

## RESUM

L'objectiu principal d'aquest treball es desenvolupar una metodologia per pogué simular els paràmetres que controlen la qualitat de les aigües superficials i com a particularització els rius. Entre els processos considerats s'inclouen la complexació aquosa i la dissolució de gasos, poguent-ho modelar a l'equilibri o segons lleis cinètiques.

Aquests tipus d'equacions han estat resoltes per diferents autors mitjançant metodologies "ad hoc". El que es planteja en aquest treball es una formulació mitjançant el formalisme del transport reactiu multicomponent, que permet tractar amb rigor tot tipus de reaccions i facilitar la generalització d'aquest treball. Per això, es va preparar un sistema bioquímic per tal d'incloure els principal processos microbiològics relacionats amb l'eliminació de la matèria orgànica, nitrificació, denitrificació i l'evolució del oxigen dissolt al riu. Per completar el sistema s'hi ha hagut d'adaptar una matriu de coeficients estequiomètrics basada en les fraccions màssiques dels elements C, H, O, N i P per cada espècie orgànica considerada, tant si es un microorganisme o matèria orgànica sense vida.

La majoria de processos introduïts es tracten de reaccions cinètiques, es a dir, que la velocitat de les reaccions està en funció de diferents substàncies. La velocitat de la generació de productes s'incrementa amb la població d'organismes de manera lineal, però on hi ha altres substàncies que provoquen una catalització y altres una inhibició a les reacciones, del tipus Monod. També s'han introduït un conjunt de processos que es consideren en equilibri al medi natural hídric.

S'ha realitzat una aplicació amb la ajuda dels paràmetres de la secció mitja del riu Llobregat, Barcelona, on s'han utilitzat el cabal mig i el perímetre mullat mig, podent obtenir els altres paràmetres necessaris apartir d'aquests.

Una vegada creats tots els arxius necessaris pel funcionament del codi CODE BRIGHT RETRASO i així haver determinat el sistema químic, orgànic i inorgànic, del riu modelat. Llavors s'obtenen diferents resultats que mostren les variacions espacials al llarg del temps de les espècies modelades i dels processos que provoquen la seva variació.

Es pot concloure que aquesta metodologia formal i generalitzada d'anàlisi, de la qualitat d'aigües superficials, és una eina molt útil com a primera aproximació del que realment succeeix en el si d'un riu que pateix un abocament d'aigua cloacal i per tant una possible degradació del medi natural. Aquesta metodologia d'anàlisi d'aigües superficials, i concretament als rius, ajudaria molt per la realització de tècniques per la seva descontaminació.