cal.mdl');

x = simout_pto2_cal.signals.values(:,2); % Lectura del vector de
predicciones de sulfuro

%Lectura de datos en los mismos tiempos de las observaciones:
cal_pto2 = [x(603); x(628); x(654);x(680);x(706); x(733);x(761);
x(790);x(819);x(848);x(877);x(903);x(928);x(953);x(978)];

if (M < 0 || N < 0 ) %Restricción para los parámetros (todos deben ser
positivos)

    ditto = 10^8
else
    ditto = (base(:,1) - cal_pto2(:,1))'*(base(:,1) - cal_pto2(:,1))
end

fprintf ('Valor de M %1.15f \n',M)
fprintf ('Valor de N %1.15f \n',N)

```

6. Nomenclatura

Símbolo	Nombre	Unidad
A	Área transversal total de un colector	m ²
A _m	Área transversal mojada de un colector	m ²
A _s	Área de la interfase agua-aire dentro de un colector	m ²
P _m	Perímetro mojado de un colector	m
P _S	Perímetro de la atmósfera superior de un colector	m
r _h	Radio hidráulico	m
d _m	Profundidad hidráulica	m
h	Nivel de agua dentro de un colector	m
w	Ancho de la interfase entre el agua y el espacio seco dentro de un colector	m
θ	Ángulo de abertura entre los radios que van desde el centro de un ducto hasta los bordes de la interfase agua-aire dentro de un ducto	rad
m	Pendiente de un colector	m/km
L	Largo de un colector	m
D	Diámetro de un colector	mm
K _H	Constante de Henry	mol/(atm·l)
P _T	Presión total dentro del espacio seco de un colector	atm
P _{H₂S}	Presión parcial de H ₂ S _(g) en el espacio seco de un colector	atm
V	Volumen de agua	m ³
u	Velocidad de agua	m/s
T	Temperatura del agua	°C
[S _T]	Concentración de sulfuro total disuelto	mg/l
[H ₂ S _(aq)]	Concentración de ácido sulfhídrico en fase acuosa	mg/l

$[H_2S_{(g)}]$	Concentración de sulfuro de hidrógeno en fase gaseosa	mg/l
$[SO_4^{-2}]$	Concentración de sulfato en las aguas servidas	mg/l
$[DBO_5]$	Demanda bioquímica de oxígeno	mg/l
g	Aceleración de gravedad	m/s ²
K_{S1}	Constante termodinámica de equilibrio entre las especies $H_2S_{(ac)}$ y HS^-	-
K_{S2}	Constante termodinámica de equilibrio entre las especies HS^- y S^{2-}	-
pK_1	Primera constante de disociación ácida para el $H_2S_{(ac)}$	-
pK_2	Segunda constante de disociación ácida para el $H_2S_{(ac)}$	-
Fr	Número de Froude	-
$K_L a$	Coefficiente global de transferencia de masa	1/h
t	Tiempo	s
n	Rugosidad del ducto	-
n_{H_2S}	Moles de H_2S	Mol
PM_{H_2S}	Peso molecular del H_2S	g/mol
x_{H_2S}	Fracción molar de H_2S dentro del espacio seco de un colector	-
n_{O_2}	Moles de O_2	Mol
PM_{O_2}	Peso molecular del O_2	g/mol
x_{O_2}	Fracción molar de O_2 dentro del espacio seco de un colector	-
n_{N_2}	Moles de N_2	Mol
PM_{N_2}	Peso molecular del N_2	g/mol
x_{N_2}	Fracción molar de N_2 dentro del espacio seco de un colector	-

Tabla 8: Nomenclatura utilizada durante esta memoria