

## II-359 – SIMULAÇÃO DA REMOÇÃO DE NITROGÊNIO EM UM REATOR EM BATELADAS SEQUENCIAIS COM BIOMASSA GRANULAR AERÓBIA

**Tiago Rogerio Vitor Akaboci<sup>(1)</sup>**

Engenheiro Ambiental pela Faculdade União das Américas. Mestre em Engenharia Ambiental na Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC).

**Jamile Wagner**

Engenheira Sanitarista e Ambiental pela UFSC. Mestre em Engenharia Ambiental na UFSC. Doutoranda em Engenharia Ambiental na UFSC.

**Ana Beatriz Bastos Alves**

Graduanda em Engenharia Sanitária e Ambiental na UFSC. Bolsista de Iniciação Científica.

**Lorena Bittencourt Guimarães**

Química Ambiental pela Universidade Estadual Paulista (UNESP). Mestre em Engenharia Ambiental na UFSC. Doutoranda em Engenharia Ambiental na UFSC.

**Rejane Helena Ribeiro da Costa**

Engenheira Civil pela Universidade Federal da Paraíba (UFPB). Mestre em Hidráulica e Saneamento pela Escola de Engenharia de São Carlos (EESC/USP). Doutora em Tratamento e Qualidade das Águas pelo INSA-Toulouse, França. Pós-doutorado pela Université Montpellier I, França. Professora Titular da UFSC.

**Endereço<sup>(1)</sup>:** Campus Universitário. Caixa Postal: 476 - Trindade - Florianópolis - SC - CEP: 88010-970 - Brasil - Tel: (48) 3721-7743 - e-mail: ea.tiagovitor@gmail.com

### RESUMO

Neste trabalho foram utilizados os modelos Activated Sludge Model N° 3 (ASM3) e uma versão modificada do modelo (ASM3m) para simular a remoção de nitrogênio em um Reator em Bateladas Sequenciais com Biomassa Granular (RBSG) no tratamento de esgoto sanitário. O modelo modificado descreveu os processos de nitrificação e desnitrificação em duas etapas, apresentando o nitrito como produto intermediário de ambos os processos, diferentemente do que é apresentado no modelo ASM3. As simulações foram realizadas no programa AQUASIM. Dados obtidos experimentalmente foram comparados com os dados obtidos pelas simulações para as variáveis  $\text{NH}_4^+\text{-N}$ ,  $\text{NO}_2^-\text{-N}$  e  $\text{NO}_3^-\text{-N}$ . A partir das simulações realizadas, verificou-se que os modelos implementados não apresentaram com fiabilidade aos valores experimentais dos processo de nitrificação e desnitrificação no RBSG.

**PALAVRAS-CHAVE:** Reatores em Bateladas Sequenciais com Biomassa Granular, Simulação, Remoção de Nitrogênio, *Activated Sludge Model 3*

### INTRODUÇÃO

A remoção biológica do nitrogênio presente nas águas residuárias pode ocorrer principalmente por meio dos processos de nitrificação e desnitrificação. No primeiro processo, ocorre a oxidação do nitrogênio amoniacal ( $\text{NH}_4^+$ ) à nitrito ( $\text{NO}_2^-$ ), realizado pelas bactérias oxidadoras de amônia (BOA), e a oxidação do nitrito à nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ), pelas bactérias oxidadoras de nitrito (BON), ambas as etapas em condições aeróbias. No processo de desnitrificação, ocorre a redução do nitrato à nitrogênio gasoso ( $\text{N}_2$ ), por bactérias heterotróficas em condições anóxicas.

Nos últimos anos, os reatores em bateladas sequenciais (RBS) com biomassa granular têm ganhado notoriedade no tratamento de águas residuárias, sendo considerada como umas das biotecnologias mais promissoras no tratamento de águas residuárias no século XXI (GAO *et al.*, 2011). Dentre os inúmeros fatores que corroboram para o enfoque dado a esta tecnologia, estão as vantagens conferidas devido principalmente às propriedades da biomassa, em termos de sedimentação, quando comparado ao sistema tradicional com biomassa em forma de flocos (TAY; LIU; LIU, 2001). Além disso, o grande interesse tem sido dado também em decorrência de que os RBS com grânulos aeróbios têm sido bastante utilizados pela possibilidade de remoção de matéria orgânica carbonácea e nutrientes, especialmente, o nitrogênio dentro da mesma unidade de tratamento (DE KREUK; HEIJNEN; VAN LOOSDRECHT, 2005; MOSQUERA-CORRAL *et al.*, 2005; JUNGLES *et al.*, 2011; COMA *et al.*, 2011).

Devido ao seu tamanho, no interior dos grânulos aeróbios existe um gradiente de oxigênio dissolvido que cria um perfil redox em três distintas zonas: aeróbia, anóxica e anaeróbia. Esta configuração ocasionada pela difusão do oxigênio permite o crescimento de diferentes bactérias nestas zonas, o que corrobora para a ocorrência da remoção de matéria orgânica carbonácea, nitrogênio e até mesmo o fósforo. Os micro-organismos que realizam a oxidação da matéria orgânica localizam-se na parte mais externa dos grânulos. Em direção ao interior do grânulo, em seguida, estariam as bactérias nitrificantes e no centro dos grânulos, onde não há a penetração do oxigênio ou a concentração deste é muito baixa, estariam as bactérias desnitrificantes (BEUN; HEIJNEN; VAN LOOSDRECHT, 2001).

Ao longo dos últimos anos foram desenvolvidos diversos estudos utilizando modelos matemáticos para a descrição de inúmeros fatores que afetam a processo de granulação, dinâmica dos micro-organismos, armazenamento de substrato e remoção de nutrientes (YANG *et al.*, 2004; XAVIER *et al.*, 2007; NI; YU; SUN, 2008). A aplicação e o desenvolvimento de modelos matemáticos no tratamento de águas residuárias em reatores de biomassa granular aeróbia foram desenvolvidos tendo como base modelos do grupo *Activated Sludge Model* (ASM) propostos pela *International Water Association* (IWA).

No modelo ASM3, o qual foi proposto por Gujer *et al.* (1999), o crescimento da biomassa heterotrófica ocorre a partir do substrato previamente armazenado como produto celular interno. No entanto, conforme apontado por Krishina e Van Loosdrecht (1999), em sistemas que operam no regime de presença e ausência de substrato (*feast-famine phase*), esta simplificação do modelo se apresenta inadequada, visto que o crescimento celular ocorre tanto a partir do substrato disponível, quanto do produto armazenado. Outra limitação do modelo ASM3 está relacionada com a descrição dos processos de nitrificação e desnitrificação em apenas uma etapa, ou seja, o nitrito como produto intermediário destes processos não é considerado.

Este trabalho tem por objetivo simular o processo de nitrificação-desnitrificação no tratamento de esgoto sanitário em um reator operado em bateladas sequenciais com grânulos aeróbios, em escala piloto, utilizando-se o modelo *Activated Sludge Model* N°3 (ASM3) e uma versão modificada do mesmo (ASM3m), a qual considera a nitrificação-desnitrificação em duas etapas, tendo o nitrito como produto intermediário, no software AQUASIM.

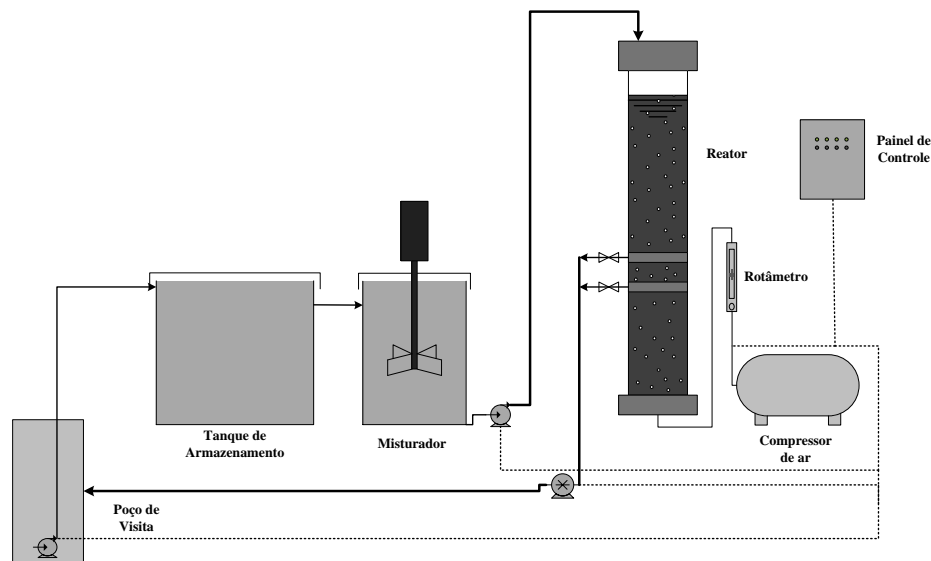
## MATERIAIS E MÉTODOS

### ***Sistema Experimental e Operação do Reator***

O RBS foi construído em coluna cilíndrica de acrílico transparente, com as seguintes dimensões: 3,0 m de altura e 0,25 m de diâmetro interno. A altura útil utilizada para o tratamento foi de 2,37 m, o que corresponde a um volume útil de 116,3 L. O RBSG foi alimentado com esgoto sanitário proveniente da rede coletora da companhia de pública de saneamento. A configuração do sistema experimental com todos seus componentes é apresentada na Figura 1.

O reator foi inoculado com lodo ativado proveniente do tanque de recirculação de lodo de uma estação de tratamento de esgoto. O lodo utilizado como inóculo apresentou uma concentração de SST de  $3,7 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$  e um índice volumétrico de lodo ( $\text{IVL}_{30}$ ) de  $297 \text{ mL} \cdot \text{g}^{-1}$ . Foram utilizados 40 L de lodo ativado na inoculação do RBSG.

A operação do reator ocorreu em regime de ciclos, compostos pelas seguintes fases: enchimento estático (10-15 min), reação aeróbia (208-218,8 min), sedimentação (10-15 min) e descarga (1,2 min), correspondendo a um ciclo operacional com 4 horas de duração.



**Figura 1. Configuração do sistema experimental**

Uma velocidade superficial ascensional de ar entre  $1,2$  e  $1,4 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$  foi aplicada ao reator. A escolha deste valor foi realizada com base em estudos de Tay, Liu e Liu (2001b), os quais concluíram que para velocidades ascensionais de ar menores que  $1,2 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$  os grânulos aeróbios formados não são estáveis. O percentual de troca volumétrica de esgoto foi de 59%.

### Métodos Analíticos

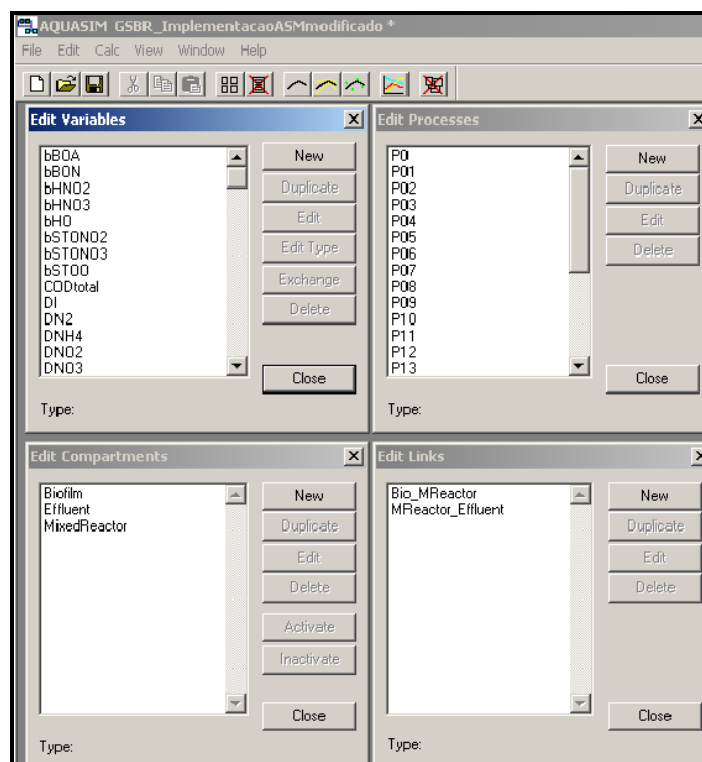
As análises físico-químicas foram feitas segundo as metodologias recomendadas pelo *Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater* (APHA, 2005). As variáveis analisadas foram: nitrogênio amoniacal ( $\text{NH}_4^+\text{-N}$ ), nitrito ( $\text{NO}_2^-\text{-N}$ ), nitrato ( $\text{NO}_3^-\text{-N}$ ) e sólidos suspensos no reator. A composição quantitativa da biomassa foi determinada por meio de métodos respirométricos, com base no trabalho de Ochoa *et al.* (2002). A densidade dos grânulos aeróbios foi obtida conforme metodologia apresentada por Beun, Van Loosdrecht e Heijnen (2002). A determinação do diâmetro médio das partículas foi realizada pela técnica de granulometria por difração a laser, com o equipamento Mastersizer 2000 (Malvern Instruments AS), com faixa de medição de 0 a  $2000 \mu\text{m}$ .

### Simulação

A implementação dos modelos para a simulação do processo de nitrificação e desnitrificação no RBSG foi realizada no *software* AQUASIM (Figura 2) (REICHERT, 1998). No programa, as equações diferenciais do modelo matemático e a representação do sistema, mais especificamente o reator, são inseridos e definidos pelo usuário.

Em relação a definição dos compartimentos no AQUASIM, para a simulação de um RBSG foram adotados três compartimentos, sendo um para a representação dos grânulos (reator de biofilme) e os demais para o processo de enchimento e esvaziamento do reator, ou seja, um RBS (reator de mistura completa). Esta definição foi adotada com base em trabalhos realizados anteriormente (BEUN; HEIJNEN; VAN LOOSDRECHT, 2001; de KREUK *et al.*, 2007; NI; YU; SUN, 2008; FANG *et al.*, 2009; NI *et al.*, 2009). O compartimento reator de biofilme opera com um volume fixo. A variação do volume ao longo do tempo, ou seja, enchimento e esvaziamento (*fill-and-draw*, no inglês), é permitida quando se utiliza um reator de mistura completa. Por este motivo, a simulação de um RBS com grânulos aeróbios envolve a definição destes compartimentos.

O reator de biofilme foi conectado a um reator de mistura completa, através de um link advectivo e com alta taxa de recirculação da vazão ( $Q_{\text{recirculação}}$ ). Esta alta taxa de recirculação foi considerada para assegurar que os dois compartimentos possuam as mesmas concentrações no líquido. Neste trabalho, foi utilizada uma vazão de recirculação de  $20 \text{ m}^3\cdot\text{h}^{-1}$ . Foram fixados um volume de  $0,068 \text{ m}^3$  para o compartimento de volume variável e de  $0,047 \text{ m}^3$  para compartimento com volume fixo.



**Figura 2. Implementação do modelo no AQUASIM**

Na implementação do compartimento indicado, para descrever os processos bioquímicos que ocorrem no reator de biofilme, foi necessária a utilização de outros parâmetros no AQUASIM, a fim de representar as características das variáveis particuladas e a difusão das variáveis solúveis dentro dos grânulos. Os parâmetros referidos são apresentados no Anexo 1.

Os parâmetros cinéticos e estequiométricos utilizados neste trabalho e obtidos na literatura apresentam seus valores típicos para 20 °C, sendo que foi realizada uma interpolação para a correção destes valores para as diferentes temperaturas trabalhadas neste estudo. As correções foram realizadas de acordo com a equação de van't Hoff-Arrhenius (Equação 1).

$$k_T = k_{20} \cdot e^{\theta(T-20)} \quad \text{(Equação 1)}$$

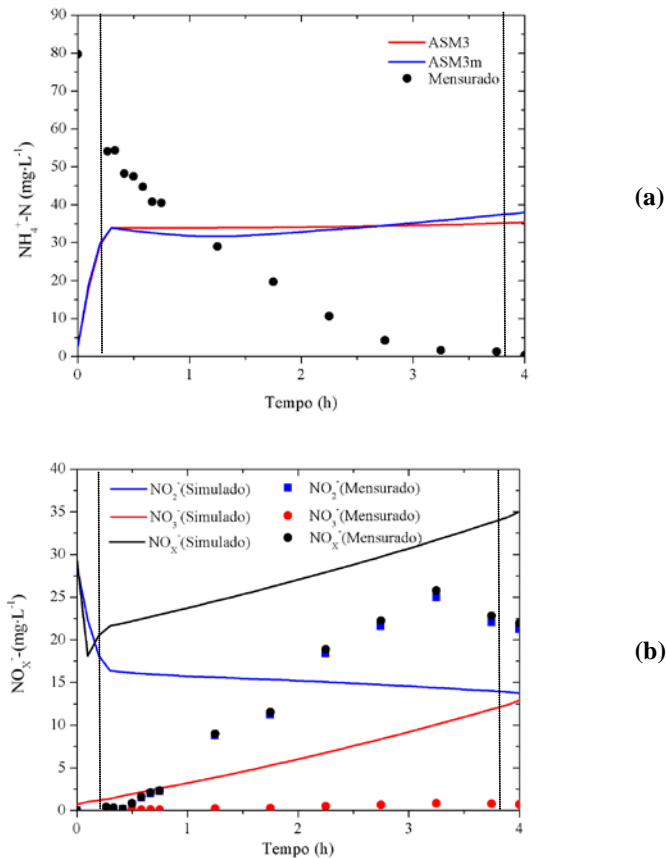
Diferentes valores para o coeficiente de temperatura são encontrados na literatura. Neste trabalho, utilizaram-se os valores propostos por Koch *et al.* (2000). Tais valores estão apresentados entre parênteses para os respectivos parâmetros no Anexo 1.

Foram implementados o modelo ASM3 (GUJER *et al.*, 1999) e uma versão modificada do modelo (ASM3m), esta que considerou o crescimento dos microrganismos heterotróficos utilizando o substrato orgânico prontamente biodegradável ( $S_s$ ) e os produtos de armazenamento celular ( $X_{STO}$ ), produzidos a partir do armazenamento de  $S_s$ , e também a incorporação do nitrito como intermediário dos processos relacionados aos micro-organismos heterotróficos em condições anóxicas e a nitrificação em duas etapas, ou seja, nitrificação e nitratação. As equações do modelo ASM3m e a matriz estequiométrica do modelo são apresentadas nos Apêndices A e B.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

### Simulação da Remoção de Nitrogênio

A Figura 3 apresenta os resultados das simulações realizadas no programa AQUASIM, para um ciclo operacional do RBSG, utilizando o modelo ASM3 e o modelo modificado neste trabalho, denominado de ASM3m. Na figura, as linhas tracejadas, da esquerda e da direita, indicam o início e término da fase de aeração, respectivamente.



**Figura 3. Simulação de um ciclo de operação do RBSG no AQUASIM para (a)  $\text{NH}_4^+\text{-N}$  e (b)  $\text{NO}_x^-\text{-N}$**

Os modelos implementados não descreveram o perfil do nitrogênio amoniacal no ciclo analisado (Figura 3a), como pode se verificar na comparação entre os dados obtidos experimentalmente e os dados obtidos pelos modelos. Para ambos, observa-se que as concentrações de  $\text{NH}_4^+\text{-N}$  não diminuem, ou seja, não ocorre o processo de nitrificação. Uma das possíveis constatações para que o programa não tenha simulado bem o processo de nitrificação é a concentração inicial de micro-organismos autotróficos ( $X_A$ ,  $X_{BOA}$  e  $X_{BON}$ ) implementada no software.

Mesmo não ocorrendo o processo de nitrificação, os modelos implementados conduziram a uma produção de  $\text{NO}_3^-\text{-N}$ . Estes dados simulados são incertos, além de divergirem com os dados experimentais, que demonstraram uma maior produção de  $\text{NO}_2^-\text{-N}$  e acúmulo deste (Figura 3b). Não é possível aferir qual foi a possível causa do aumento de  $\text{NO}_3^-\text{-N}$  nas simulações, já que não teve o processo de nitrificação.

A discrepância existente entre os dados simulados pelo programa AQUASIM e os dados obtidos experimentalmente pode ser justificada pela dificuldade da implementação de um RBSG no *software*, assim como a complexidade do mesmo em relação à necessidade da implementação de vários compartimentos, dentre os quais, o compartimento de biofilme. Este compartimento exige a definição de coeficientes de difusão para as componentes solúveis e também a definição de coeficientes de densidade para as componentes particuladas, para descrever o processo de transferência de massa para o interior dos grânulos (biofilme).

De acordo com de Kreuk *et al.* (2007) a complexidade do RBSG é a principal razão do modelo implementado ser menos preditivo. Os autores reforçam ainda que o transporte difusivo de massa nunca foi um problema direto do ASM, visto que para sistemas de lodos ativados, a concentração de biomassa é assumida apenas como presente no meio líquido em suspensão. Nestas simulações, assumiram-se os micro-organismos presentes também no interior dos grânulos, ou seja, compondo o biofilme, tornando-se muito complexo.

Observa-se também que as concentrações para o  $\text{NH}_4^+\text{-N}$  obtidos na simulação, principalmente na mistura, são bastante inferiores aos obtidos de forma experimental. O programa não calculou com confiabilidade a diluição

dos compostos. Esta diminuição da concentração dos substratos também foi reportada por de Kreuk *et al.* (2007). Segundo os autores, o afluente é misturado com o líquido presente no reator que restou do ciclo anterior, levando a uma diminuição do meio líquido presente no compartimento que contém a biomassa granular. Nas simulações realizadas no referido trabalho, havia uma longa fase de alimentação. Para solucionar tal problema, os coeficientes de difusão de acetato foram aumentados de forma arbitrária durante a fase de enchimento.

### Simulação da dinâmica dos micro-organismos autotróficos

A Figura 4 apresenta os resultados das simulações realizadas no AQUASIM para as concentrações dos micro-organismos autotróficos. Para o modelo ASM3, onde a nitrificação ocorre em apenas uma etapa, os micro-organismos nitrificantes são representados pela sigla  $X_A$ . Os micro-organismos que oxidam o nitrogênio amoniacal e o nitrito são representados pelas siglas  $X_{BOA}$  e  $X_{BON}$ , respectivamente. As linhas tracejadas da esquerda e direita indicam o início e o final da fase de aeração do ciclo, respectivamente.

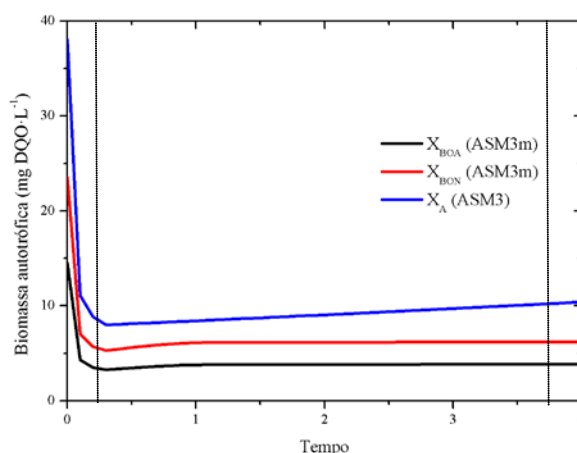


Figura 4. Perfil da concentração de  $X_{BOA}$ ,  $X_{BON}$  e  $X_A$

A simulação realizada por ambos os modelos indicaram a mesma tendência na fase inicial do ciclo de operação. As concentrações iniciais caíram para as três variáveis na fase de enchimento do reator.  $X_{BOA}$  e  $X_{BON}$  foram reduzidas de 14,5 e 23,6 mg DQO·L<sup>-1</sup>, respectivamente, para 3,2 e 5,3 mg DQO·L<sup>-1</sup> do início do enchimento até o início da aeração. Para  $X_A$ , a redução foi de 38,0 para 8,0 mg DQO·L<sup>-1</sup>. No decorrer da fase de aeração, a concentração para as variáveis começaram a aumentar lentamente, no entanto, não apresentaram grande diferença das concentrações obtidas no início da fase de aeração. Como estas variáveis não foram mensuradas durante o ciclo, não é possível afirmar que este tenha sido o comportamento da biomassa autotrófica.

Devido ao aumento da concentração inicial nas simulações de ambos os modelos, para tentar solucionar este problema, simulou-se o RBSG para um período de 100 dias, com a finalidade de obter uma concentração de biomassa que conduziria ao consumo de nitrogênio amoniacal. Todavia, após este grande período de simulação, a concentração de  $X_A$ ,  $X_{BOA}$  e  $X_{BON}$  diminuiu ainda mais, e também não levou ao consumo de  $NH_4^+-N$  (dados não apresentados).

## CONCLUSÕES

Os modelos ASM3 e ASM3m implementados neste trabalho para a simulação dos processos de nitrificação-desnitrificação do RBSG, no programa AQUASIM não responderam com fiabilidade os resultados que foram obtidos experimentalmente. De modo geral, verifica-se bastante diferença entre os resultados que foram obtidos pela simulação dos resultados que foram obtidos durante o monitoramento do reator.

Em relação à simulação do processo de nitrificação, os modelos implementados não indicaram o consumo de  $NH_4^+-N$ , no entanto houve a formação de  $NO_2^- -N$  e  $NO_3^- -N$ , demonstrando alguma inconsistência do modelo ou até mesmo algum erro da implementação do modelo no programa para a simulação.

As simulações da concentração dos micro-organismos heterotróficos demonstraram a redução dos micro-organismos durante o início da fase inicial de aeração, apresentando um leve aumento ao longo do ciclo operacional. No entanto, estas concentrações simuladas não podem indicar o comportamento da biomassa, visto que tais valores não foram obtidos experimentalmente.

## AGRADECIMENTOS

Os autores gostariam de agradecer ao CNPq, FINEP e FAPESC pelo financiamento da pesquisa, e a Prof<sup>a</sup>. Dra. Elenara Teixeira Lemos Senna e ao Msc. Luis Felipe Costa Silva do Laboratório de Farmacotécnica e Cosmetologia do Departamento de Ciências Farmacêuticas da Universidade Federal de Santa Catarina pela realização das análises granulométricas.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. APHA, AWWA, WEF. *Standard methods for the examination of water and wastewater*. 21ed., Washington, 2005.
2. BEUN, J. J. *et al.* Aerobic granulation in a sequencing batch reactor. *Water Research*, v. 33, n. 10, p. 2283-2290, 1999.
3. BEUN, J. J.; HEIJNEN, J. J.; VAN LOOSDRECHT, M. C. M. N- removal in a granular sludge sequencing batch airlift reactor. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 75, n. 1, p. 82-92, 2001.
4. COMA, M.; VERAWATY, M.; PIJUAN, M.; YUAN, Z.; BOND, P. L. Enhancing aerobic granulation for biological nutrient removal from domestic wastewater. *Bioresource Technology*, 103 (1): 101-108, 2012.
5. DE KREUK, M. K. *et al.* Kinetic model of a granular sludge SBR: Influences on nutrient removal. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 97, n. 4, p. 801-815, 2007.
6. DE KREUK, M.K., HEIJNEN, J.J., VAN LOOSDRECHT, M.C.M. Simultaneous COD, nitrogen, and phosphate removal by aerobic granular sludge. *Biotechnology & Bioengineering*, v. 90, n. 6, p. 761-769, 2005.
7. FANG, F. *et al.* Kinetic analysis on the two-step process of AOB and NOB in aerobic nitrifying granules. *Applied Microbiology and Biotechnology*, v. 83, n. 6, p. 1159-1169, 2009.
8. GAO, D. *et al.* Aerobic granular sludge: characterization, mechanism of granulation and application to wastewater treatment. *Critical Reviews in Biotechnology*, v. 32, n. 2, p. 137-152, 2011.
9. GUJER, W. *et al.* Activated Sludge Model N°3. *Water Science and Technology*, v. 39, n. 1, p. 183-193, 1999.
10. IACOPOZZI, I. *et al.* A modified Activated Sludge Model N°3 (ASM3) with two-step nitrification-denitrification. *Environmental Modelling & Software*, v. 22, n. 6, p. 847-861, 2007.
11. JIANG, HL.; TAY, JH.; TAY, S. TL. Aggregation of immobilized activated sludge cells into aerobically grown microbial granules for the aerobic biodegradation of phenol. *Letters in Applied Microbiology*, v. 35, n. 5, p. 439-445, 2002.
12. JUNGLES, M. K. *et al.* Start up of a pilot scale aerobic granular reactor for organic matter and nitrogen removal. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, v. 86, n. 5, p. 763-768, 2011.
13. KAELIN, D. *et al.* Extension of ASM3 for two-step nitrification and denitrification its calibration and validation with batch tests and pilot scale data. *Water Research*, v. 43, n. 6, p. 1680-1692, 2009.
14. KOCH, G. *et al.* Calibration and validation of Activated Sludge Model n°3 for Swiss municipal wastewater. *Water Research*, v. 34, n. 14, p. 3580-3590, 2000.
15. KRISHNA, C. ; VAN LOOSDRECHT, M.C.M. Substrate flux into storage and growth in relation to activated sludge modelling. *Water Research*, v. 33, n. 14, p. 3149-3161, 1999.
16. LIU, Y.; SHU, FY.; TAY, JH. Biosorption kinetics of Cadmium (II) on aerobic granular sludge. *Process Biochemistry*, v. 38, n. 7, p. 997-1001, 2003.
17. MANSER, R.; GUJER, W.; SIEGRIST, H. Consequences of mass transfer on the kinetics of nitrifiers. *Water Research*, v. 39, n. 19, p. 4633-4642, 2005.
18. MOUSSA, M. S. *et al.* Modelling nitrification, heterotrophic growth and predation in activated sludge. *Water Research*, v. 39, n. 20, p. 5080-5098, 2005.
19. NI, BJ. *et al.* Granulation of activated sludge in a pilot-scale sequencing batch reactor for the treatment of low-strength municipal wastewater. *Water Research*, v. 43, n. 3, p. 751-761, 2009.
20. NI, BJ.; YU, HQ.; SUN, YJ. Modelling simultaneous autotrophic and heterotrophic growth in aerobic granules. *Water Research*, v. 42, n. 6-7, p. 1583-1594, 2008.

21. PÉREZ, J.; PICIOREANU, C.; VAN LOOSDRECHT, M. C. M. Modelling biofilm and floc diffusion process based on analytical solution of reaction-diffusion equations. *Water Research*, v. 39, n. 7, p. 1311-1323, 2005.
22. REFSGAARD, J. C. *et al.* Uncertainty in the environmental modelling process – A framework and guidance. *Environmental Modelling & Software*, v. 22, n. 11, p. 1543-1556, 2007.
23. REICHERT, P. *AQUASIM 2.0 – User Manual, Computer Program for the Identification and Simulation of Aquatic Systems*. Swiss Federal Institute for Environmental Science and Technology (EAWAG), 214 p., 1998.
24. ROELEVELD, P. J.; VAN LOOSDRECHT, M. C. M. Experience with guidelines for wastewater characterization in The Netherlands, *Water Science & Technology*, v. 45, n. 6, p. 77-87, 2002.
25. SCHWARZENBECK, N.; BORGES, J. M.; WILDERER, P. A. Treatment of dairy effluents in an aerobic granular sludge sequencing batch reactor. *Applied Microbiology and Biotechnology*, v. 66, n. 6, p. 711-718, 2005.
26. TAY, JH.; LIU, QS.; LIU, Y. Microscopic observation of aerobic granulation in sequential aerobic sludge blanket reactor. *Journal of Applied Microbiology*, v. 9, n. 1, p. 168-175, 2001a.
27. TAY, JH.; LIU, QS.; LIU, Y. The effects of shear force on the formation, structure and metabolism of aerobic granules. *Applied Microbiology and Biotechnology*, v. 57, n. 1-2, p. 227-233, 2001b.
28. VAZQUEZ-PADÍN, J. R. *et al.* Modelling aerobic granular SBR at variable COD/N ratios including accurate description of total solids concentration. *Biochemical Engineering Journal*, v. 49, n. 2, p. 173-184, 2010.
29. XAVIER, J. B. *et al.* Multi-scale individual-based model of microbial and bioconversion dynamics in aerobic granular sludge. *Environmental Science and Technology*, v. 41, n. 18, p. 6410-6417, 2007.
30. YANG, SF. *et al.* Growth kinetics of aerobic granules developed in a sequencing batch reactors. *Letters in Applied Microbiology*, v. 38, n. 2, p. 106-112, 2004.
31. ZHOU, M. *et al.* Simulation of the performance of aerobic granular sludge SBR using modified ASM3 model. *Bioresource Technology*, v. 127, p. 473-481, 2013.

# APÊNDICE A. Taxas cinéticas do modelo ASM3 modificado

Processos		Expressões cinéticas
$\rho_1$	Hidrólise	$k_H \frac{X_S/X_H}{K_X + X_S/X_H} X_H$
$\rho_2$	Armazenamento Aeróbio de $S_S$	$k_{STO} \frac{S_O}{K_{H,O} + S_O} \frac{S_S}{K_{H,SS} + S_S} X_H$
$\rho_3$	Armazenamento Anóxico de $S_S - NO_3 - NO_2$	$k_{STO} \eta_{H,NO_3} \frac{K_{H,O}}{K_{H,O} + S_O} \frac{S_S}{K_{H,SS} + S_S} \frac{S_{NO_3}}{K_{H,NO_3} + S_{NO_3}} X_H$
$\rho_4$	Armazenamento Anóxico de $S_S - NO_2 - N_2$	$k_{STO} \eta_{H,NO_2} \frac{K_{H,O}}{K_{H,O} + S_O} \frac{S_S}{K_{H,SS} + S_S} \frac{S_{NO_2}}{K_{H,NO_2} + S_{NO_2}} X_H$
$\rho_5$	Crescimento Aeróbio de $X_H (S_S)$	$\mu_{H,SS} \frac{S_O}{K_{H,O} + S_O} \frac{S_{NH_4}}{K_{H,NH_4} + S_{NH_4}} \frac{S_S}{K_{H,SS} + S_S} X_H$
$\rho_6$	Crescimento Anóxico de $X_H - NO_3 - NO_2 (S_S)$	$\mu_{H,SS} \eta_{H,NO_3} \frac{K_{H,O}}{K_{H,O} + S_O} \frac{S_S}{K_{H,SS} + S_S} \frac{S_{NH_4}}{K_{H,NH_4} + S_{NH_4}} \frac{S_{NO_3}}{K_{H,NO_3} + S_{NO_3}} X_H$
$\rho_7$	Crescimento Anóxico de $X_H - NO_2 - N_2 (S_S)$	$\mu_{H,SS} \eta_{H,NO_2} \frac{K_{H,O}}{K_{H,O} + S_O} \frac{S_S}{K_{H,SS} + S_S} \frac{S_{NH_4}}{K_{H,NH_4} + S_{NH_4}} \frac{S_{NO_2}}{K_{H,NO_2} + S_{NO_2}} X_H$
$\rho_8$	Crescimento Aeróbio de $X_H (X_{STO})$	$\mu_{H,STO} \frac{X_{STO}/X_H}{K_{H,STO} + X_{STO}/X_H} \frac{S_O}{K_{H,O} + S_O} \frac{K_{H,SS}}{K_{H,SS} + S_S} \frac{S_{NH_4}}{K_{H,NH_4} + S_{NH_4}} X_H$
$\rho_9$	Crescimento Anóxico de $X_H - NO_3 - NO_2 (X_{STO})$	$\mu_{H,STO} \eta_{H,NO_3} \frac{X_{STO}/X_H}{K_{H,STO} + X_{STO}/X_H} \frac{K_{H,O}}{K_{H,O} + S_O} \frac{K_{H,SS}}{K_{H,SS} + S_S} \frac{S_{NH_4}}{K_{H,NH_4} + S_{NH_4}} \frac{S_{NO_3}}{K_{H,NO_3} + S_{NO_3}} X_H$
$\rho_{10}$	Crescimento Anóxico de $X_H - NO_2 - N_2 (X_{STO})$	$\mu_{H,STO} \eta_{H,NO_2} \frac{X_{STO}/X_H}{K_{H,STO} + X_{STO}/X_H} \frac{K_{H,O}}{K_{H,O} + S_O} \frac{K_{H,SS}}{K_{H,SS} + S_S} \frac{S_{NH_4}}{K_{H,NH_4} + S_{NH_4}} \frac{S_{NO_2}}{K_{H,NO_2} + S_{NO_2}} X_H$
$\rho_{11}$	Respiração End. Aeróbia	$b_{H,O} \frac{S_O}{K_{H,O} + S_O} X_H$
$\rho_{12}$	Respiração End. Anóxica $NO_3 - NO_2$	$b_{H,NO_3} \eta_{NO_3, end} \frac{K_{H,O}}{K_{H,O} + S_O} \frac{S_{NO_3}}{K_{H,NO_3} + S_{NO_3}} X_H$
$\rho_{13}$	Respiração End. Anóxica $NO_2 - N_2$	$b_{H,NO_2} \eta_{NO_2, end} \frac{K_{H,O}}{K_{H,O} + S_O} \frac{S_{NO_2}}{K_{H,NO_2} + S_{NO_2}} X_H$
$\rho_{14}$	Respiração Aeróbia de $X_{STO}$	$b_{STO,O} \frac{S_O}{K_{H,O} + S_O} X_{STO}$
$\rho_{15}$	Respiração Anóxica de $X_{STO} NO_3 - NO_2$	$b_{STO,NO_3} \eta_{NO_3, end} \frac{K_{H,O}}{K_{H,O} + S_O} \frac{S_{NO_3}}{K_{H,NO_3} + S_{NO_3}} X_{STO}$
$\rho_{16}$	Respiração Anóxica de $X_{STO} NO_2 - N_2$	$b_{STO,NO_2} \eta_{NO_2, end} \frac{K_{H,O}}{K_{H,O} + S_O} \frac{S_{NO_2}}{K_{H,NO_2} + S_{NO_2}} X_{STO}$
$\rho_{17}$	Crescimento Aeróbio de $X_{BOA}$	$\mu_{BOA} \frac{S_O}{K_{BOA,O} + S_O} \frac{S_{NH_4}}{K_{BOA,NH_4} + S_{NH_4}} X_{BOA}$
$\rho_{18}$	Respiração End. Aeróbia de $X_{BOA}$	$b_{BOA} \frac{S_O}{K_{BOA,O} + S_O} X_{BOA}$
$\rho_{19}$	Respiração End. Anóxica de $X_{BOA} NO_3 - NO_2$	$b_{BOA} \eta_{A, end} \frac{K_{BOA,O}}{K_{BOA,O} + S_O} \frac{S_{NO_3}}{K_{H,NO_3} + S_{NO_3}} X_{BOA}$
$\rho_{20}$	Respiração End. Anóxica de $X_{BOA} NO_2 - N_2$	$b_{BOA} \eta_{A, end} \frac{K_{BOA,O}}{K_{BOA,O} + S_O} \frac{S_{NO_2}}{K_{H,NO_2} + S_{NO_2}} X_{BOA}$
$\rho_{21}$	Crescimento Aeróbio de $X_{BON}$	$\mu_{BON} \frac{S_O}{K_{BON,O} + S_O} \frac{S_{NH_4}}{K_{BON,NH_4} + S_{NH_4}} \frac{S_{NO_2}}{K_{BON,NO_2} + S_{NO_2}} X_{BON}$
$\rho_{22}$	Respiração End. Aeróbia de $X_{BON}$	$b_{BON} \frac{S_O}{K_{BON,O} + S_O} X_{BON}$
$\rho_{23}$	Respiração End. Anóxica de $X_{BON} NO_3 - NO_2$	$b_{BON} \eta_{A, end} \frac{K_{BON,O_2}}{K_{BON,O} + S_O} \frac{S_{NO_3}}{K_{H,NO_3} + S_{NO_3}} X_{BON}$
$\rho_{24}$	Respiração End. Anóxica de $X_{BON} NO_2 - N_2$	$b_{BON} \eta_{A, end} \frac{K_{BON,O_2}}{K_{BON,O} + S_O} \frac{S_{NO_2}}{K_{H,NO_2} + S_{NO_2}} X_{BON}$

## APÊNDICE B. Matriz Estequiométrica

Processos (j)	Componentes (i)													Taxa do Processo
	S <sub>O</sub>	S <sub>I</sub>	S <sub>S</sub>	S <sub>NH<sub>4</sub></sub>	S <sub>NO3</sub>	S <sub>NO2</sub>	S <sub>N<sub>2</sub></sub>	X <sub>I</sub>	X <sub>S</sub>	X <sub>H</sub>	X <sub>STO</sub>	X <sub>BOA</sub>	X <sub>BON</sub>	
1		f <sub>SI</sub>	1-f <sub>SI</sub>						-1					ρ <sub>1</sub>
2	$\frac{(Y_{STO,O2}-1)}{Y_{STO,O2}}$		$-\frac{1}{Y_{STO,O2}}$	i <sub>N,SS</sub>							1			ρ <sub>2</sub>
3			$-\frac{1}{Y_{STO,O2}}$	i <sub>N,SS</sub>	$\frac{Y_{STO,NO3}-1}{1,14}$	$\frac{1-Y_{STO,NO3}}{1,14}$					1			ρ <sub>3</sub>
4			$-\frac{1}{Y_{STO,O2}}$	i <sub>N,SS</sub>		$\frac{Y_{STO,NO2}-1}{1,72}$	$\frac{1-Y_{STO,NO2}}{1,72}$				1			ρ <sub>4</sub>
5	$1-\frac{1}{Y_{H,O2}}$		$-\frac{1}{Y_{H,O2}}$	-i <sub>N,BM</sub>						1				ρ <sub>5</sub>
6			$-\frac{1}{Y_{H,O2}}$	-i <sub>N,BM</sub>	$\frac{Y_{H,NO3}-1}{1,14 \cdot Y_{H,NO3}}$	$\frac{1-Y_{H,NO3}}{1,14 \cdot Y_{H,NO3}}$				1				ρ <sub>6</sub>
7			$-\frac{1}{Y_{H,O2}}$	-i <sub>N,BM</sub>		$\frac{Y_{H,NO2}-1}{1,72 \cdot Y_{H,NO2}}$	$\frac{(1-Y_{H,NO2})}{1,72 \cdot Y_{H,NO2}}$			1				ρ <sub>7</sub>
8	$1-\frac{1}{Y_{H,STO}}$			-i <sub>N,BM</sub>						1	$-\frac{1}{Y_{H,STO}}$			ρ <sub>8</sub>
9				-i <sub>N,BM</sub>	$\frac{Y_{H,STO}-1}{1,14 \cdot Y_{H,STO}}$	$\frac{1-Y_{H,STO}}{1,14 \cdot Y_{H,STO}}$				1	$-\frac{1}{Y_{H,STO}}$			ρ <sub>9</sub>

10				$i_{N,BM}$		$\frac{Y_{H,STO} - 1}{1,72 \cdot Y_{H,STO}}$	$\frac{Y_{H,STO} - 1}{1,72 \cdot Y_{H,STO}}$			1	$-\frac{1}{Y_{H,STO}}$			$\rho_{10}$
11	$f_{XI-1}$			$i_{N,BM} \cdot f_{XI} \cdot i_{N,XI}$				$f_{XI}$		-1				$\rho_{11}$
12				$i_{N,BM} \cdot f_{XI} \cdot i_{N,XI}$	$\frac{f_{XI}-1}{1,14}$	$\frac{1-f_{XI}}{1,14}$		$f_{XI}$		-1				$\rho_{12}$
13				$i_{N,BM} \cdot f_{XI} \cdot i_{N,XI}$		$\frac{f_{XI}-1}{1,72}$	$\frac{1-f_{XI}}{1,72}$	$f_{XI}$		-1				$\rho_{13}$
14	-1										-1			$\rho_{14}$
15					$-\frac{1}{1,14}$	$\frac{1}{1,14}$					-1			$\rho_{15}$
16						$-\frac{1}{1,72}$	$\frac{1}{1,72}$				-1			$\rho_{16}$
17	$\frac{Y_{BOA} - 3,43}{Y_{BOA}}$			$i_{N,BM} \cdot \frac{1}{Y_{BOA}}$		$\frac{1}{Y_{BOA}}$						1		$\rho_{17}$
18	$f_{XI-1}$			$i_{N,BM} \cdot f_{XI} \cdot i_{N,XI}$				$f_{XI}$				-1		$\rho_{18}$
19				$i_{N,BM} \cdot f_{XI} \cdot i_{N,XI}$	$\frac{f_{XI}-1}{1,14}$	$\frac{1-f_{XI}}{1,14}$		$f_{XI}$				-1		$\rho_{19}$

20				$i_{N,BM} \cdot f_{XI} \cdot i_{N,XI}$		$\frac{f_{XI} - 1}{1,72}$	$\frac{1-f_{XI}}{1,72}$	$f_{XI}$				-1		$\rho_{20}$
21	$\frac{Y_{BON} - 1,14}{Y_{BON}}$			$-i_{N,BM}$	$\frac{1}{Y_{BON}}$	$-\frac{1}{Y_{BON}}$							1	$\rho_{21}$
22	$f_{XI} - 1$			$i_{N,BM} \cdot f_{XI} \cdot i_{N,XI}$				$f_{XI}$					-1	$\rho_{22}$
23				$i_{N,BM} \cdot f_{XI} \cdot i_{N,XI}$	$\frac{f_{XI} - 1}{2,86}$	$\frac{1-f_{XI}}{2,86}$		$f_{XI}$					-1	$\rho_{23}$
24				$i_{N,BM} \cdot f_{XI} \cdot i_{N,XI}$		$\frac{f_{XI} - 1}{1,72}$	$\frac{1-f_{XI}}{1,72}$	$f_{XI}$					-1	$\rho_{24}$

### ANEXO 1. Parâmetros Cinéticos e Estequiométricos (20 °C)

Parâmetro	Definição	Unidade	Valor	Fonte
$k_H^*$	Constante da taxa de hidrólise	$h^{-1}$	0,125 (0,04)	1
$K_X$	Constante de saturação da hidrólise	g DQO/g DQO	1	1
$k_{sto}^*$	Taxa máxima de armazenamento	$h^{-1}$	0,21 (0,07)	1
$K_{H,O}$	Coefficiente de saturação/inibição de $X_H$ por $S_O$	g O/m <sup>3</sup>	0,2	1
$K_{H,SS}$	Coefficiente de saturação/inibição de $X_H$ por $S_S$	g DQO/m <sup>3</sup>	11,38	2
$K_{H,NO_3}$	Coefficiente de saturação/inibição de $X_H$ por $S_{NO_3}$	g N/ m <sup>3</sup>	0,65	3
$K_{H,NO_2}$	Coefficiente de saturação/inibição de $X_H$ por $S_{NO_2}$	g N/ m <sup>3</sup>	0,65	3
$K_{H,NH_4}$	Coefficiente de saturação/inibição de $X_H$ por $S_{NH_4}$	g N/ m <sup>3</sup>	0,01	1
$K_{H,STO}$	Coefficiente de saturação/inibição de $X_H$ por $X_{STO}$	g DQO/g DQO	1	1
$\eta_{H,NO_3}$	Fator de redução para desnitrificação $NO_3-NO_2$	--	0,55	2
$\eta_{H,NO_2}$	Fator de redução para desnitrificação $NO_2-N_2$	--	0,55	2
$\mu_{H,STO}^*$	Taxa máxima de crescimento de $X_H$ com $X_{STO}$	$h^{-1}$	0,15 (0,07)	2
$\mu_{H,SS}^*$	Taxa máxima de crescimento de $X_H$ com $S_S$	$h^{-1}$	0,58 (0,07)	2
$b_{H,O}^*$	Taxa de respiração aeróbia endógena de $X_H$	$h^{-1}$	0,016 (0,07)	2
$b_{H,NO_3}^*$	Taxa de respiração anóxica endógena de $X_H$	$h^{-1}$	0,1 (0,07)	1
$b_{H,NO_2}^*$	Taxa de respiração anóxica endógena de $X_H$	$h^{-1}$	0,1 (0,07)	1
$b_{STO,O}$	Taxa de respiração aeróbia de $X_{STO}$	$h^{-1}$	0,016 (0,07)	2
$b_{STO,NO_3}$	Taxa de respiração anóxica de $X_{STO}$ $NO_3-NO_2$	$h^{-1}$	0,1 (0,07)	1
$b_{STO,NO_2}$	Taxa de respiração anóxica de $X_{STO}$ $NO_2-N_2$	$h^{-1}$	0,1 (0,07)	1
$\eta_{H,endNO_3}$	Fator de redução para $b_{H,}$ em condições anóxicas $NO_3-NO_2$		0,25—0,50	4
$\eta_{H,endNO_2}$	Fator de redução para $b_{H,}$ em condições anóxicas $NO_2-N_2$		0,35—0,70	4
$\mu_{BOA}$	Taxa máxima de crescimento de $X_{BOA}$	$h^{-1}$	0,09 (0,105)	5
$\mu_{BON}$	Taxa máxima de Crescimento de $X_{BON}$	$h^{-1}$	0,11 (0,105)	5
$K_{BOA,O}$	Coefficiente de saturação/inibição de $X_{BOA}$ por $S_O$	g O/ m <sup>3</sup>	0,8	6
$K_{BOA,NH_4}$	Coefficiente de saturação/inibição de $X_{BOA}$ por $S_{NH_4}$	g O/ m <sup>3</sup>	1	1
$b_{BOA}$	Taxa de decaimento de $X_{BOA}$	$h^{-1}$	0,0125 (0,105)	7
$\eta_{NA,end}$	Fator de redução anóxico para $b_{BOA}$ e $b_{BON}$		0,1	6
$K_{BON,O}$	Coefficiente de saturação/inibição de $X_{BON}$ por $S_O$	g O/ m <sup>3</sup>	0,8	6
$K_{BON,NO_2}$	Coefficiente de saturação/inibição de $X_{BON}$ por $S_{NO_2}$	g O/ m <sup>3</sup>	0,8	6
$b_{BON}$	Taxa de Decaimento de $X_{NOB}$	$h^{-1}$	0,0083 (0,105)	7
$i_{N,SI}$	Conteúdo de N em $S_I$	g N/g DQO	0,01	1
$i_{N,SS}$	Conteúdo de N em $S_S$	g N/g DQO	0,03	1
$i_{N,XI}$	Conteúdo de N em $X_I$	g N/g DQO	0,02	1
$i_{N,XS}$	Conteúdo de N em $X_S$	g N/g DQO	0,04	1
$i_{N,BM}$	Conteúdo de N na biomassa ( $X_H$ , $X_{BOA}$ e $X_{BON}$ )	g N/g DQO	0,07	1
$f_{SI}$	Produção de $S_I$ na hidrólise	g DQO/g DQO	0,00	1
$f_{XI}$	Fração de $X_I$ gerado na lise da biomassa	g DQO/g	0,2	1

		DQO		
$Y_{H,O2}$	Taxa de rendimento para $X_H$ no crescimento aeróbio	g DQO/g	0,63	1
$Y_{H,NO3}$	Taxa de rendimento para $X_H$ no crescimento anóxico $NO_3 - NO_2$	g DQO/g	0,54	1
$Y_{H,NO2}$	Taxa de rendimento para $X_H$ no crescimento anóxico $NO_2 - NO_3$	g DQO/g	0,54	1
$Y_{H,STO}$	Taxa de rendimento do crescimento de $X_H$ com $X_{STO}$	g DQO/g	0,68	2
$Y_{STO,O2}$	Taxa de rendimento para $X_{STO}$ no crescimento aeróbio	g DQO/g	0,85	1
$Y_{STO,NO3}$	Taxa de rendimento para $X_{STO}$ no crescimento anóxico $NO_3 - NO_2$	g DQO/g	0,8	1
$Y_{STO,NO2}$	Taxa de rendimento para $X_{STO}$ no crescimento anóxico $NO_2 - N_2$	g DQO/g	0,8	1
$Y_{BOA}$	Taxa de rendimento para $X_{BOA}$	g DQO/g	0,21	5
$Y_{BON}$	Taxa de rendimento para $X_{BON}$	g DQO/g	0,05	5
$D_{NH4}$	Coefficiente de difusão de $S_{NH4}$	$m^2 \cdot h^{-1}$	$5,76 \cdot 10^{-6}$	8
$D_{NO2}$	Coefficiente de difusão de $S_{NO2}$	$m^2 \cdot h^{-1}$	$5,76 \cdot 10^{-6}$	8
$D_{NO3}$	Coefficiente de difusão de $S_{NO3}$	$m^2 \cdot h^{-1}$	$5,76 \cdot 10^{-6}$	8
$D_O$	Coefficiente de difusão de $SO$	$m^2 \cdot h^{-1}$	$5,68 \cdot 10^{-6}$	8
$D_S$	Coefficiente de difusão de $S_S$	$m^2 \cdot h^{-1}$	$5,76 \cdot 10^{-6}$	8
$D_I$	Coefficiente de difusão de $S_I$	$m^2 \cdot h^{-1}$	$5,76 \cdot 10^{-6}$	8
$D_{N2}$	Coefficiente de difusão de $S_{N2}$	$m^2 \cdot h^{-1}$	$9,17 \cdot 10^{-6}$	8
$\rho_{XBOA}$	Densidade máxima para $X_{BOA}$	g DQO $\cdot m^{-3}$	350.000	9
$\rho_{XBON}$	Densidade máxima para $X_{BON}$	g DQO $\cdot m^{-3}$	350.000	9
$\rho_{XH}$	Densidade máxima para $X_H$	g DQO $\cdot m^{-3}$	350.000	9
$\rho_{XSTO}$	Densidade máxima para $X_{STO}$	g DQO $\cdot m^{-3}$	350.000	9
$\rho_{XS}$	Densidade máxima para $X_S$	g DQO $\cdot m^{-3}$	350.000	9
$\rho_{XI}$	Densidade máxima para $X_I$	g DQO $\cdot m^{-3}$	350.000	9
$k_L a$	Coefficiente de transferência de oxigênio	$h^{-1}$	399.708	Medido

(1) Gujer *et al.* (1999); (2) Ni; Yu e Sun (2008); (3) Koch *et al.* (2000); (4) Kaelin *et al.* (2009) (5) Fang *et al.* (2009); (6) Manser; Gujer e Siegrist (2005); (7) Moussa *et al.* (2005); (8) Beun; Heijnen; Van Loosdrecht (2001); (9) de Kreuk *et al.* (2007).