



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

**TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES MEDIANTE GRANULACIÓN
AERÓBICA: MODELO DE BASE FENOMENOLÓGICA DE UN REACTOR
AERÓBICO PARA EL CRECIMIENTO DE ORGANISMOS
ACUMULADORES DE FÓSFORO**

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA,
MENCION QUÍMICA

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERA CIVIL QUÍMICA

FERNANDA DANIELA GUZMÁN MUSA

PROFESOR GUÍA:
FELIPE DÍAZ ALVARADO

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
JUAN ASENJO DE LEUZE DE LANCIZOLLE
IRENE MARTÍNEZ BASTERRECHEA
JOSÉ CRISTIAN SALGADO HERRERA

SANTIAGO DE CHILE

2022

TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES MEDIANTE GRANULACIÓN AERÓBICA: MODELO DE BASE FENOMENOLÓGICA DE UN REACTOR AERÓBICO PARA EL CRECIMIENTO DE ORGANISMOS ACUMULADORES DE FÓSFORO

El tratamiento de aguas servidas con alta carga de especies fosforadas puede ser abordado en reactores biológicos de granulación aeróbica, los que poseen ventajas operacionales con respecto al tratamiento de aguas servidas tradicional. Los gránulos aeróbicos son estructuras complejas debido a la variedad de procesos físico-químicos que ocurren en su interior. En consecuencia, surge la motivación de realizar modelos matemáticos que permitan simular y predecir el comportamiento de este sistema de tratamiento, con el fin de facilitar el diseño y operación. El modelo propuesto en esta tesis se basa en la representación de cada gránulo como un submodelo y la modelación del sistema completo sobre la base de submodelos.

Debido a la estructura compacta y heterogénea interna del gránulo, la transferencia de masa se vuelve significativa en comparación con otros procesos, donde la resistencia a la transferencia de masa es más significativa hacia el centro de los gránulos. Respetando esta idea se formuló un modelo geométrico que permitiera representar las subestructuras del gránulo, denominadas como *aglomerados*, descomponiendo la estructura en capas de grosor descendente hacia el centro del gránulo. Con esto fue posible obtener una función para la difusividad de Acetato, Fosfato y Oxígeno dependiente del radio del gránulo, tal que su valor disminuye hacia el centro. Esta función permite explicar la existencia de diferentes zonas redox en el interior del gránulo y la presencia de un centro más poroso que la corteza.

Se modela la conducta dinámica de las concentraciones de Acetato, Fosfato y Oxígeno en el interior del gránulo. Para esto, se plantea un sistema de ecuaciones diferenciales que dependen de la difusividad y las tasas de conversión biológica. Como resultado se obtienen perfiles de concentración para los tres sustratos estudiados y a modo de conclusión se tiene que el modelo planteado es altamente sensible a las condiciones de borde impuestas y al valor de las constantes cinéticas utilizadas para la tasa de conversión.

Usando el modelo de un gránulo individual, se crea un modelo que permite seguir la conducta dinámica de Acetato y Fosfato en el reactor. Como resultado se obtienen perfiles de concentración a lo largo de la altura del reactor y se obtiene un modelo verosímil, capaz de seguir datos experimentales. Adicionalmente, se realiza un análisis de sensibilidad de las tasas de conversión microbiana. Como principal conclusión se tiene que el modelo propuesto permite seguir la conducta de un reactor. Para ser utilizado en futuras experiencias, se recomienda su calibración específica al reactor en estudio.

A modo de reflexiones y conclusiones generales se puede decir que el modelo permite representar cualquier distribución de gránulos, geometría del reactor y condiciones de operación. Adicionalmente, el modelo generado permite enfocar y guiar las pruebas experimentales necesarias para realizar el ajuste de parámetros requerido. Se concluye que gracias a que el modelo global se basa en el comportamiento de un solo gránulo, se puede trabajar con volúmenes de control menores al reactor completo, permitiendo representar un reactor no ideal como la composición de sub-reactores.

Tabla de Contenido

1. Introducción	2
2. Objetivos	4
3. Antecedentes	5
3.1. Granulación aeróbica	5
3.2. Remoción Biológica de Fósforo Mejorada	7
3.3. Arquitectura del Gránulo	9
4. Estado del Arte	14
4.1. Aplicación a gran escala	14
4.2. Modelos Reportados	19
4.2.1. Modelos orientados a los gránulos	19
4.2.2. Modelos de tratamiento de aguas en un reactor	22
5. Transferencia de masa en el gránulo	29
5.1. Arquitectura del gránulo	29
5.2. Difusión	35
5.3. Resultados	39
6. Modelo de transferencia de masa y reacción en un gránulo	43
6.1. Balance de masa	44
6.2. Condiciones de borde	45
6.3. Simplificación del Metabolismo	48
6.4. Concentración de Biomasa	50
6.5. Tasa de Consumo	54
6.5.1. Transferencia de masa externa	54
6.5.2. Transporte a través de la membrana	55
6.5.3. Cinética microbiana	56
6.6. Resultados	61
6.6.1. Mallado y condiciones de Estabilidad	62
7. Perfil de concentraciones en el Reactor	76
7.1. Geometría y Operación	76
7.2. Distribución de Gránulos	77
7.3. Modelo de celdas	80
7.4. Balance de Masa para una Celda	83
7.5. Resultados	87

8. Reflexiones Generales	97
9. Conclusiones	101
Bibliografía	104
Anexos	107
Anexo A. Condiciones de Estabilidad	107
A.1. Condiciones de Estabilidad	107
Anexo B. Nomenclatura y Unidades	109
B.0.1. Difusión	109
B.0.2. Modelo Gránulo	110
B.0.3. Modelo Reactor	113
Anexo C. Modelo gránulo	114
Anexo D. Modelo reactor	124
Anexo E. Parámetros	134

Índice de Tablas

5.1.	Valores de la difusividad en medio acuoso para los sustratos de interés [30]. . .	35
6.1.	Concentración de alimentación de sustratos. Tomado de [30].	45
6.2.	Dimensiones utilizadas para caracterizar una bacteria tipo PAO	50
6.3.	Constantes cinéticas para la proteína actP.	55
6.4.	Constantes cinéticas para el sistema Pit	56
6.5.	Coefficientes estequiométricos y cinéticos para el metabolismo de Acetato. Tomados de [30].	57
6.6.	Coefficientes estequiométricos y cinéticos para el metabolismo de Fosfato. Tomados de [30].	57
6.7.	Coefficientes estequiométricos y cinéticos para el metabolismo de PHA. Tomados de [30].	58
6.8.	Coefficientes estequiométricos y cinéticos para el metabolismo de Oxígeno. Tomados de [30].	59
6.9.	Porcentaje de penetración de sustratos	73
7.1.	Geometría de reactor [6]	76
7.2.	Distribución de tamaños de gránulos en Nereda® , Gamerwold. Extraído de [24].	78
7.3.	Distribución de gránulos y su concentración estimados para un reactor Nereda® de $9.600 m^3$	78
7.4.	Volumen y altura ocupados por cada clase de gránulo	79
7.5.	Tamaño y distribución de celdas	82
7.6.	Distribución de flujos según clase de celda	82
7.7.	Porcentaje de remoción de Acetato	94
7.8.	Porcentaje de liberación de Fosfato	94
A.1.	Comprobación de la estabilidad numérica del método numérico para la simulación.	108
B.1.	Nomenclatura y Unidades para símbolos utilizados en Capítulo 5	109
B.2.	Nomenclatura y Unidades para símbolos utilizados en Capítulo 6. A	110
B.3.	Nomenclatura y Unidades para símbolos utilizados en Capítulo 6. B	111
B.4.	Nomenclatura y Unidades para símbolos utilizados en Capítulo 6. C	112
B.5.	Nomenclatura y Unidades para símbolos utilizados en Capítulo 7.	113

Índice de Ilustraciones

3.1.	Mecanismo propuesto para la formación de gránulos aeróbicos en reactores biológicos secuenciales (SBR). Tomado de [9].	6
3.2.	Corte esquemático de gránulos anaeróbicos con los diferentes procesos de conversión de materia orgánica, nitrógeno y fósforo, que tienen lugar dentro de las diferentes zonas redox. Tomado de [8].	7
3.3.	Vías metabólicas de PAO en condiciones aeróbicas y anaeróbicas. Tomado de [16].	8
3.4.	(A) Macroimpresión del lodo granular aeróbico. (B) Gránulos cultivados en propanato y muestreados el día 169. (C) Estereomicrografía de gránulos en diferentes etapas de "vida". (D) Imagen SEM de bajo aumento de un gránulo que muestra grandes aglomerados. (E) Imagen SEM de la superficie de un gránulo. Tomado de [22]	10
3.5.	Imágenes de corte transversal de un gránulo cultivado con acetato muestreado el día 169. (A) Imagen de fluorescencia que muestra grupos de bacterias similares a Accumilibacter en rosa. Las bacterias similares a Competibacter se muestran en cian y otros microorganismos se muestran en azul. (B y C) Imágenes de campo claro y campo oscuro, respectivamente, de una sección contigua a la del panel A y teñidas con H&E que muestran la estructura de aglomerados de los grupos. Tomado de [22]	11
3.6.	Imágenes de campo claro que muestran aglomerados de biomasa que crecen hacia fuera del gránulo. La barra de escala en el panel B se aplica de manera similar al panel A. Tomado de [22]	12
3.7.	Porosidad interna como función de la distancia al centro del gránulo. Tomado de [22]	12
4.1.	Representación de un ciclo de operación en un reactor Nereda® de granulación aeróbica [23].	15
4.2.	Esquema del proceso llevado a cabo por los reactores de granulación aeróbica. Tomado de [6]	16
4.3.	Afluente y efluente de la planta de lodos granulares aeróbicos en Garmerwolde, Países Bajos. Tomado de [6]	16
4.4.	Tiempos de operación la planta de granulación aeróbica en Garmerwolde. Tomado de [6]	17
4.5.	Ciclo operativo típico en la planta aeróbica de lodos granulares. Concentración de amonio (línea continua verde), fosfato (línea continua negra), nitrato (línea discontinua roja) y oxígeno (línea discontinua azul). Tomado de [6]	17
4.6.	Distribución del tamaño de los gránulos en la planta de lodos granulares aeróbicos en Garmerwolde, Holanda. Tomado de [24].	18

4.7.	Lodo granular aeróbico: (a, b) biomasa en la parte superior del lecho de lodo granular, (c) muestra mixta del seno del líquido, (d) gránulos tamizados y lavados con agua. Tomado de [6]	18
4.8.	(g) Aumento al $1000 \times$ de los organismos acumuladores de fosfato que se encuentran en gránulos en cerámica y (h) gránulos rebanados. Tomado de [6] . .	19
4.9.	Escalas espaciales del modelo multi-escala. Tomado de [30].	25
4.10.	Resultados de un ciclo de tres horas representativo del estado maduro (en el día 700 de operación). (a) Concentración en el seno para todos los solutos estudiados. (b) Cambio absoluto en la masa de polímeros de almacenamiento interno. Tomado de [30].	27
4.11.	Resultados de un ciclo de tres horas representativo del estado maduro (en el día 700 de operación). (c) Distribución 2D de los grupos bacterianos. (d) Distribución radial promedio de grupos bacterianos e inertes. Tomado de [30].	27
5.1.	Propuesta de estructura de capas de tamaño descendiente. Adaptado de [22] .	30
5.2.	Imagen de campo claro transversal de un gránulo, teñido con H&E. Círculos naranjos indican aglomerados de células y el círculo negro representa la totalidad del gránulo.	31
5.3.	Diámetro de los aglomerados según radio del gránulo	33
5.4.	Propuesta para la distribución física de los aglomerados de células dentro de un gránulo.	34
5.5.	Representación del transporte de nutrientes al interior del gránulo, considerando la existencia de aglomerados.	35
5.6.	Diagrama representativo del volumen libre por capa.	36
5.7.	Diagrama representativo para la capa i	37
5.8.	Representación de la disminución volumen libre disponible.	39
5.9.	Coefficiente de tortuosidad	40
5.10.	Difusividad para solutos de interés en función del radio del gránulo	41
5.11.	Representación para difusión de Acetato corregida con el coeficiente de tortuosidad	41
6.1.	Diagrama de fenomenologías a modelar y su dominio.	44
6.2.	Concentraciones en el seno del reactor para todas las especies. Extraído de modelo realizado por Xavier et. al. 2007 [30].	46
6.3.	Concentración de Acetato y Fosfato en el líquido de un reactor de granulación aeróbica considerando mezcla perfecta. Fase anaeróbica.	47
6.4.	Concentración de Acetato y Fosfato en el líquido de un reactor de granulación aeróbica considerando mezcla perfecta. Fase aeróbica.	47
6.5.	Representación del metabolismo anaeróbico a considerar en el modelo	48
6.6.	Representación del metabolismo aeróbico a considerar en el modelo	49
6.7.	Aumento de $1000x$ de organismos acumuladores de fosfato que se encuentran en gránulos. [6]	50
6.8.	Resultados de un ciclo de tres horas representativo del estado maduro (en el día 700 de operación). (a) Distribución 2D de los grupos bacterianos. (b) Distribución radial promedio de grupos bacterianos e inertes. Tomado de Xavier et. al. 2007 [30].	51
6.9.	Imagen SEM de la superficie de un gránulo. [22]	52
6.10.	Tendencia lineal para datos extraídos de Xavier et. al 2007 [30]	52
6.11.	Concentración de biomasa para las distintas clases de gránulos existentes en un reactor	53

6.12.	Representación de la transferencia de masa fuera de un aglomerado	54
6.13.	Figura referencial para el eje de las coordenadas.	61
6.14.	Perfil de concentraciones de Acetato en el radio del gránulo sin considerar reacciones de consumo o liberación de sustratos. (a) Variación de la concentración entre 0 y 8 minutos de operación. (b) Variación de la concentración entre 11 y 14 minutos de operación	63
6.15.	Perfil de concentraciones de Fosfato en el radio del gránulo sin considerar reacciones de consumo o liberación de sustratos. (a) Variación de la concentración en fase aeróbica (entre 0 y 60 minutos). (b) Variación de la concentración en fase anaeróbica (entre 60 y 360 minutos)	64
6.16.	Perfil de concentraciones de Oxígeno en el radio del gránulo sin considerar reacciones de consumo o liberación de sustratos. Fase aeróbica (entre 61 y 360 minutos).	65
6.17.	Perfil de concentraciones de Acetato en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a 51grPAO/L en la primera capa. (a) Variación de la concentración entre 0 y 8 minutos de operación. (b) Variación de la concentración entre 11 y 14 minutos de operación	66
6.18.	Perfil de concentraciones de Fosfato en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a 51 grPAO/L en la primera capa. (a) Variación de la concentración en fase aeróbica (entre 0 y 60 minutos). (b) Variación de la concentración en fase anaeróbica (entre 60 y 360 minutos)	67
6.19.	Perfil de concentraciones de Oxígeno en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a 51 grPAO/L en la primera capa. Fase aeróbica (entre 61 y 360 minutos).	67
6.20.	Perfil de concentraciones de Acetato en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a $5,1\text{ grPAO/L}$ en la primera capa. (a) Variación de la concentración entre 0 y 8 minutos de operación. (b) Variación de la concentración entre 11 y 14 minutos de operación	69
6.21.	Perfil de concentraciones de Fosfato en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a 51 grPAO/L en la primera capa. (a) Variación de la concentración en fase aeróbica (entre 0 y 60 minutos). (b) Variación de la concentración en fase anaeróbica (entre 60 y 360 minutos)	70
6.22.	Perfil de concentraciones de Oxígeno en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a $5,1\text{ grPAO/L}$ en la primera capa. Fase aeróbica (entre 61 y 360 minutos).	71
6.23.	Perfil de concentraciones de Acetato en el radio del gránulo sin considerar reacciones de consumo o liberación de sustratos a los 8 minutos de operación. (a) gránulo de $500\ \mu\text{m}$ de radio total (b) gránulo de $1.788\ \mu\text{m}$ de radio total.	72
6.24.	Perfil de concentraciones de Fosfato en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a 51grPAO/L en la primera capa a los 60 minutos de operación.(a) Gránulo de $500\ \mu\text{m}$ de radio total. (b) Gránulo de $1.788\ \mu\text{m}$ de radio total.	72
6.25.	Perfil de concentraciones de Oxígeno en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a $5,1\text{grPAO/L}$ en la primera capa a los 360 minutos de operación.(a) Gránulo de $500\ \mu\text{m}$ de radio total. (b) Gránulo de $1.788\ \mu\text{m}$ de radio total.	73
6.26.	Comparación referencial para profundidad de penetración de sustratos	75
7.1.	Caudal de alimentación al reactor (ϕ) en en función del tiempo de operación.	77

7.2.	Esquema representativo de la altura ocupada por cada clase de gránulos y la altura total de lodos alcanzada en el reactor.	80
7.3.	Representación de una celda compuesta por el gránulo y el volumen de agua .	81
7.4.	Representación de monocapas formadas por celdas que encapsulan a un gránulo.	81
7.5.	Representación de una celda como un reactor continuo perfectamente agitado .	84
7.6.	Esquema explicativo para la tasa de conversión en una celda.	86
7.7.	Nivel de llenado de aguas servidas del reactor de granulación aeróbica como función del tiempo.	87
7.8.	Perfil de concentraciones en la altura del reactor, considerando una concentración de biomasa igual a $51grPAO/L$ en la primera capa de los gránulos. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos). (b) Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos).	88
7.9.	Perfil de concentraciones en la altura del reactor, considerando una concentración de biomasa igual a $5,1grPAO/L$ en la primera capa de los gránulos. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos). (b) Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos).	90
7.10.	Perfil de concentraciones en el radio del gránulo, considerando una concentración de biomasa igual a $51grPAO/L$ en la primera capa, un gránulo de radio igual a $1.500 \mu m$ ubicado a una altura de 0,01m en el reactor. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) (b)Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) . .	91
7.11.	Perfil de concentraciones en el radio del gránulo, considerando una concentración de biomasa igual a $51grPAO/L$ en la primera capa, un gránulo de radio igual a $418 \mu m$ ubicado a una altura de 0,01m en el reactor. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) (b)Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) . .	92
7.12.	Perfil de concentraciones en el radio del gránulo, considerando una concentración de biomasa igual a $5,1grPAO/L$ en la primera capa, un gránulo de radio igual a $1.500 \mu m$ ubicado a una altura de 0,01m en el reactor. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) (b)Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) . .	93
7.13.	Perfil de concentraciones en el radio del gránulo, considerando una concentración de biomasa igual a $5,1grPAO/L$ en la primera capa, un gránulo de radio igual a $418 \mu m$ ubicado a una altura de 0,01m en el reactor. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) (b)Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) . .	93

Glosario

Aglomerado:	Agregados de colonias múltiples de bacterias.
Conversión biológica:	Acción enzimática para consumir la biomasa.
Difusión:	Proceso físico-químico consistente en el movimiento de partículas de una región de alta concentración a una región de baja concentración.
Reactor Fed-Batch:	Reactor de alimentación discontinua.
Granulación aeróbica:	Tecnología para el tratamiento de aguas servidas domésticas e industriales.
Gránulo:	Agregados de origen microbiano, de estructura compacta y con excelentes propiedades de sedimentabilidad.
PAO:	Organismos acumuladores de Fósforo. Especie microbiana de mayor abundancia en un gránulo.
SBR:	Reactor biológico secuencial. Tipo de tratamiento biológico que utiliza un único reactor para realizar las operaciones de un proceso de lodos activados.
Tortuosidad:	Característica que representa el grado de vueltas o rodeos de una trayectoria.

Capítulo 1

Introducción

Las aguas residuales domésticas son vistas como un desecho del ser humano y sin un correcto tratamiento, provocan una serie de problemas, tanto para salud como para el medio ambiente, tales como la generación de malos olores, la presencia de agentes patógenos portadores de enfermedades, la contaminación de los cuerpos de agua receptores, entre otros [1]. Sin embargo, la totalidad de estos problemas puede verse anulada si es realizado un correcto y efectivo tratamiento, en conjunto con un adecuado manejo de residuos sólidos. Ante la evidente crisis hídrica que enfrentan Chile y el mundo, se ha propuesto ver el agua residual como un recurso en vez de un desecho [2], tanto para la reutilización del agua, como para los residuos sólidos generados durante el tratamiento, que son abundantes en biomasa y materia orgánica. El rediseño de los sistemas de agua puede mejorar el uso de este recurso hacia la sostenibilidad [3], promoviendo su reutilización.

El sistema de lodos activados es uno de los más utilizados para el tratamiento de aguas servidas domésticas, en el cual los microorganismos crecen típicamente en forma de flóculos suspendidos en las aguas a ser tratadas [4]. La mayoría de las instalaciones de tratamiento de aguas operan con un sistema de lodos activados de régimen continuo, con un reactor y un sedimentador en serie. En el primero ocurre la aireación, la conversión biológica de los contaminantes y el crecimiento de la biomasa como flóculos, formando lo que se conoce como lodo biológico, mientras que el sedimentador está dirigido a la separación del lodo biológico y el agua tratada mediante sedimentación. A pesar de ser la forma más común de tratar el agua, este tipo de sistemas presenta diversos inconvenientes, tales como la baja concentración de biomasa en el reactor, el requerimiento de dos equipos separados, que a su vez significa el requerimiento de gran área superficial para su instalación y alto requerimiento energético para la aireación y flujos de reciclo [4].

Como alternativa a estos inconvenientes surge el tratamiento de aguas residuales mediante granulación aeróbica, que consiste en el crecimiento de gránulos aeróbicos: agregados de origen microbiano, de estructura compacta y con excelentes propiedades de sedimentabilidad [5]. Este tipo de tratamiento tiene ventajas operacionales importantes con respecto a los tratamientos de agua convencionales en términos de conversión de la materia orgánica, nitrógeno y fósforo, del volumen requerido para el tratamiento y del consumo energético [6]. Además de tener una huella más pequeña, los sistemas de granulación aeróbica permiten la retención de altas concentraciones de biomasa en el reactor. Existen 5 características principales de este tipo de tratamiento que favorecen un tratamiento eficiente con menor huella: 1) partículas

de lodo densas y de macro escala (milimétrica), 2) existencia de diferentes zonas redox en el gránulo, es decir, regiones aeróbicas, anóxicas y anaeróbicas, 3) alta retención de biomasa, 4) control fino sobre las reacciones metabólicas mediante la regulación del oxígeno disuelto y 5) cooperación metabólica entre microorganismos autótrofos y heterótrofos [4].

Los gránulos aeróbicos son estructuras altamente complejas debido a la cantidad de procesos físico-químicos simultáneos que ocurren en su interior y por su estructura compacta y heterogénea. Las tasas de conversión y la eficiencia de remoción de contaminantes de las aguas residuales dependen de diversos factores, tales como el tamaño de los gránulos, la distribución de biomasa en su interior, la hidrodinámica del reactor, entre otros. Dado que estos factores están estrechamente relacionados unos a otros, sus efectos individuales no pueden ser estudiados experimentalmente. En base a esto, surge la motivación de realizar modelos matemáticos que permitan simular y predecir el comportamiento de este sistema de tratamiento, con el fin de entregar una base sólida para el diseño y la operación del sistema de lodos granulares aeróbicos [7].

Los reactores de granulación aeróbica utilizados en la industria pueden ser implementados para tratar la totalidad de las aguas servidas de una comunidad [6], por lo que los sistemas y procesos que ocurren en su interior pueden alcanzar elevados niveles de complejidad debido al volumen de trabajo utilizado. Dentro de un mismo reactor existen varias escalas de fenómenos físicos, químicos y biológicos. En la escala más pequeña, se tiene una interacción célula a célula, donde ocurren las reacciones químicas y biológicas, una escala intermedia que corresponde a la estructura del gránulo, la que puede presentar variaciones en cuanto a forma y tamaño entre un gránulo a otro. Finalmente, la escala macro que engloba todos los fenómenos corresponde al reactor, en el que ocurren fenómenos físico químicos, tales como mecánica de fluidos, separación sólido líquido o condiciones de mezcla generadas por una aireación controlada. Dado que en un reactor están ocurriendo diversos fenómenos a diversas escalas de forma simultánea, resulta complicado estudiar y controlar todos los factores en paralelo. Es por esto que surge la motivación de generar modelos multi escala que permitan ir desglosando el problema y estudiar por separado las características y comportamientos de cada escala, con el fin de mejorar el entendimiento de cada uno de los procesos por separado. Finalmente, el acoplamiento de estos modelos es lo que permite simular el comportamiento de un reactor de granulación aeróbica con el fin de acercarse a la realidad y optimizar el funcionamiento del proceso de tratamiento de aguas servidas.

Capítulo 2

Objetivos

Objetivo General:

Modelar un reactor de granulación aeróbica de crecimiento de organismos acumuladores de fósforo (PAO) para el tratamiento de aguas residuales, sobre la base de un modelo de base fenomenológica que considere la existencia de aglomerados celulares.

Objetivos específicos:

1. Dividir un reactor biológico de gránulos aeróbicos para el crecimiento de PAO en subdominios para, sobre ellos, definir los procesos físicos, químicos y biológicos más importantes que tienen lugar en su interior.
2. Formular y resolver un sistema de ecuaciones diferenciales sobre cada subdominio que permita modelar la conducta dinámica de la concentración de Acetato, Fosfato y Oxígeno dentro de un gránulo.
3. Acoplar la conducta de gránulos individuales utilizando el modelo anterior, para modelar el comportamiento dinámico de un reactor de granulación aeróbica para el tratamiento de aguas residuales.
4. Realizar análisis de sensibilidad respecto a la cinética microbiana para el comportamiento del modelo global.

Capítulo 3

Antecedentes

El presente capítulo busca abordar las características generales de un gránulo, así como también las principales ventajas como agentes descontaminantes de las aguas servidas. Se define un gránulo aeróbico, sus componentes y las principales condiciones operacionales para favorecer su crecimiento. Se presenta la capacidad de los gránulos para la eliminación mejorada de fósforo y el principal microorganismo responsable de esta cualidad, así como también su metabolismo. Finalmente se muestran las características de la estructura física de un gránulo y cómo esta tiene incidencia en la actividad microbiana que ocurre en su interior. Toda la información presentada es pertinente para entender de mejor manera este complejo sistema, y así favorecer su estudio y posterior modelamiento.

3.1. Granulación aeróbica

Los gránulos aeróbicos son estructuras compactas en la que conviven diversas comunidades de microorganismos y son responsables de convertir moléculas compuestas por fuentes de carbono, fósforo o nitrógeno simultáneamente. Los mecanismos de granulación consisten en interacciones bióticas y abióticas entre los microorganismos y partículas de lodo [8], dominadas principalmente por bacterias y filamentos de hongos en etapas iniciales de granulación, que promueven el desarrollo de un núcleo para la posterior colonización bacteriana [9]. Estas interacciones resultan en agregados muy compactos de forma esférica, con un diámetro de aproximadamente 1-3 mm, donde las células están inmovilizadas en una matriz de sustancias poliméricas extra celulares (EPS) [8].

Para formar estos gránulos se debe operar un reactor biológico secuencial con aireación bajo ciertas condiciones, tal que se mantenga una alimentación cíclica tipo saciedad-hambruna en condiciones anaeróbicas, altas fuerzas de corte hidrodinámicas y un tiempo de sedimentación corto para seleccionar agregados microbianos densos [8]. La fuerza de corte hidrodinámico se ve reflejada en la velocidad del flujo ascendente de aire, el que influencia los aspectos estructurales y funcionales de los biofilms y en la selección de las cepas de microorganismos que en él habitan. En particular, en el caso del gránulo, altas fuerzas de corte (aproximadamente 1 cm/s) aumentan la producción de EPS, hidrofobicidad de la superficie del gránulo y su gravedad específica [4].

Por otro lado, se ha demostrado que aplicar una alimentación anaeróbica tipo saciedad-hambruna también aumenta la hidrofobicidad de la superficie del gránulo, acelera la forma-

ción de agregados microbianos y crea un adecuado gradiente de oxígeno y sustratos en el gránulo [10], además de promover el almacenamiento interno de materia orgánica [11]. Al almacenar materia orgánica, la tasa de crecimiento bacteriana decrece y los microorganismos de crecimiento lento pueden desarrollarse, obteniendo gránulos compactos [12]. El tiempo de sedimentación es considerado importante para asegurar la predominancia de gránulos ya que cortos periodos de sedimentación aseguran que los flóculos sean lavados del reactor [4]. Por lo tanto, la formación de gránulos estables depende de más de un parámetro.

El mecanismo propuesto para la formación de gránulos sugiere la existencia de cuatro etapas principales (Figura 3.1): (i) interacción célula a célula, (ii) fijación de microorganismos y formación de agregados, (iii) fijación mejorada mediante la producción de polímeros extra celulares y (iv) formación del gránulo [9].

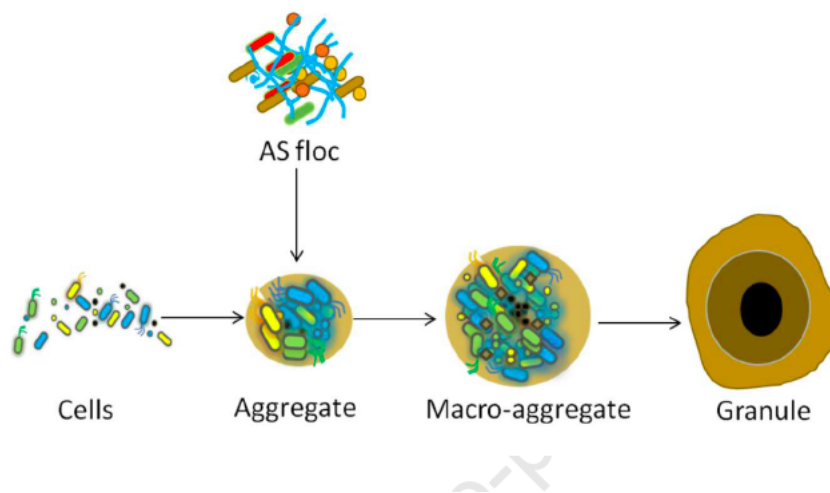


Figura 3.1: Mecanismo propuesto para la formación de gránulos aeróbicos en reactores biológicos secuenciales (SBR). Tomado de [9].

Los microorganismos no están distribuidos de igual manera en el gránulo, sino que algunas especies son más abundantes en las capas externas mientras que otras especies se encuentran en el interior de la estructura [13]. El tamaño y compacidad del gránulo crean un gradiente de oxígeno (Figura 3.2) y de sustratos, formando una estructura en capas. Existe mayor diversidad microbiana que en los flóculos ya que los gránulos aportan más nichos ecológicos debido al gradiente de sustratos en su interior. A pesar de esto, existen los mismos grupos funcionales de microorganismos en los gránulos y flóculos, pero con diferencias en las proporciones entre grupos filogenéticos a nivel de clase o filo [14]. La capa externa del gránulo se caracteriza por la presencia de oxígeno y la existencia de organismos heterótrofos y nitrificantes, que requieren oxígeno para sus procesos metabólicos. A medida que los niveles de oxígeno disminuyen hacia el centro del gránulo, nuevas especies se hacen predominantes, entre las cuales destacan los organismos acumuladores de fósforo (PAOs) y organismos denitrificantes. Gracias a esta estructura, los gránulos aeróbicos son capaces de remover simultáneamente fósforo, nitrógeno y compuestos orgánicos (medidos como demanda química de oxígeno - COD) del agua [6].

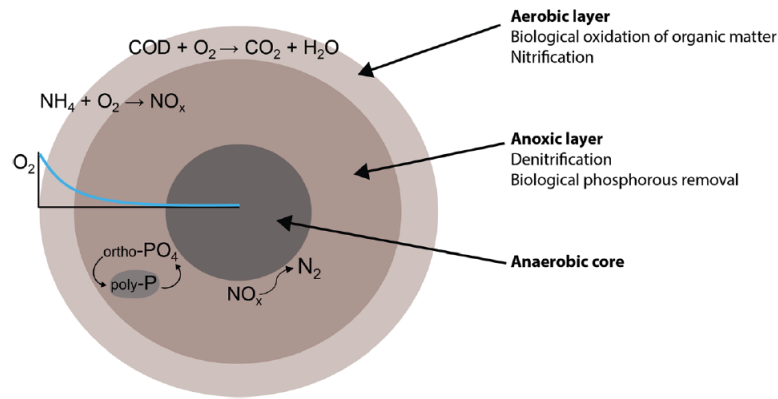


Figura 3.2: Corte esquemático de gránulos anaeróbicos con los diferentes procesos de conversión de materia orgánica, nitrógeno y fósforo, que tienen lugar dentro de las diferentes zonas redox. Tomado de [8].

3.2. Remoción Biológica de Fósforo Mejorada

Los gránulos aeróbicos facilitan la eliminación biológica de fósforo mejorada (EPBR por sus siglas en inglés), un proceso que utiliza la capacidad de ciertos organismos para almacenar compuestos orgánicos en condiciones anaeróbicas a cambio de fosfato intracelular. Siempre que haya un aceptor de electrones disponible posteriormente, como nitrato u oxígeno, los organismos pueden utilizar las sustancias orgánicas almacenadas para crecer. Una parte de la energía producida se emplea para captar de nuevo el fosfato y almacenarlo como polifosfato (Poly-P) [15]. Los principales organismos capaces de almacenar polifosfato se denominan organismos acumuladores de fósforo (PAOs), los cuales tienen una ventaja competitiva sobre los heterótrofos gracias a la reserva energética que les proporciona el polifosfato almacenado. Esta es la razón principal por la que hay una predominancia de PAOs en el gránulo. La principal especie de PAO estudiada se llama *Candidatus Accumulibacter phosphatis*, o simplemente *Accumulibacter*, y su metabolismo es la base de la mayoría de los modelos propuestos. Como se mencionó anteriormente, los microorganismos involucrados en EPBR pueden usar nitrato como aceptor de electrones en condiciones anóxicas para la oxidación de PHA, un polímero orgánico almacenado, por lo que las PAO pueden acumular fosfato y desnitrificar simultáneamente.

El metabolismo de estos organismos posee dos etapas, que se distinguen por la presencia y ausencia de oxígeno, como se muestra en la Figura 3.3. En condiciones anaeróbicas, los ácidos grasos no volátiles se absorben y se almacenan como PHA. La energía para este proceso de síntesis se obtiene de la hidrólisis de polímeros intracelulares almacenados, como Poly-P o glucógeno. A medida que los polímeros de fosfato se descomponen, moléculas de fosfato se liberan al medio acuoso, aumentando así su concentración. En la fase aeróbica, el oxígeno genera cationes estabilizadores, lo que permite que el PHA acumulado sea oxidado por un aceptor de electrones disponible, como NADH, por ejemplo, y se libera ATP. Este ATP puede ser utilizado para absorber fosfato y acumularlo como polifosfatos, para sintetizar glucógeno o para el crecimiento celular [16].

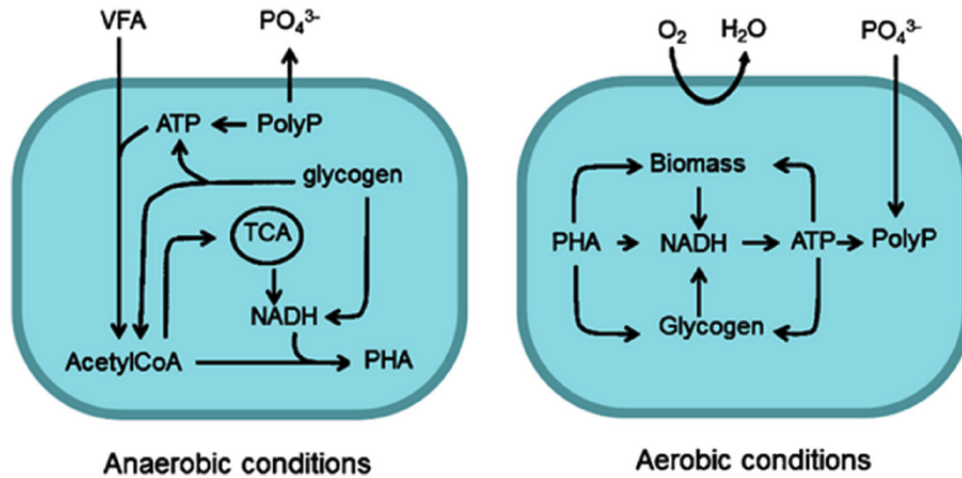


Figura 3.3: Vías metabólicas de PAO en condiciones aeróbicas y anaeróbicas. Tomado de [16].

Desde un punto de vista metabólico, las PAOs se caracterizan principalmente por la capacidad de absorber anaeróbicamente sustratos orgánicos y almacenarlos como PHA utilizando la energía de la hidrólisis del Poly-P almacenado sin la necesidad de aceptores de electrones. En particular, las PAO prosperan con ácidos grasos de cadena corta (AGCC) como el acetato y el propionato. Si el tiempo de retención de las aguas servidas en las cañerías es lo suficientemente grande tal que se produzca una fermentación en su interior, una porción significativa de la materia orgánica se convierte en AGCC, por lo que en esos casos, el acetato es el sustrato más importante para los procesos EPBR. Es por esto que cuando los procesos EPBR son modelados matemáticamente se asume que las PAOs utilizan solamente AGCC, o simplemente acetato[17].

El Poly-P es considerado como un polímero de almacenamiento de energía para la absorción anaeróbica de sustratos. En estudios tempranos sobre EPBR se consideró el Poly-P como la única fuente de energía para las PAOs bajo condiciones anaeróbicas, sin embargo, ahora se considera que el glucógeno también provee a estos microorganismos de energía durante la absorción anaeróbica de sustratos. La energía requerida para los procesos anaeróbicos se utiliza principalmente para el transporte de sustratos externos hacia la célula, la conversión de sustratos a PHA y el mantenimiento de las células durante este periodo. Por otro lado, en la fase aeróbica las PAOs crecen gracias al PHA almacenado anaeróbicamente y este también es utilizado para recuperar los niveles de glicógeno y Poly-P. Como consecuencia, el glucógeno y Poly-P intracelulares aumentan, el PHA almacenado disminuye y el ortofosfato soluble presente en el agua es absorbido por las células [17].

El almacenamiento y el consumo de glucógeno y Poly-P cíclico conducen a un consumo de energía significativo, además del requerimiento de energía para el crecimiento, por lo que se dice que las PAOs tienen un metabolismo de pérdida de energía. El valor de rendimiento de los PAO es un 13% más bajo que el de la biomasa heterótrofa habitual, por lo que la absorción rápida de sustratos en la fase anaeróbica es la clave para que las PAO sobrevivan en el proceso de EBPR. La recuperación de Poly-P y glucógeno a niveles suficientes durante la fase aeróbica parece tener mayor prioridad que el crecimiento en un contexto ecológico. Los microorganismos que son capaces de almacenar sustratos rápidamente y consumirlos de

manera más equilibrada tienen una fuerte ventaja competitiva sobre los microorganismos sin la capacidad de almacenamiento de sustratos [17].

Con respecto al transporte de sustratos hacia el interior de las células, este ocurre a través de proteínas de membrana para el caso del Acetato y del Ortofosfato, mientras que en el caso del Oxígeno no se requieren proteínas de transporte ya que su consumo está directamente asociado a la cadena transportadora de electrones que se encuentra en la membrana de la célula. En el caso de las proteínas de transporte de membrana, si la concentración de soluto es muy alta, los canales de difusión se saturan y la velocidad de transferencia es más lenta, por lo que la cinética de transporte se puede representar mediante una ecuación de Michalis-Menten. Se cree que el transporte de Acetato en PAOs es similar al de bacterias *E. coli*, el que está mediado por una proteína de membrana tipo permeasa (actP) [18]. Se identificó un homólogo de actP en el genoma de *Accumulibacter* por lo que se predice que esta transporta acetato a través de la membrana celular [19]. Para el transporte de fosfato existen dos sistemas, que se activan dependiendo de la concentración de fosfato en el medio, el sistema Pi inorgánico de baja afinidad (Pit) y el Pi específico de alta afinidad (Pst)[20]. La existencia de ambos sistemas se debe a la capacidad de los microorganismos para adaptarse a los cambios en la concentración de fosfato en el ambiente, por lo que el sistema Pit se utiliza en concentraciones altas de fosfato, mientras que el sistema Pst se suprime durante la operación EBPR hasta que los niveles de fosfato son muy bajos. [21].

3.3. Arquitectura del Gránulo

Generalmente, los gránulos se simplifican como una esfera multicapa, con gradientes decrecientes de oxígeno y sustratos, desde el exterior hasta el núcleo del gránulo. Sin embargo, estos muestran una alta heterogeneidad estructural, contienen poros, canales, estructuras en forma de hongo y vacíos llenos de agua [8], lo cual es omitido al simplificar su estructura. La mayor parte de las investigaciones y modelos llevados a cabo hasta el momento se han centrado en aspectos relacionados con la ingeniería del reactor y las variables operativas necesarias para inducir la granulación, mientras que los modelos conceptuales y matemáticos de los gránulos asumen una forma esférica con un cascarón externo y un núcleo interior. Aunque este modelo ha facilitado la comprensión del proceso, estos generalmente se validan a partir de resultados a macro escala, mientras que las observaciones a micro escala son limitadas o inexistentes. A pesar de que la arquitectura física de los gránulos está intrínsecamente relacionada con la transferencia de masa, los procesos de conversión y la partición del dominio sólido en subdominios dentro del gránulo, muy pocos reportes describen detalles de la micro estructura del gránulo [22].

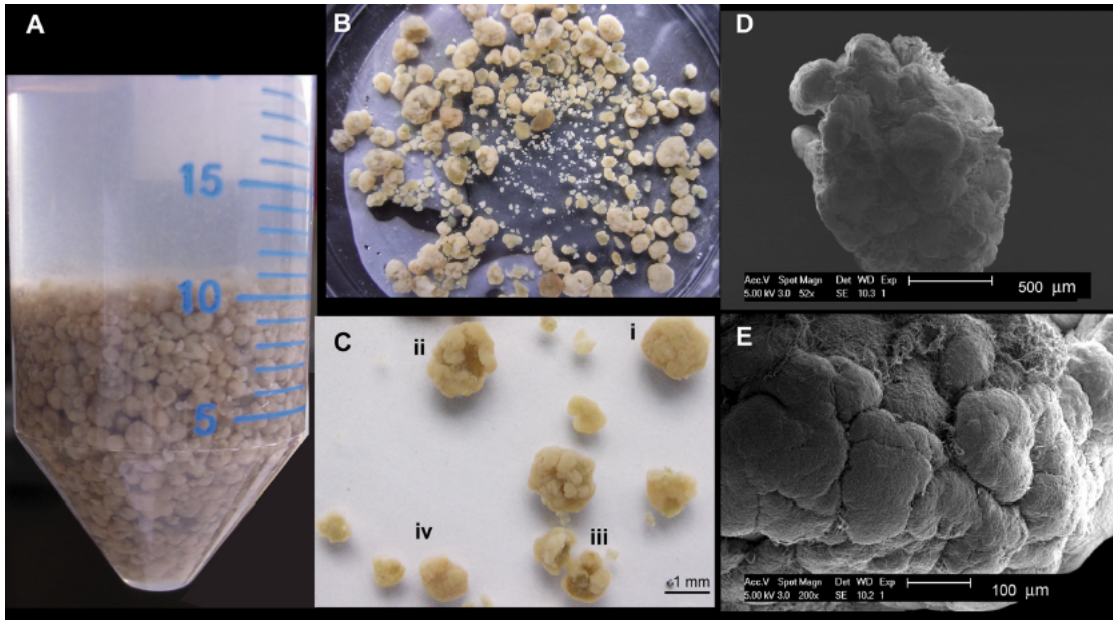


Figura 3.4: (A) Macroimpresión del lodo granular aeróbico. (B) Gránulos cultivados en propionato y muestreados el día 169. (C) Estereomicrografía de gránulos en diferentes etapas de "vida". (D) Imagen SEM de bajo aumento de un gránulo que muestra grandes aglomerados. (E) Imagen SEM de la superficie de un gránulo. Tomado de [22]

La apariencia general de un gránulo maduro se puede observar en la Figura 3.4 (A, B y C), que muestra gránulos compuestos por (i) entidades esféricas que presentan grandes estructuras de aglomerados, (ii) entidades casi esféricas de las cuales se han desprendido aglomerados, (iii) gránulos rotos y (iv) gránulos pequeños y medianos en crecimiento a partir de aglomerados desprendidos. Estas cuatro formas muestran el ciclo de vida de un gránulo. Analizando la estructura a una escala microscópica, como se aprecia en las Figuras 3.4 D y E, se pueden ver los aglomerados que se forman en el gránulo, compuestos principalmente por poblaciones densas de bacterias, y también filamentos de bacterias entre los aglomerados[22].

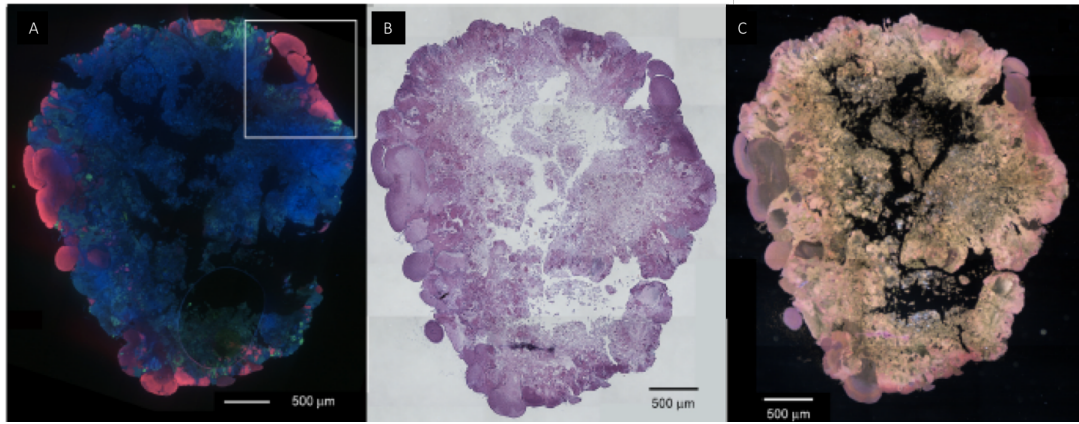


Figura 3.5: Imágenes de corte transversal de un gránulo cultivado con acetato muestreado el día 169. (A) Imagen de fluorescencia que muestra grupos de bacterias similares a *Accumulibacter* en rosa. Las bacterias similares a *Competibacter* se muestran en cian y otros microorganismos se muestran en azul. (B y C) Imágenes de campo claro y campo oscuro, respectivamente, de una sección contigua a la del panel A y teñidas con H&E que muestran la estructura de aglomerados de los grupos. Tomado de [22]

Las imágenes de cortes transversal muestran que los aglomerados están compuestos principalmente por bacterias PAO, específicamente del tipo *Accumulibacter*, y que estas estructuras protuberan desde la periferia del gránulo, como se puede apreciar en la Figura 3.5. En gránulos más grandes, puede penetrar menos sustrato, por lo que inherentemente puede crecer menos biomasa en las zonas internas, y la biomasa que logra prosperar a pesar de ello eventualmente decrece dejando espacios vacíos en el gránulo y como consecuencia este se vuelve poroso. Los gránulos estudiados por Gonzalez et. al [22] presentaron cavidades, particularmente en las zonas internas, mientras que en las zonas externas se encuentran densas poblaciones microbianas, las que pueden ser observadas mediante el contraste en el modo campo oscuro de la Figura 3.5 C, en el que aparecen más oscuras y más cercanas en longitud de onda al fuerte color rosa y púrpura de la tinción H&E original [22]. La ampliación presentada en la Figura 3.6 muestra con mayor detalle como los aglomerados de células se forman de adentro hacia afuera, lo que permite deducir que los aglomerados no son el resultado de la agregación de microcolonias múltiples.

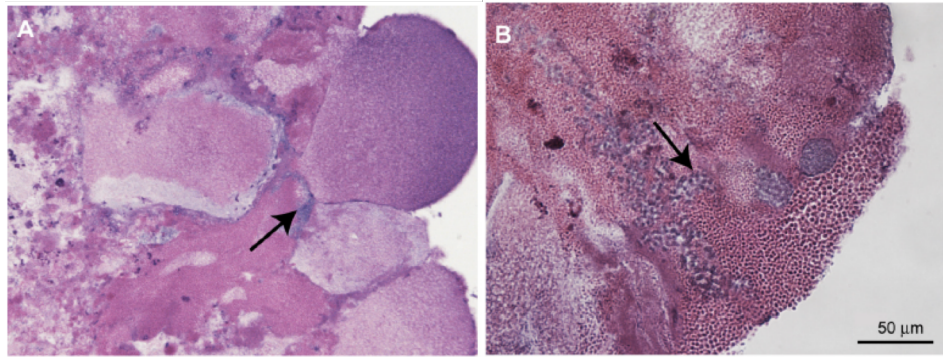


Figura 3.6: Imágenes de campo claro que muestran aglomerados de biomasa que crecen hacia fuera del gránulo. La barra de escala en el panel B se aplica de manera similar al panel A. Tomado de [22]

Este estudio también se estudió la porosidad de los gránulos utilizando el programa *ImageJ*, en el que para cada imagen binaria correspondiente a una ubicación radial diferente se estimó el valor de la porosidad como el porcentaje de vacíos con respecto al área total del gránulo [22]. La porosidad en función de la distancia radial de los gránulos se estimó utilizando imágenes de una serie de cortes finos. Como resultado se obtiene que el espacio ocupado por los espacios vacíos en la zona central del gránulo es de aproximadamente del 35 al 40 %, mientras que la porosidad estimada en la zona es de aproximadamente 10 %, como se muestra en Figura 3.7.

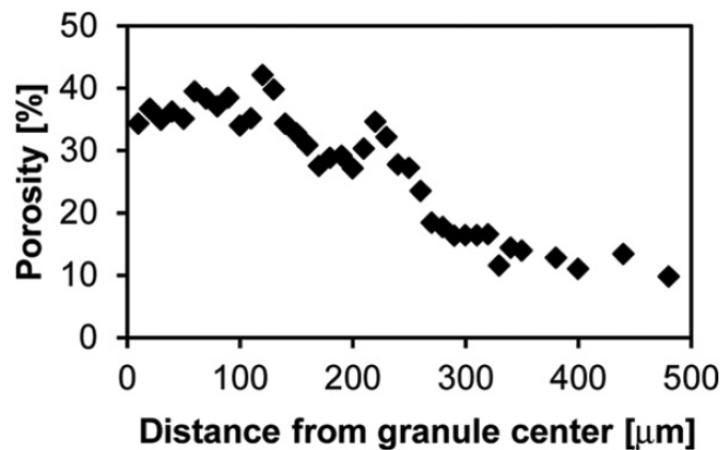


Figura 3.7: Porosidad interna como función de la distancia al centro del gránulo. Tomado de [22]

Dada la existencia de los gránulos en el reactor y su participación activa en la separación/-conversión de fosfatos, parece oportuna la inclusión de su estructura interna en los modelos. Esto permitiría mejorar el diseño futuro de reactores de tratamiento de aguas residuales con foco en compuestos fosforados.

En resumen, se puede decir que los gránulos aeróbicos son estructuras compactas con excelentes propiedades de sedimentabilidad y de remoción de compuestos orgánicos de las aguas servidas. Estos se forman en un reactor biológico secuencial en condiciones de alimentación tipo saciedad-hambruna. El gran tamaño y compacidad de los gránulos genera un gradiente de concentraciones en su interior, lo que favorece la partición de nichos biológicos. Están conformados por una diversidad de microorganismos, los que juegan roles diferentes en el proceso de remoción de nutrientes. En particular, los organismos acumuladores de fósforo (PAOs) son la especie con mayor predominancia en el gránulo. Las bacterias tipo PAO poseen un metabolismo dividido entre una fase anaeróbica, en la que ocurre la remoción de ácidos grasos no volátiles y liberación de fosfato al medio, y una fase aeróbica, en la que gracias a la presencia de oxígeno, estas bacterias son capaces de capturar el fosfato liberado y almacenarlos como polímeros. Gracias al almacenamiento de polímeros, las bacterias PAOs forman estructuras de aglomerados que crecen desde adentro hacia afuera y entregan estabilidad al gránulo.

Capítulo 4

Estado del Arte

Para modelar el proceso de granulación es necesario, en primer lugar, entender cómo operan las plantas de tratamiento que utilizan esta tecnología, en términos de filosofía de operación, rendimiento y eficiencia de remoción, y las características de los gránulos contenidos en el interior de los reactores. En segundo lugar, se deben estudiar las diferentes estrategias de modelamiento que han sido utilizadas hasta el momento, y diferenciar los dominios que se abarcan en los distintos modelos implementados. El presente capítulo busca presentar una aplicación a gran escala del lodo granular aeróbico y el estado del arte del modelamiento de este sistema.

4.1. Aplicación a gran escala

Recientemente, la tecnología de lodos granulares aeróbicos se ha ampliado e implementado para el tratamiento de aguas residuales industriales y municipales bajo el nombre comercial de Nereda[®]. Esta tecnología se basa en el uso de un reactor biológico secuencial (SBR) y un ciclo que cuenta de 3 etapas principales: 1-Llenado y vaciado simultáneos con una operación fed-batch en la que el agua residual es bombeada al reactor desde el fondo en condiciones anaeróbicas, mientras que el agua limpia sale por rebalse de la parte superior del reactor, 2- Aireación, dando lugar a la etapa aeróbica de bioconversión y 3-Rápida sedimentación, lo que permite la separación del efluente clarificado y el lodo biológico. El ciclo de operación se puede apreciar en la Figura 4.1. Nereda[®] fue inventada por la Universidad Tecnológica de Delft en Países Bajos y es una de las tecnologías pioneras utilizadas para ampliar las plantas de tratamiento de aguas residuales de lodos granulares aeróbicos.

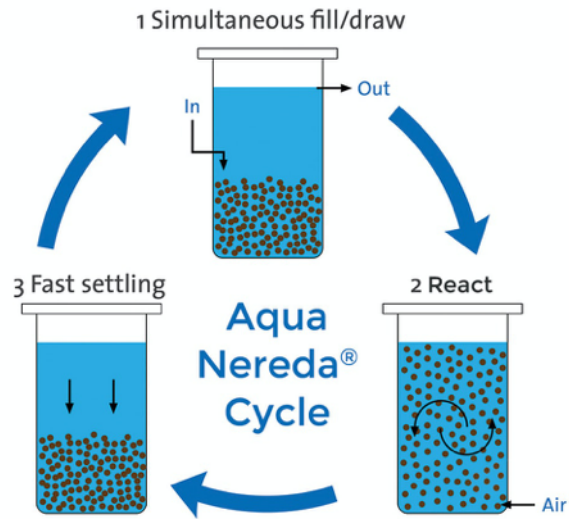


Figura 4.1: Representación de un ciclo de operación en un reactor Nereda® de granulación aeróbica [23].

En julio de 2013, se puso en funcionamiento una instalación a gran escala basada en el proceso aeróbico de lodos granulares en Garmerwolde, Países Bajos [6]. Esta trata el 41 % del total de afluentes recibidos en Garmerwolde ($28,600 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$). Las aguas residuales ingresan a la planta y pasan por tamices de 6 mm, para luego ir a una etapa de desarenado y finalmente a un estanque de 4.000 m^3 que cumple la función de amortiguar las aguas entrantes. Una vez finalizado el pretratamiento descrito, las aguas residuales son alimentadas hacia dos reactores de granulación aeróbica (altura 7,5 m, volumen 9.600 m^3 cada uno) como se muestra en la Figura 4.2 y el efluente tratado se descarga directamente de los reactores hacia el cuerpo de agua receptor a través de vertederos de desbordamiento fijos estáticos (rebalse). Durante la etapa de aireación la concentración de oxígeno disuelto se mantiene entre $1,8$ y $2,5 \text{ mgL}^{-1}$. Con respecto al lodo biológico en exceso, este es retirado de los reactores y almacenado en un estanque estabilizador de lodos de 400 m^3 . Para prevenir la liberación anaeróbica de fósforo en el estanque y garantizar una descarga continua hacia los espesadores mecánicos de cinta, el tiempo de retención de los lodos en exceso se reduce al mínimo. Las características de las aguas servidas que ingresan a la planta se pueden apreciar en la Figura 4.3, así como también los valores permitidos para el efluente según las normas de los Países Bajos y las concentraciones obtenidas en el efluente real de la planta. Se puede ver que para todos los parámetros medidos se obtienen valores inferiores a los requeridos.

Time [min]	15	30	45	60	75	90	105	120	135	150	165	180	195	210	225	240	255	270	285	300	315	330	345	360	375	390	
REACTOR 1																											
Fill/ draw	█	█	█	█																							
Reaction/Aeration					█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█
Settling																										█	█
REACTOR 2																											
Fill/ draw															█	█	█	█									
Reaction/Aeration	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█	█													
Settling													█	█													

Figura 4.4: Tiempos de operación la planta de granulación aeróbica en Garmerwolde. Tomado de [6]

En las condiciones anaeróbicas obtenidas durante la alimentación, el carbono orgánico fácilmente biodegradable será convertido en polímeros de almacenamiento por las PAOs que existen en el lecho de gránulos. Este proceso tiene como consecuencia la liberación de ortofosfato al seno del líquido, según lo que se puede apreciar de la Figura 4.5 como peaks de fosfato relativamente altos al comienzo del periodo de aireación. En el periodo de aireación ocurre en proceso de absorción de fosfato.

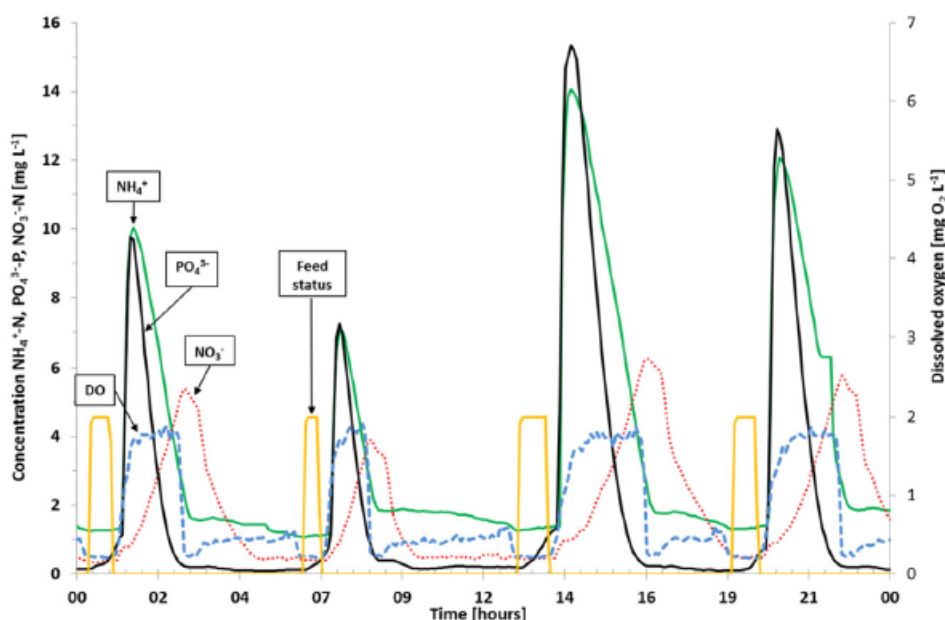


Figura 4.5: Ciclo operativo típico en la planta aeróbica de lodos granulares. Concentración de amonio (línea continua verde), fosfato (línea continua negra), nitrato (línea discontinua roja) y oxígeno (línea discontinua azul). Tomado de [6]

El lodo granular aeróbico generalmente consiste en gránulos de tamaño desde $200 \mu m$ hasta $5.000 \mu m$, en particular, la planta en Garmerwolde presenta la distribución de gránulos de la Figura 7.2. Más del 80% de los sólidos suspendidos totales del reactor consisten en gránulos mayores a $0,2 mm$, con un 60% mayor a $1 mm$. No se observó prácticamente ni un gránulo mayor a $0,2 mm$ en el lodo exceso que es retirado del reactor, lo que indica una buena separación entre la biomasa de sedimentación lenta y rápida. En la Figura 4.7 se puede

apreciar la diferencia entre gránulos y flocúlos en términos de apariencia general.

class	class mean diameter	concentration
(μm)	(μm)	(kg m^{-3})
0–212	106	1.28
212–425	318	0.82
425–630	527	0.28
630–1000	815	0.63
1000–1400	1200	1.03
1400–2000	1700	1.39
>2000	3000	1.22

Figura 4.6: Distribución del tamaño de los gránulos en la planta de lodos granulares aeróbicos en Garmerwolde, Holanda. Tomado de [24].

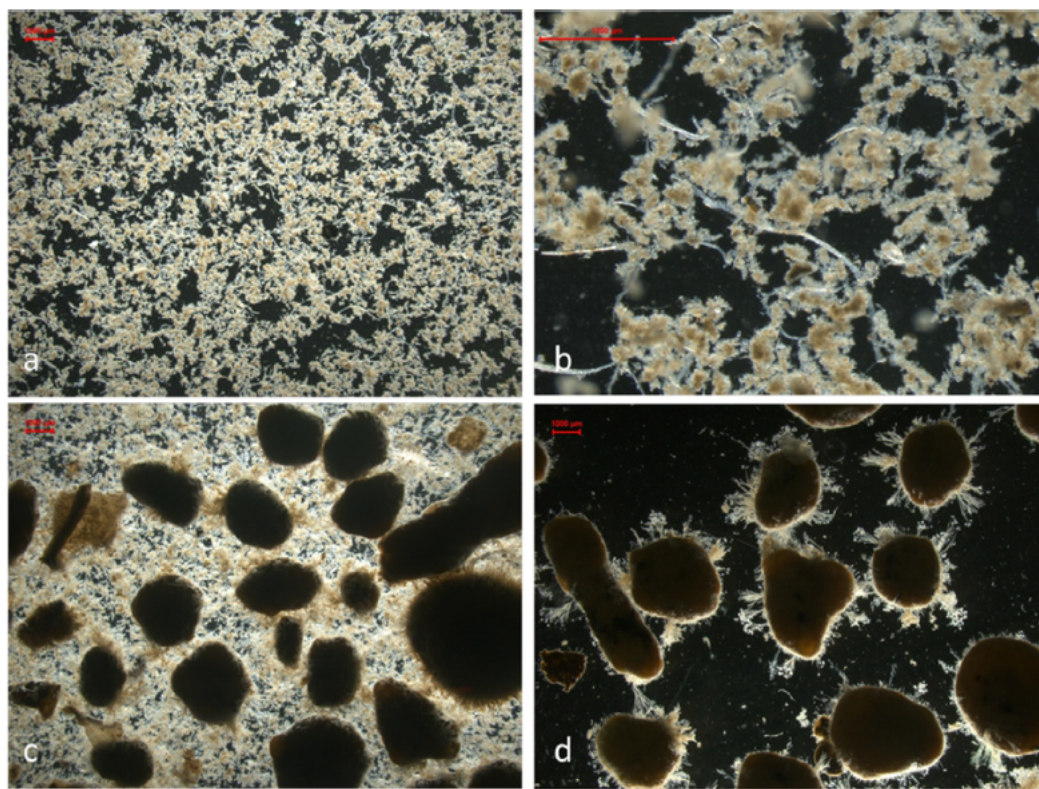


Figura 4.7: Lodo granular aeróbico: (a, b) biomasa en la parte superior del lecho de lodo granular, (c) muestra mixta del seno del líquido, (d) gránulos tamizados y lavados con agua. Tomado de [6]

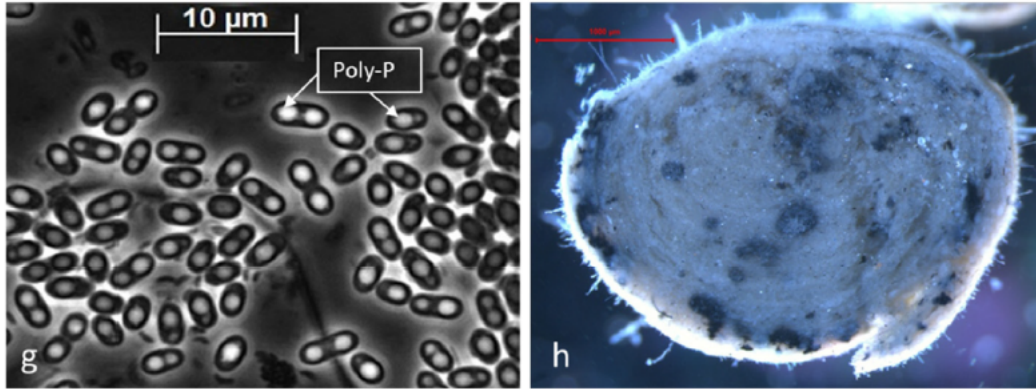


Figura 4.8: (g) Aumento al $1000\times$ de los organismos acumuladores de fosfato que se encuentran en gránulos en cerámica y (h) gránulos rebanados. Tomado de [6]

Las ventajas del lodo granular aeróbico frente a los lodos activados tradicionales radican en su estructura y en la biomasa contenida en su interior. Los flóculos son estructuras filamentosas, con poca sedimentabilidad y difícil separación sólido-líquido, mientras que los gránulos se presentan como una estructura compacta y densa. En cuanto a los parámetros operativos, el lodo granular aeróbico presenta mayor concentración de biomasa ($> 8 \text{ g L}^{-1}$ v/s 4 g L^{-1}), lo que se traduce en una mayor eficiencia de remoción de materia orgánica, nitrógeno y fósforo [8], menor índice volumétrico de lodo (IVL) (45 mL g^{-1} v/s 100 mL g^{-1}) y mayores velocidades de decantación (15 m/h vs 8 m/h), permitiendo una disminución del volumen requerido para el tratamiento en un 33%. Junto con la reducción del volumen necesario para el tratamiento, este tipo de sistemas permite reducir el consumo energético hasta en un 63% [6].

4.2. Modelos Reportados

A partir de diversas investigaciones a escala de laboratorio se ha concluido que este sistema promete una excelente implementación en escalas de tamaño real, y sin duda que para mejorar su diseño, operación e implementación, el modelamiento matemático es una importante herramienta de evaluación [7]. Los perfiles de concentración de sustratos y oxígeno son el resultado de diversos factores, tales como el coeficiente de difusión, la tasa de conversión, tamaño del gránulo, distribución espacial de la biomasa y su densidad. Estos factores afectan estrechamente unos a otros, por lo que sus efectos no pueden ser estudiados experimentalmente [7].

4.2.1. Modelos orientados a los gránulos

Modelos simples permiten describir y estudiar diversos aspectos asociados a este tipo de sistema de tratamiento, tales como el tamaño de los gránulos en conjunto con el proceso de granulación. En particular, el modelo propuesto por [25] busca predecir el tamaño promedio de un gránulo al día t de operación:

$$R(t) = \frac{R_{max}}{1 + \exp^{-k(t-t_0)}} \quad (4.1)$$

Donde R_{max} es el radio máximo de un gránulo aeróbico, k la tasa específica de crecimiento por diámetro (1/día) y t_0 es el tiempo de retraso. Este tipo de modelos está basado principalmente en experimentos y validación, sin embargo no son aplicables para describir el complejo proceso de granulación.

Por otro lado, las biopartículas en un reactor de lodos activados abarcan una amplia gama de tamaños, densidades y velocidades de sedimentación. Mientras que los flóculos son formados por bacterias en modo de crecimiento suspendido, se cree que los precursores de gránulos compactos están formados por bacterias en un modo de crecimiento adherido [26]. El modelo generado por Li et al 2009. [27] busca describir la dinámica de la biomasa mediante un enfoque seccional, es decir, que asume el mismo coeficiente de rendimiento observado (Y_{obs}) para todas las secciones de lodo. En este caso, la variación de la biomasa en el tiempo depende de factores como la remoción orgánica total, la tasa de descarga de lodo, el factor de descarga de lodo efectivo, entre otros. Al validar este modelo con datos experimentales se concluye que la descarga selectiva de flóculos sueltos es un factor operativo de crucial importancia para lograr la granulación en el reactor.

Los modelos empíricos suelen ser descriptivos y no son capaces de simular los procesos de granulación aeróbica en otros reactores o cultivos bajo diferentes condiciones, dada la complejidad de la inmovilización microbiana. Existen diversas interacciones internas entre las variables del proceso, como el crecimiento, el almacenamiento y la respiración endógena, y características del lodo, incluido el desprendimiento de biomasa, la transferencia y difusión de oxígeno [7]. El crecimiento de gránulos aeróbicos luego de la interacción célula a célula es similar al crecimiento de un biofilm, sin embargo, a diferencia de biofilm que la inmovilización inicial de las células ocurre en un superficie sólida, la granulación es un proceso de auto inmovilización [7], por lo que resulta interesante estudiar el aumento del tamaño de gránulo como resultado del crecimiento microbiano. Ni et al. 2010 [28] propuso que la progresión del tamaño de gránulo está dado por la siguiente ecuación:

$$\frac{dR}{dt} = u_L \quad (4.2)$$

En esta ecuación, u_L es la velocidad de adhesión en la superficie del gránulo, la que se puede desglosar como la suma de la velocidad con la que los componentes particulados se separan de la superficie del gránulo, la velocidad a la cual las células y partículas suspendidas en el seno del líquido se adhieren a la superficie de gránulo y de la velocidad advectiva del fluido. A través de la validación mediante 3 casos de estudio se demostró que este modelo es aplicable para describir adecuadamente el proceso de granulación aeróbica y se podría describir cuantitativamente el proceso de granulación aeróbica en términos de perfiles de radio medio. Sin embargo, aspectos tales como el aumento de la densidad y tamaño de las biopartículas, la muerte celular debido a la falta de sustrato en la biomasa de las capas interiores y la selección del tamaño de partículas a través de la sedimentación no están incluidos en el modelo descrito.

También se consideran los procesos físico-químicos en el gránulo, tales como la transferencia de masa, el desprendimiento de gránulos y su porosidad. La transferencia de masa es uno

de los fenómenos más importantes en todos los procesos de crecimiento inmovilizado [7]. Para describir este proceso se han utilizado modelos simples en una dimensión que consideran la densidad y difusión dentro del gránulo constantes y asumen una forma esférica [29]. Sobre la base de un modelo de biofilm, las distribuciones espaciales bidimensionales de solutos se pueden calcular a partir de una ecuación de reacción y difusión en estado estacionario para cada uno de los solutos, ya que la difusión es mucho más rápida que el crecimiento microbiano [30]:

$$D_i \left(\frac{\partial^2 S_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S_i}{\partial y^2} \right) + r_i = 0 \quad (4.3)$$

Donde D_i es la difusividad del soluto i y r_i es la la tasa de conversión local de i .

Por otro lado, también se han clasificado los gránulos en varias fracciones de tamaño [31], en donde gránulos con diferentes tamaños tienen sus propios perfiles de concentración y velocidades de reacción correspondientes. De acuerdo con la distribución del tamaño de los gránulos por número, el tamaño de los gránulos se clasifica en M fracciones, donde el radio de los gránulos en la m -ésima clase de tamaño (R_m) se describe como:

$$R_m = R_{min} + \frac{1}{2} \left((2m - 1) \frac{R_{max} - T_{min}}{M} \right) \quad (4.4)$$

Donde R_{min} y $R_{máx}$ son el radio mínimo y máximo del gránulo, respectivamente.

Para describir el comportamiento de los componentes en las reacciones biológicas se divide el gránulo en varias capas del mismo tamaño, en donde la concentración de sustratos en cada capa es constante. El balance de masa del componente i para una capa de gránulo en la m -ésima fracción de tamaño ($S_m \hat{i}$) se puede escribir como:

$$\frac{\partial S_m^i}{\partial t} = \frac{\partial^2 S_m^i}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \cdot \frac{\partial S_m^i}{\partial R} - \frac{k_m^i}{D_e^i} \quad (4.5)$$

Donde k_m^i es la tasa de consumo del componente i en la fracción m y D_e^i es la difusión del componente i en el gránulo.

Condiciones de borde:

- $S_m^i = S_{sur}^i$, en $R = R_m$
- $\frac{\partial S_m^i}{\partial R} = 0$, en $R = \delta_m^i$

Con δ_m^i la profundidad de penetración del componente i en los gránulos de fracción de tamaño m -ésimo [31] y R es la distancia de cada fracción al centro del gránulo.

En cuanto a la transferencia de masa externa, se considera que los gránulos se comportan como biofilms (los que han sido ampliamente estudiados), y se considera que existe una capa de líquido casi estancada en la superficie del gránulo y que por lo tanto existe una resistencia máxima a la transferencia de masa en este punto [32]. La tasa de transferencia de masa externa se puede expresar como:

$$r_{emt} = k_l a_{emt} (S_b - S_s) \quad (4.6)$$

Donde $k_l a_{emt}$ representa el coeficiente volumétrico de transferencia de masa externo, S_b es la concentración de sustrato en el seno del líquido y S_s la concentración de sustrato en la

superficie del gránulo.

En cuanto al desprendimiento de fracciones de gránulos, se ha concluido que las variaciones cíclicas en el reactor pueden afectar la forma y tamaño de los gránulos, por lo que se utiliza una tasa de desprendimiento para describir este efecto [33]:

$$u_{de} = u_f \cdot \left(\frac{R - R_m}{R_m} a + b_{de} \right), \text{ si } u_f > 0, \text{ sino } u_{de} = 0 \quad (4.7)$$

Donde u_f es la velocidad de crecimiento del gránulo, R es el radio simulado, R_m el radio promedio experimental, b_{de} el coeficiente de desprendimiento y a un factor de corrección de unidades. Este enfoque es una forma útil de describir el desprendimiento en este tipo de sistemas dado que reproduce las variaciones cíclicas en el tamaño de los gránulos en condiciones de estado estacionario. En el caso de la porosidad, se sabe que esta es heterogénea a lo largo del radio del gránulo, por lo que se puede utilizar una función lineal para describir su porosidad en la zona interna y considerar constante en la capa externa [33]:

$$\epsilon(R) = 0,6 + R \frac{0,2}{R_m - \delta}, \text{ si } 0 < R < R_m - \delta \quad (4.8)$$

$$\epsilon(R) = 0,8, \text{ si } R_m - \delta < R < R_m \quad (4.9)$$

Donde R_m es el radio del gránulo y δ es la profundidad de penetración del oxígeno.

4.2.2. Modelos de tratamiento de aguas en un reactor

Para modelar los procesos de bioconversión se ha empleado el modelo de lodos activados (o ASM por sus siglas en inglés), que es el grupo de métodos matemáticos para modelar los sistemas de lodos activados. El primer modelo generado, denominado como ASM1, toma en consideración la demanda química de oxígeno (DQO), el crecimiento bacteriano y la degradación de biomasa. En general, un modelo del tipo ASM consiste en 3 aspectos importantes: 1- Variables a seguir: DQO, biomasa y nutrientes, tanto orgánicos como inorgánicos. 2- Descripción de los procesos dinámicos: lista de los diferentes procesos biológicos que ocurren. 3- Parámetros: variables que describen las condiciones de los sistemas biológicos, tales como coeficientes de saturación media, crecimiento de biomasa, tasa de muerte celular, etc. [34]. En el caso específico de la granulación aeróbica se debe incorporar en el ASM el concepto de crecimiento y almacenamiento simultáneos. Este tipo de modelamiento permite conocer el crecimiento de especies microbianas dentro del gránulo así como también su distribución espacial.

Los gránulos están compuestos por dos grupos de bacterias, autótrofas y heterótrofas, las que coexisten e interactúan en él [31]. Las especies autótrofas son responsables por la nitrificación, mientras que las heterótrofas son responsables por la oxidación del carbono orgánico. La presencia de materia orgánica en las aguas servidas crea una competencia por la demanda de oxígeno y el espacio en el gránulo entre las autótrofas y heterótrofas, lo que junto con la transferencia de masa, resulta en la estratificación de las especies en el gránulo. Uno de los modelos desarrollados para entender mejor el crecimiento de estas especies y su actividad en el gránulo establece procesos crecimiento y acumulación simultáneos en gránulos

cultivados con aguas residuales de procesamiento de soja [35]. Este modelo utiliza el modelo de lodos activados No. 3 (ASM3) para definir los procesos de bioconversión, considerando la remoción de carbono, nitrificación y desnitrificación. A través de la validación y calibración de este modelo se puede predecir que las fracciones de biomasa activa (incluye autótrofos y heterótrofos) y biomasa en el inerte es de 55,6 % y 44,4 %. Además, se puede conocer que las especies autótrofas están ubicadas principalmente en las capas externas del gránulo, donde ocurre el mayor consumo de DQO, mientras que los heterótrofos se ubican en las capas internas del gránulo. Se puede decir que este modelo es capaz de describir adecuadamente el crecimiento microbiano en un gránulo a escala piloto.

Como ha sido mencionado anteriormente, los gránulos aeróbicos son capaces de almacenar polímeros intracelularmente a través de una alimentación anaeróbica tipo saciedad/hambruna. Este fenómeno no puede ser descrito a través de ASM3, por lo que el modelo generado por Ni y Yu 2008 [35] toma en consideración el proceso de absorción, difusión de sustrato y mantenimiento celular para describir el crecimiento y almacenamiento simultáneos en el gránulo a través del consumo de sustrato rápidamente biodegradable. Una vez que el sustrato es agotado, ocurre la degradación de los polímeros almacenados. Además se considera el mantenimiento de las células y su descomposición. Dado que este modelo fue exitosamente validado a través de datos experimentales, se puede considerar como una herramienta útil para obtener información sobre los procesos de almacenamiento microbiano que ocurren en el lodo granular aeróbico.

Al modelar el almacenamiento y el crecimiento simultáneos de gránulos aeróbicos en condiciones anóxicas, se deben considerar dos fases distintas pero complementarias, es decir, saciedad y hambruna, así como su contraparte aeróbica [7]. En condiciones de saciedad se utilizan tres coeficientes de rendimiento distintivos independientes entre sí para el almacenamiento, el crecimiento directo de biomasa en las capas externas y el crecimiento de biomasa a partir de polímeros almacenados en las capas internas del gránulo. En condiciones de hambruna, la degradación de los polímeros almacenados es el paso limitante, gobernando la tasa de crecimiento [36].

Los modelos mencionados hasta el momento permiten estudiar aspectos específicos de la granulación aeróbica, pero para entender y poder mejorar el proceso global de remoción de nutrientes mediante este tipo de tratamiento se debe estudiar además el comportamiento del reactor. El avance más significativo en este campo es el establecimiento de un modelo generalizado y su aplicación para simular el SBR basado en gránulos con consideraciones de procesos biológicos, hidrodinámica del reactor, transferencia de masa y difusión [7]. En cuanto a la eliminación de nutrientes, el modelo planteado por [37] permite evaluar la remoción de nitrógeno en un reactor SBR de granulación aeróbica y los efectos de diversos factores de operación. Este modelo está basado en un sistema de ecuaciones lineales que relacionan los procesos de transporte y conversión en las etapas de saciedad y hambruna.

-Etapa de saciedad: ecuación lineal para describir el consumo de acetato para el crecimiento de biomasa, la producción de PHB y mantención celular:

$$-r_s = \frac{1}{Y_{SX}} \cdot r_X + \frac{1}{Y_{SP}} \cdot r_P + m_S X \quad (4.10)$$

-Etapa de hambruna: ecuación lineal para describir el consumo de PHA para el crecimiento de biomasa y mantención celular:

$$-r_P = \frac{1}{Y_{SX}} \cdot r_X + m_P X \quad (4.11)$$

- r_S : Tasa de consumo de acetato
- r_X : Tasa de crecimiento de biomasa
- r_P : Tasa de producción de PHA
- Y_{SX} : Rendimiento de acetato para el crecimiento de biomasa
- Y_{SP} : Rendimiento de acetato para la producción de PHA
- Y_{PX} : Rendimiento de biomasa en PHA
- m_S : Coeficiente de mantención de biomasa para crecimiento en acetato
- m_P : Coeficiente de mantención de biomasa para crecimiento en PHA
- X : Concentración de biomasa activa

Además de las reacciones biológicas de conversión, también es de suma importancia considerar la transferencia de masa, la hidrodinámica del reactor y las características físicas del gránulo para conocer el comportamiento global del reactor, por lo que Su et. al en [31] proponen un modelo que engloba todas las características a considerar del sistema. Para esto se realiza una discretización de tiempo, tamaño y segmento de lodo para las expresiones discontinuas de diferentes procesos. Los gránulos en el reactor son clasificados por tamaños luego cada gránulo se corta a lo largo del radio dando lugar a las diferentes capas, para finalmente calcular las concentraciones de las especies y las reacciones biológicas en función de cada capa, para cada tamaño de gránulo.

El modelo recibe como variables de entrada la composición de afluente, geometría del reactor, condiciones de operación y las características de los gránulos, para luego determinar las cinéticas de transferencia de masa y reacciones biológicas. Para ello, se considera al reactor SBR como una serie de reactores CSTR en una secuencia de tiempo, tal que la se puede conocer la concentración en el efluente ($S^i(t)$) a partir de la concentración en el afluente ($S^i(t - \Delta t)$) y la tasa de reacción en ese tiempo ($k^i(t)$), como indica la siguiente ecuación:

$$S^i(t) = S^i(t - \Delta t) + k^i(t)\Delta t \quad (4.12)$$

$$S^i(0) = S_0^i \text{ para } t = 0 \quad (4.13)$$

La tasa de reacción del componente i en el seno del líquido es igual a la suma de las tasas de reacción en todas las capas de todos los gránulos:

$$k^i(t) = \sum_{m=1}^M \left(\left(\sum_{n=1}^N k_{m,n}^i f_{V,m,n} \right) f_{V,m} \right) \quad (4.14)$$

Donde N es la cantidad de capas de un gránulo y M la cantidad de clases de tamaños de gránulos. $f_{V,m}$ y $f_{V,m,n}$ son las fracciones de volumen de los gránulos correspondientes a la clase m y a la capa n .

Los modelos mencionados no son muy específicos, o simplemente no consideran, la existencia de los microorganismos acumuladores de fósforo, a pesar de ser la especie con predominancia en el gránulo. A partir de esto, se ha propuesto un modelo multi escala [30] que describe la dinámica de las poblaciones microbianas y la remoción de nutrientes en un reactor SBR. En este se representa a macro escala la concentración de 6 sustratos (oxígeno, acetato, amonio, nitrato, nitrito y fosfato), tanto en el bulk como en la salida del reactor. El gránulo se representa con un arreglo espacial bidimensional en el que se consideran los principales grupos de bacterias presentes en el gránulo, dentro de los cuales se encuentran las PAOs, con modelos cinéticos específicos para cada especie.

El modelo multi escala considera tres escalas espaciales (Figura 4.9). La escala más pequeña del modelo corresponde al metabolismo individual de cada elemento considerado, luego una escala intermedia describe el arreglo espacial del gránulo y finalmente se tiene una macro escala que considera la concentración en el seno del reactor y la concentración total de biomasa. El sistema modelado corresponde a un reactor SBR de 3[L] (escala de laboratorio), utilizado previamente en varios estudios experimentales [30]. El modelo cinético para resolver este sistema está basado en el ASM1, pero incluyendo además el metabolismo de los organismos acumuladores de fósforo (PAOs), el que considera 3 polímeros de almacenamiento interno: polihidroxialcanoato (PHA), polifosfato (Poly-P) y glucógeno.

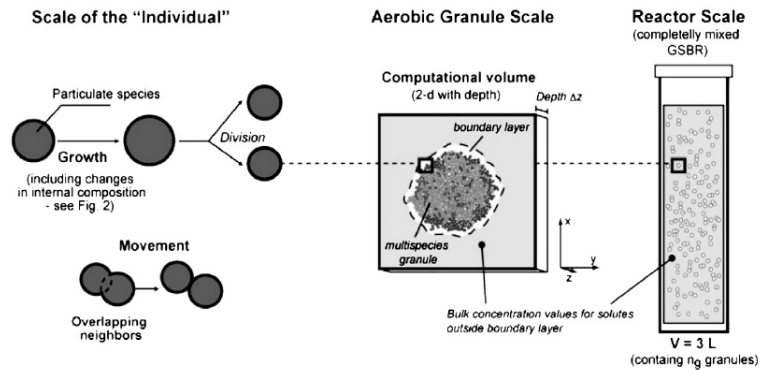


Figura 4.9: Escalas espaciales del modelo multi-escala. Tomado de [30].

El reactor de 3[L] a escala de laboratorio opera en un ciclo de 3 horas, en el que al final de cada ciclo la mitad del reactor es vaciado y relleno con 1,5[L] de alimentación fresca (para simular la operación real). Se asume que tanto el vaciado como la alimentación ocurren de manera instantánea, es decir que la concentración de sustrato se convierte en el promedio ponderado en volumen de las concentraciones de sustrato en el afluente y la que permanece en el reactor [30]. El cambio de concentración del soluto i en el tiempo se puede describir como:

$$\frac{dS_{i,bulk}}{dt} = n_g r_i(t) \quad (4.15)$$

Donde n_g es el número de gránulos en el reactor y r_i es la tasa de conversión global del

soluto i en un gránulo. Cabe destacar que este modelo no considera las conversiones por la biomasa suspendida no en forma granular, como los flóculos por ejemplo.

El dominio computacional utilizado para representar el gránulo representa la sección transversal de este en dos dimensiones. Como se mencionó previamente, la distribución espacial de los solutos en este caso se pueden calcular a partir de una ecuación de difusión/reacción en estado estacionario, ya que la difusión es más rápida que el crecimiento microbiano [30]:

$$D_i \left(\frac{\partial^2 S_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S_i}{\partial y^2} \right) + r_i = 0 \quad (4.16)$$

Donde D_i es la difusividad del soluto i y r_i es la la tasa de conversión local de i . Esta ecuación se resuelva tanto en el gránulo como en la capa límite al rededor, mientras que para el resto del dominio computacional se asume mezcla perfecta.

La tasa de conversión local se obtiene al integrar las cinéticas de todos los procesos involucrados en la conversión de un soluto dado. Por ejemplo, en el caso del ortofosfato, el cambio en su concentración depende de 4 procesos: almacenamiento de acetato ($r_{SA}^{(AN)}$), almacenamiento aeróbico de Poly-P ($r_{PP}^{(O_2)}$) y almacenamiento de poli-P mediante nitratos ($r_{PP}^{(NO_3)}$) y nitritos ($r_{PP}^{(NO_2)}$), por lo tanto la tasa conversión local del ortofosfato se puede describir como:

$$r_{PO_4} = \frac{dS_{PO_4}}{dt} = Y_{PO_4} \cdot r_{SA}^{(AN)} - r_{PP}^{(O_2)} - r_{PP}^{(NO_3)} - r_{PP}^{(NO_2)} \quad (4.17)$$

La tasa de r_{PO_4} es la contribución parcial de una sola partícula de biomasa a la tasa de bioconversión neta de fosfato de todo el gránulo, $r_{PO_4,g}$. La tasa por gránulo proviene de los aportes de todas las partículas de biomasa que lo componen en un instante dado (X):

$$r_{PO_4,g} = \sum_X r_{PO_4} \quad (4.18)$$

La tasa neta por gránulo se multiplica por el número de gránulos en el reactor para producir la tasa de conversión a escala del reactor [30]:

$$r_{PO_4,bulk} = \frac{dS_{PO_4,bulk}}{dt} = n_g \cdot r_{PO_4,g} \quad (4.19)$$

En este caso se fija el diámetro máximo del gránulo en 1100 μm . Finalmente se simula la operación a largo plazo del SBR durante 2 años (730 días).

Este modelo permite seguir las concentraciones de los solutos en el seno del líquido, como se muestra en la Figura 4.10. Estos resultados son comparables con datos experimentales de reactores a escala de laboratorio, lo que permite validar adecuadamente el modelo.

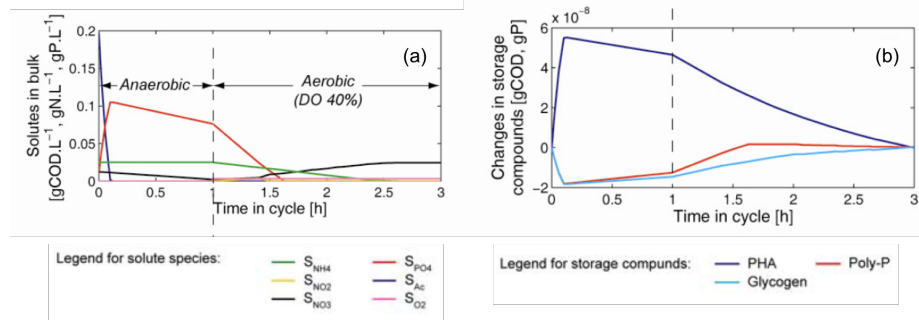


Figura 4.10: Resultados de un ciclo de tres horas representativo del estado maduro (en el día 700 de operación). (a) Concentración en el seno para todos los solutos estudiados. (b) Cambio absoluto en la masa de polímeros de almacenamiento interno. Tomado de [30].

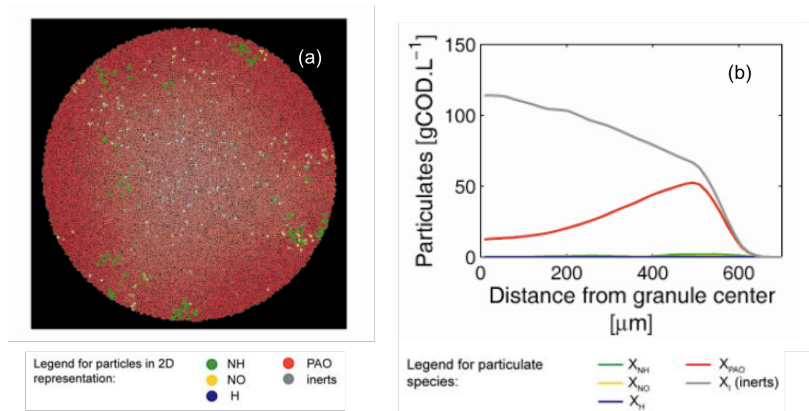


Figura 4.11: Resultados de un ciclo de tres horas representativo del estado maduro (en el día 700 de operación). (c) Distribución 2D de los grupos bacterianos. (d) Distribución radial promedio de grupos bacterianos e inertes. Tomado de [30].

Uno de los aspectos llamativos de esta propuesta es que el metabolismo propuesto para las PAOs considera la existencia y acumulación de polímeros intracelulares, además de integrar por primera vez las dinámicas internas de los microorganismos convivientes en un gránulo, la difusión de sustratos al interior del gránulo y la operación del reactor a gran escala [7].

En resumen, se puede decir que el modelamiento matemático puede servir como una valiosa herramienta al momento de evaluar e implementar el tratamiento de aguas mediante granulación aeróbica. A pesar de que los modelos existentes presentan limitaciones, su aplicación debería ir en aumento gracias a las mejoras en capacidad computacional de cálculo, que permiten acercarse aún más a la realidad de este complejo sistema biológico. Para mejorar el modelamiento matemático del lodo granular aeróbico se debe ampliar el conocimiento en el aumento simultaneo de la densidad y el tamaño de las biopartículas, de la rotura debido a la muerte celular de la biomasa interna y la selección del tamaño de las partículas por sedimentación, los que son todos elementos importantes en el proceso de granulación aeróbica [7]. Los estudios futuros que aborden el modelado matemático de lodos granulares aeróbicos brindarán una visión más clara de los mecanismos de granulación aeróbica y facilitarán su

aplicación en el tratamiento de aguas residuales [7].

Capítulo 5

Transferencia de masa en el gránulo

Dado que los gránulos son partículas compactas y heterogéneas es relevante estudiar el efecto de su estructura en el transporte de sustratos desde el borde hacia el interior. El presente capítulo busca crear un modelo espacial representativo de la estructura de un gránulo, para así definir la difusividad en interior. Se abordará la arquitectura de un gránulo a partir del análisis de imágenes extraídas de bibliografía, para sobre ellas determinar la forma geométrica que mejor se asimile a la estructura general de un gránulo maduro. A partir de esto se estimará un factor de corrección para la difusividad de moléculas en el interior del gránulo como una función del radio de este.

5.1. Arquitectura del gránulo

Las imágenes presentadas en el estudio realizado por Gonzalez et. al 2014 [22], permiten observar aglomerados de células, conformados principalmente por bacterias de tipo PAO, los que son responsables de crear túneles y canales a través del gránulo, generando una estructura porosa y heterogénea. Se observa que los aglomerados son estructuras densas y compactas, por lo que la difusión en el interior del gránulo se ve obstaculizada por su presencia. Debido a la compacidad y densidad de los aglomerados, se puede asumir que la mayor parte de la conversión de sustratos ocurre en su superficie. En el mismo estudio se concluye que los aglomerados crecen de adentro hacia afuera, por lo que el tamaño de los aglomerados de células parece disminuir hacia el centro del gránulo. Además, se puede ver como el centro del gránulo es más poroso con respecto al resto de la estructura, debido a que la población de células que se encuentra en el interior del gránulo se encuentran en etapa de muerte celular.

Para representar la estructura del gránulo y la existencia de aglomerados, se plantea utilizar una estructura de capas, dado que es una de las formas más comunes de modelar la conversión y los procesos de transferencia al interior del gránulo. Sin embargo, a diferencia de los modelos existentes, se propone que las capas sean de tamaño descendiente hacia el centro del gránulo como se muestra en la Figura 5.1. De esta forma se mantiene la teoría de que el tamaño de los aglomerados de células crece a medida que se alejan del centro del gránulo. Se propone que el grosor de la primera capa del modelo sea igual al diámetro de los aglomerados que se encuentran en la superficie, ya que estos son los más visibles al analizar el corte transversal del gránulo y son fácilmente medibles. Para estimar su valor se utilizará la Figura 5.2 y se medirá el diámetro de los aglomerados que mas destacan (marcados con los círculos naranjos).

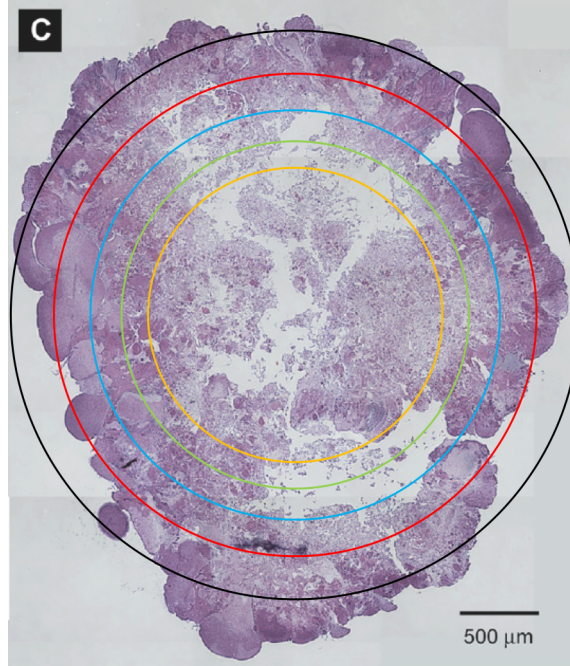


Figura 5.1: Propuesta de estructura de capas de tamaño descendiente. Adaptado de [22]

Como resultado se obtiene que los aglomerados superficiales del gránulo poseen un diámetro promedio de $270 \mu m$, al que se denominará como $d_{m\acute{a}x}$. Por otro lado, también es posible estimar un valor aproximado para el radio máximo de gránulo, denominado como $R_{m\acute{a}x}$ y cuyo valor es de aproximadamente $1.788 \mu m$ (delimitado por el círculo negro de la Figura 5.2). Dentro de un mismo reactor hay varios tamaños de gránulo y el diámetro de los aglomerados en su superficie va a depender directamente del tamaño total del gránulo. Para estimar el diámetro de los aglomerados en la superficie para cualquier tamaño de gránulo se genera el factor dR_{max} correspondiente al cociente entre $d_{m\acute{a}x}$ y $R_{m\acute{a}x}$:

$$dR_{max} = \frac{d_{max}}{R_{m\acute{a}x}} = 0,15 \quad (5.1)$$

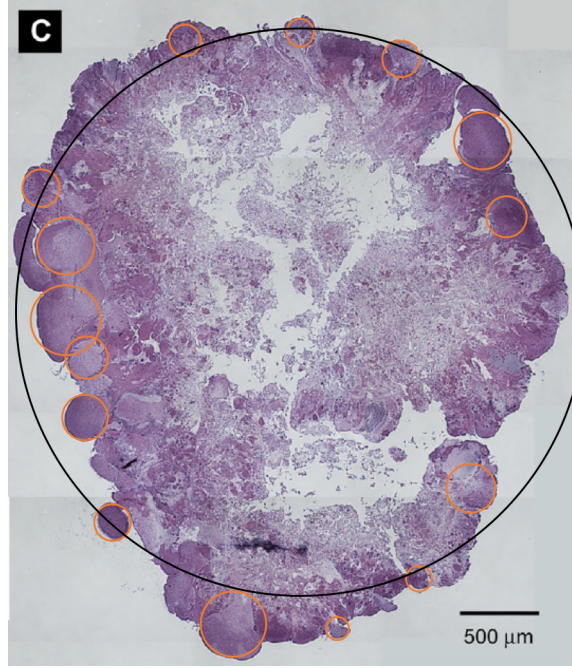


Figura 5.2: Imagen de campo claro transversal de un gránulo, teñido con H&E. Círculos naranjos indican aglomerados de células y el círculo negro representa la totalidad del gránulo.

En base a esto, se crea un modelo en capas para representar la arquitectura de un gránulo, basado en la existencia de aglomerados esféricos de diámetro decreciente. Se busca conocer el tamaño de los aglomerados que se encuentran hacia el interior del gránulo, tal que el diámetro del aglomerado sea igual al grosor de la capa correspondiente. Para estimar el tamaño de las capas inferiores se considera un factor α , tal que el diámetro de los aglomerados la capa siguiente es igual a α por el diámetro de los aglomerados de la capa actual. Sea d el vector de diámetros de los aglomerados en cada capa y n el número total de capas en el gránulo.

$$d = [d_{max}, \alpha \cdot d_{max}, \alpha^2 \cdot d_{max}, \dots, \alpha^{n-1} \cdot d_{max}] \quad (5.2)$$

De la Figura 5.1 se puede inferir que la suma del grosor de todas las capas es igual al radio del gránulo y el número de capas se puede obtener resolviendo la suma para n :

$$R_{max} = \sum_{i=1}^n \alpha^{i-1} \cdot d_{max} \quad (5.3)$$

$$R_{max} = d_{max} \cdot \frac{1 - \alpha^n}{1 - \alpha}$$

$$\frac{R_{max}}{d_{max}} = \frac{1 - \alpha^n}{1 - \alpha}$$

$$\alpha^n = 1 - \frac{R_{max}}{d_{max}} \cdot (1 - \alpha)$$

$$n = \frac{\log\left(1 - \frac{R_{max}}{d_{max}} \cdot (1 - \alpha)\right)}{\log(\alpha)} \quad (5.4)$$

Para que n sea un número real, el argumento dentro de la función logaritmo debe ser positivo, por lo tanto, el valor de α esta restringido según lo siguiente:

$$1 - \frac{R_{max}}{d_{max}} \cdot (1 - \alpha) > 0$$

$$\alpha > 1 - \frac{d_{max}}{R_{max}} \quad (5.5)$$

Sea

$$1 - \frac{d_{max}}{R_{max}} = 1 - dR_{max} = \beta \quad (5.6)$$

Reemplazando el valor de dR_{max} calculado previamente se tiene que :

$$\beta = 0,85 \quad (5.7)$$

Para que el problema a resolver tenga sentido físico y matemático, el numero de capas del gránulo debe ser un número real y finito, por lo tanto α debe ser mayor estricto a β . Por otro lado, recordando el significado de α , este es un factor que indica cuánto disminuye una capa con respecto a la anterior. Al observar el corte transversal del gránulo se puede ver que el diámetro de los aglomerados en su interior parece disminuir rápidamente hacia el centro del gránulo. En base a esto, alfa debe tener un valor lo suficientemente pequeño para que el sistema planteado sea representativo de la realidad, pero respetando la restricción de ser mayor a β .

Dado que se busca modelar un número finito de capas, α debe ser mayor a β , por lo que se fija su valor en 0,851. Como resultado el número de capas es de $n=27$. En la Figura 5.3 se muestra la progresión del tamaño de los aglomerados a medida que el radio del gránulo disminuye, en el que cada punto representa la posición de las capas en el gránulo. En esta Figura, un punto en el eje X define el radio del gránulo completo y a la izquierda en el eje Y se tiene el diámetro de los aglomerados, partiendo por el mas grande en la esquina superior derecha. Todos los puntos que se encuentran hacia la izquierda en el gráfico están incluidos en el gránulo hacia el interior. Se puede apreciar en este gráfico que para radios a partir de aproximadamente $500\mu m$ la capas poseen una distancia muy pequeña entre sí. A la derecha de la Figura 5.3 se incluye un esquema representativo para entender de mejor manera la perspectiva del diámetro decreciente de los aglomerados.

Tamaño de los aglomerados según radio del gránulo

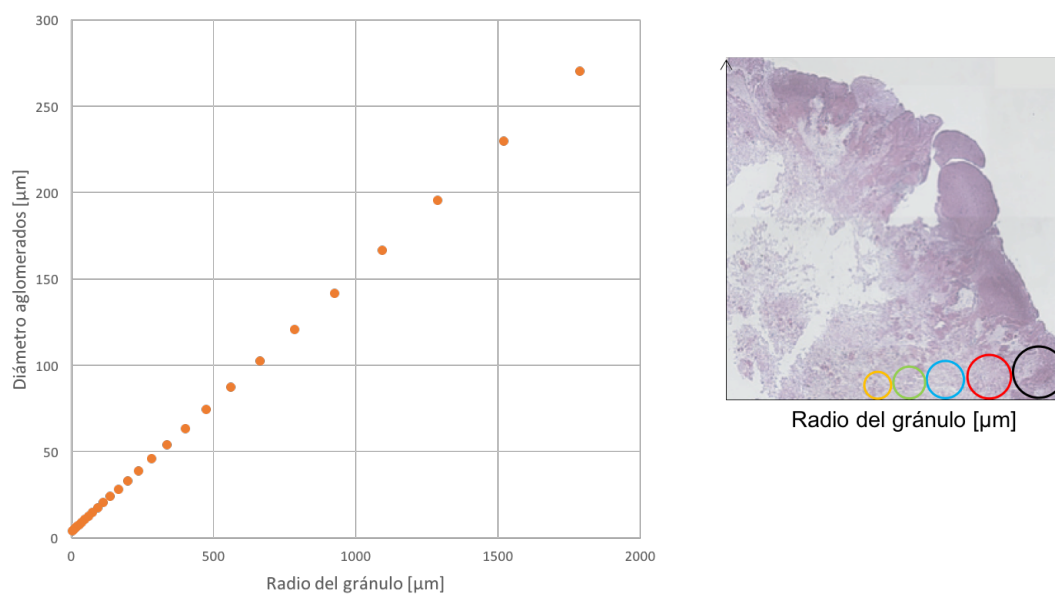


Figura 5.3: Diámetro de los aglomerados según radio del gránulo

A partir de la construcción descrita, se puede representar un gránulo y su estructura interna a través de un modelo de capas y aglomerados de tamaño decreciente. La Figura 5.4 es una representación a escala de la distribución de las primeras 5 capas y sus respectivos aglomerados dentro del gránulo. Se puede ver claramente como el tamaño de las capas disminuye, así como también el tamaño de los aglomerados. Este modelo permite representar como las colonias y nichos de microorganismos van creciendo en tamaño y forma a medida que absorben sustratos. En particular, estas estructuras se forman gracias al almacenamiento de polímeros intracelulares, los que van formando las estructuras de aglomerados. Gonzalez et. al. [22] propone que los aglomerados crecen de adentro hacia afuera, lo que está representado por el modelo de capas y aglomerados propuestos en esta sección.

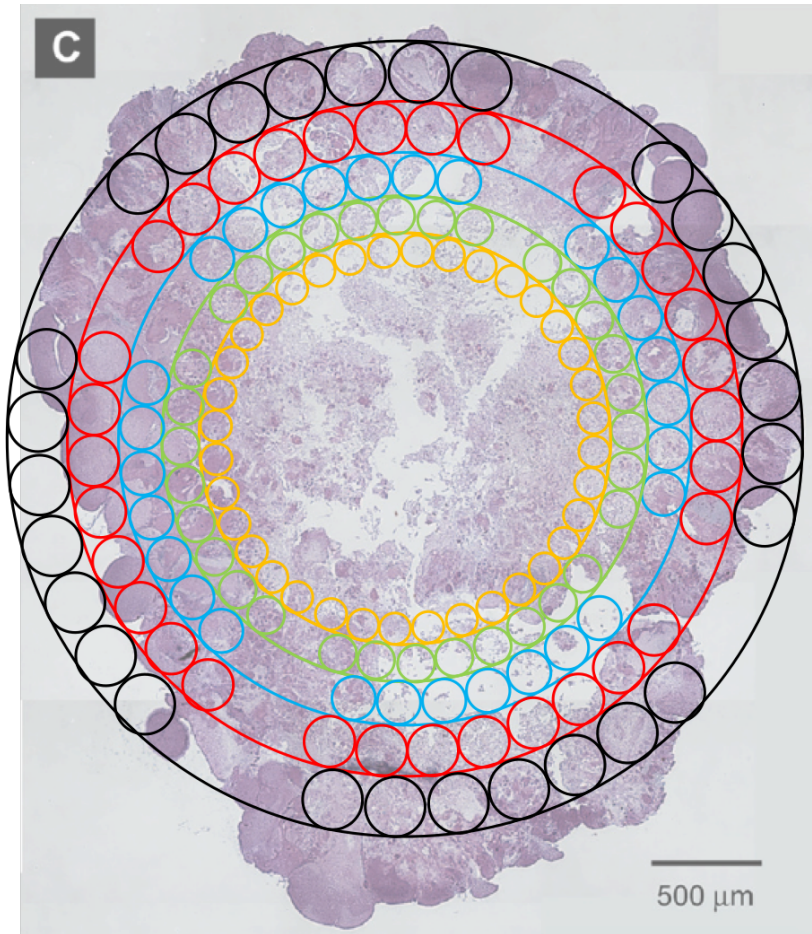


Figura 5.4: Propuesta para la distribución física de los aglomerados de células dentro de un gránulo.

Mientras más chico es el grosor de la capa, más aglomerados se encuentran en su interior y el espacio disponible no ocupado por células se hace cada vez más pequeño. Debido a esto, existe un aumento en la resistencia a la transferencia de masa ejercida por la presencia de aglomerados y, por lo tanto, el sustrato no es capaz de llegar a las células que se encuentran en las capas internas del gránulo. Como consecuencia, se generan zonas privadas de nutrientes que tendrán menor actividad biológica. Cabe destacar que el modelo propuesto impone una homogeneidad en la estructura del gránulo, la que no se cumple en la realidad, especialmente para gránulos en etapas de vida más avanzadas. En la misma Figura 5.4 se puede ver que hacia el centro del gránulo el modelo de capas deja de ser tan representativo de la realidad, ya que mientras más pequeña sea la capa, menor es el espacio disponible y por lo tanto la porosidad del gránulo debería disminuir hacia el centro del gránulo. Sin embargo, tanto en bibliografía como por el análisis de las imágenes transversales de gránulo, se ha demostrado que la porosidad aumenta hacia el centro del gránulo. A pesar de esto, esta aproximación permite representar de manera asertiva lo que está ocurriendo en las primeras capas del gránulo, las que presentan mayor nivel de actividad microbiana.

5.2. Difusión

Como se mencionó antes, debido a la estructura altamente compacta de los aglomerados, la difusión de sustratos es limitada, por lo que en vez de atravesar los aglomerados, las moléculas se mueven al rededor de ellos (Figura 5.5). A medida que los sustratos se acercan al centro del gránulo, los aglomerados se van haciendo más pequeños y es cada vez más difícil moverse y, por lo tanto, hacia el interior del gránulo la difusión va disminuyendo.

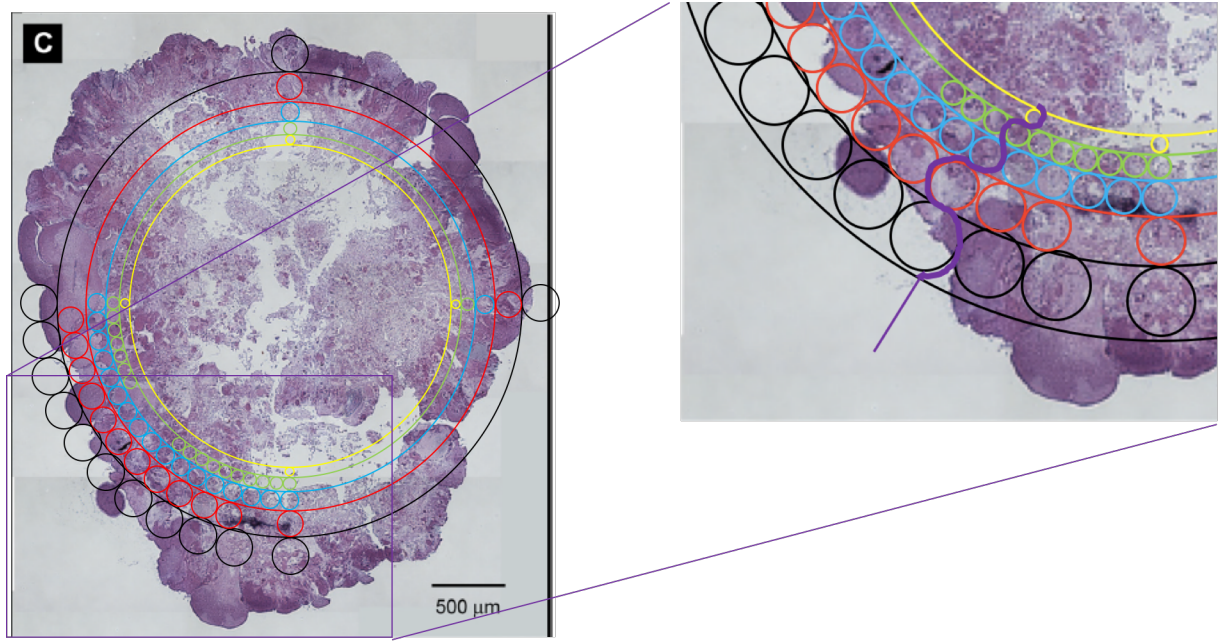


Figura 5.5: Representación del transporte de nutrientes al interior del gránulo, considerando la existencia de aglomerados.

Se desea seguir la concentración de tres solutos de interés dentro del gránulo: Acetato, Ortofosfato y Oxígeno. Su coeficiente de difusividad en el medio acuoso se presenta en la Tabla 5.1, en la que se puede apreciar que el Oxígeno es la molécula que posee mayor difusividad, mientras que el Acetato es la molécula que presenta el mayor valor. Esto se debe al tamaño y estructura de cada molécula, que tienen directa influencia en el fenómeno de transferencia de masa.

Tabla 5.1: Valores de la difusividad en medio acuoso para los sustratos de interés [30].

Soluto	Difusividad [m^2/d]
Oxígeno	$2,0 \cdot 10^{-4}$
Ortofosfato	$1,1 \cdot 10^{-4}$
Acetato	$9,6 \cdot 10^{-5}$

La difusión de sustratos dentro del gránulo puede ser descrita como una función dependiente del radio a través de un coeficiente de tortuosidad. El coeficiente de tortuosidad se define como el cociente entre la distancia real recorrida para llegar de un punto a otro y la distancia lineal entre ellos. Su valor siempre es mayor o igual a 1. Cabe destacar el coeficiente

tortuosidad es una característica espacial, independiente de la molécula que se desea seguir.

Sea $D_{S,0}$ la difusividad del sustrato S en el medio acuoso y $\tau(r)$ la función para el coeficiente tortuosidad dependiente del radio del gránulo. Entonces la difusión del sustrato S dentro del gránulo ($D_{S,e}$) se puede definir como [38]:

$$D_{S,e} = \frac{D_{S,0}}{\tau(r)} \quad (5.8)$$

La forma más simple de estimar el valor del coeficiente de tortuosidad es considerar que las moléculas, en vez de atravesar un aglomerado de diámetro $2R$, lo rodean. Por lo tanto el trayecto a recorrer mide πR . Tomando el cociente entre estos valores se tiene que el coeficiente de tortuosidad es igual a $\tau = \pi R/2R = \pi/2$ [38]. Esto se cumpliría si todos los aglomerados del gránulo fueran del mismo tamaño, pero tal como propone [22], estos tienen tamaño descendiente hacia el centro del gránulo. Es por esto que se desea buscar una función para este coeficiente tal que aumente su valor a medida que la distancia al centro del gránulo se hace más pequeña, por lo mencionado anteriormente.

Coefficiente de Tortuosidad

Se propone como metodología para estimar la función del coeficiente tortuosidad el estudio del espacio disponible que poseen las moléculas para moverse a través del gránulo. Analizando la simplificación presentada en la Figura 5.6, se podría decir que todo el espacio que no esté ocupado por los aglomerados, representados en naranja, está disponible para la difusión de los sustratos y se denominará como volumen libre. Cada capa tendrá un valor determinado de volumen libre, y se propone que este disminuye a medida que los aglomerados se hacen más pequeños.

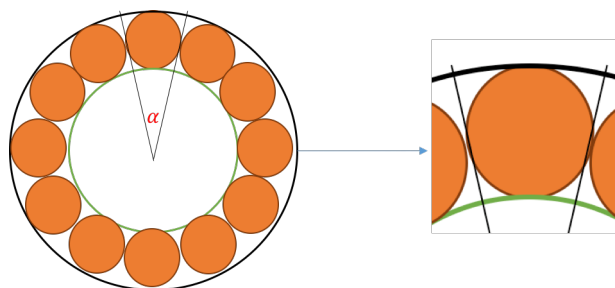


Figura 5.6: Diagrama representativo del volumen libre por capa.

¿Cuántos aglomerados habría en el gránulo?, ¿cómo estimar, en consecuencia, las fracciones de volumen ocupado y libre?

En geometría, el estudio del arreglo de esferas en una esfera de mayor tamaño, tal que no ocurra superposición, se llama empaquetamiento de esferas. Distintas ramas de las matemáticas estudian la geometría y la combinatoria para maximizar la densidad de empaquetamiento o para disminuir la energía requerida para mantener el sistema estable. Más específicamente, el problema de Tammes consiste en empaquetar un número dado de circunferencias en la superficie de una esfera con el objetivo de minimizar la distancia entre ellas. La disposición de círculos tal que se obtiene la mayor densidad es rodeando cada círculo con otros 6 círculos, cuyos centros están dispuestos en forma hexagonal. La densidad obtenida por este arreglo

tiene un valor aproximado de 0.9069 [39] y será denominada como ρ_N .

Sea V_i^c el volumen total de la capa i y v_i el volumen de cada aglomerado en la capa i . Sea N_i la cantidad de aglomerados en la capa i , por lo tanto, el volumen libre de la capa (V_i^f) se expresa como:

$$V_i^f = V_i^c - N_i \cdot v_i^c \quad (5.9)$$

El objetivo es estimar un valor de N_i lo más cercano a la realidad.

Sea R_i^{sup} el radio superior de la capa y R_i^{inf} el radio inferior de la misma. Entre las esferas formadas por R_i^{sup} y R_i^{inf} existe una esfera con radio R_i^{avg} (ver Figura 5.7) y área superficial A_i :

$$A_i = 4\pi \cdot R_{avg}^i{}^2 \quad (5.10)$$

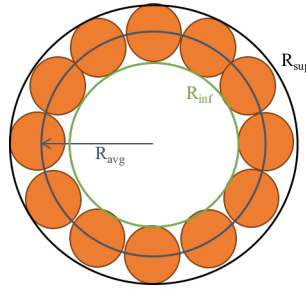


Figura 5.7: Diagrama representativo para la capa i

Esta esfera corta exactamente en la mitad de cada aglomerado, generando semi esferas, por lo tanto, la superficie de la esfera grande de radio R_i^{avg} estará cubierta de círculos cuya área es igual a a_i^c :

$$a_i = \pi \cdot (d_i/2)^2 \quad (5.11)$$

Se asumirá que estos discos están ordenados tal que se maximiza la densidad de cobertura en la superficie de la esfera grande, es decir que cada disco está rodeado por 6 círculos cuyos centros forman un hexágono y como se mencionó previamente, este arreglo tiene una densidad de 0.9069. La estimación más certera para la cantidad de discos que cubren la superficie de la esfera será igual al cociente entre el área superficial de la esfera grande y el área de un disco generado por el corte transversal de los aglomerados, corregido por el factor de densidad ρ_N , es decir:

$$N_i = \frac{A_i}{a_i^c} \cdot \rho_N \quad (5.12)$$

$$N_i = \frac{4\pi \cdot R_{avg}^i{}^2}{\pi \cdot (d_i/2)^2} = \frac{4 \cdot R_{avg}^i{}^2}{(d_i/2)^2} \cdot \rho_N \quad (5.13)$$

Con el valor de N_i se puede estimar el volumen libre que hay en cada capa del gránulo mediante la ecuación 5.9. Sin embargo, dado que se está trabajando con volúmenes tan pequeños del orden de 10^{-8} hacia abajo, el volumen libre estimado por capa también posee valores en ese orden de magnitud. Al inicio de la sección se plantea que τ debe tener valores

cercanos a $\pi/2$ en la primera capa del gránulo, por lo que se propone que el coeficiente de tortuosidad corresponde a la inversa del volumen libre que hay en cada capa del gránulo, escalado por un factor de 10^8 , mediante la Ecuación 5.14

$$\tau_i = \frac{1}{N_i} \cdot 10^8 \quad (5.14)$$

5.3. Resultados

A partir de la metodología propuesta en la Sección 5.2 se calcula el valor del volumen libre, tortuosidad y difusividad de todos los solutos de interés para cada capa del gránulo. El modelo propuesto es discreto, en el que existe un cambio de medio entre una capa y otra y permite conocer los valores puntuales en cada capa.

En primer lugar, se obtiene el volumen libre en cada capa del gránulo presentado en la Figura 5.8, cuya tendencia se asimila a una curva polinómica de orden 3, debido a que para estimar los volúmenes de las ecuaciones planteadas se deben utilizar los radios correspondientes al cubo. Se puede apreciar también que la pendiente entre dos puntos se hace cada vez más pequeña hacia el centro del gránulo. Con esto es posible confirmar la hipótesis planteada en la Sección 5.2 que el volumen libre disminuye hacia el centro del gránulo.



Figura 5.8: Representación de la disminución volumen libre disponible.

Como era de esperar, el volumen libre disponible para el movimiento de sustratos disminuye a medida que la posición se acerca al centro del gránulo. Cercano al valor de $500\mu\text{m}$ hay muy poco espacio disponible y, por lo tanto, se cree que el sustrato no alcanza a llegar a esas partes del gránulo. Esto está de acuerdo con la teoría de que en el centro del gránulo la población de células se encuentra en etapa de muerte celular, dado que el sustrato no es capaz de llegar a ellas. Es por esto que en las imágenes presentadas por [22] se puede apreciar claramente como en el centro del gránulo hay espacios en blanco, lo que significa que el gránulo se empieza a desarmar de adentro hacia afuera y no hay consumo de sustrato en estas regiones, aumentando así la porosidad.

El coeficiente de tortuosidad será proporcional a la inversa del volumen libre estimado, tal como se propuso en la Sección 5.2 mediante la Ecuación 5.14. De esta forma, el coeficiente de tortuosidad como función del radio del gránulo queda representado por la Figura 5.9.

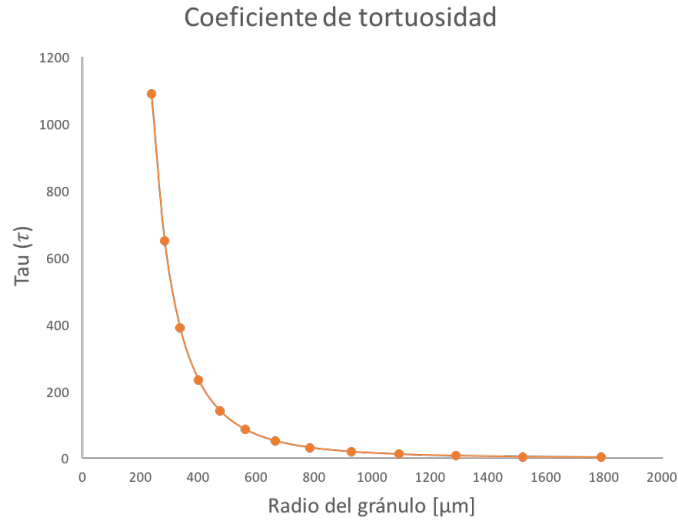


Figura 5.9: Coeficiente de tortuosidad

NOTA: τ diverge rápidamente para radios inferiores a $250\mu\text{m}$ ya que el volumen libre alcanza valores muy cercanos a 0. Para efectos de visualización del modelo se presenta solamente el gráfico hasta la capa 13, equivalente a un radio de $237\mu\text{m}$.

A partir del coeficiente de tortuosidad es posible determinar cómo varía la difusividad de los sustratos en función del radio de gránulo, la que debería seguir el mismo comportamiento que el volumen libre presentado previamente. En la Figura 5.10 se presenta la difusividad para el Acetato, Ortofosfato y Oxígeno. El orden de magnitud de la difusividad se mantiene según el valor de referencia en el medio acuoso (Tabla 5.1) para las primeras capas del gránulo, así como también las diferencias entre una especie y otra. Sin embargo, a partir de $500\mu\text{m}$ de radio aproximadamente, las difusividades convergen a valores cercanos a cero, lo que es consistente con el rápido crecimiento de coeficiente de tortuosidad presentado en la Figura 5.9. La Figura 5.11 permite apreciar como la disminución de la difusión es consistente con la estructura real del gránulo, ya que a partir de aproximadamente $500\mu\text{m}$ el valor de la difusión es cercano a cero y por lo tanto el sustrato no es capaz de ingresar a las capas internas, provocando así una ruptura en la estructura interna del gránulo, la que esta gobernada principalmente por una población de células en etapa de muerte celular. Esto se refleja en el aumento de la porosidad, así como también la presencia de espacios vacíos.

Difusividad de solutos de interés en función de radio del gránulo

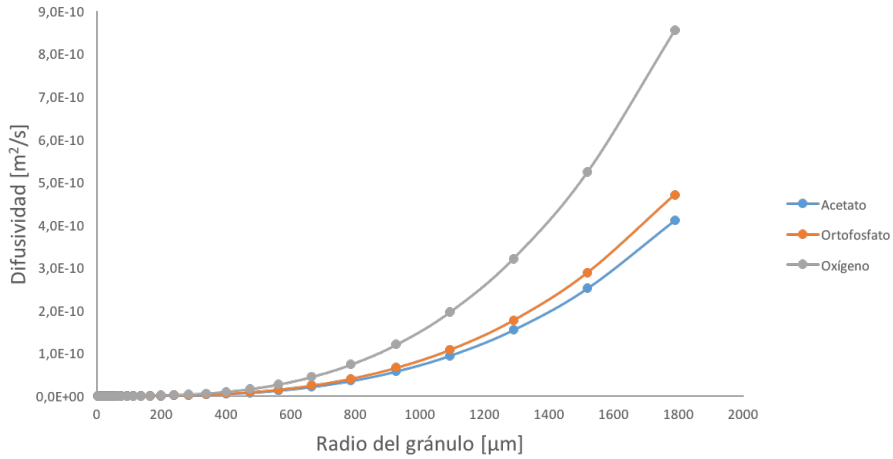


Figura 5.10: Difusividad para solutos de interés en función del radio del gránulo

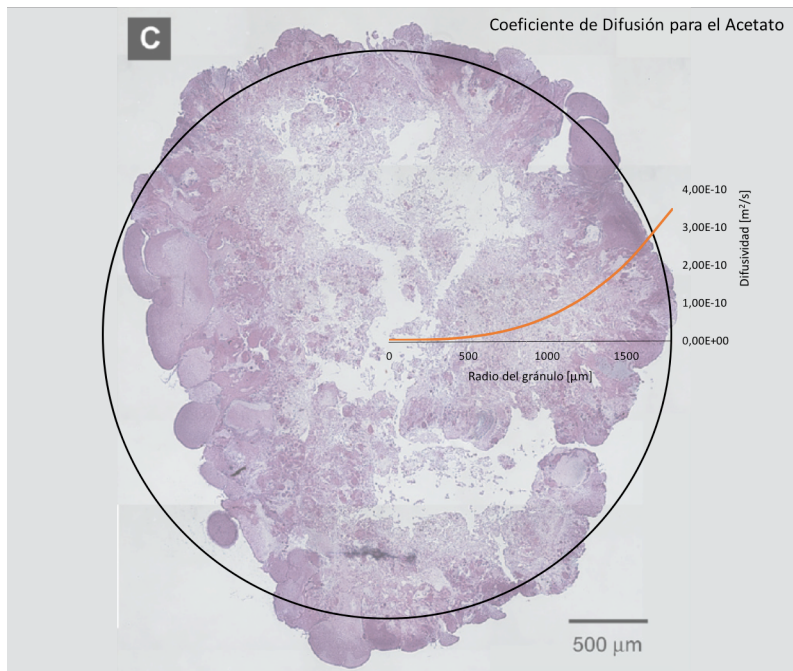


Figura 5.11: Representación para difusión de Acetato corregida con el coeficiente de tortuosidad

El comportamiento de las moléculas hacia el centro del gránulo es contradictorio. Por un lado, por como está organizada la arquitectura del gránulo, la cantidad de aglomerados que existen hacia el centro del gránulo va aumentando y su tamaño disminuyendo. Por otro lado, de acuerdo a lo observado en la difusividad, los sustratos no son capaces de ingresar al centro del gránulo debido al poco espacio para su movimiento, por lo tanto, la formación de aglomerados no es posible, dado que las células no reciben sustrato para la formación de polímeros. Sin embargo, a través de la interpretación geométrica de los aglomerados y propuesta de

estructura de un gránulo, fue posible obtener una función para la difusividad que se asimila a lo propuesto por Wilén et. al 2018 [8].

Este modelo geométrico permite representar la transferencia de masa dentro de un gránulo y cómo esta se ve afectada por el nivel de profundidad alcanzada. Esta es una de las características más importantes en el funcionamiento y eficiencia de un gránulo aeróbico, ya que permite la partición de su estructura en diversos nichos biológicos que a su vez cumplen roles diferentes y fundamentales en la remoción de nutrientes de las aguas servidas.

Capítulo 6

Modelo de transferencia de masa y reacción en un gránulo

La concentración de sustratos en el interior del gránulo dependerá principalmente de las tasas de transferencia de masa y de reacción por parte de los microorganismos que coexisten en las diversas capas. En este capítulo se plantea un modelo a partir del balance de masa que permite describir el comportamiento de los nutrientes en el interior del gránulo, el que contempla la variación de la concentración debido al efecto de la difusividad estimada en el Capítulo 5 y al efecto de la tasa de reacción, que será estudiada en este capítulo. Se estudiarán los factores asociados al consumo microbiano, tales como las principales reacciones metabólicas que ocurren, así como también una estimación para la concentración de biomasa que existe dentro del gránulo, para finalmente plantear la tasa de consumo de Acetato, Fosfato y Oxígeno en cada capa del gránulo. El modelo planteado en este capítulo permitirá conocer el comportamiento al interior de un gránulo individual, para luego, en capítulos futuros poder utilizar esta información y predecir el comportamiento completo de un reactor de granulación aeróbica. En la Figura 6.1 se puede apreciar un resumen de los fenómenos que ocurren dentro de un gránulo. El gránulo está representado por el círculo morado de mayor tamaño, mientras que los aglomerados de células están representados por los círculos naranjos.

Fenómenos a modelar:

1. Consumo de sustrato S desde el medio líquido hacia el gránulo.
2. Difusión de sustrato S en el interior del gránulo.
3. Consumo de sustrato S por parte de los microorganismos que conforman un aglomerado.

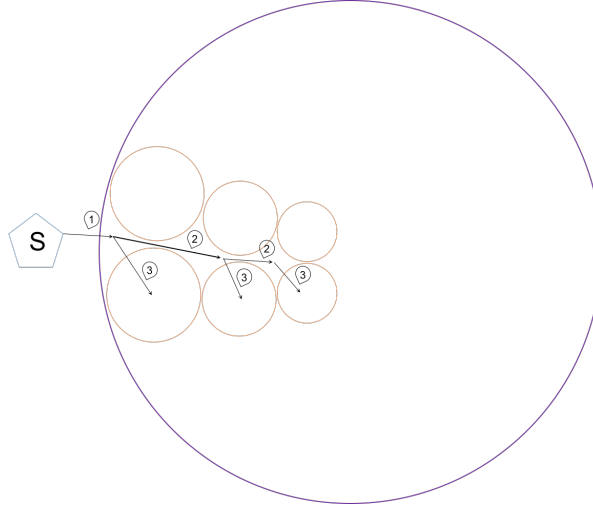


Figura 6.1: Diagrama de fenomenologías a modelar y su dominio.

6.1. Balance de masa

El objetivo propuesto consiste en describir el comportamiento de los nutrientes dentro del gránulo y para ello se propone un balance de masa que permita conocer la variación de la concentración de nutrientes, tanto en el tiempo como en el espacio, teniendo en cuenta la difusión y tasa de consumo dentro del gránulo. Cabe destacar que el balance de masa propuesto por la ecuación 6.21 es válido ya que se está trabajando con volúmenes constantes.

$$\frac{\partial C_{S,gr}}{\partial t} - D_{S,gr} \nabla^2 C_{S,gr} - r_{S,gr} = 0 \quad (6.1)$$

La concentración del sustrato S dentro del gránulo ($C_{S,gr}$) es una función que depende tanto del tiempo como de la posición dentro del gránulo, por lo que al resolver la ecuación 6.21 para los 3 sustratos estudiados, se obtiene un perfil de concentraciones que permite conocer el valor de la concentración en todos los puntos del gránulo en todo momento. Para resolver esta ecuación se considera por un lado la difusividad ($D_{S,gr}$), que a su vez es una función de la posición en el gránulo, y por otro lado la tasa de consumo de cada sustrato dentro del gránulo ($r_{S,gr}$), la que depende directamente de la concentración dentro del gránulo, por lo que también varía tanto en el tiempo como con la posición. Cabe destacar que la advección es omitida ya que dentro del gránulo no existen flujos ni fuerzas que afecten el movimiento o transporte del fluido.

Se utilizará el método de diferencias finitas centradas para resolver la EDP (ecuación de derivada parcial) propuesta por la Ecuación 6.21. Como solución se tiene una matriz para la concentración ($C_{S,gr}(i, k)$), con i el índice que especifica la posición en el radio del gránulo; y k , el índice asociado al tiempo.

$$C_{S,gr}(i, k+1) = C_{S,gr}(i, k) + D_{S,gr}(i) \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (C_{S,gr}(i+1, k) - 2C_{S,gr}(i, k) + C_{S,gr}(i-1, k)) + r_{S,gr}(i, k) \quad (6.2)$$

El vector de difusividades $D_{S,gr}(i)$ representa la difusividad en diferentes posiciones radia-

les, el que está definido por el coeficiente de tortuosidad antes descrito, mientras que la tasa de consumo $r_{S,gr}(i, k)$ es una matriz dependiente de la concentración de solutos en el interior del células y de los coeficientes cinéticos correspondientes.

6.2. Condiciones de borde

Para obtener la matriz solución es necesario definir las condiciones de borde del sistema, es decir, la concentración de los solutos afuera del gránulo. Como primera aproximación al problema, se asume que el reactor opera en condiciones de mezcla perfecta y, por lo tanto, la concentración en el borde del gránulo será igual a la concentración en el seno del líquido del reactor. Los valores de concentración en la alimentación del Acetato y Fosfato serán iguales a los considerados por el modelo multiescala, realizado por Xavier et. el. 2007 [30] presentados en la Tabla 6.1, los que corresponden a valores típicos utilizados en la operación de escala de laboratorio de reactores de granulación aeróbica.

Tabla 6.1: Concentración de alimentación de sustratos. Tomado de [30].

Especie	Concentración de alimentación [gr/m^3]
Ortofosfato	20
Acetato	396

Para el régimen de alimentación y operación se tomará como referencia el funcionamiento de la planta en Gamerwolde [6], en la que la alimentación ocurre durante la fase anaeróbica durante la primera hora de operación mediante una operación tipo Fed-Batch, en la que ocurre una nueva alimentación cada 15 minutos, dando como resultado un total de 4 alimentaciones durante la fase anaeróbica. Se desconoce con exactitud el modo de operación de la planta, pero se sabe que se debe mantener una alimentación tipo saciedad-hambruna, es decir que entre cada alimentación debe haber un periodo en el que no ingresen aguas servidas al reactor, para así favorecer el crecimiento y formación de los gránulos. Las alimentaciones se realizan cada 15 minutos durante la primera hora de operación, por lo que se asumirá que la alimentación durará 7,5 minutos y los otros 7,5 minutos no ingresará nada al reactor.

En cuanto a la tasa de consumo de Acetato y liberación de Fosfato, se tomarán como referencia los resultados del modelo multiescala presentados en la Figura 6.2. De este modelo se extrae la tasa de consumo de Acetato, así como también la tasa de liberación de Ortofosfato en la fase anaeróbica y su consumo en la fase aeróbica a partir de las pendientes correspondientes en la Figura 6.2. Se puede ver que el modelo multiescala considera un ciclo de operación de 3 horas, sin embargo, para efectos de este estudio, y para mantener las condiciones de operación consistentes con la aplicación a gran escalas, se considerará que la fase de aireación tiene una duración de 5 horas, para tener consistencia con la operación real llevada a cabo en Gamerwolde. Durante la etapa aeróbica el reactor se airea constantemente tal que la concentración de oxígeno en el reactor sea constante e igual al 40 % de la concentración de saturación ($8 mgO_2/L$), es decir $3,2 mgO_2/L$.

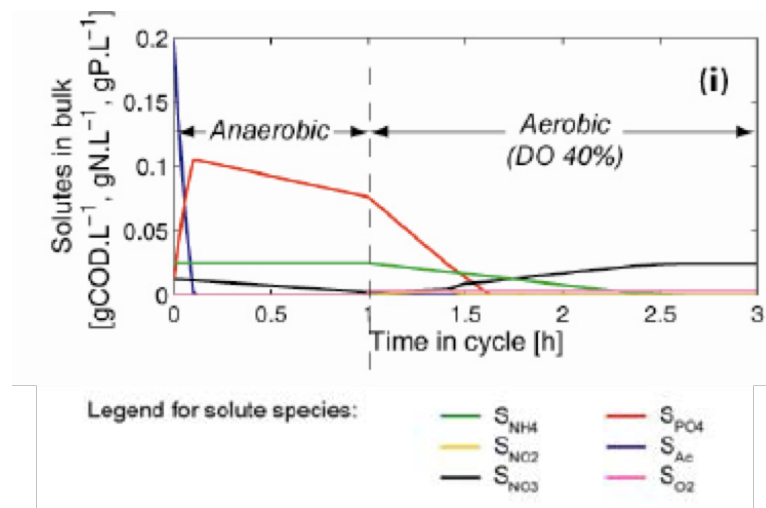


Figura 6.2: Concentraciones en el seno del reactor para todas las especies. Extraído de modelo realizado por Xavier et. al. 2007 [30].

Luego de cada alimentación, el Acetato y el Fosfato se mantienen constantes y una vez que se detiene el flujo de entrada el Acetato se degrada completamente en aproximadamente 6 minutos, mientras que el Ortofosfato es liberado hacia el líquido, aumentando así su concentración. Durante los cortos intervalos en que el Acetato tiene valor 0 se considera que el Fosfato se mantiene constante, ignorando las reacciones anóxicas de formación de Poly-P que requieren compuestos nitrogenados. Como resultado del ajuste propuesto, se obtiene una estimación para las concentraciones globales de Acetato y Fosfato dentro del reactor, las que se consideran iguales a las concentraciones afuera del gránulo y, por lo tanto, serán utilizadas como condiciones de borde para resolver la Ecuación 6.2.. Las Figuras 6.3 y 6.4 representan las concentraciones en función del tiempo de operación, las que son utilizadas como condiciones de borde para resolver la EDP. Cabe destacar que la operación para la fase anaeróbica es distinta que para la fase la fase aeróbica, por lo que se dividen las condiciones de borde en estas dos etapas.

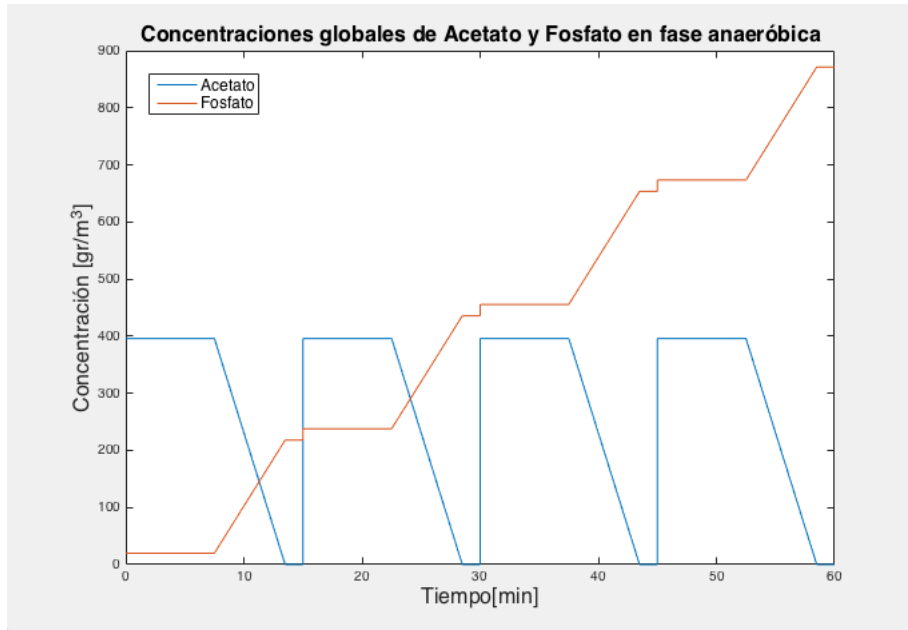


Figura 6.3: Concentración de Acetato y Fosfato en el líquido de un reactor de granulación aeróbica considerando mezcla perfecta. Fase anaeróbica.

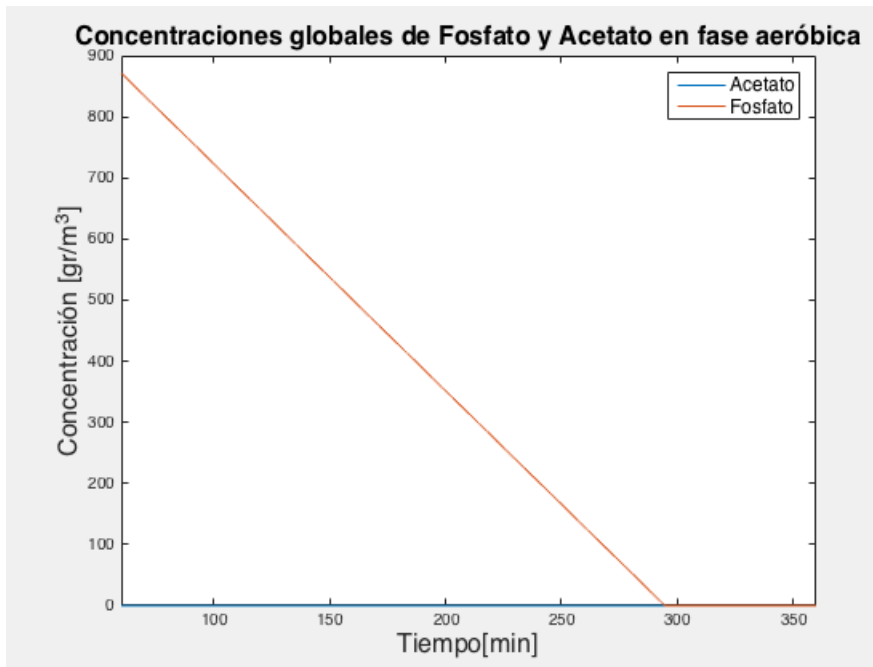


Figura 6.4: Concentración de Acetato y Fosfato en el líquido de un reactor de granulación aeróbica considerando mezcla perfecta. Fase aeróbica.

6.3. Simplificación del Metabolismo

Con el fin de simplificar la actividad celular dentro del gránulo se ha decidido considerar las PAOs como única especie bacteriana, debido a que esta es la especie con mayor protagonismo dentro del gránulo, y es la responsable de la formación de aglomerados. Para el modelamiento de su metabolismo se ignorará el detalle de las reacciones que ocurren a nivel intracelular, centrándose en la entrada, salida y acumulación de compuestos de interés. Las principales especies a estudiar serán los ácidos grasos volátiles, representados por el Acetato, que es consumido por las células, el Oxígeno que también es consumido, y el Fosfato, que es liberado en la etapa anaeróbica y consumido en la etapa aeróbica. También se estudiará la acumulación de polímeros PHA y Poly-P.

El modelo se dividirá en dos etapas, la primera correspondiente a la anaeróbica (Figura 6.5), en la que el Acetato que ingresa al gránulo es consumido por las células para formar polímeros de PHA en su interior. Los polímeros de Poly-P que se encuentran almacenados en las células previamente, se hidrolizan con el fin de liberar la energía necesaria para formar los enlaces del PHA y, por tanto, la concentración de Poly-P disminuye. Como consecuencia de esta ruptura se libera Fosfato, aumentando su concentración dentro del gránulo, y posteriormente en el medio acuoso. Esta etapa tiene una duración de 1 hora y se caracteriza por una alimentación tipo Fed-Batch de aguas servidas crudas cada 15 minutos.

Por otro lado, cuando comienza la etapa de aireación, el Fosfato presente es rápidamente consumido por las células y utilizado para la síntesis de Poly-P como reserva de energía (Figura 6.6). Mientras este proceso ocurre, los polímeros PHA que se almacenaron durante la etapa aeróbica se rompen y su concentración dentro de la célula disminuye. Tanto la duración de esta etapa como la cantidad de aire requerido va a depender de los requerimientos de cada planta o de las características del reactor. En aplicaciones a gran escala, como la ejecutada por Nereda® en Gammerwolrd, la etapa de aireación dura 6 horas y la concentración de Oxígeno disuelto se mantiene entre $1,8$ y $2,5 \text{ mgL}^{-1}$ [6]. Por otro lado, en el modelo realizado por Xavier et. al, 2007 [30] se considera que la aireación dura solamente 2 horas y la concentración de Oxígeno se mantiene constante en $3,2 \text{ mgL}^{-1}$.

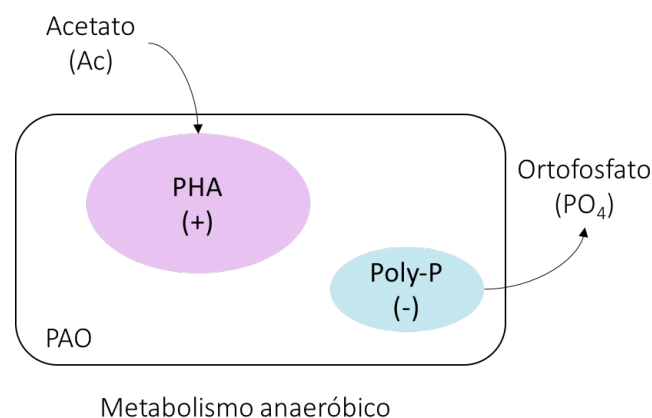


Figura 6.5: Representación del metabolismo anaeróbico a considerar en el modelo

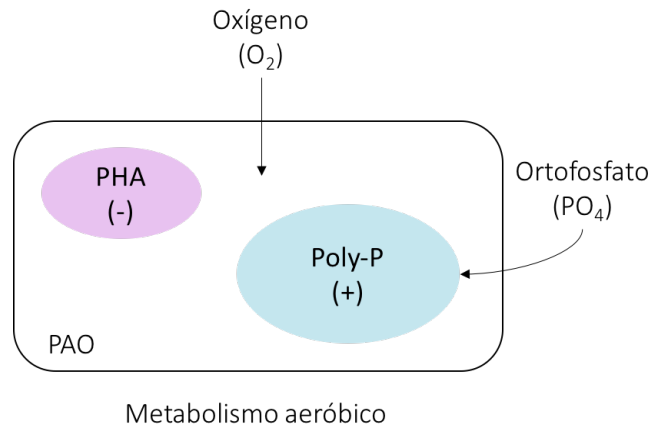


Figura 6.6: Representación del metabolismo aeróbico a considerar en el modelo

En cuanto a los procesos y especies que se ha decidido despreciar, destacan aquellos relacionados con compuestos nitrogenados, como la existencia del TCA, dado que utiliza estos compuestos como aceptores finales de electrones. Esto se debe a que no se enfocará el presente estudio en la remoción de nitrógeno, y además porque su participación en el metabolismo de las células PAO no es de mayor relevancia en la acumulación de polímeros. Por otro lado, no se considerará la acumulación ni ruptura de glicógeno, a pesar de ser un polímero de gran importancia en el metabolismo de las células. Finalmente, tampoco se considerará el crecimiento ni muerte celular, sino que la concentración de biomasa será una función que depende del radio del gránulo, pero constante en el tiempo.

Si bien se ha decidido despreciar el comportamiento de otros solutos presentes en el gránulo, así como también la existencia de otros microorganismos, estos influyen en el consumo y concentración de Oxígeno dentro del gránulo, y por lo tanto influye en la capacidad de almacenar Fosfato durante la etapa aeróbica. Debido a esto, se considerará la existencia de estos componentes netamente en la tasa de consumo de oxígeno a través de cinéticas de orden cero, es decir, despreciando su concentración pero reconociendo su existencia.

6.4. Concentración de Biomasa

La especie principal de microorganismo a considerar en el modelo corresponde a las células de tipo PAO, por lo que se considera importante conocer su tamaño estimado y principales características físicas. Se extrajeron muestras de biomasa del reactor Nereda® operado en Gamerwolde, y mediante observación microscópica amplificada fue posible observar los organismos acumuladores de fósforo y los polímeros almacenados en su interior (Figura 6.7).

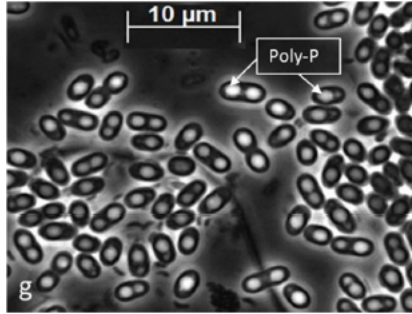


Figura 6.7: Aumento de 1000x de organismos acumuladores de fosfato que se encuentran en gránulos. [6]

A partir de estas imágenes se observan células con forma de elipsoide y es posible inferir el volumen aproximado de una célula PAO. Suponiendo que estas tienen la misma densidad que las bacterias *E. Coli*, ya que ambas provienen del filo *Proteobacteria*, la masa de una sola célula PAO puede ser obtenida a partir de su volumen. Las dimensiones inferidas para las células de tipo PAO se presentan en Tabla 6.2.

Tabla 6.2: Dimensiones utilizadas para caracterizar una bacteria tipo PAO

Dimensión	Símbolo	Valor	Unidad
Volumen	V_{PAO}	$4,3 \cdot 10^{-17}$	m^3
Masa	m_{PAO}	$7 \cdot 10^{-14}$	gr
Densidad	ρ_{PAO}	1.337	kg/m^3

A pesar de tener conocimiento sobre las dimensiones de las bacterias estudiadas, no se conoce con precisión la concentración de biomasa activa en el gránulo. Como se mencionó previamente, las células están ordenadas en forma de aglomerados, sin embargo, debido a densidad y compacidad de estas estructuras, no se tiene claridad sobre la fracción de células que efectivamente consumen sustrato. Se puede suponer que las células que se encuentran en la superficie de los aglomerados tienen una tasa de consumo de sustratos considerablemente mayor a aquellas que se encuentran en el interior del aglomerado, debido a la disponibilidad de sustrato. La biomasa con mejor actividad metabólica es aquella que tiene mejor acceso al sustrato. Consecuentemente, aquellas células que se encuentran en las capas interiores del gránulo también tienen menor acceso al sustrato, debido a la resistencia adicional al transporte de masa y la reducción de concentración por consumo de sustrato. Como se mencionó previamente, las capas internas del gránulo poseen menor espacio libre para la circulación de moléculas, y por lo tanto posee menor difusividad. Debido a esto, la concentración de biomasa debiese ir disminuyendo hacia el centro del gránulo.

No se han reportado estudios o datos experimentales que permitan conocer con precisión la concentración de biomasa en función del radio del gránulo, a pesar de que este factor tenga influencia en las tasas de conversión local de sustratos. En el modelo multi escala realizado por Xavier et. al 2007 [30] se puede seguir el crecimiento y concentración de cada una de las especies de microorganismos estudiadas a través de una serie de relaciones estequiométricas, en función de la concentración de sustratos y constantes cinéticas de consumo y crecimiento celular. En la Figura 6.8 se puede ver el resultado de una de las simulaciones realizadas a partir de este modelo, en donde la Figura 6.8 (a) representa la distribución 2D de los grupos bacterianos estudiados, mientras que la Figura 6.8 (b) representa la distribución radial promedio de grupos bacterianos e inertes.

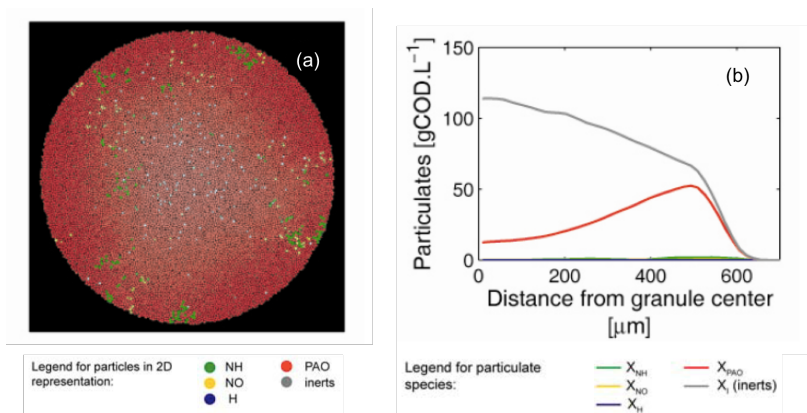


Figura 6.8: Resultados de un ciclo de tres horas representativo del estado maduro (en el día 700 de operación). (a) Distribución 2D de los grupos bacterianos. (b) Distribución radial promedio de grupos bacterianos e inertes. Tomado de Xavier et. al. 2007 [30].

De estos resultados se puede confirmar que las bacterias de tipo PAO son predominantes en el gránulo. Además, se aprecia que hacia el centro del gránulo hay predominancia de especies en etapa de muerte celular, representadas por las especies inertes. Un fenómeno interesante que se aprecia en estos resultados es una disminución de la biomasa total hacia el borde del gránulo, ya que el sistema modelado en este estudio considera gránulos de $550\mu m$ de radio, mientras que en la Figura 6.8 (b) se ve que hay presencia de bacterias hasta aproximadamente $640\mu m$.

Este fenómeno puede ser explicado por la interacción del gránulo con el medio acuoso en el que se encuentra. A pesar de que exista una predominancia de gránulos en reactores de granulación aeróbica, aún así existen otras especies, tales como hongos y bacterias filamentosas, otras estructuras de microorganismos, tales como flóculos y otras partículas de sólidos suspendidos. Todas estas estructuras pueden adherirse a la superficie de los gránulos, como se puede apreciar en la Figura 6.9, formando una corteza capaz de proteger al gránulo y además brindar estabilidad superficial a la estructura. Se ha observado que los gránulos incluso poseen una superficie hidrofóbica [8], lo que podría fortalecer el argumento de la existencia de esta corteza. Este cascarón debería tener un grosor fijo, independiente de del tamaño total del gránulo y se fijará en un tamaño de $100\mu m$.

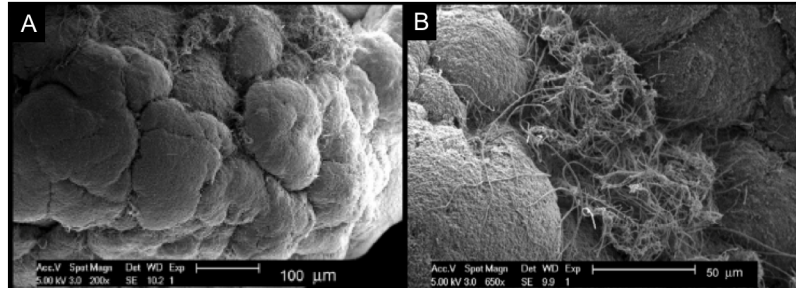


Figura 6.9: Imagen SEM de la superficie de un gránulo. [22]

Por otro lado, con respecto a la concentración de biomasa a considerar dentro del gránulo, se asumirá que esta depende mayoritariamente de la disponibilidad de sustrato en la superficie del gránulo, por lo que la concentración en la superficie siempre será la misma, independiente del tamaño del gránulo. Cabe destacar que en un reactor de granulación aeróbica se pueden encontrar gránulos de diversos tamaños, tal como se observa en la planta Nereda® operada en Gamerwolde. En esta planta se identifican hasta 6 clases de gránulos de tamaños diferentes, por lo que parece pertinente obtener una ecuación que permita conocer la concentración de biomasa como una función del radio, para todos los tamaños de gránulos existentes en un reactor. Tomando como referencia la Figura 6.8, se puede ver que la concentración de biomasa alcanza un valor máximo de $51,6 \text{ grCOD}/L$, por lo que se asumirá este valor como la concentración máxima de biomasa en la superficie de todos los gránulos. Al graficar la fracción creciente de la Figura 6.8 se puede ver que esta se ajusta a una tendencia lineal, como se aprecia en la Figura 6.10, con un valor de $R^2 = 0,955$.

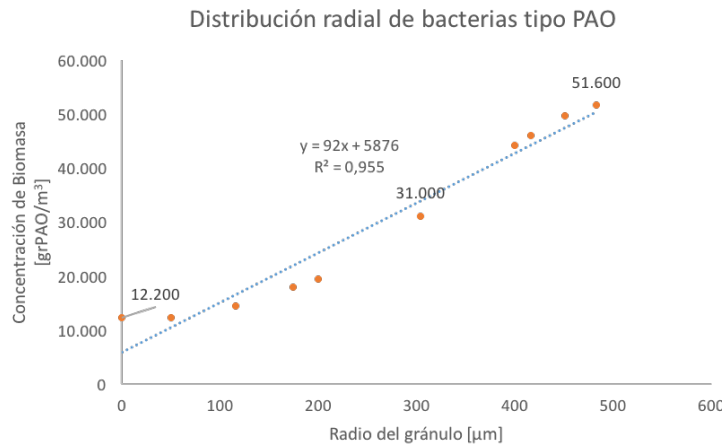


Figura 6.10: Tendencia lineal para datos extraídos de Xavier et. al 2007 [30]

En base a esto, se proponen los siguientes supuestos para construir las ecuaciones de concentración de biomasa en función del radio del gránulo. Sea R_{max} el radio del gránulo, para cualquier tamaño de gránulo.

1. Entre 0 y R_{max} la concentración de biomasa será una recta dependiente del radio del gránulo.
2. La concentración en el centro será igual a $5.876 \text{ grCOD}/m^3$: $X_{PAO} = 5.876$, $r = 0$

3. La concentración en el borde será igual a $51.600 \text{ grCOD}/\text{m}^3$: $X_{PAO} = 51.600$, $r = R_{max}$

Como resultado, la concentración de biomasa se puede obtener mediante la Ecuación 6.3. Según esta ecuación, el tamaño del gránulo interferirá en la pendiente de la recta, tal que para gránulos más pequeños la variación de biomasa según el radio del gránulo es mayor que para los gránulos más grandes. Este efecto se puede apreciar en la Figura 6.11.

$$X_{PAO} = \frac{51.600 - 5.876}{R_{max}} \cdot r + 5.876 \quad (6.3)$$

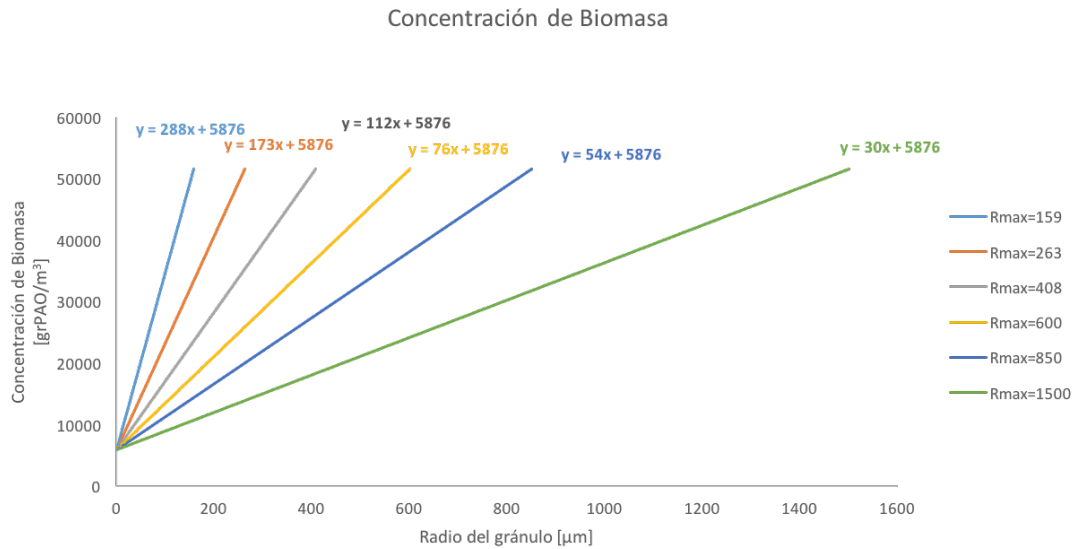


Figura 6.11: Concentración de biomasa para las distintas clases de gránulos existentes en un reactor

Se supondrá que las especies heterótrofas y nitrificantes existen solamente en la primera capa del gránulo y que su concentración será equivalente al 1% de la concentración de PAOs.

6.5. Tasa de Consumo

El objetivo de esta sección es encontrar la tasa de consumo presentada en la Ecuación 6.21. $r_{S,gr}$ hace referencia a la masa de sustrato consumido o liberado por la biomasa activa en una posición dada del gránulo. Como se mencionó antes, la biomasa activa se encuentra en la superficie de los, por lo que para estimar la tasa de consumo global en el interior del gránulo es necesario conocer la concentración de solutos que se encuentra en la superficie de los aglomerados. Siguiendo la trayectoria lineal de las moléculas desde el exterior del gránulo hacia el interior de las células, se debe considerar que las moléculas de soluto se transportan de forma externa desde los canales y espacios libres del gránulo hacia la superficie del aglomerado, en la que ocurre el fenómeno de transporte a través de la membrana de las células que se encuentran en la superficie. Una vez que las moléculas de soluto se encuentren adentro de las células ocurren finalmente la reacciones biológicas de conversión, que vendría siendo el término $r_{S,gr}$ que se desea buscar en el presente capítulo. Como fue mencionado previamente, solo se considera el consumo de nutrientes en la superficie de los aglomerados, debido a su estructura altamente densa y compacta que dificulta la transferencia de masa de solutos en su interior.

Al imponer un equilibrio en la superficie de la membrana igualando la tasa de transferencia externa ($r_{S,ext}$) y la tasa de transporte a través de la membrana ($r_{S,mb}$), es posible conocer la concentración de sustrato que ingresa a la célula, para luego encontrar la tasa de conversión $r_{S,gr}$ de cada sustrato estudiado.

$$r_{S,ext} = r_{S,mb} \quad (6.4)$$

6.5.1. Transferencia de masa externa

Debe estudiarse el transporte de nutrientes desde los canales del gránulo hasta la superficie del aglomerado donde se encuentran las células, dado que existe una alta resistencia a la transferencia de masa, debido a la película de líquido casi estancada en la superficie del aglomerado (ver Figura 6.12). La tasa de transferencia de masa externa del aglomerado ($r_{S,ext}$) se define como una función del coeficiente de difusión dentro del gránulo ($D_{S,e}$), el espesor de la capa límite (δ) y la diferencia entre la concentración en gránulo ($C_{S,gr}$) y en la superficie del aglomerado ($C_{S,ag}$).

$$r_{S,ext} \left[\frac{gr}{m^3 \cdot s} \right] = \frac{D_{S,e}}{\delta^2} \cdot (C_{S,gr} - C_{S,ag}) \quad (6.5)$$

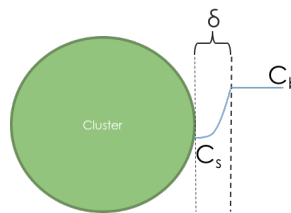


Figura 6.12: Representación de la transferencia de masa fuera de un aglomerado

Por simplicidad, se asumirá que la capa límite tiene un grosor igual al 10 % del diámetro del aglomerado, por lo que el factor $\frac{D_{S,e}}{\delta^2}$ es dependiente de la posición del gránulo.

6.5.2. Transporte a través de la membrana

Una vez que el sustrato llega a la superficie del aglomerado, debe ingresar a las células a través de la membrana. El transporte de Acetato y Fosfato ocurre mediante proteínas de membrana, mientras que en el caso del Oxígeno no hay transporte a través de la membrana, ya que este reacciona directamente en la cadena de transporte de electrones que se encuentra en la superficie de la célula. Para las proteínas de transporte de membrana, si la concentración de soluto es muy alta, los canales de difusión se saturan y la velocidad de transferencia es más lenta, por lo que la cinética de transporte se puede representar mediante la ecuación de Michalis-Menten (Ecuación 6.6).

$$r_{S,mb} \left[\frac{gr}{m^3 \cdot s} \right] = \frac{k_{S,mb} \cdot C_{S,ag}}{K_{S,mb} + C_{S,ag}} \quad (6.6)$$

El transporte de Acetato en *E.Coli* está mediado por una proteína de membrana de tipo permeasa (actP) [18] y se identificó un homólogo de actP en el genoma de *Accumulibacter*, que se predice que transporta Acetato a través de la membrana celular [19]. Valores de las constantes cinéticas para esta proteína han sido tomados por el estudio realizado en *E.Coli* [18], pero la proteína actP que es sintetizada por las bacterias de tipo PAO es muy similar en forma y tamaño a las sintetizadas por *E.Coli*. por lo que se asumirán los mismo valores, los que se presentan en la Tabla 6.4. El valor de $K_{Ac,mb}$ para la cinética propuesta es muy bajo en comparación con la concentración de entrada de acetato al reactor ($396 \text{ gr Ac}/m^3$), por lo que el valor de $k_{Ac,mb}$ es alcanzado rápidamente.

Tabla 6.3: Constantes cinéticas para la proteína actP.

Símbolo	Valor	Unidades
$k_{Ac,mb}$	1,1	$[gr AC/m^3/s]$
$K_{Ac,mb}$	0,48	$[gr AC/m^3]$

Imponiendo equilibrio en la superficie del aglomerado, la concentración de Acetato en la superficie del aglomerado ($C_{AC,ag}$) se puede obtener al resolver la siguiente ecuación:

$$\frac{D_{AC,e}}{\delta^2} \cdot (C_{AC,gr} - C_{AC,ag}) = \frac{k_{AC,mb} \cdot C_{AC,ag}}{K_{AC,mb} + C_{S,s}} \quad (6.7)$$

Para el transporte de Fosfato existen dos sistemas, que se activan dependiendo de la concentración de Fosfato en el medio, el sistema Pi inorgánico de baja afinidad (Pit) y el Pi específico de alta afinidad (Pst)[20]. La existencia de ambos sistemas se debe a la capacidad de los microorganismos para adaptarse a los cambios en la concentración de Fosfato en el ambiente, tal que el sistema Pit se utiliza en concentraciones altas de Fosfato, mientras que el sistema Pst se suprime durante la operación EBPR hasta que los niveles de Fosfato son muy bajos. [21]. Para efectos de este estudio, se considerará que el transporte de Fosfato ocurre a través del sistema Pit y los valores de sus constante cinéticas correspondientes se presentan en la Tabla 6.4.

Tabla 6.4: Constantes cinéticas para el sistema Pit

Símbolo	Valor	Unidades
$k_{PO_4,mb}$	0,212	$[grPO_4/m^3/s]$
$K_{PO_4,mb}$	$2,6 \cdot 10^{-6}$	$[grPO_4/m^3]$

Como el valor de $K_{PO_4,mb}$ es muy pequeño, se considerará que la reacción de transporte será de primer orden. Imponiendo equilibrio en la superficie, la concentración de Fosfato en la superficie del aglomerado ($C_{PO_4,ag}$) se puede obtener al resolver la siguiente ecuación:

$$\frac{D_{PO_4,e}}{\delta^2} \cdot (C_{PO_4,gr} - C_{PO_4,ag}) = k_{PO_4,mb} \cdot C_{PO_4,ag} \quad (6.8)$$

En el caso del oxígeno, no existe transporte a través de la membrana, por lo que a modo de simplificación se considerará que la concentración en la superficie del aglomerado es aproximable a la concentración en el interior del gránulo y se utilizará solamente el término $C_{O_2,gr}$ para la cinética correspondiente.

6.5.3. Cinética microbiana

Conociendo la concentración de sustrato que se encuentra en la superficie de las células, es posible estimar la tasa de consumo o liberación de sustratos en el gránulo ($r_{S,gr}$). Cabe destacar que todas las ecuaciones de cinéticas presentas a continuación están estrictamente relacionadas a la concentración de biomasa en el gránulo.

Acetato

El Acetato es consumido por las células de tipo PAO durante la fase anaeróbica y por los organismos heterótrofos que se encuentran en la capa mas externa del gránulo durante la fase aeróbica (Ecuación 6.9). Para la fase anaeróbica, la cinética de consumo puede ser descrita por una ecuación de tipo Michaelis-Menten, como se muestra en la Ecuación 6.10, que depende principalmente de la concentración de Acetato en el interior de las células. En este caso la cinética está regida por el valor de ($q_{Ac,max}$) dado que $k_{Ac,P}$ es considerablemente menor que la concentración de alimentación de Acetato (ver Tabla 6.5). Por otro lado, el consumo de Acetato en la fase aeróbica por parte de los organismos heterótrofos se asimila a una cinética de Monod compuesta, y depende tanto de la concentración de Acetato en el interior de la célula, como por la presencia de Oxígeno dentro del gránulo (Ecuación 6.11).

$$r_{Ac,gr} = -\frac{1}{Y_H} \cdot r_H^{(O_2)} - r_{Ac}^{(AN)} \quad (6.9)$$

$$r_{Ac}^{(AN)} = q_{Ac,max} \cdot \frac{C_{Ac,ag}}{C_{Ac,ag} + k_{Ac,P}} \cdot X_{PAO} \quad (6.10)$$

$$r_H^{(O_2)} = \mu_{H,max} \cdot \frac{C_{Ac,ag}}{C_{Ac,ag} + K_{Ac,H}} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,H}} \cdot X_H \quad (6.11)$$

Los coeficientes cinéticos y estequiométricos correspondientes al metabolismo del Acetato se presentan en la Tabla 6.5

Tabla 6.5: Coeficientes estequiométricos y cinéticos para el metabolismo de Acetato. Tomados de [30].

Símbolo	Valor	Unidades
Y_H	0,47	$[grH/grAc]$
$q_{Ac,max}$	7,92	$[grAc/grPAO/d]$
$K_{Ac,P}$	4	$[grAc/m^3]$
$\mu_{H,max}$	11,2	$[1/d]$
$K_{Ac,H}$	4	$[grAc/m^3]$
$K_{O_2,H}$	0,35	$[grO_2/m^3]$

Fosfato

En cuanto a la tasa de Fosfato, se tiene una reacción de liberación durante la fase anaeróbica y una reacción de consumo durante la fase aeróbica (Ecuación 6.12). La primera fase corresponde a la alimentación anaeróbica, en la que se libera Fosfato a medida que se consume Acetato y la tasa está determinada por el rendimiento anaeróbico de liberación de Fosfato (Y_{PO_4}). Cada vez que ocurre una alimentación, el Acetato es consumido y el Fosfato es liberado.

Por otro lado, la segunda etapa corresponde al consumo aeróbico de Fosfato, y su tasa de consumo es equivalente a una ecuación de Michaelis-Menten compuesta, en donde el primer término está asociado a la concentración de Oxígeno y el segundo a la concentración de Fosfato, cada una con sus correspondientes coeficientes de saturación media (Ecuación 6.13).

$$r_{PO_4,gr} = Y_{PO_4} \cdot r_{Ac}^{(AN)} - r_{PP}^{(O_2)} \quad (6.12)$$

$$r_{PP}^{(O_2)} = k_{PP} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,P}} \cdot \frac{C_{PO_4,ag}}{C_{PO_4,ag} + K_{PO_4,P}} \cdot X_{PAO} \quad (6.13)$$

Los coeficientes cinéticos y estequiométricos correspondientes al metabolismo del Fosfato se presentan en la Tabla 6.6

Tabla 6.6: Coeficientes estequiométricos y cinéticos para el metabolismo de Fosfato. Tomados de [30].

Símbolo	Valor	Unidades
Y_{PO_4}	0,5	$[grP/grAc]$
k_{PP}	0,4	$[grP/grPAO/d]$
$K_{O_2,P}$	0,2	$[grO_2/m^3]$
$K_{PO_4,P}$	1	$[grP/m^3]$

Polímeros de almacenamiento

En el caso de los polímeros (Poly-P y PHA) no hay transporte a través de la membrana ni difusión fuera de la célula, ya que se forman y se rompen en el interior de la célula. Las tasas de ruptura y formación dependen de las tasas de consumo de Acetato y Fosfato, con sus

correspondientes rendimientos. Para Poly-P, disminuye mientras se consume Acetato dentro de la célula y aumenta a medida que se consume fosfato, mientras que en el caso de PHA sucede al revés.

La tasa de Poly-P está directamente relacionada con la del fosfato, como se puede ver en la Ecuación 6.14, se utiliza la misma tasa de consumo y rendimiento. En el caso del PHA, también existen tasas diferenciadas para la fase anaeróbica y aeróbica (Ecuación 6.15). La formación anaeróbica se relaciona directamente al consumo de Acetato, mientras que la cinética para la ruptura de este polímero en la fase aeróbica está es muy similar a la tasa de consumo de Fosfato, pero en su lugar utiliza la concentración de PHA dentro de la célula ($C_{PHA,gr}$), como se puede ver en la Ecuación 6.16.

$$r_{PP,gr} = -Y_{PO4} \cdot r_{Ac}^{(AN)} + r_{PP}^{(O_2)} \quad (6.14)$$

$$r_{PHA,gr} = Y_{PHA} \cdot r_{Ac}^{(AN)} - r_{PHA}^{(O_2)} \quad (6.15)$$

$$r_{PHA}^{(O_2)} = k_{PHA} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,P}} \cdot \frac{C_{PHA,gr}}{C_{PHA,gr} + K_{PHA,P}} \cdot X_{PAO} \quad (6.16)$$

Los coeficientes cinéticos y estequiométricos correspondientes al metabolismo de PHA se presentan en la Tabla 6.7.

Tabla 6.7: Coeficientes estequiométricos y cinéticos para el metabolismo de PHA. Tomados de [30].

Símbolo	Valor	Unidades
Y_{PHA}	1,5	[grPHA/grAc]
k_{PHA}	5,51	[grPHA/grPAO/d]
$K_{PHA,P}$	0,01	[grPHA/grPAO]

Oxígeno

Para el consumo de Oxígeno en la fase aeróbica, en primer lugar se supone que la concentración de Oxígeno en el seno del reactor es constante e igual a $3,2mgO_2/L$. Sin embargo, se debe estimar cuánto de este Oxígeno realmente ingresa al gránulo y es consumido por los diferentes organismos que habitan en el.

Las bacterias de tipo PAO utilizan el Oxígeno para 3 reacciones principales: consumo de PHA, almacenamiento de Poly-P y formación de glucógeno. Además de las PAO, los organismos heterótrofos (X_H) y las bacterias oxidantes de amonio (X_{NH}) y nitrito (X_{NO}) consumen Oxígeno. Esto se puede resumir mediante la Ecuación 6.17.

$$r_{O_2} = \left(1 - \frac{3,43}{Y_{NH}}\right) \cdot r_{NH}^{O_2} + \left(1 - \frac{1,14}{Y_{NO}}\right) \cdot r_{NO}^{O_2} + \left(1 - \frac{1}{Y_H}\right) \cdot r_H^{O_2} + \left(\frac{1}{Y_{PHAO}} - 1\right) \cdot r_{PHA}^{O_2} - \left(\frac{1}{Y_{PPO}}\right) \cdot r_{PP}^{O_2} + \left(1 - \frac{1}{Y_{GLYO}}\right) \cdot r_{GLY}^{O_2} \quad (6.17)$$

Dado que el modelo se centra en el Fosfato y el Acetato como sustratos de interés, se sim-

plificarán las tasas asociadas con los compuestos nitrogenados y el glucógeno como cinéticas de tipo Michaelis-Menten asociadas solamente a la concentración de oxígeno en el gránulo, como se se presenta en las Ecuaciones 6.18, 6.19 y 6.20.

$$r_{NH}^{(O_2)} = \mu_{NH,max} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,NH}} \cdot X_{NH} \quad (6.18)$$

$$r_{NO}^{(O_2)} = \mu_{NO,max} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,NO}} \cdot X_{NO} \quad (6.19)$$

$$r_{GLY}^{(O_2)} = k_{GLY} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,P}} \cdot X_{PAO} \quad (6.20)$$

Los coeficientes cinéticos y estequiométricos correspondientes al metabolismo del Oxígeno se presentan en la Tabla 6.8.

Tabla 6.8: Coeficientes estequiométricos y cinéticos para el metabolismo de Oxígeno. Tomados de [30].

Símbolo	Valor	Unidades
Y_{NH}	0,15	$[grNH/grO_2]$
Y_{NO}	0,041	$[grNH/grO_2]$
Y_H	0,47	$[grH/grO_2]$
Y_{PHAO}	1,39	$[grPHA/grO_2]$
Y_{PPO}	4,42	$[grP/grO_2]$
Y_{GLYO}	1,11	$[grGLY/grO_2]$
$\mu_{NH,max}$	0,4	$[1/d]$
$\mu_{NO,max}$	1,1	$[1/d]$
k_{GLY}	0,93	$[grGLY/grPAO/d]$
$K_{O_2,NH}$	0,3	$[grO_2/m^3]$
$K_{O_2,NO}$	0,1	$[grO_2/m^3]$
$K_{O_2,P}$	0,2	$[grO_2/m^3]$

Ecuación	Significado
$\frac{\partial C_{S,gr}}{\partial t} - D_{S,gr} \nabla^2 C_{S,gr} - r_{S,gr} = 0$	Variación de la concentración de sustratos S en el tiempo
$r_{S,ext} = \frac{D_{S,e}}{\delta^2} \cdot (C_{S,gr} - C_{S,ag})$	Tasa de transferencia de masa externa del aglomerado
$r_{S,mb} = \frac{k_{S,mb} \cdot C_{S,ag}}{K_{S,mb} + C_{S,ag}}$	Tasa de transporte a través de la membrana celular
$r_{Ac,gr} = -\frac{1}{Y_H} \cdot r_H^{(O_2)} - r_{Ac}^{(AN)}$	Tasa de consumo de Acetato en el gránulo
$r_{Ac}^{(AN)} = q_{Ac,max} \cdot \frac{C_{Ac,ag}}{C_{Ac,ag} + k_{Ac,P}} \cdot X_{PAO}$	Tasa de consumo anaeróbico de Acetato
$r_H^{(O_2)} = \mu_{H,max} \cdot \frac{C_{Ac,ag}}{C_{Ac,ag} + K_{Ac,H}} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,H}} \cdot X_H$	Tasa de consumo aeróbico de Acetato
$r_{PO_4,gr} = Y_{PO_4} \cdot r_{Ac}^{(AN)} - r_{PP}^{(O_2)}$	Tasa de conversión de Fosfato en el gránulo
$r_{PP}^{(O_2)} = k_{PP} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,P}} \cdot \frac{C_{PO_4,ag}}{C_{PO_4,ag} + K_{PO_4,P}} \cdot X_{PAO}$	Tasa de consumo aeróbico de Fosfato
$r_{PP,gr} = -Y_{PO_4} \cdot r_{Ac}^{(AN)} + r_{PP}^{(O_2)}$	Tasa de conversión de Poly-P en el gránulo
$r_{PHA,gr} = Y_{PHA} \cdot r_{Ac}^{(AN)} - r_{PHA}^{(O_2)}$	Tasa de conversión de PHA en el gránulo
$r_{PHA}^{(O_2)} = k_{PHA} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,P}} \cdot \frac{C_{PHA,gr}}{C_{PHA,gr} + K_{PHA,P}} \cdot X_{PAO}$	Tasa de degradación aeróbica de PHA
$r_{O_2}^*$	Tasa de consumo de Oxígeno en el gránulo
$r_{NH}^{(O_2)} = \mu_{NH,max} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,NH}} \cdot X_{NH}$	Tasa de crecimiento aeróbico de organismos nitrificantes (NH)
$r_{NO}^{(O_2)} = \mu_{NO,max} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,NO}} \cdot X_{NO}$	Tasa de crecimiento aeróbico de organismos nitrificantes (NO)
$r_{GLY}^{(O_2)} = k_{GLY} \cdot \frac{C_{O_2,gr}}{C_{O_2,gr} + K_{O_2,P}} \cdot X_{PAO}$	Tasa de formación aeróbica de glicógeno

$$r_{O_2}^* = \left(1 - \frac{3,43}{Y_{NH}}\right) \cdot r_{NH}^{O_2} + \left(1 - \frac{1,14}{Y_{NO}}\right) \cdot r_{NO}^{O_2} + \left(1 - \frac{1}{Y_H}\right) \cdot r_H^{O_2} + \left(\frac{1}{Y_{PHAO}} - 1\right) \cdot r_{PHA}^{O_2} - \left(\frac{1}{Y_{PPO}}\right) \cdot r_{PP}^{O_2} + \left(1 - \frac{1}{Y_{GLYO}}\right) \cdot r_{GLY}^{O_2}$$

6.6. Resultados

A continuación se presentan los resultados obtenidos en el modelo relatado previamente. En esta sección se muestran los perfiles de concentración en el radio del gránulo durante un ciclo de operación, el que se caracteriza por una fase anaeróbica hasta los 60 minutos y luego una fase aeróbica con duración de 5 horas, entregando en total un ciclo de 6 horas, o 360 minutos. Se presentan las concentraciones de los sustratos principales estudiados (Acetato y Ortofosfato) durante todo el ciclo y la concentración de Oxígeno durante la fase aeróbica.

Con el objetivo de poder comparar los resultados con gránulos reales se considera un gránulo con radio igual a $1.788 \mu m$, equivalente al radio del gránulo estudiado en el Capítulo 5. Para todas las figuras presentadas a continuación el eje de las coordenadas, o eje X, representa el radio del gránulo como se puede apreciar en la representación de la Figura 6.13. El valor 0 en este eje es equivalente al centro del gránulo.

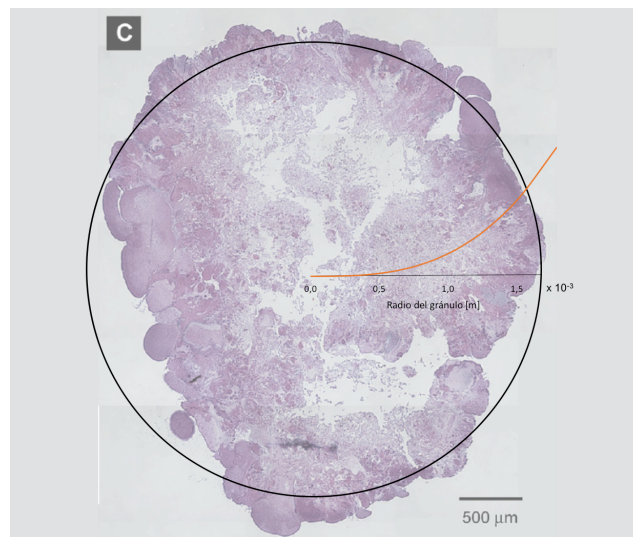


Figura 6.13: Figura referencial para el eje de las coordenadas.

Con el objetivo de realizar un análisis de sensibilidad, se presentan 3 casos, diferenciados principalmente por la tasa de reacción en el gránulo. Los primeros resultados presentados describen el perfil de concentraciones de las especies estudiadas considerando solamente el transporte de moléculas, es decir, no se incluye la reacción de consumo o generación de ninguna especie. Para los 2 casos siguientes se consideran diferentes concentraciones de biomasa en el interior del gránulo. El caso 2 utiliza la concentración de biomasa presentada en la Sección 6.8, la que se denominará como biomasa original, mientras que para el Caso 3 se multiplica la concentración de biomasa por un factor de corrección de 0,1.

Además, se quiere evaluar como afecta el radio total del gránulo en el perfil de concentraciones, por lo que además se presentan los casos 1,2 y 3 para un gránulo de radio igual a $500 \mu m$.

6.6.1. Mallado y condiciones de Estabilidad

Se propone un modelo discreto, en el que existe un cambio de medio entre una capa y otra y permite conocer el valor de concentración puntual en cada capa. El dominio espacial está definido entre $R_{m\acute{a}x}$ y 0, simulando el radio total de un granulo maduro, y el dominio temporal esta definido en 6 horas, o 360 minutos, representando un ciclo de operacion del reactor representado. En la modelacion, Δx esta definido por el grosor de cada capa y es un vector de valores descendientes y de largo igual a $n = 27$ (obtenido en Capıtulo 5). En otras palabras, el mallado espacial no tiene un valor constante en todo el dominio simulado, sino que es de tamano decreciente. Por otro lado, Δt debe tener un valor que asegure el cumplimiento de condiciones de estabilidad. Este se define en $\Delta t = 0,4$ y la condicion de estabilidad se comprueban en el Anexo A.1.

Caso 1: Transporte sin reaccion interna

Para observar y evaluar los efectos del transporte y difusividad de las moleculas en el granulo se desprecia el factor de reaccion en la ecuacion 6.2 y, por lo tanto, la ecuacion representada en las figuras a continuacion corresponde a:

$$\frac{\partial C_{S,gr}}{\partial t} - D_{S,gr} \nabla^2 C_{S,gr} = 0 \quad (6.21)$$

Al estudiar el perfil de concentracion de Acetato, Fosfato y Oxıgeno del Caso 1, sin reacciones de consumo o liberacion de sustratos en el interior del granulo, es posible evaluar, por un lado, el efecto de la difusividad propuesta en el capıtulo anterior, y por otro lado, el efecto de las condiciones de borde impuestas.

En la Figura 6.14 se presenta el perfil de concentraciones del Acetato en 6 tiempos distintos desde el inicio del ciclo. La Figura 6.14 (a) representa la alimentacion que tiene una duracion aproximada de 7 minutos, en la que es posible ver que a medida que avanza el tiempo la concentracion en el borde del granulo se mantiene constante, pero por efecto de la difusividad va aumentando en el interior del granulo, alcanzando una profundidad de aproximadamente 0,7 mm a los 8 minutos, como muestra la curva amarilla. Por otro lado, en la Figura 6.14 (b) se puede ver como a medida que se agota el sustrato en el exterior del granulo, su concentracion tambien disminuye en el interior de este, sin embargo esta no llega a 0. Luego de esto, ocurren 3 nuevas alimentaciones a los 15, 30 y 45 minutos, y el perfil de concentraciones resultante es practicamente igual al representado por la Figura 6.14.

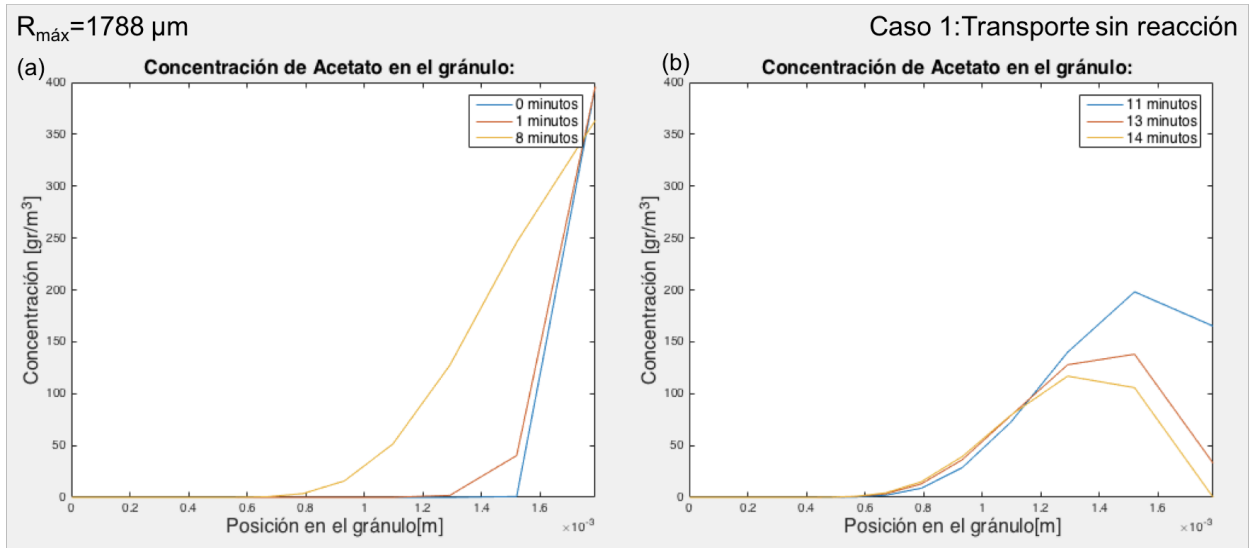


Figura 6.14: Perfil de concentraciones de Acetato en el radio del gránulo sin considerar reacciones de consumo o liberación de sustratos. (a) Variación de la concentración entre 0 y 8 minutos de operación. (b) Variación de la concentración entre 11 y 14 minutos de operación

Se puede apreciar de la Figura 6.14 que la curva del Acetato a los 8 minutos de operación tiene la misma forma que la difusividad propuesta en la Figura 5.10, dado que en este caso el único factor que gobierna la ecuación de transporte es la difusividad, que a su vez depende del radio. Sin embargo, la difusividad alcanza valores cercanos a 0 alrededor de $0,5 \text{ mm}$, mientras que el perfil de concentraciones del Acetato alcanza una profundidad máxima de aproximadamente $0,8 \text{ mm}$. Esta diferencia se debe principalmente a que luego de los 8 minutos la concentración de Acetato en el borde del gránulo comienza a disminuir rápidamente. Por la forma en que está construida la ecuación de diferencias finitas, si el Acetato en el borde se hubiese mantenido constante por más tiempo entonces hubiese alcanzado una profundidad mayor en el gránulo, llegando a las capas internas de este. Sin embargo, teóricamente se sabe que los sustratos no son capaces de alcanzar el centro del gránulo, por lo tanto, la alimentación tipo saciedad-hambruna impuesta por las condiciones de borde tiene un rol importante en la estratificación del gránulo.

La Figura 6.15 representa el perfil de concentraciones para el Fosfato durante todo un ciclo de operación. La Figura 6.15 (a) permite ver como la concentración de Fosfato aumenta en el gránulo durante la etapa anaeróbica alcanzando una profundidad de aproximadamente $0,4 \text{ mm}$ a los 60 minutos de operación (línea celeste). Durante la etapa aeróbica (Figura 6.15 (b)), a medida que la concentración exterior disminuye, esta también decrece en el interior del gránulo, sin embargo, debido al efecto de la difusividad, aumenta la profundidad de penetración de este sustrato, llegando hasta prácticamente el centro del gránulo al final del ciclo, representado por la línea morada.

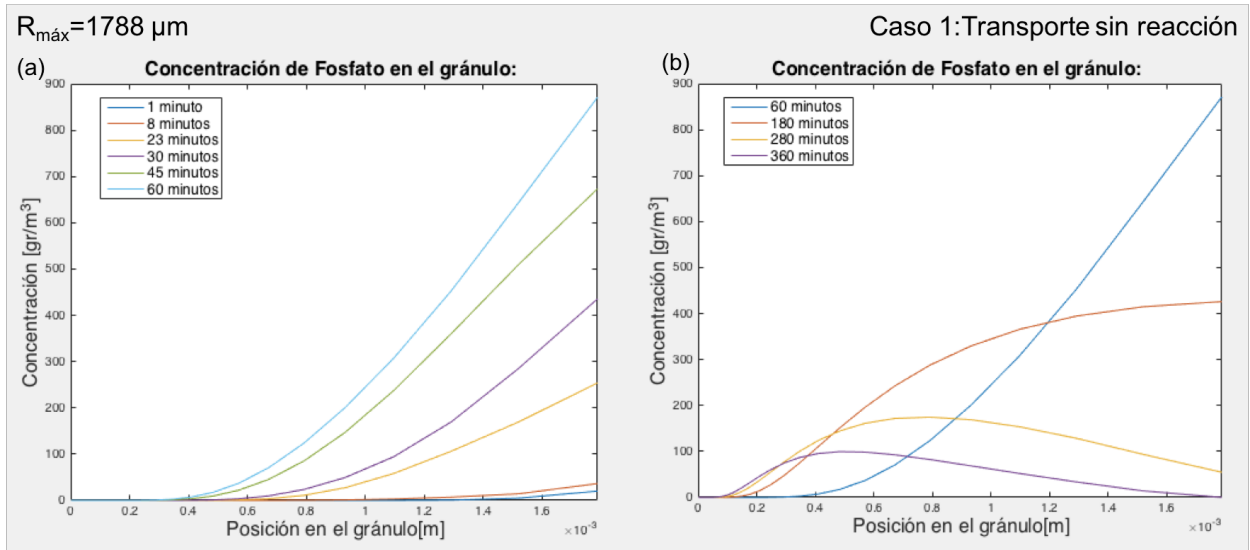


Figura 6.15: Perfil de concentraciones de Fosfato en el radio del gránulo sin considerar reacciones de consumo o liberación de sustratos. (a) Variación de la concentración en fase aeróbica (entre 0 y 60 minutos). (b) Variación de la concentración en fase anaeróbica (entre 60 y 360 minutos)

Al analizar las curvas resultantes del perfil de concentración del Fosfato se puede ver que la concentración en el interior del gránulo va aumentando a medida que la concentración en el exterior también aumenta, pero siempre manteniendo la forma de la difusividad. Se observa un efecto interesante en la fase aeróbica, en la que a pesar de que la concentración exterior disminuye, en el centro del gránulo esta aumenta, alcanzando aún mayor profundidad, llegando hasta prácticamente el centro del gránulo, lo que se debe netamente al transporte de moléculas impulsado por un gradiente de concentración. A pesar de que la difusividad tenga valores muy cercanos a cero a partir de 0,4mm de profundidad, el Fosfato logra ingresar más allá de eso. Este efecto probablemente se debe a que la etapa aeróbica tiene una duración de 5 horas, y por lo tanto, a pesar de que la difusividad sea pequeña, el paso del tiempo permite que el transporte siga ocurriendo en el interior del gránulo. También es pertinente recalcar que a pesar de que no exista consumo de este sustrato en la fase aeróbica, su concentración global en el interior del gránulo disminuye, lo que demuestra que la difusión de partículas ocurre en ambos sentidos, es decir que Fosfato también sale del gránulo.

Cabe destacar que para las condiciones de borde del sistema se ha impuesto mezcla perfecta en el reactor, sin embargo la alimentación de aguas servidas en los reactores reales ocurre de forma ascendente, pasando a través de un lecho de gránulos formada a partir de la sedimentación y, por lo tanto, el consumo de Acetato y liberación de Fosfato no ocurre en condiciones de mezcla perfecta. Dado esto, las condiciones de borde no son iguales para todos los gránulos del reactor. Efectivamente, es necesario que la concentración de Acetato llegue a 0 (o valores cercanos) en el borde superior del reactor, pero su consumo es paulatino a medida que pasa a través del lecho formado por los gránulos. Probablemente, para los gránulos ubicados en el fondo del reactor, la concentración de Acetato no llegue a 0, sino que hasta un valor equivalente al consumo de todos los gránulos ubicados en esa posición. Además, lo que ocurre afuera del gránulo es dependiente del consumo interno de todos los gránulos, por lo que no se deberían analizar por separado. Estos resultados presentados son

una primera aproximación de lo que está ocurriendo en el interior de un gránulo y el análisis se puede profundizar si se expande el modelo a un reactor completo, que permita acoplar las condiciones exteriores con el interior del gránulo.

Por último, se presenta el perfil de concentraciones de Oxígeno en el radio del gránulo durante la fase aeróbica, es decir entre 61 y 360 minutos de operación (Figura 6.16). Dado que la concentración en el seno del reactor se mantiene constante a 3,2 gr/L y que además no hay consumo de Oxígeno en el interior del gránulo, esta molécula es capaz de llegar prácticamente al centro del gránulo, alcanzando una profundidad de aproximadamente 0,05 mm. Se puede ver además por la progresión de las curvas presentadas que hasta los 180 minutos (curva morada en la Figura) la concentración en el interior del gránulo aumenta rápidamente.

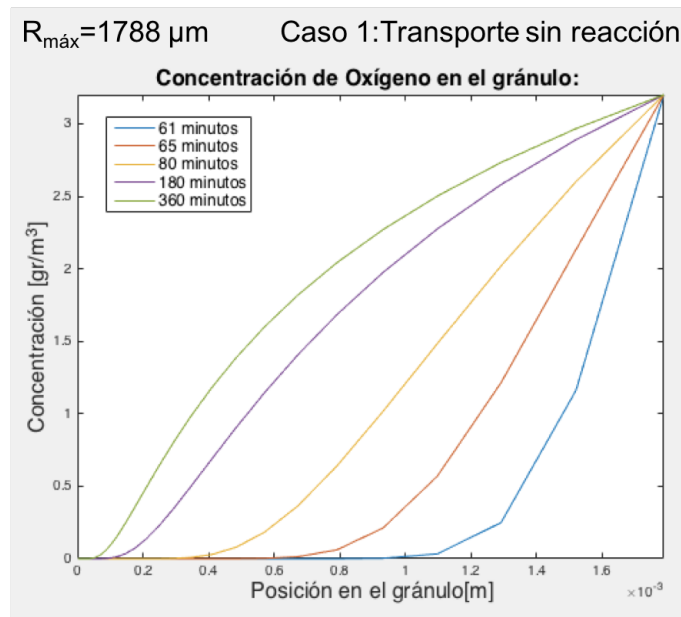


Figura 6.16: Perfil de concentraciones de Oxígeno en el radio del gránulo sin considerar reacciones de consumo o liberación de sustratos. Fase aeróbica (entre 61 y 360 minutos).

Se observa que debido a la larga duración de la etapa aeróbica, y además que este posee una difusividad mayor al de las otras dos especies estudiadas, su perfil de concentraciones presenta una forma muy diferente al Acetato y Fosfato. Dado que solamente hay transporte, la concentración en su interior es capaz de aumentar indefinidamente si el tiempo de operación es lo suficientemente grande. Sin embargo, se aprecia que el aumento en la concentración de Oxígeno en las dos primeras horas de aireación (entre 60 y 180 minutos) es más rápido que para las 3 horas siguientes, lo que demuestra que puede haber una saturación de esta molécula en el interior del gránulo. A diferencia de la etapa anaeróbica, la etapa aeróbica ocurre en condiciones de mezcla perfecta y con una concentración de Oxígeno disuelto constante en el seno del líquido, por lo tanto esta condición de borde si es realista, dado que la concentración afuera del gránulo no depende de lo que ocurre en el interior. Cabe destacar que debido a la forma que está construida la ecuación de diferencias finitas, la concentración de oxígeno en el centro siempre será 0, sin embargo esto no ocurre así en la realidad. Debido al gradiente de concentraciones, eventualmente la concentración de Oxígeno sería constante

e igual a la concentración de equilibrio. Sin embargo, gracias a la bibliografía estudiada se conoce que efectivamente existe un gradiente de Oxígeno en el interior del gránulo, el que es responsable en gran medida de la forma física que adoptan estas estructuras, así como además la estratificación de las especies que habitan en ella.

Caso 2: Biomasa original

Para este caso de estudio se considera la distribución de biomasa tal como se presenta en la Sección 6.8, en donde la concentración de la primera capa es igual a 51grPAO/L . A modo general, se observa que la tasa de consumo de Acetato es muy alta, tal que esta molécula no es capaz de penetrar más allá de la primera capa del gránulo. El perfil de concentración del Acetato durante los primeros 15 minutos de operación se puede apreciar en la Figura 6.17, en el que se puede ver como este es consumido inmediatamente en la primera capa del gránulo por los microorganismos que en ella habitan. De esta forma, el Acetato no es capaz de llegar hacia las otras capas internas debido, por lo que la tasa de consumo es más rápida que la tasa de transporte. Este comportamiento se repite para las 4 alimentaciones durante la fase anaeróbica.

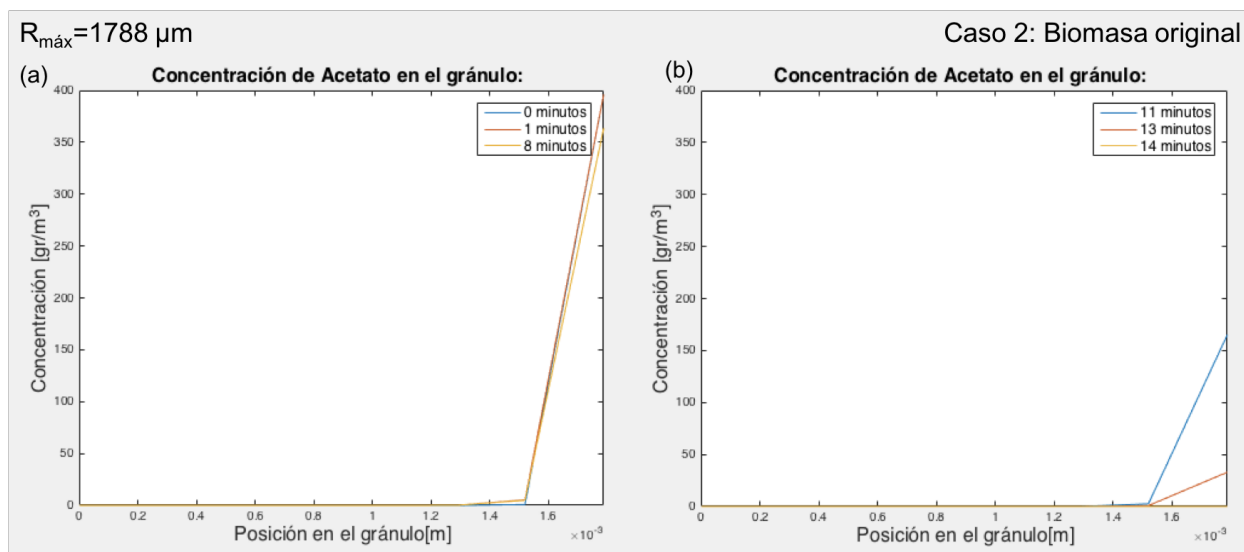


Figura 6.17: Perfil de concentraciones de Acetato en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a 51grPAO/L en la primera capa. (a) Variación de la concentración entre 0 y 8 minutos de operación. (b) Variación de la concentración entre 11 y 14 minutos de operación

Para el caso del Fosfato, la Figura 6.18 permite ver que se sigue una tendencia muy similar al Caso 1 descrito previamente, alcanzando una profundidad de $0,4 \text{ mm}$. Sin embargo, a diferencia del Caso 1, se observa que para los 8, 23 y 45 minutos de la Figura 6.18 (a), las curvas presentan un cambio notorio en la pendiente entre la primera y segunda capa, en donde incluso la concentración en esta es superior que en el borde del gránulo. Este cambio en la pendiente ocurre de forma simultánea con el consumo de Acetato, dado que la cinética de liberación de Fosfato está relacionada a la tasa de consumo de Acetato a través del rendimiento anaeróbico Y_{PO_4} . En el caso de la fase aeróbica representado en la Figura 6.18 (b) no se observan cambios con respecto al Caso 1.

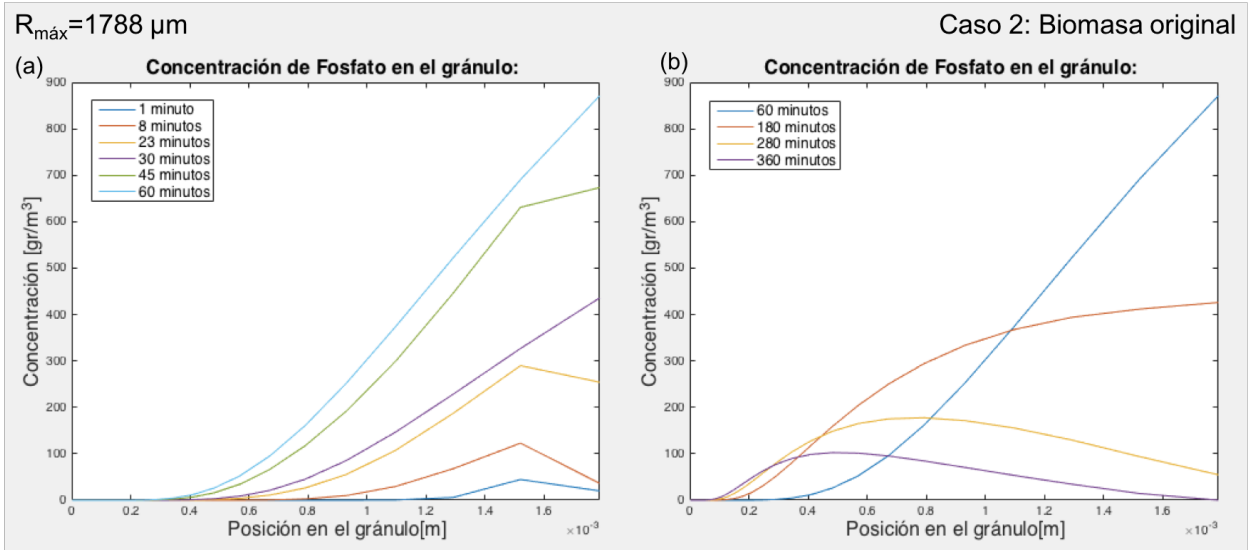


Figura 6.18: Perfil de concentraciones de Fosfato en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a 51 *grPAO/L* en la primera capa. (a) Variación de la concentración en fase aeróbica (entre 0 y 60 minutos). (b) Variación de la concentración en fase anaeróbica (entre 60 y 360 minutos)

Para el caso del Oxígeno presentado en la Figura 6.19 se observa la misma conducta que en el caso del Acetato en la Figura 6.17(a), en la que el sustrato en cuestión es consumido rápidamente en la primera capa del gránulo, sin permitir su ingreso a la capas posteriores. Debido a esto, se observa que para todos los tiempos el perfil de concentraciones en este caso es una línea recta entre la concentración de Oxígeno en el seno del reactor y 0.

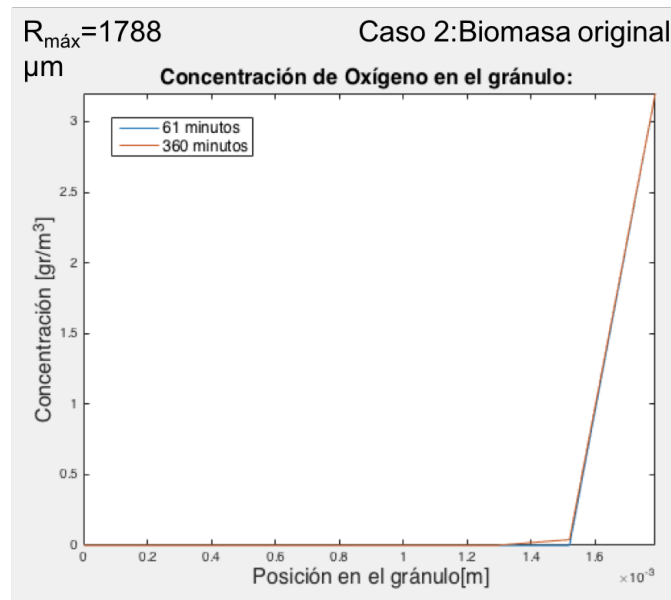


Figura 6.19: Perfil de concentraciones de Oxígeno en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a 51 *grPAO/L* en la primera capa. Fase aeróbica (entre 61 y 360 minutos).

El Caso 2 es opuesto al Caso 1, ya que tanto el Acetato como el Oxígeno se consumen completamente en la primera capa del gránulo. Este fenómeno trae como consecuencia que no sea posible el ingreso de estos sustratos al interior del gránulo, y por lo tanto, su consumo por parte de los organismos que habitan en él no tiene lugar. Si esto pasara en la realidad no se formaría ni crecería biomasa en el interior del gránulo, y por lo tanto no sería posible formar este tipo de estructuras. Según lo descrito por los perfiles de concentración formados en este caso, la biomasa activa se encuentra netamente en el cascarón externo del gránulo, mientras que todas las células que se encuentran en el interior estarían en etapa de muerte celular debido a la escasez de alimento. Sin embargo, a partir de bibliografía se ha establecido que los aglomerados de células crecen desde el interior del gránulo, y a medida que van aumentando su tamaño se mueven hacia las capas externas de este. Esto representa una contradicción, por lo que estos resultados no son representativos de la realidad.

A pesar de que el consumo de Acetato en la fase anaeróbica es muy alto, el perfil de concentraciones del Fosfato mantiene una forma muy similar a la presentada en el Caso 1. La principal diferencia en este caso es que mientras está ocurriendo la alimentación de sustrato, y por lo tanto el consumo de Acetato en la primera capa, se observa un cambio en la pendiente de la curva del Fosfato, indicando la liberación de esta molécula. Aún así, la concentración de Fosfato no presenta un aumento tan abrupto como ocurre en el caso del Acetato, a pesar de que sus cinéticas están estrechamente relacionadas. Este efecto podría indicar que el perfil de concentraciones del Fosfato está gobernado por el transporte.

Estos resultados se contradicen con la realidad, por lo que es pertinente cuestionar el valor de las constantes cinéticas utilizadas. Según la bibliografía utilizada para la realización del modelo (Xavier et al. 2007 [30]) las constantes cinéticas asociadas a las tasas máximas de consumo están normalizadas por la concentración de biomasa local en $grPAO/L$. Se utiliza la concentración de biomasa presentada en la Sección 6.8, la que es dependiente del radio gránulo, sin embargo no se tiene conocimiento práctico sobre el valor exacto de estos valores, por lo que parece pertinente evaluar el comportamiento de los sustratos en el gránulo al variar la concentración de biomasa, para lo cual se crea un factor de corrección para esta, el que es evaluado en el Caso 3.

Caso 3: Biomasa con factor de corrección

Debido a que lo observado en el Caso 2 no es representativo de la realidad, se propone un factor de corrección para la concentración de biomasa tal que las tasas de consumo y liberación de sustratos sean 10 veces menores que en el caso de la biomasa original. Esto es equivalente a considerar una concentración de 5,1 $grPAO/L$ en la primera capa del gránulo y respetar la tendencia lineal propuesta en la Sección 6.8. En base a esto, es posible observar que para este caso el Acetato logra alcanzar una profundidad de penetración superior a la primera capa del gránulo, llegando hasta aproximadamente $1mm$, como se aprecia en la curva amarilla de la Figura 6.20 (a). Una vez que finaliza la alimentación a los 8 minutos aproximadamente, se puede observar en la Figura 6.20 (b) como la concentración de Acetato disminuye, tanto en el interior del gránulo como en el exterior. A diferencia del Caso 1, el Acetato se agota completamente en el interior del gránulo a medida que esta disminuye en borde, pero al menos es capaz de penetrar hacia las capas internas del gránulo, a diferencia

del Caso 2. Para las siguientes 3 alimentaciones en los minutos 15, 30 y 45 el perfil de concentración de Acetato se comporta de la misma forma que el presentado en la Figura 6.20. Para este caso se puede ver que el Acetato es capaz de ingresar a las capas internas del gránulo, hasta una profundidad aproximada de 1mm, a diferencia del Caso 1 en el que ingresa hasta aproximadamente 0,8mm. Otra diferencia con respecto al primer caso es que entre los 11 y 14 minutos se puede apreciar un consumo en el interior del gránulo, agotando casi por completo este nutriente.

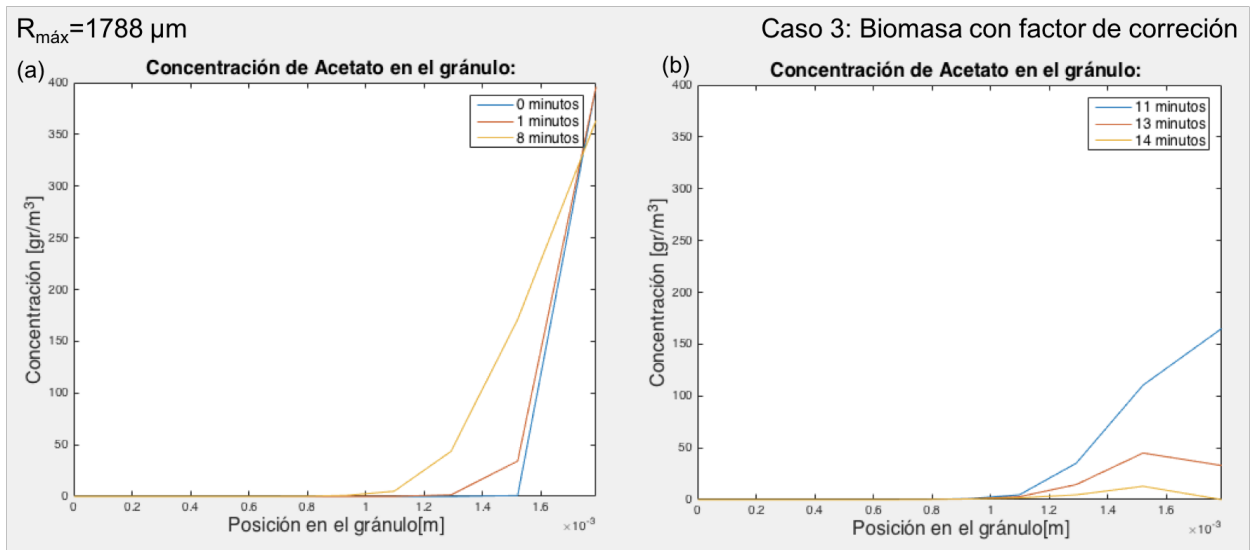


Figura 6.20: Perfil de concentraciones de Acetato en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a $5,1 \text{ grPAO/L}$ en la primera capa. (a) Variación de la concentración entre 0 y 8 minutos de operación. (b) Variación de la concentración entre 11 y 14 minutos de operación

Para el caso del Fosfato presentado en la Figura 6.21 se puede ver como la disminución en la concentración de biomasa influye en el perfil de concentraciones, tal que ya no se observa un cambio de pendiente tan abrupto entre las primeras dos capas del gránulos, como se dio en el Caso 2. Se puede ver que para este caso, el perfil de concentración de la etapa anaeróbica representado por la Figura 6.21(a) se asimila al Caso 1, en donde sólo gobierna el transporte. Para el caso aeróbico presentado en la Figura la Figura 6.21(b) no se ven cambios con respecto a los Casos 1 y 2. Para el Fosfato se puede ver como el perfil de concentración se mantiene muy similar, fortaleciendo así el argumento de que este está gobernado por el transporte.

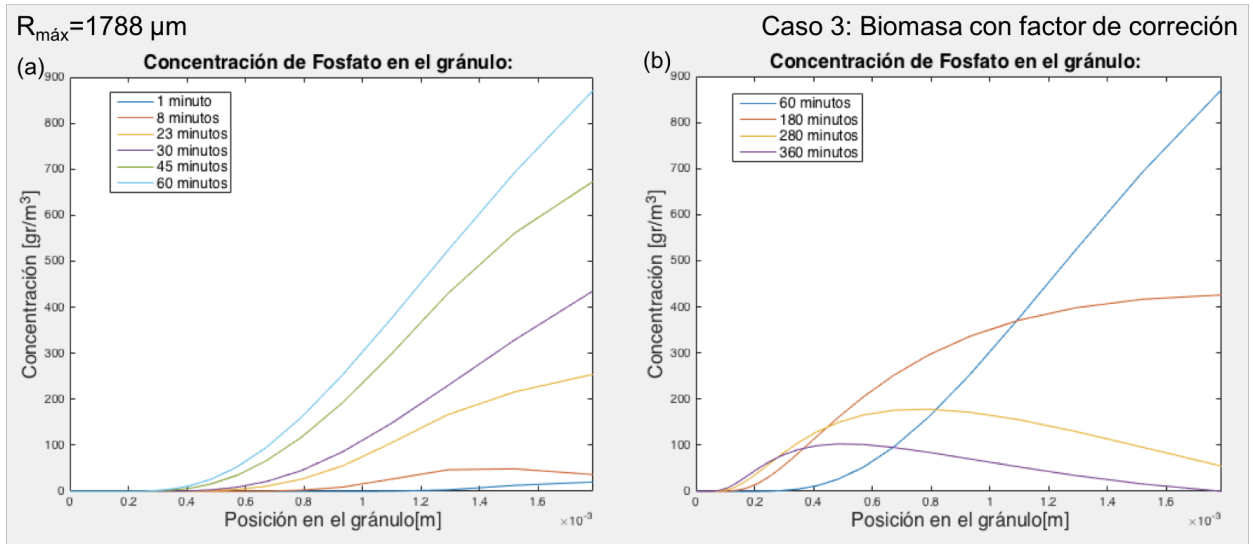


Figura 6.21: Perfil de concentraciones de Fosfato en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a 51 grPAO/L en la primera capa. (a) Variación de la concentración en fase aeróbica (entre 0 y 60 minutos). (b) Variación de la concentración en fase anaeróbica (entre 60 y 360 minutos)

Al igual que en el Caso 2, el Oxígeno tiene una conducta muy similar a la del Acetato. Se puede apreciar de la Figura 6.22 que el Oxígeno es capaz de ingresar hasta la tercera capa del gránulo, equivalente a un radio aproximado de 1mm . Cabe destacar que para este caso la concentración de Oxígeno se mantiene constante entre los tiempos 61 y 198 minutos de operación, representados por la línea azul. Posterior a eso la concentración de Oxígeno aumenta paulatinamente, hasta estabilizarse a los 215 minutos. A partir de este tiempo la curva se mantiene constante e igual la curva amarilla.

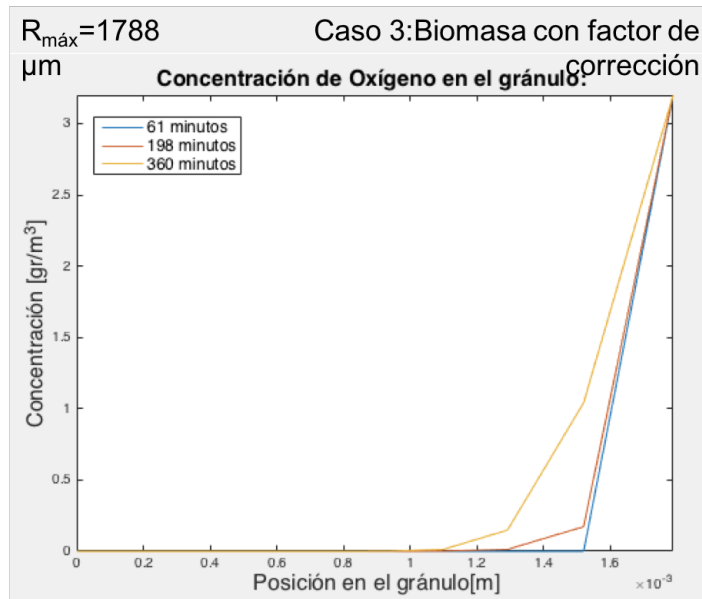


Figura 6.22: Perfil de concentraciones de Oxígeno en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a $5,1 \text{ grPAO/L}$ en la primera capa. Fase aeróbica (entre 61 y 360 minutos).

Variación según tamaño del gránulo

El modelo propuesto ha sido construido de tal manera que permite obtener un perfil de concentraciones de las especies de interés para cualquier radio de gránulo, por lo que resulta pertinente comparar el efecto del radio total de las partículas en el comportamiento de los sustratos en el interior del gránulo. Para esto se tomará un gránulo más pequeño al estudiado previamente y con radio igual a $500 \mu m$. Cabe destacar que mientras más chico sea el gránulo menor será la difusividad en su interior, debido a que los aglomerados de este son mas pequeños y por lo tanto hay menos espacio libre para la circulación y movimiento de partículas. Los resultados presentados a continuación consideran los 3 casos presentados previamente y se comparan los dos tamaños de gránulos estudiados para un instante dado de operación.

Para todos los casos y especies estudiadas se observa que el perfil de concentración mantiene la misma forma, pero la profundidad de ingreso que alcanzan los sustratos es menor en el caso del gránulo más pequeño. A continuación se presentala comparación para el Acetato en el Caso 1, Fosfato en el Caso 2 y Oxígeno en el Caso 3. Para todos los otros casos y especies la tendencia en la misma.

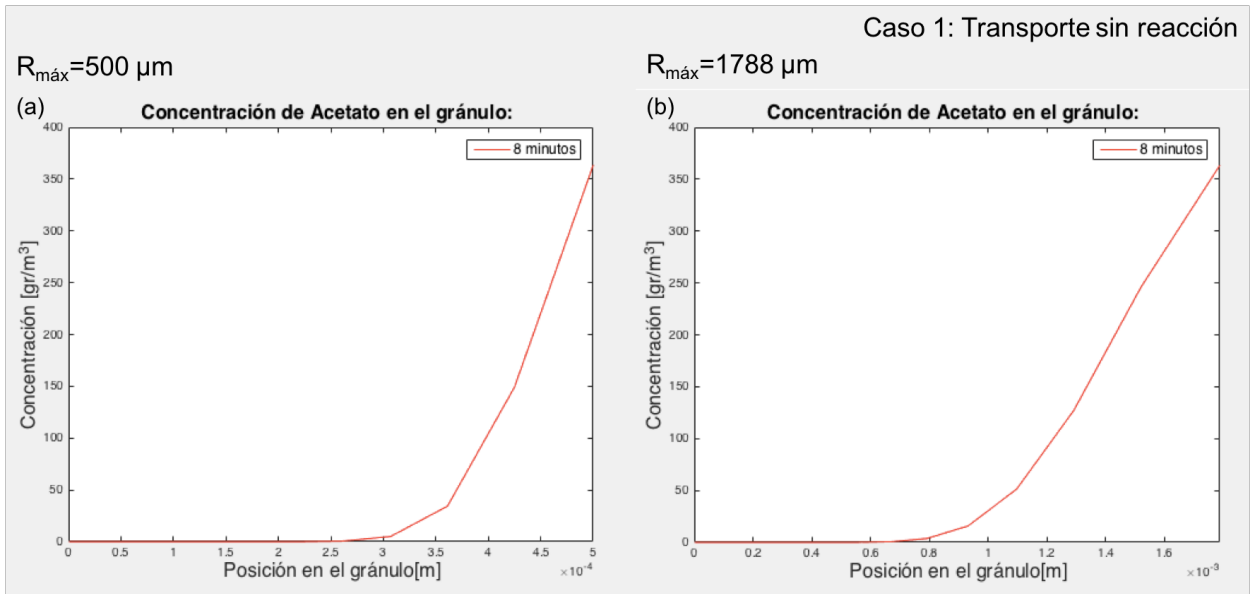


Figura 6.23: Perfil de concentraciones de Acetato en el radio del gránulo sin considerar reacciones de consumo o liberación de sustratos a los 8 minutos de operación. (a) gránulo de $500 \mu\text{m}$ de radio total (b) gránulo de $1.788 \mu\text{m}$ de radio total.

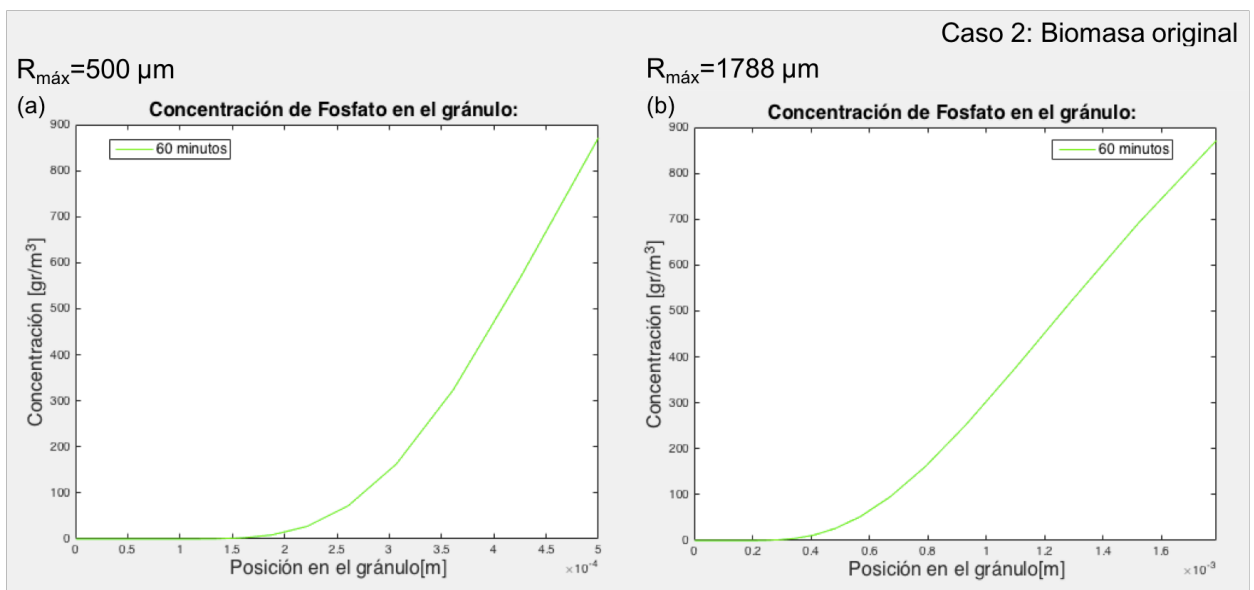


Figura 6.24: Perfil de concentraciones de Fosfato en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a 51grPAO/L en la primera capa a los 60 minutos de operación. (a) Gránulo de $500 \mu\text{m}$ de radio total. (b) Gránulo de $1.788 \mu\text{m}$ de radio total.

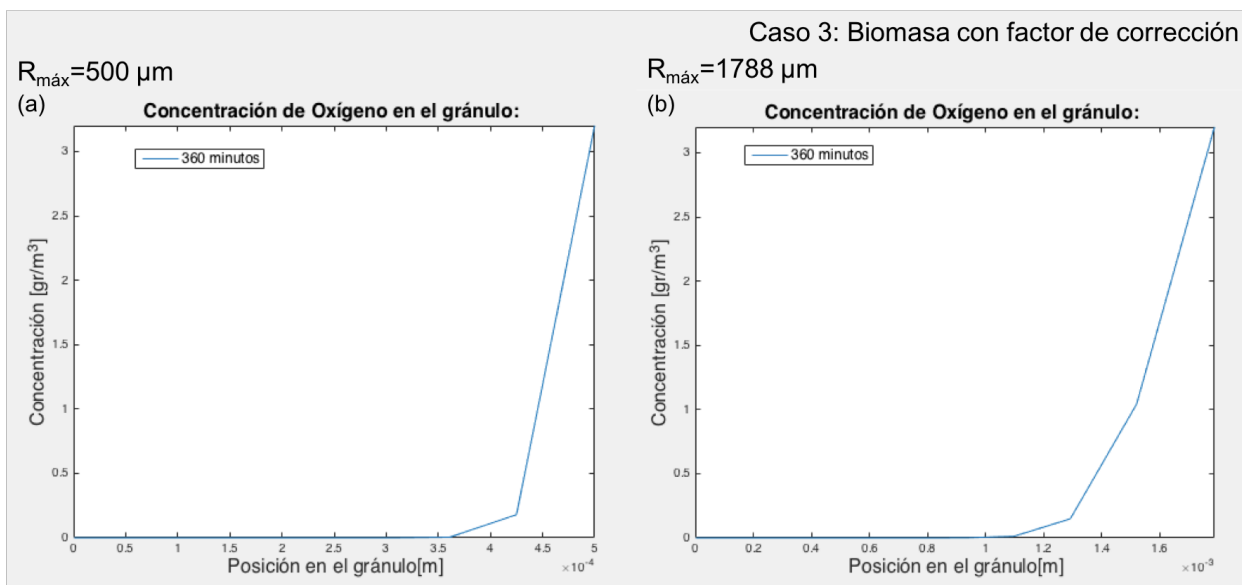


Figura 6.25: Perfil de concentraciones de Oxígeno en el radio del gránulo considerando una concentración de biomasa igual a $5, 1\text{grPAO/L}$ en la primera capa a los 360 minutos de operación. (a) Gránulo de $500 \mu\text{m}$ de radio total. (b) Gránulo de $1.788 \mu\text{m}$ de radio total.

Profundidad de penetración

Para evaluar y comparar los casos presentados se propone un factor asociado a la profundidad de penetración de los sustratos que resume toda la información comentada previamente. El factor de penetración considera la profundidad hasta la cual el sustrato es capaz de ingresar en el gránulo y la compara con el radio total del gránulo. En otras palabras, se identifica el radio de la última capa antes de que la concentración sea igual a 0 y se divide por el radio total. Esto permite comparar el efecto del sustrato estudiado, de las tasas de consumo y liberación de cada especie y además como afecta el tamaño del gránulo en la profundidad de ingreso de los sustratos. Los resultados se presentan en la Tabla 6.9 a continuación.

Tabla 6.9: Porcentaje de penetración de sustratos

	$R_{max} [\mu\text{m}]$	Acetato	Fosfato	Oxígeno
Caso 1	1.788	77 %	84 %	95 %
	500	68 %	93 %	99 %
Caso 2	1.788	48 %	93 %	15 %
	500	48 %	86 %	27 %
Caso 3	1.788	73 %	93 %	56 %
	500	62 %	86 %	39 %

Los resultados numéricos resumidos en la Tabla 6.9 engloban parte importante de lo discutido previamente. En primer lugar, se puede ver que el tamaño del gránulo posee una incidencia directa en la profundidad de penetración de las moléculas, para los 3 sustratos estudiados. Esto se debe principalmente al coeficiente de tortuosidad propuesto previamente. En el Capítulo 5 se establece que la tortuosidad depende del espacio libre disponible para la

circulación de las moléculas, el que a su vez está relacionado al tamaño de los aglomerados de cada capa. A medida que el gránulo es más pequeño, los aglomerados en su interior también disminuirán y por lo tanto también el espacio libre disponible y como consecuencia directa, la difusividad de cada sustrato en el interior del gránulo. Por otro lado, la Tabla 6.9 permite verificar que la penetración de Fosfato es independiente de la cinética utilizada, y por lo tanto este depende netamente del transporte, liderado por la difusividad, y esto se cumple para ambos tamaños de gránulo. Para el Caso 2, se puede ver que independiente del tamaño del gránulo, la profundidad de penetración del Acetato es la misma, y que para el Oxígeno es aún menor. En el caso del Acetato se tiene una profundidad de penetración del 48%, lo que indica que este sustrato alcanza a llegar a otras capas del gránulo, sin embargo no es perceptible al analizar las imágenes del perfil de concentraciones debido a que el valor de concentración que posee en las capas internas es muy pequeño.

Del análisis de sensibilidad realizado, se cree que el Caso 3 es el más representativo de la realidad, dado que la profundidad de penetración de Acetato y Oxígeno es significativa tal que permite la actividad microbiana en su interior, pero además permite evidenciar el gradiente de concentración dentro del gránulo, tal que existan zonas privadas de sustrato, especialmente de Oxígeno. Al comparar estos resultados con un gránulo real, como se presenta en la Figura 6.26, se puede ver que para radios de gránulo inferiores a la profundidad de penetración del Oxígeno, definida según la interpretación de la Figura 6.26 en 1,1mm, la porosidad del gránulo comienza a aumentar notoriamente, lo que indica que en esta región hay predominancia de células en etapa de muerte celular, debido a la escasez de sustratos, tanto de Oxígeno como de Acetato. Esta validación con la realidad permite decir que el ajuste realizado a la concentración de biomasa es adecuado, en comparación con lo observado en el caso anterior. Debido a la forma que poseen los gránulos es esperable que exista un radio en el que los sustratos ya no sean capaces de ingresar, sin embargo este debe tener un valor mínimo tal que se pueda asegurar el crecimiento y mantención de las células en su interior. Para verificar y validar tanto el modelo como el valor de las constantes cinéticas utilizados es pertinente la experimentación práctica en gránulos reales, para así poder estimar de forma asertiva la verdadera concentración de biomasa activa en su interior y realizar el ajuste de parámetros pertinente.

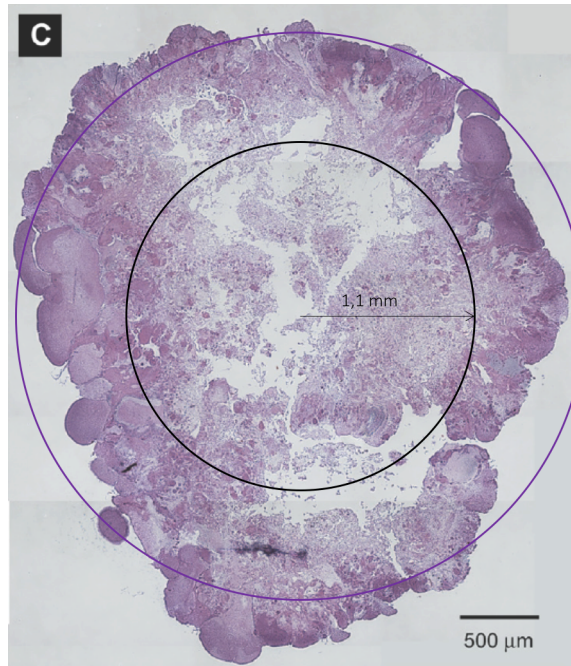


Figura 6.26: Comparación referencial para profundidad de penetración de sustratos

A modo de conclusión parcial, se logró modelar un gránulo individual en función de la concentración de sustratos, tiempo y radio del gránulo, y parámetros como la difusividad, constantes cinéticas y concentración de biomasa. Adicionalmente, se realizó un análisis de sensibilidad sobre la variable de concentración de biomasa, la que afectó directamente la cinética de conversión, lo que resultó en distintos niveles de penetración de sustratos en el gránulo. Lo anterior sería de utilidad para abordar el modelo de un reactor, acoplando los modelos de un conjunto de gránulos.

Capítulo 7

Perfil de concentraciones en el Reactor

El presente capítulo busca estudiar y simular el comportamiento de un reactor de granulación aeróbica a partir del modelo de un gránulo individual. Dentro de un reactor existen diversos tipos de gránulos que se diferencian por su tamaño y forma y, por lo tanto, por su capacidad de absorber nutrientes y generar productos. Se dividirá la operación del reactor en intervalos sucesivos, para representar los ciclos de alimentación. Para cada uno de estos intervalos, se representará la geometría interna del reactor considerando la existencia de gránulos y su variedad de tamaños. El modelo de un gránulo será utilizado, entonces, para representar la conducta de cada gránulo en el reactor y modelar, así, la actividad del sistema de gránulos. Para explicar la representación del reactor, las siguientes secciones han sido divididas para abordar la geometría y operación del reactor, en cuánto a volumen total, ciclos de operación y caudal de entrada a tratar. Por otro lado, para utilizar el modelo individual generado previamente, es necesario saber cómo interactúan los gránulos unos con otros dentro del reactor y cómo están organizados espacialmente. Finalmente se deben plantear las ecuaciones que permitan seguir la dinámica de las partículas que componen el sistema estudiado.

7.1. Geometría y Operación

La geometría del reactor considerada corresponde a uno de los dos reactores de granulación aeróbica Nereda®, ubicados en la planta de tratamiento en Garmerwolde (Países Bajos). Estos poseen una volumen total de 9.600 m^3 y sus dimensiones se presentan en la Tabla 7.1 a continuación.

Tabla 7.1: Geometría de reactor [6]

Parámetro	Valor	Unidad
Volumen	9.600	m^3
Altura	7,5	m
Área	1.280	m^2
Diámetro	40	m

En cuanto a la operación, se sabe que la planta de granulación aeróbica es responsable de tratar 28.600 m^3 de aguas servidas al día, es decir que cada reactor tiene la capacidad de recibir y tratar 14.300 m^3 al día. El tiempo total de un ciclo es de 6,5 horas, obteniendo un

total aproximado de 4 ciclos al día. El flujo de tratamiento por ciclo es equivalente a $3.575 m^3$, dividido en 4 alimentaciones durante la primera hora de operación. En consecuencia, cada alimentación es de aproximadamente $894 m^3$, que son alimentados mediante un caudal fijo hasta que se agota el lote.

Se desconoce con exactitud el modo de operación de la planta, pero se sabe que se debe mantener una alimentación tipo saciedad-hambruna, es decir que entre cada alimentación debe haber un periodo en el que no ingresen aguas servidas al reactor, para así favorecer el crecimiento y formación de los gránulos. Las alimentaciones se realizan cada 15 minutos durante la primera hora de operación, por lo que se asumirá que la alimentación durará 7,5 minutos y los otros 7,5 minutos no ingresará nada al reactor. De esta forma se puede estimar el caudal de entrada al reactor (ϕ).

$$\phi = \frac{Q}{t} = \frac{894m^3}{7,5min} = \frac{894m^3}{450s} \approx 2 \frac{m^3}{s}. \quad (7.1)$$

El flujo de entrada al reactor (ϕ) es una función del tiempo tal que se mantiene una alimentación por bloques, lo que queda representado en la Figura 7.1 a continuación.

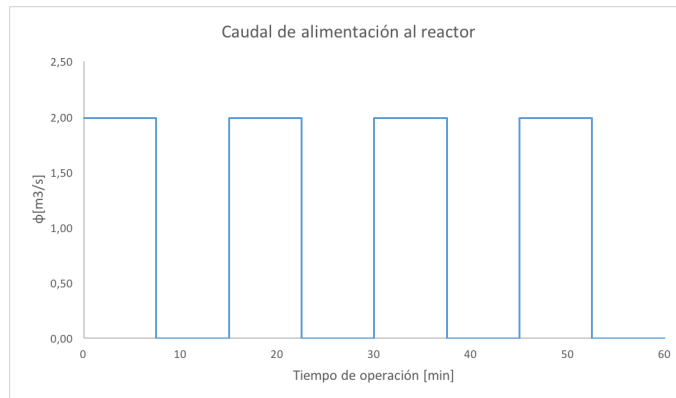


Figura 7.1: Caudal de alimentación al reactor (ϕ) en en función del tiempo de operación.

7.2. Distribución de Gránulos

Dentro de un reactor existen diversos tipos de gránulos que se diferencian por su tamaño y por la capacidad de consumir y absorber nutrientes. Un lecho de lodo granular aeróbico generalmente consta de gránulos con tamaños en el rango de $200 [\mu m]$ a $5.000 [\mu m]$ [24]. En particular, en el reactor Nereda® operado en Gamerwold se identifican 6 tipos de gránulos, con sus respectivos tamaños y concentraciones globales, como se presenta en la Tabla 7.2. Una clase de gránulo se define como el conjunto de gránulos que se encuentra dentro de un rango determinado de diámetros, y se identifica con un diámetro promedio. Mientras más grande sea el gránulo, mayor será el valor de la difusividad en su interior, especialmente en las capas externas, y por lo tanto deberían tener mejor capacidad para consumir nutrientes en comparación con gránulos más pequeños.

Debido a su peso y densidad, los gránulos de mayor tamaño se encuentran en el fondo del

reactor, mientras que los de menor tamaño se ordenan hacia arriba según tamaño y densidad. Para poder implementar el modelo generado en el capítulo anterior, es necesario conocer la cantidad de gránulos de cada clase y la altura que alcanzan dentro del reactor. La masa total de cada clase de gránulo se obtiene al multiplicar su concentración por el volumen total del reactor ($9.600 m^3$).

Tabla 7.2: Distribución de tamaños de gránulos en Nereda®, Gamerwold.
Extraído de [24].

	Clase	Diámetro promedio	Concentración
	$[\mu m]$	$[\mu m]$	$[kg/m^3]$
1	>2.000	3.000	1,22
2	1.400-2.000	1700	1,39
3	1.000-1.400	1200	1,03
4	630-1.000	815	0,63
5	425-630	527	0,28
6	212-425	318	0,82

Por otro lado, según lo estudiado por Van Dijk et al. en [24], se obtiene que la densidad de gránulos en un reactor a gran escala tiene un valor de $1035 kg/m^3$, lo que permite conocer el peso de una partícula (m_g) a partir del diámetro d y la densidad ρ_s mediante la siguiente ecuación:

$$m_g = \frac{\pi}{6} d^3 \rho_s \quad (7.2)$$

Finalmente, para conocer el número de gránulos de cada clase se divide la masa total por el peso de un gránulo. Los resultados se presentan en la Tabla 7.3.

Tabla 7.3: Distribución de gránulos y su concentración estimados para un reactor Nereda® de $9.600 m^3$.

Clase	Masa total	Peso de un gránulo	Cantidad de gránulos
	$[kg]$	$[kg]$	
1	11.712	1,5 e-5	8,0 e8
2	13.344	2,7 e-6	5,0 e9
3	9.888	9,4 e-7	1,1 e10
4	6.048	2,9 e-7	2,1 e10
5	2.688	7,9 e-8	3,4 e10
6	7.872	1,7 e-8	4,5 e11

Conocer la cantidad de gránulos de cada tipo permite estimar de forma aproximada su orden en el reactor. Según lo reportado por Pronk et. el. en [6], el reactor alcanza un índice volumétrico de sedimentación de lodos (IVL) de 45 mL/gr, lo que significa que 1 gramo de lodo ocupa 45 mL en volumen. Con esta información se puede conocer el volumen total ocupado por cada clase de gránulo (V_i), así como también la altura alcanzada (H_i). Se asumirá que las clases de gránulos no se mezclan entre sí, por lo que la distribución de volumen y

altura se asume como la presentada en la Tabla 7.4.

Volumen total ocupado por gránulos de clase i:

$$V_i = M_i \cdot IVL \quad (7.3)$$

Altura total ocupada por gránulos de clase i:

$$H_i = \frac{V_i}{A} \quad (7.4)$$

Tabla 7.4: Volumen y altura ocupados por cada clase de gránulo

Clase	Volumen ocupado [m ³]	Altura ocupada [m]
1	527	0,41
2	600	0,47
3	445	0,35
4	272	0,21
5	121	0,09
6	354	0,28

De la información presentada en la Tabla 7.4 se obtiene que la altura total ocupada por gránulos es de 1,72 metros. En el mismo estudio se reporta que la concentración total de biomasa alcanza los 6,65 gr/L, equivalente a una masa total de 63.840 kg, que ocupa un volumen de 2.873 m³ y una altura de 2,2 metros. Por lo tanto, hay 50 cm del reactor ocupado por lodos que no son gránulos, que pueden ser representados por flóculos. Esto se traduce a que los gránulos ocupan un 80 % de los lodos totales del reactor. Se presenta una representación ilustrativa para la distribución de gránulos dentro del reactor en la Figura 7.2.

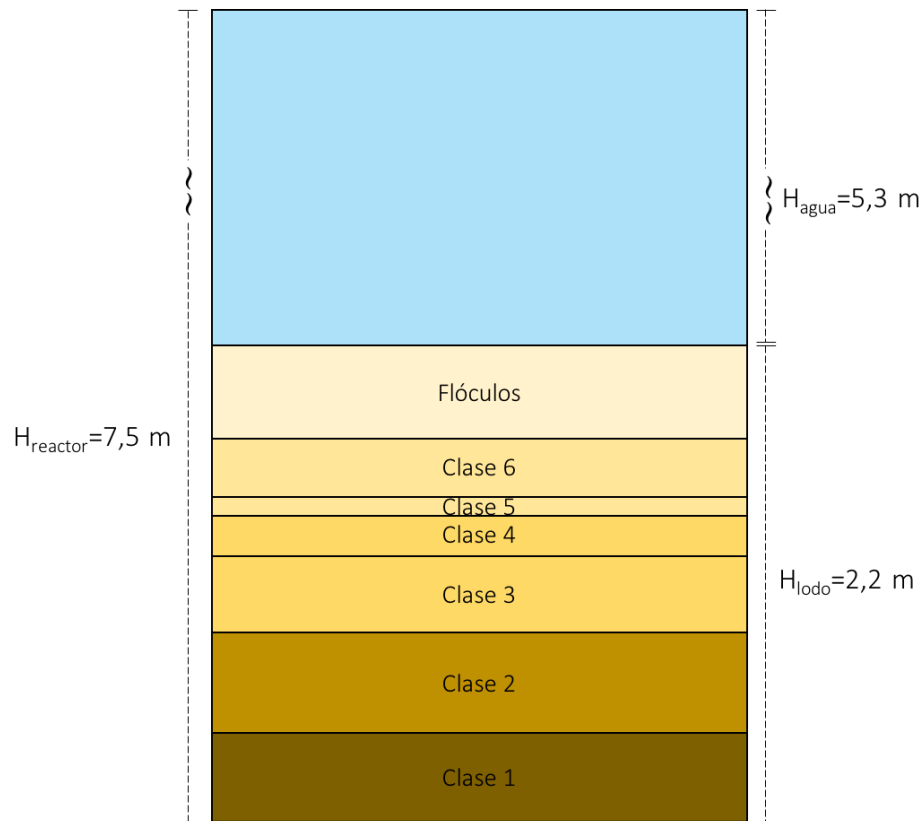


Figura 7.2: Esquema representativo de la altura ocupada por cada clase de gránulos y la altura total de lodos alcanzada en el reactor.

NOTA: La distribución de gránulos en la Figura 7.2 está a escala según altura ocupada, pero la columna de agua en la parte superior no.

Cabe destacar que el modelo generado en el capítulo anterior solamente se aplica para gránulos y no para flóculos, por lo que la fracción de lodos ocupada por flóculos se asumirá como agua. Por otro lado, según lo extraído de bibliografía [22], la población de gránulos maduros esta además compuesta por gránulos con aglomerados desprendidos desde su superficie, gránulos rotos y gránulos de menor tamaño que crecen a partir de los aglomerados desprendidos de gránulos más grandes. Sin embargo, para efectos del modelamiento, se asumirá que todos los gránulos son de forma esférica, sin desprendimientos.

7.3. Modelo de celdas

El modelo generado en el capítulo anterior permite estudiar el comportamiento de un gránulo en particular, mientras que en el presente capítulo se busca estudiar y simular el comportamiento global del reactor. Para ello se debe definir cómo están ordenados los gránulos en el reactor y cómo interactúan entre sí. Así, se estructura un modelo sobre la idea de que cada gránulo está encapsulado por una celda cúbica, como se presenta en la Figura 7.3. Cada celda está compuesta del gránulo en su centro y agua al rededor. Se asume que las celdas no se superponen entre sí y que forman monocapas, como las presentadas en la Figura 7.4, lo que permite llenar el reactor de monocapas hasta completar su volumen.

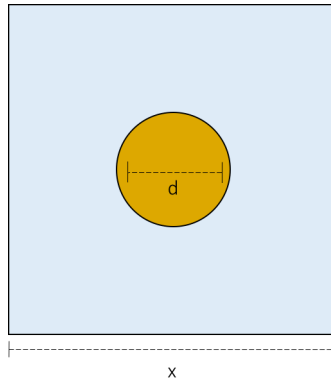


Figura 7.3: Representación de una celda compuesta por el gránulo y el volumen de agua

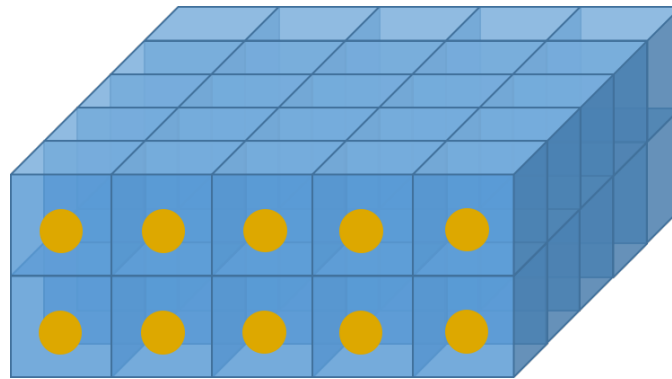


Figura 7.4: Representación de monocapas formadas por celdas que encapsulan a un gránulo.

Dado que existen 6 clases de gránulos de tamaños diferentes, también existirán 6 clases de celdas. Previamente se determinó el volumen ocupado por la totalidad de gránulos de cada clase, así como también la cantidad de gránulos de cada clase, por lo tanto el cociente entre ambos valores corresponde al volumen de una celda. Se busca conocer cuantas celdas y monocapas hay para cada clase de gránulo.

Sea n_i el total de gránulos de clase i :

- Volumen de una celda de clase i :

$$v_i = \frac{V_i}{n_i} \quad (7.5)$$

- Arista de una celda de clase i :

$$x_i = (v_i)^{1/3} \quad (7.6)$$

- Área de una celda de clase i :

$$a_i = x_i^2 \quad (7.7)$$

- Cantidad de celdas de clase i por monocapa:

$$c_i = \frac{A}{a_i} \quad (7.8)$$

Donde A equivale al area total del reactor.

- Cantidad de monocapas de celdas de tipo i :

$$m_i = \frac{n_i}{c_i} \quad (7.9)$$

Los resultados se presentan en la Tabla 7.5.

Tabla 7.5: Tamaño y distribución de celdas

Clase	d [m]	v [m ³]	x [m]	a [m ²]	c	m
1	0,030	6,6 e-7	0,087	7,6 e-5	1,7 e7	48
2	0,017	1,2 e-7	0,049	2,4 e-5	5,3 e7	96
3	0,012	4,2 e-8	0,035	1,2 e-5	1,1 e8	100
4	0,008	1,3 e-8	0,024	5,6 e-6	2,3 e8	90
5	0,005	3,6 e-8	0,015	2,3 e-6	5,5 e8	62
6	0,003	7,8 e-10	0,009	8,5 e-7	1,5 e9	301

El total de monocapas ocupadas por gránulos en el reactor es igual a:

$$m_T = \sum_{i=1}^6 m_i = 697 \quad (7.10)$$

El caudal de entrada al reactor se alimenta de forma ascendente y distribuida equitativamente por el fondo del reactor. Por lo tanto, a cada celda ingresará una fracción de ese flujo total, tal como indica la Ecuación 7.11 , según la cantidad de celdas que haya en cada monocapa, . Mientras menor sea el volumen de la celda, menor será su flujo de entrada, lo que se puede apreciar en la Tabla 7.6.

$$phi_i = \frac{\phi}{c_i} \quad (7.11)$$

Tabla 7.6: Distribución de flujos según clase de celda

Clase	Caudal de entrada [m ³ /s]
1	1,2 e-7
2	3,8 e-8
3	1,9 e-8
4	8,7 e-9
5	3,6 e-9
6	1,3 e-9

Cabe destacar que el modelo de celdas propuestos solo es aplicable a la fase anaeróbica del reactor, en la que los gránulos están ordenados en un lecho, gracias a la sedimentación que da lugar una vez finalizado el periodo de aireación. Para representar el comportamiento de los nutrientes, especialmente Fosfato, en el reactor durante la fase aeróbica es necesario realizar otro modelo. Es por esto que se ha decidido dejar de la lado esta etapa de operación.

7.4. Balance de Masa para una Celda

Una vez que la fracción del reactor compuesta por gránulos queda dividida y bien definida por las celdas, es posible determinar el cambio en la concentración de nutrientes en el tiempo y en el espacio a partir del modelo de los gránulos contenidos en su interior. El modelo propuesto en el capítulo anterior permite conocer el cambio de concentración dentro del gránulo considerando la concentración en el borde. Sin embargo, la concentración en el borde depende a su vez de la tasa de consumo y transferencia de masa hacia adentro del gránulo. En otras palabras, existe una interdependencia directa entre la concentración en el borde del gránulo y la tasa de consumo de este.

Para resolver este problema, se asume que cada celda se comporta como un reactor continuo perfectamente agitado, en el que la variación de la concentración en su interior es distinta de 0 (Figura 7.5). La variación de la masa total de un componente es igual a la masa que entra, menos la masa que sale y menos la masa que se consume. Dado que se asume la celda como un reactor de mezcla perfecta, la concentración en su interior es igual a la concentración de salida. En el interior de la celda, la actividad del gránulo consumiendo o generando moléculas puede ser representada por una cinética. Tal cinética corresponde a una función que depende del modelo de un gránulo y se expresa mediante r_g . Lo anterior queda representado por el Balance de Masas planteado en la Ecuación 7.12 presentada a continuación:

$$V_a \cdot \frac{dC_{out}}{dt} = Q_{in} \cdot C_{in} - Q_{out} \cdot C_{out} - V_g \cdot r_g \quad (7.12)$$

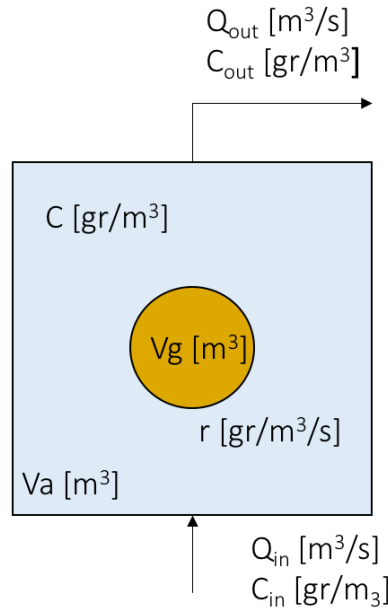


Figura 7.5: Representación de una celda como un reactor continuo perfectamente agitado

Todas las celdas cuentan con una concentración de entrada (C_{in}) y una concentración de salida (C_{out}), y dado que el flujo es ascendente, la concentración de salida de una celda cualquiera es igual a la concentración de entrada de la celda que se encuentra arriba de esta. Así es posible conocer cómo varía la concentración de sustratos para todas las celdas que componen la altura del reactor.

Usando una estimación de las derivadas mediante Diferencias finitas en un esquema explícito para la derivada temporal, es posible discretizar la Ecuación 7.12, en donde cada celda se identifica con un índice p correspondiente a la posición en la altura y un índice k correspondiente al paso del tiempo. La Ecuación 7.13 indica que para conocer la concentración de salida de la celda p basta con conocer la información de entrada, salida y tasa de consumo o liberación de la misma celda en el tiempo anterior.

$$C_{out}(p, k + 1) = C_{out}(p, k) + \frac{Q(p, k)}{V_a(p)} \cdot \Delta t \cdot (C_{in}(p, k) - C_{out}(p, k)) - \frac{V_g(p)}{V_a(p)} \cdot \Delta t \cdot r(p, k) \quad (7.13)$$

Condiciones iniciales: Para el tiempo 0, la concentración de salida de todas las celdas es igual a 0, y la concentración de entrada de todas las celdas es igual a 0, excepto para la primera celda:

- $C_{out}(p, 1) = 0 \text{ gr/m}^3, \forall p$
- $C_{in}(p, 1) = 0 \text{ gr/m}^3, \forall p > 1$

El dominio espacial al que se refiere la discretización de diferencias finitas considera solamente las entradas y salidas de las celdas, o reactores, pero no de su interior. Cabe destacar

que las condiciones iniciales deben ser definidas para todo el dominio, lo que se logra mediante el supuesto que cada celda se comporta como un reactor perfectamente agitado.

Condiciones de borde: La concentración de entrada de la primera celda será la proveniente de la alimentación en todos los tiempos:

- $C_{AC,in}(1, k) = 396 \text{ gr}/m^3$, $\forall k$
- $C_{PO4,in}(1, k) = 20 \text{ gr}/m^3$, $\forall k$

Una vez definida la ecuación a resolver en cada celda, así como las condiciones iniciales y de borde del sistema, se debe estimar la tasa de consumo o liberación asociada al gránulo (r_g). Esta tasa indica la masa de sustrato que entra o sale del gránulo por unidad de tiempo, y por ende, cuánto desaparece o aparece de la celda, dependiendo de la especie a estudiar. La conversión en el gránulo depende de dos fenómenos principales, difusión y cinética microbiana, como fue revisado en el capítulo anterior. Tomando como ejemplo el caso del Acetato, a pesar de que este sea consumido en todo el gránulo, según su profundidad de penetración, la tasa a la cual desaparece de la celda será igual a la tasa de conversión de la primera capa del gránulo, pues esta corresponde a la capa visible desde el fluido.

La tasa de conversión de la primera capa depende directamente de la concentración de sustrato que hay en el borde del gránulo. La celda se asume como un reactor de mezcla perfecta por lo que la concentración en el borde del gránulo es igual a la concentración en toda la celda, la que se denomina como C_b en la Figura 7.6. Para cada paso de tiempo, el cambio en la concentración está definido por la tasa de conversión, y por lo tanto la concentración en el borde se redefine para cada iteración de tiempo. En la Figura 7.6 esto está representado por la disminución de C_b entre los tiempos t y $t - \Delta t$. El cambio de concentración en una posición dada en el radio del gránulo, para un paso de tiempo, depende de la concentración, de la tasa de transferencia de masa y de la tasa de consumo del gránulo en la misma posición en el tiempo anterior. Esto provoca un cambio en el perfil de concentración que se forma en el gránulo, lo que está indicado con los números 1 y 2 en la Figura 7.6. Por lo tanto, se puede decir que a tasa de consumo en la celda es igual a la diferencia entre la concentración en el borde del gránulo en el tiempo actual y en el tiempo siguiente.

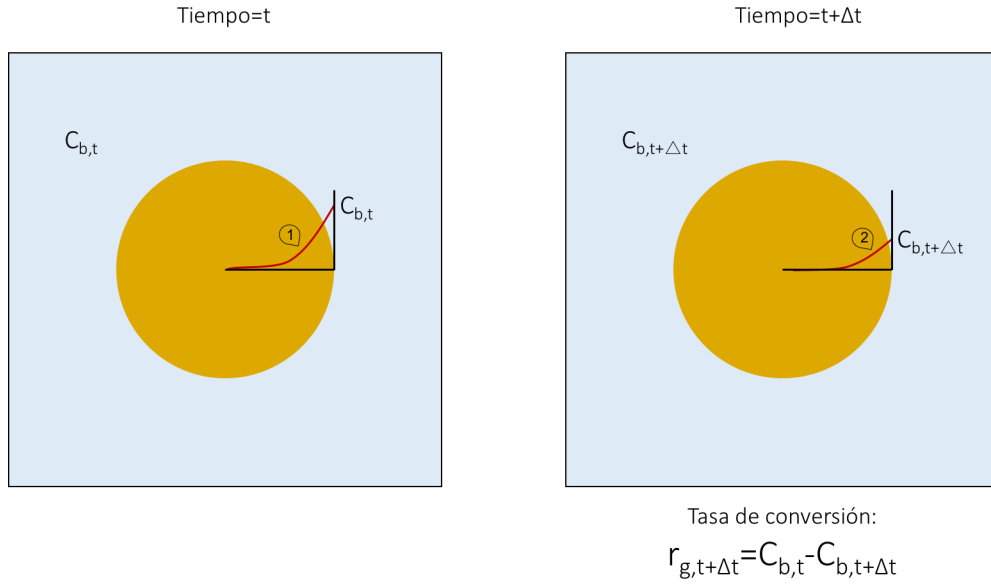


Figura 7.6: Esquema explicativo para la tasa de conversión en una celda.

Esto se puede resumir mediante el siguiente set de ecuaciones:

- La concentración de entrada de la celda $p+1$ va a ser igual a la concentración de salida de la celda p :

$$C_{in}(p+1, k) = C_{out}(p, k) \quad (7.14)$$

- La concentración en el borde del gránulo es igual a la concentración a la salida de la celda:

$$C_{gr}(p, k, 1) = C_{out}(p, k) \quad (7.15)$$

- La concentración en el gránulo en el tiempo siguiente en una posición en el radio depende de la concentración, de la tasa de transferencia de masa y de la tasa de consumo del gránulo en la misma posición en el tiempo anterior:

$$C_{gr}(p, k+1, i) = C_{gr}(p, k, i) + r_d(p, k, i) + r_g(p, k, i) \quad (7.16)$$

- La tasa de consumo en la celda es igual a la diferencia entre la concentración en el borde del gránulo en el tiempo actual y en el tiempo siguiente:

$$r_g(p, k+1) = C_{gr}(p, k+1, 1) - C_{gr}(p, k, 1) \quad (7.17)$$

7.5. Resultados

A continuación se presentan los resultados obtenidos a partir del modelo representativo de un reactor de granulación aeróbica de volumen igual a 9.600 m^3 . Se modela la primera hora de operación, equivalente a la fase anaeróbica. Se presenta el perfil de concentración de las dos especies principales estudiadas, Acetato y Fosfato, a medida que el flujo de alimentación se mueve de forma ascendente desde el fondo del reactor. Además, se muestra el perfil de concentraciones de dos gránulos en el interior del reactor. El primer gránulo presentado se encuentra en el fondo del reactor y tiene un radio de $1.500\ \mu\text{m}$, mientras que el segundo gránulo se encuentra a 1,2 metros de altura y tiene un radio de $418\ \mu\text{m}$. Se eligen dos gránulos separados entre sí para tener mayor representatividad del comportamiento dinámico del reactor y cómo este afecta la conducta al interior de los gránulos. Al igual que el capítulo anterior, se realiza un análisis de sensibilidad al presentar dos casos para comparar el efecto de la tasa de conversión de nutrientes en los perfiles globales de concentración. El primer caso considera una concentración de biomasa en la primera capa del gránulo de 51 grPAO/L , mientras que el segundo considera una concentración de biomasa en la primera capa del gránulo de $5,1\text{ grPAO/L}$, lo que modifica las tasas de conversión microbiana.

Al inicio del ciclo el reactor está compuesto por el lecho de gránulos aeróbicos y agua tratada. Una vez que comienza la alimentación desde el fondo del reactor, las aguas servidas desplazan hacia arriba el agua tratada, provocando su salida por rebalse en la parte superior. Considerando que el reactor opera bajo un régimen de operación tipo fed-batch, el nivel de aguas servidas varía en el tiempo. En la Figura 7.7 se presenta la variación de la altura de llenado de agua servida en función del tiempo. Además, los marcadores en la misma Figura indican 5 tiempos de operación diferentes y representativos de la etapa anaeróbica, para los cuales se presentarán los perfiles de concentración de Acetato y Fosfato en los resultados mostrados a continuación.

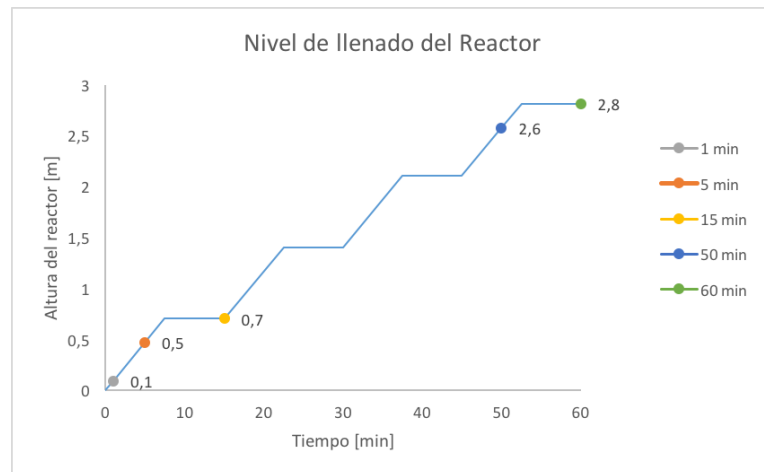


Figura 7.7: Nivel de llenado de aguas servidas del reactor de granulación aeróbica como función del tiempo.

Perfil de Concentración en la altura del reactor

Para el primer caso de estudio se considera la distribución de biomasa tal como se presenta en la Sección 6.8, tal que la concentración de la primera capa de los gránulos es igual a 51grPAO/L , mientras que para las siguientes capas del gránulo se sigue una tendencia lineal. La Figura 7.8 representa la variación de la concentración de Acetato y Fosfato a medida que el flujo es alimentado desde el fondo del reactor. Se presentan 5 instantes, correspondientes a 1, 5, 15, 50 y 60 minutos de operación. Al inicio del ciclo el reactor está lleno de agua y libre de contaminantes, por lo que la concentración de Acetato y Fosfato son iguales a 0 en toda la altura.

Con el objetivo de tener mayor claridad sobre la distribución de gránulos en el interior del reactor con respecto a su altura, se incluye en las Figuras asociadas al perfil de concentración de Acetato y Fosfato en el reactor, referencias hacia el cambio de tamaño de los gránulos. Estos están reflejados por las barras horizontales de color café que se pueden ver las Figuras 7.8 y 7.9, las que cambian de color gradualmente, según el cambio en la clasificación de los gránulos. La barra en el fondo del reactor, de color café oscuro representa a la clase de gránulos de diámetro mayor a $2.000[\mu\text{m}]$, la siguiente clase corresponde a los gránulos de diámetro entre $1.400[\mu\text{m}]$ y $2.000[\mu\text{m}]$, y así sucesivamente.

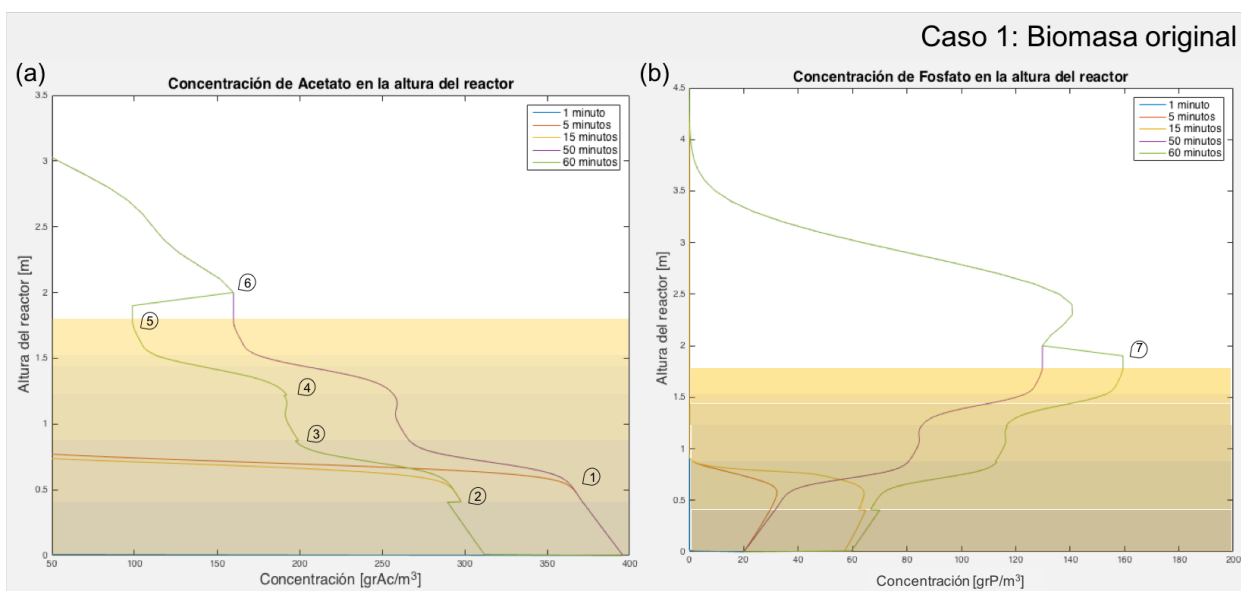


Figura 7.8: Perfil de concentraciones en la altura del reactor, considerando una concentración de biomasa igual a 51grPAO/L en la primera capa de los gránulos. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos). (b) Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos).

Una vez iniciada la alimentación, la concentración de Acetato en el reactor aumenta a medida que el flujo se mueve hacia arriba. Se puede ver como a los 5 minutos el flujo de agua ascendente alcanza una altura de aproximadamente $0,75\text{m}$, lo que está representado por la curva naranja e indicado con el numero 1 en la Figura 7.8. La concentración de Acetato mantiene el valor de alimentación, pero con una leve disminución a medida que el flujo avanza. Una vez que la alimentación es detenida comienza el periodo de hambruna, en el

que los microorganismos contenidos en los gránulos consumen el sustrato alimentado. Esto se puede apreciar al observar la curva amarilla de la Figura 7.8 (a), indicado por el número 2, en la que la concentración de Acetato en el fondo del reactor disminuye hasta $300\text{gr}/\text{m}^3$ aproximadamente. Se puede ver también que esta curva presenta un quiebre a una altura de 0,5m aproximadamente, indicado con el número 2, en el que se aprecia que hay más de una concentración para la misma altura. Previo a los 0,5 metros la concentración de Acetato disminuye de forma continua, mientras que en el punto de quiebre, su valor sube levemente para luego seguir descendiendo de forma continua.

A medida que se van realizando las siguientes alimentaciones, el agua contaminada se va desplazando hacia arriba en el reactor, pero gracias al consumo de las bacterias, la concentración de Acetato disminuye según la tasa de consumo. A los 50 minutos de operación se genera una curva escalonada (curva morada), la que es representativa de los 4 flujos de alimentación. Finalmente, se puede ver que a los 60 minutos, correspondiente al final de la fase anaeróbica, la concentración de Acetato disminuye con respecto a la curva morada, indicando el consumo por parte de los microorganismos. La concentración mínima de Acetato se alcanza a los 2 metros de altura y tiene un valor aproximado de $100\text{grAc}/\text{m}^3$, como se indica con el número 5. Se puede apreciar que la curva verde presenta varios quiebres y cambios de pendiente, siendo los más notorios a alturas aproximadas de 0,5m, 1m, 1,5m y 2m, indicados con los números 2, 3, 4 y 6 en la Figura 7.8 (a), respectivamente. Al comparar con las barras de color café, se puede ver que los quiebres en las curvas de concentración ocurren precisamente en la transición de una clase de gránulo a la siguiente. Además, es posible apreciar que a los 2 metros las curvas verde y morada se juntan, indicado con el número 5, y disminuyen de la misma forma hasta los 3 metros de altura, lo que se debe a que en ese punto ocurre un cambio de dominio, tal que se acaba el lecho de gránulos y hay solamente agua tratada hacia arriba, por lo tanto no hay tasa de consumo.

En el caso del Fosfato presentado en la Figura 7.8 (b) se puede ver cómo este es liberado al mismo tiempo que el Acetato es consumido, por lo que las curvas generadas en el perfil de concentraciones del Fosfato siguen la misma tendencia que para el caso del Acetato, pero su valor aumenta debido a que esta molécula es liberada en vez de ser consumida. El máximo valor de concentración alcanzado es de aproximadamente $160\text{grP}/\text{m}^3$, a una altura de 2 metros a los 60 minutos de operación, indicado con el número 7.

En el segundo caso de estudio, a diferencia del caso anterior, se considera que la concentración de la primera capa de los gránulos es igual a $5,1\text{grPAO}/L$, mientras que para las siguientes capas del gránulo se sigue una tendencia lineal. En cuanto al perfil de concentración de contaminantes en el reactor se puede apreciar la misma forma para las curvas que el caso anterior, con la diferencia de que se consume menos Acetato y se libera menos Fosfato. En la Figura 7.9 se puede ver que el Acetato alcanza una concentración mínima de aproximadamente $340\text{grAc}/\text{m}^3$, mientras que el Fosfato alcanza una concentración máxima de aproximadamente $40\text{grP}/\text{m}^3$, ambos a una altura de 2 metros, indicados con los números 1 y 2 respectivamente.

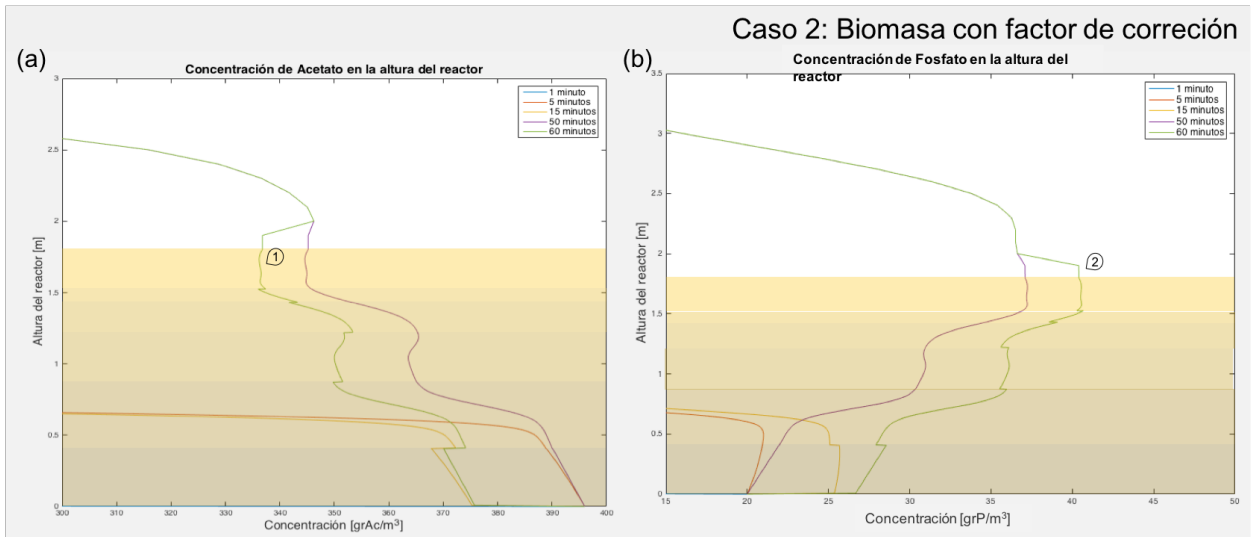


Figura 7.9: Perfil de concentraciones en la altura del reactor, considerando una concentración de biomasa igual a $5,1 \text{ grPAO/L}$ en la primera capa de los gránulos. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos). (b) Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos).

Se puede ver en las Figuras 7.8 y 7.9 que las curvas correspondientes a periodos de alimentación (colores naranja y morado en la Figuras) presentan una forma más continua en comparación a las curvas correspondientes a periodos de hambruna (amarillo y verde), lo que indica que el flujo de alimentación es más rápido que la tasa de conversión. Una vez que se detiene el pulso de alimentación se puede apreciar como la concentración de Acetato disminuye producto de la actividad microbiana, lo que es de esperar desde el punto biológico, ya que las bacterias consumen sustrato para almacenarlo como polímeros en el interior de los gránulos. Idealmente, en el periodo de hambruna debería consumirse por completo el sustrato alimentado, para así maximizar la remoción de materia orgánica y, como consecuencia, la producción de polímeros, lo que no es posible evidenciar en los resultados presentados. Esto demuestra que los parámetros del modelo deben ser ajustados para llegar a este escenario biológico ideal. Los tiempos de alimentación y hambruna fueron establecidos en 7,5 minutos cada uno, sin embargo estos pueden ser modificados, lo que afecta la velocidad ascendente de alimentación, y tendría incidencia directa en los perfiles de concentración generados. Al aumentar la duración del periodo de hambruna, los microorganismos tienen más tiempo para consumir el sustrato alimentado, por lo que es de esperar que la masa total consumida sea mayor.

como se mencionó, perfiles de concentración del reactor presentan quiebres notorios durante los periodos de hambruna, en los que hay más de una concentración para la misma altura. Estos ocurren justamente en los puntos de la altura en que hay cambios de clases de gránulos. La primera clase de gránulos alcanza una altura de $0,41 \text{ [m]}$, mientras que la segunda clase alcanza una altura de $0,88 \text{ [m]}$ desde el fondo del reactor, las que son consistentes con los dos primeros quiebres que se observan en las curvas verdes de las Figuras 7.8 y 7.9 (representados por los números 2 y 3 de la Figura 7.8).

Dado que los quiebres observados en las curvas presentadas ocurren justamente al cambiar

el dominio de una clase de gránulo a otra, resulta pertinente analizar las diferencias existentes entre las clases de gránulos que puedan explicar este comportamiento. Esto probablemente se deben a un error numérico provocado por el cambio de dominio computacional. Una diferencia importante entre una clase de gránulo y otra es el tamaño de las celdas que componen el reactor, que tienen un menor volumen a medida que se alejan del fondo del reactor. Al ser mas pequeñas, la fracción del flujo total que ingresa a cada una de ellas es menor y, por lo tanto, la masa de Acetato que ingresa también es menor. El balance de masas planteado es válido ya que considera una conservación del volumen de entrada y salida de la celda. Sin embargo, cuando ocurre el cambio de dominio esta conservación de volumen ya no es válida para ese punto en particular, ya que el flujo que sale de una celda de mayor tamaño es superior al flujo que está ingresando a la celda siguiente, cuyo volumen es menor. Esto explica porque para un mismo punto en la altura del reactor se observan dos concentraciones distintas.

Perfil de concentración en el radio del gránulo.

a continuación se presentan los perfiles de concentración para el Acetato y Fosfato en el interior de 2 gránulos diferentes. El primero de ellos corresponde aun gránulo de Clase 1, con radio igual a $1.500 \mu m$ que se encuentra en el fondo del reactor, mientras que el segundo gránulo presentado es de clase 4, con radio igual a $418 \mu m$, ubicado a 1,2 metros de altura en el reactor. Lo siguiente se realiza con el objetivo de apreciar al acoplamiento entre el modelo presentado en el Capítulo 6.

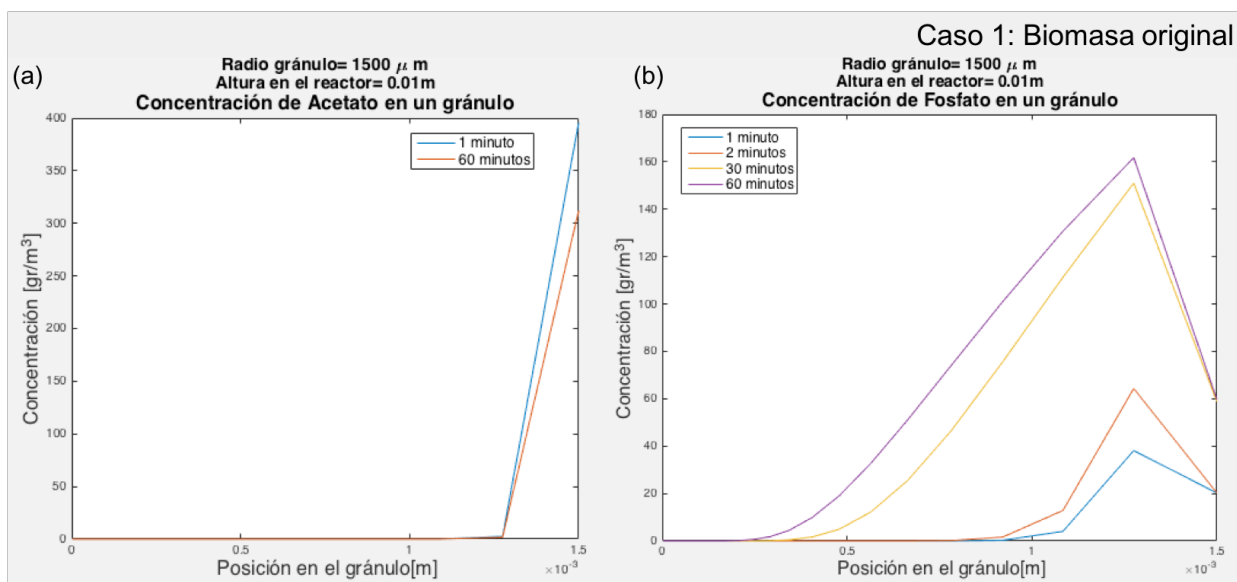


Figura 7.10: Perfil de concentraciones en el radio del gránulo, considerando una concentración de biomasa igual a $51 gr PAO/L$ en la primera capa, un gránulo de radio igual a $1.500 \mu m$ ubicado a una altura de $0,01m$ en el reactor. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) (b) Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos)

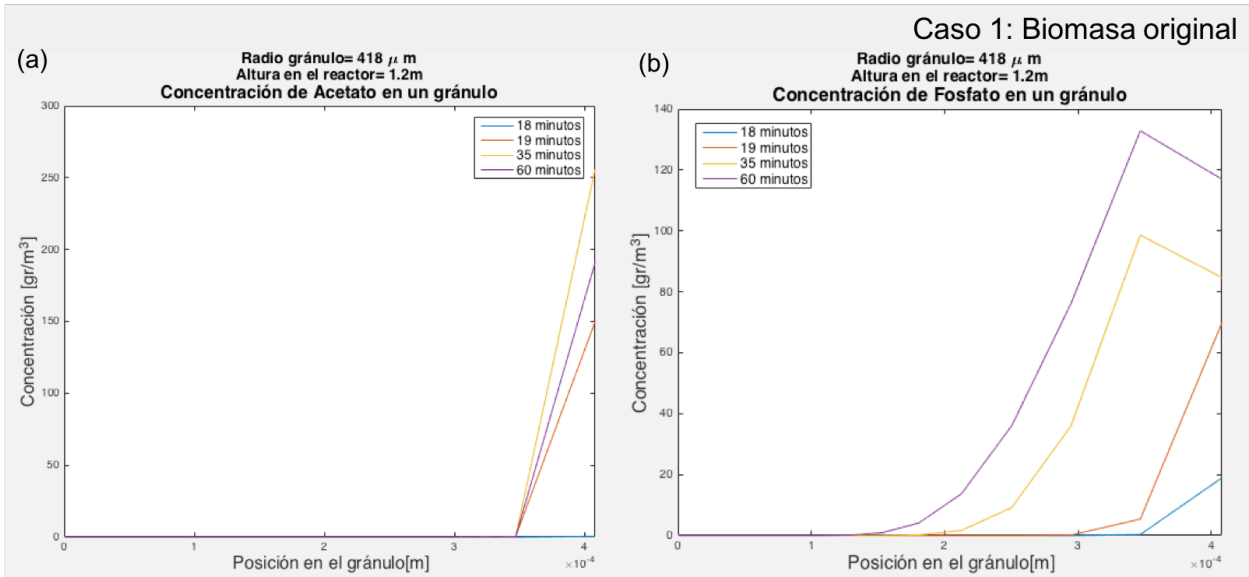


Figura 7.11: Perfil de concentraciones en el radio del gránulo, considerando una concentración de biomasa igual a 51grPAO/L en la primera capa, un gránulo de radio igual a $418\ \mu\text{m}$ ubicado a una altura de $0,01\text{m}$ en el reactor. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) (b) Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos)

Al analizar los perfiles de concentración en los gránulos estudiados del Caso 1 se observa que se mantiene la tendencia del capítulo anterior. El Acetato se consume rápidamente en la primera capa del gránulo sin alcanzar las capas internas de este, mientras que el Fosfato presenta un claro aumento de concentración en la primera capa, mientras que el ingreso a las capas internas ocurre de forma paulatina, respetando la tasa de transporte. Se puede ver que las concentraciones en el borde del gránulo son consistentes con la concentración global del Reactor. En el caso del gránulo de mayor tamaño ($1.500\ \mu\text{m}$ de radio) la concentración en el borde disminuye de 400 a $300\ \text{grAc/m}^3$ entre el inicio y fin de la etapa anaeróbica, al igual que en la Figura 7.8 (a). Para el caso del Fosfato en la figura 7.10(b) se ve como la concentración en la primera capa del gránulo alcanza un valor de $160\ \text{grP/m}^3$ mientras que en el borde su valor es de $60\ \text{grP/m}^3$. En el caso del gránulo más pequeño ($418\ \mu\text{m}$ de radio) se mantiene lo mismo que para el tamaño mayor como se puede ver en la Figura 7.11, con la diferencia de que no se observa ningún comportamiento de transferencia de masa o reacción en su interior antes de los 18 minutos debido a que el flujo de agua que contiene el sustrato aún no ha alcanzado dicha altura en el reactor ($1,2$ metros).

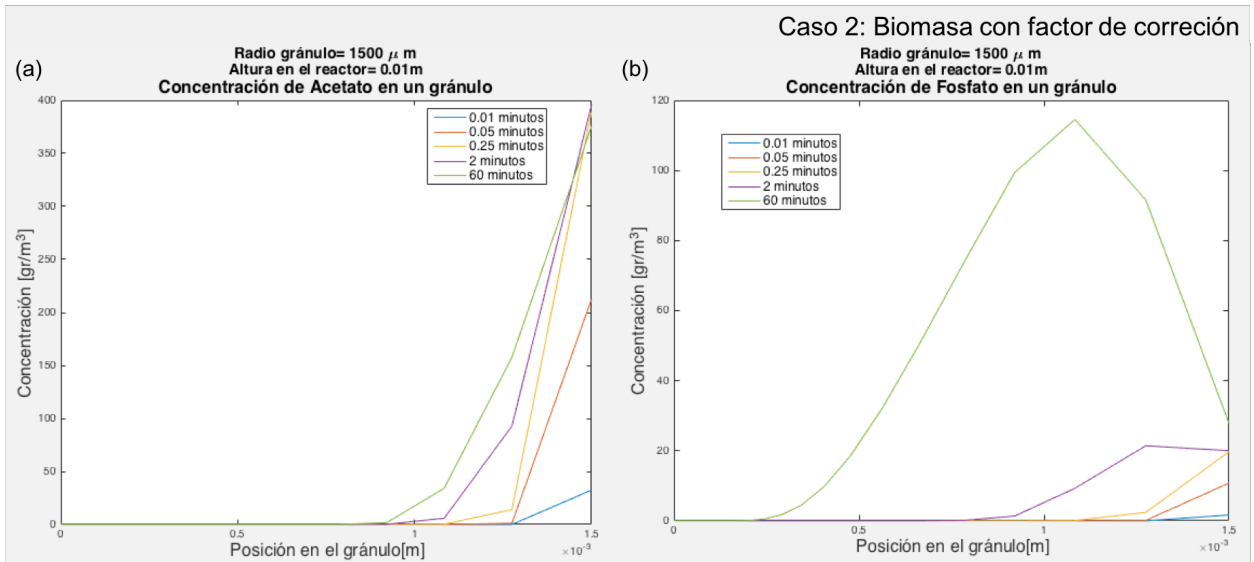


Figura 7.12: Perfil de concentraciones en el radio del gránulo, considerando una concentración de biomasa igual a $5,1 \text{ gr PAO/L}$ en la primera capa, un gránulo de radio igual a $1.500 \mu\text{m}$ ubicado a una altura de $0,01\text{m}$ en el reactor. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) (b) Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos)

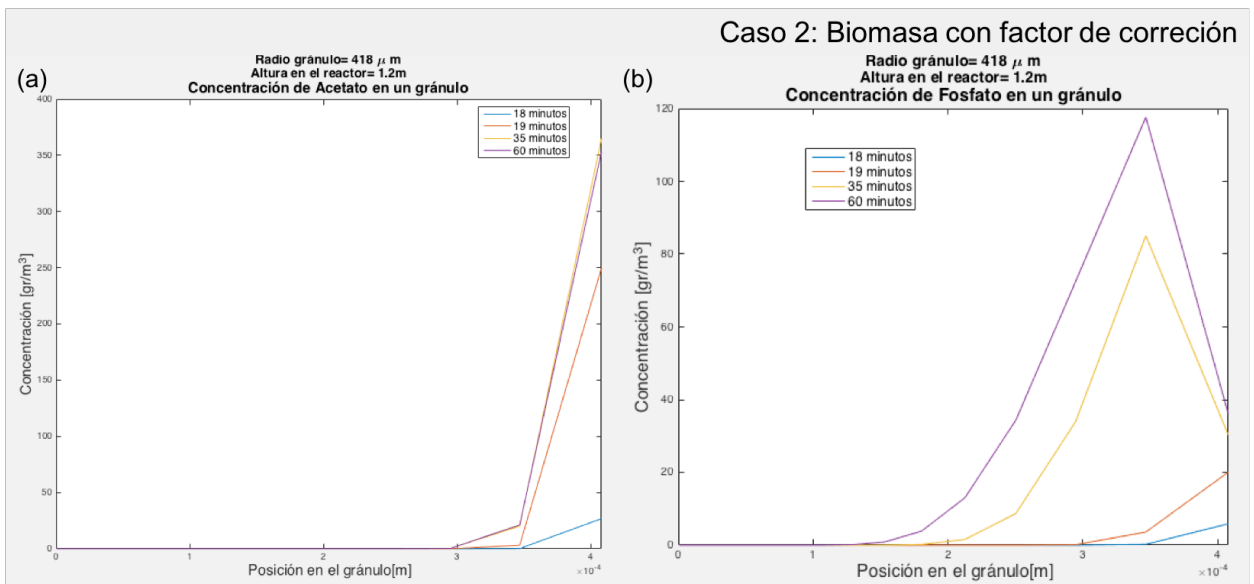


Figura 7.13: Perfil de concentraciones en el radio del gránulo, considerando una concentración de biomasa igual a $5,1 \text{ gr PAO/L}$ en la primera capa, un gránulo de radio igual a $418 \mu\text{m}$ ubicado a una altura de $0,01\text{m}$ en el reactor. (a) Variación de la concentración de Acetato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos) (b) Variación de la concentración de Fosfato durante la fase anaeróbica (1 y 60 minutos)

A pesar de que el comportamiento global del reactor en el Caso 1 demuestre que existe consumo de nutrientes por parte de los gránulos, los perfiles de concentración de Acetato en

el interior del gránulo demuestran que el comportamiento a escala de un gránulo individual no es verosímil con la realidad, debido a lo discutido en el capítulo anterior. Por otro lado, para el Caso 2 los perfiles de concentración se asemejan más al comportamiento esperado de un gránulo real, pero la conversión observada en el reactor es muy pequeña, por lo que estos resultados tampoco son los esperados. Sin embargo, la concentración en el borde de los gránulos es consistente con las concentraciones globales en el reactor, logrando así acoplar ambos modelos generados en el trabajo.

El problema fundamental a resolver es el valor de las constantes cinéticas que fueron utilizadas en el modelo. La concentración de biomasa es un factor medible experimentalmente, mientras las constantes cinéticas deben ser obtenidas a partir de un ajuste de parámetros. Las constantes utilizadas son provenientes tanto de un modelo diferente como de pruebas experimentales diferentes al caso estudiado en este capítulo. Con el fin de realizar un ajuste de parámetros que permita utilizar el modelo planteado es necesario conocer las tasas reales de conversión de sustratos a lo largo de la altura del reactor. Sería interesante rescatar del modelo cuál es la reacción limitante en el consumo de Acetato y liberación de Fosfato. Esto se puede lograr al plantear un modelo que asume que limita una cierta reacción, llegar a una expresión de su cinética, ajustar los parámetros y luego comparar con el mismo desarrollo, pero asumiendo que limita otra reacción. La ventaja del modelo formulado en este trabajo es que facilita el proceso descrito y además permite orientar de mejor manera los experimentos necesarios.

Remoción de Acetato y Liberación de Fosfato

Los resultados obtenidos permiten conocer la concentración de sustratos que hay en cada celda para cada instante de la operación, y por lo tanto, la masa total que hay en el reactor. En particular, se puede conocer la masa total de Acetato y Fosfato que hay en el reactor al final de la etapa anaeróbica, es decir, a los 60 minutos. Al contrastar estos valores con la masa total de sustratos que ingresan al reactor durante la alimentación es posible obtener y comparar el porcentaje de remoción de Acetato y de liberación de Fosfato.

Tabla 7.7: Porcentaje de remoción de Acetato

	Inicial [kgAc]	Final [kgAc]	Remoción [%]
Caso 1	1.416	503	65
Caso 2	1.416	830	41

Tabla 7.8: Porcentaje de liberación de Fosfato

	Inicial [kgP]	Final [kgP]	Liberación [%]
Caso 1	71,5	240	336
Caso 2	71,5	80	112

El modelo generado permite conocer la masa de sustrato que hay en el reactor en todo momento y para todo el rango de altura, y por ende, la masa total de contaminante en el equipo. Al comparar la masa total de Acetato que ingresa al reactor con la masa restante al final de la fase aeróbica se puede conocer el porcentaje de remoción del sistema. En la Tabla 7.7 se puede ver que para el caso 1 se consumen aproximadamente 910 [kg] de Acetato, alcanzando una remoción del 65 % de la masa total que ingresa al reactor, mientras que en el segundo caso se consumen aproximadamente 580 [kg], equivalente a un 41 % de remoción. Si bien en ninguno de los casos se alcanza a descontaminar el agua que ingresa al reactor, el agua que sale del reactor por la parte superior está limpia pues el flujo de agua contaminada no alcanza la altura total del reactor. Para comparar estos resultados con la remoción de materia orgánica de un reactor real se toma como referencia la concentración de DBO_5 en el afluente y efluente de la planta operada en Gammerwolde, Países Bajos por Nereda®. La concentración promedio de DBO_5 en el afluente de la planta es de 224 [mg/L], mientras que el efluente posee valores de 9,7 [mg/L], equivalente a un 96 % de remoción. Esta comparación demuestra que el valor de los parámetros utilizados en el modelo no permite obtener un porcentaje de remoción realista, ya que reactores de este tipo se caracterizan por sus excelentes propiedades de remoción de materia orgánica. Esto evidencia que los parámetros cinéticos utilizados en el modelo no son compatibles con la realidad, pero que una vez ajustado, el modelo permitiría conocer los valores locales de concentración de materia orgánica en todo el reactor, lo que a su vez mejora el entendimiento del equipo y puede brindar a futuro mejoras en su operación.

La fracción del reactor ocupada por gránulos posee una altura de 1,72 metros y por lo tanto el sustrato que no fue consumido entre el fondo del reactor y este punto ya no disminuirá su concentración. Sin embargo, durante la fase aeróbica puede haber consumo de Acetato por parte de los organismos heterótrofos que se encuentran en las capas externas del gránulo. Además, dado que en la fase aeróbica se aplica aireación constante se generan condiciones de mezcla perfecta y, por lo tanto, las partículas de Acetato se diluyen con el resto del agua limpia existente en la parte superior del reactor. Estos factores pueden contribuir a la disminución de la concentración de Acetato en el reactor, aumentando así el porcentaje de remoción.

Debido a los supuestos tomados en cuanto a la concentración de biomasa y, por consecuencia, las tasas de conversión, el modelo no permite diferenciar de manera directa cuál es el tipo de gránulo más eficiente para la remoción de nutrientes del agua. Estimar la tasa de consumo de cada gránulo según su tamaño puede resultar útil al momento de realizar el perfil de concentración en la altura del reactor y además puede servir para optimizar el funcionamiento del equipo al favorecer el crecimiento de los gránulos más eficientes. Si bien el modelo planteado no permite diferenciar la remoción entre las diferentes clases, esto se puede lograr a partir de estudios experimentales. En particular, se pueden aislar las diferentes clases de gránulos y medir la tasa de consumo de cada una por separado. Se cree que los gránulos con mejor eficiencia de remoción poseen un tamaño mediano, debido que, por un lado, la población de microorganismos que habitan en un interior posee un grado de desarrollo lo suficientemente avanzado como para maximizar el almacenamiento de polímeros sin comprometer el crecimiento de biomasa y, por otro lado, al ser más pequeños y compactos que los gránulos de mayor tamaño, presentan menor porosidad en su interior. Sin embargo, como fue mencionado antes, gránulos más grandes poseen mejores tasas de transferencia de masa pues poseen mayor cantidad de volumen libre, debido al tamaño de los aglomerados

en su interior. Sin lugar a dudas, son muchos los factores que pueden afectar la conversión de sustratos dentro de un gránulo y, debido a la complejidad del ecosistema, es sumamente difícil estimar de forma precisa cuál es el proceso que tiene mayor relevancia al momento de descontaminar las aguas servidas.

En la formulación del modelo se asumió que las clases de gránulos no se mezclan entre sí, lo que permitió el ordenamiento de las celdas como fue planteado. Sin embargo, la realidad puede tener otro comportamiento si se tiene otro empaquetamiento de gránulos. A pesar de esto, este supuesto permite un primer acercamiento a un reactor que tiene una variedad de tamaño de gránulos. Otra ventaja del modelo formulado es que permite arreglar la misma masa total de gránulos con otra distribución de tamaños y, en consecuencia, habría cambios en el tratamiento. Si bien no es parte de los alcances de este trabajo, es un modelo que permite realizar este tipo de comparaciones.

En cuanto a los factores que no fueron contemplados en el modelo destacan 2 principales. El primero de ellos corresponde a que los gránulos que se encuentran más abajo están constantemente expuestos a la entrada de aguas servidas crudas por lo que eventualmente se saturan de sustrato. Debido a esto, el gradiente de concentraciones entre el interior del gránulo y el borde disminuye, provocando así una disminución en la tasa de transferencia de masa. En segundo lugar, no se toman en consideración los efectos de la difusividad y de la gravedad en el eje Z, a pesar de que la alimentación posee ventanas en las que no hay presencia de flujo ascendente, por lo que el modelo puede ser extendido al estudiar el efecto de ambos fenómenos en el perfil de concentraciones presentado.

Capítulo 8

Reflexiones Generales

Los gránulos aeróbicos son agregados de origen microbiano, de estructura compacta y con excelentes propiedades de sedimentabilidad. En él conviven diversas comunidades de microorganismos y son responsables de convertir la materia orgánica presente en las aguas servidas, funcionando así como agentes descontaminantes. En particular, los organismos acumuladores de fósforo (PAOs) son la especie con mayor abundancia dentro del gránulo y se caracterizan por su capacidad de almacenar polímeros orgánicos en su interior. Gracias al almacenamiento de polímeros, las bacterias tipo PAO se organizan en estructuras de aglomerados mediante la adhesión de las células. Estos aglomerados son responsables de crear una estructura heterógena dentro del gránulo, caracterizada por la presencia de túneles y canales que dificultan la transferencia de masa en su interior. En base a esto, surge la necesidad de crear un modelo geométrico que permita representar la estructura del gránulo, que a su vez permita modelar los procesos de conversión en su interior. Se propone un modelo de capas de grosor descendente hacia el centro del gránulo, tal que cada capa está definida por el diámetro de los aglomerados en su interior. De esta manera es posible representar la teoría de que los aglomerados crecen desde adentro hacia afuera, y así tener una primera aproximación que permite describir geoméricamente la existencia de estas estructuras. Una de las principales ventajas del modelo es que es aplicable a gránulos de cualquier tamaño. Esto permite representar todos los tamaños de gránulos que hay en un reactor, lo que resulta de gran ventaja al expandir el modelo de un gránulo individual al conjunto de diversos gránulos que componen un reactor.

Una de las teorías más fuertes sobre la estructura de los gránulos es que la difusividad hacia el centro del gránulo disminuye, por lo que existe un gradiente de concentración de oxígeno y materia orgánica en el gránulo, lo que es responsable de la estratificación de las especies microbianas en su interior. Para representar este fenómeno en el modelo propuesto, se crea un factor de corrección para la difusividad de las moléculas, que depende de la posición en el radio del gránulo. Este factor de corrección viene representado por el coeficiente de tortuosidad, el que será representativo del espacio libre que hay en el interior del gránulo, el que a su vez se calcula según la teoría de empaquetamiento de esferas a partir del diámetro de los aglomerados que hay en cada capa. Como resultado se obtiene una función para la difusividad dependiente del radio, que se acerca a la teoría propuesta en un principio. Al contrastar el gráfico de la difusividad con la posición en gránulo real se puede ver que la posición en que la difusividad posee valores cercanos a 0, el gránulo se va haciendo más poroso. Si la difusividad es muy chica el transporte de sustratos no es posible, entonces las células se mueren por escasez de sustrato y por eso el gránulo se vuelve poroso. Se podría

decir que el modelo se corrige a si mismo. Como los aglomerados del interior son tan chicos no hay espacio para el transporte de moléculas entonces la difusividad es casi nula y como consecuencia no ingresa sustrato y la población bacteriana entra en etapa de muerte celular.

Para la conversión microbiana en el interior del gránulo se toma como simplificación que las PAO son la especie de mayor importancia y responsable de la mayor parte de las reacciones de conversión. Se consideran 2 etapas de su metabolismo, una aeróbica y una anaeróbica y además se simplifica el metabolismo, tal que se estudia la concentración de 3 sustratos de interés: Acetato, Ortofosfato y Oxígeno. Las tasas de conversión de cada sustrato están normalizadas por la concentración de biomasa local que hay en cada posición del gránulo. Se tomó como supuesto que la concentración de biomasa en la primera capa será la misma, para cualquier tamaño de gránulo, ya que en la práctica formación de células depende de la disponibilidad de sustrato. Sin embargo, se podría decir que la fracción de biomasa activa se encuentra en la superficie de los aglomerados, por lo tanto los gránulos más chicos tendrían mayor biomasa activa, ya que los aglomerados son más pequeños y por lo tanto hay mayor área superficial y, como consecuencia, tienen más biomasa activa. Sin embargo, a pesar de los supuestos tomados, no se tiene conocimiento basado en la realidad sobre cuál es la fracción de biomasa activa en el gránulo, ni tampoco conocimiento experimental sobre su valor. Sin embargo, tiene sentido asumir que en distintos puntos del gránulo se tengan diferentes tasas de conversión y diferentes valores de las constantes asociadas a la cinética microbiana. Sin embargo, la tasa de conversión dentro del gránulo puede depender de muchos factores, no sólo de la concentración de biomasa, tal como concentración de sustratos, nichos de microorganismos, transporte de moléculas, interacción célula a célula, etc. Experimentalmente es difícil medir todos estos parámetros para el interior del gránulo. Se podrían medir las conversiones globales del reactor, pero obtener información sobre lo que ocurre en el interior del gránulo en términos de conversión de sustratos resulta de mayor dificultad experimental. De todas formas, el modelo utilizado es satisfactorio ya que permite diferenciar entre tamaños de gránulo y además entrega una distinción para diferentes posiciones en el radio del gránulo.

Una vez definidas la difusividad y las tasas de conversión microbiana en el interior del gránulo, se plantea un balance de masa que permite describir el comportamiento de nutrientes en el interior del gránulo, y como resultado se obtienen perfiles de concentración para Acetato, Fosfato y Oxígeno. Además de la función para la difusividad, el modelo planteado depende fuertemente de las condiciones de borde propuestas, y de las tasas de conversión estimadas a partir de la cinética microbiana. Por un lado, las condiciones de borde representan lo que ocurre afuera del gránulo, es decir, en el seno del reactor. Las condiciones de borde utilizadas en este modelo asumen que el reactor opera en condiciones de mezcla perfecta, sin embargo, la alimentación de aguas servidas en este tipo de reactores ocurre de forma ascendente, pasando a través de un lecho de gránulos, por lo tanto, las condiciones de borde de los gránulos no son homogéneas para todo el reactor. La concentración de sustratos en el líquido del reactor depende de la actividad microbiana en el interior de los gránulos, que a su vez depende de la concentración de sustratos que existe en el líquido, como fue demostrado en el modelo presentado, por lo que ambos fenómenos deben modelarse de manera acoplada. al acoplar el funcionamiento de todos los gránulos que conforman un reactor es posible obtener condiciones de borde mas cercanas a la realidad. A pesar de esto, las condiciones propuestas como primera aproximación permiten evidenciar cómo la actividad en el exterior del gránulo posee directa incidencia con el perfil de concentración generado en su interior. Incluso, este análisis permite

inferir que la alimentación tipo saciedad-hambruna impuesta en las condiciones de borde es en parte responsable de que el Acetato no llegue al centro del gránulo, favoreciendo la estratificación de microorganismos.

Se realizó un análisis de sensibilidad para evaluar, en primer lugar, cómo afecta el valor del radio total del gránulo en el perfil de concentración, y en segundo lugar, el valor de tasas cinéticas, mediante una modificación de la concentración de biomasa considerada. El tamaño del gránulo posee una incidencia directa en la penetración de sustratos debido a que el coeficiente de tortuosidad planteado previamente es sensible al diámetro de los aglomerados, los que a su vez dependen del radio total del gránulo. Mientras más chicos sean los gránulos, menor será la difusividad en su interior. Por otro lado, se observa cómo el valor de las constantes cinéticas afectan directamente en los perfiles de concentración de los sustratos. Dependiendo de la concentración de biomasa considerada, los sustratos alcanzan mayor o menor profundidad en el gránulo. Debido a la forma que poseen los gránulos es esperable que exista un radio en el que los sustratos ya no sean capaces de ingresar, sin embargo este debe tener un valor mínimo tal que se pueda asegurar el crecimiento y mantención de las células en su interior. En base a esto se concluye que el modelo requiere un ajuste de parámetros cinéticos, pero, como fue mencionado antes, es difícil medir la concentración de sustratos en el interior del gránulo diferenciado para las diferentes posiciones en el gránulo.

Con el objetivo de estudiar y simular el comportamiento de un reactor de granulación aeróbica a partir del modelo de un gránulo individual, se desarrolla un modelo sobre la idea de que cada gránulo está encapsulado por una celda cúbica, y que cada celda se comporta como un reactor continuo perfectamente agitado. Asumiendo que las celdas no se superponen entre sí es posible representar el lecho de gránulos de un reactor de 9.600 m^3 , para sobre el seguir la conducta dinámica de Acetato y Fosfato durante la fase anaeróbica de operación. Esta formulación del modelo permite tener un primer acercamiento a una reactor que tiene una variedad de gránulos y además permite utilizar el modelo de una gránulo individual para representar la conversión de materia orgánica del total de gránulos. Como resultado principal se obtiene la variación de Acetato y Fosfato en el tiempo, según la posición en la altura del reactor, los que permiten evidenciar cómo el modelo permite representar tanto el flujo de alimentación ascendente, cómo la conversión de sustratos a medida que el flujo pasa a través del lecho de gránulos. Dentro de las principales ventajas del modelo planteado son que este permite variar las diferentes configuraciones de la geometría y operación del reactor, así como también la distribución de tamaños de gránulos.

Al realizar el análisis de sensibilidad variando la tasa de conversión de sustratos se obtuvieron resultados contradictorios. Para tasas de conversión que evidencian un consumo de nutrientes a escala de reactor, al analizar el comportamiento del gránulo se observa un consumo abrupto en la primera capa de este, lo que no tiene sentido biológico en cuanto al funcionamiento interno de un gránulo. Por otro lado, al disminuir la tasa de conversión en el interior de los gránulos es posible evidenciar que la penetración de sustratos en el gránulo es más cercana a lo que podría estar ocurriendo en la realidad. Sin embargo, al disminuir las tasas de conversión, no se observa una disminución significativa de los contaminantes en el interior del reactor. El reactor modelado tiene un volumen de 9.600 m^3 y al estar trabajando con un volumen tan grande se dejan de controlar ciertas variables, como por ejemplo, el orden y distribución de los gránulos. Sin embargo, se tiene mucha información sobre el funcionamiento y rendimiento de los reactores utilizados como referencia, tal como la gra-

nulometría de lodo granular aeróbico, la que resultó ser muy valiosa para la formulación del modelo. Una de las principales conclusiones del trabajo es que debe realizarse un ajuste de parámetros para que el modelo planteado puede ser implementado como una herramienta de evaluación de reactores a escala real. Sin embargo, una de las ventajas principales del modelo realizado es que gracias a que está basado en el modelo de un gránulo individual, es posible dirigir las pruebas de laboratorio a una escala pequeña, en vez de la medición y toma de muestras en un reactor de mayor volumen. Esto facilita el control de las muestras y de las condiciones de operación. Por ejemplo, puede resultar interesante estudiar la operación de un reactor a escala de laboratorio, típicamente de 3[L], en cuanto a la distribución de gránulos y resultados de conversión de sustratos. De esta manera se podría tener mayor precisión al momento de acoplar el modelo individual de un gránulo con el del reactor completo.

Capítulo 9

Conclusiones

Se cumple el objetivo general al modelar la fase anaeróbica de un reactor de granulación aeróbica de crecimiento de PAOs para el tratamiento de aguas servidas. El modelo se realiza sobre la base de un modelo de base fenomenológica que considere la existencia de aglomerados celulares como subestructuras de un gránulo aeróbico. Como principales resultados se obtienen perfiles de concentración que permiten seguir la conducta dinámica de Acetato, Fosfato y Oxígeno en el radio de un gránulo aeróbico individual, para luego, sobre el modelo de un gránulo individual, poder simular el comportamiento de un reactor compuesto por un conjunto de gránulos de diversos tamaños.

Los gránulos son partículas compactas y heterogéneas, por lo que resulta relevante estudiar el efecto de su estructura en el transporte de sustratos y conversión de materia orgánica. Para esto se dividió un reactor biológico de granulación aeróbica para el crecimiento de organismos acumuladores de fósforo en subdominios, tal que se pueda estudiar el comportamiento de un gránulo individual. A partir de estudios de imágenes de corte transversal de un gránulo maduro de radio igual $1800 \mu m$, es posible identificar subestructuras del mismo, conformadas por el conjunto de células de tipo PAO, denominadas como aglomerados. Los aglomerados son responsables de crear canales en el interior del gránulo, jugando un rol relevante en su estructura. En base a esto se crea un modelo geométrico basado en la existencia de capas de grosor decreciente hacia el centro del gránulo, sintonizando con la teoría de que los aglomerados crecen de adentro hacia afuera. Este modelo permite describir la estructura de un gránulo, para cualquier tamaño, lo que resulta de gran ventaja para representar el conjunto de gránulos en el interior de un reactor.

Debido a la existencia de aglomerados, la difusividad en el interior del gránulo no es constante, tal que a medida que las moléculas de sustrato se acercan al centro del gránulo, la resistencia a la transferencia de masa aumenta. Para representar este fenómeno se creó un factor de corrección para la difusividad en el interior del gránulo, dependiendo de la posición en el radio, representado por un coeficiente de tortuosidad. El coeficiente de tortuosidad se estimó a partir del volumen libre que hay en cada capa del gránulo, según el número de aglomerados en su interior. Como principal resultado se obtuvo que la difusividad disminuye a medida que la posición en el radio de acerca al centro, obteniendo valores muy cercanos a 0 para posiciones en el radio inferiores a $500 \mu m$. Si la difusividad es muy pequeña, los sustratos no deberían ser capaces de llegar al centro del gránulo y la población celular que se encuentran en él entran en etapa de muerte celular y por lo tanto el gránulo debería volverse

poroso, lo que efectivamente ocurre en la realidad. Esto permite concluir que el modelo creado permite representar de manera adecuada la realidad observada en gránulos reales. Por otro lado, se identificaron las principales características del metabolismo de las células tipo PAO, tal que este se divide en una etapa aeróbica y otra anaeróbica. Además simplificó el problema tal que se estudió el metabolismo asociales al Acetato, Fosfato y Oxígeno. Esto permitirá definir sobre cada subdominio los procesos físicos, químicos y biológicos que ocurren en el interior de un gránulo.

Para modelar la conducta dinámica de la concentración de Acetato, Fosfato y Oxígeno se formuló y resolvió un sistema de ecuaciones diferenciales sobre cada subdominio. La ecuación a resolver considera la variación de la concentración en el tiempo y en el radio del gránulo como función de la difusividad y de la tasa de conversión microbiana, que tiene lugar en el interior del gránulo. Las tasas de cinética microbiana son expresiones que dependen de variables y parámetros. El problema tiene como condiciones de borde el comportamiento de los sustratos estudiados en el líquido del reactor. Estas fueron estimadas según resultados de modelos previos y se puede observar en los resultados que el valor de la concentración de los 3 sustratos estudiados depende directamente de lo que está ocurriendo en el exterior del gránulo. A modo de resultado se obtienen perfiles de concentración que permiten seguir la conducta de los tres sustratos de interés para todo el radio del gránulo y todo el tiempo de operación. Se concluye que los perfiles de concentración tienen una forma similar a la función de difusividad propuesta en el capítulo anterior y que el modelo es altamente sensible a las tasas de consumo estimadas. Las principales limitaciones de este modelo radican en que este requiere un ajuste de parámetros para las constantes cinéticas utilizadas en la tasas de conversión. Sin embargo, la toma de datos experimentales en el interior del gránulo puede ser difícil de lograr, por lo que un ajuste de parámetros tan preciso no es factible. Otra limitación del modelo planteado es su sensibilidad a las condiciones de borde, las que a su vez deberían estar acopladas al funcionamiento global del conjunto de gránulos. Es por esto que surge la necesidad de validar el modelo propuesto.

Para validar el modelo previo se plantea acoplar la conducta de gránulos individuales y así modelar el comportamiento dinámico de un reactor de granulación aeróbica para el tratamiento de aguas residuales. Esto se logra bajo la idea de que cada gránulo individual está encapsulado por una celda cúbica que se comporta como un reactor continuo perfectamente agitado. Esto permite ordenar el conjunto de gránulos que componen el reactor, así como también seguir la variación de la concentración de sustratos en la altura del reactor, a medida que se realiza una alimentación ascendente desde el fondo del reactor. Como principal resultado se obtienen perfiles de concentración de Acetato y Fosfato en la altura del reactor. Esto permite evidenciar el consumo de Acetato y liberación de Fosfato por parte de los microorganismos que se encuentran en el gránulo, a medida que el flujo de agua se mueve de forma ascendente. Una de las ventajas del modelo generado es que puede recibir como datos de entrada cualquier distribución de tamaños de gránulo, así como también diferentes configuraciones geométricas y operacionales, por lo que es adaptable a cualquier reactor que opere bajo la tecnología de granulación aeróbica. Este modelo representa una primera aproximación que permite seguir la concentración de contaminantes en la altura del reactor, lo que puede ser utilizado a futuro para optimizar el funcionamiento de los reactor, en términos de volumen ocupado y/o consumo energético.

Se realizó además un análisis de sensibilidad respecto a la cinética microbiana para el comportamiento del modelo global, con el fin de estudiar el efecto de los valores de las constantes cinéticas utilizadas en el rendimiento global del reactor. Esto se realizó a través de la modificación de la concentración de biomasa en el interior del gránulo, ya que las constantes cinéticas obtenidas a partir de bibliografía están normalizadas por la concentración de biomasa local según el radio del gránulo. Como resultado se obtiene que disminuir el valor de la concentración de biomasa en un 90 % representa una diferencia en la remoción de Acetato de 15 %. Por otro lado, también se observó que disminuir la concentración de biomasa posee un efecto directo en los perfiles de concentración de Acetato en el interior del gránulo. Se observó que mientras más grande sea la concentración de biomasa y, por lo tanto, las tasas de conversión, menor es la profundidad de penetración de sustrato en el gránulo. Debido a la forma y actividad microbiana que hay en el interior de un gránulo, es esperable que los sustratos no sea capaces de alcanzar la totalidad el radio del gránulo, sin embargo, estos deben alcanzar una profundidad mínima tal que se pueda asegurar el crecimiento y mantención de las células que se encuentran en él. Se obtienen resultados contradictorios al realizar este análisis de sensibilidad, ya que para tasas de conversión que evidencian un consumo de nutrientes significativo a escala de reactor, el comportamiento del gránulo presenta un consumo abrupto en la primera capa de este, lo que no tiene sentido biológico en cuanto al funcionamiento interno de un gránulo. Se concluye que el modelo propuesto un ajuste de parámetros específico para el modelo y sistema propuestos y que, gracias a que el modelo está basado en el comportamiento de un gránulo individual es posible dirigir la experimentación a una escala pequeña, en la que la toma de muestras y mantención de condiciones de operación sean más simples y controlables.

Finalmente, se concluye que el modelo realizado permite rescatar las características principales de la estructura individual de un gránulo y a partir de ello representar la conducta de un reactor compuesto por el conjunto de miles de gránulos de diferentes tamaños. Esto facilita el entendimiento de este tipo de tratamiento en términos de conversiones globales, y además permite dirigir el muestreo y las pruebas de laboratorio para realizar el ajuste de parámetros pertinente. Este trabajo ha logrado un modelo verosímil que puede ser calibrado para representar diferentes reactores de granulación aeróbica. Se espera que una vez que esto sea logrado, el modelo realizado pueda ser utilizado para optimizar y mejorar el funcionamiento de esta prometedora tecnología para el tratamiento de aguas servidas.

Bibliografía

- [1] M. von Sperling, *Wastewater Characteristics, Treatment and Disposal*, vol. 1. London. IWA Publishing., 2007.
- [2] P. L. McCarty, J. Bae, and J. Kim, “Domestic wastewater treatment as a net energy producer-can this be achieved?,” *Environ. Sci. Technol.*, vol. 45, pp. 7100–7106, Sept. 2011.
- [3] D. Gormaz-Cuevas, J. Riffo-Rivas, L. Montastruc, M. Brüning-González, and F. A. Díaz-Alvarado, “A multi-objective optimization model to plan city-scale water systems with economic and environmental objectives: A case study in santiago, chile,” *Journal of Cleaner Production*, vol. 279, p. 123737, 2021.
- [4] Y. V. Nancharaiah and G. Kiran Kumar Reddy, “Aerobic granular sludge technology: Mechanisms of granulation and biotechnological applications,” *Bioresource Technology*, vol. 247, pp. 1128–1143, 2018.
- [5] M. K. de Kreuk, N. Kishida, and M. C. M. van Loosdrecht, “Aerobic granular sludge—state of the art.,” *Water science and technology : a journal of the International Association on Water Pollution Research*, vol. 55, pp. 75–81, 2007.
- [6] M. Pronk, M. K. de Kreuk, B. de Bruin, P. Kamminga, R. Kleerebezem, and M. C. M. van Loosdrecht, “Full scale performance of the aerobic granular sludge process for sewage treatment,” *Water Research*, vol. 84, pp. 207–217, 2015.
- [7] B.-J. Ni and H.-Q. Yu, “Mathematical modeling of aerobic granular sludge: A review,” *Biotechnology advances*, vol. 28, pp. 895–909, Nov. 2010.
- [8] B.-M. Wilén, R. Liébana, F. Persson, O. Modin, and M. Hermansson, “The mechanisms of granulation of activated sludge in wastewater treatment, its optimization, and impact on effluent quality.,” *Applied microbiology and biotechnology*, vol. 102, pp. 5005–5020, Jun 2018.
- [9] Y. V. Nancharaiah and M. Sarvajith, “Aerobic granular sludge process: a fast growing biological treatment for sustainable wastewater treatment,” *Current Opinion in Environmental Science Health*, vol. 12, pp. 57–65, 2019.
- [10] D. Gao, L. Liu, H. liang, and W.-M. Wu, “Comparison of four enhancement strategies for aerobic granulation in sequencing batch reactors,” *Journal of Hazardous Materials*, vol. 186, no. 1, pp. 320–327, 2011.
- [11] S. S. Adav and D.-J. Lee, “Extraction of extracellular polymeric substances from aerobic granule with compact interior structure,” *Journal of Hazardous Materials*, vol. 154, no. 1, pp. 1120–1126, 2008.

- [12] M. K. de Kreuk, C. Picioreanu, M. Hosseini, J. B. Xavier, and M. C. M. van Loosdrecht, “Kinetic model of a granular sludge sbr: Influences on nutrient removal,” *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 97, pp. 801–815, July 2007.
- [13] M. K. de Kreuk, J. J. Heijnen, and M. C. M. van Loosdrecht, “Simultaneous cod, nitrogen, and phosphate removal by aerobic granular sludge,” *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 90, pp. 761–769, June 2005.
- [14] M.-K. H. Winkler, R. Kleerebezem, L. M. M. de Bruin, P. J. T. Verheijen, B. Abbas, J. Habermacher, and M. C. M. van Loosdrecht, “Microbial diversity differences within aerobic granular sludge and activated sludge flocs,” *Applied Microbiology and Biotechnology*, vol. 97, no. 16, pp. 7447–7458, 2013.
- [15] M. Maurer, *Erhöhte biologische Phosphorelimination: Modellierung der biologischen und chemischen Prozesse*. PhD thesis, 1996.
- [16] J. T. Bunce, E. Ndam, I. D. Ofiteru, A. Moore, and D. W. Graham, “A review of phosphorus removal technologies and their applicability to small-scale domestic wastewater treatment systems,” *Frontiers in Environmental Science*, vol. 6, p. 8, 2018.
- [17] T. Mino, M. C. M. van Loosdrecht, and J. J. Heijnen, “Microbiology and biochemistry of the enhanced biological phosphate removal process,” *Water Research*, vol. 32, no. 11, pp. 3193–3207, 1998.
- [18] R. Gimenez, M. F. Nuñez, J. Badia, J. Aguilar, and L. Baldoma, “The gene yjcg, co-transcribed with the gene acs, encodes an acetate permease in escherichia coli,” *Journal of bacteriology*, vol. 185, pp. 6448–6455, Nov. 2003.
- [19] S. He and K. D. McMahon, “Microbiology of ‘candidatus accumulibacter’ in activated sludge,” *Microbial Biotechnology*, vol. 4, pp. 603–619, feb 2011.
- [20] N. N. Rao and A. Torriani, “Molecular aspects of phosphate transport in escherichia coli,” *Molecular Microbiology*, vol. 4, pp. 1083–1090, jul 1990.
- [21] H. G. Martín, N. Ivanova, V. Kunin, F. Warnecke, K. W. Barry, A. C. McHardy, C. Yeates, S. He, A. A. Salamov, E. Szeto, E. Dalin, N. H. Putnam, H. J. Shapiro, J. L. Pangelinan, I. Rigoutsos, N. C. Kyrpides, L. L. Blackall, K. D. McMahon, and P. Hugenholtz, “Metagenomic analysis of two enhanced biological phosphorus removal (EBPR) sludge communities,” *Nature Biotechnology*, vol. 24, pp. 1263–1269, sep 2006.
- [22] G.-G. Graciela, H. Christof, and G. Voordouw, “Aerobic granules: Microbial landscape and architecture, stages, and practical implications,” *Applied and Environmental Microbiology*, vol. 80, pp. 3433–3441, June 2014.
- [23] “Nereda. nereda® technology - how it works. 2022 [en linea] <https://global.royalhaskoningdhv.com/nereda/technology/nereda-technology---how-it-works>[consulta: 09 junio 2022],” 2022.
- [24] E. J. H. van Dijk, M. Pronk, and M. C. M. van Loosdrecht, “A settling model for full-scale aerobic granular sludge,” *Water Research*, vol. 186, p. 116135, 2020.
- [25] K.-Z. Su and H.-Q. Yu, “Formation and characterization of aerobic granules in a sequencing batch reactor treating soybean-processing wastewater,” vol. 39, pp. 2818–2827, feb 2005.

- [26] S.-F. Yang, Q.-S. Liu, J.-H. Tay, and Y. Liu, "Growth kinetics of aerobic granules developed in sequencing batch reactors," *Letters in Applied Microbiology*, vol. 38, pp. 106–112, Feb. 2004.
- [27] A.-J. Li and X.-Y. Li, "Selective sludge discharge as the determining factor in sbr aerobic granulation: Numerical modelling and experimental verification," *Water Research*, vol. 43, no. 14, pp. 3387–3396, 2009.
- [28] B.-J. Ni, G.-P. Sheng, X.-Y. Li, and H.-Q. Yu, "Quantitative simulation of the granulation process of activated sludge for wastewater treatment," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 49, pp. 2864–2873, Mar. 2010.
- [29] Y. Li and Y. Liu, "Diffusion of substrate and oxygen in aerobic granule," *Biochemical Engineering Journal*, vol. 27, no. 1, pp. 45–52, 2005.
- [30] J. B. Xavier, M. K. de Kreuk, C. Picioreanu, and M. C. M. van Loosdrecht, "Multi-scale individual-based model of microbial and bioconversion dynamics in aerobic granular sludge," *Environ. Sci. Technol.*, vol. 41, pp. 6410–6417, Sept. 2007.
- [31] K.-Z. Su and H.-Q. Yu, "A generalized model for aerobic granule-based sequencing batch reactor. 1. model development," *Environ. Sci. Technol.*, vol. 40, pp. 4703–4708, Aug. 2006.
- [32] S. Mudliar, S. Banerjee, A. Vaidya, and S. Devotta, "Steady state model for evaluation of external and internal mass transfer effects in an immobilized biofilm," *Bioresource technology*, vol. 99, pp. 3468–74, July 2008.
- [33] J. R. Vázquez-Padín, A. Mosquera-Corral, J. L. Campos, R. Méndez, J. Carrera, and J. Pérez, "Modelling aerobic granular sbr at variable cod/n ratios including accurate description of total solids concentration," *Biochemical Engineering Journal*, vol. 49, no. 2, pp. 173–184, 2010.
- [34] T. M. M. v. L. Mogens Henze, W. Gujer, *Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. IWA Publishing, 2000.
- [35] B.-J. Ni and H.-Q. Yu, "Growth and storage processes in aerobic granules grown on soybean wastewater," vol. 100, pp. 664–672, jul 2008.
- [36] G. Sin, A. Guisasola, D. J. W. D. Pauw, J. A. Baeza, J. Carrera, and P. A. Vanrolleghem, "A new approach for modelling simultaneous storage and growth processes for activated sludge systems under aerobic conditions," *Biotechnology and Bioengineering*, vol. 92, no. 5, pp. 600–613, 2005.
- [37] J. J. Beun, J. J. Heijnen, and M. C. M. van Loosdrecht, "N-removal in a granular sludge sequencing batch airlift reactor," *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 75, pp. 82–92, Oct. 2001.
- [38] S. Mahnič-Kalamiza, D. Miklavčič, and E. Vorobiev, "Dual-porosity model of solute diffusion in biological tissue modified by electroporation," *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes*, vol. 1838, no. 7, pp. 1950–1966, 2014.
- [39] H.-C. Chang and L.-C. Wang, "A Simple Proof of Thue's Theorem on Circle Packing," *arXiv e-prints*, p. arXiv:1009.4322, Sept. 2010.

Anexos

Anexo A

Condiciones de Estabilidad

A.1. Condiciones de Estabilidad

A continuación se muestra la condición de estabilidad utilizada para establecer el mallado utilizado en la simulación realizada en el presente trabajo.

Se debe cumplir que para todo el mallado espacial (Δx) la siguiente condición de estabilidad:

$$D_{S,e} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq 0,25 \quad (\text{A.1})$$

Para esto se considera que $\Delta t = 0,4s$ y se verifica para todas las capas simuladas si esta condición se cumple, teniendo en cuenta los diferentes valores que toma la difusión en el mallado. Esta verificación se presenta en la Tabla A.1. Además, se presenta un ejemplo de cálculo para el cumplimiento de la condición de estabilidad para el Acetato en la primera capa del gránulo:

Ejemplo de cálculo:

$$4,1 \cdot 10^{-10} \frac{0,4}{(2,7 \cdot 10^{-4})^2} = 2,2 \cdot 10^{-3} \leq 0,25$$

Tabla A.1: Comprobación de la estabilidad numérica del método numérico para la simulación.

Capa	dx	Estabilidad					
		$D_{Ac,e}$	$D_{PO_4,e}$	$D_{O_2,e}$	Acetato	Fosfato	Oxígeno
1	2,7,E-04	4,1,E-10	4,7,E-10	8,5,E-10	2,2,E-03	2,6,E-03	4,7,E-03
2	2,3,E-04	2,5,E-10	2,9,E-10	5,2,E-10	1,9,E-03	2,2,E-03	4,0,E-03
3	2,0,E-04	1,5,E-10	1,8,E-10	3,2,E-10	1,6,E-03	1,8,E-03	3,4,E-03
4	1,7,E-04	9,4,E-11	1,1,E-10	2,0,E-10	1,4,E-03	1,6,E-03	2,8,E-03
5	1,4,E-04	5,8,E-11	6,6,E-11	1,2,E-10	1,1,E-03	1,3,E-03	2,4,E-03
6	1,2,E-04	3,5,E-11	4,0,E-11	7,3,E-11	9,7,E-04	1,1,E-03	2,0,E-03
7	1,0,E-04	2,1,E-11	2,4,E-11	4,5,E-11	8,1,E-04	9,3,E-04	1,7,E-03
8	8,7,E-05	1,3,E-11	1,5,E-11	2,7,E-11	6,8,E-04	7,8,E-04	1,4,E-03
9	7,4,E-05	7,9,E-12	9,0,E-12	1,6,E-11	5,7,E-04	6,5,E-04	1,2,E-03
10	6,3,E-05	4,8,E-12	5,4,E-12	9,9,E-12	4,8,E-04	5,4,E-04	9,9,E-04
11	5,4,E-05	2,9,E-12	3,3,E-12	6,0,E-12	3,9,E-04	4,5,E-04	8,2,E-04
12	4,6,E-05	1,7,E-12	2,0,E-12	3,6,E-12	3,3,E-04	3,7,E-04	6,8,E-04
13	3,9,E-05	1,0,E-12	1,2,E-12	2,1,E-12	2,7,E-04	3,1,E-04	5,6,E-04
14	3,3,E-05	6,0,E-13	6,9,E-13	1,3,E-12	2,2,E-04	2,5,E-04	4,6,E-04
15	2,8,E-05	3,5,E-13	4,1,E-13	7,4,E-13	1,8,E-04	2,0,E-04	3,7,E-04
16	2,4,E-05	2,1,E-13	2,4,E-13	4,3,E-13	1,4,E-04	1,6,E-04	3,0,E-04
17	2,0,E-05	1,2,E-13	1,4,E-13	2,5,E-13	1,1,E-04	1,3,E-04	2,4,E-04
18	1,7,E-05	6,7,E-14	7,7,E-14	1,4,E-13	8,8,E-05	1,0,E-04	1,8,E-04
19	1,5,E-05	3,7,E-14	4,2,E-14	7,7,E-14	6,7,E-05	7,7,E-05	1,4,E-04
20	1,3,E-05	2,0,E-14	2,3,E-14	4,1,E-14	5,0,E-05	5,8,E-05	1,0,E-04
21	1,1,E-05	1,0,E-14	1,2,E-14	2,2,E-14	3,6,E-05	4,1,E-05	7,5,E-05
22	9,1,E-06	5,1,E-15	5,9,E-15	1,1,E-14	2,5,E-05	2,8,E-05	5,1,E-05
23	7,8,E-06	2,4,E-15	2,7,E-15	4,9,E-15	1,6,E-05	1,8,E-05	3,3,E-05
24	6,6,E-06	9,7,E-16	1,1,E-15	2,0,E-15	8,9,E-06	1,0,E-05	1,8,E-05
25	5,6,E-06	3,2,E-16	3,7,E-16	6,7,E-16	4,1,E-06	4,7,E-06	8,5,E-06
26	4,8,E-06	7,0,E-17	8,1,E-17	1,5,E-16	1,2,E-06	1,4,E-06	2,6,E-06
27	4,1,E-06	1,0,E-18	1,2,E-18	2,2,E-18	2,5,E-08	2,9,E-08	5,2,E-08

Anexo B

Nomenclatura y Unidades

A continuación se presentan todas los símbolos utilizados en el desarrollo del presente trabajo, así como su significado y unidades.

B.0.1. Difusión

Tabla B.1: Nomenclatura y Unidades para símbolos utilizados en Capítulo 5

Símbolo	Definición	Unidades
$R_{m\acute{a}x}$	Radio exterior del gránulo	[m]
$d_{m\acute{a}x}$	Diámetro promedio de los aglomerados superficiales del gránulo	[m]
$dR_{m\acute{a}x}$	Factor proporcional para relacionar el radio del gránulo y el diámetro promedio de los aglomerados superficiales	-
α	Factor que relaciona el grosor de una capa con el grosor de la capa siguiente	-
$D_{S,e}$	Difusividad del sustrato S en el interior del gránulo	[m ² /d]
$D_{S,0}$	Difusividad del sustrato S en el medio acuoso	[m ² /d]
τ	Coefficiente de tortuosidad	-
V_i^c	Volumen total de la capa i	[m ³]
v_i^c	Volumen de cada aglomerado de la capa i	[m ³]
N_i	Cantidad de aglomerados en la capa i	-
V_i^f	Volumen libre de la capa i	[m ³]
R_i^{sup}	Radio superior de la capa i	[m]
R_{inf}	Radio inferior de la capa i	[m]
R_i^{avg}	Radio promedio de la capa i	[m]
a_i^c	Área de la semi esfera generada por el corte de un aglomerado de la capa i	[m ²]
ρ_N	Factor de corrección para N_i	-

B.0.2. Modelo Gránulo

Tabla B.2: Nomenclatura y Unidades para símbolos utilizados en Capítulo 6. A

Símbolo	Definición	Unidades
Concentración de sustratos		
$C_{S,gr}$	Concentración de sustrato S en el interior del gránulo	$[grS/m^3]$
$C_{S,ag}$	Concentración sustrato S en la superficie del aglomerado	$[grS/m^3]$
$C_{AC,gr}$	Concentración de Acetato en el interior del gránulo	$[grAc/m^3]$
$C_{AC,ag}$	Concentración de Acetato en la superficie del aglomerado	$[grAc/m^3]$
$C_{PO_4,gr}$	Concentración de Ortofosfato en el interior del gránulo	$[grPO_4/m^3]$
$C_{PO_4,ag}$	Concentración de Ortofosfato en la superficie del aglomerado	$[grPO_4/m^3]$
$C_{O_2,gr}$	Concentración de Oxígeno en el interior del gránulo	$[grO_2/m^3]$
$C_{O_2,ag}$	Concentración de Oxígeno en la superficie del aglomerado	$[grO_2/m^3]$
Tasas de consumo		
$r_{S,gr}$	Tasa de consumo de sustrato S en el interior del gránulo	$[grS/m^3/s]$
$r_{Ac,gr}$	Tasa de consumo de Acetato en el interior del gránulo	$[grAc/m^3/s]$
$r_{PO_4,gr}$	Tasa de consumo de Ortofosfato en el interior del gránulo	$[grPO_4/m^3/s]$
$r_{O_2,gr}$	Tasa de consumo de Oxígeno en el interior del gránulo	$[grO_2/m^3/s]$

Tabla B.3: Nomenclatura y Unidades para símbolos utilizados en Capítulo 6. B

Símbolo	Definición	Unidades
Trasferencia de masa externa		
$r_{S,ext}$	Tasa de transferencia en el exterior del aglomerado de sustrato S	$[grS/m^3/s]$
δ	Espesor de la capa límite de un aglomerado	[m]
$r_{Ac,ext}$	Tasa de transferencia en el exterior del aglomerado Acetato	$[grAc/m^3/s]$
$r_{PO_4,ext}$	Tasa de transferencia en el exterior del aglomerado Fosfato	$[grP/m^3/s]$
$r_{O_2,ext}$	Tasa de transferencia en el exterior del aglomerado de Oxígeno	$[grO_2/m^3/s]$
Transporte a través de la membrana		
$r_{S,mb}$	Tasa de transporte a través de la membrana de sustrato S	$[grS/m^3/s]$
$k_{S,mb}$	Tasa máxima de transferencia a través de la membrana de sustrato S	$[grS/m^3/s]$
$K_{S,mb}$	Coficiente de saturación media para transferencia de masa a través de la membrana de sustrato S	$[grS/m^3]$
$r_{Ac,mb}$	Tasa de transporte a través de la membrana de Acetato	$[grAc/m^3/s]$
$k_{Ac,mb}$	Tasa máxima de transferencia a través de la membrana de Acetato	$[grAc/m^3/s]$
$K_{Ac,mb}$	Coficiente de saturación media para transferencia de masa a través de la membrana de Acetato	$[grAc/m^3]$
$r_{PO_4,mb}$	Tasa de transporte a través de la membrana de Fosfato	$[grP/m^3/s]$
$k_{PO_4,mb}$	Tasa máxima de transferencia a través de la membrana de Fosfato	$[grP/m^3/s]$
$K_{PO_4,mb}$	Coficiente de saturación media para transferencia de masa a través de la membrana de Fosfato	$[grP/m^3]$
$r_{O_2,mb}$	Tasa de transporte a través de la membrana de Oxígeno	$[grO_2/m^3/s]$

Tabla B.4: Nomenclatura y Unidades para símbolos utilizados en Capítulo 6. C

Símbolo	Definición	Unidades
Cinética microbiana		
$r_{Ac}^{(AN)}$	Tasa de consumo anaeróbico de Acetato	$[grAc/m^3/s]$
$r_H^{(O_2)}$	Tasa de consumo aeróbico de Acetato	$[grAc/m^3/s]$
$q_{Ac,max}$	Tasa máxima de reacción para consumo de Acetato por PAOs	$[grAc/grPAO/d]$
$K_{Ac,P}$	Coficiente de saturación media para consumo de Acetato por PAOs	$[grAc/m^3]$
Y_H	Rendimiento para el crecimiento de heterótrofos	$[grH/grAc]$
$\mu_{H,max}$	Tasa específica de crecimiento para heterótrofos	$[1/d]$
$K_{Ac,H}$	Coficiente de saturación media para Acetato	$[grAc/m^3]$
$K_{O_2,H}$	Coficiente de saturación media para Oxígeno	$[grO_2/m^3]$
$r_{PP}^{(O_2)}$	Tasa de consumo aeróbico de Fosfato	$[grP/m^3/s]$
Y_{PO_4}	Rendimiento anaeróbico para la liberación de Fosfato	$[grP/grAc]$
k_{PP}	Tasa de formación de Poly-P	$[grP/grPAO/d]$
$K_{O_2,P}$	Coficiente de saturación media para Oxígeno	$[grO_2/m^3]$
$K_{PO_4,P}$	Coficiente de saturación media de Fosfato para la formación de Poly-P	$[grP/m^3]$
$r_{PP,gr}$	Tasa de conversión de Poly-P en el gránulo	$[grP/m^3/s]$
$r_{PHA,gr}$	Tasa de conversión de PHA en el gránulo	$[grPHA/m^3/s]$
$r_{PHA}^{(O_2)}$	Tasa de degradación aeróbica de PHA	$[grPHA/m^3/s]$
Y_{PHA}	Rendimiento anaeróbico para la formación de PHA	$[grPHA/grAc]$
k_{PHA}	Tasa de degradación de PHA	$[grPHA/grPAO/d]$
$K_{PHA,P}$	Coficiente de saturación media para PHA	$[grPHA/grPAO]$
r_{O_2}	Tasa de consumo de Oxígeno en el gránulo	$[grO_2/m^3/s]$
$r_{NH}^{(O_2)}$	Tasa de crecimiento aeróbico de organismos nitrificantes (NH)	$[grO_2/m^3/s]$
$r_{NO}^{(O_2)}$	Tasa de crecimiento aeróbico de organismos nitrificantes (NO)	$[grO_2/m^3/s]$
$r_{GLY}^{(O_2)}$	Tasa de formación aeróbica de glicógeno	$[grO_2/m^3/s]$
Y_{NH}	Rendimiento para crecimiento de oxidantes de amonio	$[grNH/grO_2]$
Y_{NO}	Rendimiento para crecimiento de oxidantes de nitrito	$[grNH/grO_2]$
Y_{PHAO}	Rendimiento aeróbico para la degradación de PHA	$[grPHA/grO_2]$
Y_{PPO}	Rendimiento aeróbico para la formación de Poly-P	$[grP/grO_2]$
Y_{GLYO}	Rendimiento aeróbico para la formación de glicógeno	$[grGLY/grO_2]$
$\mu_{NH,max}$	Tasa específica de crecimiento (NH)	$[1/d]$
$\mu_{NO,max}$	Tasa específica de crecimiento (NO)	$[1/d]$
k_{GLY}	Tasa de formación de glicógeno	$[grGLY/grPAO/d]$
$K_{O_2,NH}$	Coficiente de saturación media para oxígeno (XNH)	$[grO_2/m^3]$
$K_{O_2,NO}$	Coficiente de saturación media para oxígeno (XNO)	$[grO_2/m^3]$
$K_{O_2,P}$	Coficiente de saturación media para Oxígeno	$[grO_2/m^3]$

B.0.3. Modelo Reactor

Tabla B.5: Nomenclatura y Unidades para símbolos utilizados en Capítulo 7.

Símbolo	Definición	Unidades
ϕ	Flujo de entrada al reactor	$[m^2/s]$
m_g	Peso de un gránulo	[kg]
V_i	Volumen total ocupado por gránulos de clase i	$[m^3]$
H_i	Altura total ocupada por gránulos de clase i	[m]
v_i	Volumen de una celda de clase i	$[m^3]$
x_i	Arista de una celda de clase i	[m]
a_i	Área de una celda de clase i	$[m^2]$
c_i	Cantidad de celdas de clase i por monocapa	-
m_i	Cantidad de monocapas de celdas de tipo i	-
m_T	Total de monocapas ocupadas por gránulos	-
ϕ_i	Caudal de entrada a una celda de clase i	$[m^3/s]$
C_{out}	Concentración de salida de una celda	$[gr/m^3/s]$
C_{in}	Concentración de entrada de una celda	$[gr/m^3/s]$
Q_{in}	Caudal de entrada de una celda	$[m^3/s]$
Q_{out}	Caudal de salida de una celda	$[m^3/s]$
V_g	Volumen de un gránulo dentro de la celda	$[m^3]$
r_g	Tasa de generación o consumo dentro de la celda	$[gr/m^3/s]$
V_a	Volumen total de la celda	$[m^3]$

Anexo C

Modelo gránulo

A continuación se presentan los códigos utilizados para la generación de los resultados presentados en el Capítulo 6.

Código C.1:

```
1 alpha=0.851;
2
3 %% Tortuosidad
4 tauyX=tortuosidad_GRANULO(alpha);
5 r=tauyX(1,:);
6 dr=tauyX(2,:);
7 tau=tauyX(3,:);
8 n=tauyX(4,:);
9 n=n(length(n));
10
11 %% Difusión
12 M=Transporte_GRANULO(tau,n,dr);
13 D_AC_e=M(1,:);
14 D_PO4_e=M(2,:);
15 D_O2_e=M(3,:);
16
17 %% Concentración de biomasa
18
19 X_PAO=zeros(1,n);
20 X_H=zeros(1,n);
21 X_NH=zeros(1,n);
22 X_NO=zeros(1,n);
23 for i=1:n
24     X_PAO(i)=(((45724/r(1))*r(i))+5876)*(1e0);
25     X_NO(i)=0.01*X_PAO(i);
26 end
27 for i=1
28     X_H(i)=0.01*X_PAO(i);
29     X_NH(i)=0.01*X_PAO(i);
30 end
31
32 %% Mallado de tiempo
33 hr=3600;
```

```

34 t_anaerobico=hr;
35 t_aerobico=5*hr;
36 t_sedimentacion=0.5*hr;
37 t_ciclo=t_anaerobico+t_aerobico;
38
39 dt=0.4;
40 t=0:dt:t_ciclo;
41
42 %% Matrices solución
43
44 %%Concentración de sustratos y polímeros
45 C_AC_gr=zeros(n,length(t));
46 C_AC_ag=zeros(n,length(t));
47
48 C_PO4_gr=zeros(n,length(t));
49 C_PO4_ag=zeros(n,length(t));
50
51 C_O2_gr=zeros(n,length(t));
52
53 C_PP_gr=zeros(n,length(t));
54 C_PHA_gr=zeros(n,length(t));
55
56 %%Tasa de transferencia externa
57 r_AC_ext=zeros(n,length(t));
58 r_PO4_ext=zeros(n,length(t));
59
60 %%Transporte a través de la membrana
61 r_AC_mb=zeros(n,length(t));
62 r_PO4_mb=zeros(n,length(t));
63
64 %%Tasas globales de consumo
65 r_AC_gr=zeros(n,length(t));
66 r_PO4_gr=zeros(n,length(t));
67 r_O2_gr=zeros(n,length(t));
68 r_PP_gr=zeros(n,length(t));
69 r_PHA_gr=zeros(n,length(t));
70
71 %%Tasas específicas de consumo
72 r_AC_an=zeros(n,length(t));
73 r_H_O2=zeros(n,length(t));
74 r_PP_O2=zeros(n,length(t));
75 r_PHA_O2=zeros(n,length(t));
76 r_NH_O2=zeros(n,length(t));
77 r_NO_O2=zeros(n,length(t));
78 r_GLY_O2=zeros(n,length(t));
79
80 %%Matrices y vectores auxiliares
81 b=zeros(n,length(t));
82 B=zeros(n,length(t));
83 C=zeros(n,length(t));
84 a=M(5,:);
85 a_PO4=M(6,:);

```



```

86 c=P.k_AC_mb;
87 d=P.K_AC_mb;
88
89
90 %% Condiciones de borde
91
92 %Sustratos
93 CB=CB_GRANULO(hr,dt,t);
94 C_AC_gr(1,:)=CB(1,:);
95 C_PO4_gr(1,:)=CB(2,:);
96 C_O2_gr(1,:)=CB(3,:);
97
98 %Polímeros
99 C_PHA_gr(1,1)=0;
100 C_PP_gr(1,1)=0;
101
102 %Anaeróbica
103 for k=1:round(hr/dt)
104   r_AC_an(1,k)=(C_AC_gr(1,k)*P.q_s_max/(C_AC_gr(1,k)+P.K_Ac_P))*X_PAO(1);
105   r_PO4_gr(1,k)=P.Y_PO4*r_AC_an(1,k);
106   r_PHA_gr(1,k)=P.Y_PHA*r_AC_an(1,k);
107   r_PP_gr(1,k)=-P.Y_PO4*r_AC_an(1,k);
108
109   C_PHA_gr(1,k+1)=C_PHA_gr(1,k)+r_PHA_gr(1,k)*dt;
110   C_PP_gr(1,k+1)=C_PP_gr(1,k)+r_PP_gr(1,k)*dt;
111 end
112
113 K_O2=P.S_O2_in/(P.S_O2_in+P.K_O2_P);
114
115 %Aeróbica
116
117 for k=round(hr/dt)+1:length(t)-1
118   r_PP_O2(1,k)=P.k_PP*(C_PO4_gr(1,k)/(C_PO4_gr(1,k)+P.K_PO4_P))*K_O2*
      ↪ X_PAO(1);
119   r_PP_gr(1,k)=r_PP_O2(1,k);
120   C_PP_gr(1,k+1)=C_PP_gr(1,k)+r_PP_gr(1,k)*dt;
121
122   r_PHA_O2(1,k)=P.k_PHA*K_O2*(C_PHA_gr(1,k)/(C_PHA_gr(1,k)+(P.K_PHA_P*
      ↪ X_PAO(1))))*X_PAO(1);
123   r_PHA_gr(1,k)=-r_PHA_O2(1,k);
124   C_PHA_gr(1,k+1)=C_PHA_gr(1,k)+r_PHA_gr(1,k)*dt;
125 end
126
127
128 %% Iteración diferencias finitas
129
130 % Fase anaeróbica
131
132 for k=1:round(hr/dt)
133   for i=2:length(r)-1
134
135     %Tasas de consumo

```

```

136     %Acetato
137     b(i,k)=C_AC_gr(i,k);
138     B(i,k)=c/a(i)+d-b(i,k);
139     C(i,k)=-b(i,k)*d;
140     C_AC_ag(i,k)=0.5*(-B(i,k)+(B(i,k)^2-(4*C(i,k)))^(0.5));
141     r_AC_an(i,k)=(C_AC_ag(i,k)*P.q_s_max/(C_AC_ag(i,k)+P.K_Ac_P))*X_PAO(i)
↪ ;
142     r_AC_gr(i,k)=-r_AC_an(i,k);
143     %Fosfato
144     C_PO4_ag(i,k)=(a_PO4(i)*C_PO4_gr(i,k))/(a_PO4(i)+P.k_PO4_mb);
145     r_PO4_gr(i,k)=P.Y_PO4*r_AC_an(i,k);
146     %Polímeros
147     r_PHA_gr(i,k)=P.Y_PHA*r_AC_an(i,k);
148     r_PP_gr(i,k)=-P.Y_PO4*r_AC_an(i,k);
149
150
151
152     %EDP
153     C_AC_gr(i,k+1)=C_AC_gr(i,k)+D_AC_e(i)*(dt/(dr(i)^2))*(C_AC_gr(i+1,k)-2*
↪ C_AC_gr(i,k)+C_AC_gr(i-1,k))+r_AC_gr(i,k)*dt;
154     C_PO4_gr(i,k+1)=C_PO4_gr(i,k)+D_PO4_e(i)*(dt/(dr(i)^2))*(C_PO4_gr(i+1,k)
↪ -2*C_PO4_gr(i,k)+C_PO4_gr(i-1,k))+r_PO4_gr(i,k)*dt;
155     C_PHA_gr(i,k+1)=C_PHA_gr(i,k)+r_PHA_gr(i,k)*dt;
156     C_PP_gr(i,k+1)=C_PP_gr(i,k)+r_PP_gr(i,k)*dt;
157
158     %Condicional para tener concentraciones positivas
159     if C_AC_gr(i,k+1)<0
160         C_AC_gr(i,k+1)=0;
161     end
162 end
163 end
164
165 %Fase aerobica
166 for k=round(hr/dt)+1:length(t)-1
167     for i=2:length(r)-1
168
169         %Tasas de consumo
170         %Acetato
171         b(i,k)=C_AC_gr(i,k);
172         B(i,k)=c/a(i)+d-b(i,k);
173         C(i,k)=-b(i,k)*d;
174         C_AC_ag(i,k)=0.5*(-B(i,k)+(B(i,k)^2-(4*C(i,k)))^(0.5));
175         r_H_O2(i,k)=P.mu_H_max*(C_AC_ag(i,k)/(C_AC_ag(i,k)+P.K_AC_H))*(C_O2_gr
↪ (i,k)/(C_O2_gr(i,k)+P.K_O2_H))*X_H(i);
176
177         %Fosfato
178         C_PO4_ag(i,k)=(a_PO4(i)*C_PO4_gr(i,k))/(a_PO4(i)+P.k_PO4_mb);
179         r_PP_O2(i,k)=P.k_PP*(C_PO4_ag(i,k)/(C_PO4_ag(i,k)+P.K_PO4_P))*(C_O2_gr(i
↪ ,k)/(C_O2_gr(i,k)+P.K_O2_P))*X_PAO(i);
180         r_PO4_gr(i,k)=-r_PP_O2(i,k);
181
182         %Polímeros

```

```

183 r_PP_gr(i,k)=r_PP_O2(i,k);
184 r_PHA_O2(i,k)=P.k_PHA*K_O2*(C_PHA_gr(i,k)/(C_PHA_gr(i,k)+(P.K_PHA_P*
    ↪ X_PAO(i))))*X_PAO(i);
185 r_PHA_gr(i,k)=-r_PHA_O2(i,k);
186
187 %Oxígeno
188 r_NH_O2(i,k)=P.mu_NH_max*(C_O2_gr(i,k)/(C_O2_gr(i,k)+P.K_O2_NH))*
    ↪ X_NH(i);
189 r_NO_O2(i,k)=P.mu_NO_max*(C_O2_gr(i,k)/(C_O2_gr(i,k)+P.K_O2_NO))*
    ↪ X_NO(i);
190 r_GLY_O2(i,k)=P.k_GLY*(C_O2_gr(i,k)/(C_O2_gr(i,k)+P.K_O2_P))*X_PAO(i);
191
192 r_O2_gr(i,k)=((1-P.Y_NH)*r_NH_O2(i,k))+((1-P.Y_NO)*r_NO_O2(i,k))+((1-P.
    ↪ Y_GLYO)*r_GLY_O2(i,k))+((1-P.Y_H)*r_H_O2(i,k))+((P.Y_PHAO-1)*
    ↪ r_PHA_O2(i,k))-(P.Y_PPO*r_PP_O2(i,k));
193
194
195
196
197 %EDP
198 C_AC_gr(i,k+1)=C_AC_gr(i,k)+D_AC_e(i)*(dt/(dr(i)^2))*(C_AC_gr(i+1,k)-2*
    ↪ C_AC_gr(i,k)+C_AC_gr(i-1,k))+r_AC_gr(i,k)*dt;
199 C_PO4_gr(i,k+1)=C_PO4_gr(i,k)+D_PO4_e(i)*(dt/(dr(i)^2))*(C_PO4_gr(i+1,k)-2*
    ↪ C_PO4_gr(i,k)+C_PO4_gr(i-1,k))+r_PO4_gr(i,k)*dt;
200 C_O2_gr(i,k+1)=C_O2_gr(i,k)+D_O2_e(i)*(dt/(dr(i)^2))*(C_O2_gr(i+1,k)-2*
    ↪ C_O2_gr(i,k)+C_O2_gr(i-1,k))+r_O2_gr(i,k)*dt;
201 C_PP_gr(i,k+1)=C_PP_gr(i,k)+r_PP_gr(i,k)*dt;
202 C_PHA_gr(i,k+1)=C_PHA_gr(i,k)+r_PHA_gr(i,k)*dt;
203
204
205 %Condicional para tener concentraciones positivas
206 if C_AC_gr(i,k+1)<0
207     C_AC_gr(i,k+1)=0;
208 end
209 if C_PO4_gr(i,k+1)<0
210     C_PO4_gr(i,k+1)=0;
211 end
212 if C_O2_gr(i,k+1)<0
213     C_O2_gr(i,k+1)=0;
214 end
215
216 end
217 end

```

Código C.2:

```

1 global P
2
3 %Tiempos y concentraciones extraidas de Xavier2007
4 t_0=0; %[s]
5 t_AC=359.48; %[s]
6 t_tot=hr; %[s]

```

```

7 t_fp=6058.54; %[s]
8 t_fin=6*hr; %[s]
9 feed_0=7.5*60; %[s]
10
11 AC_0=P.S_AC_in;
12 AC_f=0;
13 PO4_0=P.S_PO4_in;
14 PO4_tot=152.12;
15 PO4_fp=0;
16
17 %Pendientes de consumo
18 m_AC=(AC_f-AC_0)/(t_AC-t_0);
19 m1_PO4=-P.Y_PO4*m_AC;
20 m2_PO4=(PO4_fp-PO4_tot)/(t_fp-t_tot);
21
22 %Tiempos de alimentación
23 t_f1_0=0;
24 t_f2_0=hr*0.25; %15 minutos
25 t_f3_0=hr*0.5; %30 minutos
26 t_f4_0=hr*0.75; %45 minutos
27
28 t_AC1_0=feed_0+t_AC;
29 t_AC2_0=feed_0+t_AC+t_f2_0;
30 t_AC3_0=feed_0+t_AC+t_f3_0;
31 t_AC4_0=feed_0+t_AC+t_f4_0;
32
33 feed_1=feed_0;
34 feed_2=t_f2_0+feed_0;
35 feed_3=t_f3_0+feed_0;
36 feed_4=t_f4_0+feed_0;
37
38
39
40 %Tiempos normalizados por dt
41 t_f1=round(t_f1_0/dt);
42 t_f2=round(t_f2_0/dt);
43 t_f3=round(t_f3_0/dt);
44 t_f4=round(t_f4_0/dt);
45
46 t_AC1=round(t_AC1_0/dt);
47 t_AC2=round(t_AC2_0/dt);
48 t_AC3=round(t_AC3_0/dt);
49 t_AC4=round(t_AC4_0/dt);
50
51 feed1=round(feed_1/dt);
52 feed2=round(feed_2/dt);
53 feed3=round(feed_3/dt);
54 feed4=round(feed_4/dt);
55
56
57 tp=[1 feed1 t_AC1 t_f2 feed2 t_AC2 t_f3 feed3 t_AC3 t_f4 feed4 t_AC4 hr/dt];
58

```

```

59 %Fase anaeróbica
60
61 %Alimentación 1
62 for k=tp(1):tp(2)
63     C_AC_gr(1,k)=P.S_AC_in;
64     C_PO4_gr(1,k)=P.S_PO4_in;
65 end
66
67
68 for k=tp(2)+1:tp(3)
69     C_AC_gr(1,k)=P.S_AC_in+m_AC*t(k-tp(2));
70     C_PO4_gr(1,k)=P.S_PO4_in+m1_PO4*t(k-tp(2));
71 end
72
73 for k=tp(3)+1:tp(4)
74     C_PO4_gr(1,k)=C_PO4_gr(1,tp(3));
75 end
76
77 %Alimentación 2
78 for k=tp(4)+1:tp(5)
79     C_AC_gr(1,k)=P.S_AC_in;
80     C_PO4_gr(1,k)=P.S_PO4_in+C_PO4_gr(1,tp(4));
81 end
82
83 for k=tp(5)+1:tp(6)
84     C_AC_gr(1,k)=P.S_AC_in+m_AC*t(k-tp(5));
85     C_PO4_gr(1,k)=C_PO4_gr(1,tp(5))+m1_PO4*t(k-tp(5));
86
87 end
88
89 for k=tp(6)+1:tp(7)
90     C_PO4_gr(1,k)=C_PO4_gr(1,tp(6));
91 end
92 %Alimentación 3
93 for k=tp(7)+1:tp(8)
94     C_AC_gr(1,k)=P.S_AC_in;
95     C_PO4_gr(1,k)=P.S_PO4_in+C_PO4_gr(1,tp(6));
96 end
97
98 for k=tp(8)+1:tp(9)
99     C_AC_gr(1,k)=P.S_AC_in+m_AC*t(k-tp(8));
100     C_PO4_gr(1,k)=C_PO4_gr(1,tp(8))+m1_PO4*t(k-tp(8));
101 end
102
103 for k=tp(9)+1:tp(10)
104     C_PO4_gr(1,k)=C_PO4_gr(1,tp(9));
105 end
106
107 %Alimentación 4
108 for k=tp(10)+1:tp(11)
109     C_AC_gr(1,k)=P.S_AC_in;
110     C_PO4_gr(1,k)=P.S_PO4_in+C_PO4_gr(1,tp(10));

```

```

111 end
112
113 for k=tp(11)+1:tp(12)
114     C_AC_gr(1,k)=P.S_AC_in+m_AC*t(k-tp(11));
115     C_PO4_gr(1,k)=C_PO4_gr(1,tp(11))+m1_PO4*t(k-tp(11));
116 end
117 for k=tp(12)+1:tp(13)
118     C_PO4_gr(1,k)=C_PO4_gr(1,tp(12));
119 end
120
121
122 for k=1:round(hr/dt)
123     C_O2_gr(1,k)=0;
124 end
125
126
127 %Fase aerobica
128
129 for k=round(hr/dt)+1:round(t_fin/dt)+1
130     C_O2_gr(1,k)=P.S_O2_in;
131     C_AC_gr(1,k)=0;
132     C_PO4_gr(1,k)=C_PO4_gr(1,t_AC4)+m2_PO4*t(k-hr/dt);
133     if C_PO4_gr(1,k)>0 %Condición para Concentración mayor o igual a 0
134         C_PO4_gr(1,k)=C_PO4_gr(1,k);
135     else
136         C_PO4_gr(1,k)=0;
137     end
138 end
139 CB=[C_AC_gr(1,:); C_PO4_gr(1,:);C_O2_gr(1,:)];
140
141 end

```

Código C.3:

```

1
2     global P
3
4     beta=1-P.dR_max;
5
6
7     n1=1-alpha;
8     n2=n1/P.dR_max;
9     n3=1-n2;
10    n4=log(n3);
11    n5=log(alpha);
12
13    if alpha<=beta
14        %disp('alpha debe ser mayor que beta')
15        n0=50;
16    else
17        n0=floor(n4/n5); %redondea hacia abajo
18    end

```

```

19     n=1:1:n0; %vector para contar el numero de capas
20
21     d=zeros(1,length(n)); %diametro de los clusters
22     r=zeros(1,length(n)); % radio de los clusters
23     dx=zeros(1,length(n)); % mallado en x
24     R=zeros(1,length(n)); % Vector de radio de cada capa
25     R_avg=zeros(1,length(n)); %Vector de radios promedio de ada capa
26     v=zeros(1,length(n)); %volumen de cada cluster
27     A=zeros(1,length(n)); % Area de la esfera grande de cada capa
28     a=zeros(1,length(n)); % área de los clusters cortados a la mitad
29     N=zeros(1,length(n)); %cantidad de clusers por capa
30     VT=zeros(1,length(n)); %volumen total por capa
31     Vc=zeros(1,length(n)); % volumen de capas completas (esfera)
32     Nv=zeros(1,length(n)); %volumen total ocupado por clusters
33     fV=zeros(1,length(n)); %volumen libre por capa
34     inv_fV=zeros(1,length(n)); % inversa volumen libre
35     tau=zeros(1,length(n)); %coeficiente de tortuosidad
36
37
38     for i=1:length(n)
39         d(i)=P.d_max*alpha^(i-1);
40         r(i)=d(i)/2;
41     end
42
43     R(1)=P.R_max;
44     for i=2:length(n)
45         R(i)= R(i-1)-d(i-1);
46     end
47
48     for i=1:length(n)
49         x(i)=R(i);
50         dx(i)=d(i);
51     end
52
53
54     Rn1=R(length(n))-d(length(n));
55     for i=1:length(n)-1
56         R_avg(i)= (R(i)+R(i+1))/2;
57     end
58     R_avg(length(n))=(R(length(n))+Rn1)/2;
59
60     rho=0.9069;
61     for i=1:length(n)
62         v(i)=(4*pi/3)*((d(i)/2)^3);
63         A_cluster(i)=(4*pi)*((d(i)/2)^2);
64         A(i)=(4*pi)*(R_avg(i)^2);
65         a(i)=pi*((d(i)/2)^2);
66         N_0(i)=A(i)/a(i);
67         N(i)=N_0(i)*rho;
68         VT(i)=(4*pi/3)*(R(i)^3);
69         Area_total_capa(i)=N(i)*A_cluster(i);
70

```

```

71     end
72
73     for i=1:length(n)-1
74         Vc(i)=VT(i)-VT(i+1);
75     end
76     Vc(length(n))=VT(length(n));
77
78
79     for i=1:length(n)
80         Nv(i)=N(i)*v(i);
81         fV(i)=Vc(i)-Nv(i);
82         inv_fV(i)=1/fV(i);
83         tau(i)=inv_fV(i)*1e-8;
84     end
85
86     tauyX=[x; dx; tau;n];

```

Código C.4:

```

1  global P
2
3  %Vector de difusión dependiente del coeficiente de tortuosidad
4
5  D_AC_e=zeros(1,n);
6  D_PO4_e=zeros(1,n);
7  D_O2_e=zeros(1,n);
8
9  for i=1:n
10     D_AC_e(i)=P.D_AC_0/tau(i);
11     D_PO4_e(i)=P.D_PO4_0/tau(i);
12     D_O2_e(i)=P.D_O2_0/tau(i);
13 end
14
15 Delta=zeros(1,n);
16 for i=1:n
17     Delta(i)=dr(i)*0.1;
18 end
19
20 a=zeros(1,n);
21 a_PO4=zeros(1,n);
22 for i=1:n
23     a(i)=D_AC_e(i)/(Delta(i)^2);
24     a_PO4(i)=D_PO4_e(i)/(Delta(i)^2);
25 end
26
27 M=[D_AC_e;D_PO4_e;D_O2_e;Delta; a; a_PO4];
28
29 end

```


Anexo D

Modelo reactor

A continuación se presentan los códigos utilizados para la generación de los resultados presentados en el Capítulo 7.

Código D.1:

```
1
2
3 %% Uso de indices
4
5 % j: clase de gránulo. Se mueve entre 1 y length(d)
6 % i: radio del gránulo. Se mueve entre 1 y length(n)
7 % k: tiempo de residencia. Se mueve entre 1 y t
8 % p: posicion en las celdas. Se mueve entre 1 y m_T (suma total de celdas)
9 % f: tiempo global. Se mueve entre 1 y length(T)
10
11 %% Dimensiones globales del reactor
12
13 h=7.5; %altura [m] [Pronk2015]
14 V=9600 ;% volumen [m3] [Pronk2015]
15 A=V/h; %area
16
17
18 Q_T=14300; %[m3/dia] volumen total tratado en 1 dia
19 c=4; %cantidad de ciclos al dia
20 Q_c=Q_T/c; % 3573 [m3/ciclo]
21 f_c=4; %cantidad de alimentaciones en 1 ciclo
22 Q_fc=Q_c/f_c; %893,75 [m3/alimentación]
23 t_fc=5*60; %[min] duración de cada alimentación
24 t_al=15*60;
25 t_no=t_al-t_fc;
26
27 hr=3600;
28 t_anaerobico=hr;
29 t_aerobico=5*hr;
30 t_sedimentacion=0.5*hr;
31 t_ciclo=t_anaerobico+t_aerobico;
32
33
```

```

34 phi = (Q_fc/t_fc); %flujo 2 [m3/s]
35 Vz = phi/A; %0.0016 m/s
36
37 % Constantes para los lodos
38 IVL=0.045; %[m3/kg]
39 rho=1035; %[kg/m3]
40
41 % Vector de tiempo
42 dt=0.3;
43 t=0:dt:hr;
44
45 % División de flujo que entra a cada celda
46
47 cel=celdas_REACTOR(IVL,V,A, rho);
48
49 d=cel(1,:); % Diametro para cada clase de gránulo [m]
50 n=cel(5,:); % Cantidad de gránulos para cada clase
51 c=cel(11,:); % Cantidad de celdas de cada clase por monocapa
52 m=cel(12,:); % Cantidad de monocapas de cada clase de celda
53 m_T=sum(m); % Cantidad total del monocapas (694)
54 x=cel(9,:); % Tamaño de la arista de la celda de cada clase
55 H_lodo_0=x(1)*m(1)+x(2)*m(2)+x(3)*m(3)+x(4)*m(4)+x(5)*m(5)+x(6)*m(6);
56
57
58 %Celdas sin granulos
59 x7=0.1;
60 c7=A/x7^2;
61 m7=round((h-H_lodo_0)/x7);
62 Q7=phi/c7;
63 V7=x7^3;
64
65 M0=1:1:m_T+m7;
66 M=[m(1); m(1)+m(2); m(1)+m(2)+m(3); m(1)+m(2)+m(3)+m(4); m(1)+m(2)+m(3)+m(4)
    ↪ +m(5); m(1)+m(2)+m(3)+m(4)+m(5)+m(6); m(1)+m(2)+m(3)+m(4)+m(5)+m(6)
    ↪ +m7];
67 H_lodo=zeros(1,m_T+1);
68
69 for i=2:M(1)
70     H_lodo(i)=H_lodo(i-1)+x(1);
71 end
72 for i=M(1)+1:M(2)
73     H_lodo(i)=H_lodo(i-1)+x(2);
74 end
75 for i=M(2)+1:M(3)
76     H_lodo(i)=H_lodo(i-1)+x(3);
77 end
78 for i=M(3)+1:M(4)
79     H_lodo(i)=H_lodo(i-1)+x(4);
80 end
81 for i=M(4)+1:M(5)
82     H_lodo(i)=H_lodo(i-1)+x(5);
83 end

```

```

84 for i=M(5)+1:M(6)
85     H_lodo(i)=H_lodo(i-1)+x(6);
86 end
87
88 H=zeros(1,m_T+m7);
89 for p=1:M(6)
90     H(p)=H_lodo(p);
91 end
92 for p=M(6)+1:M(7)
93     H(p)=H(p-1)+x7;
94 end
95
96 %Caudal que entra a cada celda de la monocapa
97 phi_i=zeros(1,length(d));
98 for j=1:length(d)
99     phi_i(j)=phi/c(j);
100 end
101
102
103 Vg=zeros(1,m_T);
104 Va=zeros(1,m_T);
105 Q=zeros(1,m_T);
106
107
108 for p=1:M(1)
109     Q(p)=phi_i(1);
110     Vg(p)=((d(1)/2)^3)*4*pi/3;
111     Va(p)=x(1)^3-Vg(p);
112 end
113
114 for j=2:length(d)
115     for p=M(j-1)+1:M(j)
116         Q(p)=phi_i(j);
117         Vg(p)=((d(j)/2)^3)*4*pi/3;
118         Va(p)=x(j)^3-Vg(p);
119     end
120 end
121
122 %Alimentación por pulsos
123
124 Qsi=ones(1,round(t_fc/dt));
125 Qno=zeros(1,round(t_no/dt));
126 Qsi_no=[Qsi Qno Qsi Qno Qsi Qno Qsi Qno 0];
127 %Qsi_no=[Qsi Qno 0];
128
129
130
131 %% Modelo gránulo
132
133 alpha =0.851;
134 tauyX=tortuosidad_REACTOR(alpha,M,m_T,d);
135 n_g=tauyX(1,:); %Numero de capas en 1 granulo.

```

```

136
137 r=zeros(m_T,length(n_g));
138 for p=1:m_T
139     r(p,:)=tauyX(p+1,:);
140 end
141 dr=zeros(m_T,length(n_g));
142 for p=m_T+1:2*m_T
143     dr(p-m_T,:)=tauyX(p+1,:);
144 end
145 tau=zeros(m_T,length(n_g));
146 for p=(2*m_T)+1:3*m_T
147     tau(p-2*m_T,:)=tauyX(p+1,:);
148 end
149
150 Trans=Transporte_REACTOR(tau,n_g,m_T);
151
152 D_AC_e=zeros(m_T,length(n_g));
153 D_PO4_e=zeros(m_T,length(n_g));
154 D_O2_e=zeros(m_T,length(n_g));
155
156 for p=1:m_T
157     D_AC_e(p,:)=Trans(p,:);
158 end
159 for p=m_T+1:2*m_T
160     D_PO4_e(p-m_T,:)=Trans(p,:);
161 end
162 for p=(2*m_T)+1:3*m_T
163     D_O2_e(p-2*m_T,:)=Trans(p,:);
164 end
165
166 %Concentración de Biomasa dependiente del radio del gránulo.
167 X_PAO=zeros(m_T,length(n_g));
168 X_H=zeros(m_T,length(n_g));
169 X_NH=zeros(m_T,length(n_g));
170 X_NO=zeros(m_T,length(n_g));
171
172 for p=1:m_T
173     X_PAO(p,1)=0;
174     for i=2:length(n_g)
175         X_PAO(p,i)=(((45724/r(p,2))*r(p,i))+5876)*(1e-1);
176         X_H(p,i)=0.01*X_PAO(p,i);
177     end
178     for i=2
179         X_NH(p,i)=0.01*X_PAO(p,i);
180         X_NO(p,i)=0.01*X_PAO(p,i);
181     end
182 end
183
184
185 %% Matrices solución
186
187 %Concentración de sustratos en reactor y tasas de consumo

```

```

188 %Acetato
189 C_AC_in=zeros(m_T+m7,length(t));
190 C_AC_out=zeros(m_T+m7,length(t));
191 r_AC=zeros(m_T,length(t));
192 %Fosfato
193 C_PO4_in=zeros(m_T+m7,length(t));
194 C_PO4_out=zeros(m_T+m7,length(t));
195 r_PO4=zeros(m_T,length(t));
196 %Concentración de sustratos en el gránulo
197 C_AC_gr=zeros(m_T,length(t),length(n_g));
198 C_PO4_gr=zeros(m_T,length(t),length(n_g));
199 %Tasas globales de consumo
200 r_AC_gr=zeros(m_T,length(t),length(n_g));
201 r_PO4_gr=zeros(m_T,length(t),length(n_g));
202 %Difusión
203 rD_AC=zeros(m_T,length(t),length(n_g));
204 rD_PO4=zeros(m_T,length(t),length(n_g));
205 %Tasas específicas de consumo dentro del gránulo
206 r_AC_an=zeros(m_T,length(t),length(n_g));
207
208
209 %% Condiciones de borde
210
211 for k=1:length(t)
212     C_AC_in(1,k)=P.S_AC_in;
213     C_PO4_in(1,k)=P.S_PO4_in;
214
215 end
216
217 %% Iteración diferencias finitas
218
219 fin=zeros(1,length(t)); %contador
220
221 for k=1:length(t)-1
222
223     for p=1:m_T
224
225         C_AC_in(p+1,k)=C_AC_out(p,k);
226         C_AC_gr(p,k,1)=C_AC_out(p,k);
227         C_AC_gr(p,k,2)=C_AC_out(p,k);
228
229         C_PO4_in(p+1,k)=C_PO4_out(p,k);
230         C_PO4_gr(p,k,1)=C_PO4_out(p,k);
231         C_PO4_gr(p,k,2)=C_PO4_out(p,k);
232
233         for i=2:length(n_g)-1
234             %Acetato
235             r_AC_an(p,k,i)=-P.q_s_max*X_PAO(p,i)*C_AC_gr(p,k,i)/(P.K_Ac_P +
↪ C_AC_gr(p,k,i));
236             r_AC_gr(p,k,i)=r_AC_an(p,k,i);
237             rD_AC(p,k,i)=D_AC_e(p,i)*(1/(dr(p,i)^2))*(C_AC_gr(p,k,i+1)-2*C_AC_gr(p,k,i
↪ )+C_AC_gr(p,k,i-1));

```

```

238
239     C_AC_gr(p,k+1,i)=C_AC_gr(p,k,i)+rD_AC(p,k,i)*dt+r_AC_gr(p,k,i)*dt;
240     C_AC_gr(p,k+1,1)=C_AC_gr(p,k+1,2);
241
242
243
244     %Fosfato
245     r_PO4_gr(p,k,i)=-P.Y_PO4*r_AC_an(p,k,i);
246     rD_PO4(p,k,i)=D_PO4_e(p,i)*(1/(dr(p,i)^2))*(C_PO4_gr(p,k,i+1)-2*C_PO4_gr
↪ (p,k,i)+C_PO4_gr(p,k,i-1));
247
248     C_PO4_gr(p,k+1,i)=C_PO4_gr(p,k,i)+rD_PO4(p,k,i)*dt+r_PO4_gr(p,k,i)*dt;
249     C_PO4_gr(p,k+1,1)=C_PO4_gr(p,k+1,2);
250
251
252     if C_AC_gr(p,k+1,i)<0
253         C_AC_gr(p,k+1,i)=0;
254     end
255     if C_PO4_gr(p,k+1,i)<0
256         C_PO4_gr(p,k+1,i)=0;
257     end
258 end
259
260     C_AC_out(p,k+1)=C_AC_out(p,k)+dt*Q(p)*Qsi_no(k)/Va(p)*(C_AC_in(p,k)-
↪ C_AC_out(p,k))-Vg(p)/Va(p)*r_AC(p,k);
261     r_AC(p,k+1)=C_AC_gr(p,k,1)-C_AC_gr(p,k+1,1);
262
263     C_PO4_out(p,k+1)=C_PO4_out(p,k)+dt*Q(p)*Qsi_no(k)/Va(p)*(C_PO4_in(p,k)-
↪ C_PO4_out(p,k))-Vg(p)/Va(p)*r_PO4(p,k);
264     r_PO4(p,k+1)=C_PO4_gr(p,k,1)-C_PO4_gr(p,k+1,1);
265
266
267 end
268
269 for p=m_T+1:m_T+m7-1
270
271     C_AC_in(m_T+1,k)=C_AC_out(m_T,k);
272     C_AC_out(p,k+1)=C_AC_out(p,k)+dt*Q7*Qsi_no(k)/V7*(C_AC_in(p,k)-
↪ C_AC_out(p,k));
273     C_AC_in(p+1,k)=C_AC_out(p,k);
274
275
276     C_PO4_in(m_T+1,k)=C_PO4_out(m_T,k);
277     C_PO4_out(p,k+1)=C_PO4_out(p,k)+dt*Q7*Qsi_no(k)/V7*(C_PO4_in(p,k)-
↪ C_PO4_out(p,k));
278     C_PO4_in(p+1,k)=C_PO4_out(p,k);
279
280
281 end
282
283 end

```

Código D.2:

```

1 global P
2
3 d0=[3000 1700 1200 815 527 318]; %[mu m] diametros caracteristicos de la clase de granulo
4 C=[1.22 1.39 1.03 0.63 0.28 0.82]; %[kg/m3] concentración de la clase de granulo
5
6 d=zeros(1,length(d0));
7 M_T=zeros(1,length(d0));
8 m_1g=zeros(1,length(d0));
9 n=zeros(1,length(d0));
10 Vi=zeros(1,length(d0));
11 Hi=zeros(1,length(d0));
12 v=zeros(1,length(d0));
13 x=zeros(1,length(d0));
14 a=zeros(1,length(d0));
15 c=zeros(1,length(d0));
16 m0=zeros(1,length(d0));
17 m=zeros(1,length(d0));
18
19 for i=1:length(d0)
20     d(i)=d0(i)*1e-6; %[m] conversion de unidades a metros
21     M_T(i)=C(i)*V; %[kg] masa total de granulos de la clase
22     m_1g(i)=pi*rho*(d(i)^3)/6; %[kg] masa de 1 granulo de clase i
23     n(i)=M_T(i)/m_1g(i); % [] cantidad de granulos de clase i
24     Vi(i)=M_T(i)*IVL; %[m3] volumen ocupado por la totalidad de granulos de clase i
25     Hi(i)=Vi(i)/A; %[m] altura ocupada por granulos de clase i
26     v(i)=Vi(i)/n(i); %[m3] volumen ocupado por un solo granulo de clase i
27     x(i)=v(i)^(1/3); %[m] tamaño de la arista de la celda que contiene al granulo de clase i,
    ↪ de volumen vi
28     a(i)=x(i)^2; %[m2] área de la arista de la celda que contiene al granulo de clase i
29     c(i)=A/a(i); % [] cantidad de celdas de tipo i por monocapa
30     m0(i)=n(i)/c(i); %[] cantidad de monocapas de celdas de tipo i
31     m(i)=round(m0(i)); % redondeamos m al entero mas cercano.
32 end
33
34
35 cel=[d; C; M_T; m_1g; n; Vi; Hi; v; x; a; c; m];

```

Código D.3:

```

1
2
3 global P
4
5 R_max=[0.0015 0.00085 0.000600 0.000408 0.000264 0.000159];
6 d_max=zeros(1,length(R_max));
7 for k=1:length(R_max)
8     d_max(k)=R_max(k)*P.dR_max;
9 end
10 beta=1-P.dR_max;
11

```

```

12
13     n1=1-alpha;
14     n2=n1/P.dR_max;
15     n3=1-n2;
16     n4=log(n3);
17     n5=log(alpha);
18
19     if alpha<=beta
20         n0=50;
21     else
22         n0=floor(n4/n5); %redondea hacia abajo
23     end
24     n=1:1:n0; %vector para contar el numero de capas
25
26     dc=zeros(length(R_max),length(n)); %diametro de los clusters
27     rd=zeros(length(R_max),length(n)); % radio de los clusters
28     x=zeros(length(R_max),length(n)); %vector de posición en el radio
29     dx=zeros(length(R_max),length(n)); % mallado en x
30     R=zeros(length(R_max),length(n)); % Vector de radio de cada capa
31     R_avg=zeros(length(R_max),length(n)); %Vector de radios promedio de ada capa
32     v=zeros(length(R_max),length(n)); %volumen de cada cluster
33     A=zeros(length(R_max),length(n)); % Area de la esfera grande de cada capa
34     a=zeros(length(R_max),length(n)); % área de los clusters cortados a la mitad
35     N_0=zeros(length(R_max),length(n)); %cantidad de clusers por capa
36     N=zeros(length(R_max),length(n)); %cantidad de clusers por capa
37     VT=zeros(length(R_max),length(n)); %volumen total por capa
38     Vc=zeros(length(R_max),length(n)); % volumen de capas completas (esfera)
39     Nv=zeros(length(R_max),length(n)); %volumen total ocupado por clusters
40     fV=zeros(length(R_max),length(n)); %volumen libre por capa
41     inv_fV=zeros(length(R_max),length(n)); % inversa volumen libre
42     Tau=zeros(length(R_max),length(n)); %coeficiente de tortuosidad
43     A_cluster=zeros(length(R_max),length(n));
44     Area_total_capa=zeros(length(R),length(n));
45
46     for k=1:length(R_max)
47         for i=1:length(n)
48             dc(k,i)= d_max(k)*alpha^(i-1);
49             rd(k,i)=dc(k,i)/2;
50         end
51
52         R(k,1)=R_max(k);
53         for i=2:length(n)
54             R(k,i)= R(k,i-1)-dc(k,i-1);
55         end
56
57         for i=1:length(n)
58             x(k,i)=R(k,i);
59             dx(k,i)=dc(k,i);
60         end
61
62
63     Rn1(k)=R(k,length(n))-dc(length(n));

```



```

64     for i=1:length(n)-1
65         R_avg(k,i)= (R(k,i)+R(k,i+1))/2;
66     end
67     R_avg(k,length(n))=(R(k,length(n))+Rn1(k))/2;
68
69     rho=0.9069;
70     for i=1:length(n)
71         v(k,i)=(4*pi/3)*((dc(k,i)/2)^3);
72         A_cluster(k,i)=(4*pi)*((dc(k,i)/2)^2);
73         A(k,i)=(4*pi)*(R_avg(k,i)^2);
74         a(k,i)=pi*((dc(k,i)/2)^2);
75         N_0(k,i)=A(k,i)/a(k,i);
76         N(k,i)=rho*N_0(k,i);
77         VT(k,i)=(4*pi/3)*(R(k,i)^3);
78         Area_total_capa(k,i)=N(k,i)*A_cluster(k,i);
79
80     end
81
82     for i=1:length(n)-1
83         Vc(k,i)=VT(k,i)-VT(k,i+1);
84     end
85     Vc(k,length(n))=VT(k,length(n));
86
87
88     for i=1:length(n)
89         Nv(k,i)=N(k,i)*v(k,i);
90         fV(k,i)=Vc(k,i)-Nv(k,i);
91         inv_fV(k,i)=1/fV(k,i);
92         Tau(k,i)=inv_fV(k,i)*1e-8;
93     end
94
95     end
96
97     x0=zeros(m_T,length(n));
98     dx0=zeros(m_T,length(n));
99     tau0=zeros(m_T,length(n));
100
101     for p=1:M(1)
102         x0(p,:)=x(1,:);
103         dx0(p,:)=dx(1,:);
104         tau0(p,:)=Tau(1,:);
105     end
106
107     for j=2:length(d)
108         for p=M(j-1)+1:M(j)
109             x0(p,:)=x(j,:);
110             dx0(p,:)=dx(j,:);
111             tau0(p,:)=Tau(j,:);
112         end
113     end
114
115     r=zeros(m_T,length(n)+1);

```

```

116 dr=zeros(m_T,length(n)+1);
117 tau=zeros(m_T,length(n)+1);
118
119
120 for p=1:m_T
121     r(p,:)= [x0(p,1)+1e-5 x0(p,:)];
122     dr(p,:) = [-1e-05 -dx0(p,:)];
123     tau(p,:) = [1 tau0(p,:)];
124 end
125 n=[n length(n)+1];
126
127 tauyX=[n;r; dr; tau];

```

Código D.4:

```

1 global P
2
3
4 D_AC_e=zeros(m_T,length(n_g));
5 D_PO4_e=zeros(m_T,length(n_g));
6 D_O2_e=zeros(m_T,length(n_g));
7
8 for p=1:m_T
9     for i=1:length(n_g)
10        D_AC_e(p,i)=P.D_AC_0/tau(p,i);
11        D_PO4_e(p,i)=P.D_PO4_0/tau(p,i);
12        D_O2_e(p,i)=P.D_O2_0/tau(p,i);
13    end
14 end
15
16
17 M=[D_AC_e;D_PO4_e;D_O2_e ];
18
19 end

```

Anexo E

Parámetros

A continuación se entregan todos los parámetros utilizados para la generación de los modelos presentados previamente.

Código E.1:

```
1
2 %%PARÁMETROS%%
3
4 P.R_max = 1788e-6; %[m] Radio máximo del gráulo
5 P.dR_max= 0.15;
6 P.d_max=P.dR_max*P.R_max; %[m] Diámetro máximo del aglomerado
7
8 P.S_AC_in = 396; %[grAC/m3] Concentraación de Acetato en la alimentación [Xavier2007]
9 P.S_PO4_in = 20; %[grPO4/m3] Concentración de fosfato en la alimentación [Xavier2007]
10 P.S_O2_in=3.2 ; %[grO2/m3] Concentración de Oxígeno disuelto durante fase aeróbica [
    ↪ Xavier2007]
11
12 % Difusión
13 P.D_AC_0 = 9.6e-5/(24*3600); %[m2/s] Coeficiente de difusividad de Acetato en medio
    ↪ acuoso. [Xavier2007]
14 P.D_PO4_0 = 1.1e-4/(24*3600); %[m2/s] Coeficiente de difusividad de Fosfato en medio
    ↪ acuoso. [Xavier2007]
15 P.D_O2_0= 2e-4/(24*3600); %[m2/s] Coeficiente de difusividad de Oxígeno en medio
    ↪ acuoso. [Xavier2007]
16
17 % Transporte membrana
18
19 P.k_AC_mb=1.1016; % [grAc/m3/s] Tasa máxima de reacción para proteína actP [
    ↪ Xavier2007]
20 P.K_AC_mb=0.48; % [grAc/m3] Coeficiente de saturación media para proteína actP [
    ↪ Gimenez2003]
21 P.k_PO4_mb=0.132; % [grP/m3/s] Tasa máxima de reacción para sistema Pit [Xavier2007]
22
23 %Acetato
24
25 P.q_s_max_0=7.92; %[grAc/grPAO/d] Tasa máxima de reacción para consumo de Acetato
    ↪ por PAOs [Xavier2007]
26 P.q_s_max=P.q_s_max_0/(24*3600); %[grAC/m3/s]
```

```

27 P.K_Ac_P=4 ; % Coeficiente de saturación media para consumo de Acetato por PAOs [grAc
    ↪ /m3] [Xavier2007]
28
29 % PHA
30
31 P.k_PHA_0= 5.51; %[grPHA/grXPAO/d] Tasa de degradación de PHA [Xavier2007]
32 P.k_PHA=P.k_PHA_0/(24*3600); % [grPHA/m3/s]
33 P.Y_PHA=1.5; % Rendimiento anaeróbico para la formación de PHA [grPHA/grAc] [
    ↪ Xavier2007]
34 P.K_PHA_P=0.01; %[grPHA/grXPAO] Coeficiente de saturación media para PHA [
    ↪ Xavier2007]
35
36 % Poly-P
37
38 P.k_PP_0= 0.4; % [grP/grXPAO/d] Tasa de formación de Poly-P [Xavier2007]
39 P.k_PP=P.k_PP_0/(24*3600); % [grP/m3/s]
40 P.Y_PO4=0.5 ; % [grP/grAc] Rendimiento anaeróbico para liberación de Fosfato [
    ↪ Xavier2007]
41 P.K_PO4_P=1 ; % [grP/m3] Coeficiente de saturación media de Fosfato para la formación
    ↪ de Poly-P [Xavier2007]
42 P.K_PP_P_0=0.01; %[grP/grXPAO] Coeficiente de saturación media para Poly-P [
    ↪ Xavier2007]
43 P.K_O2_P=0.2; %[grO2/m3] Coeficiente de saturación media para Oxígeno [Xavier2007]
44
45 %O2
46
47 %Formaci de glicógeno por PAOs
48
49 Y_GLYO_0=1.11; %[grGly/grXPAO] Rendimiento anaeróbico para formación de glicógeno [
    ↪ Xavier2007]
50 d_Y=1; %[grO2/grXPAO]
51 P.Y_GLYO=d_Y/Y_GLYO_0; %[grO2/grGly]
52 P.k_GLY_0=0.93; %[grGly/grXPAO/d] Tasa de formación de glicógeno [Xavier2007]
53 P.k_GLY=P.k_GLY_0/(24*3600); %Glycogen formation rate [grGly/m3/s]
54
55 %formación de PHA y Poly-P por PAOs
56
57 Y_PHAO_0=1.39; %[grPHA/grXPAO] Rendimiento aeróbico para degradación de PHA [
    ↪ Xavier2007]
58 P.Y_PHAO=d_Y/Y_PHAO_0; %[grO2/grPHA]
59
60 Y_PPO_0=1.39; %[grP/grXPAO] Rendimiento aeróbico para formación de Poly-P [
    ↪ Xavier2007]
61 P.Y_PPO=d_Y/Y_PPO_0; %[grO2/grP]
62
63 % Organismos oxidantes de amonio y nitrito (XNH y XNO)
64
65 P.mu_NH_max_0=0.4; %[1/s] Tasa específica de crecimiento (XNH)[Xavier2007]
66 P.mu_NH_max=P.mu_NH_max_0/(24*3600); %[grXNH/m3/s]
67 P.K_O2_NH=0.3; %[grO2/m3] Coeficiente de saturación media para oxígeno (XNH) [
    ↪ Xavier2007]

```

```

68 Y_NH_0=0.15; %[XNH/grN] Rendimiento para crecimiento de oxidantes de amonio [
    ↪ Xavier2007]
69 a_Y=3.43; %[grO2/grN]factor de corrección de unidades
70 P.Y_NH=a_Y/Y_NH_0; %[grO2/grXNH]
71
72
73 P.mu_NO_max_0=0.4; %[1/s] Tasa específica de crecimiento (XNO)[Xavier2007]
74 P.mu_NO_max=P.mu_NO_max_0/(24*3600);
75 P.K_O2_NO=0.1; %[grO2/m3] Coeficiente de saturación media para oxígeno (XNO) [
    ↪ Xavier2007]
76 Y_NO_0= 0.041; % [grXNH/grN]Rendimiento para crecimiento de oxidantes de nitrito [
    ↪ Xavier2007]
77 b_Y=1.14; %[grO2/grN]factor de corrección de unidades
78 P.Y_NO=b_Y/Y_NO_0; %[grO2/grXNH]
79
80 % Organismos heterótrofos genéricos (XH)
81
82 Y_H_0=0.47; %[grXH/grAc] Rendimiento para el crecimiento de heterotrofos [Xavier2007]
83 c_Y=1; %[grO2/grAc] factor de corrección de unidades
84 P.Y_H=c_Y/Y_H_0; %[grO2/grXH]
85
86
87 P.mu_H_max_0=11.2; %[1/d] Tasa específica de crecimiento (XH) [Xavier2007]
88 P.mu_H_max=P.mu_H_max_0/(24*3600); %[grXH/m3/s]
89
90 P.K_O2_H=0.35; %[grO2/m3] Coeficiente de saturación media para Oxígeno [Xavier2007]
91 P.K_AC_H=4; %[grAc/m3] Coeficiente de saturación media para Acetato [Xavier2007]

```