

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL**

JANAINA DE MORAES PERES ANDRADE

**USO DO MODELO ASM3 PARA SIMULAÇÃO DO DESEMPENHO DE REATOR
COMPARTIMENTADO ANAERÓBIO/ANÓXICO E AERÓBIO PARA REMOÇÃO
SIMULTÂNEA DE MATÉRIA ORGÂNICA E NITROGÊNIO EM ESGOTO
DOMÉSTICO**

Recife

2017

JANAINA DE MORAES PERES ANDRADE

**USO DO MODELO ASM3 PARA SIMULAÇÃO DO DESEMPENHO DE REATOR
COMPARTIMENTADO ANAERÓBIO/ANÓXICO E AERÓBIO PARA REMOÇÃO
SIMULTÂNEA DE MATÉRIA ORGÂNICA E NITROGÊNIO EM ESGOTO
DOMÉSTICO**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutora em Engenharia Civil.

Área de Concentração: Tecnologia Ambiental

Orientador: Prof. Dr. Mário Takayuki Kato

Recife

2017

Catálogo na fonte

Bibliotecária Maria Luiza de Moura Ferreira, CRB-4 / 1469

A553u Andrade, Janaina de Moraes Peres.

Uso do modelo ASM3 para simulação do desempenho de reator compartimentado anaeróbico/anóxico e aeróbico para remoção simultânea de matéria orgânica e nitrogênio em esgoto doméstico / Janaina de Moraes Peres Andrade. - 2017.

78 folhas, il., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Mário Takayuki Kato.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, 2017.

Inclui Referências.

1. Engenharia Civil. 2. Modelo ASM3. 3. Software ASIM. 4. Esgoto doméstico.

5. Reator compartimentado anaeróbico/anóxico e aeróbico. I. Kato, Mário Takayuki (Orientador). II. Título.

UFPE

624 CDD (22. ed.)

BCTG/2018-101



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL**

A comissão examinadora da Defesa de Tese de Doutorado

**USO DO MODELO ASM3 PARA SIMULAÇÃO DO DESEMPENHO DE REATOR
COMPARTIMENTADO ANAERÓBIO/ANÓXICO E AERÓBIO PARA REMOÇÃO
SIMULTÂNEA DE MATÉRIA ORGÂNICA E NITROGÊNIO EM ESGOTO
DOMÉSTICO**

defendida por

Janaina de Moraes Peres Andrade

Considera a candidata APROVADA

Recife, 04 de dezembro de 2017.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Mário Takayuki Kato - UFPE
(orientador)

Prof.^a Dr.^a Juliana Cardoso de Moraes - IFPE
(examinadora externa)

Prof. Dr. Wamberto Raimundo da Silva Junior – UFPE
(examinador externo)

Prof.^a Dr.^a Simone Machado Santos – UFPE
(examinadora externa)

Prof. Dr. Wanderli Rogério Moreira Leite – UFPE
(examinador externo)

*Ao meu querido filho Benício,
com amor e orgulho,
DEDICO.*

AGRADECIMENTOS

Tudo que termina é porque um dia começou. Se começou foi preciso coragem e disposição. Se perdurou foi necessário muita luta e entrega. E se terminou é porque teve tudo isso junto e mais a força da família e de amigos, que incentivaram e ajudaram como puderam.

A história deste doutorado não teve início no dia em que o curso começou... e sim, quando recebi um e-mail em 2010 me alertando sobre uma seleção para mestrado na área de tecnologia ambiental. Então é lá que começam os meus agradecimentos...

À minha mãe Inajara de Moraes Peres e ao meu pai Hiram Deiques Peres que sempre apoiaram meus estudos não apenas financeiramente, mas, principalmente, me deram todo o amor do mundo e educação para que eu pudesse batalhar com confiança por todos os meus sonhos; **Ao meu irmão Renan** por todo incentivo sempre;

À minha avó Marina que deixou sua casa e veio morar uns tempos em Recife comigo, para que a solidão não fosse mais forte que a minha vontade de seguir em frente;

À Tamara e Larissa, duas amigas que foram fundamentais em toda adaptação de uma vida nova e, **ao professor Hélio Lopes** (in memoriam) que sem saber, com aquele e-mail que enviou, mudou todo o rumo da minha vida.

Foram dias difíceis mas eles passaram e eu venci. Eu queria mais, não queria ficar pela metade. E mais uma vez aqueles que estiveram comigo desde o início compraram este sonho comigo, era a vez de iniciar o doutorado. Com o doutorado também veio a mudança definitiva para Recife, o casamento e o maior presente da minha vida: meu filho! Complicado administrar o doutorado, o trabalho e um filho, mas Deus sempre colocou na minha vida pessoas dispostas a colaborar.

Agradeço **ao meu marido Ígaro Andrade Araújo** por me ajudar a aprender a manusear tantos softwares necessários para o meu trabalho;

Ao meu filho Benício por ser minha inspiração diária. Suas doses de amor e carinho me tornam cada dia melhor;

À UFRPE, em especial à Reitora Maria José de Sena e aos meus chefes Moacy e Carla, por terem a sensibilidade de permitirem minha licença do trabalho para conclusão do doutorado;

Ao meu orientador Mario Kato e aos professores Juliana Moraes e Wamberto Raimundo, fundamentais no progresso do meu aprendizado. Muito obrigada pela paciência.

À Compesa e à BRK ambiental, parceiros importantes.

E, finalmente, agradeço àquele que é o grande engenheiro de toda a minha história:

Deus!!

Obrigada por tudo!

*“Todas as vitórias ocultam uma
abdicação”*

(Simone de Beauvoir)

RESUMO

A intensa urbanização e industrialização clamam pela constante modernização e aumento da eficiência de tecnologias de tratamento de águas residuárias. A modelagem matemática é um importante instrumento para o melhor entendimento dos processos que ocorrem em um reator biológico, assim como para a obtenção de parâmetros que permitam elaborar projetos e operar sistemas. Seguindo esta dinâmica, este trabalho trata da simulação computacional e modelagem matemática de reatores compartimentados anaeróbio/anóxico e aeróbio para remoção simultânea de matéria orgânica e nitrogênio de esgoto doméstico. Os reatores em estudo são experimentais, em escala piloto e foram instalados na ETE Mangueira, em Recife-PE. A simulação computacional foi implementada pelo software ASIM e utilizou o modelo matemático ASM3, proposto pela *International Water Association (IWA)*. O modelo ASM3 original, bem como o modelo ASM3 alterado por Koch *et al.* (2000) não forneceram resultados satisfatórios para a modelagem do reator e, mesmo com tentativas de ajustes de calibração, o modelo ASM3 não pôde ser validado para o sistema em questão. Acredita-se que o modelo ASM3 não tenha respondido satisfatoriamente para este reator porque o mesmo não considera em sua estrutura a existência de biofilmes móveis, e, caso sejam criada e incluída uma extensão ao modelo que descreva um compartimento MBBR, esse possa vir a ser usado para a modelagem de sistemas compartimentados com biofilme móvel.

Palavras-chave: Modelo ASM3. Software ASIM. Esgoto doméstico. Reator compartimentado anaeróbio/anóxico e aeróbio.

ABSTRACT

The intense urbanization and industrialization call for constant modernization and increased efficiency of wastewater treatment technologies. Mathematical modeling is an important instrument to better understand the processes involved in a biological reactor, as well as to obtain parameters that allow the elaboration of projects and operating systems. This work deals with the computational simulation and mathematical modeling of anaerobic/anoxic and aerobic reactors for the simultaneous removal of organic matter and nitrogen from domestic effluent. The reactors under study are experimental, pilot scale and installed at Mangueira Station, Recife-PE. A computer simulation was implemented by ASIM software and the mathematical model ASM3, proposed by the International Water Association (IWA). The original ASM3 model, as well as the ASM3 model modified by Koch et al. (2000) did not provide satisfactory results for reactor modeling, and even with attempts to calibrate the ASM3 model could not be validated for the system in question. It is believed that the ASM3 model did not respond satisfactorily to this reactor because it does not consider in its structure the existence of mobile biofilms, and if an extension to the model describing an MBBR compartment is created and included, it may become used for the modeling of systems compartmentalized with mobile biofilm.

Keywords: ASM3 model. ASIM software. Domestic sewage. Compartmentalized reactor anaerobic/anoxic and aerobic.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Conversão biológica nos sistemas aeróbios e anaeróbios	23
Figura 2 – Ciclo biológico do Nitrogênio	24
Figura 3 – Fluxograma das etapas de desenvolvimento de um modelo matemático	35
Figura 4 – Fracionamento da DQO afluente nos modelo ASM	39
Figura 5 – Processos do modelo ASM3	41
Figura 6 – Esquema de operação dos reatores	55
Figura 7 – Reatores compartimentados anaeróbio/anóxico e aeróbio	55
Figura 8 – Seleção do modelo a ser simulado pelo software ASIM	59
Figura 9 – Quadro para inserção dos dados do reator e do afluente	60
Figura 10 – Representação do sistema de tratamento gerado pelo software	60
Figura 11 – DQO total efluente medida e simulada com os modelos ASM3 original e de Koch	64
Figura 12 – S_{NOX} efluente medida e simulada com os modelos ASM3 original e de Koch	65
Figura 13 – S_{NH4} efluente medida e simulada com os modelos ASM3 original e de Koch	66
Figura 14 – S_{ALK} efluente medida e simulada com os modelos ASM3 original e de Koch	67
Figura 15 – X_{SST} efluente medida e simulada com os modelos ASM3 original e de Koch	68

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Comparativo entre os modelos ASM	38
Tabela 2 – Componentes ou variáveis do modelo ASM3	40
Tabela 3 – Matriz estequiométrica e de componentes do modelo ASM3	43
Tabela 4 – Valores típicos dos coeficientes estequiométricos do modelo ASM3	45
Tabela 5 – Matriz cinética do modelo ASM3	46
Tabela 6 – Valores usuais dos parâmetros cinéticos, relativos a um efluente primário para aplicação do modelo ASM3, a 20°C	47
Tabela 7 – Resumo das condições operacionais em cada fase da pesquisa	56
Tabela 8 – Método de obtenção das variáveis utilizadas no modelo ASM3	57
Tabela 9 – Valores de referência das frações da DQO total para o ASM3	58

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
1.1	OBJETIVO GERAL	15
1.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	15
2	JUSTIFICATIVA	16
3	REVISÃO DE LITERATURA	18
3.1	REATORES COMPARTIMENTADOS ANAERÓBIO/ANÓXICO E AERÓBIO	18
3.2	PROCESSOS BIOLÓGICOS NA REMOÇÃO DE MATÉRIA ORGÂNICA EM CONDIÇÕES AERÓBIAS	20
3.3	PROCESSOS BIOLÓGICOS NA REMOÇÃO DE MATÉRIA ORGÂNICA EM CONDIÇÕES ANAERÓBIAS	21
3.4	PROCESSOS BIOLÓGICOS NA REMOÇÃO DE NITROGÊNIO	24
3.4.1	Nitrificação e Desnitrificação Simultânea (NDS)	27
3.5	REATOR MBBR	29
3.6	CINÉTICA DO CRESCIMENTO BACTERIANO	30
3.7	BALANÇO DE MASSA	32
3.8	USO DA MODELAGEM MATEMÁTICA	33
3.9	MODELAGEM MATEMÁTICA DE SISTEMAS BIOLÓGICOS PARA TRATAMENTO DE EFLUENTES	36
3.9.1	Activated Sludge Models (ASM)	37
3.9.1.1	<i>Processos presentes no modelo ASM3</i>	41
3.9.1.2	<i>Estequiometria do modelo ASM3</i>	43
3.9.1.3	<i>Cinética do modelo ASM3</i>	46
3.9.1.4	<i>Considerações, restrições e limitações do modelo ASM3</i>	48
3.10	SIMULAÇÃO, CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DOS MODELOS MATEMÁTICOS PARA REATORES BIOLÓGICOS	49
4	METODOLOGIA	54
4.1	CARACTERÍSTICAS DO REATOR MODELADO	54
4.2	PARÂMETROS DE ENTRADA DO MODELO ASM3	56
4.3	SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	58
4.4	EXPORTAÇÃO DOS DADOS E TESTE DE HIPÓTESES	61
4.5	AJUSTES DE CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DO MODELO	62

5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	63
5.1	DQO TOTAL	63
5.2	NITRATO + NITRITO	65
5.3	NITROGÊNIO AMONÍACAL	66
5.4	ALCALINIDADE TOTAL	67
5.5	SÓLIDOS SUSPENSOS TOTAIS	68
5.6	PARÂMETROS CALIBRADOS E VALIDAÇÃO DO MODELO	69
6	CONCLUSÕES	72
	REFERÊNCIAS	73

1 INTRODUÇÃO

A intensa urbanização e industrialização congrega populações que geram grandes quantidades de efluentes. O processo de eliminação e tratamento desses resíduos deve ser realizado estrategicamente, conforme uma política de saneamento adequada. O lançamento de esgoto bruto em corpos hídricos pode causar perda da qualidade ambiental, prejuízos econômicos e comprometer a saúde pública.

A escolha do tipo de tratamento dos efluentes depende das condições mínimas estabelecidas para a qualidade da água dos corpos receptores, enquadrados e classificados em função de sua utilização pelo Conselho Nacional de Meio Ambiente (CONAMA) em sua Resolução nº 357, de 18 de março de 2005, alterada e complementada pela resolução nº 430, de 13 de maio de 2011. Em qualquer projeto de estações de tratamento é fundamental o estudo das características do esgoto a ser tratado e da qualidade do efluente que se deseja lançar no corpo receptor.

A cada dia se investe mais no desenvolvimento de técnicas e plantas que superem as existentes tanto em eficiência quanto na redução de custos de operação do tratamento de esgotos. Com o avanço tecnológico, principalmente na área de tecnologia de informação, tem crescido também a utilização de modelos matemáticos para descrever como ocorrem os processos bioquímicos no tratamento de esgoto e, desta maneira, é possível prever o comportamento de estações de tratamento em relação à eficiência na remoção de material orgânico e nutrientes. Os modelos matemáticos tornam-se importantes por contribuir para que os processos envolvidos no tratamento de esgoto possam ser mais compreendidos.

Alguns dos modelos que vêm sendo implementados para descrever o tratamento de esgoto em processos biológicos aeróbios, e que se tornaram bastante difundidos desde a sua primeira versão feita em 1987, é a série *Activated Sludge Models* (ASM), proposto pela *International Water Association* (IWA). Os modelos ASM1 e ASM3 foram propostos para descrever a remoção da matéria orgânica e compostos nitrogenados, já os modelos ASM2 e ASM2d explicitam também a remoção de fósforo do sistema.

Nesta pesquisa utilizou-se o modelo ASM3 para modelar reatores compartimentados e compostos por uma primeira zona anaeróbia/anóxica e uma segunda zona aeróbia com biofilme aderido e em suspensão.

Reatores com esta configuração têm sido utilizados para a remoção simultânea de matéria orgânica e compostos nitrogenados. A remoção de nitrogênio neste tipo de sistema pode atingir 80% - 90%, uma vez que é possível aproveitar as melhores características de cada processo e aumentar a eficiência final (METCALF; EDDY, 2003).

Porém, segundo Ferrai *et al.* (2010), os critérios de projeto utilizados para esses reatores ainda são bastante empíricos, confiando principalmente em parâmetros como a carga superficial aplicada (carga de poluentes por unidade de superfície dos suportes) e o tempo de detenção hidráulica para alcançar a qualidade desejada do efluente. Foram encontrados pouquíssimos trabalhos na literatura que descrevam uma modelagem matemática de sistemas compartimentados com uma primeira zona anaeróbia/anóxica seguida de uma zona aeróbia com biomassa.

Com o objetivo de contribuir para a implementação e o fortalecimento da referida tecnologia de tratamento, a utilização de modelos matemáticos é uma ferramenta indispensável que fornece elementos relevantes para o projeto, operação e otimização deste tipo de sistema biológico, a qual se configura na evolução do conhecimento e no domínio técnico do processo. É nesse contexto que se insere esta pesquisa.

1.1 OBJETIVO GERAL

Implementar o modelo ASM3 em reator biológico compartimentado anaeróbio/anóxico e aeróbio para remoção simultânea de matéria orgânica e compostos nitrogenados.

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Simular o comportamento do reator compartimentado anaeróbio/anóxico e aeróbio utilizando os dados de monitoramento do sistema, por meio do software ASIM;
- Estruturar o modelo ASM3 ao reator compartimentado anaeróbio/anóxico e aeróbio experimental da ETE Mangueira;
- Ajustar os coeficientes cinéticos do modelo ASM3 para às condições de funcionamento do reator compartimentado anaeróbio/anóxico e aeróbio em estudo, a fim de validar o modelo.

2 JUSTIFICATIVA

O amplo déficit em saneamento básico e a insuficiência de recursos destinados para investimento em saneamento básico no Brasil fazem com que o problema sanitário seja comumente associado à expansão dos serviços de coleta e tratamento de efluentes a baixo custo. Neste contexto, considerando somente o tratamento de esgoto doméstico, a engenharia e as ciências biológicas têm se empenhado na construção de novos sistemas que sejam confiáveis, viáveis e com custo mais baixos.

Em países mais desenvolvidos, instituições internacionais de pesquisa vêm investindo muito na área de modelagem, simulação e controle de processos de tratamento de águas residuárias como alternativa para a criação de tecnologias mais eficientes e baratas. No Brasil, pesquisas neste tema ainda são incipientes.

Os modelos matemáticos oferecem grandes benefícios, fornecendo conceitos e possibilitando respostas, previsões de desempenho ou comparações de alternativas de tratamento, propiciando o controle e a otimização operacional. Outra vantagem dos modelos matemáticos refere-se à potencial economia na construção e nos custos de operação e manutenção, uma vez que qualquer processo de tratamento adequado deve produzir o efluente específico com o consumo mínimo de energia e de insumos (CHRISTOFOLETTI, 2004).

Quando se trata de reatores novos e promissores, como os compartimentados, o uso da modelagem matemática e da simulação computacional torna-se ainda mais relevante, visto que estes se configuram como novas alternativas de tratamento, as quais apresentam maiores eficiências e menor produção de lodo para descarte, o que os apresenta como excelente alternativa para melhoria da qualidade ambiental. É importante ressaltar que reatores compartimentados ou híbridos podem ser utilizados tanto em sistemas convencionais, como em sistemas descentralizados. Nestes casos, o uso destes reatores ainda é caracterizado como agente de inclusão social e melhora na qualidade de vida da população beneficiada, o que ressalta a importância dos estudos de modelagem matemática do sistema.

A IWA (International Water Association), sediada em Londres mas com membros de diversos países, criou o modelo ADM1 (Anaerobic Digestion Model) e a série de modelos ASM (Activated Sludge Model), que se tornaram os mais utilizados e difundidos no campo científico e prático, dado a sua riqueza de detalhes, mas, sem

abrir mão de simplificações. No entanto, encontraram-se poucos trabalhos na literatura que utilizem estes modelos para sistemas compartimentados.

A COST (European Cooperation in Science and Technology) é uma cooperação de pesquisa intergovernamental que também mantém pesquisas com instituições fora da Europa, como Argentina, Austrália e Canadá. Entre 1992 e 1998 a COST criou uma “frente de pesquisa” - *Action 682* – intitulada “*Optimizing the design and operation of biological wastewater treatment plants through the use of computer programs based on a dynamic modelling of the process*”.

Nesse período expandiu-se e aprofundou-se o conhecimento dos processos de tratamento de águas residuárias e dos modelos matemáticos relacionados. De 1998 a 2004, foi dada continuidade ao trabalho com outra “frente” - *Action 624* - “*Optimal management of wastewater systems*”. Essa etapa teve como objetivo otimizar o desempenho das ETEs, focando no desenvolvimento de novas estratégias mais sustentáveis na gestão de sistemas de tratamento de efluentes como um todo. Para tal objetivo, a *Action 624* continuou envolvendo pesquisas na área de modelagem e simulação com enfoque na integração dos modelos previamente desenvolvidos (COST, 2017).

Os resultados de trabalhos nessa área de pesquisa estão presentes em uma série de pacotes de simulação comercializados no mundo todo, que colocam em evidência a importância e o valor do trabalho de modelagem dos processos de tratamento de águas residuárias não só no campo acadêmico, mas também na própria indústria.

Para o avanço científico e tecnológico do Brasil na área de tratamento de efluentes, é de suma importância que se invista em pesquisas sobre modelagem e simulação para aplicação prática nas Estações de Tratamento de Esgoto. Logo, pesquisas que abordam este tema são justificadas por todos os benefícios anteriormente citados aos sistemas de tratamento e ao meio ambiente, em especial quando se trata dos reatores compartimentados e, pelo progresso que levam consigo para a temática.

3 REVISÃO DE LITERATURA

3.1 REATORES COMPARTIMENTADOS ANAERÓBIO/ANÓXICO E AERÓBIO

Os processos de tratamento de águas residuais geralmente são equipados com diferentes unidades de tratamento (reatores anaeróbios de lodo ascendente – UASB - seguido de sistemas convencionais de lodo ativado) para obter um efluente que atinja as normas ambientais para descarte nos corpos receptores (BUNTNER *et al.*, 2013; CHUNG *et al.*, 2007). Embora o UASB seja compacto e, atualmente, apresente baixo custo operacional e baixa produção de lodo, sua combinação com o sistema de lodos ativados convencional ainda apresenta inconvenientes como custos de operação elevados (energia para aeração e eliminação de sólidos) e necessidade de áreas extensas (ABBASI; ABASSI, 2012, ANTONELLA *et al.*, 2012).

Padrões nacionais e internacionais de qualidade da água têm se tornado cada vez mais rígidos, assim como o custo de unidades territoriais para instalação de estações de tratamento está cada vez maior (VERLICCHI *et al.*, 2011), o que exige o desenvolvimento de tecnologias de tratamento mais eficientes com o mínimo de impacto ambiental e menor custo possível. Uma alternativa para o uso de tecnologias convencionais é a implantação de reatores compartimentados ou integrados que combinam processos anaeróbios, anóxicos e aeróbios, na tentativa de maximizar as vantagens que cada sistema possui e, ao mesmo tempo, minimizar seus pontos negativos. Desta forma é possível obter maior remoção de poluentes em uma área muito menor quando se compara aos processos convencionais (CHAN *et al.*, 2009).

Esta configuração aumenta a eficiência do processo porque: (a) usa a matéria orgânica do próprio esgoto afluente como doador de elétrons na redução dos óxidos de nitrogênio (NOx) sem necessidade de fornecimento adicional de carbono orgânico; (b) permite a nitrificação parcial ao invés da nitrificação total, o que oferece algumas vantagens do processo, tais como: requisito 25% menor de O₂ para a nitrificação, consumo de carbono orgânico 40% menor e baixa produção de lodo (BERNET *et al.*, 2005).

Com o objetivo de alcançar melhor estabilidade e maior eficiência no processo, foram propostas diversas combinações de tratamento anaeróbio e aeróbio. O grande problema da aplicação do tratamento com sistemas combinados é encontrar a

condição ótima para cada um. Diversos autores já estudaram numerosos esquemas de plantas e condições hidráulicas para sistemas de reatores integrados.

Lopes (1999) estudou um sistema composto de reatores compartimentados anaeróbio-aeróbio em série para o tratamento de esgoto sanitário. A primeira fase, anaeróbia, apresentou eficiência média de remoção de DQO total de 77%, para 12 horas de tempo de detenção hidráulica, e superior a 60% para TDH de 8 e 6 h. Já o tratamento posterior, aeróbio, foi capaz de, em média, remover 50% da DQO total remanescente. Ou seja, o sistema anaeróbio-aeróbio apresentou eficiência média de remoção de DQO total de 89 e 85% para TDH de 8 e 6 horas em cada reator.

Kato *et al.* (2001) pesquisaram a remoção de nitrogênio em dois reatores do tipo EGSB anaeróbio-aeróbio, em escala piloto, com volume de 401L cada e TDH de 4h e 8h, respectivamente, tratando efluente doméstico. Alcançaram eficiência de 58% e 76% para DQO bruta e filtrada no reator anaeróbio e 59% e 75% para os mesmos parâmetros, nessa ordem, para o reator aeróbio. A nitrificação atingiu concentrações de nitrato de 30 mg/L, porém com valores instáveis devido a problemas com aeração e perda de biomassa nitrificante.

Silva e Nour (2004) estudaram um reator compartimentado anaeróbio-aeróbio, tratando esgoto sanitário, como possibilidade de ser utilizado em pequenas comunidades urbanas e rurais. O desempenho do sistema foi avaliado em diversos tempos de detenção hidráulica (TDH), nos quais os melhores valores de Demanda Química de Oxigênio Total (DQO_{total}) - 73,7% e Sólidos em Suspensão Totais (SST) - 78,8%, foram obtidos com TDH total de 8 horas (4 horas para a fase anaeróbia e 4 horas para a fase aeróbia). O reator compartimentado apresentou a característica de estabilidade operacional necessária aos sistemas de baixo custo.

Lozada (2000), tratando esgoto sanitário, operou um sistema composto por um reator anaeróbio, UASB, seguido de um reator aeróbio, operado em bateladas seqüenciais. O reator UASB, para TDH de 6 horas, obteve eficiência de remoção de DQO e de SS da ordem de 71% e 62%, respectivamente. Além disso, foi observada a quase completa amonificação (98%) das formas de nitrogênio presentes no afluente. Com o subsequente pós-tratamento com RSB foram alcançadas eficiências de remoção de DQO e de sólidos suspensos da ordem de 87% e 84%, respectivamente, enquanto para NTK, foram encontrados valores de eficiência de conversão superiores a 79%, com tempo de aeração de 4 horas.

É notório que o sistema combinado é uma alternativa viável para o tratamento de esgoto sanitário, com melhores eficiências que o reator anaeróbio e com menores custos operacionais que o reator aeróbio operado separadamente.

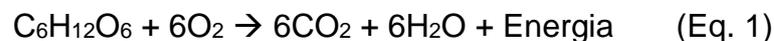
Para tornar o processo ainda mais eficiente a modelagem matemática destas plantas é de extrema importância, uma vez que com o modelo é possível testar a influência da modificação de alguns parâmetros importantes, sem a necessidade da realização de testes na própria ETE, o que além de economizar tempo, diminui significativamente custos com material e mão de obra.

3.2 PROCESSOS BIOLÓGICOS NA REMOÇÃO DE MATÉRIA ORGÂNICA EM CONDIÇÕES AERÓBIAS

A matéria orgânica presente nas águas residuárias é composta por uma combinação de carbono, hidrogênio, oxigênio, e até mesmo em alguns casos, nitrogênio. Tais elementos formam uma variedade de moléculas orgânicas que possuem desde estrutura simples a complexas (METCALF; EDDY, 2003).

A remoção biológica da matéria orgânica é realizada por microrganismos heterotróficos que, através da respiração, utilizam o carbono para a produção de energia e crescimento. Neste processo, através da ação enzimática das células, moléculas orgânicas de cadeias complexas (carboidratos, lipídios, proteínas) são transformadas em moléculas com cadeias de menor complexidade.

A equação geral da respiração aeróbia (Eq. 1) pode ser expressa como:



Tal equação é geral e simplificada, sendo que na realidade ocorrem diversas etapas intermediárias. A própria composição da matéria orgânica é simplificada, e neste caso a fórmula molecular da glicose é assumida como representativa da matéria orgânica carbonácea. Analisando-se a reação, podem ser destacados os seguintes aspectos, todos de importância no tratamento de esgotos (METCALF; EDDY, 2003):

- a estabilização da matéria orgânica;
- a utilização de oxigênio;
- a produção de gás carbônico;

- a liberação de energia.

O material orgânico é metabolizado pelos microrganismos aeróbios em duas vias: o catabolismo e o anabolismo. Na primeira via, as moléculas orgânicas são oxidadas a dióxido de carbono (CO_2), água e outros produtos, havendo uma liberação de energia que é então capturada pelos organismos para a utilização em suas atividades celulares e para a produção de novas células. No anabolismo, a matéria orgânica é metabolizada pelos microrganismos para a sintetização do protoplasma (formação de novas células), utilizando-se parte da energia que foi liberada na oxidação. Quando toda a matéria orgânica biodegradável é utilizada, inicia-se o processo conhecido como respiração endógena, onde as novas células consomem o próprio material celular para a obtenção de energia que é então utilizada na manutenção celular (METCALF; EDDY, 2003).

Os microrganismos aeróbios são mais eficientes que os anaeróbios, em se tratando de utilização de substrato e produção de energia, ou seja, a remoção de material orgânico carbonáceo é mais eficiente em processos aeróbios que em anaeróbios. Além disso, os processos aeróbios são capazes de reduzir a carga de nutrientes e de agentes patogênicos no esgoto. No entanto, é um processo mais caro, que exige maiores áreas para implantação e são mais complexos de serem operados (AKABOCI, 2013).

3.3 PROCESSOS BIOLÓGICOS NA REMOÇÃO DE MATÉRIA ORGÂNICA EM CONDIÇÕES ANAERÓBIAS

A geração de energia nas células microbianas pode ser efetuada, dependendo do microrganismo, por meio da respiração ou da fermentação. A denominação de respiração não é restrita apenas aos processos que envolvem consumo de oxigênio. De maneira geral, a oxidação implica na perda de um ou mais elétrons para a substância oxidada. No processo de conversão da matéria orgânica em condições de ausência de oxigênio são utilizados aceptores de elétrons inorgânicos como NO_3^- , SO_4^{2-} ou CO_2 .

Caso haja nitratos disponíveis no meio líquido, os organismos aparelhados a utilizar o nitrato na respiração passam a fazê-lo, convertendo o nitrato a nitrogênio

gasoso (desnitrificação). O NO_3^- é utilizado antes dos outros aceptores inorgânicos porque o sistema utiliza primeiro aquele que produz a mais alta qualidade de energia. Quando o ambiente está nestas condições, recebe nomenclatura específica de ambiente anóxico.

Quando os nitratos se extinguem, têm-se as condições anaeróbias estritas. Nestas, são utilizados os sulfatos, os quais são reduzidos a sulfetos, e o dióxido de carbono, que é convertido a metano. Enquanto houver substâncias de maior liberação de energia, as inferiores não serão utilizadas.

A Equação 2 mostra, de forma geral e simplificada, a conversão da matéria orgânica em condições anaeróbias.



Nesta equação podem ser destacados os seguintes aspectos (VON SPERLING, 1996):

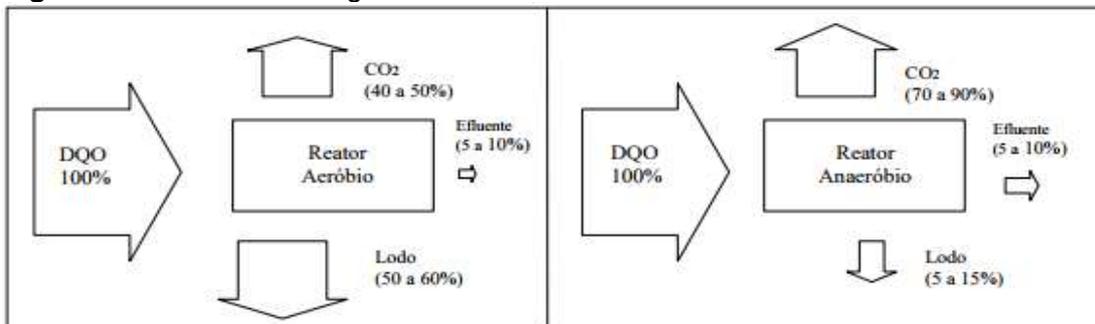
- a não exclusividade da oxidação. Se, por um lado, o carbono do CO_2 se apresenta em seu estado mais elevado de oxidação (+4), o oposto ocorre com o CH_4 , onde o Carbono se encontra em seu estado mais reduzido (-4), podendo ser posteriormente oxidado;
- a não utilização de oxigênio;
- a produção de metano e gás carbônico;
- a liberação de energia (inferior à da respiração aeróbia).

A digestão anaeróbia de compostos orgânicos complexos é normalmente considerada um processo de dois estágios. No primeiro, um grupo de bactérias facultativas e anaeróbias, denominadas fermentativas, convertem os orgânicos complexos em outros compostos. Compostos orgânicos complexos como carboidratos, proteínas e lipídeos são hidrolisados, fermentados e biologicamente convertidos em materiais orgânicos mais simples, principalmente ácidos voláteis. No segundo estágio ocorre a conversão dos ácidos orgânicos, gás carbônico e hidrogênio em produtos finais gasosos, o metano e o gás carbônico. Esta conversão é efetuada por um grupo especial de bactérias, denominadas formadoras de metano, as quais são estritamente anaeróbias. As bactérias metanogênicas dependem do substrato fornecido pelas acidogênicas. Logo, uma vez que as bactérias metanogênicas são

responsáveis pela maior parte de degradação do resíduo, a sua baixa taxa de crescimento e de utilização dos ácidos orgânicos normalmente representa o fator limitante no processo de digestão como um todo (CHERNICHARO, 1997).

Como vantagens do processo anaeróbio sobre o processo aeróbio pode-se citar a produção de metano para produção de energia, os menores custos de implantação e operação, menor área requerida, a tolerância a altas cargas orgânicas e a menor produção de lodo (67% de anabolismo neste contra apenas 30% no anaeróbio, segundo van Haandel, 1996). Por outro lado esse processo de tratamento apresenta como desvantagens baixa remoção de nutrientes e patógenos (o que geralmente gera a necessidade de algum pós tratamento), a possibilidade de geração de maus odores e de um efluente com aspecto desagradável, a chance de inibição das bactérias anaeróbias por um grande número de compostos e a lentidão na partida do processo quando não se usa lodo de semente adaptado (CHERNICHARO, 1997). A Figura 1 mostra um esquema da conversão biológica nos sistemas aeróbios e anaeróbios em termos de DQO, produção de CO₂ e de lodo.

Figura 1: Conversão biológica nos sistemas aeróbios e anaeróbios.



Fonte: CHERNICHARO, 2001.

Diante das vantagens e desvantagens de cada tipo de tratamento, muitos estudos têm sido realizados com o objetivo de criar e desenvolver plantas que integrem o sistema anaeróbio ao aeróbio em um único reator no intuito de criar alternativas tecnicamente viáveis e economicamente vantajosas que integrem as vantagens e reduzam as desvantagens de cada tipo de tratamento.

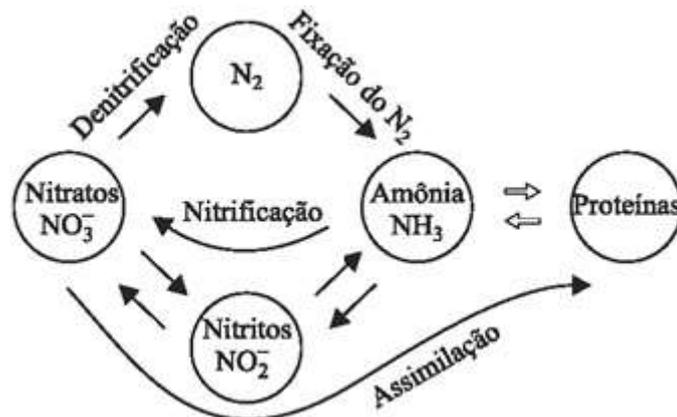
3.4 PROCESSOS BIOLÓGICOS NA REMOÇÃO DE NITROGÊNIO

No esgoto sanitário, o nitrogênio é encontrado sob a forma de compostos orgânicos nitrogenados e amônia, e é originado de proteínas do metabolismo do corpo humano. Dentre os compostos orgânicos, os principais são os aminoácidos, proteínas e ureia (GERARDI, 2002).

Aproximadamente 60% do nitrogênio contido no esgoto sanitário está na forma de amônia e 40% está na forma de nitrogênio orgânico. Logo, outro processo muito importante no tratamento de esgotos é o processo de oxidação das formas nitrogenadas.

A amônia é originada da amonificação do nitrogênio orgânico e da hidrólise da ureia. O ciclo biológico do nitrogênio está esquematizado na Figura 2.

Figura 2: Ciclo biológico do Nitrogênio.



Fonte: Adaptado de <<https://pir2.forumeiros.com/>>.

A assimilação do Nitrogênio é a conversão biológica do N-orgânico como nitrito, nitrato ou amônia. Um vegetal em crescimento ou um microrganismo no solo, assimila nitrogênio na forma de nitrato, convertendo-o em proteína, ácidos nucleicos e outros compostos nitrogenados da célula. O nitrogênio inorgânico é devolvido ao ciclo, a partir da matéria orgânica, como resultado de autólise, decomposição e putrefação de material biológico e a forma principal na qual aparece é como amônia, processo denominado amonificação (STARKENBURG *et al.*, 2011).

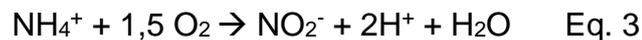
A remoção biológica do nitrogênio presente nas águas residuárias pode ocorrer por meio dos processos de nitrificação e desnitrificação, e o Anammox (*Anaerobic Ammonium Oxidation*). Os dois primeiros processos já são bastante conhecidos e

consolidados. Já no processo Anammox, organismos anaeróbios oxidam a amônia utilizando o nitrito como acceptor de elétrons.

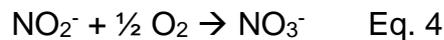
Sabe-se que a nitrificação é a oxidação biológica da amônia a nitritos e nitratos e os microrganismos responsáveis são as bactérias nitrificantes. Estas possuem baixo crescimento, sendo necessário um alto tempo de retenção celular para garantir a permanência da biomassa no sistema (VIEIRA, 2000).

As bactérias dos gêneros *Nitrosomonas*, *Nitrospira* e *Nitrosococcus* oxidam a amônia a nitrito e as do gênero *Nitrobacter*, *Nitrococcus*, *Nitrospira*, *Nitrospina* e *Nitrotoga* oxidam nitrito a nitrato (STARKENBURG *et al.*, 2011).

A reação da conversão biológica da amônia a nitrito (nitrificação) é expressa pela equação 3:



A conversão do nitrito a nitrato (nitratação) é expressa pela equação 4:



A nitrificação é afetada por vários fatores ambientais, dentre os quais temperatura, pH, concentração do substrato e fatores de inibição. Tais fatores podem afetar a taxa de crescimento das bactérias nitrificantes e, conseqüentemente, na taxa de nitrificação (BERNET; SPERÁNDIO, 2009).

O pH é um dos fatores mais relevantes que afetam a nitrificação, estando a faixa ótima entre 7,0 e 8,2. A temperatura é outro fator importantíssimo, tendo sua faixa ótima bem ampla, entre 5,0 e 40 °C (BERNET; SPERÁNDIO, 2009).

O efeito da temperatura na taxa de crescimento dos organismos nitrificantes pode ser expresso conforme a equação de van't Hoff-Arrhenius (Equação 5).

$$\mu = \mu_{20} \cdot \Theta^{T-20} \quad \text{Eq. 5}$$

Onde:

μ = Taxa de crescimento (dia^{-1});

μ_{20} = Taxa de crescimento a 20 °C (dia^{-1});

Θ = Coeficiente de temperatura (adimensional);

T = Temperatura (°C).

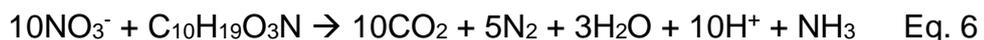
Na desnitrificação, bactérias heterotróficas anaeróbias facultativas e algumas autotróficas utilizam o nitrito ou nitrato para reduzi-los ao gás nitrogênio (N₂), na ausência ou em baixas concentrações de OD. Quando há uma pequena quantidade de oxigênio disponível as bactérias heterotróficas utilizam o oxigênio presente no nitrito e/ou nitrato para metabolizar a matéria orgânica. Estas bactérias heterotróficas usarão preferencialmente o oxigênio quando este está disponível, no entanto, passarão a utilizar o nitrito ou nitrato quando o suprimento de oxigênio for baixo ou ausente (respiração anóxica).

A desnitrificação pode ser dividida em duas etapas principais. Na primeira, o nitrato é reduzido para nitrito e, posteriormente, ocorre a redução do nitrito a nitrogênio gasoso.

Vários gêneros de bactérias atuam no processo de desnitrificação, dentre os quais se destacam os gêneros *Pseudomonas*, *Rhodopseudomonas*, *Bacillus*, *Thiobacillus*, *Alcaligenes*, *Paracoccus*, entre outros (STARKENBURG *et al.*, 2011).

Além do N₂, que por ser insolúvel em água e escapar para a atmosfera, o óxido nitroso, conhecido como gás hilariante, também pode ser emitido para a atmosfera. Segundo Kampschreur *et al.* (2009), o óxido nitroso pode ser produzido durante os processos de nitrificação e desnitrificação, e os principais parâmetros que colaboram para a emissão do N₂O em ETES são a baixa concentração de oxigênio dissolvido e acúmulo do nitrito, estes no processo de nitrificação e desnitrificação, e a baixa relação DQO/N na etapa de desnitrificação.

As reações que descrevem o processo de desnitrificação dependem do tipo da fonte de carbono envolvido e também da fonte de nitrogênio. A equação representando a desnitrificação com o uso do esgoto como fonte de material orgânico é apresentada na Equação 6 (WEF, 2011):



Fatores ambientais como pH, temperatura, concentração de OD e relação DQO/N influenciam a taxa de crescimento dos microrganismos desnitrificantes. Com relação ao pH não há consenso na literatura para a melhor faixa para a desnitrificação, mas sabe-se que em pH ácido há redução da desnitrificação, pela formação do ácido nitroso, mais tóxico que o nitrito. A temperatura deve ser mantida constante entre 20

e 35 °C e a influência deste fator também pode ser medido pela equação de van't-Hoff Arrhenius (CUERVO LÓPEZ *et al.*, 2009).

Por ser um processo anaeróbio, a concentração máxima de OD admitida é de 0,1 mg.L⁻¹, uma vez que para as bactérias desnitrificantes o OD é o acceptor de elétrons energeticamente preferível (JORDÃO; PESSOA, 2009). Sobre a relação C/N, sabe-se que quando conhecida a melhor relação, pode-se obter a máxima conversão dos compostos nitrogenados com uma porcentagem mínima de carbono orgânico, o que afeta diretamente a eficiência dos processos de tratamento de esgotos (CHIU; CHUNG, 2003).

3.4.1 Nitrificação e Desnitrificação Simultânea (NDS)

O fenômeno da NDS pode ser explicado por meio de dois princípios, o físico e o biológico. A explicação física, e aceita como convencional, é que a NDS é consequente de uma gradiente de concentração de OD dentro dos flocos biológicos e biofilmes, decorrente da difusão do OD nos mesmos. Este gradiente de concentração do oxigênio cria microzonas que são favoráveis a determinadas linhagens de microrganismos. As bactérias nitrificantes são encontradas em regiões com alta concentração de OD, enquanto os microrganismos desnitrificantes estão dispostos nas microzonas com menor concentração de OD (MÜNCH; LANT; KELLER, 1996).

Diversos fatores contribuem para que ocorram as reações de nitrificação e desnitrificação simultaneamente, tais como as características físicas dos agregados microbianos, OD, relação A/M (alimento/micro-organismos), relação C/N, entre outros (HE *et al.*, 2009).

O OD é um dos principais parâmetros que interferem no processo de NDS, visto que deve ser ajustado de modo a obter equilíbrio nas condições ideais para ocorrer a nitrificação e a desnitrificação, de forma a evitar a inibição de algum processo. Concentrações de OD muito baixas podem afetar a taxa da nitrificação e concentrações muito altas prejudicariam a taxa de desnitrificação. As características físicas dos agregados microbianos influenciam na difusão do OD e, conseqüentemente, na criação de zonas aeróbias e anóxicas dentro dos agregados. Além da difusão do OD, as características dos agregados interferem na difusão dos substratos (LI *et al.*, 2007).

A dinâmica dos microrganismos nitrificantes autotróficos e desnitrificantes heterotróficos é influenciada diretamente pela razão DQO/N do afluente ao processo de remoção de nitrogênio (FU *et al.*, 2009).

Quando a razão DQO/N é alta, a nitrificação é prejudicada, devido à disputa direta por OD entre os microrganismos autotróficos e heterotróficos. Ocorrendo o contrário, ou seja, baixa razão entre DQO/N, o processo de desnitrificação é inibido, decorrente da deficiência de uma fonte de carbono doadora de elétrons (WALTERS *et al.*, 2009).

Com o aprofundamento acerca dos mecanismos que embasam a NDS, várias vantagens podem ser obtidas com a aplicação deste processo quando comparada aos processos convencionais de nitrificação e desnitrificação. A ocorrência na NDS em um mesmo reator dispensa a necessidade da utilização de reatores separados ou até mesmo de aeração intermitente, fazendo com que sistema fique mais simples, reduzindo a área e custos relacionados. Outras vantagens oferecidas são: (i) com a NDS é que o hidrogênio doado para as reações de desnitrificação podem ser oriundos dos compostos orgânicos presentes na água residuária; (ii) a redução do tempo necessário para ocorrer completamente a nitrificação e desnitrificação; (iii) manutenção do pH neutro no reator, uma vez que a alcalinidade consumida na nitrificação é produzida na desnitrificação; e (iv) utilização de menor quantidade de fonte de matéria orgânica (fonte de carbono) e menor produção de lodo (WALTERS *et al.*, 2009; SEIFI; FAZAELIPOOR, 2012).

3.5 REATOR MBBR

A tecnologia de sistema de tratamento de esgoto do tipo MBBR (Moving Bed Biofilm Reactor) foi desenvolvida na Noruega na década de 1980, através da parceria firmada entre a companhia Kaldnes Miljøteknologi (KMT), especialista em tratamento de efluentes doméstico e industrial, e o Instituto de Pesquisa SINTEF (RUSTEN *et al.*, 2000).

O princípio do MBBR é congregar as melhores características de processos de lodos ativados, o qual se tem o aproveitamento de todo o volume útil do reator, com as melhores de processos com biofilme em um único reator, evitando as características indesejáveis (RUSTEN *et al.*, 2006).

O crescimento dos microrganismos em reatores de leito móvel com biofilme ocorre em suportes com alta área superficial (biomédias) que se movimentam livremente pelo reator de forma a aproveitar todo o volume útil (FERRAI *et al.*, 2010). Estes suportes permanecem sempre dentro do reator, pois na saída do mesmo um sistema de peneiras é posto para a sua retenção. Logo, a biomassa fica retida no processo por mais tempo favorecendo o aumento da concentração dos microrganismos que crescem lentamente, como as bactérias autotróficas que são as responsáveis pela nitrificação (BASSIN *et al.*, 2011). Assim, o MBBR trata cargas orgânicas carbonáceas e nitrogenadas mais elevadas quando comparado ao sistema de lodo ativado (CATINO, 2013).

Resumidamente, podem-se destacar as seguintes vantagens (FUJII, 2011; WEF, 2010):

- Menor volume dos reatores biológicos se comparado com o sistema de lodo ativado conjugado com clarificadores para alcançar os mesmos objetivos de tratamento;
- As taxas de aplicação de sólidos para as unidades de clarificação são significativamente reduzidas quando comparadas às de sistemas de lodo ativado;
- Não há necessidade de operações de retrolavagem para controle da espessura de biofilme ou desentupimento do meio suporte por se tratar de reatores de mistura completa e fluxo contínuo;
- Ao contrário do sistema de lodos ativados, não depende da etapa de separação de sólidos para manter a densidade populacional de microrganismos, uma vez que a maior parte da biomassa ativa é retida continuamente no reator;

- Maior capacidade para absorver cargas de choque;
- Ocorrência de desnitrificação em zonas anaeróbias nas camadas profundas do biofilme;
- Facilidade para oxidar cargas com altas taxas de componentes solúveis dentro do biofilme;
- Possibilidade de trabalhar com baixa idade do lodo;
- Maior eficiência da nitrificação independentemente da Idade do lodo.

Um ponto a ser considerado em contraste com as inúmeras vantagens dessa tecnologia é o consumo de oxigênio. A necessidade de manter viáveis tanto a biomassa aderida quanto a em suspensão deve requerer uma maior quantidade de Oxigênio Dissolvido (OD). Além disso, a ocorrência da nitrificação bem como a energia necessária para manter em agitação a bioméria, contribui para uma demanda maior de consumo de OD.

3.6 CINÉTICA DO CRESCIMENTO BACTERIANO

Embora o crescimento dos microrganismos constitua um processo complexo, associado diretamente aos requisitos ambientais necessários ao crescimento, usualmente é possível descrevê-lo, ainda que de forma aproximada, através de modelos matemáticos relativamente simples. A teoria do crescimento biológico se baseia em três relações fundamentais: taxa de crescimento, coeficiente de produção celular e relação entre concentração de substrato e taxa de crescimento (CHERNICHARO, 1997).

A taxa de crescimento bruto específico dos microrganismos em função do substrato limitante pode ser expressa pela seguinte equação empírica (Eq. 7), chamada “equação de Monod”:

$$\mu = \mu_{m\acute{a}x} (S / (K_S + S)) \quad \text{Eq. 7}$$

Onde:

$\mu_{m\acute{a}x}$ = taxa de crescimento específico máxima (d^{-1});

S = concentração do substrato ou nutriente limitante (g/m^3);

K_s = constante de saturação, a qual é definida como a concentração do substrato para a qual $\mu = \mu_{m\acute{a}x} / 2$ (g/m^3).

A equação de Monod pode representar aproximadamente tanto as cinéticas de ordem zero quanto as de primeira ordem, bem como a transição entre as mesmas.

Porém, para se obter a taxa líquida de crescimento, deve-se considerar a etapa do metabolismo endógeno. Outros fatores como morte e predação, também contribuem para o decréscimo da massa de microrganismos, sendo que estes são usualmente agrupados a fim de representar o decaimento bacteriano total. A taxa de decaimento bacteriano pode ser expressa como uma reação de primeira ordem da forma (Eq. 8):

$$dX/dt = -K_d \cdot X \quad \text{Eq. 8}$$

onde:

K_d = coeficiente de respiração endógena (d^{-1}).

X = concentração de microrganismos no reator (g/m^3).

Dessa forma, o crescimento líquido dá-se pela Equação 9:

$$dX/dt = \mu_{m\acute{a}x} \cdot (S / (K_s + S)) \cdot X - K_d \cdot X \quad \text{Eq. 9}$$

Os dados cinéticos fornecem informações úteis para a análise de sistemas de tratamento, as quais podem ser obtidas por meio de balanços de massa em reatores bioquímicos usados no tratamento de águas residuárias.

O domínio sobre a cinética bacteriana é imprescindível nos estudos de modelagem matemática de reatores. Um dos primeiros passos da modelagem é a proposição da cinética das reações que ocorrem no processo.

3.7 BALANÇO DE MASSA

Conhecidas as taxas das reações de interesse no tratamento de esgotos, deve-se avaliar quantitativamente a sua influência dentro do balanço de massa geral do composto em análise. Isto porque a concentração de um determinado composto em um reator é função, não apenas das reações bioquímicas, mas também dos mecanismos de transporte (entrada e saída) do composto (VON SPERLING, 1996).

O balanço de massa consiste na quantificação dos materiais que entram, saem e acumulam-se, num sistema de limites definidos. Baseia-se na lei de conservação de massa, onde nada é criado ou destruído e sim, transformado.

O estudo do balanço de massa representa uma peça fundamental do projeto de equipamentos e reatores e torna-se complexo quando tratamos de processos constituídos por diversos equipamentos interligados. Esta complexidade aumenta em sistemas multifásicos, heterogêneos e com reações químicas.

A expressão de um balanço de massa é desenvolvida sobre um volume de controle fechado e possui termos para entrada, saída, geração e acumulação de materiais dentro do volume em que a reação se processa. A expressão geral de um balanço de massa é:

$$\textit{Acúmulo} = \textit{Entrada} - \textit{saída} + \textit{geração} - \textit{consumo}$$

Pode-se formular o balanço de massa para matéria carbonácea e nutrientes em um reator, através da seguinte expressão matemática (Equação 10):

$$dC/dt \cdot V = QC_0 - QC + rV \quad \text{Eq. 10}$$

onde:

dC/dt = Variação da concentração no tempo;

V = Volume do reator;

Q = Vazão;

C = Concentração em massa;

r = Taxa de geração.

A taxa de geração (r) será definida através de processos que envolvem reações químicas, segundo a equação 11:

$$r = kC^n \quad \text{Eq. 11}$$

onde:

k = constante de reação;

n = ordem da reação.

O balanço de massa é a premissa fundamental para a modelagem matemática de reatores e acontece após a proposição das cinéticas do processo.

3.8 USO DA MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem de processos busca a proposição de um conjunto de relações entre as variáveis capaz de representar de forma adequada, dentro da precisão requerida, cada caso em particular. Este conjunto de relações é chamado de modelo e, no caso específico da modelagem matemática, é constituído por equações algébrico-diferenciais.

Schwaab (2007) relatou modelo como sendo uma estrutura que tenta descrever de forma aproximada a realidade. Esta descrição aproximada é função da necessidade do modelo basear-se em um conjunto de observações experimentais, as quais são corrompidas por erros de medidas. Os erros de medidas também são designados como incertezas experimentais. Logo, na concepção do modelo, nem todas as variáveis podem ser controladas e/ou medidas precisamente durante os experimentos.

Segundo Nielsen (2003), um modelo matemático é um conjunto de relações entre as variáveis em um sistema em estudo e geralmente pode prever as variáveis de saída e o estado do sistema a partir das variáveis de entrada. Estas relações são normalmente expressas na forma de equações matemáticas, mas também podem ser especificadas como expressões lógicas, as quais são usadas na operação de um processo.

Quando as relações matemáticas expressam apenas características de estado estacionário diz-se que o modelo é estático. Quando as relações matemáticas

envolvem taxas de mudança com o tempo (comportamento transiente), e são descritas através de equações diferenciais, o modelo é dito dinâmico. Assim, as equações de balanço especificam como os materiais fluem dentro e fora do volume de controle e como são convertidos no interior deste volume. Essa conversão interna no volume de controle é representada pela equação de taxa (também chamada de cinética) e, juntamente com o balanço de massa, especificam o modelo completo (NIELSEN, 2003).

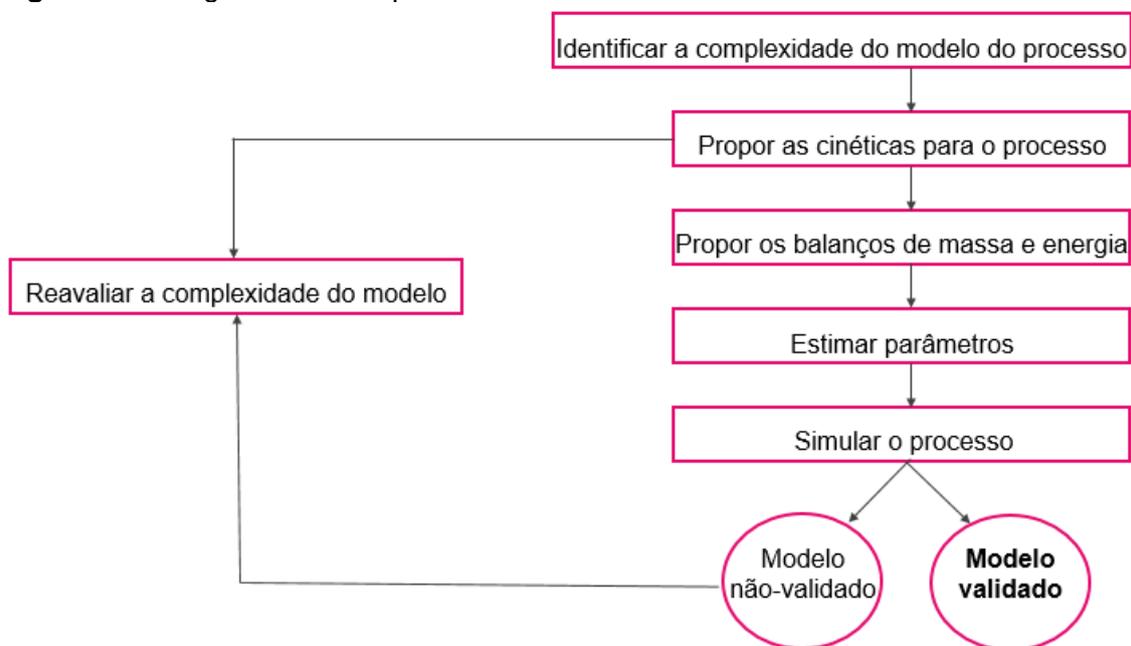
Os modelos matemáticos dinâmicos podem ser subdivididos em duas classes distintas, quais sejam: modelos matemáticos baseados na física do processo e modelos baseados nas relações de entrada-saída. Os modelos baseados na física do processo são modelos cuja derivação baseia-se nas leis da natureza e outras relações bem estabelecidas (normalmente empíricas), muitas vezes resultados de experiências de modelagem anteriores. Modelos matemáticos baseados nas relações de entrada-saída são aqueles cuja derivação baseia-se diretamente na coleta de dados do sistema, para uma posterior identificação, ajustando as informações obtidas a certo conjunto de modelos candidatos. O tipo de modelo será determinado a partir dos dados obtidos, do tempo disponível para o desenvolvimento do modelo e do grau de informação prévia sobre o sistema a ser modelado (GUIMARÃES, 1997).

Segundo Gordillo (1996), a elaboração do modelo, juntamente com sua aplicação na simulação, reúne uma série de vantagens na hora de conhecer e melhorar o processo, tais como: (a) entender o comportamento do sistema, já que abrange as evoluções que seguem as diferentes variáveis, de modo a formular um modelo; (b) a exploração do modelo mediante simulação ajuda a planejar o experimento, já que em pouco tempo se pode obter uma visão de quais variáveis afetam o processo e, portanto, estabelecer o tempo de duração para atingir os objetivos propostos; (c) nesse sentido, a predição da evolução do processo permite detectar em que momento a operação vai mudar sua trajetória, de modo que se possa tomar decisões a tempo de corrigir e dirigir o processo para a produção ótima. O modelo, portanto, permite projetar estratégias de operação e controle; (d) finalmente, uma aplicação menos direta, contudo também útil, é a sua utilização didática, já que permite traçar diferentes situações do processo e, portanto, facilitar sua compreensão e estudo, o que de forma experimental seria muito mais difícil e demorado de se levar a termo.

Neste contexto, encontram-se na literatura diversos conceitos e classificações desta ferramenta fundamental para o estudo desses processos. No entanto, projetar um modelo matemático envolve diversas etapas, dentre as quais a primeira e mais importante é a definição da complexidade do modelo. Para essa tarefa deve se definir o número de reações a serem consideradas no modelo e a estequiometria para essas reações (NIELSEN, 2003).

A Figura 3 ilustra as etapas envolvidas na elaboração do modelo matemático.

Figura 3: Fluxograma das etapas de desenvolvimento de um modelo matemático.



Fonte: Adaptado de Nielsen (2003).

Se as simulações empregando o modelo apresentam curvas que seguem a mesma tendência dos dados reais e as mesmas são consideradas estatisticamente representativas, o modelo é considerado válido (ZANOTELLI, 2002).

Caso contrário, se o ajuste não é significativo dentro do nível de significância estatística selecionado, mesmo para o conjunto de parâmetros estimado que propicia o melhor ajuste, torna-se necessário revisar o modelo cinético e passar através do ciclo de modelagem novamente (NIELSEN, 2003).

3.9 MODELAGEM MATEMÁTICA DE SISTEMAS BIOLÓGICOS PARA TRATAMENTO DE EFLUENTES

A utilização da modelagem matemática no tratamento de esgotos tornou-se uma ferramenta com grande aplicação em meados dos anos 90 (GERNAEY *et al.*, 2004), propiciando maior controle de todo o processo.

Dentre os diversos modelos matemáticos desenvolvidos, os mais utilizados e com grande difusão no campo científico e prático são o ASM e o ADM, ambos desenvolvidos pela IWA. O ASM vem sendo utilizado desde o final dos anos 80. Desde então, várias atualizações foram feitas e o modelo foi evoluindo através da incorporação de novos processos e variáveis, chegando-se atualmente ao ASM3. Já o ADM1 surgiu em 2002 com o objetivo de ser uma ferramenta para a modelagem dos processos anaeróbios. Este modelo foi concebido nos mesmos moldes do ASM, dado o grande sucesso obtido com a série em anos anteriores (BATSTONE *et al.*, 2002).

Os referidos modelos são conhecidos como modelos caixa branca ou white-box, também denominados de modelos determinísticos. Resultam de um conjunto de equações diferenciais, que são baseados nos princípios da engenharia, significando que as equações do modelo foram desenvolvidas a partir das equações gerais de balanço de massa e outras substâncias conservativas (GERNAEY *et al.*, 2004).

Os avanços na área computacional têm sido determinantes para a utilização destes modelos e têm contribuído para que a modelagem seja mais um elemento empregado para maior controle do processo.

Os vários usos para um modelo na área de tratamento de esgotos podem ser sumarizados da seguinte forma (GUIMARÃES, 1997; OLSSON; NEWELL, 1999):

- Os modelos expressam matematicamente ideias conceituais, para enfatizar os eventos de maior interesse que ocorrem no interior do sistema;
- Comparando a simulação do modelo com os dados obtidos empiricamente pode-se atentar para defeitos conceituais;
- A simulação do modelo pode fornecer informações valiosas, não aparentes nos estudos em plantas-piloto;
- A identificação de parâmetros que influenciam na eficiência do sistema fornece um guia para o estabelecimento de critérios de projeto, planejamento e gerenciamento a longo prazo;

- Permite estimar variáveis de processo que não são diretamente mensuráveis;
- O modelo auxilia na identificação de prováveis defeitos e mal funcionamentos, apontando suas causas;
- Permite testar a sensibilidade dos parâmetros do sistema;
- A modelagem leva à otimização operacional, como o planejamento de funcionamento e paralisação de ETEs;
- O modelo subsidia dados para a outorga para lançamento de efluentes em corpos hídricos;
- Os modelos possibilitam a exploração de características que no sistema real resultariam em operações custosas;
- A modelagem matemática explora novos conhecimentos e explica adequadamente os fenômenos significativos dentro do processo, melhorando a compreensão do sistema e otimizando o processo.

3.9.1 Activated Sludge Models (ASM)

O grupo de modelos ASM tem sido utilizado em diversos estudos que envolvem a remoção de compostos orgânicos e nutrientes em processos de tratamento de esgoto (GOKCAY; SIN, 2004). Os modelos são apresentados em forma de matriz, com o objetivo de facilitar o entendimento dos processos envolvidos.

Na matriz, as colunas contêm as variáveis de estado do modelo, chamadas de componentes e representam as substâncias contidas no sistema, tais como OD, DQO, NH_4^+ , etc. As componentes insolúveis são representadas pela letra X e as componentes solúveis, pela letra S.

Os processos químicos e biológicos envolvidos e suas equações de reação são apresentados nas linhas da matriz.

O primeiro modelo desenvolvido, ASM1, foi apresentado por Henze *et al.* (1987). Nele são apresentados 8 processos biológicos e 13 componentes, que descrevem a remoção da matéria carbonácea, nitrificação e desnitrificação.

O modelo ASM2 foi apresentado por Gujer *et al.* (1995) e incluiu a remoção química e biológica do fósforo. Este modelo possui 20 componentes e 19 processos. Em comparação ao modelo ASM1, o novo modelo passou a ter uma estrutura celular

interna, descrevendo a função dos organismos acumuladores de fósforo (OAF) e teve dois processos incluídos para descrever a precipitação química do nutriente com a utilização do hidróxido de ferro ($\text{Fe}(\text{OH})_3$).

O modelo ASM2d foi a evolução do anterior, proposta por Henze *et al.* (1999) e incluiu a capacidade desnitrificante de alguns OAF, mantendo o número de componentes, mas contando com mais dois processos, totalizando 21.

O modelo ASM3 surgiu após anos de utilização do ASM1, onde se tornou evidente alguns erros e defeitos deste. Logo, o ASM3, proposto por Gujer *et al.* (1999), complementou o ASM1 e supriu suas principais carências.

As matrizes cinéticas e estequiométricas do modelo ASM3 estão disponíveis no Anexo A, bem como as tabelas com os valores usuais propostos por Henze *et al.* (2000) para os parâmetros cinéticos. Vale ressaltar que para cada caso específico os valores usuais dos parâmetros cinéticos e estequiométricos podem mudar e cabe ao modelador adaptar à sua situação. Os valores destes parâmetros não são parte do ASM3, são apenas sugestões que podem ser utilizadas e testadas.

Dentre as modificações apresentadas no modelo ASM3 em comparação ao ASM1, as que se destacam são a descrição do decaimento bacteriano pelo processo da respiração endógena, que se assemelha ao fenômeno original observado e, a inclusão do armazenamento interno de material celular.

No ASM3 os processos de conversões dos microrganismos heterotróficos e autotróficos são tratados de maneira separada e para ambos os grupos o processo de decaimento é descrito de forma idêntica. No modelo novo assume-se que todo substrato facilmente biodegradável (S_s) é primeiro consumido e armazenado como um componente celular interno (X_{STO}) utilizado para o crescimento.

A Tabela 1 apresenta um resumo comparativo entre os modelos ASM.

Tabela 1: Comparativo entre os modelos ASM.

Modelo	ASM1	ASM2	ASM2d	ASM3
Nitrificação	X	X	X	X
Desnitrificação	X	X	X	X
Bio-P		X	X	
D-AoP			X	
Remoção química de P		X	X	
Processos	8	19	21	12
Variáveis ou componentes	13	20	20	13

Fontes: HENZE *et al.* 1987; GUJER *et al.* 1995; HENZE *et al.* 1999; GUJER *et al.* 1999.

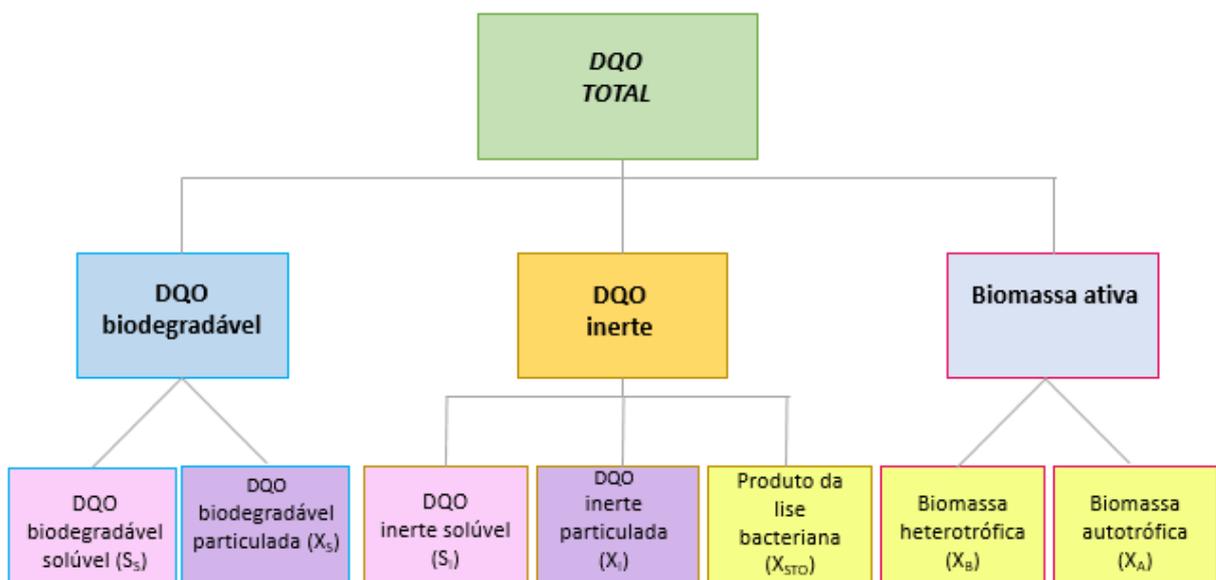
No modelo ASM3, a matéria orgânica (M.O.) é dividida em M.O. biodegradável, não biodegradável ou inerte e biomassa ativa.

A matéria orgânica inerte passa pelo sistema de tratamento sem mudanças em sua forma e é subdividida em solúvel (não sofre transformações, deixando o sistema na mesma concentração em que entrou) ou particulada (é envolvida pela biomassa, sendo removida junto com o lodo). Já a matéria orgânica biodegradável sofre alterações na sua passagem pelo sistema e podem ser subdivididas, de acordo com a sua facilidade de degradação em rapidamente biodegradável (S_s) - usualmente na forma solúvel e podem ser utilizadas diretamente pelas bactérias heterotróficas - ou lentamente biodegradável (X_s) - usualmente na forma particulada e não são utilizadas diretamente pelas bactérias, devendo sofrer o processo de hidrólise para transformar-se em S_s e ficar disponível à utilização das bactérias. A biomassa ativa se caracteriza nas bactérias autotróficas e heterotróficas vivas presentes no sistema (HENZE *et al.*, 1999).

Nota-se que a classificação da DQO se baseia não só sobre uma distinção física, mas, sobretudo, em um comportamento biológico diferente (VAN HAANDEL; MARAIS, 1999).

Um esquema das frações na DQO pode ser visualizado na Figura 4.

Figura 4: Fracionamento da DQO afluente nos modelo ASM.



O ASM3 tem sido muito utilizado na modelagem do tratamento de esgoto devido à sua facilidade de aplicação, calibração e por corrigir carências contidas no modelo ASM1. Desde que foi proposto, o ASM3 tem sido utilizado para obtenção de parâmetros de operação e projeto de ETEs, definição de estratégias de controle e otimização de processos (GERNAEY *et al.*, 2004).

A Tabela 2 apresenta as variáveis ou componentes do modelo ASM3.

Tabela 2: Componentes ou variáveis do modelo ASM3.

Sigla	Descrição	Formação	Remoção
S_{O2}	Concentração de oxigênio dissolvido no reator (mg·L ⁻¹).	-----	Crescimento aeróbio
S_I	Material orgânico solúvel inerte	Hidrólise de X _S	-----
X_I	Material orgânico particulado inerte	Decaimento	-----
S_S	Substrato prontamente biodegradável	Hidrólise de X _S	Crescimento de X _H
X_S	Substrato lentamente biodegradável	Decaimento de X _H e X _A	Hidrólise de S _S
X_H	Biomassa heterotrófica	Crescimento	Decaimento
X_A	Biomassa autotrófica – nitrificantes	Crescimento	Decaimento
X_{STO}	Produto de armazenamento celular interno de organismos heterotróficos.	Decaimento de X _H e X _A	Crescimento
S_{NOX}	Nitrogênio na forma de nitrito e nitrato	Nitrificação	Desnitrificação
S_{NH4}	Nitrogênio na forma NH ₄ ⁺ e NH ₃	Crescimento de X _H e X _A	Nitrificação
S_{N2}	Nitrogênio gasoso	Desnitrificação	-----
X_{SST}	Sólidos Suspensos Totais	-----	-----
S_{ALK}	Alcalinidade (molar)	Desnitrificação	Nitrificação

Fonte: GUJER *et al.* (1999).

3.9.1.1 Processos presentes no modelo ASM3

Diversos processos são incorporados ao modelo ASM3, sendo eles (Figura 5):

Figura 5: Processos do modelo ASM3.

Processos		
Hidrólise	Armazenamento aeróbio de S_s	Armazenamento anóxico de S_s
Crescimento aeróbio de heterotróficos	Crescimento anóxico de heterotróficos	Respiração endógena aeróbia de X_H
Respiração endógena anóxica de X_H	Respiração aeróbia de produtos de armazenamento	Respiração anóxica de produtos de armazenamento
Crescimento aeróbio de autotróficos	Respiração endógena aeróbia de X_A	Respiração endógena anóxica de X_A

A hidrólise é o processo que torna disponível todo substrato X_s contido no afluente. A hidrólise é considerada ativa independente do doador de elétrons. Esse processo é diferente do processo de hidrólise do ASM1, sendo menos dominante e importante para o cálculo das velocidades de consumo de oxigênio e desnitrificação.

O armazenamento aeróbio de substrato prontamente biodegradável é o processo que descreve o armazenamento de substrato prontamente biodegradável (S_s) em produtos internos de armazenamento da célula X_{sto} . A energia necessária no processo é adquirida através da respiração aeróbia. Nesse processo se assume que todo o substrato primeiramente vira produto de armazenamento e posteriormente é assimilado pela biomassa, embora isso não aconteça dessa forma.

O armazenamento anóxico de substrato prontamente biodegradável é idêntico ao armazenamento aeróbio, mas a desnitrificação fornece a energia necessária. Somente uma fração pequena de organismos heterotróficos X_H presente no lodo ativado é capaz de realizar a desnitrificação, e no ASM3 isso é considerado através da redução da velocidade de armazenamento anóxica em relação à aeróbia.

No processos de crescimento aeróbio de organismos heterotróficos o substrato para o crescimento dos organismos heterotróficos é considerado como sendo

somente produtos orgânicos de armazenamento X_{STO} , com isso o modelo ASM3 pode ser simplificado consideravelmente.

O crescimento anóxico de organismos heterotróficos é similar ao crescimento aeróbio, mas a respiração é baseada em desnitrificação. Entretanto, somente uma fração pequena de organismos heterotróficos X_H presente no lodo ativado é capaz de realizar a desnitrificação, e no ASM3 isso é considerado através da redução da velocidade de armazenamento anóxica em relação à aeróbia.

O processo de respiração endógena aeróbia descreve todas as formas de perda de biomassa e necessidade de energia não ligada ao crescimento por considerar respiração em condições aeróbias: queda, manutenção, respiração endógena, lise, predação, mobilidade, morte, entre outros. A queda (lise) introduzida no ASM1 é bem diferente do processo modelado no ASM3.

A respiração endógena anóxica é parecida com a aeróbia, mas um pouco mais lento. A predação por protozoários em condições anóxicas é menos ativa que em condições aeróbias.

O processo de respiração aeróbia de produtos de armazenamento é análogo ao processo de respiração endógena, e é garantido que os produtos de armazenamento X_{STO} decaem juntamente com a biomassa.

A respiração anóxica de produtos de armazenamento é similar à aeróbia, mas em condições de desnitrificação.

Os processos autotróficos integram o crescimento em condições aeróbias estritas e a respiração endógena em condições aeróbias e anóxicas.

Comparando com o ASM1, o ASM3 inclui uma descrição mais detalhada de produtos internos de armazenamento e permite melhor ajuste dos processos de queda de biomassa em condições ambientes. A importância da hidrólise foi reduzida, e a degradação de nitrogênio orgânico solúvel e particulado foi integrada nos processos de hidrólise, queda e crescimento (OSELAME *et al.*, 2014).

3.9.1.2 Estequiometria do modelo ASM3

A tabela 3 apresenta a matriz estequiométrica $v_{j,i}$ do modelo ASM3 em conjunto com a matriz de composição $i_{k,i}$, como proposto por Gujer; Larsen (1995). Relativamente à Tabela 3, a matriz de composição pode ser lida da seguinte forma: $i_{2,3}$ é preenchida com o símbolo $i_{N,SS}$ e indica que qualquer grama de DQO na forma de S_S contém $i_{N,SS}$ gramas de nitrogênio. O índice $k = 2$ diz respeito ao segundo conservador, o nitrogênio. O índice $i = 3$ diz respeito ao terceiro componente que é S_S . Este é medido em termos de g DQO e o conservador nitrogênio conservador é expresso em g N. Desta forma, $i_{N,SS}$ indica a composição de S_S em relação ao nitrogênio, daí $i_{k,i}$, ser chamada de matriz de composição.

Tabela 3: Matriz estequiométrica e de composição do modelo ASM3.

Componente $i \rightarrow$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
j Processo	S_{D_2}	S_1	S_5	S_{NH_4}	S_{N_2}	S_{NOX}	S_{ALK}	X_1	X_5	X_H	X_{STO}	X_A	X_{SS}
Expresso em \rightarrow	O ₂	COD	COD	N	N	N	Mole	COD	COD	COD	COD	COD	SS
1 Hidrólise		f_{S_1}	x_1	y_1			z_1		-1				$-i_{X_1}$
<i>Organismos heterotróficos</i>													
2 Armazenamento aeróbio de S_S	x_2		-1	y_2			z_2				Y_{STO,D_2}		t_2
3 Armazenamento anóxico de S_S			-1	y_3	$-x_3$	x_3	z_3				$Y_{STO,NOX}$		t_3
4 Crescimento aeróbio de X_H	x_4			y_4	$-x_5$	x_5	z_4		1		$-1/Y_{H,O_2}$		t_4
5 Crescimento anóxico				y_4	$-x_5$	x_5	z_5		1		$-1/Y_{H,NOX}$		t_5
6 Respiração endógena aeróbia	x_6			y_6			z_6	f_1		-1			t_6
7 Respiração endógena anóxica				y_7	$-x_7$	x_7	z_7	f_1		-1			t_7
8 Respiração aeróbia de X_{STO}	x_8										-1		t_8
9 Respiração anóxica de X_{STO}					$-x_9$	x_9	z_9				-1		t_9
<i>Organismos autotróficos</i>													
10 Crescimento aeróbio de X_A	x_{10}			y_{10}		$1/Y_A$	z_{10}					1	t_{10}
11 Respiração endógena aeróbia	x_{11}			y_{11}			z_{11}	f_1				-1	t_{11}
12 Respiração endógena anóxica				y_{12}	$-x_{12}$	x_{12}	z_{12}	f_1				-1	t_{12}
<i>Matrix de composição $i_{k,i}$</i>													
<i>k Conservativos</i>													
1 ThOD	g ThOD	-1	1	1		-1.71	-4.57		1	1	1	1	1
2 Azoto	g N		i_{N,S_1}	i_{N,S_5}	1	1	1		i_{N,X_1}	i_{N,X_5}	$i_{N,DM}$		$i_{N,DM}$
3 Carga iônica	Mole +				1/14		-1/14	-1					
<i>Observáveis</i>													
4 SS	g SS								i_{SS,X_1}	i_{SS,X_5}	$i_{SS,DM}$	0.60	$i_{SS,DM}$

Todos os elementos vazios de $v_{j,i}$ ou $i_{k,i}$, indicam valores nulos. Todos os valores de x_j , y_j e z_j podem ser obtido a partir da equação de conservação (Eq. 12) para os três conservadores k : ThOD (Demanda Teórica de Oxigênio), nitrogênio e carga iônica:

$$\sum_i v_{j,i} \cdot i_{k,i} = 0 \quad \text{para } i = 1 \text{ a } 12 \quad (\text{Eq. 12})$$

O coeficiente estequiométrico para S_{N_2} em qualquer processo de desnitrificação é o valor negativo do coeficiente para S_{NOX} . Os coeficientes de composição de ThOD para S_{N_2} ($-1,71 \text{ g de ThOD (g } N_2)^{-1}$) e para S_{NOX} ($-4,57 \text{ g de ThOD (g } NO_3^- \text{-N)}^{-1}$), bem como para S_{O_2} ($-1 \text{ g, ThOD (g } O_2)^{-1}$) são negativos para doadores de elétrons devido ao potencial redox de ThOD.

Os coeficientes estequiométricos para X_{SST} podem ser obtidos pela equação 13.

$$\sum_i v_{j,i} \cdot i_{4,i} = v_{j,13} \quad \text{para } i = 8 \text{ a } 12 \quad (\text{Eq. 13})$$

Sabe-se que a produção de energia bioquímica (ATP) na respiração anóxica é menor do que na respiração aeróbia. Isso conduz ao fato de que os coeficientes de rendimento aeróbio (Y_{STO,O_2} e Y_{H,O_2}) excedem os coeficientes de rendimento anóxicos ($Y_{STO,NOX}$ e $Y_{H,NOX}$). Assumindo o rendimento anóxico de energia como $\eta_{anóxico} = 0,70$ do rendimento energético aeróbio, a seguinte relação energética (Equação 14) pode ser aplicada:

$$\frac{1-Y_{STO,O_2}}{Y_{STO,O_2}} = \frac{\eta_{anóxico} \cdot (1-Y_{STO,NOX})}{Y_{STO,NOX}} \quad \text{e} \quad \frac{1-Y_{O_2}}{O_2} = \frac{\eta_{anóxico} \cdot (1-Y_{NOX})}{Y_{NOX}} \quad (\text{Eq. 14})$$

Sugere-se que a Equação 14 seja usada para relacionar rendimentos anóxicos e aeróbios no modelo ASM3.

O rendimento líquido verdadeiro, Y_{net} , da biomassa heterotrófica X_H produzido por unidade de substrato S_S removido em ASM3 é obtido pela equação 15:

$$Y_{net,O_2} = Y_{STO,O_2} \cdot Y_{H,O_2} \quad \text{e} \quad Y_{net,NOX} = Y_{STO,NOX} \cdot Y_{H,NOX} \quad (\text{Eq.15})$$

Todos os parâmetros estequiométricos são definidos juntamente com suas unidades e um valor típico na Tabela 4.

Na matriz de composição $i_{k,i}$ da Tabela 3, a composição de todas as frações orgânicas relativas a ThOD são assumidas como a unidade, considerando que, na realidade, a análise de DQO recupera apenas uma fração de THOD, tipicamente 95% em efluentes domésticos.

Tabela 4: Valores típicos dos coeficientes estequiométricos do modelo ASM3 (Adaptado de Henze *et al.*, 2000).

Símbolo	Descrição	Valor usual	Unidade
f_{Si}	Produção de material orgânico solúvel inerte (S_i) na hidrólise.	0	Massa DQO S_i / massa DQO S_s
Y_{STO,O_2}	Rendimento aeróbio do produto armazenado por S_s .	0,85	Massa DQO X_{STO} / massa DQO S_s
$Y_{STO,NOX}$	Rendimento anóxico do produto armazenado por S_s .	0,80	Massa DQO X_{STO} / massa DQO S_s
Y_{H,O_2}	Rendimento aeróbio da biomassa heterotrófica	0,63	Massa DQO X_H / massa DQO X_{STO}
$Y_{H,NOX}$	Rendimento anóxico da biomassa heterotrófica	0,54	Massa DQO X_H / massa DQO X_{STO}
Y_A	Rendimento da biomassa autotrófica	0,24	Massa DQO X_A / massa N S_{NOX}
f_{Xi}	Produção de material orgânico particulado inerte (X_i) na respiração endógena.	0,20	Massa DQO X_i / massa DQO X_{BM} .
i_{N,S_i}	Nitrogênio contido em S_i .	0,01	Massa N/ massa DQO S_i .
i_{N,S_s}	Nitrogênio contido em S_s .	0,03	Massa N/ massa DQO S_s .
i_{N,X_i}	Nitrogênio contido em X_i .	0,02	Massa N/ massa DQO X_i .
i_{N,X_s}	Nitrogênio contido em X_s .	0,04	Massa N/ massa DQO X_s .
$i_{N,BM}$	Nitrogênio contido nas biomassas heterotrófica e autotrófica.	0,07	Massa N/ massa DQO X_{BM} .
i_{SS,X_i}	Nitrogênio contido em S_i .	0,01	Massa N/ massa DQO S_i .
i_{SS,X_i}	Taxa de DQO de substrato prontamente biodegradável (S_s) no material orgânico particulado inerte (X_i)	0,75	Massa S_s / massa DQO X_i
i_{SS,X_s}	Taxa de DQO de substrato prontamente biodegradável (S_s) no substrato lentamente biodegradável (X_s)	0,75	Massa S_s / massa DQO X_s
$i_{SS,BM}$	Taxa de DQO de substrato prontamente biodegradável (S_s) na biomassa heterotrófica e autotrófica	0,90	Massa S_s / massa DQO X_{BM}

3.9.1.3 Cinética do modelo ASM3

As expressões cinéticas do ASM3 são baseadas em funções de comutação (termos hiperbólicos ou de saturação, equações de Monod, $S / (K + S)$) para todos compostos solúveis consumidos. Esta forma de expressão cinética é escolhida não por causa de evidência experimental, mas sim por conveniência matemática: estas funções de comutação param toda a atividade biológica, como guias, quando as concentrações do processo se aproximam de zero, o que caracteriza uma importante diferença entre ASM1 e ASM3. Similarmente, as funções de comutação relacionam-se com a proporção de X_{STO} / X_H resp. X_S / X_H . A inibição é modelada com $1 - S / (K + S) = K / (K + S)$.

A Tabela 5 é um resumo de todas as expressões cinéticas do modelo ASM3. Os parâmetros cinéticos são definidos na Tabela 6, juntamente com suas unidades e um valor típico a 20°C. É importante ressaltar que esses valores são apenas sugestões, não sendo parte do modelo ASM3.

Tabela 5: Matriz cinética do modelo ASM3

<i>f</i> Processo	Equação da taxa de processo ρ_f , $\rho_f \geq 0$.
1 Hidrólise	$k_{H1} \cdot \frac{X_S / X_{H1}}{K_X + X_S / X_H} \cdot X_{H1}$
<i>Organismos heterotróficos</i>	
2 Armazenamento aeróbio de S_S	$k_{STO} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \cdot X_H$
3 Armazenamento anóxico de S_S	$k_{STO} \cdot \eta_{NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \cdot X_H$
4 Crescimento aeróbio	$\mu_H \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{K_{ALK} + S_{ALK}} \cdot \frac{X_{STO} / X_H}{K_{STO} + X_{STO} / X_H} \cdot X_H$
5 Crescimento anóxico	$\mu_H \cdot \eta_{NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{K_{ALK} + S_{ALK}} \cdot \frac{X_{STO} / X_H}{K_{STO} + X_{STO} / X_H} \cdot X_H$
6 Respiração endógena aeróbia	$b_{H,O_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot X_H$
7 Respiração endógena anóxica	$b_{H,NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot X_H$
8 Respiração aeróbia de X_{STO}	$b_{STO,O_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot X_{STO}$
9 Respiração anóxica de X_{STO}	$b_{STO,NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot X_{STO}$
<i>Organismos autotróficos</i>	
10 Crescimento aeróbio de X_A	$\mu_A \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{A,O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{A,NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{K_{A,ALK} + S_{ALK}} \cdot X_A$
11 Respiração endógena aeróbia	$b_{A,O_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{A,O_2} + S_{O_2}} \cdot X_A$
12 Respiração endógena anóxica	$b_{A,NOX} \cdot \frac{K_{A,O_2}}{K_{A,O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{A,NOX} + S_{NOX}} \cdot X_A$

Tabela 6 – Valores usuais dos parâmetros cinéticos, relativos a um efluente primário, para aplicação do modelo ASM3, a 20° C (Adaptado de Henze *et al.*, 2000).

Símbolo	Descrição	Valor usual	Unidade
μ_H	Máxima taxa de crescimento específico da biomassa heterotrófica	2,0	dia ⁻¹
b_{H,O_2}	Taxa de respiração endógena aeróbia da biomassa heterotrófica	0,2	dia ⁻¹
$b_{H,NOX}$	Taxa de respiração endógena anóxica da biomassa heterotrófica	0,1	dia ⁻¹
b_{STO,O_2}	Taxa de respiração aeróbia para X_{STO} .	0,2	dia ⁻¹
$b_{STO,NOX}$	Taxa de respiração anóxica para X_{STO} .	0,1	dia ⁻¹
k_{STO}	Constante de velocidade de armazenamento	5,0	dia ⁻¹
K_{O_2}	Coeficiente de saturação de oxigênio para organismos heterotróficos	0,2	Massa O ₂ / Volume
K_{NO}	Coeficiente de saturação /inibição de nitrato para heterotróficos	0,5	Massa N / Volume
K_S	Coeficiente de saturação para substrato prontamente biodegradável	2,0	Massa DQO / Volume
K_{STO}	Coeficiente de saturação para produto de armazenamento celular interno de organismos heterotróficos (X_{STO}).	1,0	Massa DQO armazenada / DQO celular
K_{NH_4}	Coeficiente de saturação da amônia para organismos autotróficos	0,01	Massa N/Volume
K_{ALK}	Coeficiente de saturação para alcalinidade da biomassa heterotrófica	0,1	Mol HCO ₃ ⁻ / Volume
K_h	Taxa específica de hidrólise	3,0	dia ⁻¹
K_x	Coeficiente de saturação para hidrólise	1,0	Massa Xs / DQO celular
η_{NOX}	Fator de correção sob condições anóxicas	0,6	Adimensional
μ_A	Máxima taxa de crescimento específico da biomassa autotrófica	1,0	dia ⁻¹
K_{A, NH_4}	Taxa específica de amonificação	1,0	Massa N / Volume
K_{A,O_2}	Coeficiente de saturação de Oxigênio para organismos autotróficos.	0,5	Massa O ₂ /Volume
$K_{A,ALK}$	Coeficiente de saturação para alcalinidade da biomassa autotrófica.	0,5	Mol HCO ₃ ⁻ / Volume
b_{A,O_2}	Taxa de respiração endógena aeróbica da biomassa autotrófica	0,15	dia ⁻¹
$b_{A,NOX}$	Taxa de respiração endógena anóxica da biomassa autotrófica	0,05	dia ⁻¹

3.9.1.4 Considerações, restrições e limitações do modelo ASM3

Segundo Henze *et al.* (2000), os modelos ASM3 e ASM1 foram desenvolvidos para a simulação para o tratamento aeróbio e anóxico de esgoto doméstico em sistemas de lodos ativados, portanto, não podem ser utilizados para simular efluentes industriais.

Ainda, o ASM3 foi desenvolvido em temperaturas de 8-23°C, fora desse intervalo o modelo pode não satisfazer as necessidades de simulação do usuário. O ASM3, assim como o ASM1 não descreve o comportamento da biomassa em condições anaeróbias. Em reatores com frações grandes de anaerobiose podem levar a grandes erros.

O desenvolvimento do ASM3 aconteceu com experiências de pH entre 6,5 e 7,5, e a alcalinidade deve ser predominantemente devido ao bicarbonato.

O ASM3 também não apresenta bons resultados com elevadas concentrações de nitrato.

Os modelos ASM3 e ASM1 não lidam com idades de lodo muito altas, nem abaixo de 1 dia, onde a floculação e adsorção de X_s e acumulação se tornam limitantes.

3.10 SIMULAÇÃO, CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DE MODELOS MATEMÁTICOS PARA REATORES BIOLÓGICOS

Segundo Kelton *et al.* (2002), a simulação computacional refere-se a uma ampla coleção de métodos e aplicações para imitar o comportamento do sistema real por meio de um computador, com um software apropriado. Atualmente é uma das ferramentas mais adotadas no auxílio à tomada de decisão em processos produtivos e para análise da estrutura de sistemas através da modelagem.

Alguns softwares de modelagem e simulação de comportamento dinâmico de processos biológicos para tratamento de efluentes já implementam os modelos ASM em sua estrutura e estão sendo cada vez mais utilizados no apoio à operação, gestão e controle de ETEs. Os de mais fácil acesso encontrados para esta pesquisa foram o EMSO, o Aquasim e o ASIM. Este último foi o escolhido para a simulação neste trabalho.

O software ASIM (Activated Sludge Simulation Program) permite a simulação de uma variedade de sistemas de tratamento de efluentes, principalmente, processos de lodos ativados com sistemas de até 10 reatores dispostos em série (aeróbios, anóxicos e anaeróbios), incluindo a recirculação de lodos e da fase líquida.

O programa permite a simulação dinâmica da variação de cargas (diurna ou sazonal), a variação de temperatura e dos parâmetros operacionais, tais como aeração, recirculação e remoção do lodo em excesso.

Uma das particularidades do ASIM é permitir ao simulador definir, armazenar e editar os modelos biocinéticos e os diferentes parâmetros e componentes utilizados para caracterizar as águas residuais e os processos de transformação relevantes em termos de estequiometria e cinética. O programa inclui os modelos ASM1 (adaptado) ASM2d e ASM3.

Foi desenvolvido pela EAWAG – Aquatic Search and Swiss Federal Institute of Aquatic Science and Technology. A empresa Hilinger AG é a distribuidora da versão comercial. Mais informações em <<http://www.asim.eawag.ch/>> (ASIM SOFTWARE, 2016).

Após a inserção dos dados no software e a realização da simulação, é possível que as curvas modeladas para as variáveis de saída do reator não sejam compatíveis com os dados reais de monitoramento, uma vez que o modelo foi proposto em condições que, geralmente, não são idênticas às circunstâncias de operação do reator

a ser modelado. Quando isso acontece é necessário realizar ajustes em alguns parâmetros cinéticos do modelo utilizado, o que é chamado de calibração.

Logo, a calibração do modelo é entendida como a estimativa dos parâmetros do modelo para um determinado conjunto de dados obtidos da ETE em estudo. Quando o modelo é usado para avaliação e otimização do desempenho do processo, pode ser necessário ter uma precisão mais exata dos processos em estudo e, portanto, a coleta de dados e a calibração do modelo são necessárias (PETERSEN, 2000).

Dois tipos de calibração podem ser distinguidas: a abordagem matemática, que se baseia puramente na otimização matemática; e a abordagem da engenharia de processo, que se baseia na compreensão do processo e da estrutura do modelo, que foi a realizada neste trabalho.

Na calibração pela abordagem de engenharia de processo, os parâmetros do modelo são ajustados um a um, principalmente com base na experiência e na compreensão do processo pelo modelador, até que o ajuste seja razoavelmente bom com os dados disponíveis da ETE. O resultado não é um conjunto único de parâmetros, mas um conjunto de parâmetros que resulta em previsões aceitáveis das concentrações do efluente e da produção de lodo. Um modelo matemático é, então, validado quando as curvas com as concentrações de saída do efluente geradas pelo modelo são semelhantes aos dados de monitoramento do sistema. Somado a isso, as curvas devem ser iguais estatisticamente (ZANOTELLI, 2002).

Na literatura podem ser encontrados uma infinidade de trabalhos que tratam da calibração e validação do modelo ASM3, em diversas condições de operação. No entanto, em todos os trabalhos encontrados utilizando o ASM3 para modelar reatores com compartimento MBBR, mostrou-se necessário que, além da calibração, fossem criadas extensões ao modelo para que pudesse ser validado. Além disso, não foram encontrados trabalhos com reatores compartimentados utilizando o ASM3.

Por exemplo, Koch *et al.* (2000) calibraram o modelo ASM3 para estações de tratamento de águas residuárias operando com reatores em batelada utilizando efluente suíço, considerado diluído. Na calibração foram alterados e validados diversos parâmetros cinéticos e estequiométricos, dentre eles a taxa de crescimento de organismos heterotróficos aeróbio de $2,0 \text{ d}^{-1}$ para $3,0 \text{ d}^{-1}$; a taxa de crescimento de organismos autotróficos de $1,0 \text{ d}^{-1}$ para $1,3 \text{ d}^{-1}$ e a taxa de hidrólise de $3,0 \text{ d}^{-1}$ para $9,0 \text{ d}^{-1}$.

Já nos estudos de Ferrai *et al.* (2010) foi utilizada uma versão adaptada e estendida do modelo ASM3 (SIN *et al.*, 2005) que prevê a difusão do transporte de massa, para modelar um reator MBBR compartimentado anóxico e aeróbio tratando esgoto doméstico. Após os ajustes de calibração encontraram os valores médios de $0,5 \text{ d}^{-1}$ para μ_H e de $2,3 \text{ mg DQO} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{mg DQO}^{-1}$ para K_{STO} .

A calibração de um modelo deve ser feita baseando-se em resultados obtidos com o sistema e com as simulações do modelo, portanto, o ponto de partida para a calibração é geralmente o conjunto de parâmetros padrão fornecido pelo modelo.

Para calibrar o modelo ASM3 com dados experimentais, somente alguns parâmetros devem ser alterados e, segundo Henze *et al.* (2000), todas as mudanças precisam seguir os seguintes princípios:

a) Se os experimentos utilizados para calibração não são sensíveis para as variações de certo parâmetro, então o parâmetro não deve ser alterado. Quaisquer alterações poderiam distorcer o modelo;

b) Somente um parâmetro pode ser alterado por vez, caso os parâmetros interajam entre si, somente o que tenha maior influência deve ser alterado. Para a calibração de crescimento e queda, somente a velocidade de crescimento deve ser alterada;

c) Devido à alta interatividade de alguns parâmetros é difícil saber qual tem que ser alterado. Nesse caso, as condições experimentais devem ser de tal maneira que o parâmetro de interesse tenha a resposta dominante.

Algumas vezes, mesmo após os ajustes de calibração necessários, não é possível adequar o modelo e realizar previsões de comportamento da remoção de matéria orgânica em alguns tipos de reatores como o SBR (KRISHNA; VAN LOOSDRECHT, 1999) e o MBBR. Existem várias propostas de extensões do ASM3 (MOUSSA *et al.*, 2005; IACOPOZZI *et al.*, 2007; SIN *et al.*, 2008; KAELIN *et al.*, 2009; ZHOU *et al.*, 2013), no intuito de melhor caracterizar o processo de nitrificação e desnitrificação, descrevendo-os como um processo em dois estágios, ou mesmo prevendo com mais detalhes o crescimento e armazenamento da biomassa. Estas extensões tornam o ASM3 mais complexo do que o modelo original, no entanto, adequando-se o modelo a cada sistema em questão, possibilitam-se melhor caracterização e controle dos processos em ETEs.

Brockmann *et al.* (2013) desenvolveram um modelo para reatores MBBR onde os processos de conversão bioquímica foram modelados usando o ASM3, mas o

armazenamento de substrato facilmente biodegradável não foi incluído, conforme sugerido por Boltz *et al.* (2011). A análise após simulação computacional do modelo mostrou que uma boa caracterização de águas residuárias em relação ao substrato orgânico é importante para modelar reatores de biofilme nitrificantes, para assim poderem representar adequadamente as concentrações de sólidos no efluente e na biomassa. No entanto, para a calibração dinâmica, abordou-se que a evolução da biomassa do biofilme no tempo ainda não pôde ser descrita como exatamente acontece, o que revela ainda grandes dificuldades na modelagem de reatores com biofilme.

Ferrai *et al.* (2010) utilizaram uma versão adaptada e estendida do modelo ASM3 (SIN *et al.*, 2005) que prevê a difusão do transporte de massa, para modelar um reator MBBR compartimentado anóxico e aeróbio tratando esgoto doméstico. Após os ajustes de calibração encontraram os valores médios de $0,5 \text{ d}^{-1}$ para μ_H e de $2,3 \text{ mg DQO} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{mg DQO}^{-1}$ para K_{STO} .

Barry *et al.* (2017) criaram um modelo para reatores MBBR que foi validado para algumas previsões, mas que mostrou necessitar ajustes para as equações que descrevem o processo de fixação da DQO particulada ao biofilme.

Gao *et al.* (2017) realizaram modificações no modelo ASM3 para adequá-lo a um sistema cíclico de lodos ativados (CAS) utilizando duas principais extensões: o processo simultâneo de armazenamento e crescimento e a biocinética de polímeros microbianos. Após a calibração do modelo modificado, denominado M-ASM3, houve sua validação e concluiu-se que ele se tornou mais preciso do que o ASM3 original. Dentre as diversas variáveis criadas e modificadas, o M-ASM3 chegou ao resultado de $0,88 \text{ d}^{-1}$ para μ_A . A constante μ_H não foi alterada.

Moya *et al.* (2012) desenvolveram um modelo matemático para um reator compartimentado anaeróbio-aeróbio-anóxico para tratar efluente de piscicultura. O objetivo era promover a remoção de matéria orgânica no primeiro compartimento do reator, nitrificação no segundo e desnitrificação no terceiro, um escopo bem próximo ao reator estudado nesta pesquisa, porém, não havia biofilme móvel no compartimento aeróbio. Da mesma forma, Plascencia-Jatomea *et al.* (2015) criaram um modelo para um reator integrado com fases anaeróbia-aeróbia-anóxica, mas sem a presença de biofilme móvel.

Wu *et al.* (2016) fizeram adaptações ao modelo ASM3 para utilizar em uma planta de tratamento de esgoto de indústria de refrigerante. Dentre outros parâmetros

modificados, após a calibração encontraram-se os valores de μ_H igual a 14 d^{-1} e μ_A entre $0,87$ e $0,99 \text{ d}^{-1}$.

Koch *et al.* (2000) realizaram experimentos em batelada e em reatores de lodos ativados em escala real com esgoto municipal suíço, considerado diluído, para calibrar e validar o modelo ASM3 naquelas condições. Entre outras calibrações para as variáveis de processo, encontraram os valores de $3,0 \text{ d}^{-1}$ para μ_H e $0,9$ a $2,0 \text{ d}^{-1}$ para μ_A .

4 METODOLOGIA

O presente trabalho realizou a simulação computacional e modelagem matemática, através do modelo ASM3, de reator compartimentado em escala piloto, com fase anaeróbia/anóxica e aeróbia e recirculação da fase líquida.

4.1 CARACTERÍSTICAS DO REATOR MODELADO

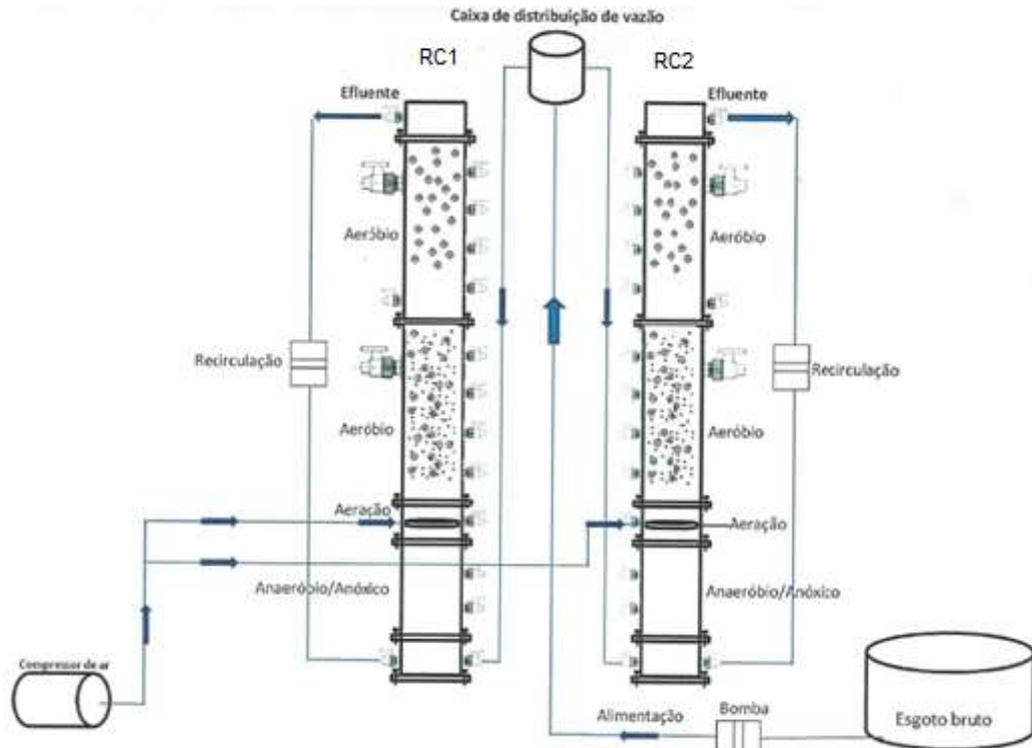
Os reatores compartimentados anaeróbio/anóxico e aeróbio foram operados no período de agosto de 2013 a fevereiro de 2015, na Estação de Tratamento de Esgotos da Mangueira - ETE Mangueira, situada em Recife – PE (MORAIS, 2015). Tal pesquisa foi parte integrante da Rede Nacional de Tratamento de Esgotos Descentralizado (RENTED) - Edital MCT/MCIDADES/FINEP/Ação Transversal SANEAMENTO AMBIENTAL E HABITAÇÃO - 6/2010.

Foram operados dois reatores verticais compartimentados, construídos em tubo PVC tipo comercial com diâmetro de 0,40m, altura útil de 3,10 m e volume total de 390 litros (Figuras 6 e 7). Os reatores tinham configuração idêntica, funcionaram em paralelo e atuaram como réplicas com diferentes condições operacionais.

O leito de cada reator foi dividido em dois compartimentos separados por placas de aço inox perfuradas. O primeiro compartimento era anaeróbio/anóxico, com altura de 0,70m e volume de 90L, para a remoção de matéria orgânica. O segundo compartimento aeróbio, que operou como reator MBBR, media 2,20m de altura e volume de 300L. Este compartimento recebeu meios suportes móveis com razão de recheio de 0,55 e teve a finalidade de promover a nitrificação. O efluente nitrificado foi recirculado para o compartimento anóxico a fim de promover a desnitrificação, utilizando o próprio esgoto bruto como doador de elétrons.

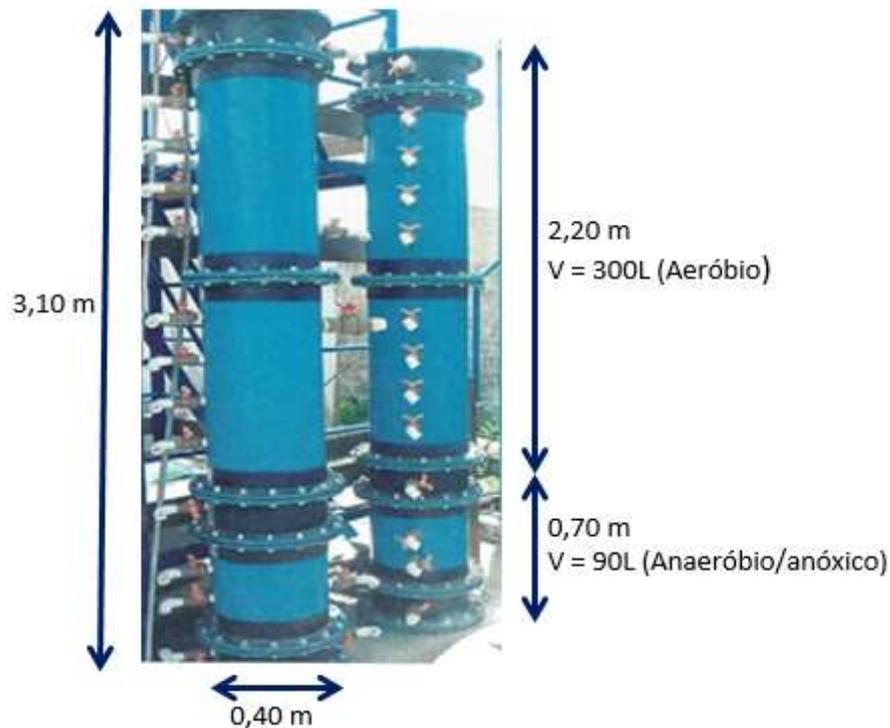
Os reatores compartimentados foram alimentados com esgoto doméstico após tratamento preliminar.

Figura 6: Esquema de operação dos reatores compartimentados anaeróbio/anóxico e aeróbio.



Fonte: (MORAIS, 2015).

Figura 7: Reatores compartimentados anaeróbio/anóxico e aeróbio utilizados na pesquisa.



Fonte: Adaptado de MORAIS (2015).

Os parâmetros físico-químicos analisados nos esgotos bruto e tratado, segundo metodologia do Standard Methods (APHA, 2005), foram: temperatura, pH, potencial redox, oxigênio dissolvido (OD), DQO total, DQO filtrada, alcalinidade total e bicarbonato, sólidos, NTK, nitrogênio amoniacal, nitrito e nitrato.

O experimento foi dividido em quatro fases. Na Fase 1, os reatores compartimentados foram operados com tempo de detenção hidráulica (TDH) de 12 horas, sem recirculação. Nas Fases 2, 3 e 4, os reatores compartimentados operaram com TDH de 12h, 10h e 8h, respectivamente, sendo aplicada uma taxa de recirculação de 1,5 para o reator compartimentado 1 (RC1) e de 3,0 para o reator compartimentado 2 (RC2), conforme resumo apresentado na Tabela 7.

Tabela 7: Resumo das condições operacionais em cada fase da pesquisa.

Fase	RC1	RC2
1	TDH = 12h; r = 0.	TDH = 12h; r = 0.
2	TDH = 12h; r = 1,5.	TDH = 12h; r = 3,0.
3	TDH = 10h; r = 1,5	TDH = 10h; r = 3,0.
4	TDH = 8h; r = 1,5	TDH = 8h; r = 3,0.

4.2 PARÂMETROS DE ENTRADA DO MODELO ASM3

Em ambos reatores, a Fase 2 foi a que apresentou melhores eficiências de remoção, tanto para matéria carbonácea quanto para matéria nitrogenada, sendo que no RC1, os resultados foram ainda melhores do que no RC2. Para o RC1, na fase 2, a eficiência média de remoção de DQO foi de $52 \pm 15\%$ para DQO bruta e, eficiência de remoção média de N-NTK de 60%. Para o RC2, na fase 2, a eficiência média de remoção de DQO foi de 51 ± 15 para DQO bruta e eficiência de remoção média de N-NTK de 57% (MORAIS, 2015).

Logo, por ter apresentado as melhores eficiências de remoção, selecionou-se a fase 2 do RC1 para a simulação computacional, modelagem matemática e comparação com os dados de monitoramento.

Na Fase 2, com duração de 158 dias, os reatores operaram com tempo de detenção hidráulica (TDH) de 12 horas, sendo 2,8 horas no compartimento anaeróbio e 9,2 horas no compartimento aeróbio. No RC1 foi aplicada taxa de recirculação de 1,5 e, nestas condições, o reator operou com vazão de 32,5 L/h e velocidade ascensional do líquido de 0,64 m/h.

A escolha da aplicação do ASM3 ocorreu uma vez que, mesmo sendo um modelo tão difundido no meio científico, não foram encontrados trabalhos utilizando-o para as condições de operação dos reatores desta pesquisa. Dessa forma, pretendeu-se contribuir para o conhecimento dos resultados obtidos com a aplicação do ASM3 em reatores compartimentados anaeróbio/anóxico e aeróbio com biofilme móvel.

O modelo ASM3 utiliza 13 variáveis. Os valores de cinco delas foram obtidos através das análises diretas; os valores das outras oito variáveis a serem utilizadas no modelo, foram extraídas de cálculos e dados da literatura e equações do balanço de massa, conforme discriminadas na Tabela 8.

Tabela 8: Método de obtenção das variáveis utilizadas no modelo ASM3.

Sigla	Descrição	Obtenção
S_{O2}	Concentração de oxigênio dissolvido	Análise direta.
S_I	Material orgânico solúvel inerte	Literatura
X_I	Material orgânico particulado inerte	Literatura
S_S	Substrato prontamente biodegradável	Literatura
X_S	Substrato lentamente biodegradável	Literatura
X_H	Biomassa heterotrófica	Literatura
X_A	Biomassa autotrófica – organismos nitrificantes	Literatura
X_{STO}	Produto de armazenamento celular interno de organismos heterotróficos.	Literatura
S_{NOX}	Nitrogênio na forma de nitrito e nitrato	Análise direta.
S_{NH4}	Nitrogênio na forma NH ₄ ⁺ e NH ₃	Análise direta.
S_{N2}	Nitrogênio gasoso	Balanço de massa.
X_{SST}	Sólidos Suspensos Totais	Análise direta.
S_{ALK}	Alcalinidade (molar)	Análise direta.

Para a determinação dos valores de cada fração da DQO, da biomassa e do produto de armazenamento celular utilizou-se como referência aqueles citados por Koch *et al.* (2000). A Tabela 9 especifica os valores de referência das frações supracitadas.

Tabela 9: Valores de referência das frações da DQO total para o modelo ASM3.

Fração	S _i	S _s	X _i	X _s	X _H	X _A	X _{STO}	Total
%	6%	10%	20%	55%	9%	0%	0	100%

Fonte: (Koch *et al*, 2000).

Para a obtenção dos valores para nitrogênio gasoso (S_{N2}), foi realizado o balanço de massa dos compostos nitrogenados presentes no afluente.

Ainda, para o efluente tratado, os dados coletados foram DQO Total, não tendo sido realizadas as análises para o fracionamento da DQO. No entanto, o software gera os gráficos em cada fração da DQO separadamente. Sendo assim, para fazer a comparação das concentrações de saída da DQO, foram somados os valores de cada fração da DQO efluente gerada pelo simulador.

4.3 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Os dados coletados e adquiridos foram utilizados para a simulação do sistema no software ASIM, com a utilização do modelo ASM3.

O software ASIM, que pode ser baixado gratuitamente em sua versão acadêmica em <www.asim.eawag.ch>, simula uma estação de tratamento de águas residuárias com capacidade de nitrificação (ASIM SOFTWARE, 2016). Em sua biblioteca existem vários tipos de tanques e é possível montar uma planta muito próxima ao reator real. Além disso, o modelo ASM3 já está registrado na memória do programa, com todos os parâmetros cinéticos e estequiométricos, o que facilita sua utilização. Vale ressaltar que estes parâmetros já inclusos em sua biblioteca são passíveis de alteração, caso seja necessário realizar ajustes de calibração.

É possível que o usuário informe volume do reator, idade do lodo, vazão afluente, temperatura de operação, condições operacionais, bem como os valores das variáveis do modelo para simular a operação do reator de forma mais completa possível e muito próxima à situação real e/ou ideal. É importante ressaltar que os dados inseridos no programa são do esgoto afluente e, através da aplicação do modelo, os resultados gerados são aqueles esperados na saída do reator.

Algumas telas do software estão demonstradas nas Figuras 8 a 10, de forma a familiarizar o leitor com o funcionamento do simulador.

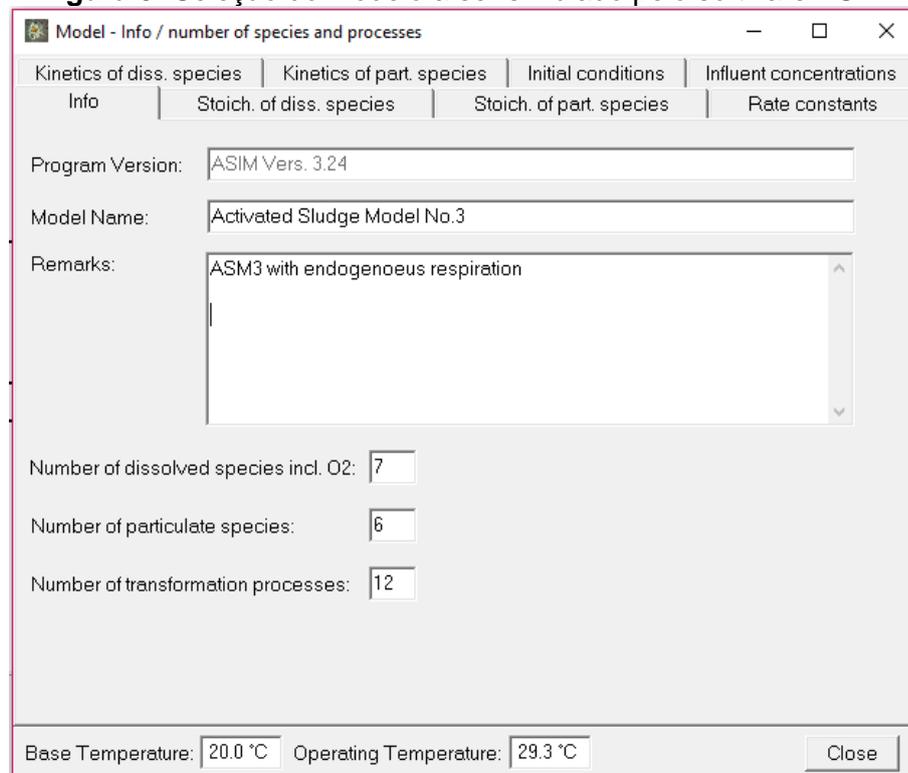
Ao inicializar o software é necessário criar um projeto novo e escolher o modelo que será utilizado na simulação.

Foram simuladas duas condições do modelo ASM3, uma de cada vez, ambas constantes na biblioteca do software ASIM. Inicialmente realizou-se a simulação com o modelo ASM3 chamado de original, onde os valores das constantes cinéticas são aqueles indicados por Henze *et al.* (2000). Também realizou-se a simulação com o modelo chamado ASM3 de Koch, o qual possui algumas constantes alteradas com relação ao ASM3 original, adequando-o ao esgoto doméstico suíço, considerado diluído e com características muito próximas ao esgoto doméstico brasileiro.

Após a escolha do modelo utilizado, define-se a hidráulica do reator, neste caso, fluxo contínuo.

O próximo passo é a inserção de dados de entrada como número de reatores, vazão afluente, idade do lodo, entre outros. As próximas abas do programa são para colocar os dados de volume dos compartimentos e as características do esgoto afluente, levando em consideração as 13 variáveis do modelo ASM3 (Figura 9).

Figura 8: Seleção do modelo a ser simulado pelo software ASIM.



The screenshot shows a window titled "Model - Info / number of species and processes" with a standard Windows-style title bar (minimize, maximize, close). The window contains several tabs: "Kinetics of diss. species", "Kinetics of part. species", "Initial conditions", and "Influent concentrations". The "Info" tab is selected, showing sub-tabs for "Stoich. of diss. species", "Stoich. of part. species", and "Rate constants". The main area contains the following fields:

- Program Version: ASIM Vers. 3.24
- Model Name: Activated Sludge Model No.3
- Remarks: ASM3 with endogenous respiration
- Number of dissolved species incl. O2: 7
- Number of particulate species: 6
- Number of transformation processes: 12
- Base Temperature: 20.0 °C
- Operating Temperature: 29.3 °C

A "Close" button is located at the bottom right of the window.

Figura 9: Quadro para inserção dos dados do reator e do afluente.

Flowscheme:

Definition | Reactors and secondary clarifiers | Initial conditions | Influent concentrations | State of plant

Number of reactors: Number of secondary clarifier compartments:

1. influent flowrate: directed to reactor Nr.:

2. influent flowrate: directed to reactor Nr.:

Return sludge flowrate: directed to reactor Nr.:

1. internal recirculation flowrate: taken from reactor Nr.:
directed to reactor Nr.:

2. internal recirculation flowrate: taken from reactor Nr.:
directed to reactor Nr.:

Sludge age (SRT) (>0.500)

Saturation concentration for oxygen: Operating temperature:

Com os dados lançados, o software gera uma planta, como exemplificado pela Figura 10.

Figura 10: Representação do sistema de tratamento modelado gerado pelo software ASIM.



Após a normalização e o lançamento dos dados sazonais do afluente realizou-se as simulações, que geram gráficos com a modelagem do comportamento esperado, ao passo de saída de 0,11h a cada ponto simulado, para cada variável e processo.

4.4 EXPORTAÇÃO DOS DADOS E TESTE DE HIPÓTESES

O software ASIM não permite a inserção de novos dados em um gráfico gerado. Logo, para que pudessem ser comparados os dados modelados com os dados reais de monitoramento do efluente, as informações gráficas foram exportadas para o software de planilha eletrônica Excel. Em seguida, estes dados foram inseridos no programa Origin, bem como os dados reais das análises realizadas no efluente do sistema. Desta forma, foi possível visualizar e comparar se as duas curvas geradas (curva modelada e curva com dados reais do sistema) estavam próximas.

Além disso, aplicou-se o teste t de Student, a fim de comparar os dados de monitoramento e os dados modelados, ao nível de 95% de probabilidade, com o intuito de conhecer se as curvas real e modelada, para cada parâmetro, eram iguais estatisticamente. A utilização deste teste foi indicada por Sokal; Rohlf, (1995) para validação estatística e testes biológicos.

O teste t Student, ou simplesmente teste t, é o método mais utilizado para se avaliar as diferenças entre as médias entre dois grupos. Ele averigua se a média da amostra é diferente de um valor de referência ou da média da população testando as hipóteses:

- H0: a média da amostra é igual à média da referência (ou população).
H1: a média da amostra é diferente à média da referência (ou população).

Para o teste de hipóteses inicialmente deve-se estabelecer o nível de significância a ser utilizado. Em seguida, calcula-se o desvio padrão existente entre os dois grupos, através da equação 16:

$$sd = \sqrt{\frac{\sum di^2 - [(\sum di)^2 / n]}{n-1}} \quad (\text{eq. 16})$$

Sendo que:

di= diferença entre o valor da concentração observada e o valor simulado.

n= número de amostras

Logo após, calcula-se a média das diferenças das concentrações (md), através da equação 17 e, em seguida, o valor da variável t , através da equação 18:

$$md = \sum di / n \quad \text{Eq. 17}$$

$$t = \frac{md}{sd \cdot \sqrt{n}} \quad \text{Eq. 18}$$

Em seguida, com o auxílio da tabela estatística t realiza-se a comparação do valor do t calculado com o t tabelado, na coluna do nível de significância desejado. Caso o t calculado seja menor (em módulo) do que o valor tabelado, a hipótese H_0 é aceita. Caso contrário, rejeita-se a hipótese de igualdade estatística entre os valores e, torna-se necessário realizar ajustes de calibração nos parâmetros cinéticos do modelo, na tentativa de validá-lo para o sistema em questão.

4.5 AJUSTES DE CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DO MODELO

Através do teste estatístico t , caso às simulações não alcancem valores estatisticamente iguais aos valores das concentrações analisadas do efluente, é necessário realizar ajustes de calibração, de forma a tentar adequar o modelo ao reator em questão.

A calibração deve ser feita manualmente a partir dos dados iniciais e dos dados de operação do reator, através do método indicado por Henze *et al.* (2000). Os parâmetros de ajuste são estimados pela comparação das taxas medidas e previstas.

A calibração é realizada de maneira lógica com um processo iterativo, alterando apenas algumas das diversas constantes de cada vez, visto que a modificação de alguns parâmetros pode alterar também outras variáveis. Isto posto, é notório que a calibração deve ser feita com o entendimento dos processos envolvidos, caso contrário, essa demandaria muito tempo e poderia levar a extrapolações improváveis.

Após a alteração dos valores de cada constante cinética, é necessário executar novamente o programa para a simulação com os novos valores e, então, confrontar com os dados reais, como feito anteriormente, para verificar a possibilidade de ter sido validado o modelo.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após as simulações no software ASIM com o uso do modelo ASM3 original e de Koch, obtiveram-se os resultados para cada variável do modelo e, após a inserção no programa Origin, os resultados simulados foram comparados com os dados reais do efluente tratado coletado na saída do reator. No entanto, as curvas simuladas e reais não foram estatisticamente iguais em nenhum dos parâmetros, nem utilizando-se o modelo ASM3 original, tampouco utilizando-se o ASM3 de Koch.

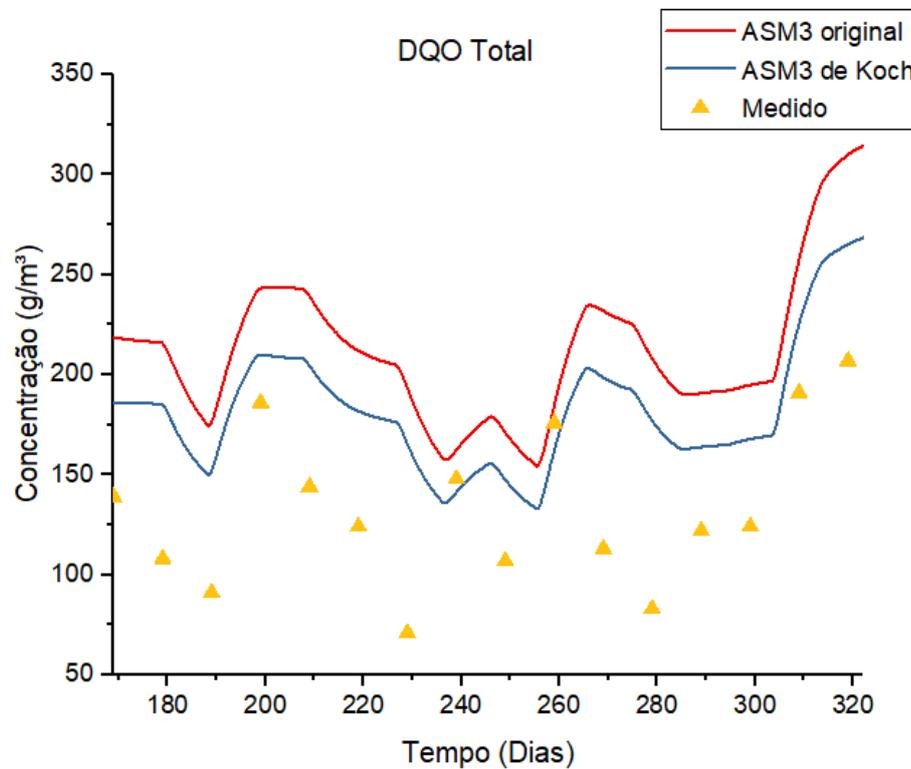
5.1 DQO TOTAL

A DQO Total é uma medida extremamente importante, uma vez que é o parâmetro utilizado para representar a matéria orgânica no sistema.

Ao analisar a Figura 11 observa-se que as concentrações medidas estão abaixo da curva das concentrações simuladas, tanto pelo modelo ASM3 original, quanto pelo ASM3 de Koch. No entanto, no modelo ASM3 de Koch, nota-se que a curva está mais próxima dos dados reais, do que a curva simulada pelo ASM3 original.

Ao aplicar o teste t, ao nível de 95% de probabilidade, rejeitou-se a hipótese de que as simulações propostas, tanto pelo ASM3 original quanto pelo de Koch, fossem adequadas à situação real, para este parâmetro, tendo-se obtido valores de $t = -8,586$ e $t = -6,28$, respectivamente. O valor tabelado de t para 15 graus de liberdade com significância igual a 0,05 é de $\pm 1,753$.

Figura 11: DQO Total efluente medida e simulada com os modelos ASM3 original e de Koch.



Pelo comportamento apresentado na Figura 11, é notório que a matéria orgânica afluente é oxidada mais rapidamente do que o proposto pelo ASM3, tanto na condição original, quanto com as constantes de Koch. Acredita-se que isso tenha ocorrido pela temperatura tropical em que o reator compartimentado operou, que torna a atividade de microrganismos mais intensa e aumenta a velocidade de oxidação da matéria orgânica, o que, conseqüentemente, diminui a DQO.

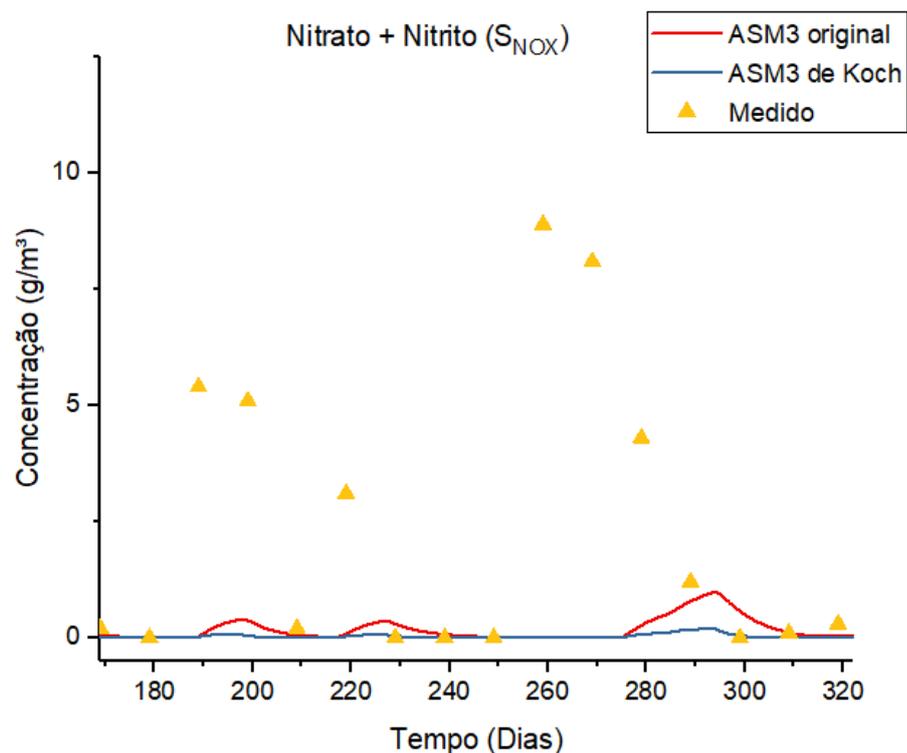
O modelo foi proposto para atuar sem restrições de 8 - 23°C (o reator em questão operou com temperatura média de 29,3°C) e mesmo com correções de coeficientes de temperatura realizadas pelo próprio simulador, não foi possível representar as condições verdadeiras do local.

5.2 NITRATO+NITRITO

A Figura 12 mostra que as curvas das concentrações simuladas para Nitrogênio em forma de Nitrato e Nitrito (S_{NOX}) divergem muito dos dados de monitoramento do efluente, tanto para a simulação com o modelo ASM3 original quanto para o ASM3 de Koch, tendo apresentado valores de $t = 2,708$ e $t = 2,545$. O valor tabelado de t para 15 graus de liberdade com significância igual a 0,05 é de $\pm 1,753$.

As curvas simuladas apresentaram concentrações geralmente próximas de zero, o que não condiz com o observado no sistema real. Certamente, o modelo considera em sua estrutura a ocorrência da desnitrificação total, mas isso não foi observado no sistema real, uma vez que em alguns pontos observaram-se concentrações relativamente altas de nitrato+nitrito no efluente final.

Figura 12: S_{NOX} efluente medido e simulado com os modelos ASM3 original e de Koch.

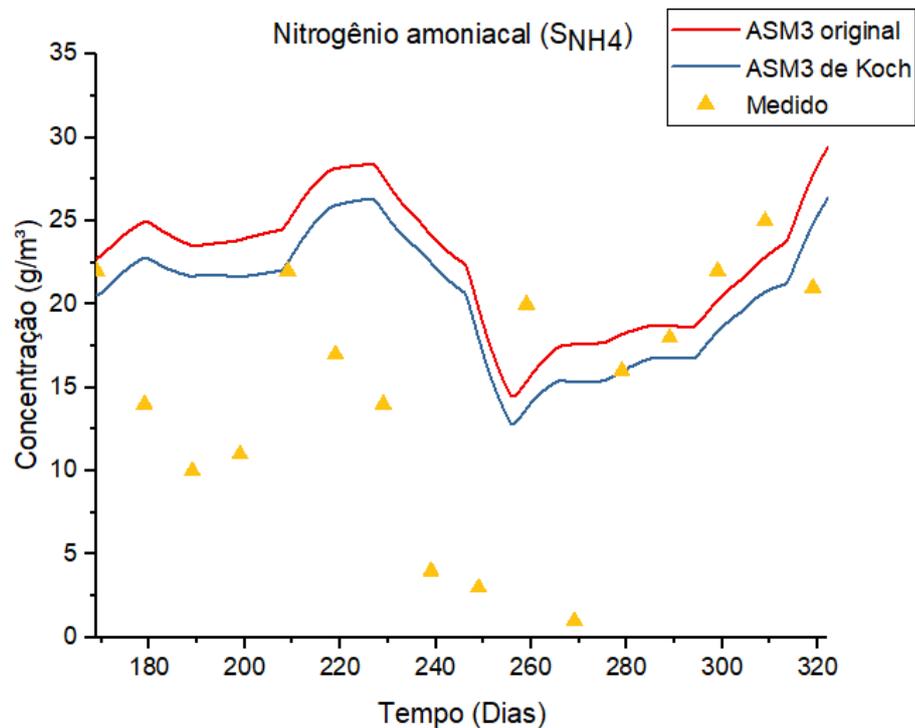


5.3 NITROGÊNIO AMONIAICAL

Na Figura 13 estão dispostas as simulações e dados de monitoramento para a variável Nitrogênio amoniacal. Nota-se que a maioria dos pontos analisados está abaixo das curvas simuladas com os modelos ASM3 original e ASM3 de Koch.

Ao aplicar o test t, ao nível de 95% de probabilidade, rejeitou-se a hipótese de que as simulações propostas fossem adequadas à situação real, também para o Nitrogênio amoniacal, tendo apresentado o valor calculado de $t = -3,803$ para a simulação com ASM3 original e de $t = -2,808$ para a simulação com o modelo ASM3 de Koch.

Figura 13: SNH_4 efluente medido e simulado com os modelos ASM3 original e de Koch.



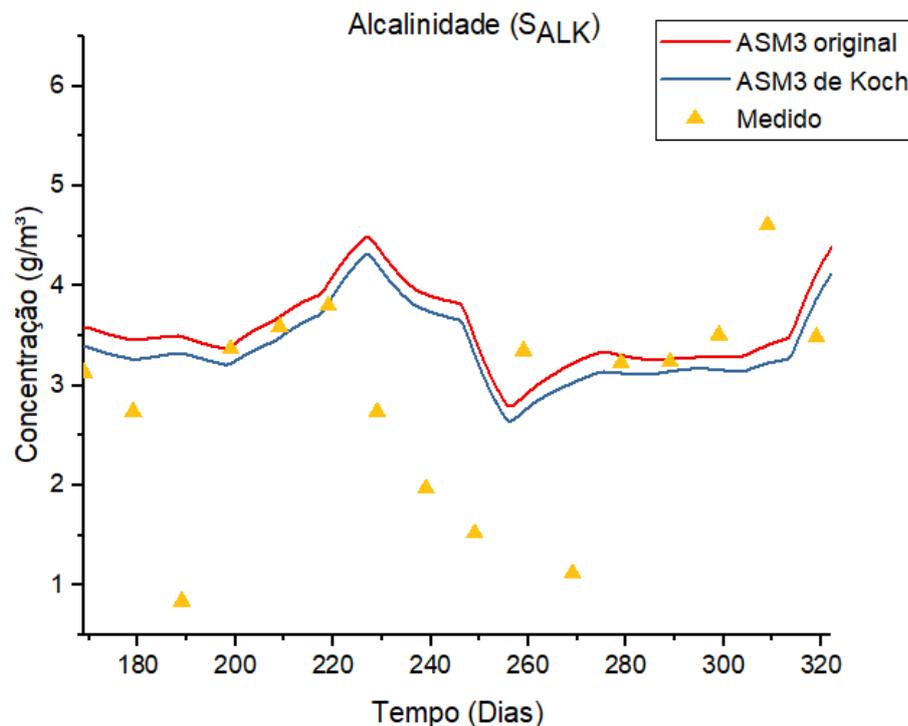
5.4 ALCALINIDADE TOTAL

O gráfico da variável alcalinidade total (Figura 14) mostra que as curvas das concentrações simuladas, tanto pelo modelo ASM3 original, quanto pelo ASM3 de Koch, estão próximas aos pontos de monitoramento do efluente final do reator, sendo que estes apresentam alguns pontos divergentes, ou seja, fora do que era esperado.

O consumo de alcalinidade é proveniente, principalmente, da nitrificação. Logo, nas situações em que os pontos de monitoramento apresentaram valores abaixo da curva esperada, é entendido que o sistema real nitrificou, mas não realizou a desnitrificação na proporção adequada para a estabilidade da alcalinidade, o que deixa clara uma desarmonia na cinética do modelo com a cinética real do reator.

Aplicando-se o teste t a 95% de probabilidade, a hipótese de que a simulação proposta pelo modelo para a variável alcalinidade fosse adequada à situação real foi rejeitada para os modelos ASM3 original e de Koch, com valores de t calculado de -2,481 e -1,777, respectivamente.

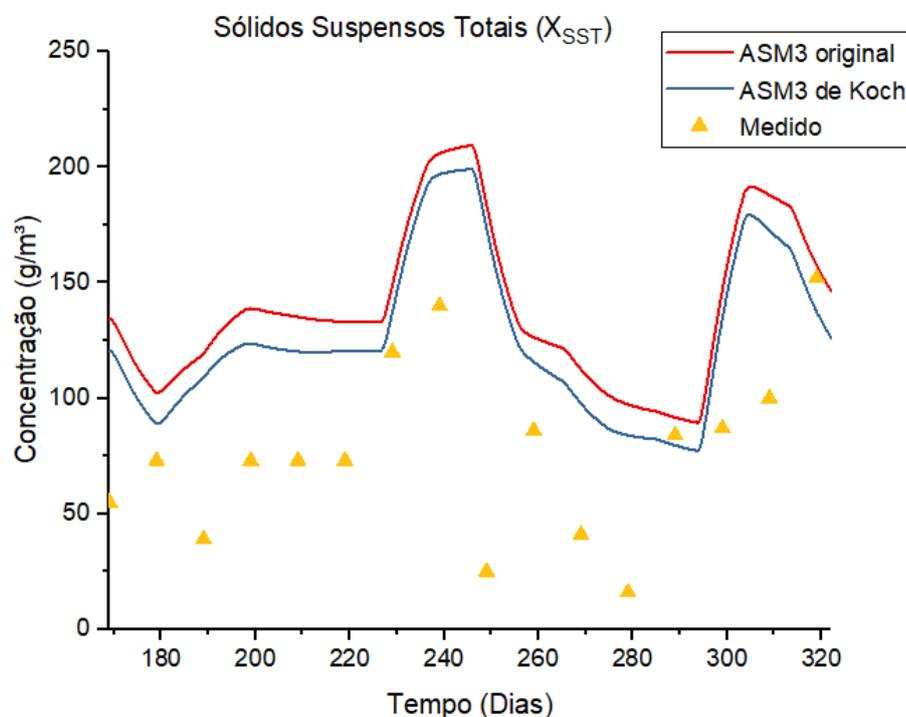
Figura 14: SAlk efluente medida e simuladas com os modelos ASM3 original e de Koch.



5.5 SÓLIDOS SUSPENSOS TOTAIS

Com a análise dos gráficos de X_{SST} (Figura 15), observa-se que os pontos analisados do efluente real apresentaram concentrações abaixo das curvas das concentrações simuladas, o que indicaria desempenho melhor do que o esperado pelo modelo no decaimento da concentração de sólidos. Isto pode ter acontecido, devido a uma alta retenção de sólidos no interior do reator, justificada pela falta de inoculação inicial.

Figura 15: X_{SST} efluente medida e simuladas com os modelos ASM3 original e de Koch.



A divergência entre os pontos medidos e as curvas simuladas, corroborada pelo teste t, revelou que os modelos ASM3 original e ASM3 de Koch não são representativos para este parâmetro.

Portanto, o modelo ASM3 com seus parâmetros cinéticos padrão, bem como com os parâmetros cinéticos propostos por Koch e colaboradores não puderam ser validados para o reator compartimentado anaeróbio/anóxico e aeróbio em estudo. A simulação de nenhuma das variáveis correspondeu aos dados de monitoramento. Sendo assim, foi necessário realizar a calibração de alguns parâmetros, tanto iniciando com os parâmetros cinéticos do ASM3 original, quanto iniciando pelos

parâmetros propostos por Koch, na tentativa de validar o modelo ASM3 para o reator em questão.

5.6 PARÂMETROS CALIBRADOS E VALIDAÇÃO DO MODELO

Para realizar os ajustes de calibração dos parâmetros cinéticos do modelo ASM3, inicialmente foram utilizados os valores padrão do ASM3 original.

As tentativas de calibração tiveram início pela alteração da velocidade de crescimento heterotrófico anóxico ($\mu_{\text{Hanóx}}$). Isto porque, segundo Henze *et al.* (2000), recomenda-se sempre iniciar as calibrações pelas velocidades. Ainda, por ser o compartimento anaeróbio/anóxico o que tinha por função principal a remoção da M.O., iniciou-se então a calibração por essa velocidade.

No ASM3 original, $\mu_{\text{Hanóx}}$ tem valor de $1,2 \text{ d}^{-1}$. Como a temperatura média de operação do reator foi superior ao intervalo previsto pelo modelo, optou-se por se elevar consideravelmente o valor de $\mu_{\text{Hanóx}}$ para $2,0 \text{ d}^{-1}$, a fim de observar a forma como um aumento brusco impactaria nas simulações. No entanto, após simular desta forma, não se observou nenhum tipo de alteração relevante. Então, sem seguida, optou-se por baixar drasticamente o valor de $\mu_{\text{Hanóx}}$ para $0,5 \text{ d}^{-1}$, com o intuito de verificar se uma redução considerável traria modificações nas simulações. No entanto, também não se observou alterações significativas nas simulações, tanto para a DQO total, quanto para as variáveis nitrogenadas.

Ficou claro que a alteração do parâmetro $\mu_{\text{Hanóx}}$ não traria a redução das concentrações nas curvas, para que fossem compatíveis estatisticamente com a curva da DQO total medida no efluente final do reator. Dessa forma, priorizou-se realizar alterações nos valores da velocidade de crescimento heterotrófico aeróbio (μ_{H}) para observar as modificações que causariam nas curvas simuladas. É importante ressaltar que sempre se realiza uma iteração por vez de forma a observar a influência de cada parâmetro sobre cada variável a ser calibrada.

O valor padrão de μ_{H} no ASM3 original é de $2,0 \text{ d}^{-1}$. Desta forma, a primeira tentativa de calibração foi elevando-se este valor para $3,0 \text{ d}^{-1}$. Observou-se após as novas simulações que a curva simulada para a DQO total abaixou, mas ainda ficou longe de ser validada, obtendo-se um valor calculado de $t = -8,728$.

Em seguida, realizaram-se tentativas de aumentar o valor de μ_H para $4,0 \text{ d}^{-1}$, $4,5 \text{ d}^{-1}$ e $5,0 \text{ d}^{-1}$, tendo-se alcançado o melhor resultado com a simulação de $4,0 \text{ d}^{-1}$, no entanto, ainda longe de se realizar a validação do modelo, obtendo-se nesta situação o valor calculado de $t = -7,892$.

A tentativa seguinte foi de manter o em $4,0 \text{ d}^{-1}$ e alterar o armazenamento aeróbio de S_S (K_{STO}) de $5,0 \text{ mg DQO} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{mg DQO}^{-1}$ (valor padrão) para $7,0 \text{ mg DQO} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{mg DQO}^{-1}$. No entanto, como não foram observadas alterações significativas, realizou-se nova simulação baixando o valor de K_{STO} para $3,0 \text{ mg DQO} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{mg DQO}^{-1}$. Nesta simulação pôde-se observar um aumento da fração S_S da DQO, o que é um efeito indesejado no reator e na simulação. Sendo assim, decidiu-se por manter o valor de K_{STO} no valor padrão e partir para a modificação de outros parâmetros.

Mas, mesmo com a modificação de diversos outros parâmetros, um por vez, não se chegou a uma simulação que gerasse curvas compatíveis estatisticamente com a curva dos dados de monitoramento do efluente do reator.

Sendo assim, fez-se a tentativa de iniciar a calibração baseando-se nos valores propostos por Koch *et al.* (2000). Neste, o valor padrão de μ_H é de $3,0 \text{ d}^{-1}$. Realizaram-se tentativas tanto baixando quanto elevando este valor, mas que não apresentaram os cenários esperados. Também foram realizadas tentativas elevando e baixando, um de cada vez, os valores de μ_{Hanox} , K_{STO} e velocidade de crescimento de organismos autotróficos (μ_A), mas em nenhuma das tentativas gerou curvas iguais estatisticamente aos dados do reator em estudo, tanto para a DQO, quanto para as variáveis nitrogenadas e alcalinidade.

É importante ressaltar novamente que o software ASIM utiliza valores de cada fração da DQO para realizar as simulações e que, como apenas análises da DQO total foram realizadas no trabalho de Moraes (2015), foi necessário usar valores da literatura para estipular cada fração. Sendo assim, para efeito de comparação com os valores das concentrações presentes no efluente coletado na saída do reator, as curvas simuladas de cada fração da DQO foram somadas para que se chegasse a uma estimativa da DQO total simulada. Isso, certamente, dificultou a modelagem da DQO total, visto que quando se tem o conhecimento do comportamento da curva de cada fração da DQO, torna-se mais visível qual parâmetro precisa ser alterado para a calibração e, assim, calibrando-se individualmente cada fração, a soma das curvas para obtenção do comportamento da DQO total surge corretamente. Porém, não se pode afirmar que tenha sido este o único motivo para a não validação do modelo.

Ainda, ficou claro que em todas as tentativas de calibração as curvas de X_{SST} jamais chegaram próximas à curva dos dados de monitoramento do sistema e, isto pode ser justificado por dois fatores:

- a) o segundo compartimento do reator estudado é MBBR, o que não é levado em conta pelo modelo, que o considera apenas como um reator de lodos ativados;
- b) a falta de inoculação inicial do reator.

Sendo assim, era de se esperar que o reator estivesse retendo mais sólidos do que o modelo propôs. Estes, provavelmente, ficavam aderidos aos meios suporte móveis presentes no reator formando a biomassa ativa, o que foi acentuado pela falta de inoculação prévia.

Neste trabalho, ficou clara a dificuldade na modelagem de reatores com biofilme, dificuldade esta que foi acrescida pela configuração compartimentada com diferentes processos em cada seção. Não foram encontrados trabalhos na literatura de autores que tivessem utilizado o modelo ASM3 sem extensões para modelar reatores com as mesmas características do sistema aqui estudado, o que ressalta a importância desta pesquisa.

6 CONCLUSÕES

Este trabalho realizou a simulação computacional dos dados de monitoramento do reator compartimentado anaeróbio/anóxico e aeróbio da ETE Mangueira.

Através de processos iterativos foram realizadas diversas modificações nos valores dos parâmetros cinéticos padrão indicados por Henze *et al.* (2000) e Koch *et al.* (2000) para tentativa de calibração do modelo ASM3 ao reator em estudo, mas, com nível de significância de 0,05, não se obteve a validação do modelo.

Acredita-se que as maiores dificuldades para validação do modelo ASM3 ao reator tenham sido que o mesmo não prevê a existência de um compartimento MBBR. Sendo assim, a forma de operação do reator não se adequa ao modelo, que, mesmo sendo um modelo de lodos ativados, não é capaz de descrever o funcionamento da biomassa em suspensão e retida no reator, o que altera, de fato, os resultados esperados para as simulações de todas as variáveis. Por isso, pressupõe-se que, com a inserção de extensões ao modelo ASM3 que prevejam e assumam o comportamento da biomassa no compartimento MBBR, este possa ser validado para reatores compartimentados com biomassa em aderida e em suspensão, como o desta pesquisa.

REFERÊNCIAS

ABBASI, T; ABASSI, S. A. **Formation and impact of granules in fostering clean energy production and wastewater treatment in upflow anaerobic sludge blanket (UASB) reactors.** *Renew Sustain Energy*, v. 16, p.1696–1708, 2012.

AKABOCI, T. R. V. **Tratamento de esgoto sanitário em reator em bateladas sequenciais com grânulos aeróbios:** desempenho do processo e modelagem matemática. Dissertação de mestrado apresentada ao programa de pós graduação em engenharia ambiental. UFSC, 2013.

ANTONELLA, L; VIOTTI, P; MANCINI, G; TORRETTA, V. **An integrated wastewater treatment system using a BAS reactor with biomass attached to tubular supports.** *Journal Environmental Management*, v.113, p. 51–60, 2012.

ASIM SOFTWARE. Disponível em: <<http://www.asim.eawag.ch/>>. Acesso em: 03 de janeiro de 2016.

APHA - AMERICAN PUBLIC HEALTH ASSOCIATION. **Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater.** 21 ed., Washington – DC, 2005.

BARRY, U; CHOUBERT, J; CANLER, J; PÉTRIMAU, O; HÉDUIT, A; LESSARD, P. **A one dimensional moving bed biofilm reactor model for nitrification of municipal wastewaters.** *Bioprocess Biosystem Engineering*, v. 40, p.1141–1149, 2017.

BASSIN, J. P; DEZOTTI, M; SANT'ANNA JR., G. L. **Nitrification of industrial and domestic saline wastewaters in moving bed biofilm reactor and sequencing batch reactor.** *Journal of Hazardous Materials*, v.185. p.242-248, 2011.

BATSTONE, D. J; KELLER, J; ANGELIDAKI, I; KALYUZHNYI, S; PAVLOSTATHIS, S.G; ROZZI, A; SANDERS, W; SIEGRIST, H; VAVILIN, V. **Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1).** London: IWA Publishing, p.77, 2002.

BERNET, N; SÁNCHEZ, O; CESBRON, D; STEYER, J.P; DELGENÈS, J.P. **Modeling and control of nitrite accumulation in a nitrifying biofilm reactor.** *Biochemical Engineering Journal*, v.24, p.173–183, 2005.

BERNET, N; SPÉRANDIO, M. **Principles of nitrifying processes.** In: CERVANTES (editor), F.J. *Environmental Technologies to Treat Nitrogen Pollution: Principles and Engineering.* London: IWA Publishing, p. 23-39, 2009.

BOLTZ, J. P; MORGENROTH, E; BROCKMANN, D; BOTT, C; GELLNER, W. J; VANROLLEGHEM, P. A. **Systematic evaluation of biofilm models for engineering practice:** componentes and critical assumptions. *Water Science and Technology*, v. 64, p. 930-944, 2011.

BROCKMANN, D; BOLTZ, J. P; MORGENROTH, E; DAIGGER, G. T; HENZE, M; RITTMANN, B; SORENSEN, K. H; TAKA´CS, I; VANROLLENGHEM, P. A; VAN LOOSDRECHT, M. **Applying a framework for calibrating a biofilm-reactor**

model: a full-scale moving-bed biofilm reactor active in nitrification. In: 9th International Conference on Biofilm Reactors. IWA Publishing LU, Editor: Issy-Ls-Moulineaux France, 38-31 st May 8p. 2013.

BUNTNER, D; SÁNCHEZ, A; GARRIDO, J.M. **Feasibility of combined UASB and MBR system in dairy wastewater treatment at ambient temperatures.** Chem. Engineering Journal, v.230, p.475–481, 2013.

CATINO, F. C. R. Revista TAE. **Avaliação do desempenho de um sistema piloto de MBBR tratando esgoto doméstico.** 2013. Disponível em: <<http://www.revistatae.com.br/noticialnt.asp?id=6387>>. Acesso em: 28 de setembro de 2015.

CHAN, Y.J., CHONG, M.F., LAW, C.L., HASSEL, D.G. **A review on anaerobic–aerobic treatment of industrial and municipal wastewater.** Chem. Engineering Journal, v.155, p. 1–18, 2009.

CHERNICHARO, C. A. L. **Pós-tratamento de efluentes de reatores anaeróbios.** PROSAB. Belo Horizonte, 2001.

CHERNICHARO, C. A. L. **Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias.** V.5. Reatores Anaeróbios. Belo Horizonte: Segrac, 1997.

CHIU, Y.C; CHUNG, M.S. **Determination of optimal COD/nitrate ratio for biological denitrification.** International Biodeterioration & Biodegradation, v. 51, p. 43-49, 2003.

CHRISTOFOLETTI, A. **Modelagem de sistemas ambientais.** Edgard Blucher, São Paulo. 2004.

CHUNG, J; BAE, W; LEE, Y.W; RITTMANN, B.E. **Shortcut biological nitrogen removal in hybrid biofilm/suspended growth reactors.** Process Biochem. v. 42, p. 320–328, 2007.

COST – European Cooperation in Science and Technology. Disponível em: <<http://www.cost.eu/>>. Acesso em: 15 de julho de 2017.

CUERVO LÓPEZ, F; HERNÁNDEZ, S. M; TEXIER, A. C; GÓMEZ, J. **Principles of denitrifying processes.** In: CERVANTES (editor), F.J. Environmental Technologies to Treat Nitrogen Pollution: Principles and Engineering. London: IWA Publishing, 2009.

FERRAI, M; GUGLIELMI, G; ANDREOTTOLA, G. **Modelling respirometric tests for the assessment of kinetic and stoichiometric parameters on MBBR biofilm for municipal wastewater treatment.** Environmental Modeling & Software, v. 25, p.626-632, 2010.

FU, Z; YANG, F; ZHOU, F; XUE, Y. **Control of COD/N ratio for nutrient removal in a modified membrane bioreactor (MBR) treating high strength wastewater.** Bioresource Technology, v.100, p.136-141, 2009.

FUJII, F.Y. **Análise comparativa entre o processo de lodo ativado e o reator de biofilme de leito móvel na remoção de nitrogênio de esgoto sanitário.**

Dissertação apresentada à EPUSP, São Paulo, 2011.

GAO, F; NAN, J; ZHANG, X. **Simulating a cyclic activated sludge system by employing a modified ASM3 model for wastewater treatment.** *Bioprocess Biosystem Engineering*, v. 40, p.877–890, 2017.

GERARDI, M. H. **Wastewater microbiology: nitrification and denitrification in the activated sludge process.** 1. ed. New York: John Wiley and Sons, 2002.

GERNAEY, K.V; VAN LOOSDRECHT, M.C.M; HENZE, M; LIND, M; JØRGENSEN S.B. **Activated sludge wastewater treatment plant modelling and simulation: state of the art.** *Environmental Modeling & Software*, v. 19, p. 763-783, 2004.

GOKCAY, C. F; SIN, G. **Modelling of a large-scale Wastewater treatment plant for efficient operation.** *Water Science and Technology*, v. 50, p. 123-130, 2004.

GORDILLO, M. A. **Estratègies d'operació em "fed-batch": aplicació a la producció de lípases per Candida**, Tese de Doutorado apresentada a Universitat Autònoma de Barcelona, Espanha, 1996.

GUIMARÃES, T. L. V. **Estudo e modelagem de um sistema anaeróbio de tratamento de esgoto. Desenvolvimento da instrumentação aplicada a uma planta piloto.** Dissertação de mestrado apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais, 1997.

GUJER, W; HENZE, M; MINO, T; MATSUO, T; WENTZEL, M. C; MARAIS, G. R. **The Activated Sludge Model N° 2: Biological phosphorus removal.** *Water Science and Technology*, v. 31, p. 1-11, 1995.

GUJER, W; HENZE, M; MINO, T; VAN LOOSDRECHT, M. C. M. **Activated Sludge Model N°3.** *Water Science and Technology*, v. 39, p.183-193, 1999.

GUJER, W; LARSEN, T. A. **The implementation of biokinetics and conservation principles in ASIM.** *Water Science Technology*, v.31, p. 257–266, 1995.

HE, SB; XUE, G; WANG, B. Z. **Factors affecting simultaneous and denitrification (SND) and its kinetics model in membrane bioreactor.** *Journal of Hazardous Materials*, v. 168, p. 704-710, 2009.

HENZE, M; GRADY, C. P. L; GUJER, W; MARAIS, G. V. R; MATSUO, T. **Activated Sludge Model No. 1.** IAWQ Scientific and Technical Report No. 1, London, UK, 1987.

HENZE, M; GUJER, W; MINO, T; VAN LOOSDRECHT, M. **Activated sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d e ASM3.** London: IWA Publishing, 2000.

HENZE, M; GUJER, W; MINO, T; MATSUO, T; WENTZEL, M. C; MARAIS, G. R; VAN LOOSDRECHT, M. C. M. **Activated Sludge Model N^o2D**. Water Science and Technology, v. 39, p. 165-182, 1999.

IACOPOZZI, I; INNOCENTI, V; MARSILI-LIBELLI, S; AND GIUSTI, E. **A modified activated sludge model no. 3 (ASM3) with two-step nitrification-denitrification**. Environmental Modell. Software, v. 22, p. 847–861, 2007.

JORDÃO, E. P.; PESSÔA, C. A. **Tratamento de Esgotos Domésticos**. 5 ed. Rio de Janeiro: ABES, 2009.

KAELIN, D; MANSER, R; RIEGER, L; EUGSTER, J; ROTTERMANN, K; SIEGRIST, H. **Extension of ASM3 for two-step nitrification and denitrification and its calibration and validation with batch tests and pilot scale data**. Water Research, v. 43, p. 1680–1692, 2009.

KAMPSCHREUR, M. J; TEMMINK, H; KLEEREBEZEM, R; JETTEN, M. S; VAN LOOSDRECHT, M. C. M. **Nitrous oxide emission during wastewater treatment**. Water Research, v. 43, p. 4093- 4103, 2009.

KATO, M. T; FLORÊNCIO, L; ARANTES, R. F. M. **Tratamento de Esgotos Sanitários em reatores tipo EGSB anaeróbio e aeróbio**. In: PROSAB. Coletânea de trabalhos técnicos, Belo Horizonte. v. 2, p.165-174, 2001.

KELTON, W. D; SADOWSKI, R. P; SADOWSKI, D. A. **Simulation with Arena**. 2. ed., New York: McGraw-Hill, 2002.

KOCH, G; KUHNI, M; GUJER, W; SIEGRIST, H. **Calibration and validation of activated sludge model n^o3 for swiss municipal wastewater**. Water Research, v. 34, p.3580-3590, 2000.

KRISHNA, C; VAN LOOSDRECHT, M. **Substrate flux into storage and growth in relation to activated sludge modelling**. Water Research, v.33, p. 3149–3161, 1999.

LI, J; PENG, Y; GU, G; WEI, S. **Factors affecting simultaneous nitrification and denitrification in an SBBR treating domestic wastewater**. Frontiers of Environmental Science & Engineering in China, v. 1, p. 246-250, 2007.

LOPES, D. D. **Tratamento de esgoto sanitário empregando reatores compartimentados anaeróbio/aeróbio em série**. Tese de Doutorado apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos, USP, 1999.

LOZADA, P. T. **Tratamento de esgoto sanitário em sistema combinado anaeróbio-aeróbio (UASB–RSB)**. Tese de Doutorado apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos, USP, 2000.

METCALF; EDDY. **Wastewater engineering: Treatment and reuse**. 4. ed. New York: Editora Mc Graw Hill, Inc, 2003.

MORAIS, J. C. **Remoção de matéria orgânica e nitrogênio em reator compartimentado anaeróbio/anóxico e aeróbio tratando esgoto doméstico.** Tese de doutorado apresentada à Universidade Federal de Pernambuco, 2015.

MOUSSA, M; HOOIJMANS, C; LUBBERDING, H; GIJZEN, H; VAN LOOSDRECHT, M. **Modelling nitrification, heterotrophic growth and predation in activated sludge.** Water Research, v. 39, p. 5080–5098, 2005.

MOYA, J; HUILIÑIR, C; PEREDO, K; ASPÉ, E; ROECKEL, M. **Modeling of simultaneous denitrification – Anaerobic digestion – Organic matter aerobic oxidation and nitrification in an anoxic–anaerobic–aerobic compact filter reactor.** Journal of Biotechnology, v.160, p.176–188, 2012.

OLSSON, G; NEWELL, B. **Wastewater treatment systems modeling, diagnosis and control.** IWA Publishing, 1999.

OSELAME, M. C; FERNANDES, H; COSTA, R. H. R. **Simulation and calibration of a full-scale sequencing batch reactor for wastewater treatment.** Brazilian Journal of Chemical Engineering, v.31, n.3, p.649-658, 2014.

PETERSEN, B. **Calibration, Identifiability and Optimal Experimental Design of Activated Sludge Models.** Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Agricultura e Ciências Biológicas Aplicadas da Universidade de Gante, Bélgica, 2000.

PLASCENCIA-JATOMEA, R; GONZÁLEZ, I; GÓMEZ, J; MONROY, O. **Operation and dynamic modeling of a novel integrated anaerobic–aerobic–anoxic reactor for sewage treatment.** Chemical Engineering Science, v. 138, p. 31–40, 2015.
RUSTEN, B; HELLSTROM, B. G; HELLSTROM, F; SEHESTED, O; SKJELFOSS, E; SVENDSEN, B. **Pilot testing and preliminary design of moving bed biofilm reactors for nitrogen removal at the frevar wastewater treatment plant.** Water Science and Technology, v. 42, n. 4/5, p. 13-20, 2000.

RUSTEN, B; EIKEBROKK, B; ULGENES, Y; LYGREN, E. **Aquacultural Engineering,** v.34, n. 3, p. 322-331, 2006

SCHWAAB, M; PINTO, J. C. **Análise de Dados Experimentais I: Fundamentos de Estatística e Estimação de Parâmetros,** E-papers Serviços Editoriais: Rio de Janeiro, 2007.

SEIFI, M; FAZAELIPOOR, M. H. **Modelling simultaneous nitrification and denitrification (SND) in a fluidized bed biofilm reactor.** Applied Mathematical Modelling, v. 36, p. 5603-5613, 2012.

SILVA G. H. R; NOUR E. A. A. **Reator compartimentado anaeróbio/aeróbio: Sistema de baixo custo para tratamento de esgotos de pequenas comunidades.** Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental, v. 9, n.2, p. 268-275, 2004.

SIN, G; GUIASOLA, A; PAUW, D. J. W; BAEZA, J. A; CARRERA, J; VANROLLEGHEM, P. A. **A new approach for modelling simultaneous storage**

and growth processes for activated sludge systems under aerobic conditions. *Biotechnology & Bioengineering*, v.92, p.600–612, 2005.

SOKAL, R; ROHLF, F. J. **Biometry**: the principles and practice of statistics in biological research. 1995.

STARKENBURG, S. R; SPIECK, E; BOTTOMLEY, P. J. **Metabolism and genomics of nitrite-oxidizing bacteria**: Emphasis on studies of pure culture and *Nitrobacters* species. In: WARD, B. B.; ARP, D. J.; KLOTZ, M. G. *Nitrification*. Washington: ASM Press, 267-294, 2011.

VAN HAANDEL, A. C; LETTINGA, G. **Tratamento Anaeróbio de Esgotos**: Um Manual para Regiões de Clima Quente, Epgraf, Campina Grande, 240 p, 1996.

VAN HAANDEL, A; MARAIS, G. R. V. **O comportamento do sistema de lodo ativado**. Campina Grande – epgraf, 1.ed. 1999.

VERLICCHI, P; MASSOTI, L; GALLETTI, A. **Wastewater polishing index**: a tool for a rapid quality assessment of reclaimed wastewater. *Environmental Monit. Assess.*, v. 173, p. 267–277, 2011.

VIEIRA, L. G. T. **Desenvolvimento de sistema misto (aeróbio/anaeróbio) de leito fixo para remoção de nitrogênio de esgoto sanitário pré-tratado em reator anaeróbio**. Tese de doutorado apresentada à Universidade Federal de São Carlos, 2000.

VON SPERLING, M. **Princípios Básicos do Tratamento de Esgotos**. 1.ed. v.2. Belo Horizonte: Editora UFMG, 1996.

WALTERS, E; HILLE, A; HE, M; OCHMANN, C; HORN, H. **Simultaneous nitrification/denitrification in a biofilm airlift suspension (BAS) reactor with biodegradable carrier material**. *Water Research*, v. 43, p. 4461-4468, 2009.

WEF - WATER ENVIRONMENT FEDERATION. **Biofilm reactors**, Manual of Practice No. 35, Alexandria, Virginia, 2010.

WEF - WATER ENVIRONMENT FEDERATION. **Nutrient Removal**. Alexandria: Mc Graw Hill, 2011.

WU, X; YANG, Y; WU, G; MAO, J; ZHOU, T. **Simulation and optimization of a coking wastewater biological treatment process by activated sludge models (ASM)**. *Journal of Environmental Management*, v. 165, p. 235-242, 2016.

ZANOTELLI, C. T. **Modelagem matemática de Nitrogênio e Fósforo em lagoas facultativas e de aguapés para tratamento de dejetos de suínos**. Tese de Doutorado apresentada à Universidade Federal de Santa Catarina, 2002.

ZHOU, M; GONG, J; YANG, C; PU, W. **Simulation of the performance of aerobic granular sludge SBR using modified ASM3 model**. *Bioresource Technology*, v. 127, p. 473–481, 2013.