



# MODELIZACIÓN DE LOS PROCESOS DE NITRIFICACIÓN EN REDES DE DISTRIBUCIÓN DE AGUA

Ignacio Gómez Lucena<sup>1</sup>, Emilio Camacho Poyato<sup>1</sup>, Juan Antonio Rodríguez  
Díaz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Agronomía, Universidad de Córdoba

[g72golui@uco.es](mailto:g72golui@uco.es), [ecamacho@uco.es](mailto:ecamacho@uco.es), [jarodriguez@uco.es](mailto:jarodriguez@uco.es)

## RESUMEN

El presente trabajo consiste en el desarrollo de un modelo para simular las reacciones de nitrificación en redes de riego que emplean aguas regeneradas. La importancia de simular este proceso químico se debe a que la composición química del agua regenerada varía a lo largo del año, pero también varía a nivel espacial dentro de la red de distribución. Se ha observado que los puntos más distantes de la estación de bombeo reciben agua con una mayor concentración de nitratos, lo que evidencia una clara nitrificación a lo largo de la red. Conocer con exactitud la calidad del agua que llega a las parcelas de los regantes resulta necesario para realizar una fertirrigación de precisión y optimizar la cantidad de abono aportado, en caso de que sea necesario realizar este aporte. En muchos casos, los nutrientes que incorpora el agua regenerada son suficientes para satisfacer las necesidades nutritivas de los cultivos, lo que permite reducir la cantidad de fertilizante aportado al suelo. Esto repercute de manera positiva para el medioambiente y para el agricultor, que experimenta una reducción notable de los costes.

### Palabras clave

Aguas regeneradas, nitrógeno, modelización.

## 1. INTRODUCCIÓN

Las aguas regeneradas son aguas residuales procedentes de núcleos urbanos o actividades industriales que han sido tratadas en una estación depuradora. Este tratamiento permite que vuelvan a ser utilizadas con diversos fines, como el riego de cultivos y áreas verdes, fines industriales, la limpieza de calles o la extinción de incendios, entre otros.

Las aguas regeneradas, por su naturaleza, son muy ricas en nutrientes, entre los que destaca el nitrógeno. Por este motivo, presentan una gran aptitud para ser empleadas en el riego agrícola. Las formas nitrogenadas que más abundan en las aguas regeneradas son el amoníaco, el ion amonio y el ion nitrato. También está presente, en menor medida, el ion nitrito. La nitrificación es un proceso bioquímico llevado a cabo por bacterias nitrificantes, que se completa en dos etapas. En el primer paso, el ion amonio ( $\text{NH}_4^+$ ) se oxida a ion nitrito ( $\text{NO}_2^-$ ); en el segundo paso, el ion nitrito se oxida a ion nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ). La oxidación del

**SMART WATER:**

Transición hacia sistemas inteligentes, sostenibles y resilientes

amonio es llevada a cabo por las bacterias oxidantes del amonio (AOB). La oxidación de nitrito a nitrato es llevada a cabo por las bacterias oxidantes del nitrito (NOB). Los procesos de nitrificación están afectados por diversos factores, destacando el pH, la concentración de oxígeno disuelto en agua, la temperatura, y la cantidad de sustrato inicial (amonio y nitrito).

Estudios previos en comunidades de regantes que emplean aguas regeneradas han demostrado que la calidad de las aguas regeneradas (haciendo referencia a su composición química) varía a lo largo del año, pero también varía a nivel espacial dentro de la red de distribución. Se ha observado que los puntos más distantes de la estación de bombeo reciben agua con una mayor concentración de nitratos, lo que evidencia una clara nitrificación a lo largo de la red. Para realizar una fertirrigación de precisión, es necesario conocer con exactitud la calidad del agua que llega a las parcelas. De este modo, el abonado debe tener en cuenta y complementar los nutrientes que ya incorpora el agua regenerada. Por este motivo, se ha desarrollado un modelo que permite simular estas reacciones de nitrificación y determinar la calidad del agua que llega a cada parcela en una red de riego.

## **2. METODOLOGÍA**

### **2.1 ZONA DE ESTUDIO**

El modelo se ha desarrollado a partir de los datos de calidad de agua tomados entre 2018 y 2020 en la Comunidad de Regantes (CR) de Tintín (Montilla, Córdoba). Esta CR recibe el agua regenerada procedente de la Estación de Depuración de Aguas Residuales (EDAR) de Montilla. La CR cuenta con una extensión de 650 ha, en las que predomina el cultivo del olivo. El riego se realiza mediante goteo subterráneo, con goteros autocompensantes de 2,2 L/h, espaciados a 1 metro y enterrados a una profundidad de 40 cm.

El agua regenerada procedente de la EDAR es conducida a una balsa de decantación, y posteriormente, a una balsa de almacenamiento, donde se aplica un tratamiento de ultrasonidos para reducir la concentración de algas. A continuación, el agua pasa al sistema de impulsión, que se encarga de dotar a la corriente de la energía suficiente para alcanzar todos los puntos de la CR, satisfaciendo los requisitos de presión mínima. La filtración del agua se realiza mediante un sistema de filtros de mallas.

### **2.2 MODELIZACIÓN HIDRÁULICA**

La red de distribución de la CR Tintín se ha modelizado en Epanet [1], para estudiar su comportamiento hidráulico. A cada nodo se le ha asignado su demanda base y los turnos de riego se han modelizado mediante un patrón de demanda. La implantación de la red en este software también ha sido necesaria para calcular los tiempos de viaje del agua. La calidad del agua que llega a cada nodo es función del tiempo que tarda el agua en llegar desde el sistema de impulsión hasta el nodo en cuestión [2]. Para correr el software Epanet en el lenguaje de programación Python, se ha empleado la librería *Epanet Python Toolkit (EPyT)*, que permite realizar simulaciones hidráulicas de la red y calcular los tiempos de viaje del agua desde el sistema de impulsión hasta los nodos que conforman la red de distribución.

## SMART WATER:

Transición hacia sistemas inteligentes, sostenibles y resilientes

**2.3 MODELIZACIÓN DE LA NITRIFICACIÓN**

Para simular los procesos de nitrificación en la red de distribución se ha adaptado el modelo desarrollado por Le et al. [3] para corrientes libres. Este modelo es aplicable únicamente en condiciones de abundancia de oxígeno y temperatura adecuada. Como principal novedad, el modelo desarrollado en este trabajo trata de simular las reacciones de nitrificación en condiciones no óptimas de temperatura y oxígeno disuelto. Además, incorpora el efecto que tienen los siguientes factores sobre la velocidad de las reacciones de nitrificación:

- Concentración de amonio
- Concentración de nitrito
- pH
- Concentración de oxígeno disuelto en agua
- Temperatura

La influencia de estos factores (Figura 2) se ha determinado por separado para las AOB y las NOB. Estos parámetros toman valores de 0 a 1, donde 0 implica una inhibición total de la nitrificación, y 1 implica que las condiciones son óptimas para el desarrollo de la reacción. Para cuantificar estos valores se ha revisado bibliografía al respecto [4], [5], [6], [7], en la que se estudia el efecto de cada uno de estos factores sobre la velocidad de la nitrificación por separado.

Este modelo también simula el efecto que la propia nitrificación tiene sobre el pH del medio y la concentración de oxígeno disuelto. Estos dos parámetros afectan a la velocidad de las reacciones, pero las reacciones de nitrificación también afectan a los valores de pH y oxígeno disuelto. A medida que amonio y nitrito son oxidados, el pH se reduce y la concentración de oxígeno disuelto en agua disminuye, ya que las reacciones de nitrificación liberan protones al medio y consumen oxígeno. Estos dos fenómenos son simulados mediante dos ecuaciones diferenciales. El modelo se compone de las siguientes ecuaciones:

$$\frac{dNH_4}{dt} = -k_a * \theta_{pH} * \theta_T * \theta_{NH_4} * \theta_{OD} * NH_4 \quad (1)$$

$$\frac{dNO_2}{dt} = k_a * \theta_{pH} * \theta_T * \theta_{NH_4} * \theta_{OD} * NH_4 - k_n * \theta_{pH}' * \theta_T' * \theta_{NO_2} * \theta_{OD}' * NO_2 \quad (2)$$

$$\frac{dNO_3}{dt} = k_n * \theta_{pH}' * \theta_T' * \theta_{NO_2} * \theta_{OD}' * NO_2 \quad (3)$$

$$\frac{dOD}{dt} = a * \frac{dNH_4}{dt} + b * \frac{dNO_3}{dt} \quad (4)$$

$$\frac{dpH}{dt} = c * \frac{dNH_4}{dt} \quad (5)$$

Donde  $NH_4$  es la concentración de amonio (mg/L);  $k_a$  es la constante de oxidación del amonio ( $h^{-1}$ );  $\theta_{pH}$  es el factor de inhibición por pH para las AOB;  $\theta_T$  es el factor de inhibición por temperatura para las AOB;  $\theta_{NH_4}$  es el factor de inhibición por concentración de sustrato para las AOB;  $\theta_{OD}$  es el factor de inhibición por concentración de oxígeno disuelto en agua para las AOB;  $NO_2$  es la concentración de nitrito (mg/L);  $k_n$  es la constante

**SMART WATER:**

Transición hacia sistemas inteligentes, sostenibles y resilientes

de oxidación del nitrito ( $h^{-1}$ );  $\theta_{pH}'$  es el factor de inhibición por pH para las NOB;  $\theta_T'$  es el factor de inhibición por temperatura para las NOB;  $\theta_{NO_2}$  es el factor de inhibición por concentración de sustrato para las NOB;  $\theta_{OD}'$  es el factor de inhibición por concentración de oxígeno disuelto en agua para las NOB; OD esa la concentración de oxígeno disuelto en agua (mg/L);  $a$  y  $b$  son parámetros adimensionales que relacionan el consumo de oxígeno con la variación de la concentración del amonio y el nitrato;  $NO_3$  es la concentración de nitrato (mg/L), pH es el valor de pH del agua;  $c$  es un parámetro adimensional que relaciona la variación del pH con la variación de la concentración de amonio.

Estas ecuaciones, así como la influencia de los factores de inhibición, han sido implementados en el lenguaje de programación Python. Para facilitar la programación, elaborar gráficas y resolver las ecuaciones diferenciales se han empleado las siguientes librerías: *numpy*, *pandas*, *scipy.integrate* y *matplotlib.pyplot*.

**2.4 CALIBRACIÓN DEL MODELO**

Para calibrar las ecuaciones y los parámetros del modelo se han empleado datos de calidad de agua tomados en diferentes puntos de la red de distribución de la CR Tintín a lo largo de tres campañas de riego (2018, 2019, 2020).

Los parámetros de calidad de agua que se han analizado para desarrollar el modelo son los siguientes:

- Concentración de amonio ( $NH_4^+$ ) en mg/L
- Concentración de nitrato ( $NO_3^-$ ) en mg/L
- pH
- Temperatura del agua en °C
- Concentración de oxígeno disuelto en agua, en mg/L

Con los datos reales de calidad de agua se ha calculado la variación de estos parámetros entre el sistema de impulsión y cada nodo de la red. Estas variaciones se han relacionado con el tiempo de viaje del agua (previamente calculado) y, de este modo, se han calibrado las ecuaciones que integran el modelo.

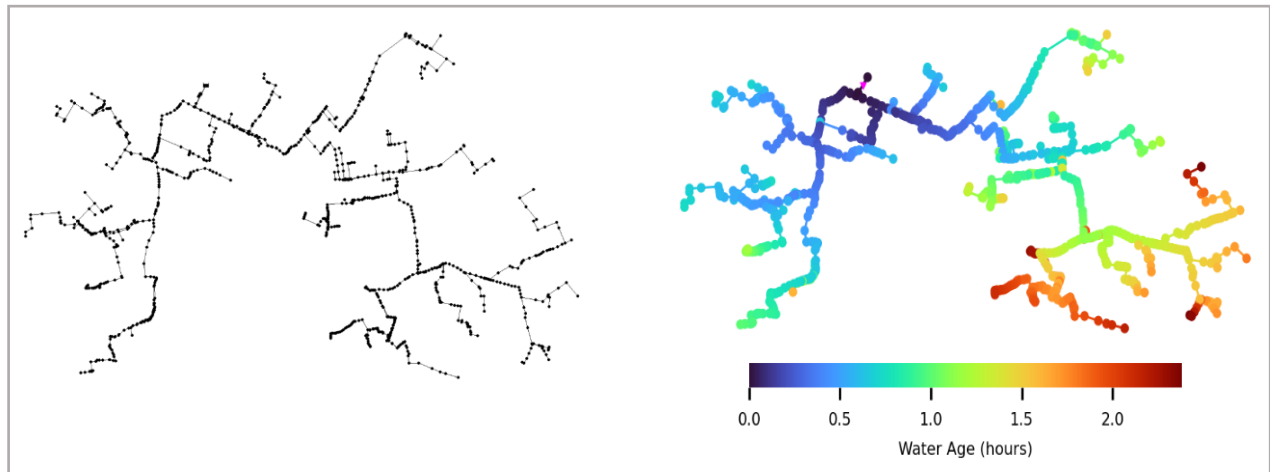
Para calibrar las ecuaciones que simulan el consumo de oxígeno y la variación del pH durante las reacciones, se ha empleado la librería *pyMCMCstat* de Python. Esta librería integra los métodos de cadenas de Markov Monte Carlo (MCMC), que son métodos estadísticos que permiten estimar parámetros de una función en base a unos datos objetivo previamente conocidos. Se trata de una serie de algoritmos que dan valores a uno o varios parámetros  $\theta$  y calculan el resultado de aplicar estos parámetros en una función previamente definida. A continuación, se repite el proceso con un nuevo valor de  $\theta$ , y se calcula el resultado, que se compara con los datos objetivo a los que la función debe aproximarse. Este proceso se repite sucesivamente, hasta que el algoritmo converge en torno a un valor de  $\theta$ , que es el valor más probable para el parámetro establecido. Este método requiere de alta capacidad de computación, ya que el algoritmo converge a partir de un número elevado de iteraciones (500, 1000, 10000...). Pero si el algoritmo se implementa correctamente, la convergencia de la cadena está garantizada.

**SMART WATER:**

Transición hacia sistemas inteligentes, sostenibles y resilientes

**3. RESULTADOS****3.1 MODELIZACIÓN HIDRÁULICA**

Tras implementar la red de distribución de la CR Tintín en el software Epanet, se obtiene una vista general de la misma, y se puede proceder a realizar simulaciones hidráulicas y calcular el tiempo de viaje del agua, desde el sistema de impulsión hasta cada uno de los nodos que conforman la red de distribución de la CR.



*Figura 1. Red de distribución de la CR Tintín y tiempos de viaje*

**3.3 PARÁMETROS DEL MODELO**

*Tabla 1. Resultados de la calibración de las constantes*

<b>Parámetro</b>	<b>Media</b>	<b>Unidad</b>	<b>Error estándar</b>
$a$	1,2	Adimensional	0,13
$b$	-0,15	Adimensional	0,14
$c$	0,26	Adimensional	0,07
$k_a$	0,75	$\text{h}^{-1}$	-
$k_n$	1,46	$\text{h}^{-1}$	-

Como se muestra en la Figura 2, los diferentes parámetros, que son factores de inhibición, toman valores entre 0 y 1. Estos factores representan la influencia en la nitrificación de la temperatura, el pH, el oxígeno disuelto y la concentración de sustrato, de forma separada, para las AOB y las NOB. El pH óptimo se sitúa en torno a entre 7,5 y 8,5. La temperatura óptima es de 35 °C para las AOB, y de 38 °C para las NOB. No obstante, las bacterias nitrificantes se desarrollan bien en un amplio intervalo de temperatura.

SMART WATER:

Transición hacia sistemas inteligentes, sostenibles y resilientes

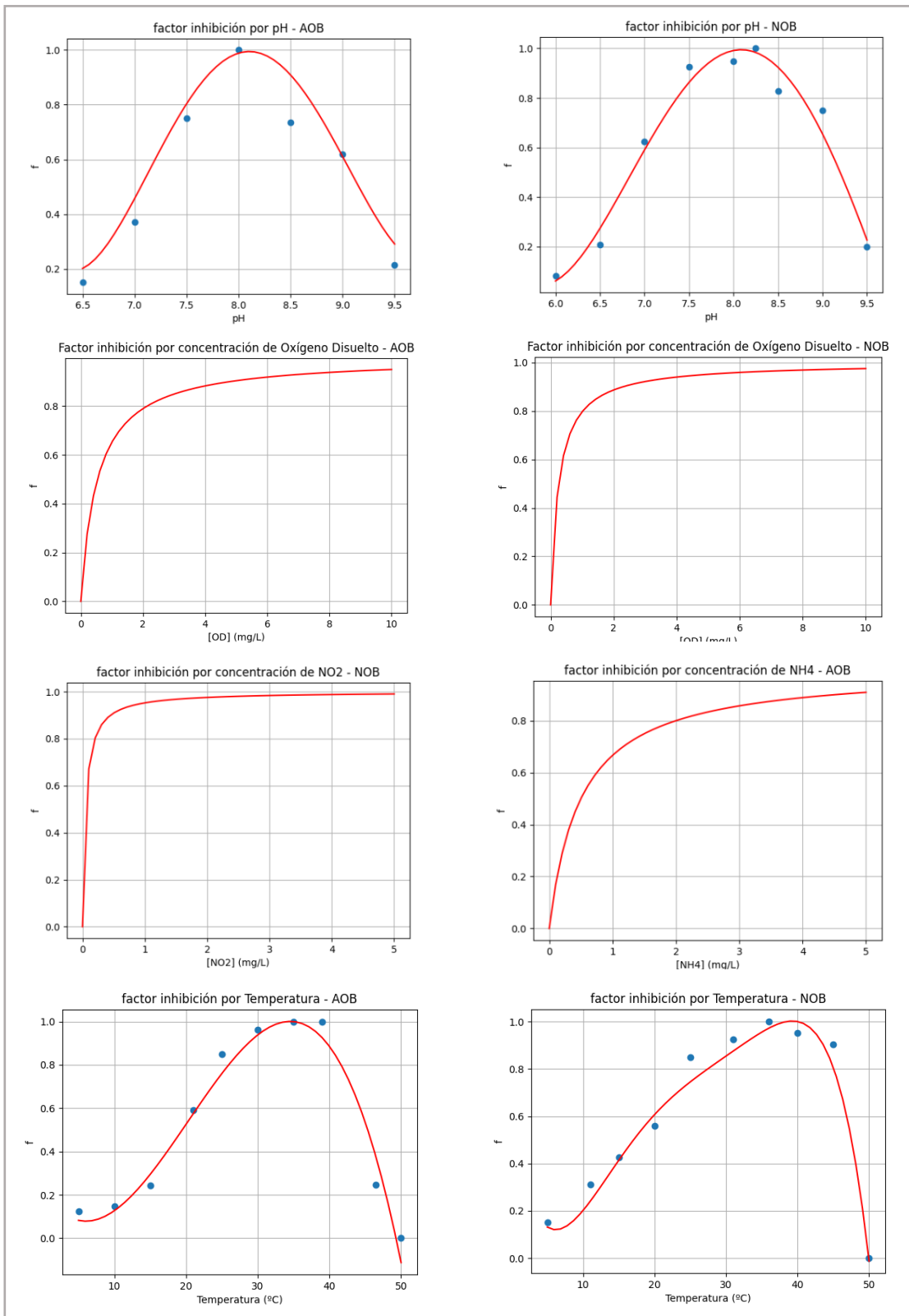


Figura 2. Parámetros del modelo

**SMART WATER:**

Transición hacia sistemas inteligentes, sostenibles y resilientes

**3.4 AJUSTE DEL MODELO**

A continuación, se muestran dos simulaciones realizadas con el modelo, y sus respectivas comparaciones con los datos reales de calidad de agua, para comprobar el ajuste. El modelo requiere que las condiciones iniciales sean introducidas manualmente. A partir de unos valores iniciales introducidos de pH, temperatura, oxígeno disuelto en agua, concentraciones de amonio, nitrito y nitrato, el modelo es capaz de simular las transformaciones químicas que tienen lugar durante el proceso de nitrificación en la red.

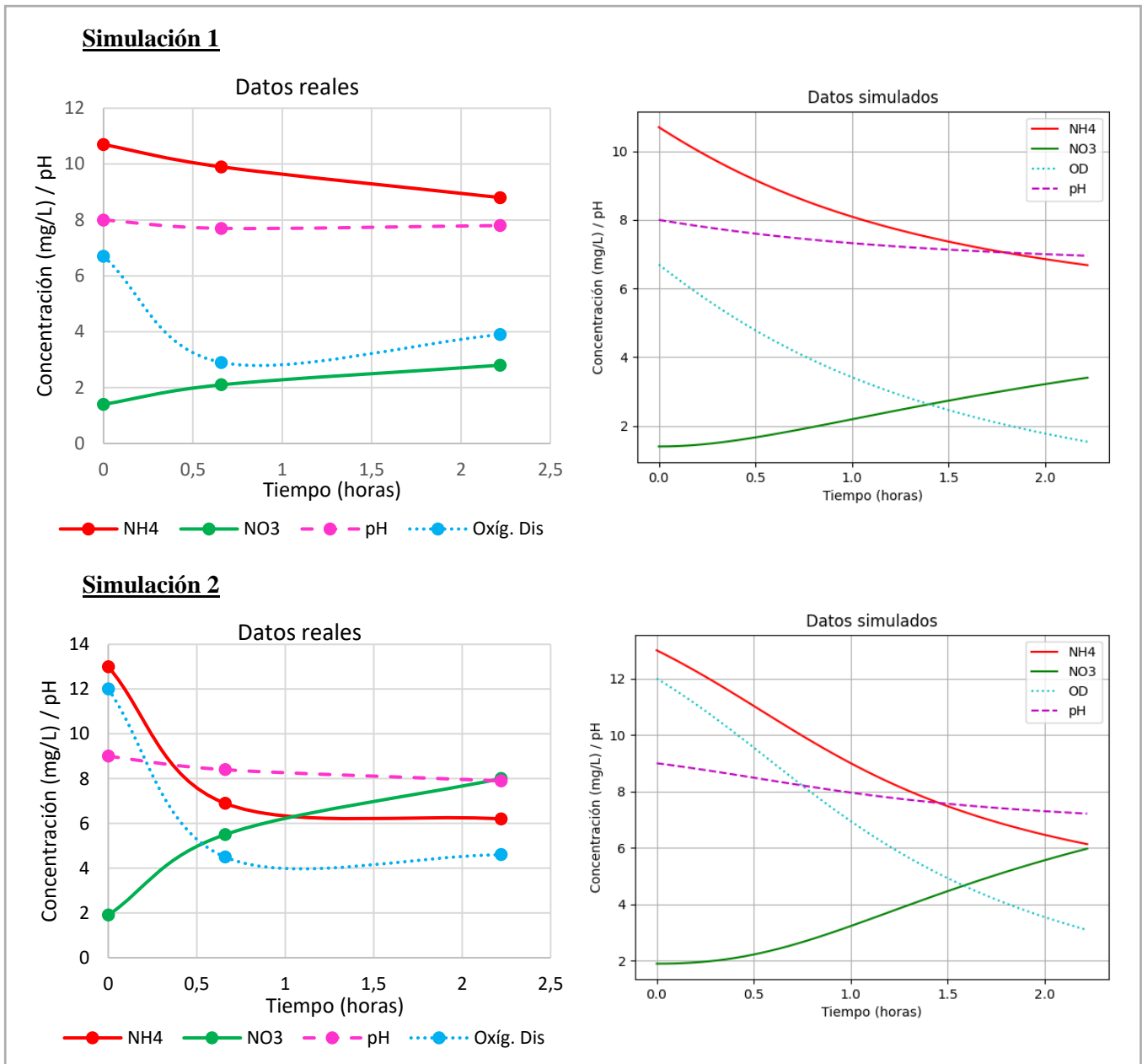


Figura 3. Ajuste del modelo



**SMART WATER:**

Transición hacia sistemas inteligentes, sostenibles y resilientes

## 4. CONCLUSIONES

Modelizar los procesos de nitrificación en redes de riego resulta de vital importancia para determinar la calidad del agua que llega a cada regante dentro de una comunidad. Esto permite ajustar el plan de fertilización.

Las reacciones de nitrificación son extremadamente complejas y dinámicas, influenciadas por diversos factores y difíciles de modelizar con precisión.

El modelo desarrollado constituye una primera aproximación para simular las reacciones de nitrificación en redes de riego que emplean aguas regeneradas. Este modelo continuará en desarrollo y se perfeccionará con los datos de calidad de agua que se tomarán en la campaña 2023/2024.

## REFERENCIAS

- [1] L. Rossman, H. Woo, F. Tryby, “EPANET 2.2 User Manual”, U.S. Environmental Protection Agency. 2020.
- [2] C. Alcaide, I. Fernández, I. Martín, E. Camacho, J. Rodríguez, “Spatio-temporal analysis of nitrogen variations in an irrigation distribution network using reclaimed water for irrigation olive trees”, *Agricultural Water Management*, vol. 262
- [3] H. Le, J. Fettig, y G. Meon, “Kinetics and simulation of nitrification at various pH values of a polluted river in the tropics”, *Ecohydrology and Hydrobiology*, vol. 19, no. 1. 2019, pp. 54-65.
- [4] C. Grunditz y G. Dalhammar, “Development of nitrification inhibition assays using pure cultures of *Nitrosomonas* and *Nitrobacter*”, *Water Research*, vol. 35, no. 2. 2001, pp. 433-440.
- [5] H. Daebel, R. Manser, W. Gujer, “Exploring temporal variations of oxygen saturation constants of nitrifying bacteria”, *Water Research*, vol. 41, no. 5. 2007, pp. 1094-1102.
- [6] V. Pambrun, E. Paul, y M. Spérandio, “Modeling the partial nitrification in sequencing batch reactor for biomass adapted to high ammonia concentrations”, *Biotechnology and Bioengineering*, vol. 95, no. 1. 2006, pp. 120-131.
- [7] R. Jones, P. Dold, I. Takács, K. Chapman, B. Wett, S. Murthy, y M. Shaughnessy, “Simulation for operation and control of reject water treatment processes”, *Proceedings of the Water Environment Federation*, vol. 2007, no. 14. 2007, pp. 4357-4372.