



UNIVERSIDAD DE CHILE

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA CIVIL

MOVILIDAD DE PAHS (HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS) EN AGUAS
RESIDUALES Y CONSECUENCIAS PARA EL REÚSO DIRECTO: CASO PTAS LA
FARFANA

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERA CIVIL

ANTONIA FLORENCIA ARROYO WELKNER

PROFESORA GUÍA:

ANA LUCÍA PRIETO SANTA

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:

NÉSTOR ROJAS ALCAYAGA

KATHERINE LIZAMA ALLENDE

SANTIAGO DE CHILE

2021

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR
AL TÍTULO DE INGENIERA CIVIL
POR: ANTONIA FLORENCIA ARROYO WELKNER
FECHA: 2021
PROFESORA GUÍA: ANA LUCÍA PRIETO SANTA

MOVILIDAD DE PAHS (HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS) EN AGUAS RESIDUALES Y CONSECUENCIAS PARA EL REÚSO DIRECTO: CASO PTAS LA FARFANA

Los PAHs (hidrocarburos aromáticos policíclicos) son una familia de más de 400 compuestos orgánicos conformados por dos o más anillos de benceno. Son recalcitrantes, ubicuos en el ambiente y con tendencia a bioacumularse. Tienen distintas fuentes de origen, sin embargo, la principal entrada a cauces naturales son las plantas de tratamiento de aguas servidas (PTAS), por lo que comprender los mecanismos de remoción en estas resulta de gran valor. Además, bajo el contexto de sequías cada vez más recurrentes a nivel país, lograr un uso eficiente del agua es de suma importancia. Iniciativas como el reúso de aguas tratadas surgen como posibles soluciones para optimizar manejo hídrico, pero para esto se requiere asegurar la calidad del agua tratada para no generar efectos adversos a la salud de los consumidores ni al medioambiente.

En el presente trabajo de título se desarrolló un modelo conceptual con el objetivo de analizar la presencia y remoción de PAHs en la PTAS La Farfana, la cual trata aproximadamente el 50% de las aguas servidas del Gran Santiago. Se realizó un análisis de los resultados obtenidos, tanto mediante comparación con experiencias internacionales como a través de la realización de un análisis de sensibilidad y se evaluó el cumplimiento de normativa relacionada al reúso directo.

El desarrollo del modelo conceptual se basó en el trabajo de Provoste (2020), y se consideraron los siguientes modelos para la línea de aguas: modelo estacionario de concentración para evaluar el destino de compuestos hidrofóbicos y volátiles en lodos activados (Lee et al., 1998) y el ASM-X (Plosz et al., 2012), junto con el modelo simple para lodos activados (Nanning et al., 2008). Para la línea de lodos se consideró: modelo de tres componentes para sorción de microcontaminantes en lodos (Barret et al., 2010) y el modelo de cuatro componentes para biodisponibilidad y metabolismo de microcontaminantes en digestión anaeróbica (Delgadillo-Mirquez et al., 2011). Los PAHs considerados en el estudio fueron el naftaleno y el benzo(a)pireno, al ser PAHs de bajo y alto peso molecular respectivamente, y al tener efectos cancerígenos y encontrarse frecuentemente en aguas servidas. Los resultados obtenidos para el naftaleno presentaron un flujo de ingreso de 680 g/d, de los cuales 158 g/d se encontraron en el efluente y 367 g/d en los lodos tratados. Las eficiencias de remoción fueron de 78% en la línea de agua y de 23% en la línea de lodos. En el caso de benzo(a)pireno el flujo de ingreso a la planta fue de 77 g/d, de los cuales 5 g/d se encontraron en el efluente y 70 g/d en los lodos tratados. Las eficiencias obtenidas para el benzo(a)pireno son de 94% en la línea de agua y de 20% en la línea de lodos. Se observaron diferencias en los comportamientos de ambos PAHs debido a sus propiedades fisicoquímicas. A pesar de esto, para ambos PAHs el proceso predominante fue la adsorción a los lodos. Los resultados se encontraron dentro de los rangos esperados y en buena concordancia con la literatura. Sin embargo, para futuras experiencias puede ser de utilidad contar con datos experimentales para lograr una buena calibración de los parámetros relevantes en la modelación.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, me gustaría agradecer a todos los que de alguna forma u otra me apoyaron a lo largo del proceso de la memoria. Los que trabajaron conmigo por Zoom, los que me distrajeron de la memoria por un rato y los que aguantaron todas mis quejas con paciencia.

Gracias a la profesora Ana, por ayudarme a cada paso del proceso y por su confianza en mis capacidades, que a ratos superó mi propia confianza. Igualmente, gracias a los miembros de la comisión Néstor Rojas y Katherine Lizama por su buena disposición a resolver dudas. Gracias también al miembro no oficial de la comisión, Fabi, por explicarme con toda la paciencia del mundo los pasos a seguir y por todos sus consejos.

Gracias a mis papás, por entregar lo mejor de ellos para que mis hermanos y yo tuviéramos la mejor educación posible. Por enseñarme a trabajar duro para cumplir mis metas. Gracias a mis hermanos por aguantarme mis malos ánimos, y por ayudarme a sobrellevar este proceso a ratos tan estresante.

Gracias Srdjan por el apoyo incondicional, desde tu ayuda en electromagnetismo hasta las correcciones finales de la memoria. Espero poder estar a la altura y ayudarte de la misma forma en este largo procesos que tu estas empezando.

Cerca de siete años en la universidad pasaron rápidamente gracias a la buena compañía que tuve a lo largo de la carrera. Definitivamente hubiese sido peor sin todos los amigos que me rodearon. Tuve la suerte de formar un grupo de amigos en el colegio, y aún más suerte de haber mantenido las amistades, que solo se han fortalecido con el tiempo. Gracias a todos ellos. En Beauchef conocí también personas increíbles, que de alguna forma u otra me ayudaron a crecer y seguir avanzando. La única forma en que pude sobrellevar los primeros años de la U fue por las amigas que hice. Gracias por su apoyo y compañía en el estudio. A mis amigos de civil, gracias por todas las enseñanzas, que muchas veces fueron más allá de lo académico. A mis amigos de escalada, gracias por todas las salidas, acampadas y guitearreos, son definitivamente de los mejores recuerdos que me llevo del paso por la universidad.

Por último, me doy gracias a mí misma, por entender que al final del día está bien no entender todo a la primera, que la resiliencia es de las características más valiosas que uno puede tener, y que es una que día a día sigo desarrollando. Gracias por no rendirte cada vez que caíste en este proceso.

TABLA DE CONTENIDO

AGRADECIMIENTOS	II
TABLA DE CONTENIDO.....	III
ÍNDICE DE TABLAS	V
ÍNDICE DE FIGURAS.....	VI
1. INTRODUCCIÓN.....	1
2. MARCO TEÓRICO	3
2.1 HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS (PAHs).....	3
2.2 PAHs EN PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES (ARes).....	5
2.3 MODELACIÓN DE MICROCONTAMINANTES Y PAHs EN PTAS	13
2.4 REGULACIÓN Y NORMATIVA.....	14
2.5 OBJETIVOS.....	17
3. METODOLOGÍA.....	18
4. CASO ESTUDIO: PTAS LA FARFANA.....	25
4.1 LÍNEA DE AGUAS.....	26
4.2 LÍNEA DE LODOS	28
5. MODELO CONCEPTUAL EN LA PTAS LA FARFANA	31
5.1 TRATAMIENTO PRIMARIO	34
5.2 TRATAMIENTO SECUNDARIO	35
5.3 ESPESADORES, CÁMARA DE MEZCLA Y DESHIDRATADOR	37
5.4 DIGESTIÓN ANAERÓBICA	41
6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	45
6.1 RESULTADOS Y ANÁLISIS DE LA MODELACIÓN	45
4.1 COMPARACIÓN DE RESULTADOS	57
4.2 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD.....	60
4.3 COMPARACIÓN DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS CON NORMATIVA EXISTENTE.....	64
5 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	66
BIBLIOGRAFÍA	68
ANEXO A: BASE TEÓRICA DE LOS MODELOS.....	LXVIII
ANEXO B: MODELO CONCEPTUAL: LÍNEA DE AGUAS	LXXVII
ANEXO C: MODELO CONCEPTUAL: LÍNEA DE LODOS	LXXXV
ANEXO D: SELECCIÓN DE PARÁMETROS	XCII

ANEXO E: RESULTADOS DEL MODELO CONCEPTUAL.....XCIV

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Propiedades de PAHs clasificados como contaminantes prioritarios por la US EPA (Alegbeleye et al., 2017).....	3
Tabla 2: Concentraciones de PAHs reportadas en los afluentes y efluentes de PTAS (concentraciones en ng/L).....	7
Tabla 3: Concentraciones de PAHs reportadas en los lodos generados de PTAS (concentraciones en ng/g peso seco).....	9
Tabla 4: Modelos de concentración de microcontaminantes en PTAS existentes (adaptado de Pomies et al., 2013).....	14
Tabla 5: Normativa existente para PAHs en agua y lodos para agricultura	17
Tabla 6: Recopilación bibliográfica de PAHs afluentes a PTAS	20
Tabla 7: Parámetros considerados para el análisis de sensibilidad.....	23
Tabla 8: Parámetros de diseño y operacionales de tratamiento primario (AKROS Ing., 2014)...	27
Tabla 9: Parámetros de diseño y operacionales del tratamiento secundario (AKROS Ing., 2014).....	27
Tabla 10: Parámetros de diseño y operacionales de espesador primario (AKROS Ing., 2014). ..	28
Tabla 11: Parámetros de diseño y operacionales de espesador secundario (AKROS Ing., 2014).	28
Tabla 12: Parámetros de diseño y operacionales para la digestión anaeróbica (AKROS Ing., 2014).	29
Tabla 13: Parámetros de diseño y operacionales de deshidratador mecánico (AKROS Ing., 2014).	30
Tabla 14: Modelos utilizados para la línea de agua y la línea de lodos.....	32
Tabla 15: Notación de subíndices y superíndices	34
Tabla 16: Eficiencias de remoción de naftaleno	45
Tabla 17: Eficiencias de remoción de benzo(a)pireno.....	46
Tabla 18: Resumen de eficiencias de remoción de los PAHs reportadas en literatura para la línea de aguas.....	58
Tabla 19: Resumen de concentración de PAHs en lodos según literatura.....	59
Tabla 20: Parámetros variados para análisis de sensibilidad	61
Tabla 21: Parámetros considerados en el tratamiento primario.....	XCII
Tabla 22: Parámetros considerados en el tratamiento secundario	XCII
Tabla 23: Parámetros considerados en la digestión anaeróbica.....	XCIII
Tabla 24: Resultados obtenidos para la modelación del naftaleno en la línea de aguas.....	XCIV
Tabla 25: Resultados obtenidos para la modelación de naftaleno en la línea de lodos	XCIV
Tabla 26: Resultados de la modelación de benzo(a)pireno en la línea de aguas	XCIV
Tabla 27: Resultados de la modelación para benzo(a)pireno en la línea de lodos	XCIV

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Principales fuentes de ingreso antropogénicas de PAHs a sistemas acuáticos (Adaptado de UK Environment Agency, 2019).	5
Figura 2: Resumen de procesos de movilidad de PAHs en la línea de aguas (Adaptado de Meakins et al., 1994).	11
Figura 3: Resumen de procesos de movilidad de PAHs durante la digestión anaeróbica (Adaptado de Meakins et al., 1994).	13
Figura 4: Diagrama de flujo del tren de tratamiento de la planta La Farfana. Nótese que líneas negras representan la línea de aguas, las líneas grises la línea de lodos y las líneas punteadas indican retornos.	26
Figura 5: Etapas del sistema de tratamiento incluidas en el modelo	31
Figura 6: Flujo másico obtenido a partir del modelo conceptual para el naftaleno en la línea de agua. Todos los flujos se presentan en [g/d]	47
Figura 7: Flujo másico obtenido a partir del modelo conceptual para el naftaleno en la línea de lodos. Todos los flujos se presentan en [g/d]	48
Figura 8: Flujo másico obtenido a partir del modelo conceptual para el benzo(a)pireno en la línea de agua. Todos los flujos se presentan en [g/d]	49
Figura 9: Flujo másico obtenido a partir del modelo conceptual para el benzo(a)pireno en la línea de lodos. Todos los flujos se presentan en [g/d]	50
Figura 10: Distribución de naftaleno a la salida de a) tratamiento primario, b) tratamiento secundario	51
Figura 11: Distribución de benzo(a)pireno a la salida de a) tratamiento primario, b) tratamiento secundario	53
Figura 12: Análisis de sensibilidad para la línea de aguas. a) variaciones en la concentración disuelta efluente a la planta, b) variaciones en la concentración adsorbida a MP efluente a la planta, c) variaciones en la concentración total efluente a la planta.....	62
Figura 13: Análisis de sensibilidad para la línea de aguas. a) variaciones en la concentración disuelta libre presente en el lodo tratado, b) variaciones en la concentración adsorbida a DCM presente en el lodo tratado, c) variaciones en la fase adsorbida a MP presente en el lodo tratado	64
Figura 14: a) cometabolismo, b) metabolismo. (Fuente: Delgadillo-Mirquez et al. (2011)).	LXXV
Figura 15: Estructura línea de aguas	LXXVII
Figura 16: Estructura línea de lodos	LXXXV

1. INTRODUCCIÓN

En el contexto actual de estrés hídrico mundial donde factores como el crecimiento demográfico y la urbanización han generado un consumo de agua cada vez mayor, resulta de gran interés poder optimizar el consumo de este recurso. Chile no es una excepción a esto, pues considerando la sequía que se está viviendo desde el año 2010 en las zonas norte y centro del país, es necesario considerar medidas que permitan un manejo óptimo del agua disponible, ya que se espera que como consecuencia del cambio climático estos eventos de sequía se vuelvan más recurrentes en el país (Centro de Ciencia del Clima y la Resiliencia, 2020). De esta forma, iniciativas como el reúso de aguas residuales (ARes) tratadas surgen como una posible solución para combatir el creciente estrés hídrico.

El año 2018 se publica la Ley N°21.075 la cual regula la recolección, reutilización y disposición de aguas grises lo cual demuestra un avance considerable en materia de reúso de aguas a nivel país. A pesar de esto, existen otras alternativas que permiten darle mayor vida útil al agua. Una de estas corresponde al reúso directo de ARes tratadas, el cual puede ser tanto reúso potable como no potable. Si es que se desea poder implementar un sistema de reúso directo del agua servida tratada en un futuro, es necesario tomar en cuenta diversos contaminantes los cuales se encuentran en las aguas servidas y removerlos, de tal forma que sea posible reusar el agua tratada sin generar efectos adversos para la salud, además de cumplir con los estándares de calidad. A nivel internacional se ha visto una creciente preocupación por la presencia de microcontaminantes en el medio acuático, por lo existe una tendencia a incluir algunos de estos a la normativa de descarga y de agua potable (Luo et al., 2014; Manoli et al., 2007).

Dentro de estos contaminantes, se encuentran diversos xenobióticos, como por ejemplo los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs). Los PAHs son una gama de compuestos orgánicos que contienen dos o más anillos de benceno con distintas estructuras moleculares. Son contaminantes ubicuos en el ambiente, recalcitrantes y con tendencias a bioacumularse (Mojiri et al., 2019). A pesar de presentar diferencias en su estructura, cuentan con características similares, siendo por ejemplo altamente insolubles en agua, por lo que no suelen encontrarse en altas concentraciones disueltos en agua (Haritash et al., 2009). Sin embargo, los PAHs presentan conocidos efectos adversos tanto para el medio ambiente como para la vida humana, por lo que es de importancia removerlos de los cuerpos de agua.

Las fuentes de PAHs a los compartimientos ambientales son variadas, existiendo fuentes tanto naturales como antropogénicas. Dentro de las fuentes naturales destacan incendios forestales, erupciones volcánicas y procesos hidrotermales. Por otro lado, las fuentes antropogénicas de los PAHs a cuerpos de agua son diversas, incluyendo deposición atmosférica, efluentes de plantas de tratamiento de aguas servidas y derrames de petróleo (Manoli et al., 1999). En aguas servidas se encuentran concentraciones del orden de los ng/L a los µg/L de PAHs predominantemente debido a fuentes antropogénicas, siendo los PAHs más recurrentes el naftaleno, antraceno, fenantreno, benzo(a)pireno y pireno, entre otros. Adicionalmente, diversos estudios indican que el efluente de las plantas de tratamiento de aguas servidas (PTAS) de grandes ciudades son la mayor fuente de PAHs a cauces superficiales (Qiao et al. 2014; Jelic et al., 2015). De esta forma, resulta de interés comprender los procesos de movilidad que ocurren para estos contaminantes en plantas de tratamiento de aguas servidas (AASS).

Respecto a la normativa relacionada a estos contaminantes, a nivel nacional no existe para ningún uso de agua, aunque en el Decreto Supremo 90, el cual regula las descargas de residuos líquidos a aguas marinas y continentales superficiales se establece una concentración máxima de hidrocarburos fijos de 10 mg/L en cuerpos fluviales. Internacionalmente, sin embargo, entidades como el U.S. Environmental Protection Agency (EPA) y la Unión Europea si consideran los PAHs en su normativa, en particular de agua potable. En el *Safe Drinking Water Act*, donde se establece la normativa para el agua potable de la EPA se establece como concentración máxima permitida 0,2 µg/L de benzo(a)pireno (U.S. EPA, 2014). En el documento *Drinking Water Directive* de la Unión Europea, se establecen como concentraciones máximas para agua potable: 0,01 µg/L de benzo(a)pireno y 0,1 µg/L de PAHs (UE, 1998).

A nivel internacional, existe escasa normativa relacionada al reúso directo del agua y depende del uso y calidad del agua residual (Are) tratada. La normativa sobre reúso directo potable es aún más limitada, al 2017 estando contemplada únicamente en Queensland, Australia (OMS, 2017). En el caso de Estados Unidos, la EPA establece en el *Potable Reuse Compendium* que, a pesar de no existir normativa para reúso directo a nivel federal, es posible aplicarlo mientras se cumplan los requerimientos del *Clean Water Act*, *Safe Drinking Water Act* además de la normativa federal aplicable (EPA, 2017). En Chile no existe normativa para reúso directo, aunque existen casos donde se ha aplicado este sistema para procesos industriales (Fundación Chile, 2018).

Tomando estos antecedentes en consideración el principal objetivo de este trabajo consiste en realizar una modelación conceptual de la remoción de PAHs aplicado específicamente al caso de la planta de tratamiento de aguas servidas (PTAS) La Farfana, la cual trata aproximadamente un 50% de las aguas servidas del Gran Santiago (Aguas Andinas, 2001) y por lo tanto constituye una fuente importante de ingreso de PAHs a sistemas acuáticos. A partir de los resultados obtenidos, se busca realizar un análisis de la presencia y remoción de PAHs en la planta y compararla con otras experiencias a nivel internacional, además de estudiar el cumplimiento de la normativa.

2. MARCO TEÓRICO

2.1 HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS (PAHs)

Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs por sus siglas en inglés), son compuestos orgánicos formados por dos o más anillos de benceno con distintas estructuras moleculares. Son contaminantes ubicuos en el ambiente, recalcitrantes y con tendencias a bioacumularse (Mojiri et al., 2019). A la fecha se han identificado más de 400 PAHs, sin embargo, generalmente los estudios y regulaciones se enfocan en hasta 20 de estos, entre los cuales se incluyen: naftaleno, antraceno, fluoreno, pireno, benzo(a)pireno, entre otros (Mojiri et al., 2019).

Tabla 1: Propiedades de PAHs clasificados como contaminantes prioritarios por la US EPA (Alegbeleye et al., 2017)

PAH	N° anillos	Peso molecular	Punto de fusión [°C]	Solubilidad en agua [mg/L]	Presión de vapor [mmHg]	Constante de Henry [kPa*m ³ /mol]	Log(Kow) ^[1]
Naftaleno	2	128,2	79-82	320	ND ^[2]	43,01	3,5
Acenafteno	3	152,2	95	5,3	4,47x10 ⁻³	12,17	3,95
Acenaftileno		152,2	72-82	3,93	0,029	8,40	3,94
Fluoreno		166,2	115-116	1,85	5,0x10 ⁻⁶	7,87	4,28
Fenantreno		178,2	99	1,24	6,8x10 ⁻⁴	3,24	5,62
Antraceno		178,2	218	0,64	1,7x10 ⁻⁵	3,96	5,33
Fluoranteno	4	202,3	110	0,25	5,0x10 ⁻⁶	0,957	4,62
Pireno		202,3	156	0,14	2,5x10 ⁻⁶	0,920	4,47
Benzo(a)antraceno		228,3	158	0,01	2,2x10 ⁻⁸	1,22	5,30
Criseno		228,3	255	0,002	6,3x10 ⁻⁷	0,53	5,30
Benzo(b)fluoranteno	5	252,3	168	0,0015	5,0x10 ⁻⁷	0,067	5,74
Benzo(k)fluoranteno		252,3	215	ND	9,7x10 ⁻¹⁰	0,016	6,06
Benzo(a)pireno		252,3	179	0,0038	5,6x10 ⁻⁹	0,046	5,74
Benzo(g,h,i)perileno		276,3	273	0,00026	1,3x10 ⁻¹⁰	0,075	6,20
Dibenzo(a,h)antraceno	6	278,5	262	0,0005	ND	0,00046	6,84
Indeno(1,2,3-c,d)pireno		276,3	163	Insoluble	10 ⁻¹¹ x10 ⁻⁶	ND	6,20

[1] K_{ow}: coeficiente de partición octanol-agua

[2] ND: no determinado

A pesar de que pueden presentar distintas estructuras moleculares estos compuestos presentan en su gran mayoría comportamientos similares. Son hidrofóbicos, tienen baja presión de vapor y baja solubilidad en agua, por lo que suelen encontrarse disueltos en agua en bajas concentraciones (Fatone et al., 2011; Manoli et al., 1999; Qiao et al., 2014). En cauces superficiales se han reportado concentraciones totales de PAHs entre 0,1-830 ng/L en Estados Unidos y de 76-312 ng/L en Polonia (Maiszewska-Kordybach, 1999). En la Tabla 1 se presentan algunas propiedades fisicoquímicas para los 16 PAHs considerados como contaminantes prioritarios por la US EPA (US EPA, 2014).

Respecto a su clasificación, los PAHs se dividen en dos categorías en base a su peso molecular: LMW (bajo peso molecular) si es que están conformados por dos o tres anillos de benceno y HMW (alto peso molecular) si es que están conformados por cuatro o más. A medida que el peso molecular del PAH aumenta, su hidrofobicidad aumenta mientras que su solubilidad en agua y su presión de vapor disminuyen, lo que en consecuencia hace que el compuesto sea más recalcitrante. Además, a medida que aumenta el peso molecular de los PAHs disminuye la constante de Henry mientras que el coeficiente de partición octanol-agua aumenta (K_{ow}), por lo que en consecuencia los LMW PAHs presentan mayor tendencia a la volatilización y los HMW PAHs mayor tendencia a la adsorción (Jelic et al., 2015).

La temperatura es también un factor relevante en el estado de los PAHs, ya que existe evidencia que indica que el coeficiente de partición sólido-líquido (K_d), parámetro el cual determina la adsorción de estos en condición de equilibrio disminuye a medida que se incrementa la temperatura (Wang et al. 2011).

El ingreso de PAHs al medioambiente tiene diversos orígenes, incluyendo fuentes naturales y antropogénicas. Entre las fuentes naturales se destacan las erupciones volcánicas e incendios forestales. Por otro lado, las fuentes antropogénicas son variadas, incluyendo el uso y producción de alquitrán y asfalto, producción de coque, gasificación o licuefacción de combustibles fósiles, procesos de generación de calor mediante el uso de combustibles fósiles, procesos de tratamiento de maderas, entre otros. Los gases de escape tanto de vehículos como de otros motores son también fuentes de PAHs al ambiente. Es importante destacar que generalmente los PAHs ocurren como parte de mezclas complejas pero que pueden ser generados como compuestos individuales para usos industriales o para investigación de estos (Alegbeleye et al., 2017).

En sitios contaminados, los PAHs pueden presentarse asociados a material particulado (MP) o en estado gaseoso, dependiendo de la volatilidad del compuesto. Los LMW PAHs ocurren predominantemente como gases, mientras que los HMW PAHs suelen estar adsorbidos a material particulado (Alegbeleye et al., 2017).

Distintos estudios han demostrado que el efluente de las plantas de tratamiento de aguas servidas de grandes ciudades son la mayor fuente de PAHs a cauces superficiales (Qiao et al., 2014; Zhang et al., 2019). Sin embargo, también ingresan a cauces superficiales mediante deposición atmosférica, escorrentía urbana y efluentes industriales, especialmente aquellas asociadas a la producción de plásticos y la producción de hierro y acero (Manoli et al., 1999). Además, ya que los lodos producidos en las PTAS son utilizados en agricultura, la eventual escorrentía sobre predios puede constituir otra fuente a sistemas acuáticos (UK Environment Agency, 2019). En la Figura 1 se presentan las principales fuentes antropogénicas de PAHs a sistemas acuáticos. Debido a la baja solubilidad de estos compuestos y a su naturaleza hidrofóbica, las concentraciones de

PAHs disueltos en agua es generalmente baja, encontrándose usualmente adsorbida a material particulado, por lo que finalmente se deposita en sedimentos (Perelo, 2010; Juhasz et al., 2000).

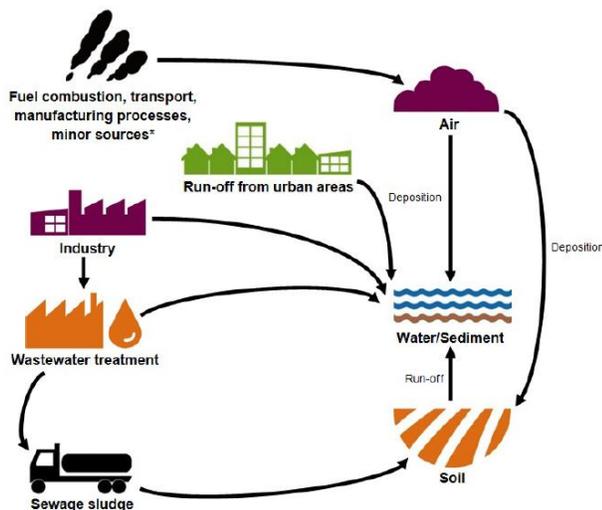


Figura 1: Principales fuentes de ingreso antropogénicas de PAHs a sistemas acuáticos (Adaptado de UK Environment Agency, 2019).

Resulta de importancia remover estos contaminantes del medioambiente ya que no solo son recalcitrantes y con tendencia a bioacumularse, sino que además presentan efectos adversos para la salud y para el ambiente. Los efectos adversos para la salud humana dependen de diversos factores, pero predominantemente de la duración y el nivel de exposición, además de la toxicidad del compuesto. Se debe destacar que la exposición a estos contaminantes se puede llevar a cabo mediante ingesta de agua, de comida o por inhalación. La IARC (International Agency for Research on Cancer) ha clasificado el benzo(a)pireno como un cancerígeno para humanos (Grupo 1), mientras que el naftaleno, criseno, benzo(a)antraceno, benzo(k)fluoranteno, y benzo(b)fluoranteno han sido clasificados como posiblemente cancerígenos para humanos (Grupo 2) (IARC, 2002).

2.2 PAHs EN PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES (ARes)

La carga afluyente a las plantas de tratamientos de aguas servidas proviene de distintas fuentes, incluyendo domicilios e industrias, por lo que contiene una amplia gama de contaminantes. A pesar de esto, estas plantas son diseñadas a nivel mundial para remover de forma efectiva materia orgánica, sólidos suspendidos y nutrientes como el nitrógeno y el fósforo, removiendo de forma colateral contaminantes emergentes (Bergqvist et al., 2006).

Durante los últimos años, sin embargo, ha existido una creciente preocupación por la exposición a microcontaminantes presentes tanto en el agua como en el aire, por lo que la remoción efectiva

de estos se ha convertido en un tema de interés. Entidades internacionales reflejan esta tendencia claramente al establecer normativas de descarga de plantas de tratamiento para estos (Luo et al., 2014; Manoli et al., 2007).

Debido a que los efluentes de las PTAS en áreas urbanas han sido identificados como la mayor fuente directa de PAHs a cauces superficiales (Qiao et al., 2014), comprender los procesos físicos, químicos y biológicos que determinan la movilidad de los PAHs a lo largo de dichas plantas resulta fundamental para poder conocer las concentraciones presentes en el efluente a estas.

Respecto a la carga afluyente de PAHs a las PTAS, diversos estudios han reportado concentraciones desde los ng/L hasta los µg/L, entre los 211-5.015 ng/L (Bussetti et al., 2005; Fantone et al., 2010; Liu et al., 2017; Tian et al., 2012). En la Tabla 2 se presentan valores reportados por distintas experiencias. Cabe recalcar que las experiencias internacionales generalmente reportan mayores concentraciones disueltas de LMW PAHs que de HMW PAHs tanto en el afluyente como en el efluente de las PTAS, posiblemente debido a la mayor tendencia a la adsorción a los lodos de los HMW PAHs. De la Tabla 2 se observa que las concentraciones afluentes para LMW PAHs se encuentran en el rango de 89-13.090 ng/L, mientras que para los HMW PAHs se reportan concentraciones entre 53-1.189 ng/L. El naftaleno se ha identificado como el PAH más común en aguas servidas, lo cual se explica ya que este compuesto es de los pocos PAHs con usos directos en domicilios, estando presente en productos de limpieza, funguicidas, entre otros, además de ser utilizado en procesos industriales (Jelic et al., 2015).

Tabla 2: Concentraciones de PAHs reportadas en los afluentes y efluentes de PTAS (concentraciones en ng/L)

	Bussetti et al. (2005)		Fantone et al. (2010)		Manoli et al. (1999)		Pham et al. (1999)		Sun et al. (2018)	
Ubicación	Venecia, Italia		Italia		Thessaloniki, Greece		Montreal, Canadá		Harbin, China	
Tipo de PAH	Afluente	Efluente	Afluente	Efluente	Afluente	Efluente	Afluente	Efluente	Afluente	Efluente
Naftaleno	18	5	250	56	2.800	ND	147	88	882	413
Acenafteno	10	6	30	ND	ND	ND	21	2	11	11
Acenaftileno	12	4	180	ND	ND	44	16	5	117	23
Fluoreno	18	6	177	19	500	190	37	15	300	67
Fenantreno	19	8	84	58	1.000	4	333	109	481	147
Antraceno	12	5	14	ND	70	30	28	12	75	27
Fluoranteno	18	6	28	17	230	50	150	20	257	56
Pireno	16	7	25	17	220	5	138	23	196	43
Benzo(a)antraceno	15	3	23	13	40	15	39	4	76	10
Criseno	8	4	59	15	60	6	80	5	103	19
Benzo(b)fluoranteno	15	3	16	ND	22	3	105	6	103	9
Benzo(k)fluoranteno	12	3	32	ND	7	4			89	12
Benzo(a)pireno	17	2	16	ND	20	1	48	1	100	8
Benzo(g,h,i)perileno	6	3	5	ND	4	7	6	0	34	4
Dibenzo(a,h)antraceno	4	3	16	ND	28	6	18	1	26	7
Indeno(1,2,3-c,d)pireno	8	4	5	ND	14	ND	19	0	55	8
\sum LMW PAHs	90	35	735	133	4.370	268	582	231	1.866	689
\sum HMW PAHs	121	41	225	62	645	97	603	60	1.040	175
\sum PAHs	211	76	960	195	5.015	365	1.185	291	2.906	864

Resulta importante recalcar que las variaciones en la carga afluyente se deben a diversos factores, como lo son la estacionalidad, composición del agua servida (dependiendo del porcentaje de industrias que tributan a la red), y la población servida. En este sentido, se ha evidenciado un aumento de la concentración de PAHs afluentes a PTAS en la temporada de invierno, lo que se podría atribuir a mayores emisiones de PAHs debido al uso de sistemas de calefacción a combustión y mayor deposición atmosférica durante esta temporada (Manoli et al., 2007). Adicionalmente, se ha identificado que generalmente las cargas afluentes son mayores mientras mayor sea el porcentaje de industrias afluentes a la planta y el nivel de urbanización del área (Jelic et al., 2015; Zhang et al., 2019).

Debido a la naturaleza hidrofóbica de los PAHs, estos presentan tendencias a ingresar a la PTAS adsorbido a materia particulada tanto orgánica como inorgánica (Liu et al., 2014), y considerando que las aguas servidas pueden demorar horas en llegar hasta la planta, es posible suponer que la interacción de los PAHs con el material particulado se encuentra en equilibrio (Fatone et al., 2011; Dionisi et al., 2006). A causa de esto, además, se espera que en las etapas de sedimentación estos sean removidos de la línea de agua, para ingresar a los lodos. Es más, de acuerdo a lo reportado por diversos autores, la adsorción resulta ser el proceso predominante en la remoción de PAHs (Qiao et al., 2014; Zhang et al., 2019).

Una vez que los PAHs han ingresado a la planta de tratamiento, existen diversos procesos físicos, químicos y biológicos que aportan en la degradación o remoción de estos. Entre los procesos de mayor importancia se encuentran la adsorción a los lodos, biodegradación, volatilización y degradación abiótica (Jelic et al., 2015; Zhang et al., 2019). Sin embargo, la evidencia sugiere que la degradación abiótica genera remociones despreciables en PTAS (Zhang et al., 2019; Li et al., 2010).

La remoción de PAHs obtenida como resultado del tratamiento depende tanto de las propiedades fisicoquímicas del compuesto en cuestión como de parámetros operacionales de la planta, por lo que en la literatura se reportan variadas eficiencias de remoción. Por un lado, la remoción depende de factores como su solubilidad en agua y su presión de vapor. Por otro lado, la configuración de la planta de tratamiento, vale decir, la tecnología utilizada, parámetros operacionales e incluso la calidad del agua afluyente pueden afectar la remoción obtenida (Jelic et al., 2015).

Por otro lado, la presencia de PAHs en lodos presenta gran variabilidad a nivel internacional, siendo generalmente mayor en países de Asia respecto a países europeos. Zonas como Beijing, Zhejiang y Jiangsu, China, presentan valores particularmente altos, lo cual se podría atribuir a la industrialización presente en estas áreas (Zhang et al., 2019). En la Tabla 3 se presentan concentraciones de PAHs en lodos de distintas PTAS.

A diferencia de la proporción de PAHs en las aguas servidas, en los lodos tratados los LMW PAHs se encuentran en menor porcentaje que los HMW PAHs. De la Tabla 3 se observa que los LMW PAHs se encuentran en el rango de 431-12.400 ng/g peso seco, mientras que los HMW PAHs se encuentran en el rango de 830-25.120 ng/g peso seco. Esta diferencia se puede explicar por el coeficiente de partición sólido-líquido, el cual aumenta con el peso molecular de los PAHs, por lo que los HMW PAHs presentan mayor tendencia a la adsorción.

Tabla 3: Concentraciones de PAHs reportadas en los lodos generados de PTAS (concentraciones en ng/g peso seco)

	Bussetti et al. (2005)	Cai et al. (2007)	Dai et al. (2007)	Manoli et al. (1999)	Perez et al. (2001)	Tian et al. (2012)	Torretta et al. (2013)
Ubicación	Venecia, Italia	Beijing, China	Beijing, China	Thessaloniki, Grecia	Catalonia, Spain	Tai'an, China	Lombardia, Italia
Naftaleno	28	1,100	180	1.000	198	768	254
Acenafteno	67	2,200	21	600	60	103	-
Acenaftileno	92	2,500	131	1.050	319	114	-
Fluoreno	74	1,400	91	4.600	472	254	-
Fenantreno	91	1,200	466	380	1.346	670	326
Antraceno	79	4,000	58	1.300	166	100	25
Fluoranteno	93	ND	293	2.680	448	375	177
Pireno	98	4,300	236	45	525	247	543
Benzo(a)antraceno	99	8,300	274	640	140	144	302
Criseno	94	3,500	463	1.550	134	103	385
Benzo(b)fluoranteno	93	2,900	572	280	43	88	115
Benzo(k)fluoranteno	77	1,100	115	122	33	26	-
Benzo(a)pireno	87	5,000	226	240	34	ND	62
Benzo(g,h,i)perileno	52	ND	1,134	16	1	ND	-
Dibenzo(a,h)antraceno	69	16	93	300	7	ND	456
Indeno(1,2,3-c,d)pireno	68	4	2.682	120	63	ND	-
Σ LMW PAHs	431	12.400	951	8.930	2.560	2.011	605
Σ HMW PAHs	830	25.120	6.093	5.993	1.429	986	2.040
Σ PAHs	1.262	37.520	7.043	14.923	3.989	2.997	2.645

A continuación se realiza una descripción de los mecanismos de remoción de PAHs en cada una de las etapas de tratamiento de aguas servidas. En la Figura 2 y la Figura 3 se presenta un resumen de estos en la línea de agua y la de lodos.

2.2.1 Tratamiento preliminar

El tratamiento preliminar contempla generalmente una etapa de tamizado y desarenado, aunque en algunas PTAS esta etapa considera también la remoción de grasas y aceites. Respecto a la remoción de PAHs en esta etapa, las experiencias internacionales generalmente la consideran despreciable, o no miden experimentalmente la remoción en esta etapa (Birkett & Lester, 2003; Manoli et al., 2007). Sin embargo, tanto en el desarenado como en el desengrasado puede llevarse a cabo remoción de PAHs debido a la capacidad de adsorción de estos tanto a arenas como a lípidos, además de posible volatilización por aireación (Tian et al., 2012; Liu et al., 2014; Thunnissen et al., 2020).

2.2.1 Tratamiento primario

El objetivo del tratamiento primario corresponde a la remoción de sólidos suspendidos sedimentables mediante un clarificador primario. El mecanismo de remoción de PAHs predominante en esta etapa es la adsorción, aunque también puede ocurrir en menor medida mediante volatilización (Manoli et al., 2007; Jelic et al., 2015; Zhang et al. 2019).

En esta etapa, Manoli et al. (2007) reportó una eficiencia de remoción de 28 a 67%, mientras que Byrns et al. (2001) reportó eficiencias de 11 a 62%, donde la variación se debió predominantemente a las propiedades fisicoquímicas de los distintos PAHs estudiados. En este sentido, de acuerdo a lo reportado por Manoli et al. (2007), la remoción de LMW PAHs fue de 35% en promedio, mientras que la de HMW PAHs es de 61% en promedio. Debido a que los HMW PAHs presenten mayor coeficiente de partición sólido-líquido

Se espera que los HMW PAHs presenten mayor remoción que los LMW PAHs en esta etapa debido a su mayor coeficiente de partición sólido-líquido. Por el contrario, se espera que la volatilización sea mayor para los LMW PAHs que para los HMW PAHs debido a que los LMW PAHs presentan mayor constante de Henry. De todas formas, varios estudios reportan que la remoción por adsorción es más efectiva que la remoción por volatilización en esta etapa (Manoli et al., 2007; Byrns et al., 2001; Jelic et al., 2015).

2.2.2 Tratamiento secundario

El objetivo del tratamiento secundario corresponde a la degradación de materia orgánica mediante acción microbiana. Los procesos de remoción de PAHs predominantes en el tratamiento secundario corresponden a la biodegradación, adsorción a los lodos y volatilización, mientras que procesos abióticos como la fotólisis no generan remociones significativas en PTAS (Birkett & Lester, 2003; Mozo et al., 2019; Zhang et al., 2019).

La biodegradación de PAHs depende de diversos factores, incluyendo las características fisicoquímicas de estos, su biodisponibilidad como también de parámetros operacionales como la

edad del lodo, la presencia de material disuelto coloidal y la temperatura. La evidencia sugiere que los PAHs se encuentran biodisponibles para su degradación en fase disuelta libre o adsorbido a DCM (material disuelto coloidal) (Delgadillo-Mirquez et al., 2011; Barret et al., 2010). De esta forma, debido a que los HMW PAHs se encuentran predominantemente adsorbidos a material particulado, su biodegradación es más limitada que la de los LMW PAHs (Mozo et al., 2019).

Debido a que las concentraciones de PAHs son generalmente del orden de los ng/L o µg/L, la biodegradación de estos es insuficiente para el crecimiento de biomasa. Luego, la evidencia sugiere que la biodegradación de estos compuestos ocurre mediante cometabolismo (Fischer et al., 2014; Margot et al., 2015). Criddle (1993) define el cometabolismo como la transformación de un sustrato de no crecimiento por biomasa en presencia de un sustrato de crecimiento, el cual es un dador de electrones para energía, mantención y crecimiento de la biomasa. De acuerdo a esta definición, los PAHs corresponden a sustratos de no crecimiento mientras que el sustrato de crecimiento corresponde a la DQO biodegradable (Semblante et al., 2015).

En relación a los parámetros operacionales, la evidencia sugiere que a mayor edad del lodo aumenta la eficiencia de remoción de PAHs en el tratamiento secundario (Sponza et al., 2012; Fatone et al., 2011; Clara et al., 2005). De acuerdo a Clara et al. (2005) esto se debe a que el incrementar la edad del lodo permite el desarrollo de bacteria de lento crecimiento, generando así mayor diversidad en la cultura bacteriana; más aún se propone que la presencia de bacterias nitrificantes incrementa la remoción de PAHs. Por otro lado, Tian et al. (2012) indican que las variaciones en la temperatura debido a la estacionalidad generan efectos en la remoción de PAHs, reportando mayor remoción en la temporada de primavera (temperatura ambiente promedio de 22°C) que en la temporada de otoño (temperatura ambiente promedio de 7°C). Una posible explicación para esto es que el aumento de la temperatura promueve mayor actividad biológica, además de incrementar la solubilidad de los PAHs, y en consecuencia su biodisponibilidad (Zhang et al., 2019). Por último, la presencia de material disuelto coloidal genera una disminución en la adsorción a material particulado, con lo cual se disminuye la eficiencia de remoción (Qiao et al., 2016).

En relación a la volatilización en el tratamiento secundario, existen diferencias entre el efecto de este proceso reportado por distintos autores. Mientras que Manoli et al. (2007) consideran la volatilización despreciable al significar un 1-2% de la remoción total de PAHs, Lee et al. (1998) reportan remociones por volatilización de hasta 12%.

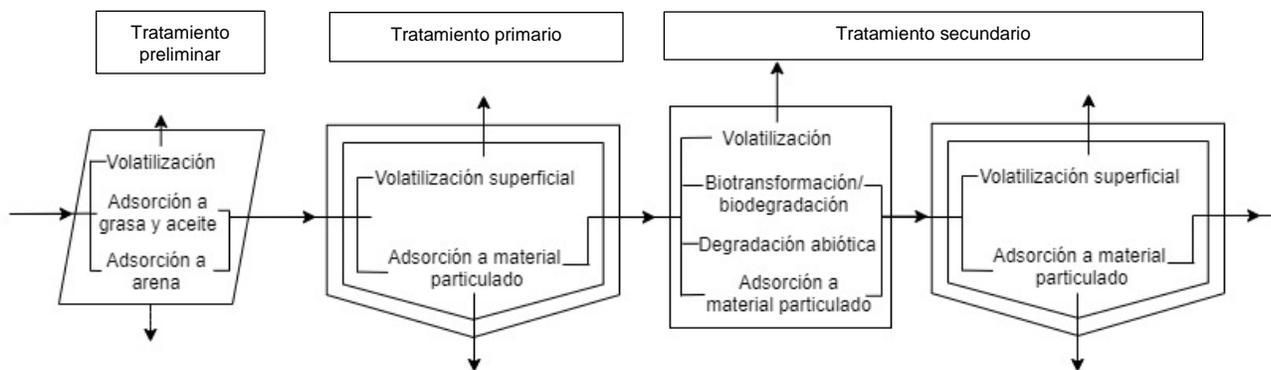


Figura 2: Resumen de procesos de movilidad de PAHs en la línea de aguas (Adaptado de Meakins et al., 1994).

2.2.3 Espesado y deshidratación

Los procesos de espesamiento, deshidratación y secado buscan reducir el contenido de agua de los lodos, por lo cual estos procesos no alteran mayormente la cantidad de PAHs en su fase disuelta ni particulada. En este sentido, ya que en los lodos los PAHs se encontrarán mayormente en fase particulada, la reducción del contenido de agua no alterará la concentración de PAHs de forma significativa, mientras no se utilicen acondicionantes para incrementar la eficiencia del proceso (Mailler et al., 2016). El único mecanismo por el cual se genera una reducción de PAHs en la línea de lodos en esta etapa es por los retornos hacia la línea de aguas.

2.2.4 Digestión anaeróbica

La digestión anaeróbica es un proceso complejo el cual tiene como objetivo la reducción de materia orgánica. Se ha observado que este proceso sí genera una reducción en la concentración de PAHs, aunque su eficiencia está ligada a las características de cada PAH (Siebielska, 2014). Dentro de la digestión anaeróbica se considera que los procesos de biodegradación por cometabolismo, volatilización y sorción/desorción tienen un rol en la remoción de PAHs (Zhang et al. 2019).

Al igual que para la biodegradación en condición aeróbica, la digestión anaeróbica se encuentra sujeta a la biodisponibilidad del PAH, por lo que el proceso de sorción/desorción puede tener un impacto en la biodegradación. La evidencia sugiere que la fase biodisponible en condiciones anaeróbicas corresponde a la fase acuosa, compuesta por la fase disuelta libre y la adsorbida a DCM (material disuelto coloidal) (Delgadillo-Mirquez et al., 2011; Barret et al., 2010). En consecuencia, la biodegradación de HMW PAHs es más baja que la de LMW PAHs en digestores anaeróbicos, debido a su mayor tendencia a la adsorción a MP (Delgadillo-Mirquez et al., 2011). En relación a la volatilización, diversos autores sugieren que este proceso genera remociones despreciables (Delgadillo-Mirquez et al., 2011; González-Gil et al., 2020; Semblante et al. 2015).

En la literatura se encuentra un amplio rango de remociones de PAHs en esta etapa. Delgadillo-Mirquez et al. (2011) reporta remociones de entre 32 a 74% para los distintos PAHs en escala de laboratorio (debiéndose predominantemente a la biodegradación). En contraste, otras experiencias como la realizada por Wlodarczyk-Makula et al. (2005) reportó remociones despreciables durante la digestión anaeróbica. En este sentido, Semblante et al. (2015) reportó que generalmente los estudios que presentan altas remociones de PAHs en la digestión anaeróbica son generalmente a escala de laboratorio. De esta forma, se espera que en PTAS de gran envergadura la eficiencia de remoción de PAHs en la etapa de digestión anaeróbica sea baja.

Adicionalmente, factores como la temperatura y pH del sistema tienen impacto en la remoción de PAHs. Diversos estudios han demostrado que la remoción de PAHs es maximizada en condiciones termofílicas (Trably et al., 2003; El-Hadj et al., 2006). Christensen et al. (2004) reporta que el pH óptimo es de 8, estudiando el rango de pH entre 5 y 9, determina el óptimo en 8.

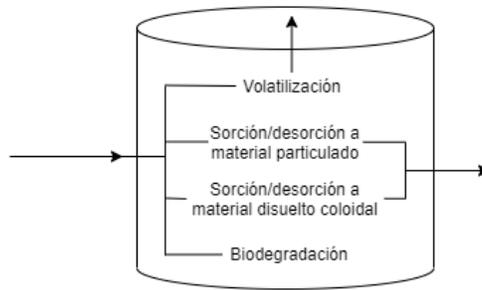


Figura 3: Resumen de procesos de movilidad de PAHs durante la digestión anaeróbica (Adaptado de Meakins et al., 1994).

2.3 MODELACIÓN DE MICROCONTAMINANTES Y PAHs EN PTAS

La modelación de microcontaminantes en plantas de tratamiento de aguas servidas presenta generalmente dos desafíos. Por un lado, el comprender los mecanismos involucrados en la remoción de estos a lo largo del tratamiento y por otro lado, el poder realizar predicciones precisas con una cantidad de información limitada. En términos generales, los modelos de movilidad de contaminantes se separan en dos categorías: modelos multimedia (fugacidad y actividad) y de concentración (Polesel, 2016).

Los modelos multimedia han sido desarrollados con el objetivo de predecir la concentración de contaminantes en distintos medios de forma simultánea, considerando procesos de transporte y de transformación entre estos. Por otro lado, los modelos de concentración incluyen una amplia gama de modelos los cuales utilizan la concentración del contaminante como variable de estado para describir la movilidad de los contaminantes durante el tratamiento. Estos modelos permiten distintos niveles de complejidad, pudiendo incluir concentraciones en estado acuoso, adsorbido y en estado gaseoso y además utilizando distintos parámetros operacionales y variables para definir la movilidad.

Los modelos de concentración pueden considerar una situación estacionaria o dinámica. A pesar de que ambos utilizan las mismas ecuaciones de balance de masa, los modelos estacionarios reflejan únicamente la condición en régimen permanente. De esta forma, los modelos dinámicos son capaces de reflejar el impacto de variaciones temporales del contaminante en el afluente a la PTAS (Polesel, 2016).

En la Tabla 4 adaptada de Pomies et al. (2013) se presentan algunos de los modelos de concentración existentes para la modelación de microcontaminantes en PTAS del tipo lodos activados como también en sistemas de tratamiento de lodos como la digestión anaeróbica.

Tabla 4: Modelos de concentración de microcontaminantes en PTAS existentes (adaptado de Pomies et al., 2013).

Etapa considerada	Nombre del modelo	Microcontaminante modelado	Referencia
Lodos activados	Movilidad de compuestos orgánicos xenobióticos en PTAS	PAHs	Byrns et al. (2001)
Sedimentador primario y lodos activados	Modelo estacionario de concentración para evaluar el destino de compuestos hidrofóbicos y volátiles en lodos activados	PAHs	Lee et al. (1999)
Lodos activados	Modelo de lodos activados para xenobióticos (ASM-X)	Farmacéuticos	Plosz et al. (2010)
Línea de lodos	Modelo de tres componentes para sorción de microcontaminantes en lodos	PAHs	Barret et al. (2010)
Digestión anaeróbica de lodos	Modelo de cuatro componentes para biodisponibilidad y cometabolismo de microcontaminantes en digestión anaeróbica	PAHs	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)

Es importante notar, además, que existen modelos de concentración que consideran la línea de agua, pudiendo estimar la remoción de microcontaminantes en el tratamiento primario y el secundario en conjunto, o solo uno de estos. En cambio, existen modelos dirigidos a determinar la movilidad de los microcontaminantes a lo largo de la línea de lodos, enfocados principalmente en el efecto de la digestión anaeróbica.

En el Anexo A se presentan las bases teóricas de los modelos considerados para el desarrollo del modelo conceptual.

2.4 REGULACIÓN Y NORMATIVA

2.4.1 PAHs

Debido a las características de los PAHs, como su toxicidad, persistencia y bioacumulación, son clasificados como uno de los Compuestos Orgánicos Persistentes (COPs) por el Programa de las Naciones Unidas por el Medio Ambiente (PNUMA) (Ministerio de Agricultura, Alimentación y Medio Ambiente, España, 2012).

Respecto a su normativa, los PAHs se encuentran normados por distintas entidades internacionales para distintos compartimientos, incluyendo agua potable, aire, alimentos y lodos para reúso en agricultura.

Los PAHs son parte de la lista de *Priority Pollutants* del *Clean Water Act* de la EPA, el cual establece la estructura básica para la regulación de descargas a cuerpos de agua y la regulación de los estándares de calidad de cuerpos de agua superficiales. Dentro de los *Priority Pollutants* se consideran los siguientes 16 PAHs: naftaleno, acenafteno, acenaftileno, fluoreno, fenantreno, antraceno, fluoranteno, pireno, benzo(a)antraceno, criseno, benzo(b)fluoranteno, benzo(k)fluoranteno, benzo(a)pireno, benzo(g,h,i)perileno, dibenzo(a,h)antraceno, idenol(1,2,3,c-d)pireno. Sin embargo, se debe notar que en esta lista no se establecen límites de concentración,

sino que se utiliza como una guía (U.S. EPA, 2014). En el caso del agua potable, la EPA en el *National Primary Drinking Water Regulations* establece una concentración límite máxima de 0,2 µg/L para benzo(a)pireno, un PAH con conocidos efectos cancerígenos (U.S. EPA, 2009).

Por su lado, la Unión Europea en el 2455/2001/CE establece contaminantes prioritarios para el agua los cuales se considera que pueden presentar riesgos para el ambiente acuático o para el posterior uso de estas aguas como agua potable. De esta forma, el listado busca adoptar medidas para generar gradualmente una reducción de la presencia de estos contaminantes. Entre los contaminantes prioritarios se incluyen los siguientes PAHs: antraceno, naftaleno, benzo(a)pireno, benzo(b)fluoranteno, benzo(g,h,i)perileno, benzo(k)fluoranteno, idenol(1,2,3-cd)pireno (UE, 2001). En la Directiva 98/83/CE relativa a la calidad de las aguas destinadas al consumo humano, la Unión Europea establece la calidad del agua potable, donde determinan una concentración de 0,01 µg/L para el benzo(a)pireno y de 0,1 µg/L para PAHs (considerando benzo(b)fluoranteno, benzo(k)fluoranteno, benzo(ghi)perileno e idenol(1,2,3-cd)pireno) (UE, 1998).

Considerando el impacto de la presencia de PAHs en cauces naturales, los Países Bajos establecieron concentraciones máximas permisibles (MPCs) para asegurar la protección de ecosistemas acuáticos de 2.000 ng/L para el naftaleno y de 10 ng/L para el benzo(a)pireno (NIPHE, 2012).

En el caso de Chile, la normativa no contempla los PAHs para ningún uso del agua. Sin embargo, en el Decreto Supremo 90, el cual regula la descarga de residuos líquidos a aguas marinas y continentales superficiales, se establece una concentración máxima de 10 mg/L para hidrocarburos fijos descargados en cuerpos de agua fluviales.

2.4.2 Reúso de agua tratada

Respecto a la reutilización de las aguas tratadas, esta se clasifica dependiendo del nivel de tratamiento y de reutilización. El reúso de aguas residuales se divide en tres tipos:

- Reúso directo: Se subdivide en el reúso potable y no potable. En el caso del reúso directo de agua potable (DPR), este consiste en ingresar el efluente de la planta de tratamiento de aguas servidas a una planta de tratamiento de agua avanzada y posteriormente a la red de agua potable. El reúso directo de agua no potable, en cambio, consiste en el tratamiento del efluente de la PTAS para su utilización para aplicaciones que no requieren calidad de agua potable. Dentro de sus usos puede incluirse el riego, uso ornamental o procesos industriales.
- Reúso indirecto: el agua es tratada en una planta de tratamiento de aguas residuales y luego en una planta de tratamiento de agua avanzada. Luego es derivada a cauces naturales por donde reingresa a la red de agua potable.
- Reúso de facto: el agua ingresa a una planta de tratamiento de aguas residuales y luego es derivada a un cauce superficial de donde se obtiene agua para la red de agua potable. (DIC, 2019).

En cualquiera de estos casos, uno de los aspectos más importantes a considerar para el reúso es la calidad del agua con el fin de garantizar que patógenos no entren en contacto con las personas (Fundación Chile, 2016).

A nivel internacional, la aplicación más utilizada para las aguas tratadas corresponde al riego de cultivos agrícolas, aunque también es utilizada en procesos industriales y recarga de acuíferos. La normativa relacionada a la reutilización de aguas residuales tratadas es variada, y depende directamente de las características de las aguas residuales de cada país y de los sectores donde se reutilicen (Fundación Chile, 2018).

A pesar de que el reúso directo de aguas es una práctica que es cada vez más implementada a nivel mundial, la normativa relacionada es limitada. Al 2017, Queensland, Australia es el único estado a nivel mundial el cual contempla el DPR en su normativa de agua potable (OMS, 2017). En el caso de Estados Unidos, no existe normativa relacionada al reúso directo a nivel federal. Sin embargo, el reúso directo potable es posible mientras se cumplan los requisitos establecidos en el *Safe Drinking Water Act*, el *Clean Water Act*, además de normativas a nivel estatal (U.S. EPA, 2017).

Chile cuenta con experiencia limitada en relación a reúso directo de agua tratada, donde destacan los casos de ECONSSA en Antofagasta y Aguas Chañar en Atacama, donde se reutiliza el agua residual para procesos industriales en minería (Fundación Chile, 2016). El año 2018 se publica la Ley N°21.075 la cual regula la recolección, reutilización y disposición de aguas grises, siendo este uno de los primeros avances en términos de normativa para el reúso de aguas servidas tratadas. En el caso del reúso potable directo, no existe normativa en el país.

En relación a la normativa asociada al reúso de lodos en agricultura, en el “Reglamento para manejo de lodos generados en plantas de tratamiento de aguas servidas” de Chile, no se hace mención de concentraciones máximas de PAHs en los lodos estabilizados. En cambio, diversos países de la Unión Europea sí presentan límites en las concentraciones de PAHs en lodos para reúso en agricultura. Por ejemplo, Francia considera como límite máximo para PAHs de entre 2-5 mg/kg de materia seca, dependiendo del PAH, mientras que Italia considera 6 mg/kg de materia seca (Collivignarelli et al., 2019).

En la Tabla 5 se presentan las concentraciones máximas de PAHs establecidas por distintos países e instituciones para diversos usos de agua y de lodos tratados para agricultura.

Tabla 5: Normativa existente para PAHs en agua y lodos para agricultura

Normativa aplicable para	País o institución	Compuesto	Valor	Unidad	Referencia
Agua potable para consumo humano	EPA	Benzo(a)pireno	0,2	µg/L	EPA, 2014
Agua potable para consumo humano	UE	Benzo(a)pireno	0,01	µg/L	UE, 1998
Agua potable para consumo humano	UE	∑PAHs	0,1	µg/L	UE, 1998
Reutilización de aguas para potabilización	OMS	Benzo(a)pireno	0,7	µg/L	OMS, 2017
Concentración máxima permisible para la protección de sistemas acuáticos	Países Bajos	Naftaleno	2,0	µg/L	NIPHE, 2012
Concentración máxima permisible para la protección de sistemas acuáticos	Países Bajos	Benzo(a)pireno	0,01	µg/L	NIPHE, 2012
Lodos estabilizados para agricultura	Francia	Benzo(a)pireno	2	µg/gMS	Collivignarelli et al., 2019
Lodos estabilizados para agricultura	Italia	∑PAHs	6	µg/gMS	Collivignarelli et al., 2019

2.5 OBJETIVOS

General

Plantear un modelo conceptual de la movilidad de PAHs en los principales procesos unitarios de tratamiento de aguas servidas en La Farfana.

Específicos

1. Desarrollar un modelo conceptual para definir la movilidad de PAHs en plantas de tratamiento de ARes, y aplicarlo al naftaleno y al benzo(a)pireno en la PTAS La Farfana.
2. Analizar los resultados obtenidos y comparar con aquellos presentados en la literatura y otras experiencias a nivel internacional.
3. Analizar la normativa relacionada al reúso directo de ARes tratadas y comparar con los resultados obtenidos.

3. METODOLOGÍA

La metodología aplicada en la presente memoria está basada en la desarrollada por Provoste (2020), quien implementó un modelo para estudiar la distribución de PCBs en la biofactoría Mapocho-Trebal. De esta forma, su metodología es adaptada y complementada para estudiar la presencia de PAHs en la PTAS La Farfana.

Para poder llevar a cabo los objetivos presentados en la sección anterior, cada uno de estos se subdivide en tareas. A continuación se presentan las tareas y las subtareas asociadas junto a cada objetivo junto con la metodología aplicada.

3.1 Desarrollar un modelo conceptual para definir la movilidad de PAHs en plantas de tratamiento de aguas servidas, tomando como caso estudio la PTAS La Farfana.

3.1.1 Tarea 1: Recopilación de antecedentes de la PTAS La Farfana

Para el desarrollo del modelo conceptual fue necesario elaborar un diagrama de flujo tanto para la línea de agua como para la línea de lodo en la PTAS La Farfana con el objetivo de comprender el funcionamiento de la planta y por ende los posibles mecanismos de remoción de PAHs presentes.

En primer lugar se realizó una recopilación bibliográfica sobre el diseño y operación de la PTAS. Para esto, se accedió a documentos disponibles en el Servicio de Evaluación Ambiental (SEA), además de informes sobre el funcionamiento de la planta para el proceso tarifario para el periodo 2015-2020 desarrollado por AKROS Ing. A partir de esta información se obtuvo el diagrama de flujo de la planta, además de los parámetros operacionales de esta como los caudales de ingreso y salida de cada proceso, las dimensiones de las unidades de tratamiento, los flujos máxicos de sólidos suspendidos totales, entre otros.

3.1.2 Tarea 2: Elaboración del modelo conceptual

Posteriormente se procedió a la elaboración del modelo conceptual para estudiar la movilidad de PAHs en la PTAS La Farfana. Como se ha mencionado, el presente modelo se desarrolló en base al modelo realizado por Provoste (2020) el cual corresponde a un modelo conceptual para estudiar la presencia y movilidad de PCBs en la PTAS Mapocho-Trebal. Al estar diseñado para otro contaminante y otra planta de tratamiento, fue necesario adaptar y complementar el modelo para los PAHs para poder aplicarlo al caso de La Farfana. En este sentido, la PTAS Mapocho-Trebal cuenta con otra configuración y sistemas de tratamiento, incluyendo por ejemplo una etapa de hidrólisis térmica y una etapa de prepesado del lodo secundario.

Una vez que se planteó el modelo conceptual, se aplicó para el caso del naftaleno y el benzo(a)pireno. La selección de estos contaminantes se justifica ya que por un lado, el naftaleno corresponde a uno de los PAHs más abundantes en aguas servidas y por otro lado, el benzo(a)pireno por su conocido efecto adverso a la salud, al ser clasificado como cancerígeno por la IARC (IARC, 2002; Zhang et al., 2019). Además, el naftaleno corresponde a un LMW PAH

mientras que el benzo(a)pireno corresponde a un HMW PAH, lo que permite estudiar las diferencias de comportamiento que presentan estos dos grupos.

La elaboración del modelo conceptual requirió de una revisión bibliográfica sobre los mecanismos de remoción y movilidad de PAHs en PTAS, considerando tanto la línea de agua como la de lodos. En base a esta recopilación fue posible estudiar la factibilidad de utilizar el modelo propuesto por Provoste (2020), además de seleccionar los parámetros fisicoquímicos y cinéticos a utilizar para la modelación de naftaleno y benzo(a)pireno. En base a este análisis se determinó incluir el efecto de la volatilización en el tratamiento secundario, el cual no estuvo contemplado en el modelo de Provoste (2020).

El modelo conceptual desarrollado para determinar la movilidad de PAHs en la PTAS La Farfana consiste en 4 submodelos los cuales son acoplados de forma que se represente la presencia y remoción de estos en la línea de agua y de lodos conjuntamente. Cada uno de los submodelos permitió obtener la concentración de cada PAH a la salida de las etapas unitarias de tratamiento consideradas, para luego ser acoplados en un sistema de ecuaciones conformado por los balances de masa de cada etapa de tratamiento.

3.1.3 Tarea 3: Determinación de la concentración afluyente

Para la realización del presente trabajo no se contó con mediciones experimentales de la presencia de PAHs en la PTAS La Farfana. En consecuencia, para determinar la concentración afluyente a la planta a considerar en el modelo se realizó una revisión bibliográfica sobre la presencia de estos en PTAS de gran envergadura a nivel mundial. La literatura indica que la concentración de PAHs afluyente a PTAS depende de diversos factores como la composición del agua servida (porcentaje de industrias que tributan a la planta), la población servida y la estacionalidad (Jelic et al., 2015; Manoli et al., 2007).

Con estos antecedentes, se determinó utilizar la concentración afluyente de la planta con condiciones más similares a La Farfana en términos de población. En la Tabla 6 se presentan los estudios disponibles sobre la presencia de naftaleno y benzo(a)pireno en PTAS.

En base a esta información, se decidió utilizar la concentración afluyente de 882 ng/L de naftaleno y 100 ng/L de benzo(a)pireno, en base a la experiencia realizada por Sun et al. (2018) en la PTAS de Harbin, China, la cual tiene un caudal de entrada de 7,5 m³/s, es abastecida por 4,582,000 PE y un 20% de sus afluentes corresponden a aporte de industrias (Sun et al., 2018). La PTAS La Farfana tiene un caudal de entrada de 8,8 m³/s y trata las aguas servidas de 3,700,000 personas (Suez, 2018).

Tabla 6: Recopilación bibliográfica de PAHs afluentes a PTAS

Ubicación	Año	PTAS	Caudal [m ³ /s]	Población servida [hab]	Naftaleno [ng/L]	Benzo(a)pireno [ng/L]	Referencia
Jordania	2014	As-Salt WWTP	0,09	2.220.000	-	86	Alawi et al. (2018)
		Irbid WWTP	0,14		-	77	
		Kherbet As-Samara WWTP	3,19		-	86	
		Abu Nsair WWTP	0,05		-	90	
		Aqaba WWTP	0,10		-	64	
Italia	2002	Fusina WWTP	1,16	200.000	80	297	Bussetti et al. (2005)
Italia	2005-2008	WWTP A	0,29	12.000 – 700.000	250	16	Fantone et al. (2010)
		WWTP B	0,17		96	5	
		WWTP C	0,23		113	5	
		WWTP D	1,37		634	14	
		WWTP E	0,24		103	20	
Jordania	1997	Mutah WWTP	-	17.000	220	ND	Jiries et al. (1999)
		Karak WWTP	0,01	90.000	169	9	
China	2015	-	2,55	-	435	ND	Liu et al. (2017)
Grecia	1994-1995	Thessaloniki STP	0,46	1.000.000	2.800	200	Manoli et al. (2007)
Canada	1993	Montreal Urban Community WWTP	15,05	1.400.000	147	48	Pham et al. (1999)
España	2007	Mataró WWTP	0,35	200.000	4.500	300	Sánchez-Avila et al. (2009)
China	2009-2016	Harbin WWTP	7,52	4.600.000	882	100	Sun et al (2018)

Ubicación	Año	PTAS	Caudal [m ³ /s]	Población servida [hab]	Naftaleno [ng/L]	Benzo(a)pireno [ng/L]	Referencia
China	2008	Tai'an WWTP - Mayo	0,58	-	207	ND	Tian et al. (2012)
		Tai'an WWTP - Noviembre		-	971	ND	
Noruega	2002-2004	WWTP A	0,93	15.000 – 300.000	315	12,5	Vogelsang et al. (2006)
		WWTP B	0,39		325	6,5	
		WWTP C	-		84	16	
		WWTP D	0,12		250	8	
		WWTP E	0,10		122	ND	
China	2011	Hefei WWTP	3,47	880.000	1.437	1.383	Wang et al. (2013)
Polonia	2004	Verano	0,68	100.000	2.987	532	Włodarczyk-Makula et al. (2005)
		Invierno	0,69		1.931	2.101	
China	2010	Zhejiang WWTP	1,22	-	15	1,87	Yao et al. (2012)

3.1.4 Tarea 4: Simulación del modelo conceptual

Una vez que se recopilaron todos los antecedentes necesarios y que se determinó la concentración afluente a considerar, se evaluó el modelo utilizando Excel de Microsoft Office. En particular, se utilizan las herramientas Solver y Macros.

A partir del modelo conceptual se determinaron los valores de naftaleno y benzo(a)pireno presentes en el efluente de la PTAS y en los lodos tratados, además de la presencia y remoción en cada una de las etapas de tratamiento en la línea de aguas y de lodos. En base a estos resultados se realizó un diagrama de flujo con los flujos máxicos de estos PAHs en cada etapa. Además, se determinó la eficiencia de remoción en cada una de las etapas y la eficiencia total de la línea de aguas y la de lodos.

3.2 Análisis de los resultados obtenidos

3.2.1 Tarea 5: Analizar y comparar los resultados obtenidos con experiencias internacionales

Se realizó una recopilación de experiencias a nivel internacional para poder compararlos con los resultados obtenidos utilizando el presente modelo para el naftaleno y el benzo(a)pireno. Para esto, se incluyeron únicamente plantas de tratamiento ubicadas en áreas urbanas las cuales presenten sistemas de tratamientos similares a los presentes en La Farfana.

Con estos antecedentes se procedió a comparar los resultados, buscando analizar las diferencias entre las eficiencias reportadas por otras experiencias con las del modelo conceptual. Además, se estudiaron los mecanismos de remoción predominantes en cada una de las etapas del tratamiento y se analizó la distribución y movilidad del naftaleno y benzo(a)pireno en la PTAS. Por último, se realizó una comparación entre las remociones obtenidas para el naftaleno y el benzo(a)pireno y se analizaron las diferencias entre los comportamientos de estos en la planta.

3.2.2 Tarea 6: Realizar un análisis de sensibilidad del modelo

Para la realización del análisis de sensibilidad existen diversas alternativas con variados niveles de complejidad. En este caso, el método aplicado correspondió a un análisis de sensibilidad local, el cual consistió en la variación porcentual de un parámetro a la vez para estudiar la variación obtenida en los resultados (Hamby, 1994).

El análisis se realizó únicamente para el naftaleno, para los parámetros que definen los procesos identificados como los de mayor importancia en cada etapa de tratamiento de acuerdo a los resultados obtenidos. En la Tabla 7 se presentan los parámetros considerados en el análisis de sensibilidad.

Para determinar la variación porcentual a utilizar para cada uno de los parámetros, se realizó una revisión bibliográfica sobre estos y los distintos valores reportados en la literatura.

Tabla 7: Parámetros considerados para el análisis de sensibilidad.

Etapa	Parámetro	Justificación
Tratamiento primario	Coefficiente de partición sólido-líquido ($K_{d,prim}$)	Proceso de adsorción se identificó como el de mayor influencia el tratamiento primario. El coeficiente de partición sólido-líquido es el que caracteriza este proceso.
Tratamiento secundario	Coefficiente de partición sólido-líquido ($K_{d,sec}$)	Proceso de adsorción se identificó como el de mayor influencia el tratamiento secundario. El coeficiente de partición sólido-líquido es el que caracteriza este proceso.
	Edad del lodo (SRT)	En la literatura se reconoce la edad del lodo como un factor determinante en la remoción de PAHs (Sponza et al., 2012).
Digestión anaeróbica	Constante cinética de sorción/desorción a MP (k_1)	El proceso dominante en la digestión anaeróbica fue el de sorción/desorción a MP. Los parámetros que caracterizan este proceso son k_1 y K_p . Debido a que la sorción a DCM puede afectar la sorción a MP también se incluyen k_2 y K_{DCM} al análisis.
	Constante cinética de sorción/desorción a DCM (k_2)	
	constante de equilibrio de sorción a MP (K_p)	
	constante de equilibrio de sorción a DCM (K_{DCM}).	

Tanto en el tratamiento primario como en el secundario el proceso con mayor influencia en la remoción de naftaleno de la línea de aguas fue la adsorción a los lodos, por lo que el parámetro que se varió fue el coeficiente de partición sólido líquido (K_d). Debido que en la literatura se reconoce la edad del lodo como un parámetro determinante en la remoción de PAHs en lodos activados convencionales (Sponza et al., 2012), también se consideró la variación este parámetro para el tratamiento secundario.

En la línea de lodos, debido a que no se consideran procesos de degradación en los espesadores, cámara de mezcla ni en el deshidratador, no se realiza un análisis de sensibilidad en estas etapas. En el digestor anaeróbico el proceso que dominó fue el de sorción/desorción, por lo que se estudió la variación de la constante cinética de sorción/desorción a MP (k_1), la constante cinética de sorción/desorción a DCM (k_2), la constante de equilibrio de sorción a MP (K_p) y la constante de equilibrio de sorción a DCM (K_{DCM}).

3.3 Analizar la normativa relacionada al reúso directo de ARes tratadas y comparar con los resultados obtenidos.

3.3.1 Tarea 7: Recopilación de antecedentes sobre normativa de reúso directo y utilización de lodos estabilizados para agricultura.

Con el objetivo de comparar la normativa para reúso directo con los resultados obtenidos, fue necesario realizar una recopilación de antecedentes sobre la normativa nacional e internacional.

Además, se estudió la normativa relacionada el reúso de lodos estabilizados en agricultura, en ambos casos con particular atención a los PAHs incluidos en la normativa.

3.3.2 Tarea 8: Comparación sobre el cumplimiento de normativa e impacto de PAHs en reúso directo.

En base a los resultados obtenidos de la modelación conceptual, y con la información sobre la normativa para reúso directo existentes, fue posible realizar una comparación entre ambos. Se consideró un escenario de reúso directo potable y uno de reúso directo no potable.

4. CASO ESTUDIO: PTAS LA FARFANA

El tratamiento de las aguas servidas consiste en la remoción de sustancias o elementos contaminantes en el caudal afluente a la planta con el objetivo de alcanzar la calidad apta para la descarga de las aguas de acuerdo a lo establecido en el Decreto 90/2000 “Norma de Emisión para la Regulación de Contaminantes Asociados a las Descargas de Residuos Líquidos a Aguas Marinas y Continentales Superficiales”.

La planta de tratamiento de aguas servidas La Farfana está ubicada en la calle Camino La Farfana, comuna de Maipú. La planta cuenta con tecnología de lodos activados convencionales, digestión anaeróbica de lodos y deshidratación de lodos en centrífugas, y tiene el objetivo de tratar el 50% de las aguas servidas del Gran Santiago, atendiendo a una población de 3,7 millones de personas (Suez, 2018). La disposición de las aguas tratadas se realiza en el río Mapocho, mientras que la disposición de lodos se realiza en predios agrícolas, en el Centro de Gestión Integral de Biosólidos El Rutil y en rellenos sanitarios (Aguas Andinas, 2019).

Las comunas que tributan a la PTAS corresponden a: Santiago, Providencia, Macul, Ñuñoa, La Reina, San Joaquín, Pedro Aguirre Cerda, Peñalolén, La Granja, Quinta Normal, San Ramón, San Miguel, La Cisterna, y Lo Espejo. Adicionalmente, las comunas que tributan de forma parcial corresponden a: Estación Central, La Florida, Las Condes, Pudahuel y Lo Prado. La PTAS comienza su funcionamiento el año 2004, y cuenta con una vida útil de 24 años, tras los cuales se contemplan ampliaciones para el proyecto (Aguas Andinas, 2001).

Para lograr que el agua cumpla con las condiciones requeridas para su posterior descarga, se llevan a cabo diversos procesos, a los cuales en conjunto se les denomina la línea de agua. Estos procesos, sin embargo, generan subproductos con alto contenido de sólidos, los cuales se denominan lodos. Del mismo modo que el agua, es necesario tratarlos en lo que se denomina la línea de lodos.

En la Figura 4 se presentan los procesos para la línea de aguas y la línea de lodos. Como se puede apreciar, la línea de aguas considera un tratamiento preliminar, tratamiento primario, tratamiento secundario y desinfección. Por otro lado, la línea de lodos considera el espesamiento de lodos primarios y secundarios, una digestión anaeróbica y la deshidratación de lodos digeridos.

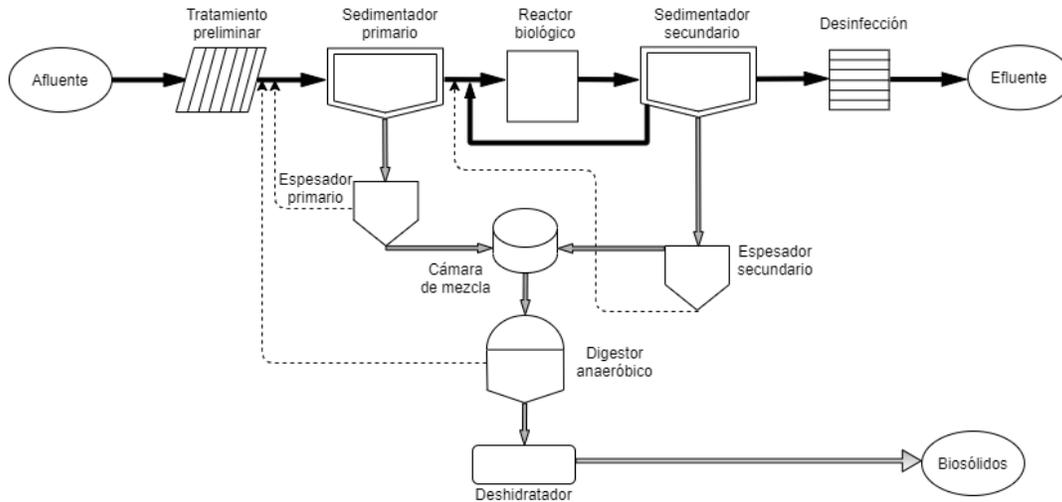


Figura 4: Diagrama de flujo del tren de tratamiento de la planta La Farfana. Nótese que líneas negras representan la línea de aguas, las líneas grises la línea de lodos y las líneas punteadas indican retornos.

4.1 LÍNEA DE AGUAS

4.1.1 Tratamiento preliminar

El tratamiento preliminar consiste en el uso de rejillas para retener el material grueso y un sistema para la remoción de grasas y aceites.

En primer lugar, el agua cruda pasa por una batería de rejillas y luego por otra batería de rejillas con menor separación. Ambas baterías de rejillas cuentan con un sistema mecanizado para la remoción del material retenido, el cual es lavado, compactado y depositado en contenedores cubiertos.

Posteriormente, el agua es conducida a una planta elevadora para ser derivada al sistema de remoción de grasas y aceites. Este consiste en cuatro canales aireados más uno de reserva con un volumen total de 3.780 m^3 . La remoción de las arenas se realiza mediante concentradores de vórtice. El material pesado acumulado en el fondo de los tanques es movido por un tornillo transportador a una tolva en el extremo de cada tanque, para luego ser bombeado a un sistema de separación y lavado de arenas. El aire inyectado en el agua por medio de difusores permite que las grasas y aceites se conglomeren en la superficie de cada desarenador y de esta forma ser removidos por una rasqueta de superficie. Los aceites y grasas removidos en esta etapa son enviados a los digestores, junto con los lodos del tratamiento primario.

4.1.2 Tratamiento primario

El tratamiento primario corresponde a 14 sedimentadores circulares de 45 m de diámetro dispuestos en paralelo, los cuales en conjunto proveen un área de decantación de aproximadamente 18.800 m^2 . Cada uno de los sedimentadores cuenta con equipos barredores de lodos y espumas

superficiales. Los lodos resultantes son enviados al espesamiento primario. La Tabla 8 presenta los parámetros operacionales del tratamiento primario.

Tabla 8: Parámetros de diseño y operacionales de tratamiento primario (AKROS Ing., 2014)

Parámetro	Nombre	Unidad	Valor
V	Volumen clarificador primario	m ³	840.543
Q ⁰	Caudal de entrada	m ³ /d	771.539
Q ^e	Caudal de salida	m ³ /d	732.171
Q ^w	Caudal de lodos primarios	m ³ /d	33.091
Q _{EP} ^r	Caudal de retorno desde espesador primario	m ³ /d	35.804
Q _{DH} ^r	Caudal de retorno desde deshidratador	m ³ /d	5.271
X ⁰	Concentración de SST de entrada	mgSST/L	273
F X ^w	Flujo másico de SST en lodos primarios	kgSST/d	160.864
F X ^e	Flujo másico de SST de salida	kgSST/d	88.215

4.1.3 Tratamiento secundario

El tratamiento secundario corresponde a 16 estanques rectangulares para el proceso de lodos activados convencional, con un volumen total cercano a los 181.000 m³. El efluente de los reactores biológicos es derivado a los sedimentadores secundarios, los cuales son 16 unidades circulares de 50 m de diámetro y 5,5 m de profundidad. Una fracción de los lodos es recirculada a los reactores biológicos, con el objetivo de mantener la concentración de biomasa requerida. El exceso de lodos producidos en la sedimentación secundaria es conducido al espesador secundario.

En la Tabla 9 se presentan los parámetros operacionales y las dimensiones del tratamiento secundario.

Tabla 9: Parámetros de diseño y operacionales del tratamiento secundario (AKROS Ing., 2014)

Parámetro	Nombre	Unidad	Valor
V	Volumen	m ³	180.800
Q _{TS} ⁰	Caudal de entrada a tratamiento secundario	m ³ /d	732.171
Q _{ES} ^r	Caudal de retorno de espesador secundario	m ³ /d	38.010
Q _{TS} ^e	Caudal de salida de tratamiento secundario	m ³ /d	732.171
Q _{TS} ^w	Caudal de lodo secundario de purga	m ³ /d	41
Q _{TS} ^r	Caudal de lodo de recirculación	m ³ /d	701
S _{TS} ⁰	Concentración de sustrato de entrada	mgDQO/L	535
SRT	Tiempo de retención de sólidos	d	1,8
F SST ^w	Flujo de SST en descarte de lodos	kgSST/d	116.789

4.1.4 Desinfección

El efluente de los clarificadores secundarios es posteriormente desinfectado utilizando cloro gaseoso, para lo cual se realiza una mezcla rápida con cloro y luego se deriva a unos estanques de contacto.

4.2 LÍNEA DE LODOS

4.2.1 Espesamiento de lodos primarios y secundarios

Los lodos extraídos de los clarificadores primarios son dirigidos a la etapa de tamizado y espesamiento gravitacional. Las espumas recuperadas de los clarificadores primarios son dirigidas hacia tamizado y desnatado. Por otro lado, el exceso de lodos de los clarificadores secundarios es espesado mediante el sistema de flotación.

En las Tabla 10 y Tabla 11 se presentan los parámetros operacionales para la etapa de espesado primario y para la etapa de espesado secundario, respectivamente.

Tabla 10: Parámetros de diseño y operacionales de espesador primario (AKROS Ing., 2014).

Parámetro	Nombre	Unidad	Valor
Q_{EP}^0	Caudal de lodo primario de entrada	m ³ /d	33.109
Q_{EP}^r	Caudal de retorno de sobrenadante	m ³ /d	30.479
Q_{EP}^e	Caudal de lodo primario espesado de salida a cámara de mezcla	m ³ /d	2.406
X_{EP}^0	Concentración de SST en lodo de entrada	gSST/L	4
X_{EP}^e	Concentración de SST en lodo espesado	gSST/L	56
X_{EP}^r	Concentración de SST en retorno de sobrenadante	gSST/L	0,4

Tabla 11: Parámetros de diseño y operacionales de espesador secundario (AKROS Ing., 2014).

Parámetro	Nombre	Unidad	Valor
Q_{ES}^0	Caudal de lodo secundario de entrada	m ³ /d	40.877
Q_{ES}^r	Caudal de retorno de sobrenadante	m ³ /d	38.009
Q_{ES}^e	Caudal de lodo secundario espesado de salida a cámara de mezcla	m ³ /d	2.865
X_{ES}^0	Concentración de SST en lodo de entrada	gSST/L	2,9
X_{ES}^r	Concentración de SST en retorno de sobrenadante	gSST/L	0,6
X_{ES}^e	Concentración de SST en lodo espesado secundario	gSST/L	35

4.2.2 Digestión anaeróbica

La estabilización de los lodos se lleva a cabo mediante digestión anaeróbica. Para este proceso se cuenta con 8 digestores de concreto de 35 m de diámetro y 4 estanques de almacenamiento de lodos digeridos.

Los lodos primarios y secundarios, las espumas y material flotante removido de los sedimentadores son bombeados a los digestores anaeróbicos donde son neutralizados física, química y biológicamente. El objetivo de esto es que los lodos tengan un potencial reducido de reactividad química y biológica en su lugar de disposición final.

Los lodos estabilizados son conducidos gravitacionalmente a los estanques de almacenamiento. Los parámetros operacionales de la digestión anaeróbica se presentan en la Tabla 12.

Tabla 12: Parámetros de diseño y operacionales para la digestión anaeróbica (AKROS Ing., 2014).

Parámetro	Nombre	Unidad	Valor
Q_{DA}^0	Caudal de lodo de entrada a digestión anaeróbica	m ³ /d	5.059
Q_{DA}^e	Caudal de lodo digerido	m ³ /d	5.059
V_{DA}	Volumen de digestores	m ³	116.164
TRH	Tiempo de retención hidráulica	d	23,5
$F_{SSV_{DA}^0}$	Flujo de SSV en lodo mezclado de entrada al digestor	kgSSV/d	175.080
$F_{SSV_{DA}^e}$	Flujo de SST en lodo mezclado de entrada al digestor	kgSST/d	229.393
$F_{SST_{DA}^e}$	Flujo de SST en lodo digerido	kgSST/d	130.027
%SSV	Rendimiento en eliminación de SSV (reducción de SSV)	-	45

4.2.3 Deshidratación de los lodos

Los lodos digeridos pasan por dos procesos de deshidratación: mecánica y en canchas de secado.

El secado mecánico se realiza mediante centrifugas, donde la humedad de los lodos se reduce desde un 95% a un 75% aproximadamente. Para la deshidratación se requiere la adición de acondicionadores químicos con el objetivo de optimizar el proceso. Se utiliza un polielectrolito catiónico de alto peso molecular, un polímero orgánico.

El agua recuperada en este proceso es recirculada para ser tratado junto al afluente de la PTAS. Posteriormente, se realiza un proceso de deshidratación en canchas de secado, permitiendo así humedades del orden de 35% mediante evaporación al aire libre y drenado natural. Los parámetros operacionales se presentan en la Tabla 13.

Tabla 13: Parámetros de diseño y operacionales de deshidratador mecánico (AKROS Ing., 2014).

Parámetro	Nombre	Unidad	Valor
Q_{DH}^0	Caudal de lodo de entrada	m ³ /d	5.242
Q_{DH}^r	Caudal de retorno de sobrenadante a tratamiento secundario	m ³ /d	5.271
Q_{DH}^e	Caudal de lodo deshidratado de salida	m ³ /d	463
$F X^0$	Flujo másico de SST en lodo de entrada	kg/d	229.393
$F X^r$	Flujo másico de SST en retorno de sobrenadante a secundario	kg/d	6.894
$F X^e$	Flujo másico de SST en lodo de salida	kg/d	130.027

5. MODELO CONCEPTUAL EN LA PTAS LA FARFANA

El modelo conceptual desarrollado para estimar la movilidad de PAHs en la PTAS La Farfana consiste en un sistema de ecuaciones de balance de masa para de cada una de las etapas de tratamiento. Para cada una de las etapas de tratamiento se utilizaron modelos conceptuales desarrollados por distintos autores, de acuerdo a lo presentado en la Tabla 14. De esta forma se acoplan los distintos modelos de las etapas unitarias de tratamiento para representar la presencia y remoción de estos en la línea de agua y la línea de lodos conjuntamente. La realización del modelo se llevó a cabo utilizando Excel de Microsoft Office y se evaluó para el naftaleno y benzo(a)pireno.

La selección de los modelos conceptuales se realizó a partir del trabajo realizado por Provoste (2020). Sin embargo, para implementarlos al estudio de movilidad de PAHs en la PTAS La Farfana fue necesario en primer lugar verificar la factibilidad de la aplicación de en relación a los supuestos de cada modelo. De esta forma, los modelos utilizados para la modelación de la línea de agua y la de lodos se presentan en la Tabla 14.

Se despreció la remoción de PAHs tanto en la etapa de pretratamiento como en la de desinfección. De acuerdo a lo reportado por distintos autores la remoción de microcontaminantes en la etapa de pretratamiento es muy baja, por lo que es posible despreciarla en términos de la modelación (Birkett & Lester, 2003; Meakins et al., 1994). En base a muestreo experimental, Manoli et al. (1999) reporta una remoción por cloración despreciable. En el caso de la línea de lodos, se modelan todas las etapas del tratamiento.

En la Figura 5 se presentan las etapas de tratamiento modeladas.

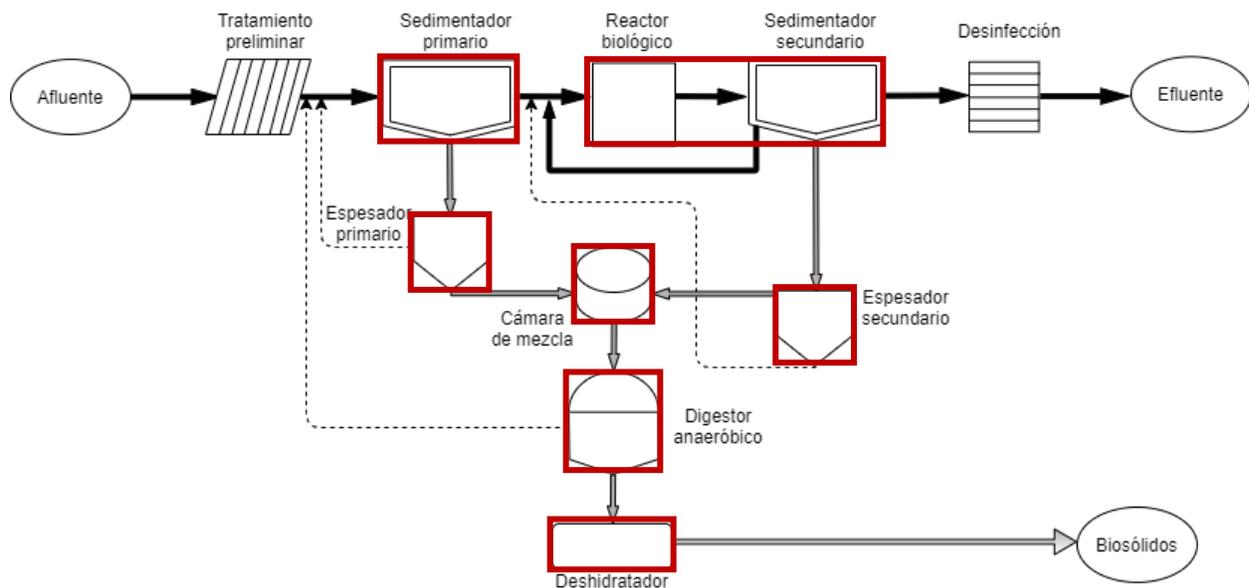


Figura 5: Etapas del sistema de tratamiento incluidas en el modelo

Tabla 14: Modelos utilizados para la línea de agua y la línea de lodos

Línea de tratamiento	Etapas de tratamiento	Operación	Modelo	Referencia
Línea de aguas	Pretratamiento	Desbaste de sólidos	No considerada	Birkett & Lester (2003)
		Desarenador		
		Desengrasador		
	Tratamiento primario	Sedimentación gravitacional	Modelo estacionario de concentración para evaluar el destino de compuestos hidrofóbicos y volátiles en lodos activados	Lee et al. (1998)
Tratamiento secundario	Lodos activados convencionales	ASM-X (Activated Sludge Model for Xenobiotics) Modelo estacionario de concentración para evaluar el destino de compuestos hidrofóbicos y volátiles en lodos activados	Plosz et al. (2010, 2012) Lee et al. (1998)	
Desinfección	Cloración	No considerada	Manoli et al. (1999)	
Línea de lodos	Espesado	Espesador primario gravitacional	Modelo de tres componentes para sorción de microcontaminantes en lodos	Barret et al. (2010)
		Espesador secundario flotación		
		Cámara de mezcla		
	Estabilización	Digestión anaeróbica	Modelo de cuatro componentes para biodisponibilidad y cometabolismo de microcontaminantes en digestión anaeróbica	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)
Deshidratación	Centrífugas	Modelo de tres componentes para sorción de microcontaminantes en lodos	Barret et al. (2010)	

De forma general, cada uno de los ‘submodelos’ se resuelve realizando un balance de masa en el tanque en cuestión para cada una de las fases del PAH presente, por lo que la ecuación general corresponde a:

$$V \cdot \frac{\partial C}{\partial t} = F_{in} - F_{out} \pm \sum r_i \quad (1)$$

Donde:

V : Volumen del estanque [L]

C : Concentración de PAH en el estanque en la fase modelada [ng/L]

F_{in} : Flujo másico de entrada al proceso [ng/d]

F_{out} : Flujo másico de salida del proceso [ng/d]

r_i : Tasa de consumo o producción de PAH en la fase modelada en el proceso [ng/d]

Es importante notar que bajo esta formulación hay ciertos supuestos considerados. El primer supuesto, y el cual se aplica para todos los procesos, es que existe una condición de mezcla completa en los estanques, por lo que la concentración disuelta en el estanque será la misma que la concentración efluente de este. Además, la modelación se realiza bajo régimen estacionario, por lo cual la ecuación 1 se reescribe como:

$$0 = F_{in} - F_{out} \pm \sum r_i \quad (2)$$

En cada una de las etapas de tratamiento, se considera la concentración total del contaminante como:

$$C_T = C_d + C_{DCM} + C_{part} \quad (3)$$

Donde:

C_T : concentración total de PAHs [ng/L]

C_d : concentración disuelta libre [ng/L]

C_{DCM} : concentración adsorbida a DCM [ng/L]

C_{part} : concentración adsorbida a material particulado [ng/L]

En el caso de la línea de aguas, la concentración disuelta contempla las fases disuelta libre y la adsorbida a DCM de forma conjunta.

Adicionalmente, la determinación de la eficiencia de remoción de cada una de las etapas de tratamiento se considera la siguiente ecuación:

$$R\% = \frac{(F_{in} - F_{out})}{F_{in}} \cdot 100 \quad (4)$$

Donde:

$R\%$: eficiencia de remoción (o acumulación)

F_{in} : flujo másico de entrada a la etapa de tratamiento

F_{out} : flujo másico de salida a la etapa de tratamiento

Para la descripción del modelo se considera la notación presentada en la Tabla 15 a continuación. Los subíndices se utilizan como identificador de la etapa de tratamiento, mientras que los superíndices se utilizan para identificar la dirección del flujo.

Tabla 15: Notación de subíndices y superíndices

Subíndice	Etapas de tratamiento
TP	Tratamiento primario
TS	Tratamiento secundario
EP	Espesador primario
ES	Espesador secundario
DA	Digestor anaeróbico
DH	Deshidratador
Superíndice	
0	Afluente
e	Efluente
w	Descarte
r	Retorno

Los modelos para cada etapa de tratamiento se resolvieron utilizando la herramienta *solver* de Excel. Para cada una de las fases involucradas en el submodelo se resuelven las ecuaciones de balance de masa de forma simultánea. A continuación se presentan las principales ecuaciones, supuestos y consideraciones adoptadas en cada etapa de tratamiento, los cuales se aplican para el naftaleno y el benzo(a)pireno. El detalle de la formulación de los modelos se encuentra en el Anexo B para la línea de agua y en el Anexo C para la línea de lodos. Adicionalmente, los valores de las constantes cinéticas utilizadas en cada una de las etapas de tratamiento se encuentran en el Anexo D.

5.1 TRATAMIENTO PRIMARIO

El modelo utilizado para el tratamiento primario se basó en el modelo desarrollado por Lee et al. (1998) para compuestos hidrofóbicos y volátiles en régimen permanente.

El objetivo del modelo desarrollado por Lee et al. es estudiar la movilidad de contaminantes hidrofóbicos y volátiles en el tratamiento primario el cual consiste en un sedimentador gravitacional y en el tratamiento secundario, conformado por un estanque de lodos activados seguido de un sedimentador secundario. El modelo contempla distintos procesos de remoción, incluyendo: adsorción, biodegradación de las fases disuelta y adsorbida y volatilización. Dado que este modelo será utilizado únicamente para el tratamiento primario se consideran los siguientes procesos: advección, sorción y volatilización. A continuación, se presentan los supuestos y consideraciones adoptadas para la realización del modelo.

5.1.1 Supuestos y consideraciones

- El modelo considera el contaminante en la fase disuelta, fase adsorbida y gaseosa. (Lee, Rittmann, Shi, & McAvoy, 1998)
- Se considera una condición de equilibrio entre la fase líquida y la adsorbida (Lee et al., 1998; Dionisi et al., 2006). Se utiliza un modelo lineal para caracterizar la

adsorción, por lo que la relación entre ambas fases esta determinada por el coeficiente de partición sólido-líquido (K_d) (Lee et al., 1998; Pomies et al., 2013).

- A pesar de que el modelo de Lee et al. (1998) considera la adsorción a los sólidos suspendidos volátiles presentes en el reactor, el presente modelo considera la adsorción a los sólidos suspendidos totales, lo cual está respaldado ampliamente por la literatura (Pomies et al., 2013; Liu et al., 2011).
- La volatilización ocurre únicamente en la fase líquida. La fase adsorbida no sufre transformaciones (Lee et al., 1998).
- La concentración adsorbida afluyente a la PTAS es nula. Aunque la evidencia sugiere que existe una fase adsorbida afluyente a las PTAS, este supuesto se considera para la aplicación del modelo.

5.1.2 Formulación del modelo

Una vez que se han adoptado los supuestos mencionados, se tienen las siguientes ecuaciones de balance de masa para la fase disuelta y la fase adsorbida.

1. Balance de masa fase disuelta:

$$0 = R_{adv,dis} + R_{sorp,dis} + R_{vol,dis} \quad (5)$$

Donde:

$R_{adv,dis}$: tasa de advección fase disuelta [ng/d]

$R_{sorp,dis}$: tasa de sorción a material particulado [ng/d]

$R_{vol,dis}$: tasa de volatilización fase disuelta [ng/d]

2. Balance de masa fase adsorbida:

$$0 = R_{adv,p} + R_{sorp,p} \quad (6)$$

Donde:

$R_{adv,p}$: tasa de advección fase particulada [ng/d]

$R_{sorp,p}$: tasa de sorción a material particulado [ng/d]

5.2 TRATAMIENTO SECUNDARIO

La movilidad de PAHs en el tratamiento secundario se determina en base al modelo ASM-X desarrollado por Plosz et al. (2012), complementado con el modelo de Lee et al. (1998) para compuestos hidrofóbicos y volátiles en régimen permanente. Para la modelación de la biomasa en el reactor se utiliza el modelo ASSM (Activated Sludge Simple Model) por Nanning et al. (2008).

El modelo ASM-X reconoce tres fases del contaminante: disuelta libre, adsorbida a DCM (dissolved and colloidal matter) y adsorbida a material particulado. Sin embargo, en la práctica poder medir la concentración disuelta libre y adsorbida a DCM resulta complejo, por lo que el ASM-X considera la concentración C_{LI} la cual incluye la fase disuelta libre y adsorbida a DCM conjuntamente. El término C_{SL} utilizado en el modelo corresponde a la fracción del contaminante adsorbida a los lodos secundarios. En este sentido, el modelo original no considera la fracción que se encuentra adsorbida a material particulado en el efluente. Adicionalmente, el modelo considera la existencia de compuestos retransformables los cuales son transformados al compuesto en cuestión mediante distintos mecanismos, como la desconjugación de metabolitos, formación abiótica o biotransformación de otros compuestos. Es importante notar que no se considera la adsorción de estos compuestos conjugados. Los procesos de degradación, generación y movilidad considerados por el ASM-X son: sorción, desorción, biodegradación mediante cometabolismo y formación del contaminante mediante retransformación.

Debido a que el modelo ASM-X no considera el efecto de la volatilización en la remoción de xenobióticos, el presente modelo es complementado con el modelo de Lee et al. (1998) el cual considera la volatilización superficial y por aireación en el tratamiento secundario.

Los procesos de degradación y movilidad considerados son: sorción, biodegradación mediante cometabolismo y volatilización superficial y por aireación. Al igual que para el tratamiento primario, a continuación se presentan los supuestos y consideraciones adoptadas para la aplicación del modelo y luego las ecuaciones utilizadas.

5.2.1 Supuestos y consideraciones

- Se desprecia la fase retransformable C_{CJ} . La degradación biológica de PAHs ocurre mediante la oxidación del anillo aromático seguido de degradación a metabolitos y dióxido de carbono, y no se reconoce la reacción de forma inversa (Bamforth et al., 2005).
- Aunque el modelo es en un principio dinámico, en este caso se considera el modelo bajo régimen permanente.
- Se modelan los procesos de adsorción y biodegradación en condiciones aeróbicas y anóxicas, además de la advección (Plosz et al., 2010).
- La concentración adsorbida corresponde a aquella adsorbida a los lodos secundarios. Para cuantificar la fase adsorbida en el efluente se considera una condición de equilibrio sólido-líquido, siguiendo una isoterma lineal caracterizada por K_d (Plosz et al., 2010; Dionisi et al., 2006). El proceso de sorción ocurre considerablemente en menor tiempo que el tiempo de retención de sólidos, por lo que es posible suponer que ocurre de forma instantánea en el reactor (Dionisi et al., 2006).
- Al igual que para el tratamiento primario, se considera la adsorción a los sólidos suspendidos totales (Liu et al., 2011).
- El modelo original de Plosz et al. (2010) considera la degradación biológica como metabolismo, incluyendo el efecto de la inhibición competitiva. Debido a que las concentraciones de PAHs en PTAS son muy bajas, la biodegradación de estos no genera crecimiento de biomasa, por lo que la degradación biológica se considera que ocurre como

cometabolismo (Delgadillo-Mirquez et al., 2011). De esta forma, se utilizan ecuaciones para la tasa de biodegradación planteadas por Plosz et al. en estudios posteriores (2012).

- La volatilización ocurre únicamente en la fase líquida. La fase adsorbida no sufre transformaciones (Lee et al., 1998).
- Se considera la volatilización superficial en el reactor y en el sedimentador secundario. La volatilización por aireación se considera únicamente en el reactor (Lee et al., 1998).

5.2.2 Formulación del modelo

1. Balance de masa fase disuelta

$$0 = r_{adv} + r_{sor,ox} + r_{bio,ox} + r_{sor,ax} + r_{bio,ax} + r_{vol,sup} + r_{vol,air} \quad (7)$$

Donde:

r_{adv} : tasa de advección de fase disuelta [ng/d]

r_{desor} : tasa de desorción [ng/d]

$r_{sor,ox}$: tasa de sorción en condición aeróbica [ng/d]

$r_{bio,ox}$: tasa de biodegradación en condición aeróbica [ng/d]

$r_{sor,ax}$: tasa de sorción en condición anóxica [ng/d]

$r_{bio,ax}$: tasa de biodegradación en condición anóxica [ng/d]

$r_{vol,sup}$: tasa de volatilización superficial [ng/d]

$r_{vol,air}$: tasa de volatilización por aireación [ng/d]

2. Balance de masa fase adsorbida

$$0 = r_{adv} + r_{sor,ox} + r_{sor,ax} \quad (8)$$

Donde:

r_{adv} : tasa de advección de fase disuelta [ng/d]

r_{desor} : tasa de desorción [ng/d]

$r_{sor,ox}$: tasa de sorción en condición aeróbica [ng/d]

$r_{sor,ax}$: tasa de sorción en condición anóxica [ng/d]

5.3 ESPESADORES, CÁMARA DE MEZCLA Y DESHIDRATADOR

En el caso del espesador primario, espesador secundario, cámara de mezcla y deshidratador, la modelación se realiza en base al modelo de tres componentes para sorción de microcontaminantes en lodos propuesto por Barret et al. (2010d).

Este modelo supone que los microcontaminantes orgánicos se pueden encontrar en 3 fases: disuelta libre (C_f , ng/L), adsorbidos a material particulado (C_p , ng/g_{COD-P}) y adsorbidos a DCM (C_{DCM} , ng/g_{COD-DCM}).

5.3.1 Supuestos y consideraciones

- No se consideran procesos químicos ni bioquímicos para los PAHs en estas etapas, por lo cual el único proceso considerado es el de advección. El proceso de espesado de lodos se realiza mediante procesos físicos, y no se adicionan químicos. Además, de acuerdo con la literatura estos no presentan alteraciones en los PAHs (Mailler et al., 2016).
- Para poder relacionar las concentraciones afluentes provenientes del tratamiento primario y del secundario, se considera que la fase disuelta de estas etapas corresponde a la suma de la concentración disuelta libre y la concentración adsorbida a DCM (Barret et al., 2010d).
- No existe interacción entre la fase adsorbida a DCM y la fase adsorbida a MP (Barret et al., 2010d).
- El proceso de adsorción ocurre sobre los sólidos suspendidos totales (Liu et al., 2011).

5.3.2 Formulación del modelo de espesador primario

1. Balance de masa fracción disuelta libre

$$\left(C_{dis,EP}^0 \cdot Q_{EP}^0 - C_{dis,EP} \cdot Q_{EP}^e - C_{dis,EP} \cdot Q_{EP}^r \right) \cdot 1000 = 0 \quad (9)$$

Donde:

$C_{dis,EP}^0$: concentración disuelta libre de entrada a espesador primario [ng/L]

Q_{EP}^0 : caudal afluente a espesador primario [m³/d]

$C_{dis,EP}$: concentración disuelta libre en tanque (y efluente) [ng/L]

Q_{EP}^e : caudal efluente a digestor anaeróbico [m³/d]

Q_{EP}^r : caudal retornado a tratamiento primario [m³/d]

2. Balance de masa fracción adsorbida a DCM

$$\left(c_{DCM,EP}^0 \cdot DCM_{EP}^0 \cdot Q_{EP}^0 - c_{DCM,EP} \cdot DCM_{EP}^e \cdot Q_{EP}^e - c_{DCM,EP} \cdot DCM_{EP}^r \cdot Q_{EP}^r \right) \cdot 1000 = 0 \quad (10)$$

Donde:

$c_{DCM,EP}^0$: concentración adsorbida a DCM de entrada a espesador primario [ng/gDCM]

DCM_{EP}^0 : concentración de DCM de entrada a espesador primario [gDCM/L]

Q_{EP}^0 : caudal afluente a espesador primario [m³/d]

$c_{DCM,EP}$: concentración disuelta libre en tanque (y efluente) [ng/gDCM]

DCM_{EP}^e : concentración de DCM efluente a digestor anaeróbico [gDCM/L]

Q_{EP}^e : caudal efluente a digestor anaeróbico [m³/d]

DCM_{EP}^r : concentración de DCM retornada a tratamiento primario [gDCM/L]

Q_{EP}^r : caudal retornado a tratamiento primario [m³/d]

3. Balance de masa fracción adsorbida a material particulado

$$\left(c_{p,EP}^0 \cdot X_{EP}^0 \cdot Q_{EP}^0 - c_{p,EP} \cdot X_{EP}^e \cdot Q_{EP}^e - c_{p,EP} \cdot X_{EP}^r \cdot Q_{EP}^r \right) \cdot 1000 = 0 \quad (11)$$

Donde:

$c_{p,EP}^0$: concentración adsorbida a DCM de entrada a espesador primario [ng/gX]

X_{EP}^0 : concentración de SST de entrada a espesador primario [gSST/L]

Q_{EP}^0 : caudal afluyente a espesador primario [m³/d]

$c_{p,EP}$: concentración disuelta libre en tanque (y efluente) [ng/gX]

X_{EP}^e : concentración de SST efluente a digestor anaeróbico [gSST/L]

Q_{EP}^e : caudal efluente a digestor anaeróbico [m³/d]

X_{EP}^r : concentración de SST retornada a tratamiento primario [gSST/L]

Q_{EP}^r : caudal retornado a tratamiento primario [m³/d]

5.3.3 Formulación del modelo de espesador secundario

1. Balance de masa disuelta libre

$$\left(C_{dis}^0 \cdot Q_{ES}^0 - C_{dis} \cdot Q_{ES}^e - C_{dis} \cdot Q_{ES}^r \right) \cdot 1000 = 0 \quad (12)$$

Donde:

C_{dis}^0 : concentración disuelta libre de entrada a espesador secundario [ng/L]

Q_{ES}^0 : caudal afluyente a espesador secundario [m³/d]

C_{dis} : concentración disuelta libre en tanque (y efluente) [ng/L]

Q_{ES}^e : caudal efluente a digestor anaeróbico [m³/d]

Q_{EP}^r : caudal retornado a tratamiento secundario [m³/d]

2. Balance de masa fracción adsorbida a DCM

$$\left(c_{DCM}^0 \cdot DCM_{ES}^0 \cdot Q_{ES}^0 - c_{DCM,ES} \cdot DCM_{ES}^e \cdot Q_{ES}^e - c_{DCM,ES} \cdot DCM_{ES}^r \cdot Q_{ES}^r \right) \cdot 1000 = 0 \quad (13)$$

Donde:

$c_{DCM,ES}^0$: concentración adsorbida a DCM de entrada a espesador secundario [ng/gDCM]

DCM_{ES}^0 : concentración de DCM de entrada a espesador secundario [gDCM/L]

Q_{ES}^0 : caudal afluyente a espesador secundario [m³/d]

$c_{DCM,ES}$: concentración disuelta libre en tanque (y efluente) [ng/gDCM]

DCM_{ES}^e : concentración de DCM efluente a digestor anaeróbico [gDCM/L]

Q_{EP}^e : caudal efluente a digestor anaeróbico [m³/d]

DCM_{ES}^r : concentración de DCM retornada a tratamiento secundario [gDCM/L]

Q_{ES}^r : caudal retornado a tratamiento primario [m³/d]

3. Balance de masa fracción adsorbida a material particulado

$$\left(c_{p,ES}^0 \cdot X_{ES}^0 \cdot Q_{ES}^0 - c_{p,ES} \cdot X_{ES}^e \cdot Q_{ES}^e - c_{p,ES} \cdot X_{ES}^r \cdot Q_{ES}^r \right) \cdot 1000 = 0 \quad (14)$$

Donde:

$c_{p,ES}^0$: concentración adsorbida a DCM de entrada a espesador secundario [ng/gX]

X_{ES}^0 : concentración de SST de entrada a espesador secundario [gSST/L]

Q_{ES}^0 : caudal afluyente a espesador secundario [m³/d]

$c_{p,ES}$: concentración disuelta libre en tanque (y efluente) [ng/gX]

X_{ES}^e : concentración de SST efluente a digestor anaeróbico [gSST/L]

Q_{ES}^e : caudal efluente a digestor anaeróbico [m³/d]

X_{ES}^r : concentración de SST retornada a tratamiento secundario [gSST/L]

Q_{ES}^r : caudal retornado a tratamiento secundario [m³/d]

5.3.4 Formulación del modelo de deshidratador

1. Balance de masa fracción disuelta libre

$$\left(C_{dis,DH}^0 \cdot Q_{DH}^0 - C_{dis,DH} \cdot Q_{DH}^e - C_{dis,DH} \cdot Q_{DH}^r \right) \cdot 1000 = 0 \quad (15)$$

Donde:

$C_{dis,DH}^0$: concentración disuelta libre de entrada a deshidratador [ng/L]

Q_{DH}^0 : caudal afluyente a deshidratador [m³/d]

$C_{dis,DH}$: concentración disuelta libre en tanque (y efluente) [ng/L]

Q_{DH}^e : caudal efluente [m³/d]

Q_{DH}^r : caudal retornado a tratamiento primario [m³/d]

2. Balance de masa fracción adsorbida a DCM

$$\left(c_{DCM,DH}^0 \cdot DCM_{DH}^0 \cdot Q_{DH}^0 - c_{DCM,DH} \cdot DCM_{DH}^e \cdot Q_{DH}^e - c_{DCM,DH} \cdot DCM_{DH}^r \cdot Q_{DH}^r \right) \cdot 1000 = 0 \quad (16)$$

Donde:

$c_{DCM,DH}^0$: concentración adsorbida a DCM de entrada a deshidratador [ng/gDCM]

DCM_{DH}^0 : concentración de DCM de entrada a deshidratador [gDCM/L]

Q_{DH}^0 : caudal afluyente a deshidratador [m³/d]

$c_{DCM,DH}$: concentración disuelta libre en tanque [ng/gDCM]

DCM_{DH}^e : concentración de DCM efluente [gDCM/L]

Q_{DH}^e : caudal efluente [m³/d]

DCM_{DH}^r : concentración de DCM retornada a tratamiento primario [gDCM/L]

Q_{DH}^r : caudal retornado a tratamiento primario [m³/d]

3. Balance de masa fracción adsorbida a material particulado

$$\left(c_{p,DH}^0 \cdot X_{DH}^0 \cdot Q_{DH}^0 - c_{p,DH} \cdot X_{DH}^e \cdot Q_{DH}^e - c_{p,DH} \cdot X_{DH}^r \cdot Q_{DH}^r \right) \cdot 1000 = 0 \quad (17)$$

Donde:

$c_{p,DH}^0$: concentración adsorbida a DCM de entrada a deshidratador [ng/gX]

X_{DH}^0 : concentración de SST de entrada a deshidratador [gSST/L]

Q_{DH}^0 : caudal afluente a deshidratador [m³/d]

$c_{p,DH}$: concentración disuelta libre en tanque (y efluente) [ng/gX]

X_{DH}^e : concentración de SST efluente [gSST/L]

Q_{DH}^e : caudal efluente [m³/d]

X_{DH}^r : concentración de SST retornada a tratamiento primario [gSST/L]

Q_{DH}^r : caudal retornado a tratamiento primario [m³/d]

5.4 DIGESTIÓN ANAERÓBICA

La modelación de la remoción en la digestión anaeróbica se realizó utilizando el modelo de cuatro componentes para biodisponibilidad y cometabolismo de microcontaminantes en digestión anaeróbica desarrollado por Delgadillo-Mirquez et al. (2011).

El modelo asume que los microcontaminantes orgánicos se pueden encontrar de forma disuelta libre (C_f , µg/L), adsorbidos a MP (c_p , µg/gCOD-P), adsorbidos a DCM (c_{DCM} , µg/gCOD-DCM) y en la fase gaseosa (C_g , µg/L).

El modelo original consta de siete componentes y nueve procesos, incorporando los procesos de degradación del microcontaminante abióticos y bióticos además del desarrollo de la biomasa, vale decir, el crecimiento y decaimiento de esta e hidrólisis del sustrato.

5.4.1 Supuestos y consideraciones:

- El modelo incorpora de forma simultánea procesos sobre el sustrato soluble, el sustrato particulado y el contaminante en las fases mencionadas. Para el sustrato soluble se considera su consumo para crecimiento de biomasa e hidrólisis, mientras que para el sustrato considera la hidrólisis y decaimiento de biomasa. Para los PAHs se considera los procesos de: advección, sorción a partículas, sorción a DCM, biodegradación de la fase disuelta libre y biodegradación de la fase adsorbida a DCM (Delgadillo-Mirquez et al., 2011).
- La modelación de la biomasa se excluye; en su lugar, se impone una reducción de los sólidos suspendidos volátiles de un 45% obtenida de AKROS Ing. (2014).
- Fases biodisponibles corresponden a la disuelta libre y adsorbida a DCM (Delgadillo-Mirquez et al., 2011).

- La biodegradación del sustrato de crecimiento se modela como un proceso de dos pasos: hidrólisis del sustrato particulado y posteriormente la biodegradación a biogás (Delgadillo-Mirquez et al., 2011).
- Se considera que la biodegradación de los PAHs ocurre por cometabolismo, pero no se incluyen el efecto de inhibición competitiva entre el sustrato de crecimiento y de no crecimiento (Delgadillo-Mirquez et al., 2011).
- El proceso adsorción al MP y al DCM se modela como una reacción de primer orden (Delgadillo-Mirquez et al., 2011).
- No existe interacción entre la fase adsorbida a DCM y la adsorbida a material particulado. El proceso de adsorción ocurre en ambos casos desde la fase disuelta libre (Delgadillo-Mirquez et al., 2011).
- Se considera que la fase gaseosa afluyente es nula para la aplicación del modelo (Delgadillo-Mirquez et al., 2011).

5.4.2 Formulación del modelo

1. Balance de masa de biomasa

$$Q_{DA}^0 \cdot X_{DA}^0 \cdot 1000 - Q_{DA}^e \cdot X \cdot 1000 + (r_{crec.bio} - r_{dec}) \cdot V_{DA} \cdot 1000 = 0 \quad (18)$$

Donde:

Q_{DA}^0 : caudal afluyente a digestión anaeróbica [m^3/d]

X_{DA}^0 : concentración de biomasa afluyente a digestión anaeróbica [gCOD/L]

Q_{DA}^e : caudal efluyente a digestión anaeróbica [m^3/d]

X : concentración de biomasa en digestor (y efluyente) [gCOD/L]

$r_{crec.bio}$: tasa de crecimiento de biomasa [gCOD/L*d]

V_{DA} : volumen digestor anaeróbico [m^3]

2. Balance de masa de sustrato soluble

$$Q_{DA}^0 \cdot S_{DA}^0 \cdot 1000 - Q_{DA}^e \cdot S_s \cdot 1000 + \left(-\frac{1}{Y} r_{crec.bio} + r_{hidrolisis} \right) \cdot V_{DA} \cdot 1000 = 0 \quad (19)$$

Donde:

Q_{DA}^0 : caudal afluyente a digestión anaeróbica [m^3/d]

S_{DA}^0 : concentración de sustrato soluble afluyente a digestión anaeróbica [gCOD/L]

Q_{DA}^e : caudal efluyente a digestión anaeróbica [m^3/d]

S_s : concentración de sustrato soluble en digestor (y efluyente) [gCOD/L]

$r_{crec.bio}$: tasa de crecimiento de biomasa [gCOD/L*d]

$r_{hidrolisis}$: tasa de hidrólisis de sustrato particulado [gCOD/L*d]

Y : yield [gCOD-X/gCOD-Ss]

V_{DA} : volumen digestor anaeróbico [m^3]

3. Balance de masa de sustrato particulado

$$Q_{DA}^0 \cdot S_{p,DA}^0 \cdot 1000 - Q_{DA}^e \cdot S_p \cdot 1000 + (r_{dec} - r_{hidrotisis}) \cdot V_{DA} \cdot 1000 = 0 \quad (20)$$

Donde:

Q_{DA}^0 : caudal afluente a digestión anaeróbica [m^3/d]

$S_{p,DA}^0$: concentración de sustrato particulado afluente a digestión anaeróbica [gCOD/L]

Q_{DA}^e : caudal efluente de digestión anaeróbica [m^3/d]

S_p : concentración de sustrato particulado en digestor (y efluente) [gCOD/L]

r_{dec} : tasa de decaimiento de biomasa [gCOD/L*d]

$r_{hidrotisis}$: tasa de hidrólisis de sustrato particulado [gCOD/L*d]

V_{DA} : volumen digestor anaeróbico [m^3]

4. Balance de masa de PAH en fase gaseosa

$$Q_{DA}^0 \cdot C_g^0 \cdot 1000 - Q_{DA}^e \cdot C_g \cdot 1000 + r_{vol} \cdot V_{DA} \cdot 1000 = 0 \quad (21)$$

Donde:

Q_{DA}^0 : caudal afluente a digestión anaeróbica [m^3/d]

C_g^0 : concentración de PAH en fase gaseosa afluente a digestión anaeróbica [$\mu g/L$]

Q_{DA}^e : caudal efluente de digestión anaeróbica [m^3/d]

C_g : concentración de PAH en fase gaseosa en digestor (y efluente) [$\mu g/L$]

r_{vol} : tasa de volatilización de PAH [$\mu g /L*d$]

V_{DA} : volumen digestor anaeróbico [m^3]

5. Balance de masa de PAH en fase particulada

$$Q_{DA}^0 \cdot C_p^0 \cdot 1000 - Q_{DA}^e \cdot C_p \cdot 1000 + r_{sorp,p} \cdot V_{DA} \cdot 1000 = 0 \quad (22)$$

Donde:

Q_{DA}^0 : caudal afluente a digestión anaeróbica [m^3/d]

C_p^0 : concentración de PAH en fase particulada afluente a digestión anaeróbica [$\mu g/L$]

Q_{DA}^e : caudal efluente de digestión anaeróbica [m^3/d]

C_p : concentración de PAH en fase particulada en digestor (y efluente) [$\mu g /L$]

$r_{sorp,p}$: tasa de adsorción a material particulado [$\mu g /L*d$]

V_{DA} : volumen digestor anaeróbico [m^3]

6. Balance de masa de PAH en fase adsorbida a DCM

$$Q_{DA}^0 \cdot C_{DCM}^0 \cdot 1000 - Q_{DA}^e \cdot C_{DCM} \cdot 1000 + (r_{sorp,DCM} - r_{bio,DCM}) \cdot V_{DA} \cdot 1000 = 0 \quad (23)$$

Donde:

Q_{DA}^0 : caudal afluente a digestión anaeróbica [m^3/d]
 C_{DCM}^0 : concentración de PAH adsorbido a DCM afluente a digestión anaeróbica [$\mu g/L$]
 Q_{DA}^e : caudal efluente de digestión anaeróbica [m^3/d]
 C_{DCM} : concentración de PAH adsorbido a DCM en digestor (y efluente) [$\mu g/L$]
 $r_{sorp,DCM}$: tasa de adsorción a DCM [$\mu g/L*d$]
 $r_{bio,DCM}$: tasa de biodegradación de biodegradación de fase adsorbida a DCM [$\mu g/L*d$]
 V_{DA} : volumen digestor anaeróbico [m^3]

7. Balance de masa de PAH en la fase disuelta libre

$$Q_{DA}^0 \cdot C_f^0 \cdot 1000 - Q_{DA}^e \cdot C_f \cdot 1000 - (r_{vol} + r_{sorp,p} + r_{sorp,DCM} + r_{bio,f}) \cdot V_{DA} \cdot 1000 = 0 \quad (24)$$

Donde:

Q_{DA}^0 : caudal afluente a digestión anaeróbica [m^3/d]
 C_f^0 : concentración de PAH disuelto libre afluente a digestión anaeróbica [$\mu g/L$]
 Q_{DA}^e : caudal efluente de digestión anaeróbica [m^3/d]
 C_f : concentración de PAH disuelto libre en digestor (y efluente) [$\mu g/L$]
 r_{vol} : tasa de volatilización [$\mu g/L*d$]
 $r_{sorp,p}$: tasa de adsorción a material particulado [$\mu g/L*d$]
 $r_{sorp,DCM}$: tasa de adsorción a DCM [$\mu g/L*d$]
 $r_{bio,f}$: tasa de biodegradación de biodegradación de fase disuelta libre [$\mu g/L*d$]
 V_{DA} : volumen digestor anaeróbico [m^3]

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En primer lugar, se presentan los resultados obtenidos a partir del modelo conceptual para el naftaleno y para el benzo(a)pireno, seguido de un análisis y discusión de estos resultados. Luego se incluye una comparación de los resultados obtenidos con distintas experiencias internacionales y el análisis de sensibilidad realizado. Finalmente se presentan los resultados obtenidos en relación al cumplimiento de la normativa.

6.1 RESULTADOS Y ANÁLISIS DE LA MODELACIÓN

La presentación de los resultados se realiza mediante diagramas de flujo para el naftaleno y para el benzo(a)pireno donde se incluyen los flujos másicos en cada etapa de tratamiento para cada fase del PAH, además del flujo másico total. Para mayor detalle sobre los resultados obtenidos, en el Anexo E se presentan las concentraciones obtenidas en cada una de las etapas de tratamiento.

La Figura 6 y la Figura 7 presentan los resultados obtenidos para la modelación del naftaleno en la línea de aguas y de lodos de la PTAS La Farfana respectivamente. Considerando una concentración afluente de 882 ng/L para el naftaleno, el flujo de entrada calculado fue de 680,5 g/d, de los cuales 158,2 se reportaron en el efluente. Por otro lado, el flujo total de ingreso a la línea de lodos fue de 476,7 g/d, mientras que el flujo másico al lodo tratado fue de 367,2 g/d. En la Tabla 16 se presentan las eficiencias de remoción de naftaleno calculadas a partir de los flujos másicos, obtenidas en cada una de las etapas de tratamiento. En la Tabla 16 se distingue la eficiencia obtenida considerando únicamente la fase disuelta (o la fase particulada en la línea de lodos) y la eficiencia al considerar todas las fases del contaminante.

Tabla 16: Eficiencias de remoción de naftaleno

Proceso	Eficiencia [%]	
	Fase disuelta	Total
Tratamiento primario	47,2	33,2
Tratamiento secundario	59,2	70,7
Línea de agua	78,2	78,3
	Fase particulada	Total
Digestión anaeróbica	4,7	0,4
Línea de lodos	23,5	23,0

Del mismo modo, la Figura 8 y la Figura 9 presentan los resultados obtenidos para la modelación del benzo(a)pireno en la línea de aguas y de lodos. Considerando una concentración afluente de 100, el flujo másico de entrada a la planta fue de 77,1 g/d de los cuales 5,2 g/d se encontraron en el efluente. Los retornos desde la línea de lodos a la de aguas generaron un flujo de 16,1 g/d. En el caso de la línea de lodos, el flujo másico de ingreso fue de 87,7 g/d, mientras que el flujo másico

al lodo tratado fue de 70,7 g/d. En la Tabla 17 se presentan las eficiencias de remoción de benzo(a)pireno calculadas a partir de los flujos máxicos obtenidos en las distintas etapas de tratamiento.

Tabla 17: Eficiencias de remoción de benzo(a)pireno

Proceso	Eficiencia [%]	
	Fase disuelta	Total
Tratamiento primario	77,0	48,6
Tratamiento secundario	75,5	90,0
Línea de agua	94,3	93,8
	Fase particulada	Total
Digestión anaeróbica	7,6	0,0
Línea de lodos	25,4	20,0

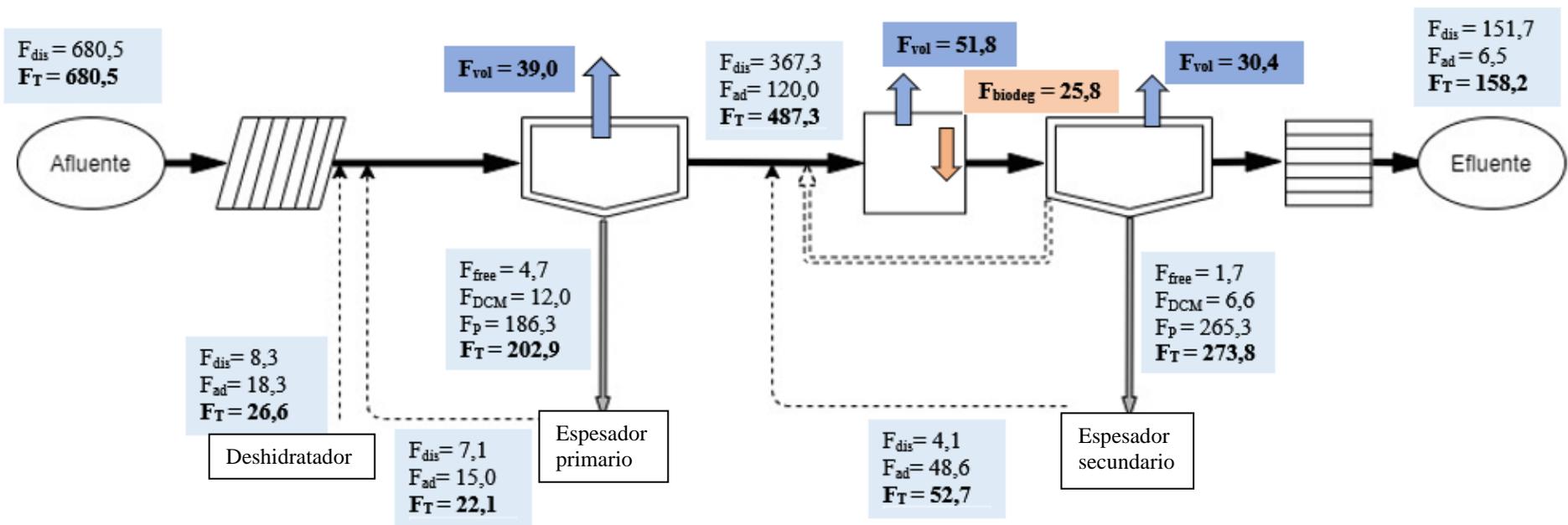


Figura 6: Flujo másico obtenido a partir del modelo conceptual para el naftaleno en la línea de agua. Todos los flujos se presentan en [g/d]

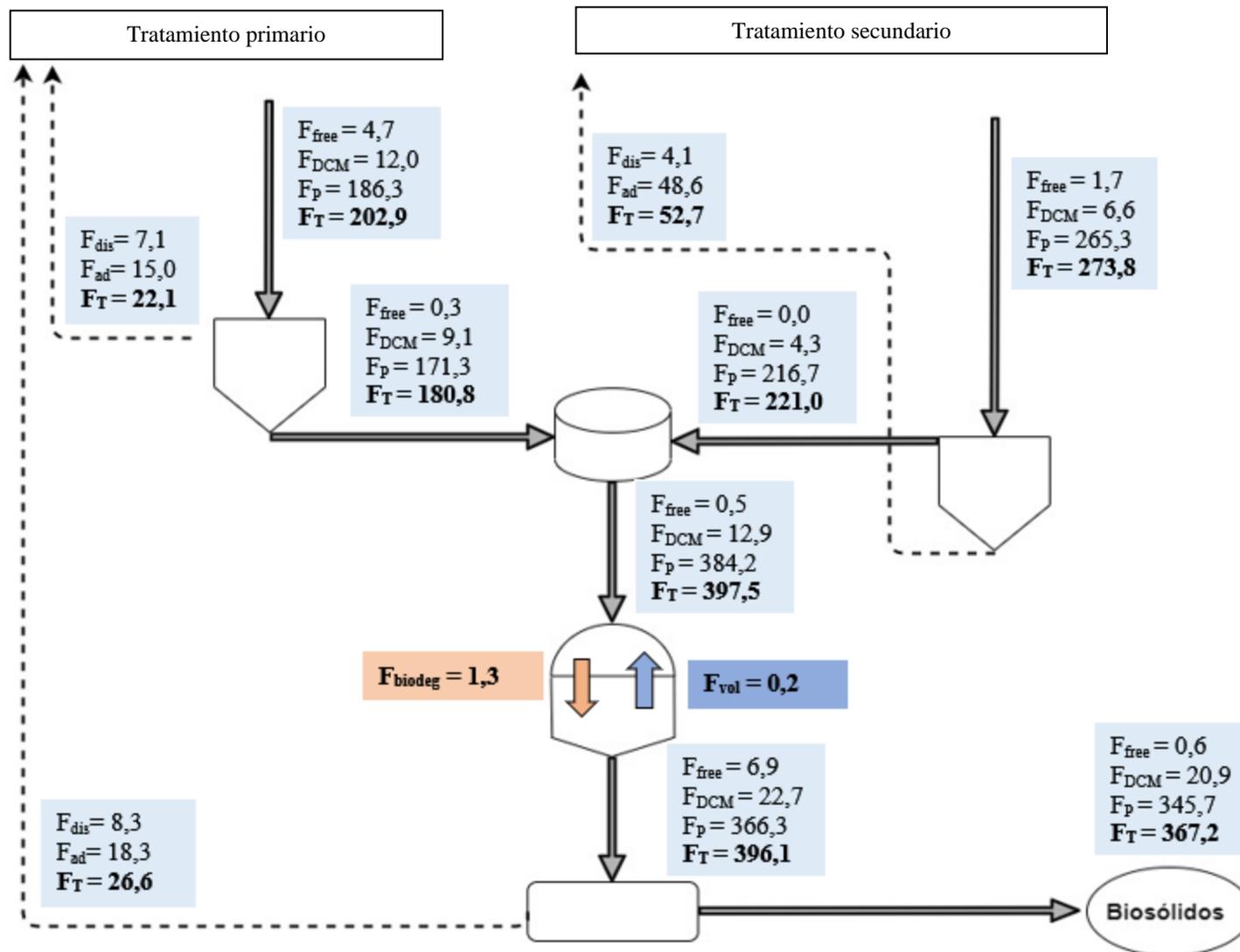


Figura 7: Flujo másico obtenido a partir del modelo conceptual para el naftaleno en la línea de lodos. Todos los flujos se presentan en [g/d]

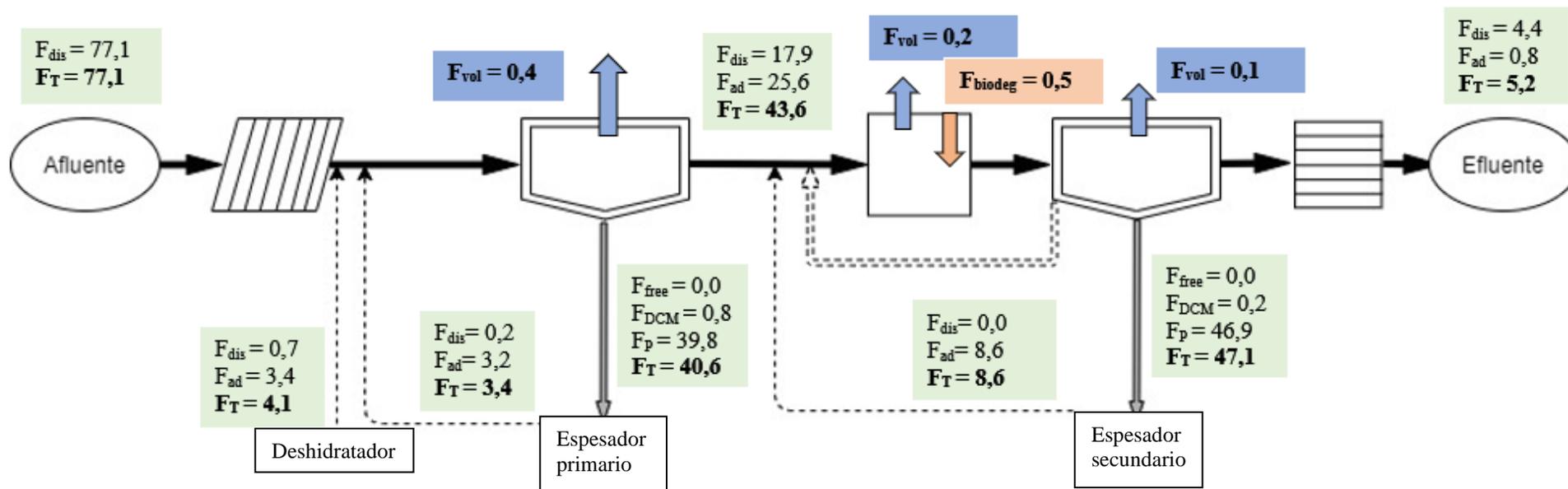


Figura 8: Flujo másico obtenido a partir del modelo conceptual para el benzo(a)pireno en la línea de agua. Todos los flujos se presentan en [g/d]

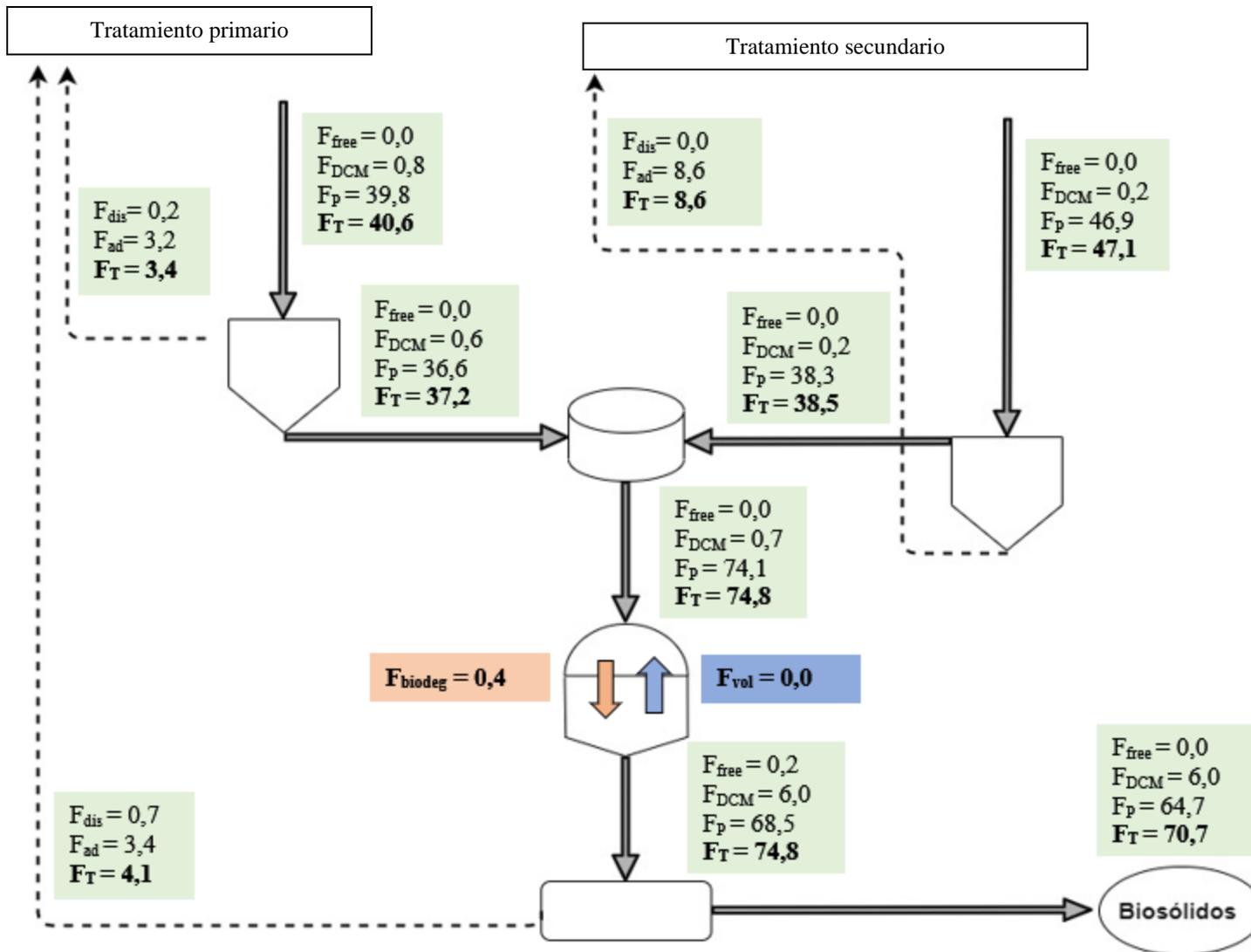


Figura 9: Flujo másico obtenido a partir del modelo conceptual para el benzo(a)pireno en la línea de lodos. Todos los flujos se presentan en [g/d]

En base a los resultados obtenidos se observó que el mecanismo de remoción predominante en la línea de agua (tanto en el tratamiento primario como en el secundario) corresponde a la adsorción a los lodos, lo que se ve validado por la literatura (Manoli et al., 2007; Byrns et al., 2001). En el caso de la línea de lodos, se observó que los procesos de remoción en el digestor anaeróbico, y el proceso que predominó en esta etapa fue el de desorción. Tal como se esperaba, la remoción del naftaleno fue menor que la del benzo(a)pireno en la línea de aguas, lo que se explica por su menor capacidad de adsorción a MP.

De la Tabla 16 se observa que la eficiencia de remoción para la concentración total de naftaleno en el tratamiento primario es de 33,2%. De acuerdo a Byrns et al. (2001), compuestos con $\log(K_{ow})$ entre 3,3 y 5 presentan remociones por adsorción de entre 15-50%. Además, reporta que la remoción por volatilización en el tratamiento primario tiene poco impacto en la remoción total, y que esta es máxima para compuestos con $\log(K_{ow})$ igual a 2 ya que sobre este valor se tiene una constante de Henry más baja además de presentar mayor tendencia a la adsorción. Los resultados obtenidos en el presente estudio se ajustaron de buena forma a esto. El naftaleno, con un $\log(K_{ow})$ de 3,36, presentó una remoción por adsorción al lodo primario de 24%, mientras que la volatilización constituyó un 5% de la remoción. De la Figura 10 a) se observa que luego del tratamiento primario el naftaleno se dirige principalmente al tratamiento secundario (67%), y que la remoción de la línea de aguas se debió predominantemente a que una fracción correspondiente al 28% fue derivada a la línea de lodos.

Los resultados obtenidos para el tratamiento primario también se encontraron en concordancia con los resultados obtenidos por Lee et al. (1998). El presente estudio obtuvo una remoción por volatilización para el naftaleno (con una constante de Henry adimensional de 0,03) de 5%. El modelo desarrollado por Lee et al. (1998) obtuvo remociones de 8% para compuestos con constante de Henry adimensional de 0,03.

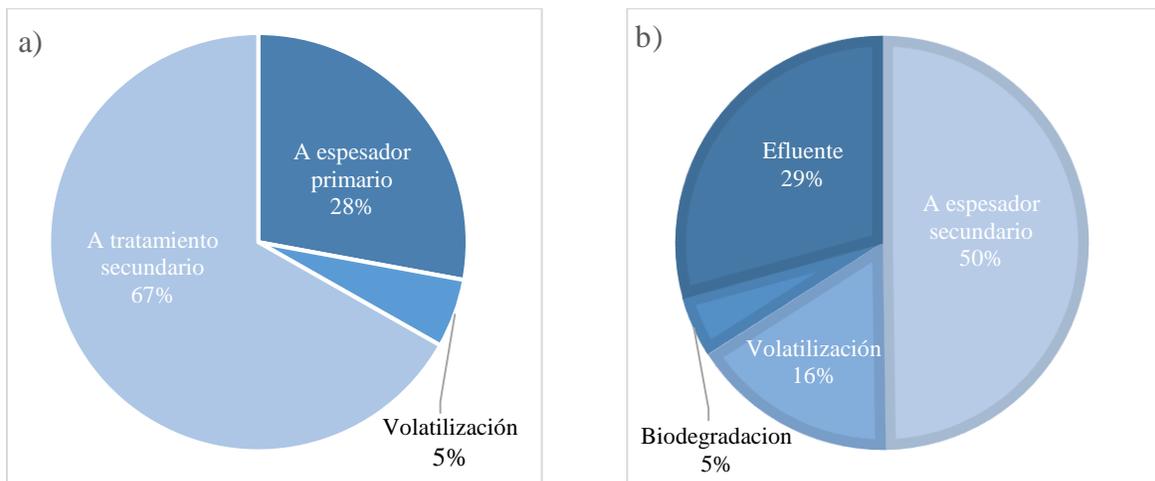


Figura 10: Distribución de naftaleno a la salida de a) tratamiento primario, b) tratamiento secundario

En el tratamiento secundario, en cambio, se obtuvo una eficiencia de remoción de 71%, donde una vez más el proceso predominante correspondió a la adsorción a los lodos. La volatilización constituyó un 16% de la remoción mientras que la biodegradación un 5%. Se observó en el

tratamiento secundario que un mayor porcentaje es derivado a la línea de lodos que en el tratamiento primario, lo que se debe a que en esta etapa el porcentaje de naftaleno adsorbido a MP obtenido fue de 49%, y dado que los sólidos suspendidos en el efluente del tratamiento secundario son muy bajos en comparación a los sólidos suspendidos que van al espesador secundario (19 mgSST/L y 2857 mgSST/L, respectivamente), la mayor parte de la fracción adsorbida es derivada al espesador secundario. Del mismo modo, la volatilización obtenida en el tratamiento secundario es mayor a la obtenida en el tratamiento primario ya que en el tratamiento secundario se considera la volatilización superficial en el reactor biológico y en el sedimentador secundario, además de volatilización por aireación en el reactor biológico.

Considerando la volatilización del naftaleno, el presente modelo obtuvo resultados similares a los de Byrns et al. (1998), donde se obtuvo una remoción por volatilización de entre 10 y 20% para compuestos con $\log(K_{ow})$ entre 3,3 y 3,6. Resulta relevante notar, sin embargo, que los valores obtenidos para la volatilización en esta etapa se encontraron sobredimensionados comparándolos con los valores reportados por Manoli et al. (2007), quienes obtuvieron una remoción por volatilización de 1-2% para el naftaleno. Sin embargo, el modelo FATE utilizado por dichos autores para estimar la volatilización consideró únicamente el efecto de la aireación, despreciando de esta forma la volatilización superficial.

Respecto a la biodegradación observada en el tratamiento secundario, esta se modeló como cometabolismo y depende de diversos factores como la concentración disuelta de entrada, la concentración de SSVLM y la cinética de biodegradación. Los resultados obtenidos en la modelación presentaron una remoción de un 5% debido a la biodegradación, lo cual se encuentra en concordancia con lo reportado por Manoli et al. (2007), quienes obtuvieron remociones del 4%.

Por otro lado, la línea de lodos presentó una eficiencia de remoción para el naftaleno de 20% la que se explica en gran medida a los retornos hacia la línea de aguas. Como se observa en la Figura 7, 477 g/d ingresan a la línea de lodos de los cuales 101 g/d son recirculados hacia la línea de agua. Tanto en los espesadores como en el deshidratador se observa una reducción del flujo por la línea de lodos debido únicamente a los retornos, ya que no se consideraron procesos de degradación en estos.

En el caso del digestor anaeróbico se observó una degradación del naftaleno debido a biodegradación y a volatilización de este. De acuerdo a lo reportado por Rockne et al. (1998) se esperaba que la biodegradación en el digestor anaeróbico fuera 1 o 2 órdenes de magnitud menor al obtenido en condición aeróbica. Los resultados obtenidos presentan una biodegradación de 25,8 g/d en el tratamiento secundario y de 1,3 g/d en el digestor anaeróbico, lo cual cumple con lo esperado.

Sin embargo, se debe considerar también que la biodegradación de los PAHs está sujeta a la concentración de la fase biodisponible en el reactor, que en la digestión anaeróbica considera las fases disuelta libre y adsorbida a DCM de acuerdo a la literatura (Delgadillo-Mirquez, 2011; Barret et al., 2010). En este sentido, en el tratamiento secundario se obtuvo una concentración de 207 ng/L de naftaleno disuelto (considerando fase disuelta y adsorbida a DCM de forma conjunta) mientras que en el digestor anaeróbico la concentración de naftaleno disuelto libre y adsorbido a DCM es de 1.310 ng/L y 4.344 ng/L respectivamente, por lo que la fase biodisponible fue 1 orden de magnitud mayor en el digestor anaeróbico que en el tratamiento secundario.

La volatilización obtenida en el digestor anaeróbico para el naftaleno fue mínima, obteniéndose una tasa de remoción de 0,2 g/d por este proceso. Este resultado se encuentra en concordancia con las experiencias de Barret et al. (2010) y Delgadillo-Mirquez et al. (2011), donde la remoción por volatilización es menor a un 1%.

En la digestión anaeróbica, adicionalmente, se observó una desorción desde la fase adsorbida a MP, al ser la concentración de esta fase mayor a la concentración adsorbida a MP en condición de equilibrio. Por el contrario, se observó una adsorción a DCM. Debe notarse que el modelo propuesto por Delgadillo-Mirquez (2011) el cual es utilizado en el presente trabajo considera la misma constante cinética de adsorción que de desorción, lo que de acuerdo a Yang et al. (2013) no es correcto, pues la desorción es un proceso más lento que la sorción. De esta forma, al observarse desorción en esta etapa se consideró una constante de sorción/desorción determinada por Bezza et al. (2015) para la desorción de naftaleno. De todas formas, el proceso de desorción significó una disminución de 5% del naftaleno en fase adsorbida a MP, por lo que en el efluente de esta etapa el 92% del naftaleno se encuentra en fase adsorbida a MP.

Respecto al benzo(a)pireno, en la Tabla 17 se observa que la eficiencia de remoción obtenida para el flujo total en la línea de aguas fue de 94%, mientras que para el tratamiento primario y secundario se obtuvieron eficiencias de 49% y 90% respectivamente. De la Figura 11 a) se observa que en el caso del tratamiento primario la volatilización generó remociones nulas de benzo(a)pireno, mientras que un 48% del benzo(a)pireno que ingresa a esta etapa es derivado a la línea de lodos. En el caso del tratamiento secundario, la Figura 11 b) muestra que la remoción se debe predominantemente a la adsorción al lodo secundario y advección hacia la línea de lodos, mientras que la biodegradación y la volatilización del benzo(a)pireno constituyen un 3% y 1% de la remoción respectivamente.

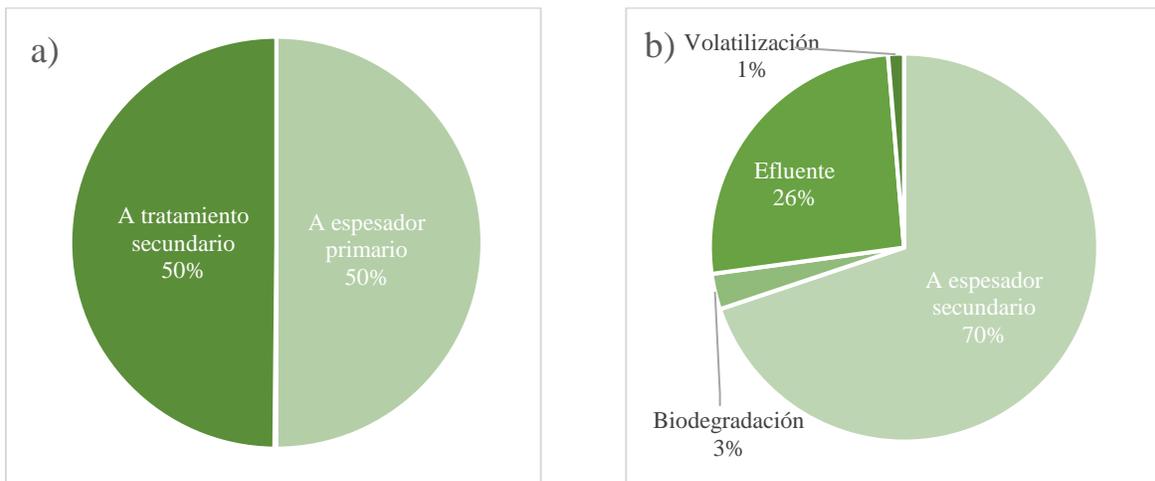


Figura 11: Distribución de benzo(a)pireno a la salida de a) tratamiento primario, b) tratamiento secundario

En el caso del tratamiento primario, los resultados son congruentes con lo presentado en la literatura, ya que al tratarse de un HMW PAH el benzo(a)pireno tiene mayor constante de Henry que el naftaleno, por lo cual el proceso de volatilización es menos efectivo, mientras que la adsorción a los lodos es el proceso de remoción predominante (Jelic et al., 2015; Byrns et al.,

2001). Como se observa en la Figura 8, al tratamiento primario ingresan 7 g/d de benzo(a)pireno adsorbido a MP provenientes del recirculado, mientras que a la salida del tratamiento 66 g/d se encontraron adsorbidos a MP. De esta forma, se observó que el proceso de adsorción es de importancia en esta etapa, aunque parte de la fase adsorbida a MP se encontró presente en la salida al tratamiento secundario.

Los resultados obtenidos en el tratamiento secundario se encontraron también en concordancia con lo presentado en la literatura. Se observó que el benzo(a)pireno se encuentra predominantemente en la fase adsorbida a MP, y que en su mayoría es derivado al tratamiento de lodos. Además, se evidenció que el benzo(a)pireno es recalcitrante, donde la remoción debido a biodegradación y volatilización obtenida fue muy baja.

En relación a la biodegradación, de acuerdo a los resultados obtenidos por Bautista et al. (2009), la constante cinética de biodegradación considerada para el benzo(a)pireno fue más baja que para el naftaleno, lo que en parte explica la menor biodegradación obtenida para el benzo(a)pireno. Adicionalmente, un factor determinante en la degradación biológica de microcontaminantes es la biodisponibilidad de estos, la cual según la literatura corresponde a la fase disuelta (Barret et al., 2010; Jelic et al., 2015). De esta forma, debido a que el benzo(a)pireno se encuentra mayormente adsorbido a MP, la concentración biodisponible es de 6 ng/L de los 59 ng/L que ingresan al tratamiento secundario.

En relación con la volatilización, al igual que en el tratamiento primario, se observó que este proceso genera remociones mínimas en el sistema, removiendo 1%. A pesar de que en esta etapa se considera volatilización superficial y por aireación, debido a la constante de Henry del benzo(a)pireno se generó volatilización muy baja. Al igual que para el naftaleno, la volatilización obtenida para el benzo(a)pireno en el presente modelo se encontró en concordancia con los resultados de Byrns et al. (2001), quienes reportaron una volatilización despreciable para contaminantes con $\log(K_{ow})$ superiores a 5,6.

En la digestión anaeróbica, al igual que en el tratamiento secundario, se observaron remociones prácticamente despreciables por biodegradación y por volatilización. En este caso, sin embargo, la remoción por biodegradación en condición anaeróbica no cumple con ser 1-2 órdenes de magnitud menor que en el caso aeróbico como se esperaba (Rockne et al., 1998), lo cual puede estar explicado por las concentraciones biodisponibles en ambas etapas de tratamiento (6 ng/L en el tratamiento secundario y 1.188 ng/L en la digestión anaeróbica). Adicionalmente, en la digestión anaeróbica, al igual que para el naftaleno, la constante de sorción/desorción considerada corresponde a una constante de desorción determinada por Bezza et al. (2015).

Al comparar los resultados obtenidos para ambos contaminantes queda en evidencia la dependencia de la remoción con las características fisicoquímicas del PAH modelado. Como se ha señalado anteriormente, a medida que aumenta el peso molecular de los PAHs disminuye la constante de Henry y a su vez aumenta el coeficiente de partición octanol-agua (K_{ow}). En consecuencia, se esperaba que el naftaleno fuera removido en mayor medida mediante volatilización que el benzo(a)pireno y que se removiera en menor medida por adsorción que el benzo(a)pireno (Zhang et al., 2019; Jelic et al., 2015). Los resultados obtenidos en el presente estudio se encontraron en concordancia con esto.

A partir de los resultados obtenidos para ambos contaminantes, fue posible observar la importancia que tiene el proceso de adsorción, que para ambos PAHs estudiados tanto en el tratamiento

primario como en el secundario fue el proceso predominante. En consecuencia, se observa la importancia que tiene el coeficiente de partición sólido-líquido en la modelación, al ser este el parámetro que caracteriza la adsorción en la línea de agua. Comparando las eficiencias de remoción para la línea de aguas del naftaleno y del benzo(a)pireno, en la Tabla 16 y la Tabla 17, se nota que la eficiencia de remoción del naftaleno (total) fue de 78,3%, mientras que la del benzo(a)pireno (total) fue de 93,8%. A pesar de que la remoción por volatilización y por biodegradación fue menor para el benzo(a)pireno que para el naftaleno, su eficiencia total fue mayor, lo que se debe a su mayor K_d (0,0022 L/mgSSV para el naftaleno y 0,0097 L/mgSSV para el benzo(a)pireno, de acuerdo a Dionisi et al., 2006). De esta forma, es posible destacar por un lado que para HMW PAHs se espera mayor eficiencia de remoción al tener mayor K_d en comparación con los LMW PAHs, y por otro lado la importancia de estimar de forma precisa este coeficiente.

En el tratamiento primario, se obtuvo que un 44% del naftaleno se encontró en fase adsorbida, versus un 76% del benzo(a)pireno. En cambio, en esta etapa un 5% del naftaleno que ingresó es volatilizado mientras que un 0,13% del benzo(a)pireno se removió mediante volatilización.

En el tratamiento secundario, se observó que la remoción de ambos PAHs ocurre predominantemente por la adsorción a los lodos secundarios, lo cual se explica por la hidrofobicidad de los PAHs. Sin embargo, se observaron diferencias en la remoción obtenida por biodegradación y volatilización. Mientras que para el naftaleno la volatilización genera mayor remoción que la biodegradación, esto no fue así para el benzo(a)pireno. De acuerdo a lo reportado por Byrns et al. (2001), el proceso de biodegradación alcanza su máxima eficiencia con un $\log(K_{ow})$ entre 3-3.5 y luego decae debido a que el proceso de sorción al lodo adquiere mayor importancia, lo que se vio reflejado en los resultados. El naftaleno (con $\log(K_{ow})$ de 3,36) presentó una remoción por biodegradación de 5%, mientras que el benzo(a)pireno (con $\log(K_{ow})$ de 5,97) presentó una remoción por biodegradación de 3%.

Los resultados obtenidos para ambos contaminantes en la digestión anaeróbica evidenciaron un proceso de desorción desde la fase adsorbida a MP y adsorción a DCM, además de bajas remociones por biodegradación y volatilización. De la Tabla 16 y la Tabla 17 se observa que las remociones totales en esta etapa corresponden a 0,4% y 0% para el naftaleno y benzo(a)pireno respectivamente. En contraste, los resultados obtenidos por Delgadillo-Mirquez et al. (2011) reportaron eficiencias de remoción en digestores anaeróbicos de entre 32-74% (no se explicita la remoción para cada PAH). Además, reportan que la remoción por volatilización es despreciable, por lo que es posible suponer que la diferencia en las remociones obtenidas se debe a la biodegradación. Sin embargo, Semblante et al. (2015) reportan que altas remociones en digestores anaeróbicos están limitadas a digestores a escala de laboratorio, y que en PTAS generalmente existe biodegradación despreciable de PAHs. De esta forma, el presente estudio se encuentra en congruencia a lo planteado por Semblante et al. (2015) y no con los resultados de Delgadillo-Mirquez et al. (2011) posiblemente debido a que este no es un estudio a escala piloto.

Respecto a las limitaciones y posibles fuentes de error del modelo, en primer lugar es posible mencionar la falta de datos experimentales de PAHs en la PTAS La Farfana, ya que se imposibilita la validación del modelo conceptual realizado. Además, la estimación de la concentración afluente a la PTAS se realiza en base a una recopilación bibliográfica sobre la presencia de PAHs en otras PTAS a nivel mundial. Sin embargo, es necesario notar que estas experiencias generalmente consideran únicamente la fase disuelta afluente, despreciando de esta forma la concentración

adsorbida a material particulado. En este sentido, ya que la literatura indica que existe equilibrio entre la fase disuelta y la adsorbida a la entrada de las PTAS (Fatone et al., 2010; Dionisi et al., 2006), esto puede significar una subestimación de la concentración afluente. Para lograr un resultado más preciso, se recomienda utilizar mediciones in situ de PAHs afluentes a la planta, así como en las distintas etapas de tratamiento.

La etapa de tratamiento preliminar no fue considerada en el modelo ya que la literatura indica que la remoción de microcontaminantes durante esta etapa es generalmente baja (Meakins et al., 1994), además de que no se contó con suficiente información sobre modelos de xenobióticos en esta etapa. Sin embargo, la etapa de desarenado y desengrasado puede generar una remoción la cual no fue contemplada en el modelo, debido a la adsorción de PAHs a lípidos y arenas, además de posible volatilización por aireación. La literatura indica que existe adsorción de PAHs a lípidos (Zhang et al., 2009; Huckins et al., 1999; Thunnissen et al., 2020), por lo que durante el desengrasado una fracción de los PAHs podría removerse junto con las grasas. Sin embargo, tanto en el caso de la adsorción a arena como a lípidos, se observa que el coeficiente de partición es menor que en el caso de la adsorción a materia orgánica (Liu et al., 2011; Zhang et al., 2009).

Adicionalmente, es posible mencionar la importancia de seleccionar de forma precisa el coeficiente de partición sólido-líquido a utilizar. En el presente modelo se consideran valores determinados por Dionisi et al. (2006) para el K_d . Sin embargo, en la práctica este valor depende tanto del contaminante en cuestión como la composición del medio en el cual se encuentra. Barret et al. (2010a) desarrollaron un modelo el cual permite determinar las constantes de equilibrio de adsorción a material particulado y a DCM a partir de los cuales se puede determinar K_d . Para esto, se requeriría información específica sobre la composición de los lodos incluyendo la concentración de carbohidratos y lípidos, para lo cual se recomienda mayor estudio sobre la composición del lodo para obtener resultados más precisos. De igual forma, parámetros relacionados a la biodegradación en el digester anaeróbico se estimaron en base a parámetros de biodegradación en condición aeróbica, al no obtenerse valores más precisos, lo cual puede generar distorsiones en las remociones por biodegradación reportadas en el digester anaeróbico.

En el caso de los espesadores, la cámara de mezcla y el deshidratador se trabajó bajo el supuesto de que no ocurren procesos químicos ni biológicos, lo que se ha visto validado por la literatura (Mailler et al., 2016). Sin embargo, esto es válido mientras no se utilicen acondicionantes, los que pueden generar impactos en la fase particulada. De esta forma, en el caso de la deshidratación, donde sí se utilizan acondicionantes, los resultados obtenidos por el modelo pueden mostrar alteraciones respecto a la condición real en la planta. El uso de los acondicionantes se ha visto que genera mayor adsorción al MP, por lo que a la salida del deshidratador podría encontrarse subestimada la fase adsorbida a MP (Zhang et al., 2019).

El considerar únicamente el régimen permanente para el desarrollo del modelo conceptual significa una simplificación importante la cual facilita la aplicación del modelo. Sin embargo, el considerar únicamente régimen permanente limita los resultados ya que no es posible considerar la posible variación en la carga afluente por la estacionalidad e incluso por diferencias horarias. Para poder estudiar el efecto de la estacionalidad, podrían realizarse campañas de muestreo en la época estival e invernal en el caudal afluente a la planta, así como también en las distintas etapas de tratamiento. En cambio, para poder estudiar el efecto de la carga horaria, sería necesario realizar una modelación no estacionaria.

Finalmente, a lo largo de la línea de tratamiento se desprecian los efectos de la temperatura en la remoción de los PAHs, lo cual genera distorsiones entre los resultados obtenidos y la realidad. Existe evidencia que indica que una temperatura de 25°C permite mayor remoción de PAHs que una de 10 o 35°C, ya que los microorganismos asociados a su biodegradación encuentran un crecimiento óptimo a esta temperatura. Sin embargo, a mayor temperatura los PAHs presentan mayor solubilidad en agua, por lo que se espera que se encuentren más biodisponibles (Zhang et al., 2019). En consecuencia, se espera que durante la época estival ocurriera mayor biodegradación de los PAHs, incrementando así la eficiencia de remoción.

4.1 COMPARACIÓN DE RESULTADOS

A continuación se presentan resultados obtenidos en distintas experiencias a nivel internacional las cuales, al igual que el presente modelo buscan cuantificar la presencia de PAHs en plantas de tratamiento de aguas servidas. En la Tabla 18 se han incluido únicamente aquellas plantas que presenten diseño similar a La Farfana, es decir, tratamiento secundario mediante lodos activados convencionales en la línea de aguas y digestión anaeróbica para el tratamiento de lodos.

A diferencia de la sección anterior, la eficiencia en este caso se determina a partir de las concentraciones (en vez del flujo másico) para poder comparar con las eficiencias reportadas en la literatura.

En la Tabla 18 es posible observar la gran variabilidad entre las concentraciones afluentes medidas experimentalmente por las distintas experiencias a nivel internacional, especialmente para el naftaleno, que posiblemente se debe al porcentaje de afluente industrial a cada una de las PTAS o a la época en que se realizaron las mediciones, donde a mayor porcentaje de industrias en el área, mayor es la concentración afluente (Jelic et al., 2015). Del mismo modo, las eficiencias obtenidas en cada una de las PTAS presentan también una gran variabilidad, reportándose valores desde 19,5% hasta 96% para la concentración disuelta de naftaleno. Las eficiencias obtenidas en el presente trabajo se encuentran en el rango de otras experiencias, y es congruente con estas al presentar una mayor eficiencia de remoción para el benzo(a)pireno que para el naftaleno. La remoción para el naftaleno obtenida en el presente estudio fue de 77% mientras que la del benzo(a)pireno fue de 94%.

Tabla 18: Resumen de eficiencias de remoción de los PAHs reportadas en literatura para la línea de aguas.

Referencia	Ubicación	Naftaleno			Benzo(a)pireno		
		Afluente [ng/L]	Efluente [ng/L]	Eficiencia	Afluente [ng/L]	Efluente [ng/L]	Eficiencia
Manoli & Samara (1999)	Thessaloniki, Grecia	2.800	290	89,6%	20	3,8	81,0%
Fantone et al. (2010)	Italia	250	56	77,6%	16	ND	> 99%
		96	73	24,0%	ND	ND	-
		113	43	61,9%	ND	ND	-
		634	74	88,3%	14	ND	> 99%
		103	37	64,1%	20	ND	> 99%
Wlodarczyk-Makula (2010)	Polonia	2.987	119	96,0%	71	66	6,8%
		1.931	1.045	45,9%	179	5	97,2%
Bussetti et al. (2005)	Venecia, Italia	18,4	5,2	71,7%	17,4	2,8	83,9%
Sánchez-Avila et al. (2009)*	Cataluña, España	4.500	3.490	22,4%	40	ND	> 99%
Pham et al. (1999)	Montreal, Canadá	147	88	40,1%	48	1	97,9%
Jiries et al. (1999)	Karak, Jordania	169	136	19,5%	9	ND	> 99%
Man et al. (2016)	Hong Kong, China	151,6	8,75	94,2%	1,8	0,04	97,8%
Este estudio (2020)	Santiago, Chile	882	291	76,5%	100	11	94,0%

*considera la concentración disuelta y la particulada

En las experiencias recopiladas, se observó que en el tratamiento primario el principal mecanismo de remoción de naftaleno y benzo(a)pireno del agua corresponde a la adsorción a los lodos primarios, y que esta fue mayor para los HMW PAHs que para los LMW PAHs (Jelic et al., 2015; Zhang et al. 2019). Los resultados del presente estudio mostraron una remoción debido a la adsorción en el tratamiento primario de 28% para el naftaleno y de 50% para el benzo(a)pireno, en concordancia con la literatura.

En el tratamiento secundario, en el presente estudio se obtuvo una remoción de 89% y de 97% para el naftaleno y benzo(a)pireno respectivamente. Nuevamente el proceso predominante fue el de adsorción a los lodos para ambos contaminantes, en concordancia con la literatura (Manoli et al., 2007; Byrns et al., 2001).

En la Tabla 19 se presentan valores reportados por distintas experiencias en distintos tipos de lodos, en plantas de tratamiento de aguas servidas de distintas capacidades y ubicaciones. Cabe mencionar que los resultados presentes en las experiencias reportan únicamente las

concentraciones particuladas, por lo que la validación de los resultados obtenidos en el modelo desarrollado se concentra en la concentración particulada.

Tabla 19: Resumen de concentración de PAHs en lodos según literatura

Referencia	Ubicación	Tipo de lodo	Naftaleno [ug/kg peso seco]	Benzo(a)pireno [ug/kg peso seco]
Manoli & Samara (1999)	Thessaloniki, Grecia	Lodo secundario	190	66
		Lodo mixto (primario y secundario)	900	140
		Lodo espesado	340	140
		Lodo estabilizado	800	240
		Lodo deshidratado	1.000	240
Bussetti et al.	Venecia, Italia	Lodo secundario	31	87
		Lodo estabilizado	28	86
Cai et al. (2007)	Beijing, China	Lodo secundario	1.100	5.000
	Wuxi, China		500	24
	Dapu, China		310	7
	Yuanlang, China		120	480
	Shatian, China		240	33
Dai et al. (2007)	GBD, China	Lodo secundario	98	395
	BXH, China		23	327
Hua et al. (2008)	Sibao WWTP, China	Lodo estabilizado	16.320	4.540
	Ningbo WWTP, China		140	3.700
Perez et al. (2001)	España	Lodo secundario	197	34
	España		27	522
Toretta et al. (2013)	Lombardía, Italia	Lodo primario	259	56
		Lodo secundario	277	36
		Lodo espesado	279	44
		Lodo estabilizado	254	62
Villar et al. (2009)	Guadalete WWTP, España	Lodo primario	776	115
		Lodo secundario	707	87
		Lodo estabilizado	539	170
Este estudio	Santiago, Chile	Lodo primario	1.270	271
		Lodo secundario	2.140	378
		Lodo espesado (PS+SS)	1.646	318
		Lodo estabilizado	2.692	503
		Lodo deshidratado	2.658	498

En base a la Tabla 19, es posible ver que los resultados obtenidos para la línea de lodos en la modelación se encontraron dentro del rango de otras experiencias, aunque fueron más elevadas que en la mayoría de las otras experiencias tanto para el naftaleno como para el benzo(a)pireno. Sin embargo, esto puede deberse a que las concentraciones afluentes utilizadas fueron las obtenidas por Sun et al. (2018), las cuales también eran más elevadas a otras experiencias.

A continuación se comparan los resultados de la modelación con los valores experimentales de Toretta et al. (2013), Villar et al. (2009) y Manoli et al. (1999) ya que reportan valores para lodos primarios, secundarios, espesados y estabilizados. De acuerdo a los resultados obtenidos en este estudio, el lodo secundario presentó mayor concentración particulada de PAHs que los lodos primarios, y la estabilización de los lodos mediante digestión anaeróbica presentó un aumento en la concentración de naftaleno y benzo(a)pireno. Las experiencias internacionales, en cambio, no presentan una tendencia clara; mientras Villar et al. (2009) y Toretta et al. (2013) observaron una remoción de lodos en la digestión anaeróbica, Manoli et al. (1999) reportan una acumulación de PAHs en esta. Debe tenerse en cuenta, sin embargo, que al presentarse valores en unidades de $\mu\text{g}/\text{kg}$ de materia seca, las remociones (o acumulaciones) de PAHs se encuentran ligadas a la variación en la materia seca.

Una diferencia observada entre las experiencias internacionales y este modelo corresponde al flujo presente en los retornos desde la línea de lodos hacia la línea de aguas, en particular desde la etapa de deshidratado. Los estudios que presentan información sobre la presencia de PAHs en los retornos corresponden al realizado por Manoli et al. (1999) y al de Wlodarczyk-Makula et al. (2005). Con una concentración afluente a la planta de 2.800 ng/L para el naftaleno y de 20 ng/L para el benzo(a)pireno, y con concentraciones a la entrada del deshidratado de 800 ng/g peso seco y 1900 ng/g peso seco, Manoli et al. (1999) obtuvieron flujos de 0,67 g/d en los retornos para el naftaleno y de 3,2 g/d para el benzo(a)pireno. Wlodarczyk-Makula et al. (2005) reportaron flujos de 0,6 g/d ($\Sigma 16$ PAHs) en el recirculado para un flujo afluente al deshidratado de 84,6 g/d ($\Sigma 16$ PAHs). El presente estudio, en contraste, obtuvo una concentración de entrada al deshidratado de 2.962 ng/g peso seco de naftaleno, con lo cual se obtuvo un flujo de 26,6 g/d en el retorno al tratamiento primario. En el caso del benzo(a)pireno, el presente estudio obtuvo una concentración de entrada al deshidratado de 503 ng/g peso seco y un retorno de 4,1 g/d hacia el tratamiento primario. De esta forma, se observa una sobreestimación del retorno desde el deshidratado al tratamiento primario, que posiblemente se debe a que el flujo de ingreso al deshidratador es muy superior al de ingreso en otras experiencias.

4.2 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

En la Figura 12 se presentan las variaciones porcentuales en el efluente de la línea de aguas al variar los parámetros de acuerdo a lo presentado en la Tabla 20. Como se menciona en la sección de Metodología, el análisis de sensibilidad se llevó a cabo únicamente para el naftaleno.

Los parámetros seleccionados fueron los que caracterizaron los procesos predominantes en cada una de las etapas. La variación de estos parámetros se determinó en base a valores reportados por otras experiencias. En el caso de las constantes cinéticas de sorción/desorción en la digestión anaeróbica k_1 y k_2 , se consideró sólo una sobreestimación de estos. El modelo de Delgadillo-Mirquez et al. (2011) modela la adsorción y la desorción de forma conjunta, y debido a que se

observó desorción en el presente modelo, se consideró el valor disponible para la constante cinética de desorción ($k_1 = 0,007 \text{ d}^{-1}$). De esta forma la sobreestimación correspondió a considerar la constante cinética de sorción ($k_1 = 80,16 \text{ d}^{-1}$) y al no encontrarse otros valores menores para la desorción, no se realizó una subestimación.

En el caso de la variación de la edad del lodo, se seleccionaron las edades del lodo máximas y mínimas observadas en la PTAS La Farfana en el periodo 2009-2013. Con estas variaciones, sin embargo, no se observaron variaciones en la concentración efluente, por lo que no se agregó este factor a la Figura 12.

Tabla 20: Parámetros variados para análisis de sensibilidad

Parámetro	Unidad	Variación	Valor	Referencia
$K_{d,prim}$	L/kgSST	Subestimado	861	Lee et al. (1998)
		Valor original	2.200	Pomies et al. (2013)
		Sobreestimado	3.981	Barret et al. (2010)
$K_{d,sec}$	L/kgSST	Subestimado	861	Lee et al. (1998)
		Valor original	2.200	Pomies et al. (2013)
		Sobreestimado	6.310	Barret et al. (2010)
K_p	L/gCOD	Subestimado	1,25	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)
		Valor original	1,92	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)
		Sobreestimado	6,31	Barret et al. (2010)
K_{DCM}	L/gCOD	Subestimado	3,03	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)
		Valor original	7,98	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)
		Sobreestimado	25,12	Barret et al. (2010)
k_1	d^{-1}	Valor original	0,007	Bezza et al. (2015)
		Sobreestimado	80,16	Dionisi et al. (2006)
k_2	d^{-1}	Valor original	0,007	Bezza et al. (2015)
		Sobreestimado	80,16	Dionisi et al. (2006)
SRT	d	Subestimado	1,60	AKROS Ing. (2014)
		Valor original	1,83	
		Sobreestimado	2,29	

En primer lugar, se destaca que en la literatura se presentan rangos para los coeficientes de partición sólido-líquido sumamente amplios, encontrándose valores hasta un 80% mayores al utilizado en el presente estudio.

La Figura 12 muestra que al incrementar el coeficiente de partición sólido-líquido en el tratamiento primario como en el secundario se obtuvo una menor concentración total en el efluente, debido a que la adsorción a los lodos se incrementó. Se observa también que el valor sobreestimado de $K_{d,sec}$ genera una disminución mayor en el efluente (-28%) que el valor sobreestimado de $K_{d,prim}$ (-24%).

Además, se observa que las variaciones en el coeficiente de partición sólido-líquido tanto para el tratamiento primario como para el secundario puede impactar la concentración total efluente a la planta en hasta un 32%. De esta forma, resulta de gran importancia estimar de forma precisa de

este parámetro para los PAHs en la PTAS La Farfana. Para poder determinar el coeficiente de partición sólido-líquido, el cual como se ha mencionado anteriormente depende tanto de las propiedades fisicoquímicas del contaminante como del medio (Barret et al., 2010), es necesario realizar mediciones experimentales de la concentración del contaminante en fase acuosa y en fase adsorbida para la condición de equilibrio (Barret et al., 2010; Dionisi et al., 2006).

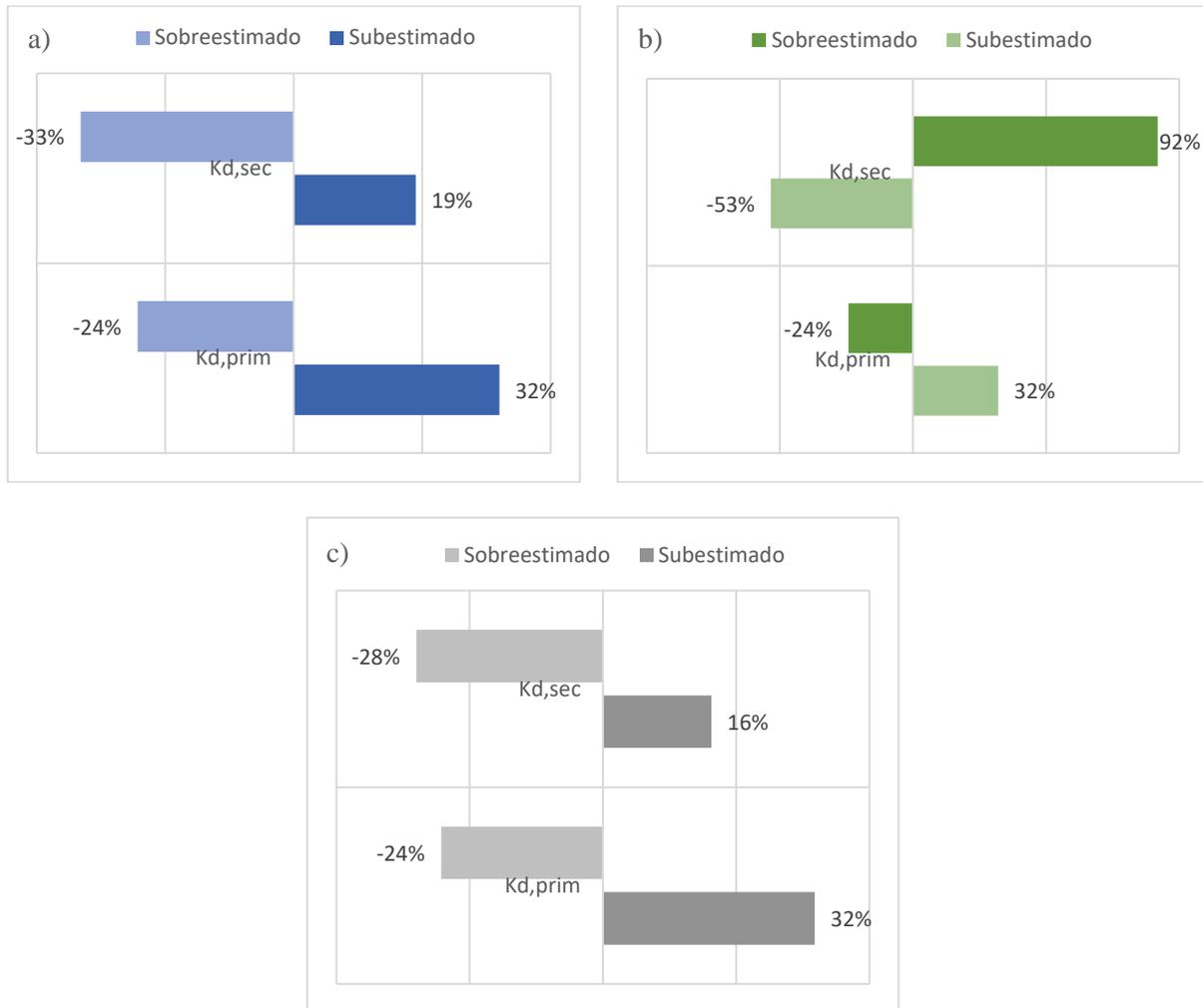


Figura 12: Análisis de sensibilidad para la línea de aguas. a) variaciones en la concentración disuelta efluente a la planta, b) variaciones en la concentración adsorbida a MP efluente a la planta, c) variaciones en la concentración total efluente a la planta

En el caso del digester anaeróbico, los resultados obtenidos para el análisis de sensibilidad se presentan en la Figura 13. En primer lugar, se observa que las variaciones consideradas no generaron cambios significativos en la concentración de naftaleno en el lodo estabilizado, pero si se observó un cambio en los flujos de retorno a la línea de aguas, en particular desde el deshidratador. Esto se observa particularmente al variar k_1 y K_p , los cuales definen el proceso de

sorción/desorción entre la fase disuelta libre y la adsorbida a MP. Al evaluar el modelo con el parámetro k_1 sobreestimado, se obtiene un flujo un 33% mayor en el recirculado desde el deshidratador a la línea de aguas. De esta forma, al igual que para el caso de la línea de aguas, resulta de gran importancia lograr una buena estimación de los parámetros requeridos para la modelación.

Además, de la Figura 13 se observa que la variación en el K_{DCM} genera impactos en las tres fases del contaminante, aunque estas son mayores para el naftaleno adsorbido a DCM. Debido a la sobreestimación de K_{DCM} , se obtuvo un incremento en la biodegradación de un 38% ya que la concentración biodisponible aumenta. En la condición original los flujos obtenidos a la salida de la digestión anaeróbica fueron de 6,9 g/d para la fase disuelta libre, 22,9 g/d para la fase adsorbida a DCM y de 366,3 g/d para la fase adsorbida a MP. La condición sobreestimada de K_{DCM} , en cambio, reportó flujos de 4,5 g/d para la fase disuelta libre, 35,7 para la fase adsorbida a DCM y de 354,3 para la fase adsorbida a MP. De esta forma, se observa que aumentar el K_{DCM} incrementa la adsorción a DCM, por lo que a su vez se incrementa la desorción de la fase adsorbida a MP. Esta variación tiene consecuencias también en los retornos. En la condición original, el modelo obtuvo un flujo total de 26,6 g/d hacia el tratamiento primario. En la condición sobreestimada, en contraste, el flujo total retornado al tratamiento primario fue un 13% menor, lo cual puede ser explicado debido a que la fase adsorbida a DCM se dirige principalmente al lodo tratado ya que la concentración de DCM es mayor en el lodo tratado que en el retorno.

Incrementar el parámetro K_p genera variaciones en las concentraciones en el lodo tratado ya que impacta en la biodisponibilidad del PAH. Como se ve en la Figura 13, sobreestimar K_p generó una disminución del 58,5% de la concentración disuelta de naftaleno presente en el lodo tratado, una disminución de 31,2% de la concentración adsorbida a DCM y un aumento de la concentración adsorbida a MP de 2,7%. De esta forma, resulta relevante notar que la variación del K_p genera cambios considerables en la biodegradación anaeróbica del naftaleno, pues mientras en la condición original se obtuvo una tasa de biodegradación anaeróbica de 1,3 g/d, la condición sobreestimada generó una tasa de biodegradación de 0,8 g/d. Esto se debe a que al aumentar K_p se incrementa la sorción a MP y por lo tanto la fase biodisponible disminuye.

En consecuencia, además, las variaciones en el K_p generaron diferencias en los flujos retornados desde el deshidratador al tratamiento primario. En la condición original, el flujo adsorbido a MP a la salida del digestor anaeróbico fue de 366,3 g/d, mientras que en la condición con K_p sobredimensionado fue de 376,2 g/d. A su vez, el flujo en fase acuosa (disuelto libre y adsorbido a DCM) fue de 29,8 g/d en condición original y de 18,7 g/d en la condición de K_p sobredimensionado. Estas diferencias en los flujos de salida del digestor anaeróbico tienen impacto en los retornos, ya que al encontrarse un mayor flujo en fase acuosa mayor es el retorno a la línea de agua. En condición original, el flujo total retornado al tratamiento primario fue de 26,6 g/d, mientras que en condición con K_p sobredimensionado fue de 22,8 g/d, un 16% menor.

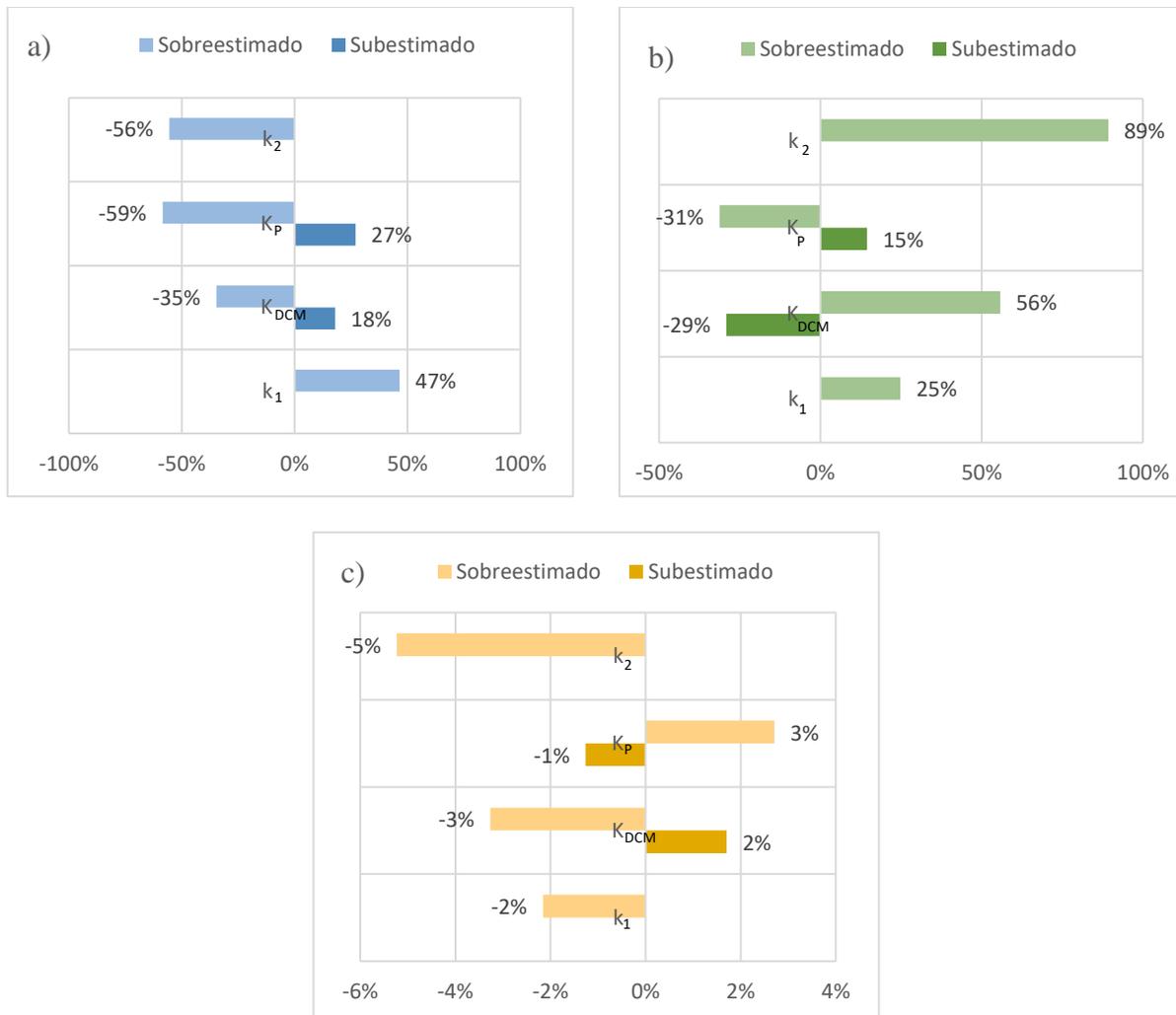


Figura 13: Análisis de sensibilidad para la línea de aguas. a) variaciones en la concentración disuelta libre presente en el lodo tratado, b) variaciones en la concentración adsorbida a DCM presente en el lodo tratado, c) variaciones en la fase adsorbida a MP presente en el lodo tratado

4.3 COMPARACIÓN DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS CON NORMATIVA EXISTENTE

Una vez que se aplicó el modelo conceptual al naftaleno y al benzo(a)pireno, se procedió a analizar el efecto de estos PAHs en el efluente de la planta, en particular en su impacto en el reúso de las aguas tratadas y los biosólidos. Los resultados obtenidos con el modelo indicaron una concentración total de 216 ng/L para el naftaleno y de 7 ng/L para el benzo(a)pireno presentes en el efluente de la PTAS La Farfana. En los biosólidos, en cambio, se obtuvieron concentraciones de 2.658 ng/gMS y de 497 ng/gMS para el naftaleno y benzo(a)pireno, respectivamente.

A partir de la Tabla 5 presentada en la sección 2.4 y de los resultados obtenidos en la modelación, es posible realizar una comparación. Cabe notar que los resultados obtenidos con el modelo

conceptual desarrollado corresponden a una estimación de la presencia de PAHs en La Farfana, por lo que no es posible asegurar el cumplimiento de la normativa en base a estos.

Considerando el impacto de la presencia de PAHs en cauces naturales, los Países Bajos establecieron concentraciones máximas permisibles (MPCs) para asegurar la protección de ecosistemas acuáticos de 2.000 ng/L para el naftaleno y de 10 ng/L para el benzo(a)pireno (NIPHE, 2012). Los resultados obtenidos en la modelación no superan la concentración máxima permisible en ninguno de los dos casos.

En el caso de implementar un sistema de reúso directo potable con el efluente de La Farfana, siguiendo las indicaciones de la EPA es necesario verificar el cumplimiento del *Clean Water Act* y del *Safe Drinking Water Act*, donde se establece una concentración máxima permitida de 200 ng/L para el benzo(a)pireno (EPA, 2017). Los resultados obtenidos se encuentran por debajo de esta concentración.

Para el caso de reúso directo potable para riego de cultivos, se debe considerar el impacto que tendrán los PAHs en los cultivos y en el suelo. La evidencia indica que la ingesta de comida corresponde a una de las mayores rutas de exposición a PAHs (Yebra-Pimentel et al., 2014). De esta forma, a pesar de que las recomendaciones establecidas por la OMS para reúso de agua en agricultura no establecen concentraciones máximas para los PAHs (OMS, 2006), se debe evaluar el impacto que tendrá en la acumulación de estos en el suelo y los alimentos (Samia et al., 2012; Khan et al., 2008; Haddaoui et al., 2016).

Khan et al. (2008) realizaron un estudio donde analizaron la acumulación de PAHs en lechugas cultivadas en suelos contaminados por riego con agua servida tratada, donde se observó que en el caso del naftaleno el factor de transferencia suelo-planta fue de 0,64, mientras que para el benzo(a)pireno fue de 0,55. En base a esos resultados, se destaca la importancia de considerar la concentración de PAHs presente en el agua servida tratada a utilizar para riego de cultivos por los posibles riesgos asociados.

En relación al reúso de los lodos estabilizados para agricultura, en Chile la normativa no establece concentraciones máximas para los PAHs. Sin embargo, en el caso de Francia sí se regula la concentración máxima permitida para el benzo(a)pireno y corresponde a 2 µg/gMS (Collivignarelli et al., 2019). Los resultados obtenidos para el benzo(a)pireno se encuentran por debajo de esta concentración.

En base a la sección 2.4, se observó que Chile cuenta con normativa limitada relacionada al reúso de las ARes tratadas. Para poder desarrollar el reúso de ARes tratadas como una nueva fuente de agua, se requiere de un marco regulatorio el cual fomente y establezca estándares adecuados (Fundación Chile, 2017). De esta forma, se destaca la importancia del desarrollo de normativa, la cual considere además el impacto de la presencia de los PAHs en las ARes tratadas. En el caso de reúso potable directo, se podría considerar la recomendación realizada por la OMS, estableciendo una concentración máxima de 700 ng/L para el benzo(a)pireno. En el caso de reúso directo para riego en agricultura, la OMS no establece concentración máxima de PAHs, sin embargo, se recomienda evaluar el posible efecto de estos por su potencial acumulación en los cultivos. En cualquier caso, resulta relevante continuar con los estudios de la presencia de PAHs en aguas servidas en Chile para poder cuantificar su presencia en estas y también poder incluirlos en la normativa.

5 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En base a los resultados obtenidos a partir del modelo conceptual fue posible cumplir con los objetivos propuestos para el presente trabajo. Con la aplicación del modelo conceptual desarrollado fue posible realizar una estimación de las concentraciones de PAHs a lo largo de las distintas etapas de tratamiento en la PTAS La Farfana. De esta forma, se cuantificó la magnitud de los distintos procesos de remoción y movilidad en cada etapa de tratamiento para la línea de agua y la de lodos. Además, tomando en cuenta que las PTAS constituyen una fuente importante de ingreso de PAHs a los cauces naturales y que la PTAS La Farfana trata aproximadamente el 50% de las ARes del Gran Santiago, la concentración estimada en el efluente puede ser información valiosa para afrontar la problemática de estos contaminantes y su presencia en el medioambiente.

Considerando una concentración de entrada a la planta de 882 ng/L de naftaleno y de 100 ng/L de benzo(a)pireno, las concentraciones efluentes obtenidas fueron de 207 ng/L y 6 ng/L. Con los resultados obtenidos, se comprobó que la remoción de los PAHs está sujeta a las características fisicoquímicas del PAH estudiado, notándose diferencias claras entre el comportamiento del naftaleno, un LMW PAH y el benzo(a)pireno, un HMW PAH. Dentro de las diferencias observadas, se destaca que en el caso del naftaleno se obtuvo una remoción por volatilización de 21% en el tratamiento primario y secundario, mientras que para el benzo(a)pireno la volatilización obtenida fue prácticamente nula, de un 1%. Para ambos PAHs estudiados, la biodegradación en el tratamiento secundario fue poco efectiva, obteniendo remociones de un 5% para el naftaleno y de 3% para el benzo(a)pireno.

En ambos casos se observó que el proceso predominante fue el de la adsorción a MP, el cual se encuentra caracterizado por el coeficiente de partición sólido-líquido. Del análisis de sensibilidad realizado, se observó que las variaciones en dicho parámetro pueden afectar hasta en un 32% la concentración efluente obtenida, por lo que se destaca la importancia de estimarlos de forma precisa. En este sentido, la disponibilidad de datos experimentales en la planta podría ayudar en gran medida para lograr una calibración precisa de los parámetros como el coeficiente de partición sólido líquido o las constantes de equilibrio de sorción a material particulado y DCM, además de la concentración afluente a la PTAS.

En la línea de lodos se observaron remociones despreciables por volatilización y por biodegradación anaeróbica, tanto para el naftaleno como el benzo(a)pireno. Al igual que para la línea de aguas el proceso dominante fue el de adsorción/desorción a MP, y el principal mecanismo de remoción fueron los retornos a la línea de aguas.

Respecto a las limitaciones del modelo, se destaca en primer lugar la falta de mediciones experimentales, por lo que la concentración afluente considerada se estimó a partir de otras experiencias a nivel internacional, la cual además considera únicamente la fase disuelta afluente de los PAHs. Además, a pesar de que la literatura indica que la remoción de PAHs en la etapa de tratamiento preliminar es baja, podría ser valioso modelar la remoción de PAHs en esta ya que puede existir remoción por volatilización o adsorción a las arenas y grasas y aceites.

Para la validación de los resultados obtenidos se realizó una comparación de estos con aquellos obtenidos de forma experimental y conceptual por otras experiencias. A partir de esto fue posible determinar que los resultados del presente trabajo se encuentran dentro del rango esperado, aunque

las experiencias internacionales presentan gran variabilidad dependiendo de factores como la estacionalidad, porcentaje de industrias y la concentración afluyente del PAH.

Adicionalmente, se compararon los resultados obtenidos con la modelación con la normativa existente relacionada al reúso directo de ARes tratadas. En el caso de un sistema de reúso directo potable, y siguiendo la recomendación de la EPA, se observó que la concentración de benzo(a)pireno obtenida con el modelo no supera a la concentración límite establecida para agua potable por la EPA. En el caso de la implementación de un sistema de reúso directo no potable, a pesar de no encontrarse los PAHs en la normativa de entidades como la OMS, se debe considerar que el riego contaminado con PAH puede generar una acumulación de estos en los alimentos. Tomando en cuenta la condición de sequía en el país, y que bajo el contexto de cambio climático éstas serán más recurrentes, se considera de gran importancia la generación de normativa que permita e incentive el reúso de aguas, para poder lograr una optimización de este recurso de forma responsable con la salud de las personas y el medioambiente.

BIBLIOGRAFÍA

- Aguas Andinas. (2001). *Informe técnico de clasificación del proyecto "Planta de Tratamiento de Aguas Servidas La Farfana"*. Santiago.
- Aguas Andinas. (2019). *Informe de Seguimiento Ambiental Planta de Tratamiento de Aguas Servidas La Farfana Etapa de Operación. Informe N°61 (Enero-Marzo 2019)*. Santiago, Chile.
- Aguas Andinas. (2019). *Informe de Seguimiento Ambiental Planta de Tratamiento de Aguas Servidas La Farfana Etapa de Operación. Informe N°62*. Santiago, Chile.
- Aguas Andinas. (2020). *Informe de Seguimiento Ambiental Planta de Tratamiento de Aguas Servidas La Farfana Etapa de Operación. Informe N°63 (Agosto-Octubre 2019)*. Santiago, Chile.
- Aguas Andinass. (2019). *Informe de Seguimiento Ambiental Planta de Tratamiento de Aguas Servidas La Farfana, Etapa de Operación, Informe N°61*. Santiago.
- AKROS Ing. (2014). Aguas Andinas proceso tarifario 2015-2020. Informe Final Modelación PTAS La Farfana y El Trebal-Mapocho. *Technical report, AKROS Ingeniería Ltda*.
- Alegbeleye, O. O. (2017). Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: A Critical Review of Environmental Occurrence and Bioremediation. *Environmental management*.
- Ballivian, P. (2018). Reúso de aguas servidas tratadas: desafíos en la regulación para un uso eficiente del recurso hídrico. *Revista de Derecho Aplicado LLM UC 2*.
- Bamforth, S., & Singleton, I. (2005). Review: Bioremediation of polycyclic aromatic hydrocarbons: current knowledge and future directions. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*.
- Barret, M., Carrere, H., Delgadillo, L., & Patureau, D. (2010c). PAH fate during the anaerobic digestion of contaminated sludge: Do bioavailability and/or cometabolism limit their biodegradation? *Water Research 44*, 3797-3806.
- Barret, M., Carrere, H., Latrille, E., Wisniewski, C., & Patureau, D. (2010a). Micropollutant and sludge characterization for modelling sorption equilibria. *Environmental Science and Technology*, 1100-1106.
- Barret, M., Cea Barcia, G., Carrere, H., & Patureau, D. (2010b). Influence of feed characteristics on the removal of micropollutants during the anaerobic digestion of contaminated sludge. *Journal of Hazardous Materials 181*, 241-247.
- Barret, M., Pautreau, D., Latrille, E., & Carrere, H. (2010d). A three-compartment model for micropollutants sorption in sludge: Methodological approach and insights. *Water Research 44*, 616-624.
- Bautista, F., Sanz, R., Molina, C., González, N., & Sánchez, D. (2009). Effect of different non-ionic surfactants on the biodegradation of PAHs by diverse aerobic bacteria. *International Biodeterioration & Biodegradation 63*, 913-922.

- Bergqvist, P., Augulyte, L., & Jurjoniene, V. (2006). PAH and PCB removal efficiencies in Umea (Sweden) and Siauliai (Lithuania) Municipal Wastewater Treatment Plant. *Water Air and Soil Pollution*, 291-303.
- Bezza, F., & Nkhalambayausi-Chirwa, E. (2015). Desorption kinetics of polycyclic aromatic Desorption kinetics of polycyclic aromatic the effect of biosurfactant supplementation on the rapidly desorbing fractions. *Biotechnology & Biotechnological Equipment*, 680-688.
- Birkett, J., & Lester, J. (2003). *Endocrine Disrupters in Wastewater and Sludge Treatment Processes*. IWA Publishing.
- Bussetti, F., Heitz, A., Cuomo, M., Badoer, S., & Traverso, P. (2006). Determination of sixteen polycyclic aromatic hydrocarbons in aqueous and solid samples from an Italian wastewater treatment plant. *Journal of Chromatography A*, 1102, 104–115.
- Byrns, G. (2001). The fate of xenobiotic organic compounds in wastewater treatment plants. *Wat. Res. Vol. 35*.
- Centro de Ciencia del Clima y la Resiliencia (CR)2. (2015). *La megasequía 2010-2015: Una lección para el futuro*. Santiago.
- Centro de Ciencia del Clima y la Resiliencia (CR)2. (28 de Julio de 2020). *Centro de Ciencia del Clima y la Resiliencia (CR)2*. Obtenido de Análisis: ¿Terminó la megasequía? Aún no, pero escapamos de la sequía extrema: <http://www.cr2.cl/analisis-termino-la-megasequia-aun-no-pero-escapamos-de-la-sequia-extrema-cr2/>
- Chang, B., Chang, S., & Yuan, S. (2003). Anaerobic degradation of polycyclic aromatic hydrocarbons in sludge. *Advances in Environmental Research* 7, 623–628.
- CHILE. Ministerio de Obras Públicas. (15 de Feb de 2018). LEY NÚM. 21.075. *Regula la recolección, reutilización y disposición de aguas grises*. Santiago, Chile.
- Clara, M., Kreuzinger, N., Strenn, B., Gans, O., & Kroiss, H. (2005). The solids retention time—a suitable design parameter to evaluate the capacity of wastewater treatment plants to remove micropollutants. *Water Research* 39, 97-106.
- Collivignarelli, M., Abbà, A., Frattarola, A., Miino, M., Padovani, S., Katsoyiannis, I., & Torretta, V. (2019). Legislation for the Reuse of Biosolids on Agricultural Land in Europe: Overview. *Sustainability*.
- Criddle, C. (1993). The Kinetics of Cometabolism. *Biotechnonology and Bioengineering*, Vol. 41, 1048-1056.
- Decreto 4. (2009). Reglamento para el manejo de lodos generados en plantas de tratamiento de aguas servidas. *Diario Oficial de la República de Chile*.
- Decreto 90. (2001). Establece norma de emisión para la regulación de contaminantes asociados a las descargas de residuos líquidos a aguas marinas y continentales superficiales. *Diario Oficial de la República de Chile*.

- Delgadillo-Mirquez, L., Lardon, L., Steyer, J.-P., & Patureau, D. (2011). A new dynamic model for bioavailability and cometabolism of micropollutants during anaerobic digestion. *Water Research* 45, 4511-4521.
- Departamento de Ingeniería Civil de la Universidad de Chile. (2019). 8vo Coloquio de Ingeniería para un Mundo Real: El reúso de Aguas Servidas en Santiago de Chile. Obtenido de <http://ingenieria.uchile.cl/noticias/154969/>
- Dionisi, D., Bertin, L., Bornoroni, L., Capodicasa, S., Petrangeli, M., & Fava, F. (2006). Removal of organic xenobiotics in activated sludges under aerobic conditions and anaerobic digestion of the adsorbed species. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* 81, 1496–1505.
- El-Hadj, T., Dosta, J., & Mata-Alvarez, J. (99–107). Biodegradation of PAH and DEHP micropollutants in mesophilic and thermophilic anaerobic sewage sludge digestion. *Water Science and Technology*, 53, 2006.
- Fatone, F., Di Fabio, S., Bolzonella, D., & Cecchi, F. (2011). Fate of aromatic hydrocarbons in Italian municipal wastewater systems: An overview of wastewater treatment using conventional activated-sludge processes (CASP) and membrane bioreactors (MBRs). *Water Research* 45, 93-104.
- Fischer, K., & Majewski, M. (2014). Cometabolic degradation of organic wastewater micropollutants by activated sludge and sludge-inherent microorganisms. *Applied Microbiology and Biotechnology* volume 98, 6583–6597.
- Forsgren, A. J. (2015). *Wastewater treatment - Occurrence and Fate of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs)*. CRC Press, Taylor & Francis Group.
- Fundación Chile. (2018). *Claves para la gestión de aguas residuales rurales: Primera planta de reúso de aguas tratadas en la Región de Coquimbo, una experiencia replicable*. Santiago, Chile.
- Haddaoui, I., Mahjoub, O., Mahjoub, B., Boujelben, A., & Di Bella, G. (2006). Occurrence and distribution of PAHs, PCBs, and chlorinated pesticides in Tunisian soil irrigated with treated wastewater. *Chemosphere* 146, 195-295.
- Hamby, D. (1994). A review of techniques for parameter sensitivity analysis of environmental models. *Environmental Monitoring and Assessment*, Vol 32, 135-154.
- Haritash, A., & Kaushik, C. (2009). Biodegradation aspects of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs): A review. *Journal of Hazardous Materials*, 1-15.
- Huckins, J., Petty, J., Orazio, C., Lebo, J., Clark, R., Gibson, V., . . . Echols, K. (1999). Determination of Uptake Kinetics (Sampling Rates) by Lipid-Containing Semipermeable Membrane Devices (SPMDs) for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) in Water. *Environ. Sci. Technol.*, 3918-3923.
- Jelic, A., Katsou, E., Malamis, S., Bolzonella, D., & Fatone, F. (2015). Occurrence, Removal, and Fate of PAHs and VOCs in Municipal Wastewater Treatment Plants: A Literature Review. En A. Forsgren, *Wastewater treatment; Occurrence and Fate of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs)* (págs. 91-112). CRC Press.

- Juhasz, A., & Naidu, R. (2000). Bioremediation of high molecular weight polycyclic aromatic hydrocarbons: a review of the microbial degradation of benzo(a)pyrene. *Int Biodeterior Biodegradation* 45, 57–88.
- Khan, S., Aijun, L., Zhang, S., Hu, Q., & Zhu, Y.-G. (2008). Accumulation of polycyclic aromatic hydrocarbons and heavy metals in lettuce grown in the soils contaminated with long-term wastewater irrigation. *Journal of Hazardous Materials*.
- Lee, K.-C., Rittmann, B. E., Shi, J., & McAvoy, D. (1998). Advanced steady-state model for the fate of hydrophobic and volatile compounds in activated sludge. *Water Environment Research, Vol 70*, 1118-1131.
- Ley 21.075 . (2018). Regula la recolección, reutilización y disposición de aguas grises. *Diario Oficial de la República de Chile*.
- Liu, J., Wang, X., & Fan, B. (2011). Characteristics of PAHs adsorption on inorganic particles and activated sludge in domestic wastewater treatment. *Bioresource Technology* 102, 5305-5311.
- Liu, Z., Li, Q., Wu, Q., Kuo, D., Chen, S., Hu, X., . . . Luo, M. (s.f.). Removal Efficiency and Risk Assessment of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in a Typical Municipal Wastewater Treatment Facility in Guangzhou, China.
- Luo, Y., Guo, W., Ngo, H., Nghiem, L., Hai, F., Zhang, J., . . . Wang, X. (2014). A review on the occurrence of micropollutants in the aquatic environment and their fate and removal during wastewater treatment. *Science of the Total Environment*, 619-641.
- Mailler, R., Gasperi, J., Patureau, D., Vulliet, E., Delgenes, N., Danel, A., . . . Rocher, V. (2016). Fate of emerging and priority micropollutants during the sewage sludge treatment: Case study of Paris conurbation. Part 1: Contamination of the different types of sewage sludge. *Waste Management*.
- Manoli, E., & Samara, C. (1999). Polycyclic aromatic hydrocarbons in natural waters: Sources, occurrence and analysis. *Journal of Environmental Quality*, 176-187.
- Manoli, E., & Samara, C. (2007). The removal of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the wastewater treatment process: Experimental calculations and model predictions. *Environmental Pollution* 151, 477-485.
- Margot, J., Rossi, L., Barry, D., & Holliger, C. (2015). A review of the fate of micropollutants in wastewater treatment plants. *WIREs Water*, 457–487.
- Meakins, N., Bubb, J., & Lester, J. (1994). The fate and behaviour of organic micropollutants during wastewater treatment processes: a review. *Int. J. Environment and Pollution Vol. 4*.
- Ministerio de Agricultura, Alimentación y Medio Ambiente, España. (2012). *Introducción al conocimiento y prevención de los contaminantes orgánicos persistentes*. Madrid.
- Mojiri, A., Zhou, J., Ohashi, A., Ozaki, N., & Kindaichi, T. (2019). Comprehensive review of polycyclic aromatic hydrocarbons in water sources, their effects and treatments. *Science of the Total Environment, Vol 696*.

- Mozo , I., Bounouba, M., Mengelle, E., Lesage, N., & Sperandio, M. (2019). Modelling PAHs removal in activated sludge process: effect of disintegration. *Water Science and Technology*, 794-805.
- Nanning, J., Mena, M., & Rojas, N. (2008). ASSM (Activated Sludge Simple Model). *XXXI Congreso Interamericano AIDIS*.
- National Institute for Public Health and the Environment. (2012). Environmental risk limits for polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs): For direct aquatic, benthic, and terrestrial toxicity.
- Perelo, L. (2010). Review: In situ and bioremediation of organic pollutants in aquatic sediments. *Journal of Hazardous Materials* 177, 81-89.
- Plosz, B., Langford, K., & Thomas, K. (2012). An activated sludge modelling framework for xenobiotic trace chemicals (ASM-X): Assesment of diclofenac and Carbamazepine. *Biotechnology and Bioengineering*.
- Plosz, B., Leknes, H., & Thomas, K. (2010). Impacts of competitive inhibition, parent compound formation and partitioning behavior on the removal of antibiotics in municipal wastewater treatment. *Environmental Science and Technology*, Vol. 44, 734-742.
- Polesel, F. (2016). Modelling the fate of Xenobiotic trace chemicals via Wastewater Treatment and Agricultural Resource Reuse. *Technical University of Denmark, DTU Environment*.
- Pomies, M., Choubert, J.-M., Wisniewski, C., & Coquery, M. (2013). Modelling of micropollutant removal in biological wastewater treatments: A review. *Science of the Total Environment* 443, 733-748.
- Provoste, F. (2020). Estudio de la distribución de PCBs en la línea de tratamiento de la biofactoría Mapocho-Trebal de Santiago y sus consecuencias para el reúso de las aguas tratadas. *Universidad de Chile, Chile*.
- Qiao, M., Cao, W., Liu, B., Bai, Y., Qi, W., Zhao, X., & Qu, J. (2016). Formation of oxygenated polycyclic aromatic hydrocarbons from polycyclic aromatic hydrocarbons during aerobic activated sludge treatment and their removal process. *Chemical Engineering Journal*, 302, 50–57.
- Qiao, M., Qi, W., Liu, H., & Qu, J. (2014). Occurrence, behavior and removal of typical substituted and parent polycyclic aromatic hydrocarbons in a biological wastewater treatment plant. *Water Research* 52, 11-19.
- Samia, K., Abdelkarim, C., Yassin, H., & Teruo, H. (2012). The effect of long-term soil irrigation by wastewater on organic matter, polycyclic aromatic hydrocarbons, and heavy metals evolution: case study of Zaouit Sousse (Tunisia). *Arab J Geosci*.
- Semblante, G., Hai, F., Huang, X., Ball, A., & Price, W. (2015). Trace organic contaminants in biosolids: Impact of conventional wastewater and sludge processing technologies and emerging alternatives. *Journal of Hazardous Materials*, 1-17.

- Siebielska, I. (2014). Comparison of changes in selected polycyclic aromatic hydrocarbons concentrations during the composting and anaerobic digestion processes of municipal waste and sewage sludge mixtures. *Water Science and Technology*, 1617-1625.
- Sponza, D., & Gok, O. (2011). Effects of sludge retention time and biosurfactant on the treatment of polyaromatic hydrocarbon (PAH) in a petrochemical industry wastewater. *Water Science and Technology*, 64, 2282–2292.
- Sun, S., Jia, L., Li, B., Yuan, A., Kong, L., Qi, H., . . . Wu, Y. (2018). The occurrence and fate of PAHs over multiple years in a wastewater treatment plant of Harbin, Northeast China. *Science of the Total Environment* 624, 491-498.
- Thunnissen, N., van de Meent, D., Struijs, J., Hjort, M., Redman, A., Smit, M., . . . van Zelm, R. (2020). Simulating behavior of petroleum compounds during refinery effluent treatment using the SimpleTreat model. *Chemosphere*.
- Tian, W., Bai, J., Liu, K., Sun, H., & Zhao, Y. (2012). Occurrence and removal of polycyclic aromatic hydrocarbons in the wastewater treatment process. *Ecotoxicology and Environmental Safety* 82, 1-7.
- Torretta, V. (2012). PAHs in wastewater: removal efficiency in a conventional wastewater treatment plant and comparison with model predictions. *Environmental Technology* 33:8, 851-855.
- Torretta, V., & Katsoyiannis, A. (2013). Occurrence of polycyclic aromatic hydrocarbons in sludges from different stages of a wastewater treatment plant in Italy. *Environmental Technology*, 34:7, 937-943.
- Trably, E., Patureau, D., & Delgenes, J. (2003). Enhancement of polycyclic aromatic hydrocarbons removal during anaerobic treatment of urban sludge. *Water Science and Technology*, 53-60.
- U.S Environmental Protection Agency. (2009). National Primary Drinking Water Regulations.
- U.S. Environmental Protection Agency (EPA). (2014). Clean Water Act. *Toxic and Priority Pollutants*.
- U.S. Environmental Protection Agency (EPA). (2017). Potable Reuse Compendium. Washington D.C.
- UK Environment Agency. (2019). *Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs): sources, pathways and environmental data*. Bristol: Environment Agency.
- Unión Europea (UE). (1998). Directiva 98/83/CE del Consejo. Relativa a la calidad de las aguas destinadas al consumo humano. *Diario Oficial de las Comunidades Europeas*.
- Unión Europea (UE). (2001). Decisión 2455/2001/CE del Parlamento Europeo y del Consejo. Por la que se aprueba la lista de sustancias prioritarias en el ámbito de la política de aguas, y por la. *Diario Oficial de las Comunidades Europeas*.

- Unión Europea (UE). (2004). Directiva 2004/107/CE del Parlamento Europeo y del Consejo. Relativa al arsénico, el cadmio, el mercurio, el níquel y los hidrocarburos aromáticos policíclicos en. *Diario Oficial de la Unión Europea*.
- Unión Europea (UE). (2006). Reglamento (CE) No 1881/2006 de la Comisión. Por el que se fija el contenido máximo de determinados contaminantes en los productos. *Diario Oficial de la Unión Europea*.
- Villar, P., Villar, M., Callejón, M., Pérez, J., Jiménez, J., Alonso, E., & Guiraúm, A. (2009). Evolution of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) and heavy metals in sludge samples from conventional activated sludge wastewater treatment plants. *Environmetrics*, Vol. 20, 561-574.
- Vogelsang, C., Grung, M., Jantsch, T., Tollefsen, K., & Liltved, H. (2006). Occurrence and removal of selected organic micropollutants at mechanical, chemical and advanced wastewater treatment plants in Norway. *Water Research* 40, 3559 – 3570.
- Wang, L., Yang, Z., & Niu, J. (2011). Temperature-dependent sorption of polycyclic aromatic hydrocarbons on natural and treated sediments. *Chemosphere*, 82, 895–900.
- World Health Organization. (2017). *Potable reuse: Guidance for Producing Safe Drinking Water*. Geneva: World Health Organization.
- Yang, L., Jin, M., Tong, C., & Xie, S. (2013). Study of dynamic sorption and desorption of polycyclic aromatic hydrocarbons in silty-clay soil. *Journal of Hazardous Materials*, 77-85.
- Yebra-Pimentel, I., Fernández-González, R., Martínez-Carballo, E., & Simal-Gándara, J. (2013). A Critical Review about the Health Risk Assessment of PAHs and their Metabolites in Foods. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*.
- Zhang, M., & Zhu, L. (2009). Sorption of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons to Carbohydrates and Lipids of Ryegrass Root and Implications for a Sorption Prediction Model. *Environ. Sci. Technol*, 2740-2745.
- Zhang, X., Yu, T., Li, X., Yao, J., Liu, W., Chang, S., & Chen, Y. (2019). The fate and enhanced removal of polycyclic aromatic hydrocarbons in wastewater and sludge treatment system: A review. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 1425-1475.

ANEXO A: BASE TEÓRICA DE LOS MODELOS

1. Tratamiento primario

La confección del modelo para la etapa de tratamiento primario está basado en el “*Advanced steady-state model for the fate of hydrophobic and volatile compounds in activated sludge*” desarrollado por Lee et al. (1998).

Este modelo considera tanto la etapa primaria como la secundaria; para la etapa primaria considera un sedimentador, mientras que para el tratamiento secundario considera un estanque con aireación y un sedimentador secundario.

El modelo considera los siguientes procesos, a través de los cuales el contaminante objetivo puede migrar o ser degradado:

1. Advección: el contaminante es transportado debido a la presencia de un flujo por el sistema.
2. Adsorción - desorción: los contaminantes hidrofóbicos pueden verse adsorbidos o desorbidos entre la fase líquida y adsorción a sólidos suspendidos volátiles (VSS). La concentración que se encuentra adherida se transfiere fuera del sistema junto a los lodos.
3. Biodegradación de la fase disuelta: el contaminante es degradado por bacterias en los flocs
4. Biodegradación de la fase adsorbida: este modelo considera que la fracción del contaminante que se encuentra adherida a los sólidos suspendidos volátiles se encuentra biodisponible para ser degradado
5. Volatilización: se considera volatilización debido a las burbujas generadas en la aireación del reactor como volatilización en la superficie

De todos los procesos mencionados, se considera que en el tratamiento primario pueden ocurrir: adsorción, advección y volatilización en la superficie. Para el caso del tratamiento secundario, se consideran todos los procesos.

La ecuación general considerada para la modelación:

$$V \cdot \frac{\partial C_{T,j}}{\partial t} = R_{adv} + R_{sorb} + R_{bio}^d + R_{bio}^s + R_{vol,bub} + R_{vol,surf} \quad (25)$$

Donde:

$C_{T,j}$: concentración total del compuesto (fase adsorbida y fase disuelta)

R_{adv} : tasa de advección [ng/d]

R_{bio}^d : tasa de biodegradación del compuesto disuelto [ng/d]

R_{bio}^s : tasa de biodegradación del compuesto adsorbido [ng/d]

$R_{vol,bub}$: tasa de volatilización por aireación [ng/d]

$R_{vol,surf}$: tasa de volatilización causada superficial [ng/d]

Considerando estado estacionario,

$$0 = R_{adv} + R_{sorb} + R_{bio}^d + R_{bio}^s + R_{vol,bub} + R_{vol,surf} \quad (26)$$

A continuación se detallan los supuestos y ecuaciones propuestas por Lee et al. (1998) para el tratamiento primario.

Adsorción

$$R_{ads,p} = -Q_w^p K_d^p C_j^p X_w^p \quad (27)$$

Donde:

X_w^p : concentración de VSS en lodos de deshecho

Q_w^p : caudal de lodo de descarte [m³/d]

K_d^p : coeficiente de partición sólido-líquido [m³/gVSS]

C_j^p : concentración en la fase disuelta en el efluente primario [mg/L]

Para poder usar la ecuación anterior para expresar la tasa de adsorción, se considera que sigue una isoterma linear, además de considerar equilibrio entre las fases disuelta y adsorbida.

El coeficiente de partición puede estimarse a partir del coeficiente de partición octanol/agua:

$$K_d^p = (6.3 * 10^{-7}) f_{oc} K_{ow} \quad (28)$$

Si se considera la composición de los sólidos primarios como C₁₀H₁₉O₃N, f_{oc}=0.597 g C orgánico/g sólidos.

Volatilización

Para el tratamiento primario ya que no existe aireación se considera únicamente volatilización superficial.

$$R_{vol,p} = -V \cdot K_{OL} \cdot a \cdot \left[C - MW \left(\frac{P}{H_c RT} \right) \right] \quad (29)$$

$$\frac{1}{K_{OL}} = \frac{1}{K_L} + \frac{1}{H_c K_G} \quad (30)$$

Reordenando la ecuación, se tiene que:

$$K_{OL} = \frac{H_c}{H_c + \frac{k_L}{k_G}} \cdot k_L \quad (31)$$

Donde:

K_{OL} : coeficiente de transferencia de masa [m/d]

H_c : coeficiente de Henry adimensional

MW : peso molecular del compuesto [g/mol]

k_L : coeficiente de transferencia de masa en fase líquida [m/d]

k_G : coeficiente de transferencia de masa en fase gaseosa [m/d]

a : área superficial de interfase (área superficial del sedimentador m²/ volumen de sedimentador m³), m⁻¹

V : volumen [m³]

P : presión parcial del aire [atm]

R : constante de los gases, g*cm²/g*mol*K

T : temperatura, K

Asumiendo que la presión P es cero en el aire, vale decir, que la velocidad del viento es suficientemente fuerte para evitar acumulación de vapor sobre la superficie del agua, entonces la tasa de volatilización se reescribe como:

$$R_{vol,p} = -V \cdot K_L \cdot a_{sur,p} \cdot C_j^p \frac{H_c}{H_c + (k_L/k_G)} \quad (32)$$

2. Tratamiento secundario

El modelo conceptual desarrollado para el tratamiento secundario está basado en el modelo ASM-X (Activated Sludge Model for Xenobiotics) por Plosz et al. (2010, 2012).

Dicho modelo considera 3 fases para el xenobiótico: fase disuelta, C_{LI} (la cual considera conjuntamente la fase disuelta libre y la fase adsorbida a material disuelto coloidal), fase adsorbida a los lodos, C_{SL} y la concentración disuelta de compuestos retransformables (conjugados), C_{CJ} .

Dentro de los procesos de remoción considera: desorción, adsorción, biodegradación y retransformación de la fracción retransformable. Todos los procesos, con la excepción de la desorción se modelan en condición aeróbica y anóxica.

Sorción/desorción

Los procesos de adsorción y desorción se modelan mediante ecuaciones diferenciales independientes:

$$r_{desorción} = k_{des} \cdot C_{SL} \quad (33)$$

$$r_{sorción,ox} = k_{des} \cdot K_{D,ox} \cdot C_{LI} \cdot \frac{S_o}{K_o + S_o} \cdot X_{SS} \quad (34)$$

$$r_{sorción,ax} = k_{des} \cdot K_{D,Ax} \cdot C_{LI} \cdot \frac{K_o}{K_o + S_o} \cdot X_{SS} \quad (35)$$

Donde:

$r_{desorción}$: tasa de desorción [ng/d]

$r_{sorción,ox}$: tasa de sorción en condición aeróbica [ng/d]

$r_{sorción,ax}$: tasa de sorción en condición anóxica [ng/d]

k_{des} : coeficiente de desorción para C_{SL} [L/d]

$K_{D,ox}$: coeficiente de partición sólido líquido aeróbico [L/gSS*d]

$K_{D,Ax}$: coeficiente de partición sólido líquido anóxico [L/gSS*d]

S_o : concentración de oxígeno disuelto [mgO₂/L]

K_o : constante de saturación media para el oxígeno disuelto [mgO₂/L]

X_{SS} : concentración de sólidos suspendidos [gSS/L]

Biodegradación

En el trabajo del 2010, Plosz et al. consideran en la biodegradación el efecto de la inhibición competitiva por la presencia de un sustrato de crecimiento. De esta forma, la tasa de biodegradación se considera como:

$$r_{biodeg,ox} = k_{Bio,ox} \cdot C_{LI} \cdot \frac{K_s \cdot \eta_{bio}}{K_s \cdot \eta_{bio} + S_s} \cdot \frac{S_o}{K_o + S_o} \cdot X_{SS} \quad (36)$$

$$r_{biodeg,ax} = k_{Bio,ax} \cdot C_{LI} \cdot \frac{K_s \cdot \eta_{bio}}{K_s \cdot \eta_{bio} + S_s} \cdot \frac{K_o}{K_o + S_o} \cdot X_{SS} \quad (37)$$

Donde:

$k_{Bio,ox}$: coeficiente de biotransformación aeróbico [L/gSS*d]

$k_{Bio,ax}$: coeficiente de biotransformación anóxico [L/gSS*d]

K_s : constante de saturación media para S_s [mg/L]

η_{bio} : factor de corrección para la inhibición de C_{LI} en presencia de S_s [-]

S_o : concentración de oxígeno disuelto [mgO₂/L]

K_o : constante de saturación media para el oxígeno disuelto [mgO₂/L]

X_{SS} : concentración de sólidos suspendidos [gSS/L]

Sin embargo, en su trabajo posterior “An activated sludge modelling framework for xenobiotic trace chemicals (ASM-X): assessment of diclofenac and carbamazepine”, en lugar de considerar el efecto de la inhibición competitiva, consideran la biodegradación por cometabolismo.

$$r_{biodeg,ox} = \left[q_{C,ox} \cdot \frac{S_s}{K_s + S_s} + k_{Bio,ox} \right] C_{LI} \frac{S_o}{K_o + S_o} X_{SS} \quad (38)$$

$$r_{biodeg,Ax} = \left[q_{C,Ax} \cdot \frac{S_s}{K_s + S_s} + k_{Bio,Ax} \right] C_{LI} \frac{K_o}{K_o + S_o} X_{SS} \quad (39)$$

Donde:

$q_{C,Ox}$: tasa específica máxima de biotransformación cometabólica en presencia de sustrato de crecimiento para C_{LI} en condición aeróbica [L/g*d]

$q_{C,Ax}$: tasa específica máxima de biotransformación cometabólica en presencia de sustrato de crecimiento para C_{LI} en condición anóxica [L/g*d]

S_s : sustrato de crecimiento [mg/L]

K_s : constante de saturación media para el sustrato de crecimiento [mg/L]

$k_{Bio,Ox}$: coeficiente de biotransformación aeróbica en ausencia de sustrato de crecimiento [L/g*d]

$k_{Bio,Ax}$: coeficiente de biotransformación anóxica en ausencia de sustrato de crecimiento [L/g*d]

S_o : concentración de oxígeno disuelto [mgO₂/L]

K_o : constante de saturación media para el oxígeno disuelto [mgO₂/L]

X_{SS} : concentración de sólidos suspendidos [gSS/L]

Retransformación

La retransformación corresponde a la formación del compuesto a partir de un compuesto conjugado. El modelo supone que el compuesto retransformable se encuentra únicamente en la fase disuelta, y no sufre procesos de adsorción.

$$r_{retrans,Ox} = k_{Dec,Ox} \cdot C_{CJ} \frac{K_s \eta_{Dec}}{K_s \eta_{Dec} + S_s} \frac{S_o}{K_o + S_o} X_{SS} \quad (40)$$

$$r_{retrans,Ax} = k_{Dec,Ax} \cdot C_{CJ} \frac{K_s \eta_{Dec}}{K_s \eta_{Dec} + S_s} \frac{K_o}{K_o + S_o} X_{SS} \quad (41)$$

Donde:

$k_{Dec,Ox}$: coeficiente de biotransformación para C_{CJ} en condición aeróbica [L/gX_{SS}*d]

$k_{Dec,Ax}$: coeficiente de biotransformación para C_{CJ} en condición anóxica [L/gX_{SS}*d]

K_s : constante de saturación media para el sustrato de crecimiento [mg/L]

η_{dec} : factor de corrección para la inhibición de formación C_{LI} en presencia de S_s [-]

S_o : concentración de oxígeno disuelto [mgO₂/L]

K_o : constante de saturación media para el oxígeno disuelto [mgO₂/L]

X_{SS} : concentración de sólidos suspendidos [gSS/L]

3. Espesadores, cámara de mezcla y deshidratador

Para la modelación de los espesadores, la cámara de mezcla y el deshidratador se utiliza el modelo de tres compartimientos desarrollado por Barret et al. (2010).

Este modelo considera tres fases para el microcontaminante en los lodos: la fase disuelta libre (C_{free} , $\mu\text{g/mL}$), la fase adsorbida a DCM (C_{DCM} , $\mu\text{g/g}_{DCM}$) y la fase adsorbida a material particulado (C_p , $\mu\text{g/g}_{PART}$). En condición de equilibrio, este sistema se ve descrito por dos ecuaciones:

$$K_{part} = \frac{C_p}{C_{free}} \quad (42)$$

$$K_{DCM} = \frac{C_{DCM}}{C_{free}} \quad (43)$$

El modelo de tres compartimientos supone que existe independencia entre la fase adsorbida a DCM y la fase adsorbida a material particulado, por lo que la sorción a cada compartimiento se realiza desde la fase disuelta libre.

4. Digestión anaeróbica

La modelación de la remoción en la digestión anaeróbica se realiza utilizando el modelo de cuatro compartimientos desarrollado por Degadillo-Mirquez et al. (2011).

El modelo asume que los microcontaminantes orgánicos se pueden encontrar de forma disuelta libre (C_f , $\mu\text{g/L}$), adsorbidos a material particulado (C_p , $\mu\text{g/g}_{COD-P}$), adsorbidos a DCM (dissolved and colloidal matter) (C_p , $\mu\text{g/g}_{COD-DCM}$) y en la fase gaseosa (C_g , $\mu\text{g/L}$).

En condición de equilibrio, el sistema de cuatro compartimientos se ve descrito por las siguientes ecuaciones:

$$K_p = \frac{C_p}{C_f} \quad (44)$$

$$K_{DCM} = \frac{C_{DCM}}{C_f} \quad (45)$$

$$K_H = \frac{C_g}{C_f} \quad (46)$$

Donde K_p (L/g_{COD-p}) es la constante de equilibrio de sorción a material particulado, K_{DCM} ($L/g_{COD-DCM}$) es la constante de equilibrio de sorción a DCM y K_H (constante de Henry adimensional) describe el equilibrio entre la fase gaseosa y la disuelta libre.

La masa total del OMP se expresa como concentración total líquida y gaseosa:

$$C_{t,liq} = C_f + c_p S_p + c_{DCM} S_S \quad (47)$$

$$C_g = K_H C_f \quad (48)$$

Donde S_p corresponde al sustrato particulado (concentración de material particulado, $g_{COD-p/L}$) y S_S corresponde al sustrato soluble (concentración de DCM, $g_{COD-DCM/L}$).

A partir de estas ecuaciones, y teniendo estimaciones de la concentración total líquida es posible estimar la concentración del contaminante en condición inicial en los distintos compartimientos con las ecuaciones presentadas a continuación:

$$C_f = \frac{C_{t,liq}}{1 + K_p S_p + K_{DCM} S_S} \quad (49)$$

$$c_p = \frac{C_{t,liq} K_p}{1 + K_p S_p + K_{DCM} S_S} \quad (50)$$

$$c_{DCM} = \frac{C_{t,liq} K_{DCM}}{1 + K_p S_p + K_{DCM} S_S} \quad (51)$$

Sorción

La cinética de sorción y desorción del contaminante entre la fase disuelta libre y la adsorbida a DCM y adsorbida a material particulado está determinado por las siguientes ecuaciones:

$$r_{sorp/desorp}^{part} = k_1 (c_p^* - c_p) = k_1 (K_p C_f - c_p) \quad (52)$$

$$r_{sorp/desorp}^{DCM} = k_2 (c_{DCM}^* - c_{DCM}) = k_2 (K_{DCM} C_f - c_{DCM}) \quad (53)$$

Donde c_p^* y c_{DCM}^* son las concentraciones del contaminante adsorbido a material particulado y a DCM en equilibrio. k_1 y k_2 con constantes cinéticas de primer orden de sorción a material particulado y DCM.

Biodegradación

La biodegradación en los lodos se modela como un proceso de dos etapas: en primer lugar hidrólisis del material particulado y luego la biodegradación del sustrato soluble a biogás.

El crecimiento de la biomasa se relaciona con el consumo del sustrato soluble siguiendo la cinética de Monod, mientras que el decaimiento de biomasa se incorpora en la transformación de biomasa activa a sustrato particulado.

La biodegradación del OMP se asume que ocurre mediante cometabolismo, ya que estos compuestos se presentan en bajas concentraciones, por lo que su biodegradación no puede resultar en crecimiento microbiano significativo. En consecuencia, la biodegradación se describe utilizando el modelo planteado por Criddle (1993), la cual se basa en el supuesto que la tasa de degradación cometabólica se ve mejorada por la generación de reductores causados por la degradación del sustrato de crecimiento. En su ausencia, la transformación cometabólica se relaciona con decaimiento endógeno. El modelo propuesto por Criddle incluye adicionalmente los efectos de la inhibición competitiva y los efectos negativos de productos tóxicos. En la Figura 14 se presenta un esquema del funcionamiento del cometabolismo en comparación con el mecanismo clásico de metabolismo.

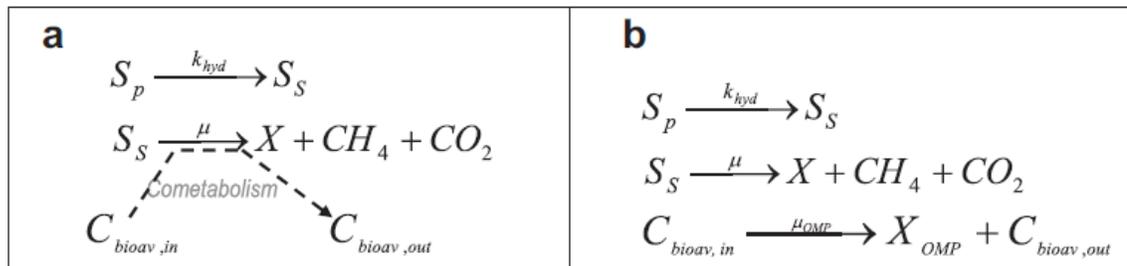


Figura 14: a) cometabolismo, b) metabolismo. (Fuente: Delgadillo-Mirquez et al. (2011))

Sin embargo, el modelo propuesto por Delgadillo-Mirquez et al. no considera estos últimos. A causa de esto, es necesario modificar las ecuaciones propuestas por Criddle.

$$r_{bio} = \left(T_c \frac{\mu}{Y} + k_c \right) \left(\frac{C_{bioav}}{K_{SC} + C_{bioav}} \right) X \quad (54)$$

Donde T_c es la capacidad de transformación del OMPs ($\mu\text{g}_{OMP}/\text{g}_{COD-Ss}$) (representando la interacción cometabolica entre el metabolismo del sustrato soluble y el metabolismo del OMP. k_c es la tasa de crecimiento específico de la biodegradación de OMPs en ausencia de sustrato primario ($\mu\text{g}_{OMP}/\text{g}_{COD-X} \cdot \text{d}$) y K_{SC} es la constante de saturación media del OMP ($\mu\text{g}_{OMP}/\text{L}$).

El modelo permite flexibilidad al momento de seleccionar la fracción biodisponible, pudiendo considerar como C_{bioav} sólo la fase disuelta libre, la fase disuelta libre y la fase adsorbida a DCM o todas las fases.

ANEXO B: MODELO CONCEPTUAL: LÍNEA DE AGUAS

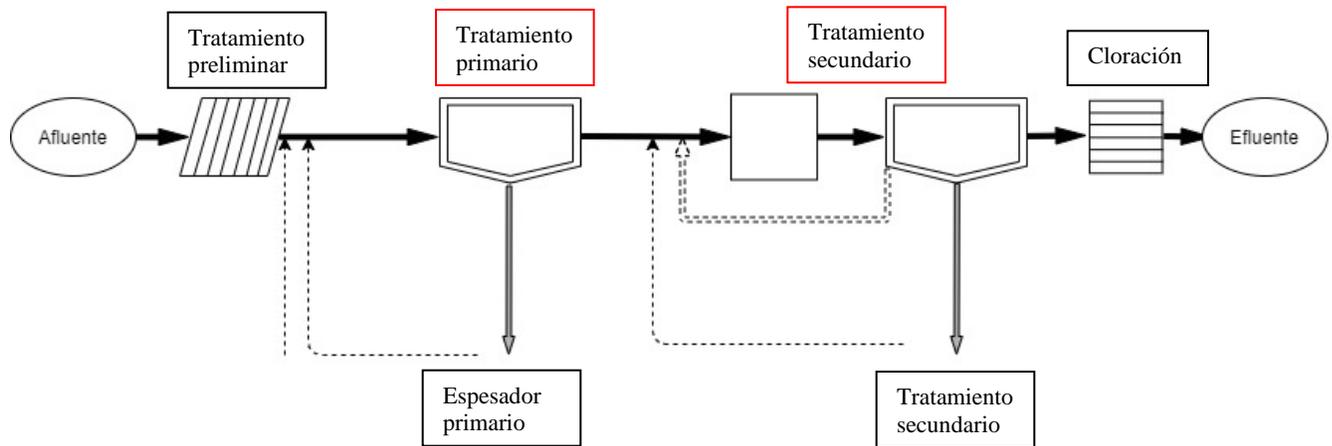


Figura 15: Estructura línea de aguas

En la línea de agua las etapas modeladas corresponden al tratamiento primario y el secundario, considerando los retornos correspondientes en cada una de estas. Al tratamiento primario ingresa la concentración afluente, la concentración recirculada desde el deshidratador y la recirculada desde el espesador primario. El efluente se dirige al tratamiento secundario mientras que los lodos primarios son derivados al espesador primario. Al tratamiento secundario ingresa el efluente del tratamiento primario y el retorno del espesador secundario. Luego del tratamiento secundario el agua es dirigida a la etapa de cloración, mientras que los lodos secundarios son derivados al espesador secundario.

A continuación se presentan las principales ecuaciones requeridas para la confección del modelo. Luego, el modelo se resuelve resolviendo la ecuación (1) para cada una de las fases del PAH presente en la etapa.

1. Tratamiento primario

Sólidos suspendidos totales:

1. Sólidos suspendidos totales en el reactor:

$$X_{TP}^e = \frac{F_{X,TP}^e \cdot 1000}{Q_{TP}^e} \quad (55)$$

Donde:

X_{TP}^e : sólidos suspendidos totales efluente [mgSST/L]

$F_{X,TP}^e$: flujo másico de sólidos suspendidos totales efluente [kgSST/d]

Q_{TP}^e : caudal efluente de tratamiento primario [m³/d]

2. Sólidos suspendidos totales en lodo primario:

$$X_{TP}^w = \frac{F_{X,TP}^w \cdot 1000}{Q_{TP}^w} \quad (56)$$

Donde:

X_{TP}^w : sólidos suspendidos totales en lodo primario [mgSST/L]

$F_{X,TP}^w$: flujo másico de sólidos suspendidos totales en lodos primarios [kgSST/d]

Q_{TP}^w : caudal efluente de tratamiento primario [m³/d]

Fase disuelta:

1. Tasa de advección

$$R_{adv,dis} = \frac{Q_{TP}^0 \cdot C_{aq}^0 \cdot 1000 + Q_{EP}^r \cdot C_{aq,EP}^r \cdot 1000 + Q_{DH}^r \cdot C_{aq,DH}^r \cdot 1000 - Q_{TP}^e \cdot C_{aq} \cdot 1000}{1000 - Q_{TP}^w \cdot C_{aq} \cdot 1000} \quad (57)$$

Donde:

Q_{TP}^0 : caudal afluente tratamiento primario [m³/d]

C_{aq}^0 : concentración de PAH en fase disuelta afluente [ng/L]

Q_{EP}^r : caudal recirculado desde espesador primario [m³/d]

$C_{aq,EP}^r$: concentración disuelta retornada desde espesador primario [ng/L]

C_{aq} : concentración de PAH en el sedimentador primario (y efluente) [ng/L]

Q_{DH}^r : caudal recirculado desde deshidratador [m³/d]

$C_{aq,DH}^r$: concentración disuelta retornada desde deshidratador [ng/L]

Q_{TP}^e : caudal recirculado desde deshidratador [m³/d]

Q_{TP}^w : caudal de lodos primarios [m³/d]

2. Tasa de adsorción

$$R_{sorp,dis} = Q_{TP}^w \cdot K_d \cdot C_{aq} \cdot X_{TP}^w \cdot 1000 + Q_{TP}^e \cdot K_d \cdot C_{aq} \cdot X_{TP}^e \cdot 1000 \quad (58)$$

Donde:

Q_{TP}^w : caudal de descarte de tratamiento primario (a espesador primario) [m³/d]

K_d : coeficiente de partición sólido líquido [m³/gSST]

C_{aq} : concentración de PAH en el sedimentador primario (y efluente) [ng/L]

X_{TP}^w : concentración de sólidos suspendidos totales de descarte (a espesador primario) [mgSST/L]

Q_{TP}^e : caudal efluente de tratamiento primario (a tratamiento secundario) [m³/d]

X_{TP}^e : concentración de sólidos suspendidos totales efluentes (a tratamiento secundario) [mgSST/L]

3. Tasa de volatilización

$$R_{vol,dis} = V_{TP} \cdot K_L a_{sur} \cdot C_{aq} \cdot \frac{H_c}{H_c + \frac{k_L}{k_G}} \cdot 1000 \quad (59)$$

Donde:

V_{TP} : volumen de sedimentador primario [m³]

$K_L a_{sur}$: coeficiente de transferencia de masa por volatilización en superficie [d⁻¹]

H_c : coeficiente de Henry adimensional [m³ agua /m³ aire]

$\frac{k_L}{k_G}$: resistencia de transferencia de masa líquido a gas [-]

Fase adsorbida:

1. Tasa de advección:

$$R_{adv,p} = Q_{TP}^0 \cdot C_p^0 \cdot X_{TP}^0 \cdot 1000 + Q_{EP}^r \cdot C_{p,EP}^r \cdot X_{EP}^r \cdot 1000 + Q_{DH}^r \cdot C_{p,DH}^r \cdot X_{DH}^r \cdot 1000 - Q_{TP}^e \cdot C_p \cdot X_{TP}^e \cdot 1000 - Q_{TP}^w \cdot C_p \cdot X_{TP}^w \cdot 1000 \quad (60)$$

Donde:

Q_{TP}^0 : caudal afluente tratamiento primario [m³/d]

C_p^0 : concentración particulada de PAHs afluente [ng/gX]

X_{TP}^0 : sólidos suspendidos totales afluentes [mgSST/L]

Q_{EP}^r : caudal recirculado desde espesador primario [m³/d]

$C_{p,EP}^r$: concentración particulada de PAHs recirculada desde espesador primario [ng/gX]

X_{EP}^r : sólidos suspendidos totales recirculados desde espesador primario [mgSST/L]

Q_{DH}^r : caudal recirculado desde deshidratador [m³/d]

$C_{p,DH}^r$: concentración particulada de PAHs recirculada desde deshidratador [ng/gX]

X_{DH}^r : sólidos suspendidos totales recirculados desde deshidratador [mgSST/L]

Q_{TP}^e : caudal efluente tratamiento primario [m3/d]

C_p : concentración particulada de PAHs en el sedimentador primario [ng/gX]

X_{TP}^e : sólidos suspendidos totales efluentes al tratamiento primario [mgSST/L]

Q_{TP}^w : caudal de descarte de tratamiento primario (a espesador primario) [m3/d]

X_{TP}^w : sólidos suspendidos totales de descarte de tratamiento primario (a espesador primario) [mgSST/L]

2. Tasa de adsorción

$$R_{sorp,dis} = Q_{TP}^w \cdot K_d \cdot C_{aq} \cdot X_{TP}^w \cdot 1000 + Q_{TP}^e \cdot K_d \cdot C_{aq} \cdot X_{TP}^e \cdot 1000 \quad (61)$$

Donde:

Q_{TP}^w : caudal de descarte de tratamiento primario (a espesador primario) [m3/d]

K_d : coeficiente de partición sólido líquido [m3/gSST]

C_{aq} : concentración de PAH en el sedimentador primario (y efluente) [ng/L]

X_{TP}^w : concentración de sólidos suspendidos totales de descarte (a espesador primario) [mgSST/L]

Q_{TP}^e : caudal efluente de tratamiento primario (a tratamiento secundario) [m3/d]

X_{TP}^e : concentración de sólidos suspendidos totales efluentes (a tratamiento secundario) [mgSST/L]

2. Tratamiento secundario

ASSM (Activated Sludge Simple Model)

Como se menciona anteriormente, para complementar la modelación se utiliza el modelo ASSM, cuyas ecuaciones se presentan a continuación:

1. Sólidos suspendidos totales en el licor mezclado (SSLM) medido

$$X_{T,medido} = X + X_{VI} + X_F + 0,15X \quad (62)$$

Donde:

X : concentración de biomasa heterotrófica activa en el reactor [mg/L]

X_{VI} : residuo celular inerte [mg/L]

X_F : sólidos suspendidos fijos [mg/L]

2. Concentración de biomasa heterotrófica activa en el reactor, expresada como sólidos suspendidos volátiles (SSVLM)

$$X = \frac{Y \cdot \theta_c \cdot (S^0 - S)}{\theta \cdot (1 + b \cdot \theta_c)} \quad (63)$$

Donde:

Y : yield [mg biomasa/mg sustrato]

θ_c : tiempo de retención de sólidos [d]

S^0 : concentración de sustrato afluente [mg sustrato/L]

S : concentración de sustrato soluble en el reactor (y en el efluente) [mg sustrato/L]

θ : tiempo de retención hidráulico = V/Q [d]

b : constante de descomposición endógena [d^{-1}]

3. Residuo celular inerte

$$X_{VI} = X_{VI}^0 \cdot \frac{\theta_c}{\theta} + f \cdot b \cdot X \cdot \theta_c \quad (64)$$

Donde:

X_{VI}^0 : residuo celular inerte de entrada [mg/L]

θ_c : tiempo de retención de sólidos [d]

θ : tiempo de retención hidráulico = V/Q [d]

f : fracción de biomasa que permanece como residuo celular inerte = 0,2 [-]

b : constante de descomposición endógena [d^{-1}]

4. Sólidos suspendidos fijos:

$$X_F = X_F^0 \cdot \frac{\theta_c}{\theta} \quad (65)$$

Donde:

X_F^0 : sólidos suspendidos fijos de entrada [mg/L]

θ_c : tiempo de retención de sólidos [d]

θ : tiempo de retención hidráulico = V/Q [d]

5. Concentración de sustrato soluble en el reactor:

$$S = \frac{K_s \cdot (1 + b \cdot \theta_c)}{\theta_c \cdot (\mu_m - b) - 1} \quad (66)$$

Donde:

S : concentración de sustrato soluble en el reactor (y en el efluente) [mg sustrato/L]

K_s : constante de velocidad media [mg sustrato/L]

b : constante de descomposición endógena [d^{-1}]

θ_c : tiempo de retención de sólidos [d]

μ_m : tasa de crecimiento específico máximo de la biomasa [d^{-1}]

6. Concentración de biomasa activa en el lodo purgado:

$$X^r = \frac{X}{r} \cdot \left(1 + r - \frac{\theta}{\theta_c} \right) \quad (67)$$

Donde:

X^r : concentración de biomasa activa en el lodo purgado [mg/L]

X : concentración de biomasa heterotrófica activa en el reactor, expresada como sólidos suspendidos volátiles (SSVLM) [mg/L]

r : razón de recirculación = Q^r/Q [-]

θ_c : tiempo de retención de sólidos [d]

θ : tiempo de retención hidráulico = V/Q [d]

7. Concentración de sólidos suspendidos volátiles de licor de mezcla (SSVLM):

$$SSVLM = \left(\frac{SSV}{SST} \right) \cdot X_{T,medido} \quad (68)$$

Donde:

$\frac{SSV}{SST}$: razón de sólidos suspendidos volátiles y sólidos suspendidos totales en el reactor [-]

$X_{T,medido}$: sólidos suspendidos totales en el licor mezclado (SSLM) medido

ASM-X (Activated sludge model for xenobiotics)

1. Tasa de desorción

$$r_{desor} = k_{Des} \cdot C_{SL} \quad (69)$$

Donde:

k_{Des} : coeficiente de tasa de desorción para CSL [L/d]

C_{SL} : concentración en la fase adsorbida [ng/L]

2. Tasa de sorción

$$r_{sor} = r_{sor,ox} + r_{sor,ax} = k_{Des} \cdot C_{LI} \cdot \frac{X_{SS}}{K_o + S_o} \cdot (K_{D,ox} \cdot S_o + K_{D,ax} \cdot K_o) \quad (70)$$

Donde:

k_{Des} : coeficiente de tasa de desorción para CSL [L/d]

C_{LI} : concentración en la fase disuelta [ng/L]

X_{SS} : concentración de sólidos suspendidos totales en el reactor [gSST/L]

K_o : coeficiente de afinidad para oxígeno disuelto [mgO₂/L]

S_o : concentración de oxígeno disuelto en el reactor [mgO₂/L]

$K_{D,ox}$: coeficiente de partición sólido-líquido en condición aeróbica [L/gSST]

$K_{D,ax}$: coeficiente de partición sólido-líquido en condición anóxica [L/gSST]

3. Tasa de biodegradación

$$r_{bio} = r_{bio,ox} + r_{bio,ax} = \left[q_{c,ox} \frac{S_s}{S_s + K_s} + k_{bio,ox} \right] C_{LI} \frac{S_o}{S_o + K_o} X_{SS} + \left[q_{c,ax} \frac{S_s}{S_s + K_s} + k_{bio,ax} \right] C_{LI} \frac{K_o}{S_o + K_o} X_{SS} \quad (71)$$

Donde:

C_{LI} : concentración en la fase disuelta [ng/L]

K_s : coeficiente de afinidad para el sustrato soluble [mgCOD/L]

S_s : concentración de sustrato soluble en el reactor [mgCOD/L]

X_{SS} : concentración de sólidos suspendidos totales en el reactor [gSST/L]

K_o : coeficiente de afinidad para oxígeno disuelto [mgO₂/L]

S_o : concentración de oxígeno disuelto en el reactor [mgO₂/L]

$k_{bio,ox}$: constante de biotransformación en condición aeróbica [L/gSST*d]

$k_{bio,ax}$: constante de biotransformación en condición anóxica [L/gSST*d]

$q_{c,ox}$: tasa máxima específica de biotransformación cometabólica en presencia de sustrato de crecimiento para CLI en condición aeróbica [L/g*d]

$q_{c,ax}$: tasa máxima específica de biotransformación cometabólica en presencia de sustrato de crecimiento para CLI en condición anóxica [L/g*d]

4. Tasa de volatilización superficial

$$R_{vol,dis} = V_{TP} \cdot K_L a_{sur} \cdot C_{aq} \cdot \frac{H_c}{H_c + \frac{k_L}{k_G}} \cdot 1000 \quad (72)$$

Donde:

V_{TP} : volumen de sedimentador primario [m³]

$K_L a_{sur}$: coeficiente de transferencia de masa por volatilización en superficie [d⁻¹]

H_c : coeficiente de Henry adimensional [m³ agua /m³ aire]

$\frac{k_L}{k_G}$: resistencia de transferencia de masa líquido a gas [-]

5. Tasa de volatilización por aireación

$$r_{vol,air} = -G \cdot H_c \cdot C_{aq} \cdot \left[1 - \exp \left(K_L a_{bub} \cdot \frac{H_c}{H_c + \left(\frac{k_L}{k_G} \right)} \cdot \frac{Z}{H_c \cdot U} \right) \right] \quad (73)$$

Donde:

G : tasa de flujo de aire [m³/d]

H_c : coeficiente de Henry adimensional [m³ agua /m³ aire]

$K_L a_{bub}$: coeficiente de transferencia de masa por desorción de burbujas [d⁻¹]

$\frac{k_L}{k_G}$: resistencia de transferencia de masa líquido a gas [-]

Z : profundidad de la columna de agua [m]

U : velocidad de subida de la burbuja [m/d]

ANEXO C: MODELO CONCEPTUAL: LÍNEA DE LODOS

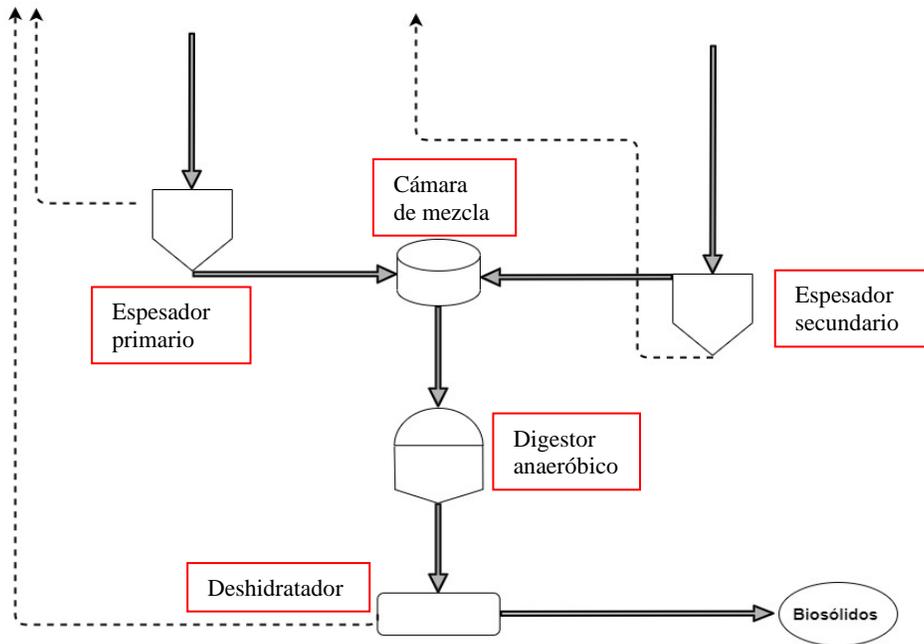


Figura 16: Estructura línea de lodos

En la línea de lodos se modelan todas las etapas, las cuales se presentan en la Figura 16. A cada uno de los espesadores ingresan los lodos del tratamiento primario y secundario, respectivamente. El sobrenadante del espesador primario es recirculado hacia el tratamiento primario en la línea de aguas, mientras que el lodo espesado es derivado a la cámara de mezcla. En el caso del espesador secundario, una fracción es recirculada el tratamiento secundario, mientras que el lodo espesado es derivado a la cámara de mezcla. Luego del mezclado de los lodos estos son ingresados al digestor anaeróbico para luego ser dirigidos al deshidratador. Finalmente, una fracción del deshidratador es recirculada a la línea de aguas, mientras que los biosólidos son TERMIANR.

A continuación se presentan las principales ecuaciones requeridas para la confección del modelo. Luego, el modelo se resuelve resolviendo la ecuación (1) para cada una de las fases del PAH presente en la etapa.

1. Espesador primario

1. Concentración disuelta libre inicial:

$$C_{dis,EP}^0 = \frac{C_{aq,TP}^w}{1 + K_{DCM} \cdot [DCM]^0} \quad (74)$$

Donde:

$C_{dis,EP}^0$: concentración disuelta libre de entrada a espesador primario [ng/L]

$C_{aq,TP}^w$: concentración en fase disuelta en lodos primarios [ng/L]

$[DCM]^0$: concentración afluente de DCM [gDCM/L]

2. Concentración adsorbida a DCM inicial:

$$C_{DCM,EP}^0 = \frac{C_{aq,TP}^w - C_{dis,EP}^0}{[DCM]^0} \quad (75)$$

Donde:

$C_{DCM,EP}^0$: concentración adsorbida a DCM afluente [ng/gDCM]

$C_{aq,TP}^w$: concentración en fase disuelta en lodos primarios [ng/L]

$C_{dis,EP}^0$: concentración disuelta libre de entrada a espesador primario [ng/L]

$[DCM]^0$: concentración afluente de DCM [gDCM/L]

3. Concentración de materia seca:

$$DM = SST + 1 \text{ [g/L]} \quad (76)$$

Donde:

DM : materia seca [gMS/L]

SST : sólidos suspendidos totales [gSST/L]

4. Concentración de material disuelto coloidal:

$$DCM = DM \cdot \%DCM \quad (77)$$

Donde:

DCM : concentración de material disuelto coloidal [gDCM/L]

DM : concentración de materia seca [gDM/L]

$\%DCM$: porcentaje de DCM presente en DM [%gDCM/gDM]

2. Espesador secundario

1. Concentración disuelta libre inicial:

$$C_{dis,ES}^0 = \frac{C_{aq,TS}^w}{1 + K_{DCM} \cdot [DCM]^0} \quad (78)$$

Donde:

$C_{dis,ES}^0$: concentración disuelta libre de entrada a espesador secundario [ng/L]

$C_{aq,TS}^w$: concentración en fase disuelta en lodos secundarios [ng/L]

$[DCM]^0$: concentración afluente de DCM [gDCM/L]

2. Concentración adsorbida a DCM inicial:

$$C_{DCM,ES}^0 = \frac{C_{aq,TS}^w - C_{dis,ES}^0}{[DCM]^0} \quad (79)$$

Donde:

$C_{DCM,ES}^0$: concentración adsorbida a DCM afluente [ng/gDCM]

$C_{aq,TS}^w$: concentración en fase disuelta en lodos secundario [ng/L]

$C_{dis,ES}^0$: concentración disuelta libre de entrada a espesador secundario [ng/L]

$[DCM]^0$: concentración afluente de DCM [gDCM/L]

1. Concentración de materia seca:

$$DM = SST + 1 \text{ [g/L]} \quad (80)$$

Donde:

DM : materia seca [gMS/L]

SST : sólidos suspendidos totales [gSST/L]

2. Concentración de material disuelto coloidal:

$$DCM = DM \cdot \%DCM \quad (81)$$

Donde:

DCM : concentración de material disuelto coloidal [gDCM/L]

DM : concentración de materia seca [gDM/L]

$\%DCM$: porcentaje de DCM presente en DM [%gDCM/gDM]

3. Cámara de mezcla

1. Concentración de materia seca:

$$DM = SST + 1 [g/L] \quad (82)$$

Donde:

DM : materia seca [gMS/L]

SST : sólidos suspendidos totales [gSST/L]

2. concentración de material disuelto coloidal:

$$DCM = DM \cdot \%DCM \quad (83)$$

Donde:

DCM : concentración de material disuelto coloidal [gDCM/L]

DM : concentración de materia seca [gDM/L]

$\%DCM$: porcentaje de DCM presente en DM [%gDCM/gDM]

4. Digestión anaeróbica

Modelo de cuatro componentes:

1. Crecimiento biomasa:

$$r_{\text{crecimiento biomasa}} = \frac{\mu_{\max} S_S}{K_S + S_S} \cdot X \quad (84)$$

Donde:

μ_{\max} : tasa máxima de crecimiento de biomasa [d-1]

S_S : sustrato soluble en el digestor [gCOD/L]

K_S : saturación media del sustrato de crecimiento [gCOD-SS/L]

X : concentración de biomasa [gCOD/L]

2. Decaimiento biomasa:

$$r_{\text{dec}} = -b \cdot X \quad (85)$$

Donde:

b : decaimiento endógeno de primer orden [d-1]

X : concentración de biomasa [gCOD/L]

3. Hidrólisis:

$$r_{hidrólisis} = k_{hyd} \cdot S_p \quad (86)$$

Donde:

k_{hyd} : cinética de primer orden de hidrólisis

S_p : sustrato particulado [gCOD/L]

4. Volatilización:

$$r_{vol} = K_{La}(K_H \cdot C_f - C_g) \quad (87)$$

Donde:

K_{La} : coeficiente de transferencia de masa entre fase líquida y gaseosa [d-1]

K_H : constante de Henry adimensional [-]

C_f : concentración de PAH en la fase disuelta libre [$\mu\text{g/L}$]

C_g : concentración de PAH en la fase gaseosa [$\mu\text{g/L}$]

5. Sorción a material particulado

$$r_{sorp,p} = k_1(K_{part}C_fS_p - C_p) \quad (88)$$

Donde:

k_1 : constante cinética de primer orden de sorción a materia particulada [d-1]

K_{part} : constante de equilibrio de sorción de PAHs a partículas [L/gCOD-part]

C_f : concentración de PAH en la fase disuelta libre [$\mu\text{g/L}$]

S_p : concentración de sustrato particulado [gCOD/L]

C_p : concentración de PAH en la fase particulada [$\mu\text{g/L}$]

6. Sorción a DCM

$$r_{sorp,DCM} = k_2(K_{DCM}C_fS_S - C_{DCM}) \quad (89)$$

Donde:

k_2 : constante cinética de primer orden de sorción a DCM [d-1]

K_{DCM} : constante de equilibrio de sorción de PAHs a DCM [L/gCOD-DCM]

C_f : concentración de PAH en la fase disuelta libre [$\mu\text{g/L}$]

S_S : concentración de sustrato soluble [gCOD/L]

C_{DCM} : concentración de PAH en la fase adsorbida a DCM [$\mu\text{g/L}$]

7. Biodegradación de fase adsorbida a DCM

$$r_{bio,DCM} = \left(T_c \frac{\mu}{Y} + k_c \right) \left(\frac{C_{DCM}}{K_{SC} + C_{DCM}} \right) \cdot X \quad (90)$$

Donde:

T_c : capacidad de transformación de PAH [$\mu\text{g/gCOD-SS}$]

μ : tasa de crecimiento de biomasa [d^{-1}]

Y : yield [gCOD-X/gCOD-SS]

k_c : tasa específica máxima de biodegradación de PAHs en ausencia de sustrato primario [$\mu\text{g/gCOD-X}\cdot\text{d}$]

C_{DCM} : concentración de PAH en la fase adsorbida a DCM [$\mu\text{g/L}$]

K_{SC} : constante de saturación media de PAHs [$\mu\text{g/L}$]

X : concentración de biomasa [gCOD/L]

8. Biodegradación de fase disuelta libre:

$$r_{bio,f} = \left(T_c \frac{\mu}{Y} + k_c \right) \left(\frac{C_f}{K_{SC} + C_f} \right) \cdot X \quad (91)$$

Donde:

T_c : capacidad de transformación de PAH [$\mu\text{g/gCOD-SS}$]

μ : tasa de crecimiento de biomasa [d^{-1}]

Y : yield [gCOD-X/gCOD-SS]

k_c : tasa específica máxima de biodegradación de PAHs en ausencia de sustrato primario [$\mu\text{g/gCOD-X}\cdot\text{d}$]

C_f : concentración de PAH disuelta libre [$\mu\text{g/L}$]

K_{SC} : constante de saturación media de PAHs [$\mu\text{g/L}$]

X : concentración de biomasa [gCOD/L]

4.4 Deshidratador

1. Concentración de materia seca:

$$DM = SST + 1 \text{ [g/L]} \quad (92)$$

Donde:

DM : materia seca [gMS/L]

SST: sólidos suspendidos totales [gSST/L]

2. Concentración de material disuelto coloidal:

$$DCM = DM \cdot \%DCM \quad (93)$$

Donde:

DCM: concentración de material disuelto coloidal [gDCM/L]

DM: concentración de materia seca [gDM/L]

%DCM: porcentaje de DCM presente en DM [%gDCM/gDM]

ANEXO D: SELECCIÓN DE PARÁMETROS

1. Tratamiento primario

Tabla 21: Parámetros considerados en el tratamiento primario

Nombre	Parámetro	Unidad	Naftaleno	Benzo(a)pireno	Referencia
Razón entre coeficiente de transferencia de masa en fase líquida y el coeficiente de transferencia de masa en fase gaseosa por volatilización superficial	$(k_L/k_G)_{sur,p}$	-	0,025		Lee et al. (1998)
Coefficiente de Henry adimensional	H_c	-	0,03	0,00079	Fendinger et al. (1998)
Coefficiente de partición sólido-líquido	K_d	L/kgSST	2.200	9.700	Pomies et al.
Coefficiente de transferencia de masa entre fase líquida y fase gaseosa	$K_L * a_{sur,p}$	d^{-1}	1.8		Lee et al. (1998)

2. Tratamiento secundario

Tabla 22: Parámetros considerados en el tratamiento secundario

Nombre	Parámetro	Unidad	Naftaleno	Benzo(a)pireno	Referencia
Tasa de biotransformación	k_{bio}	L/gSSV*d	0,11	0,013	Bautista et al. (2009)
Coefficiente de partición sólido-líquido	K_d	L/gSST	2,2	9,7	Pomies et al.
Coefficiente de desorción	k_{des}	L/d	1		Plosz et al. (2010)
Constante de saturación media para S_s	K_s	mgCOD/L	10		Plosz et al. (2010)
Constante de saturación media para oxígeno disuelto	K_o	mgO ₂ /L	0,2		Plosz et al. (2010)
Tasa máxima específica de biotransformación cometabólica en presencia de sustrato de crecimiento para C_{LI} en condición aeróbica [L/g*d]	$q_{c,ox}$	L/g*d	2,4		Plosz et al. (2012)

3. Digestor anaeróbico

Tabla 23: Parámetros considerados en la digestión anaeróbica

Nombre	Parámetro	Unidad	Naftaleno	Benzo(a)pireno	Referencia
Tasa máxima de crecimiento de biomasa	μ_{\max}	d^{-1}		0,62	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)
Constante de saturación media del sustrato de crecimiento	K_s	gCOD/L		5,10	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)
Rendimiento de crecimiento	Y	gCOD-X/gCOD-Ss		0,75	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)
Decaimiento endógeno de primer orden	b	d^{-1}		0,05	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)
Capacidad de transformación del PAH	T_c	$\mu\text{gPAH/gCOD-Ss}$		1,90	Chang et al. (1993)
Tasa máxima específica de biodegradación de OMPs en ausencia de sustrato primario	k_c	$\mu\text{gPAH/gCOD-X*d}$	0,27	0,06	Modificado de Dimitriou-Christidis et al. (2006)
Constante de saturación media de PAHs	K_{SC}	$\mu\text{gPAH/L}$	7.948,40	30.345,00	Modificado de Dimitriou-Christidis et al. (2006)
Cinética de primer orden de hidrólisis	k_{hyd}	d^{-1}		0,14	SISS, 2014
Coefficiente de transferencia de masa entre fase líquida y fase gaseosa	K_{La}	d^{-1}		100	Mozo et al. (2019)
Constante de Henry adimensional	K_H	-	0,03	0,00079	Fendinger et al. (1993)
Constante cinética de primer orden de sorción a materia particulado	k_1	d^{-1}	0,0067	0,015	Bezza et al. (2015)
Constante cinética de primer orden de sorción a DCM	k_2	d^{-1}	0,0067	0,015	Bezza et al. (2015)
Constante de equilibrio de sorción de PAH a partículas	K_{part}	L/gCOD	1,92	12,10	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)
Constante de equilibrio de sorción de OMP a DCM	K_{DCM}	L/gCOD	7,98	50,35	Delgadillo-Mirquez et al. (2011)

En el caso de los parámetros k_c y K_{sc} , debido a que no se encuentran valores para estos en condición anaeróbica en la literatura, se modifican los estimados por Dimitriou-Christidis et al. (2006), reduciéndolos en 2 órdenes de magnitud. Esto se ve validado por Rockne et al. (1998), donde se determina que la biodegradación de PAHs en condición anaeróbica es 1 a 2 órdenes de magnitud que su biodegradación en condición aeróbica.

Similarmente, no se encuentra información del parámetro T_c para PAHs, por lo cual se utiliza el valor estimado por Chang et al. (1993) para el xileno en condición aeróbica, y una vez más se reduce en 2 órdenes de magnitud.

ANEXO E: RESULTADOS DEL MODELO CONCEPTUAL

A continuación se presenta en detalle los resultados de la modelación para cada una de las etapas de tratamiento, para el naftaleno y para el benzo(a)pireno.

Tabla 24: Resultados obtenidos para la modelación del naftaleno en la línea de aguas

Etapa de tratamiento	Flujo	Fase	Valor	Unidad
Concentración afluente		Disuelta total	882,0	ng/L
Tratamiento primario	A línea de agua	Disuelto total efluente	501,7	ng/L
		Adsorbida a material particulado	163,9	ng/L
		Adsorbida a DCM	-	-
	A línea de lodos	Disuelto total a espesador primario	140,6	ng/L
		Adsorbida a material particulado a espesador primario	1.360,3	ng/gX
		Adsorbida a DCM	1.406,2	ng/gDCM
Tratamiento secundario	A línea de agua	Disuelto total efluente	207,1	ng/L
		Adsorbida a material particulado	8,9	ng/L
		Adsorbida a DCM	-	-
	A línea de lodos	Disuelto total a espesador secundario	42,0	ng/L
		Adsorbida a material particulado a espesador secundario	2.228,4	ng/gX
		Adsorbida a DCM	1.055,1	ng/gDCM

Tabla 25: Resultados obtenidos para la modelación de naftaleno en la línea de lodos

Etapa de tratamiento	Flujo	Fase	Valor	Unidad
Espesador primario	Retorno a línea de agua	Fase acuosa (disuelto + adsorbido a DCM)	233,9	ng/L
		Adsorbido a material particulado	1.270,6	ng/gX
	A línea de lodos	Disuelto total efluente	141,6	ng/L
		Adsorbida a material particulado	1.270,6	ng/gX
		Adsorbida a DCM	1.332,1	ng/gDCM
Espesador secundario	Retorno a línea de agua	Fase acuosa (disuelto + DCM)	107,4	ng/L
		Adsorbido a material particulado	2.141,8	ng/gX
	A línea de lodos	Disuelto total efluente	42,0	ng/L
		Adsorbida a material particulado	2141,8	ng/gX
		Adsorbida a DCM	1.024,3	ng/gDCM
Cámara de mezcla	A línea de lodos	Disuelto total efluente	87,5	ng/L
		Adsorbida a material particulado	1.646,7	ng/gX
		Adsorbida a DCM	1.198,9	ng/gDCM
Digestión anaeróbica	A línea de lodos	Disuelto total efluente	1.310,5	ng/L
		Adsorbida a material particulado	69.445,2	ng/L
		Adsorbida a DCM	4.344,3	ng/L
Deshidratador	Retorno a línea de agua	Fase acuosa (disuelto + DCM)	1.567,5	ng/L
		Adsorbido a material particulado	2.658,7	ng/gX
	A línea de lodos	Disuelto total efluente	1.198,0	ng/L
		Adsorbida a material particulado	2.658,7	ng/gX
		Adsorbida a DCM	3.558,1	ng/gDCM

Tabla 26: Resultados de la modelación de benzo(a)pireno en la línea de aguas

Etapa de tratamiento	Flujo	Fase	Valor	Unidad
Concentración afluente		Disuelta total	100,0	ng/L
Tratamiento primario	A línea de agua	Disuelto total efluente	24,5	ng/L
		Adsorbida a material particulado	35,0	ng/L
		Adsorbida a DCM	-	-
	A línea de lodos	Disuelto total a espesador primario	1,4	ng/L
		Adsorbida a material particulado a espesador primario	290,7	ng/gX
		Adsorbida a DCM	89,9	ng/gDCM
Tratamiento secundario	A línea de agua	Disuelto total efluente	6,0	ng/L
		Adsorbida a material particulado	1,1	ng/L
		Adsorbida a DCM	-	-
	A línea de lodos	Disuelto total a espesador secundario	0,2	ng/L
		Adsorbida a material particulado a espesador secundario	394,0	ng/gX
		Adsorbida a DCM	37,1	ng/gDCM

Tabla 27: Resultados de la modelación para benzo(a)pireno en la línea de lodos

Etapa de tratamiento	Flujo	Fase	Valor	Unidad
Espesador primario	Retorno a línea de agua	Fase acuosa (disuelto + DCM)	7,3	ng/L
		Adsorbido a material particulado	271,5	ng/gX
	A línea de lodos	Disuelto total efluente	1,4	ng/L
		Adsorbida a material particulado	271,5	ng/gX
		Adsorbida a DCM	85,2	ng/gDCM
Espesador secundario	Retorno a línea de agua	Fase acuosa (disuelto + DCM)	2,5	ng/L
		Adsorbido a material particulado	378,6	ng/gX
	A línea de lodos	Disuelto total efluente	0,2	ng/L
		Adsorbida a material particulado	378,6	ng/gX
		Adsorbida a DCM	36,0	ng/gDCM
Cámara de mezcla	A línea de lodos	Disuelto total efluente	0,8	ng/L
		Adsorbida a material particulado	317,8	ng/gX
		Adsorbida a DCM	63,9	ng/gDCM
Digestión anaeróbica	A línea de lodos	Disuelto total efluente	44,7	ng/L
		Adsorbida a material particulado	12.994,5	ng/L
		Adsorbida a DCM	1.143,6	ng/L
Deshidratador	Retorno a línea de agua	Fase acuosa (disuelto + DCM)	138,1	ng/L
		Adsorbido a material particulado	497,5	ng/gX
	A línea de lodos	Disuelto total efluente	40,9	ng/L
		Adsorbida a material particulado	497,5	ng/gX
		Adsorbida a DCM	936,6	ng/gDCM