

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA
SETOR DE ENGENHARIA, CIÊNCIAS AGRÁRIAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL**

**MURILO SWIECH ASSAD
JONATHAN BAPTISTA GOMES**

**ESTUDO NUMÉRICO DA CONVERSÃO BIOLÓGICA DE CARBONO E
NITROGÊNIO EM REATOR DE LEITO FIXO**

PONTA GROSSA

2022

**MURILO SWIECH ASSAD
JONATHAN BAPTISTA GOMES**

**ESTUDO NUMÉRICO DA CONVERSÃO BIOLÓGICA DE CARBONO E
NITROGÊNIO EM REATOR DE LEITO FIXO**

Trabalho apresentado à disciplina de OTCC como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharelado em Engenharia Civil, da Universidade Estadual de Ponta Grossa.

Orientador: Prof. Dr. Guilherme Araújo Vuitik.

PONTA GROSSA

2022

JONATHAN BAPTISTA GOMES
MURILO SWIECH ASSAD

**ESTUDO NUMÉRICO DA CONVERSÃO BIOLÓGICA DE CARBONO E
NITROGÊNIO EM REATOR DE LEITO FIXO**

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi julgado e aprovado como requisito para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Civil pela Universidade Estadual de Ponta Grossa.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Guilherme Vuitik
Departamento de Engenharia Civil – Universidade Estadual de Ponta Grossa

Prof. Dr. Marcos Rogério Széliga
Departamento de Engenharia Civil – Universidade Estadual de Ponta Grossa

Prof. Dra. Maria Magdalena Ribas Doll
Departamento de Engenharia Civil – Universidade Estadual de Ponta Grossa

Ponta Grossa, ___ de _____ de 2022.

RESUMO

As condições operacionais de reatores biológicos são regidas por excessivo empirismo, o que dificulta a assertividade em sua otimização. Nesse sentido, a problemática tratada por essa pesquisa foi a obtenção de bases matemáticas que colaborem com a previsão do desempenho de reatores biológicos frente a perturbações nas condições de entrada. Para isso, o presente trabalho contou com o desenvolvimento de uma rotina com a implementação de um modelo matemático em Python para a previsão da conversão biológica de Nitrogênio e Carbono. Os dados obtidos foram comparados com dados operacionais reais de um reator em escala piloto, construído em fibra de vidro, com 5,65 m³ de volume útil, diâmetro de 1,5 m e altura de 3,2 m, com 3 compartimentos distintos, sendo eles o leito de mistura, leito de Biobob[®] e saída do efluente. Por meio da variação das condições de entrada e observando o comportamento do reator nessas variações, com os resultados obtidos pela modelagem e através da comparação com os dados empíricos, pretendeu-se entender quais as condições de melhor comportamento e eficiência do biorreator, e os resultados servirão de subsídios para futuros testes laboratoriais. Os resultados foram compatíveis com a realidade e mostrou que nem sempre aumentar a complexidade do reator é a melhor opção

Palavras-chave: reatores biológicos, bases matemáticas, Python, Nitrogênio, Carbono, variação, condições, eficiência, futuros testes.

ABSTRACT

The operating conditions of biological reactors are governed by excessive empiricism, which hinders assertiveness in their optimization. In this sense, the problem addressed by this research was to obtain mathematical bases to collaborate with the prediction of biological reactors performance against perturbations in the input conditions. A mathematical model was written in Python computational language to predict biological conversion of carbon and nitrogen. The mathematical results were compared with real operational data from a pilot scale reactor, built in fiberglass, with 5.65 m³ of usable volume, 1.5 m diameter and 3.2 m height, with 3 distinct compartments, which are the mixing bed, the Biobob[®] bed and the effluent outlet. By changing inlet conditions and observing the behavior of the reactor in these variations, with the results obtained by modeling and through comparison with empirical data, it was intended to understand which are the conditions of best behavior and efficiency of the bioreactor, and the results will serve as subsidies for future laboratory tests. The results were compatible with reality and showed that increasing the complexity of the reactor is not always the best option.

Keywords: biological reactors, mathematical bases, Python, Nitrogen, Carbon, changing, conditions, efficiency, future tests.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 – EXEMPLO DE UM SISTEMA DE MASSAS	15
FIGURA 2 – ESQUEMA FUNCIONAMENTO BIORREATOR EM BATELADA	17
FIGURA 3 – ESQUEMA FUNCIONAMENTO BIORREATOR POR MISTURA COMPLETA	19
FIGURA 4 – ESQUEMA FUNCIONAMENTO BIORREATOR PISTONADO	20
FIGURA 5 – CURVA TÍPICA DE VARIAÇÃO DE CONCENTRAÇÃO COM O TEMPO EM REAÇÕES EM SÉRIE DE PRIMEIRA ORDEM.	22
FIGURA 6 – FASES DO CRESCIMENTO CELULAR DA BACTÉRIA	24
FIGURA 7 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO CINÉTICO DE MONOD	27
FIGURA 8 – PERFIL DE CINÉTICA ENZIMÁTICA	30
FIGURA 9 – DIAGRAMA DOS MECANISMOS DE INIBIÇÃO REVERSÍVEL.....	31
FIGURA 10 – ESQUEMA DE FLOCO DE LODO ATIVADO MOSTRANDO ZONAS INTERNAS AERÓBIAS E ANÓXICAS	36
FIGURA 11 – INFLUÊNCIA DO TAMANHO DO FLOCO NA DIFUSÃO DO OD NO INTERIOR DO FLOCO.	37
FIGURA 12 – PLATAFORMA JUPYTER APRESENTANDO A LINGUAGEM PYTHON (JUPYTER NOTEBOOK)	38
FIGURA 13 – SISTEMA PYTHON DENTRO DA PLATAFORMA JUPYTER PRONTA PARA USO	38
FIGURA 14 – FLUXOGRAMA DO TRABALHO DE CONVERSÃO DE NITROGÊNIO E CARBONO EM UM BIORREATOR DE LEITO FIXO	39
FIGURA 15 – FOTO DO BIORREATOR DE LEITO FIXO A SER UTILIZADO	41
FIGURA 16 – DIAGRAMA DE BLOCOS PARA O ESCOAMENTO NO REATOR ...	42
FIGURA 17 – IMPLEMENTAÇÃO DADOS DE NTK EM PYTHON PARA FLUXO PISTONADO	46
FIGURA 18 – IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO EM PYTHON E OBTENÇÃO DOS RESULTADOS PARA NTK COM FLUXO PISTONADO	46

FIGURA 19 – IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO EM PYTHON E OBTENÇÃO DOS RESULTADOS PARA NTK COM MISTURA COMPLETA	47
FIGURA 20 – RESULTADOS DE CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA GERADOS PELO MODELO NTK PARA RECIRCULAÇÃO DE 0%	49
FIGURA 21 – RESULTADOS DE CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA GERADOS PELO MODELO NTK PARA RECIRCULAÇÃO DE 50%	50
FIGURA 22 – RESULTADOS DE CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA GERADOS PELO MODELO NTK PARA RECIRCULAÇÃO DE 100%	51
FIGURA 23 – RESULTADOS DE CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA GERADOS PELO MODELO NTK PARA RECIRCULAÇÃO DE 150%	52
FIGURA 24 – RESULTADOS DE CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA GERADOS PELO MODELO NTK PARA RECIRCULAÇÃO DE 200%	53
FIGURA 25 – EXEMPLO DE LEITURA DOS RESULTADOS OBTIDOS PELO MODELO	54
FIGURA 26 – LINGUAGEM NO PYTHON PARA CRIAÇÃO DO GRÁFICO DE CONSUMO DE NITROGÊNIO	55
FIGURA 27 – GRÁFICO (1), GERADO EM PYTHON, DE CONSUMO DE NKT PARA DIFERENTES TAXAS DE RECIRCULAÇÃO	55
FIGURA 28 – IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO EM PYTHON E OBTENÇÃO DOS RESULTADOS PARA DQO COM MISTURA COMPLETA	57
FIGURA 29 – RESULTADOS DE CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA GERADOS PELO MODELO DQO PARA RECIRCULAÇÃO DE 0%	58
FIGURA 30 – RESULTADOS DE CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA GERADOS PELO MODELO DQO PARA RECIRCULAÇÃO DE 50%	59
FIGURA 31 – RESULTADOS DE CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA GERADOS PELO MODELO DQO PARA RECIRCULAÇÃO DE 100%	60
FIGURA 32 – RESULTADOS DE CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA GERADOS PELO MODELO DQO PARA RECIRCULAÇÃO DE 150%	61
FIGURA 33 – RESULTADOS DE CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA GERADOS PELO MODELO DQO PARA RECIRCULAÇÃO DE 200%	62
FIGURA 34 – LINGUAGEM NO PYTHON PARA CRIAÇÃO DO GRÁFICO DE CONSUMO DE CARBONO.....	63
FIGURA 35 – GRÁFICO (2) GERADO EM PYTHON DE CONSUMO DE DQO PARA DIFERENTES TAXAS DE RECIRCULAÇÃO.....	63

FIGURA 36 – GRÁFICO (1), GERADO EM PYTHON, DE CONSUMO DE NKT PARA DIFERENTES TAXAS DE RECIRCULAÇÃO	64
FIGURA 37 – GRÁFICO (2) GERADO EM PYTHON DE CONSUMO DE DQO PARA DIFERENTES TAXAS DE RECIRCULAÇÃO.....	66

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	7
2. OBJETIVOS	9
2.1. OBJETIVO GERAL.....	9
2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	9
3. REFERENCIAL TEÓRICO	10
3.1. REATORES BIOLÓGICOS	10
3.1.1 DEFINIÇÃO	10
3.1.2 CLASSIFICAÇÃO	10
3.1.2.1 DE ACORDO COM A PRESENÇA DE O₂:	10
3.1.2.2 COM RELAÇÃO A DISPERSÃO DE BIOMASSA	13
3.1.2.3 COM RELAÇÃO À HIDRODINÂMICA	15
3.2 CINÉTICA DE REAÇÕES EM SÉRIE E PARALELO	20
3.2.1 REAÇÕES EM SÉRIE	21
3.2.2 REAÇÕES EM PARALELO	22
3.3 CINÉTICA MICROBIOLÓGICA	23
3.3.1 CRESCIMENTO CELULAR	23
3.3.2 LEIS DA CINÉTICA E ESTEQUIOMETRIA	25
3.3.3 INIBIÇÃO COMPETITIVA	29
3.4 REMOÇÃO DE CARBONO E NITROGÊNIO EM REATORES BIOLÓGICOS .	32
3.4.1 CONVERSÃO DA MATÉRIA CARBONÁCEA	32
3.4.1.1 CONVERSÃO AERÓBIA	32
3.4.1.2 CONVERSÃO ANAERÓBIA	32
3.4.2 CONVERSÕES DA MATÉRIA NITROGENADA	33
3.4.2.1 OXIDAÇÃO DA AMÔNIA (NITRIFICAÇÃO)	33
3.4.2.2 REDUÇÃO DO NITRATO (DESNITRIFICAÇÃO)	35
3.5. NITRIFICAÇÃO E DESNITRIFICAÇÃO SIMULTÂNEAS (REATOR DE LEITO EMPACOTADO) (NDS)	35

3.6.	PYTHON	37
4.	METODOLOGIA DA PESQUISA.....	39
4.1	INTRODUÇÃO	39
4.2	DESCRIÇÃO DO REATOR E CONDIÇÕES EXPERIMENTAIS	40
5.	MODELO MATEMÁTICO E RESULTADOS.....	42
5.1	MONTAGEM E ENTRADA DE DADOS NO MODELO MATEMÁTICO	42
5.1.1	MODELO MATEMÁTICO PARA CONSUMO DE NITROGÊNIO.....	44
5.2.2	MODELO MATEMÁTICO PARA CONSUMO DE CARBONO	56
6.	DISCUSSÃO	64
6.1	EFICIÊNCIA BUSCADA	64
6.2	REMOÇÃO DE NITROGÊNIO	64
6.3	REMOÇÃO DE CARBONO	65
6.4	COMPARAÇÃO ENTRE NITROGÊNIO E CARBONO	67
7.	CONCLUSÃO	68
	REFERÊNCIAS.....	69
	APÊNDICE A – CÓDIGO EM PYTHON MODELO ETAPA NITROGÊNIO	71
	APÊNDICE B – CÓDIGO EM PYTHON MODELO ETAPA CARBONO	72

1. INTRODUÇÃO

A água é um elemento de grande importância para a manutenção da vida e bom funcionamento do planeta, e para o bom funcionamento dos sistemas, a qualidade da água e dos corpos de água é fundamental. Em função das suas propriedades como solvente e capacidade de transportar partículas, a água incorpora em si várias impurezas que caracterizam sua qualidade. A qualidade da água é um resultado de fenômenos naturais e dos atos dos seres humanos. Geralmente, podemos dizer que a qualidade da água é uma função do uso da terra na área de captação (VON SPERLING, 2005).

Poluição da água é a adição de substâncias ou formas energéticas que diretamente ou indiretamente alterarem a natureza do corpo d'água de tal forma que negativamente afeta seus usos legítimos. Para que o corpo d'água não seja afetado pelo lançamento indevido de águas residuárias, é necessário o tratamento antes do lançamento no corpo d'água (VON SPERLING, 2005).

Em biorreatores, os componentes orgânicos e inorgânicos presentes nas águas residuárias passam por processos de transformação. Nos reatores biológicos, as principais reações de transformação de interesse são realizadas por diferentes microrganismos, principalmente bactérias, que utilizam esses componentes no processo de crescimento metabólico para produção de energia e síntese celular (ADEOLA, 1999).

Nesse contexto, os biorreatores surgem como uma alternativa para o tratamento de águas residuárias, e, por conseguinte, a atenuação dos problemas de saneamento, pois, através deles é possível a filtragem dos efluentes para que os mesmos possam ser devolvidos aos corpos d'água.

Os biorreatores de leito fixo, os quais foram utilizados para estudo neste trabalho, têm sido amplamente empregados em bioprocessos e se caracterizam por serem reatores de coluna, na qual o material suporte é adicionado em seu interior e por onde passa o meio de alimentação de forma ascendente ou descendente. (HUILIÑIR, 2010). Este sistema permite o empacotamento de uma diversidade de suportes com variadas geometrias, além de outras vantagens como a simplicidade de operação, o baixo custo, altas taxas de conversão e produtividades volumétricas (VON SPERLING, 2005).

Os biorreatores podem ser compreendidos e dimensionados através de bases matemáticas que descrevem o seu funcionamento. O presente trabalho, tem a finalidade de aplicar bases matemáticas, que, através da modelagem, descrevem o funcionamento de biorreatores e seu desempenho com diferentes condições de entrada, facilitando o seu estudo e dimensionamento.

2. OBJETIVOS

2.1. OBJETIVO GERAL

Estudar matematicamente a conversão biológica de carbono e nitrogênio em reator de leito fixo.

2.2. Objetivos específicos

- Avaliar o desempenho de um reator de leito fixo em diferentes tempos de detenção hidráulico
- Avaliar o desempenho de um reator de leito fixo em diferentes taxas de recirculação.
- Avaliar os parâmetros matemáticos bem como suas equações no software Python®.

3. REFERENCIAL TEÓRICO

3.1. REATORES BIOLÓGICOS

3.1.1 Definição

Os biorreatores representam todo e qualquer lugar onde células e enzimas convertem substratos em produtos. Suas pesquisas envolvem o balanço de massa das diferentes espécies químicas e biológicas existentes, além de observar aspectos importantes como a transferência de oxigênio, agitação, mistura, assim como a manutenção das condições de esterilidade e produtividade suficiente (COUTINHO FILHO, 2005).

Na unidade de tratamento biológico ocorre o processo de conversão dos componentes orgânicos e inorgânicos da água residuária. As principais reações de transformação de interesse são realizadas por diferentes microrganismos, principalmente bactérias, que utilizam esses componentes no processo de crescimento metabólico para produção de energia e síntese celular. Os biorreatores, juntamente com suas condições ambientais, são determinantes no estabelecimento e permanência das populações de microrganismos responsáveis pela remoção dos poluentes de interesse do afluente (VON SPERLING, 2005).

Estabilizar a matéria orgânica, reduzir a concentração de nutrientes como o nitrogênio e fósforo, remover os compostos tóxicos em baixas concentrações, reduzir a concentração de compostos inorgânicos, trazem a importância do tratamento biológico, através dos biorreatores (VON SPERLING, 2005).

3.1.2 Classificação

Os reatores biológicos, responsáveis por tratar o afluente, podem ser classificados em relação a presença de O_2 , pela dispersão da biomassa e pela hidrodinâmica.

3.1.2.1 De acordo com a presença de O_2 :

O estado de oxidação do composto determina a máxima quantidade de energia disponível nas transformações. À medida que o composto é reduzido, maior será a energia contida. O objetivo do metabolismo energético é conservar o máximo de energia possível em uma forma disponível para a célula. O máximo de energia

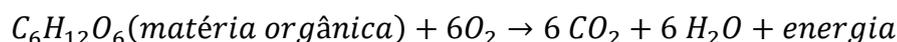
disponível da oxidação de um substrato é a diferença entre o teor energético (fornecido pelo estado de oxidação) e o teor energético dos produtos finais da reação (também gerado pelo estado de oxidação ao final da reação) (MAIER, 2000).

Assim, é possível classificar os reatores quanto a presença de O₂ da seguinte maneira:

a) aeróbios: Um reator aeróbio (presença de O₂) explora oxigênio como o aceptor final de elétrons e é capaz de sustentar diversas reações importantes que usam um número de diferentes doadores de elétrons como compostos carbonáceos e nitrogenados (HORAN, 2003).

O uso de O₂ como receptor final de elétrons pelos microrganismos, define o processo como aeróbio (ADEOLA, 1999).

A reação química que descreve este processo aeróbio é:

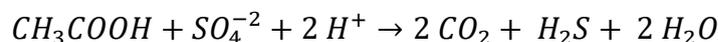


b) anaeróbios: (ausência de O₂) representa um sistema ecológico equilibrado com precisão, onde diferentes populações de microrganismos apresentam funções especializadas, e a degradação dos compostos orgânicos é geralmente considerada um processo em duas fases. Na primeira fase, um grupo de bactérias anaeróbias convertem (por hidrólise e fermentação) os compostos orgânicos complexos (carboidratos, proteínas e lipídios) em materiais orgânicos mais simples, principalmente em ácidos graxos voláteis (AGV), bem como dióxido de carbono e gases de hidrogênio. Na segunda fase, os ácidos orgânicos e o hidrogênio são convertidos em metano e dióxido de carbono. Esta conversão é realizada por um grupo especial de microrganismos, chamados de metanogênicos, que são estritamente anaeróbios procariotos. As arqueas Metanogênicas dependem do substrato fornecido pelos microrganismos formadores de ácido, consistindo, portanto, numa interação sintrófica. (CHERNICARO, 2007).

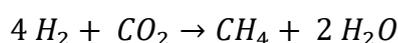
A prevalência de reações nas quais não há transferência de elétrons para o oxigênio livre ou combinado define o processo como anaeróbio (VON SPERLING, 2005).

As reações químicas que descrevem o processo anaeróbio são:

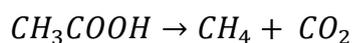
- Redução do sulfato



- Redução do CO₂



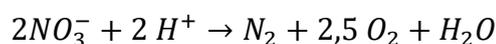
- Metanogênese acetotrófica:



A sequência de transformações que ocorrem no tratamento do efluente é uma função do aceptor de elétrons e do estado de oxidação dos compostos, medido pelo potencial de oxirredução (expresso em milivolts). A reação de redução do sulfato descreve essas reações através da troca de elétrons.

c) anóxico: (ausência de O₂ e presença de nitrito e nitrato) quando vários aceptores de elétrons estão disponíveis no meio, os microrganismos utilizam aquele que produz a maior quantidade de energia. O O₂ é utilizado primeiro e, quando se esgota, o sistema deixa de ser aeróbio. Se houver nitrato disponível no meio líquido, os organismos que são capazes de utilizar nitrato na sua respiração começam a fazê-la, convertendo o nitrato em gás nitrogênio (desnitrificação). Estas condições recebem um nome específico, sendo designado como anóxico (CHERNICHARO, 2007).

A reação química que descreve a reação anóxica é:



A fórmula ilustra as rotas principais da decomposição da matéria orgânica na presença de diferentes receptores de elétrons.

3.1.2.2 Com relação a dispersão de biomassa

A formação estrutural da biomassa, o processo de tratamento de efluentes pode ser dividido nas seguintes configurações:

a) biomassa dispersa:

A biomassa cresce de maneira dispersa no meio líquido, sem nenhuma estrutura de suporte. Essa biomassa pode ter um crescimento disperso, como ocorre nas lagoas, ou um crescimento em uma espécie de colônias, facilmente identificáveis, que podem ser em flocos, como nos sistemas de lodo ativado, ou grânulos, como nos reatores UASB.

Nas lagoas, como por exemplo na lagoa facultativa, o afluente entra em uma das extremidades da lagoa e uma série de eventos ocorrem ao longo deste percurso até a sua saída na extremidade oposta, este processo de purificação do afluente demora vários dias. A biomassa em suspensão (DBO particulada) tende a sedimentar, formando um lodo de fundo que sofrerá um processo de decomposição por microrganismos anaeróbios, sendo transformado em gás carbônico, água, metano e outros. A decomposição da biomassa dissolvida (DBO solúvel) e da biomassa em suspensão de pequenas dimensões (DBO finamente particulada), dispersa na massa líquida, ocorre através de bactérias facultativas (que tem a capacidade de sobreviver com ou sem a presença de oxigênio) (VON SPERLING, 1996).

Em alguns processos de tratamento, como no lodo ativado, os organismos se agrupam e formam uma unidade estrutural chamada floco. Embora os microrganismos sejam os agentes de remoção da DBO, o floco no lodo ativado desempenha um papel essencial na remoção de matéria orgânica. A importante propriedade que os principais microrganismos apresentam de organizar-se em uma unidade estrutural de um floco, permite que a matéria orgânica seja separada do meio líquido pelo simples processo físico de sedimentação, em unidades de sedimentação separadas. Essa separação permite que o efluente final seja clarificado (com concentrações reduzidas de matéria orgânica em suspensão) e que sua qualidade seja caracterizada por baixos valores

de DBO solúvel (removida no reator) e DBO suspensa (removida na unidade de sedimentação) (VON SPERLING, 1996).

b) biomassa aderida:

A biomassa cresce aderida a um meio de suporte, formando um biofilme. O meio de suporte pode estar imerso no meio líquido ou receber descargas líquidas contínuas ou intermitentes. O meio de suporte pode ser um sólido natural, como britas ou solo, artificial (plástico, Biobob®) ou um aglomerado da própria biomassa (grânulos) (VON SPERLING, 2005).

A fixação dos microrganismos a um sólido ou a um meio de suporte em suspensão, tem a vantagem de possibilitar uma alta concentração de biomassa a ser retida no reator por longos períodos de tempo (LUBBERDING, 1995).

No biofilme, a composição necessária para o desenvolvimento bacteriano, assim como da biomassa, oxigênio e micronutrientes, são adsorvidos na superfície. Depois de aderidos, eles são transportados através do biofilme por mecanismos de difusão, onde eles são metabolizados pelos microrganismos. Sólidos coloidais ou suspensos não podem se difundir através do biofilme e precisam ser hidrolisados em moléculas menores. Os produtos metabólicos finais são transportados na direção oposta, para a fase líquida (IWAI; KITAO, 1994).

Em um reator aeróbio, o oxigênio é consumido à medida que ele penetra o biofilme, até que seja atingida uma condição anóxica ou anaeróbia. Portanto, uma camada externa com oxigênio e uma camada interna privada de oxigênio podem ser encontradas. O oxigênio dissolvido é o fator determinante no estabelecimento destas camadas. A redução do nitrato ocorrerá na camada anóxica. Nas condições anaeróbias, haverá a formação de ácidos orgânicos e redução do sulfato. Essa coexistência entre condições aeróbias, anaeróbias e anóxicas é uma característica importante dos sistemas de biofilme (IWAI; KITAO, 1994).

c) híbrido

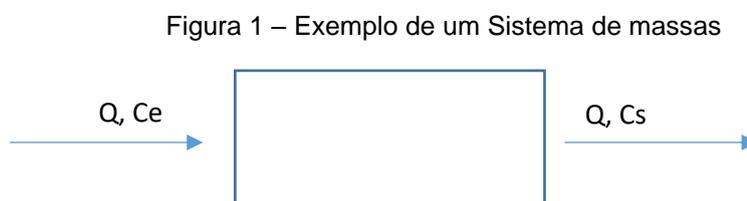
Nos reatores híbridos, a biomassa não está totalmente imóvel, porém, também não está dispersa. O melhor exemplo para este tipo de reator são os reatores

de leito fluidificado. Neste tipo de reator é adicionado areia ao invés de brita e as comunidades microbianas formam um biofilme ao redor dos grãos de areia, que servem de suporte para a biomassa. O efluente é inserido com elevada velocidade, expandindo a cama de areia que se forma no fundo do reator, fazendo com que a areia permaneça em suspensão no interior do reator, isso é conseguido utilizando a recirculação do efluente tratado em taxas elevadas, assim, ao longo de todo o volume do reator haverá areia e biomassa aderida, facilitando o contato com a matéria orgânica a ser digerida. Caso a areia escape do reator, há dispositivos de filtragem ou centrifugação que separam o meio suporte do efluente tratado (LUBBERDING, 1995).

3.1.2.3 Com relação à hidrodinâmica

A equação fundamental do balanço de massa considera um sistema com entradas e saídas de componentes. Pelo princípio da conservação de massa, a quantidade de matéria que entra no sistema é igual à quantidade que sai. O conceito torna-se mais complexo à medida que os sistemas analisados fogem desta condição ideal e simplificada (VON SPERLING, 1997).

A Figura 1 apresenta um exemplo de um sistema em que as vazões de entrada e de saída são iguais (Q), porém as concentrações de entrada (C_e) e de Saída (C_s) são diferentes. Neste caso, como existe uma diferença de concentrações, é possível afirmar que houve uma perda de massa ($C_e > C_s$) ou acréscimo de massa ($C_s > C_e$) dentro do nosso sistema.



FONTE: Chernicharo (2007)

O acúmulo de massa no sistema em função do tempo é dado pela diferença do fluxo de massa que entra e do fluxo de massa que sai (diretamente ou perdido).

Fluxo de massa (ou vazão mássica) define uma quantidade de massa (entrando ou saindo) em um intervalo de tempo (VON SPERLING, 1997).

Em forma de Equação:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_E - \dot{m}_S + \dot{m}_R \quad (1)$$

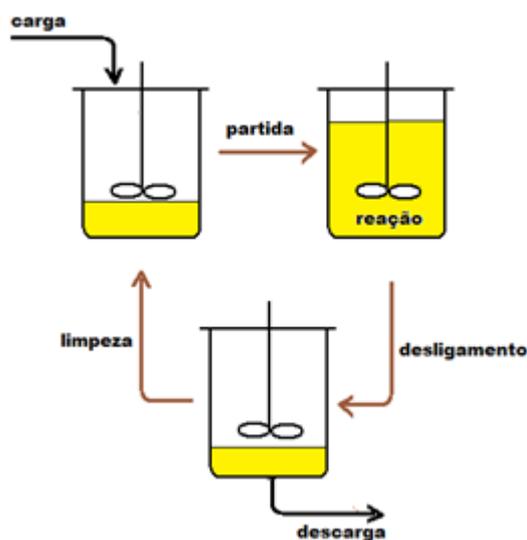
Em que \dot{m}_E representa o fluxo de massa de entrada, \dot{m}_S o fluxo de massa da saída e \dot{m}_R o fluxo de massa que reage no interior do volume de controle. A reação pode ser positiva ou negativa, dependendo do fenômeno que ocorrer dentro do volume de controle.

a) batelada: Um reator biológico em batelada é aquele em que não há fluxo de corrente entrando ou saindo. O conteúdo do reator está completamente misturado. Todos os elementos estão expostos ao tratamento por um período igual ao tempo de permanência do substrato no reator (VON SPERLING, 1997).

Para experimentos em pequena escala e experimentos de pequeno fluxo, reatores em bateladas são recomendados. Por exemplo, eles podem ser usados para medir as condições sob as quais os poluentes no meio ambiente se degradam quando submetidos a alguma forma de tratamento.

A operação de um reator em batelada parte-se da adição de um volume V com uma concentração C_1 no interior do reator. O reator é então fechado (não há fluxo de entrada ou de saída) e é dada a partida. O reator opera por um intervalo de tempo t , no qual ocorrem reações, e é mantido sob agitação de modo que o contato entre os componentes em seu interior permita homogeneidade da solução. Após o intervalo t , é desligado, esvaziado, limpo e preparado para receber um novo volume (IWAI; KITAO, 1994).

Figura 2 – Esquema funcionamento biorreator em batelada



FONTE: Chernicharo (2007)

Utilizando a equação de fluxo de massa (1), ou vazão mássica, aplica-se a definição de reator em batelada, assume-se então que durante a operação do reator, a vazão de entrada e de saída são nulas, pois não existe um aporte contínuo de massa. Logo, \dot{m}_E e $\dot{m}_S = 0$.

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_E - \dot{m}_S + \dot{m}_R$$

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_R$$

O fluxo de massa dentro de uma unidade infinitesimal (dV) do volume de controle (V) é dado por:

$$\dot{m}_R = \int_{\Delta V} r dV \quad (2)$$

Onde r define uma reação, que pode ser de ordem zero, de primeira ordem ou de segunda ordem, a depender da influência da concentração e da constante de decaimento k . Nas equações 3, 4 e 5 são apresentados os modelos cinéticos de ordem 0, 1 e 2, respectivamente.

$$r = \mp k \quad (3)$$

$$r = \mp kC \quad (4)$$

$$r = \mp kC^2 \quad (5)$$

Assim:

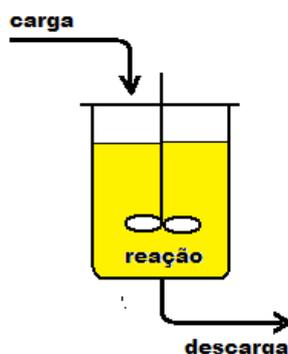
$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_R = \int_{\Delta V} r dV \quad (6)$$

b) Fluxo contínuo: são reatores biológicos que operam com entrada e saída de correntes continuamente enquanto a reação ocorre em seu interior (VON SPERLING, 2005).

Esses, por sua vez, subdividem-se em duas categorias:

b.1) Mistura completa: este biorreator é um tanque totalmente homogêneo onde as concentrações de microrganismos, oxigênio e substrato residual são idênticas em todos os pontos do tanque. O afluente é imediatamente disperso por todo o reator, e a vantagem é que o sistema, dentro de certos limites, tolera sobrecargas de poluição. No entanto, o baixo nível de substrato disponível no ambiente do microrganismo pode estimular o crescimento de bactérias semelhantes a filamentos e causar problemas de volume (IWAI; KITAO, 1994).

Figura 3 – Esquema funcionamento biorreator por mistura completa



FONTE: Chernicharo (2007)

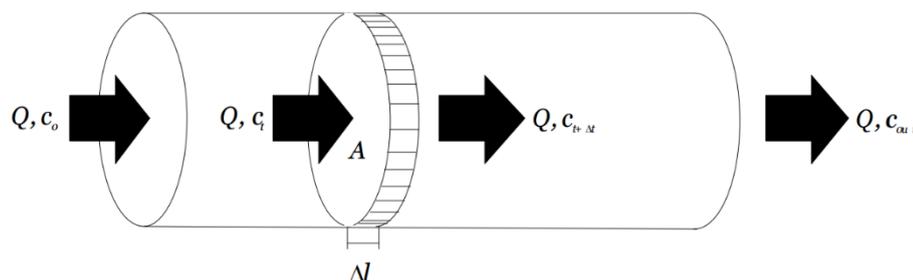
No caso do biorreator de mistura completa, considera-se que as vazões de entrada e de saída são as mesmas, de modo que haja um equilíbrio. Caso contrário o reator estaria enchendo até transbordar ($Q_e > Q_s$) ou esvaziando ($Q_s > Q_e$).

Diferente do caso do reator em batelada, nesse caso o volume e a vazão influenciam na variação da concentração em função do tempo. Isso porque nesse modelo de reator, efluente entra e sai continuamente, enquanto no reator em batelada o sistema recebe uma vazão fixa, é fechado e só libera essa vazão após o período de reação.

b.2) Pistonado: o fluido reagente se move através da tubulação como um pistão paralelo ao eixo do tubo, sendo a composição uma função do volume ou do eixo axial do equipamento (IWAI; KITAO, 1994).

As partículas de fluido entram no tanque continuamente em uma extremidade, passa através do reator, e então são descarregados na outra ponta, na mesma sequência em que eles entram no reator. As partículas de fluido se movem como um pistão, sem qualquer mistura longitudinal. As partículas mantêm suas propriedades e permanecem no tanque por um período igual ao tempo teórico de detenção hidráulica. Este tipo de fluxo é reproduzido em grandes tanques com um grande comprimento, largura e vazão, em que a dispersão longitudinal é mínima (VON SPERLING, 2005).

Figura 4 – Esquema funcionamento biorreator pistonado



FONTE: Von Sperling (2005)

Um fluido passando por um reator desse tipo pode ser modelado como se estivesse passando por uma série de cilindros de área transversal fixa e altura infinitesimais Δl .

Cada um desses cilindros com uma composição uniforme desloca-se na direção axial do reator. A hipótese fundamental deste reator é que o fluido é perfeitamente misturado na direção radial, mas não na direção axial. Todo cilindro de volume diferencial é considerado como uma entidade separada, comparando-se a um reator em batelada infinitamente pequeno, tendendo no limite para o volume zero. Então, o equacionamento é como o de um reator em batelada, sendo o diferencial que o comprimento do reator neste tipo (e por consequência o tempo que o cilindro leva para percorrer uma ponta a outra) influencia na reação (APHA, 1998).

3.2 CINÉTICA DE REAÇÕES EM SÉRIE E PARALELO

Nos biorreatores, muitas reações bioquímicas importantes ocorrem através de várias etapas elementares, onde um ou mais intermediários ativos são continuamente regenerados. Em outros casos, apenas um reagente se decompõe gerando diferentes produtos, sendo alguns desses produtos desejáveis e outros não. Nos dois casos, as reações são representadas por mais de uma equação estequiométrica e mais de uma equação cinética é necessária para sua descrição completa (LEVENSPIEL, 2000).

Essas reações podem ocorrer em série e em paralelo:

3.2.1 Reações em série

As reações em série são aquelas em que um os mais produtos formados inicialmente sofrem reações subsequentes gerando outros produtos. Podemos descrever a forma mais simples possível de reações em série de primeira ordem e um único produto intermediário como:



As reações cinéticas para reatores descontínuos correspondentes a esse modelo são:

$$(-r_A) = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot C_A \quad (7)$$

$$(r_R) = \frac{dC_R}{dt} = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_R \quad (8)$$

$$(r_S) = \frac{dC_S}{dt} = k_2 \cdot C_R \quad (9)$$

Para que o comportamento das concentrações dos diversos componentes do sistema reacional em função do tempo seja conhecido, é necessário que as equações diferenciais (13), (14) e (15), sejam resolvidas (LEVENSPIEL, 2000).

Os comportamentos das concentrações de A, R e S em função do tempo são descritos pelas expressões:

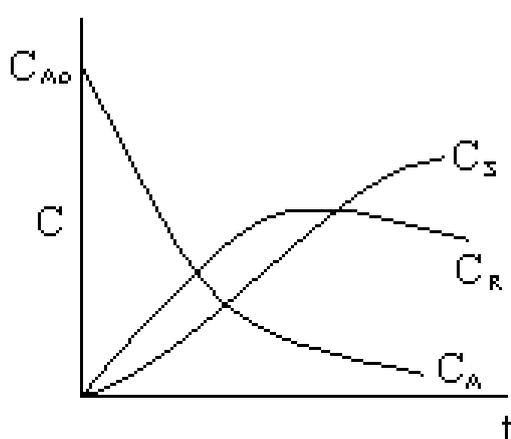
$$C_A = C_{A0} \cdot e^{-k_1 \cdot t} \quad (10)$$

$$C_R = \frac{k_1 \cdot C_{A0}}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) \quad (11)$$

$$C_S = C_{A0} \left[1 + \frac{(k_1 \cdot e^{-k_2 t} - k_2 \cdot e^{-k_1 t})}{k_2 - k_1} \right] \quad (12)$$

No início há uma alta concentração do reagente A e igual a C_{A0} , o que resulta em uma alta velocidade de consumo de A. As concentrações de R e S são mínimas ou nulas e as velocidades de consumo de R e formação de S são desprezíveis. No entanto, a velocidade de formação de R, atinge um máximo em um tempo inicial. Na Figura (7), é apresentada a variação típica das concentrações dos componentes de um sistema, no qual ocorrem reações consecutivas de primeira ordem (LEVENSPIEL, 2000).

Figura 5: Curva típica de variação de concentração com o tempo em reações em série de primeira ordem.

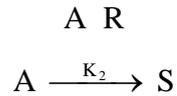


A quantidade final do produto formado é muito pequena para ser detectada analiticamente no início da reação. O período de indução é o período de tempo decorrido até que se forme uma quantidade significativa do produto. A grandeza desse período depende da precisão método analítico adotado.

3.2.2 Reações em paralelo

As reações paralelas são aquelas onde o reagente podem sofrer duas ou mais reações independentes e concorrentes. Há casos onde um ou mais reagentes são combinados para gerar um ou mais produtos, assim como casos em que um único reagente pode produzir diferentes produtos (LEVENSPIEL, 2000).

Considerando o caso mais simples no qual A se decompõe ou é consumido, segundo dois caminhos possíveis, ambos sendo reações elementares:



Em reatores descontínuos, as velocidades de conversão dos três componentes podem ser descritas como:

$$(-r_A) = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot C_A + k_2 \cdot C_A = (k_1 + k_2) \cdot C_A \quad (13)$$

$$(r_R) = \frac{dC_R}{dt} = k_1 \cdot C_A \quad (14)$$

$$(r_S) = \frac{dC_S}{dt} = k_2 \cdot C_A \quad (15)$$

A solução das equações (19), (20) e (21), considerando $C_A = C_{A0}$, $C_{R0} = C_{S0} = 0$ em $t = 0$, resulta em:

$$C_A = C_{A0} \cdot e^{-(k_1+k_2) \cdot t} \quad (16)$$

$$C_R = \frac{k_1 \cdot C_{A0}}{k_1+k_2} [1 - e^{-(k_1+k_2) \cdot t}] \quad (17)$$

$$C_S = \frac{k_2 \cdot C_{A0}}{k_1+k_2} [1 - e^{-(k_1+k_2) \cdot t}] \quad (18)$$

3.3 CINÉTICA MICROBIOLÓGICA

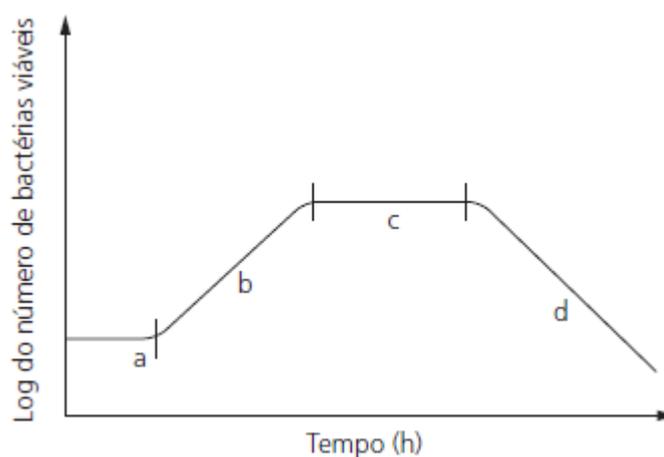
3.3.1 Crescimento celular

Na biossíntese, as células, também chamadas de biomassa, consomem os nutrientes para crescer e produzir mais células e importantes produtos. Internamente, uma célula utiliza seus nutrientes para produzir energia e mais células. Essa transformação de nutrientes em energia e bioprodutos é realizada por meio de várias enzimas que a célula utiliza em uma série de reações para produzir os metabólitos,

resíduo que sobra após o proveito da parte útil do alimento. Esses produtos tanto podem permanecer na célula (produto intracelular), como podem ser excretados para fora da célula (produto extracelular) (FOGLER, 2009).

Diversos parâmetros poderão influenciar a cinética de populações microbianas. Por exemplo, a cinética pode ser afetada pela composição, pH, reologia e temperatura do meio ou pelas características multicomponente, controles internos, adaptabilidade e heterogeneidade das populações celulares (BAILEY & OLLIS, 1986).

Figura 6 – Fases do crescimento celular da bactéria



FONTE: Fogler (2009)

Fogler (2009) descreve, da seguinte forma, as 4 fases do crescimento celular:

Na Fase I (a), chamada de fase de latência, o crescimento da concentração de células é muito pequeno. Durante a fase de latência, as células estão se ajustando a seu novo ambiente, sintetizando as enzimas e se preparando para iniciar a reprodução. Durante esse período, as células realizam funções tais como a síntese de proteínas de transporte para levar o substrato para o interior da célula, a síntese de proteínas que utilizam o novo substrato, e o início do trabalho de replicação do material genético das células. A duração da fase de latência depende da similaridade entre o meio de crescimento do qual o inóculo foi retirado e o meio de reação no qual é colocado. Se o meio do inóculo for similar ao meio do reator, a fase de latência será praticamente inexistente. Se, entretanto, o inóculo for colocado em um meio com nutrientes diferentes e outros componentes, ou se o meio de cultura do inóculo estiver

na fase estacionária ou na fase de morte celular, as células terão que reajustar sua rota metabólica de modo a permitir o consumo dos nutrientes em seu novo ambiente.

A Fase II (b) é chamada de fase de crescimento exponencial devido ao fato de a velocidade de crescimento da célula ser proporcional à concentração de células. Nessa fase, as células se dividem com sua velocidade máxima, porque todos os caminhos enzimáticos para metabolizar o meio estão em funcionamento (como resultado da fase de latência) e as células estão capacitadas para utilizar os nutrientes da forma mais eficiente.

A Fase III (c) é a fase estacionária, na qual as células ocupam um espaço biológico mínimo, em que a ausência de um ou mais nutrientes limita o crescimento das células. Durante a fase estacionária, a velocidade de crescimento celular é nula devido ao esgotamento dos nutrientes e de metabólitos essenciais. Muitos produtos importantes de fermentação, inclui produzidos durante a maioria dos antibióticos, são produzidos na fase estacionária. Por exemplo, a penicilina produzida comercialmente utilizando o fungo *Penicillium chrysogenum* é formada após o término da fase de crescimento. A presença de ácidos orgânicos e de materiais gerados durante a fase de crescimento também desacelera o crescimento celular.

A fase final, Fase IV (d), Floger (2009) descreve sendo a fase da morte celular em que ocorre um decréscimo da concentração de células vivas. Esse decaimento é resultado da presença de subprodutos tóxicos, do ambiente inóspito e do esgotamento do suprimento de nutrientes.

3.3.2 Leis da cinética e estequiometria

O sistema mais simples para representação cinética de uma população celular ignora a natureza multicomponente da célula (crescimento balanceado) e a heterogeneidade da população, considerando uma célula média. Tais modelos são chamados de não estruturados e não segregados e representam uma visão macroscópica do crescimento microbiano. Desta forma, uma certa estequiometria será aplicada ao processo de crescimento, independente do mecanismo particular ou passos reacionais que o sistema de células emprega para efetuar a reação global de crescimento. Por outro lado, modelos mais realistas consideram que a célula é composta por diversos componentes diferentes e que a população celular é

heterogênea, contendo células com características distintas. Tais modelos estruturados e segregados são extremamente rigorosos e sua aplicação para fins práticos pode ser prejudicada pela sua complexidade. (BAILEY & OLLIS, 1986).

Os modelos cinéticos que consideram crescimento balanceado relacionam velocidades de crescimento celular com a concentração de substrato. Nestes modelos a fase biológica é caracterizada somente por massa celular ou concentração. Por exemplo, pode-se representar a concentração celular em termos de sólidos em suspensão voláteis por unidade de volume (mg SSV.l^{-1}). O substrato considerado é, geralmente, a principal fonte de carbono e energia. Em meios complexos, contendo muitos substratos, deve-se considerar o substrato que limita a velocidade de crescimento celular. Pode-se também expressar a concentração de substrato em termos de demanda química de oxigênio (DQO), demanda bioquímica de oxigênio (DBO) ou carbono orgânico total (COT) no caso de tais substratos complexos (VON SPERLING, 2005).

O modelo cinético mais utilizado para representar o crescimento dos microrganismos em um sistema contínuo é o Modelo de Monod (1949 e 1950):

$$\mu = \mu_{\max} \frac{C_s}{K_s + C_s} \quad (19)$$

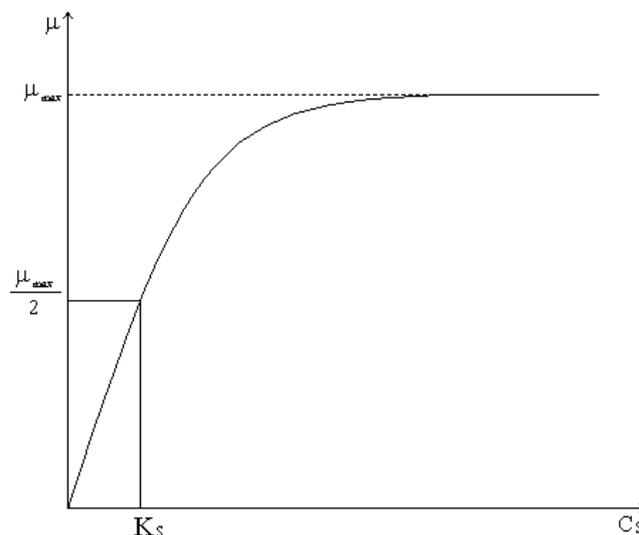
Na expressão cinética de Monod, C_s é a concentração do substrato, μ é a velocidade específica de crescimento celular (T^{-1}) e μ_{\max} e K_s são constantes cinéticas. μ_{\max} é a velocidade máxima de crescimento celular e K_s é a constante de saturação do substrato e tem o valor da concentração de substrato na qual μ atinge metade do seu valor máximo.

A representação gráfica da expressão cinética de Monod é apresentada na Figura 9.

Pela expressão (19) observa-se que, para concentrações elevadas de substrato, a razão $C_s/(C_s+K_s)$ se aproxima da unidade e que, portanto, a velocidade de crescimento se torna independente da concentração de substrato, isto é, o crescimento é um processo de ordem zero. Por outro lado, se a concentração de substrato for muito baixa, isto é, valor de C_s exacerbadamente menor que o valor de

K_s , a velocidade de crescimento se torna proporcional à concentração de substrato, o que caracteriza cinética de primeira ordem (VON SPERLING, 2005).

Figura 7 – Representação gráfica do modelo cinético de Monod



Fonte: Levenspiel (2000)

A velocidade de crescimento pode ser relacionada com a velocidade de consumo de matéria orgânica utilizando-se o conceito de coeficiente de rendimento celular ($Y_{X/S}$), que representa a razão entre a massa de células formadas por massa de substrato consumido:

$$r_x = Y_{X/S} \cdot r_s \quad (20)$$

$$r_x = \mu \cdot C_x \quad (21)$$

Nas expressões (20) e (21), r_x é a velocidade de crescimento dos microrganismos (M microrganismo. $L^{-3} \cdot T^{-1}$, por exemplo mg SSV. $f^1 \cdot h^{-1}$), r_s é a velocidade de consumo da matéria orgânica pelos microrganismos (M substrato. $L^{-3} \cdot T^{-1}$, por exemplo mg DQO. $f^1 \cdot h^{-1}$), C_x é a concentração de microrganismos ($M \cdot L^{-3}$, por exemplo: mg SSV. L^{-1}), $Y_{X/S}$ é o fator de crescimento ou a produção bruta de microrganismos por unidade de massa de substrato (M células / M substrato, por exemplo g SSV. g^{-1} DQO).

Dessa forma, a expressão de Monod pode ser apresentada em função da velocidade de degradação da matéria orgânica como:

$$r_s = \frac{C_x}{Y_{XS}} \mu_{max} \frac{C_s}{K_s + C_s} = r_{max} \frac{C_s}{K_s + C_s} \quad (22)$$

Na Equação (22), r_{max} é a velocidade máxima de degradação da matéria orgânica expressa em massa de substrato por volume e por tempo.

O valor de Y_{XS} para assimilação é praticamente constante e diretamente relacionado à estequiometria. Essa fração realmente representa a massa celular produzida, ou seja, o lodo biológico gerado em um reator aplicado ao tratamento de águas residuárias. Esse parâmetro reflete uma das principais vantagens do processo anaeróbico sobre o aeróbico, a baixa produção de lodo biológico. Enquanto valores de Y_{XS} acima de 0,45 mg SSV.mg⁻¹ DQO são observados para os organismos anaeróbios, valores variando de 0,01 a 0,35 mg SSV.mg⁻¹ DQO são reportados para os anaeróbios, dependendo da cultura, consórcio e substrato (VAN HAANDEL, 2019).

Paralelo ao crescimento de microrganismos há também decaimento devido à morte de células. A velocidade de decaimento (R_d) pode ser formulada como um processo de primeira ordem:

$$r_d = K_d \cdot C_x \quad (23)$$

Nessa expressão, K_d é a constante de decaimento endógeno ou constante de morte celular (T⁻¹).

A expressão cinética de Monod pode ser aplicada para uma faixa limitada de concentrações de substratos. Para faixas de concentração de substrato elevadas, algumas expressões cinéticas, derivadas do modelo de Monod, podem ser utilizadas com melhores resultados (FOGLER, 2009).

As altas concentrações de substrato podem ser observadas na inibição do crescimento celular. Desta forma, um modelo de inibição por excesso de substrato, derivado da cinética enzimática, pode representar adequadamente a velocidade específica de crescimento celular como:

$$\mu = \mu_{max} \frac{C_s}{K_s + C_s + C_s^2/K_{is}} \quad (24)$$

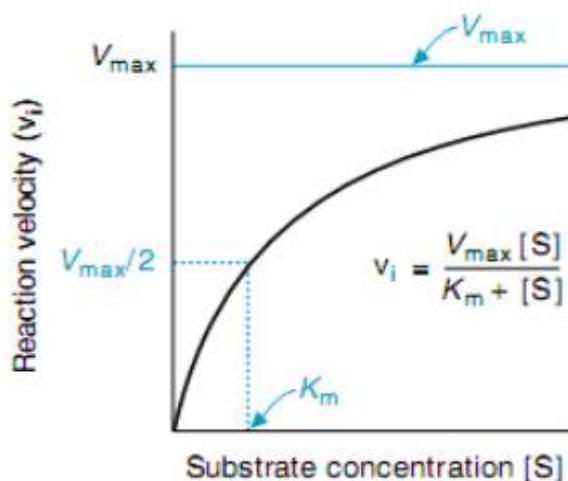
Essa expressão mostra que as altas concentrações de substrato, isto é, quando C_s for excessivamente maior que K_s , haverá diminuição da velocidade específica de crescimento, sendo K_{is} a constante de inibição por excesso de substrato (VON SPERLING, 2005).

3.3.3 Inibição competitiva

As enzimas são proteínas biológicas que fornecem controle de velocidade, especificidade e regulação de diversas reações no corpo dos animais. Elas agem como catalisadores, ou seja, aumentam a velocidade das reações químicas. A enzima, então, participa na formação e rompimento de ligações que são necessárias para transformar um substrato em produto, e retornando ao seu estado original uma vez que a reação esteja completa. O sítio de ligação de um substrato específico contém resíduos de aminoácidos que reconhecem este substrato e se ligam a ele por múltiplas interações hidrofóbicas, eletrostáticas ou de hidrogênio. A complementaridade entre enzima e substrato define o que muitos autores relatam como modelo de chave-e-fechadura (FOGLER, 2009).

Um inibidor é qualquer substância que reduz a taxa de reação. Este processo de inibição enzimática é um instrumento de regulação das células vivas e um dos procedimentos de diagnóstico, dos mais importantes para os enzimologistas. Na vida diária, temos os inibidores sendo representados por drogas, antibióticos, preservativos, venenos e toxinas (TANG,2009).

Figura 8 – Perfil de cinética enzimática: velocidade de reação com aumento da concentração de substrato em uma reação enzimática genérica.



FONTE: Tang (2009)

Em processos industriais a inibição exerce um papel muito importante, pois trata-se normalmente, com concentrações elevadas de substratos e produtos, além de que, os substratos não são substâncias puras (MAIER, 2000).

Um inibidor competitivo é uma substância que se combina com uma enzima não complexada de forma a impedir a ligação do substrato com a enzima. O inibidor e o substrato competem entre si pela ligação com a enzima. (FOGLER,2009)

Em alguns casos, o substrato ou o produto das reações enzimáticas, quando presentes em concentrações suficientemente elevadas, podem agir como um inibidor. Esta ação inibitória sobre a enzima pode ser reversível e irreversível (TANG,2009):

a) Inibição reversível:

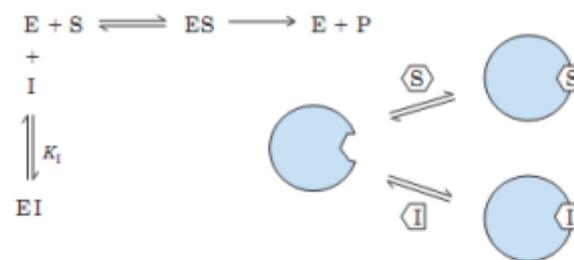
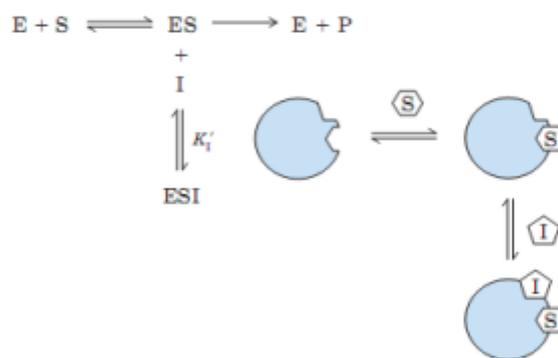
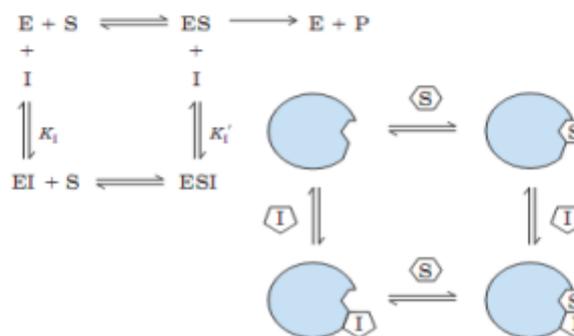
a1) Inibidor Competitivo: liga-se ao sítio ativo (ligação Inibidor + Enzima); \uparrow [Substrato] reverte inibição;

a2) Inibidor Incompetitivo: liga-se a um sítio que não o ativo (ligação Inibidor + Enzima-Substrato); o efeito somente é percebido quando se tem \uparrow [Substrato];

a3) Inibidor Não-Competitivo: liga-se a um sítio que não o ativo, mas pode formar ligação diretamente com a Enzima ou com o complexo Enzima-Substrato; \uparrow [Substrato] não reverte inibição.

b) Inibição irreversível: O inibidor se liga de forma covalente a enzima, e destrói a ação catalítica.

Figura 9 – Diagrama dos mecanismos de inibição reversível.

(a) Competitive inhibition**(b) Uncompetitive inhibition****(c) Mixed inhibition**

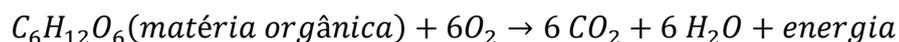
FONTE: Fogler (2009)

3.4 REMOÇÃO DE CARBONO E NITROGÊNIO EM REATORES BIOLÓGICOS

3.4.1 Conversão da matéria carbonácea

3.4.1.1 Conversão aeróbia

A equação geral da respiração aeróbia pode ser expressa por:



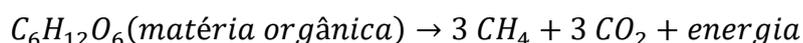
Essa equação é geral e simplificada, visto que na verdade há vários passos intermediários. A composição da matéria orgânica é simplificada e, nesse caso, a fórmula molecular da glicose é assumida como uma representação da matéria orgânica carbonácea. Analisando a reação, os seguintes aspectos podem ser destacados, todos importantes no tratamento de efluentes (TANG,2009):

- Estabilização da matéria orgânica (conversão em produtos inertes, como o dióxido de carbono e a água).
- Utilização de oxigênio.
- Produção de dióxido de carbono.
- Liberação de energia.

Os principais agentes responsáveis pela estabilização aeróbica da matéria carbonácea presente nos efluentes são os organismos decompositores, que são principalmente representados por bactérias heterotróficas aeróbias e facultativas (VON SPERLING, 2005).

3.4.1.2 Conversão anaeróbia

A conversão da matéria carbonácea sob condições anaeróbias segue a equação abaixo:



Esta equação também é geral e simplificada, e representa apenas o produto final dos estágios intermediários. Os aspectos abaixo podem ser destacados na equação (VON SPERLING, 2005):

- Não exclusividade da oxidação. O carbono do CO_2 está presente no maior estágio de oxidação (+4). Entretanto, o oposto ocorre com o CH_4 , em que o carbono está no estado mais reduzido (-4), podendo ser oxidado posteriormente (por exemplo, por combustão – o metano é inflamável).
- Não utilização de oxigênio.
- Produção de metano e dióxido de carbono.
- Liberação de energia (menos do que na respiração aeróbia)

A matéria orgânica foi apenas convertida para uma forma mais oxidada (CO_2) e outra forma mais reduzida (CH_4). No entanto, a maior parte da CH_4 é liberada para a fase gasosa, que leva uma remoção mais efetiva da matéria orgânica (VON SPERLING, 2005).

A conversão anaeróbica ocorre em duas fases:

- Fase acidogênica: conversão da matéria orgânica em ácidos orgânicos por organismos acidogênicos (organismos formadores de ácido). Neste estágio, há apenas conversão da matéria orgânica, porém não há remoção.
- Fase metanogênica: conversão dos ácidos orgânicos em metano, dióxido de carbono e água pelos organismos metanogênicos (organismos formadores de metano). A matéria orgânica é novamente convertida, mas como o CH_4 é transferido para a atmosfera, ocorre remoção de matéria orgânica.

Antes do estado de acidogênese, os compostos orgânicos complexos (carboidratos, proteínas e lipídios) precisam ser convertidos em compostos mais simples, pelo mecanismo de hidrólise (VON SPERLING, 2005).

3.4.2 Conversões da matéria nitrogenada

3.4.2.1 Oxidação da amônia (nitrificação)

Nos efluentes, o nitrogênio orgânico é convertido em amônia pelo processo de amonificação. Este processo não altera a quantidade de nitrogênio (TKN) na água

residuária, não há consumo de oxigênio, e começa no próprio efluente, continuando nas unidades de tratamento primário e biológico. Ao final do tratamento, a quantidade de nitrogênio orgânico é pequena (VON SPERLING, 2005).

Uma importante reação de oxidação que ocorre em alguns processos de tratamentos de águas residuárias é a nitrificação, na qual a amônia é transformada em nitritos e esses nitritos em nitratos. Apenas alguns processos de tratamento são capazes de suportar uma nitrificação significativa, devido a sua capacidade de manter concentrações suficientes de bactérias nitrificantes (VON SPERLING, 2007).

Os microrganismos envolvidos nesses processos são quimioautotróficos, para os quais o dióxido de carbono é a principal fonte de carbono, e a energia é obtida através da oxidação de um substrato inorgânico, como a amônia, para formas mineralizadas (VON SPERLING, 2005).

A transformação da amônia em nitritos é feita por bactérias, como as do gênero *Nitrosomonas*, de acordo com as seguintes reações:



A oxidação desses nitritos em nitratos ocorre principalmente pela ação de bactérias, como as do gênero *Nitrobacter*, da seguinte maneira:



A reação global de nitrificação é a soma das Equações (31) e (32):



Nas reações 31, 32 e 33, podemos notar os seguintes pontos:

- Consumo de oxigênio livre. Este consumo é chamado de demanda de nitrogênio.
- Liberação de H^+ , consumindo a alcalinidade do meio e possivelmente reduzindo o pH.

3.4.2.2 Redução do nitrato (desnitrificação)

Em condições anóxicas (ausência de oxigênio, mas presença de nitratos), os nitratos são utilizados por organismos heterotróficos como receptores de elétrons ao invés de oxigênio. Neste processo chamado desnitrificação, o nitrato é reduzido a gás nitrogênio, de acordo com a seguinte reação (VON SPERLING, 2005):



Com a reação de desnitrificação, os seguintes pontos podem ser notados (VON SPERLING, 2007):

- Economia de oxigênio (a matéria orgânica pode ser estabilizada na ausência de oxigênio)
- Consumo de H^+ , implicando em economia da alcalinidade e um aumento na capacidade tampão do meio.

3.5. NITRIFICAÇÃO E DESNITRIFICAÇÃO SIMULTÂNEAS (REATOR DE LEITO EMPACOTADO) (NDS)

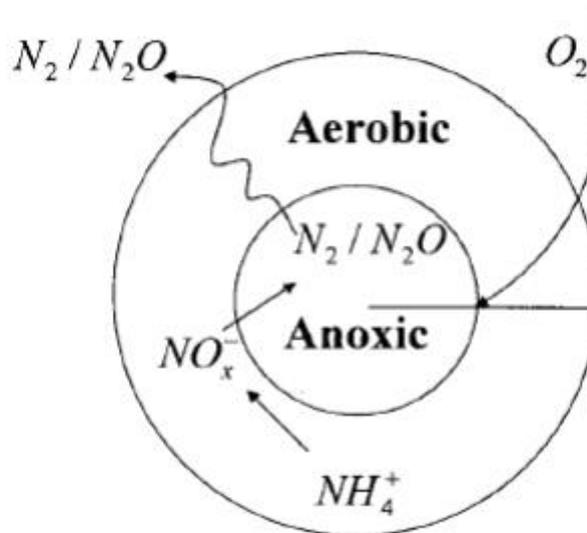
Uma alternativa de tratamento para otimizar o processo de eliminação de nitrogênio corresponde à nitrificação e desnitrificação simultânea (NDS), onde a nitrificação e desnitrificação acontecem em um mesmo reator, sem separação, nas mesmas condições e ao mesmo tempo (POCHANA; KELLER, 1999).

Para Yoo et al. (1999), a NDS oferece uma potencial economia nos custos para um segundo tanque (anóxico), ou pelo menos reduz seu tamanho, caso possa se assegurar que uma quantidade considerável de desnitrificação ocorra junto com a nitrificação no tanque aerado.

Segundo a revisão de literatura de Münch et al. (1996), as fundamentações dadas para o fenômeno de NDS podem ser classificadas em dois critérios: físico ou biológico na natureza. O físico é a explanação convencional que o NDS ocorre em consequência dos gradientes da concentração de oxigênio dissolvido, dentro dos flocos microbianos ou dos biofilmes, devido às limitações de difusão, criando zonas com alta concentração de oxigênio na área externa e condição de limitação de oxigênio dissolvido em zonas internas (figura 12). Isto é, os microrganismos

nitrificantes existem em regiões com elevada concentração de oxigênio dissolvido, visto que os desnitrificantes serão, preferencialmente, ativos nas zonas com baixa concentração de oxigênio dissolvido. Já a explicação biológica está na existência de bactérias desnitrificantes aeróbias e nitrificantes heterotróficas.

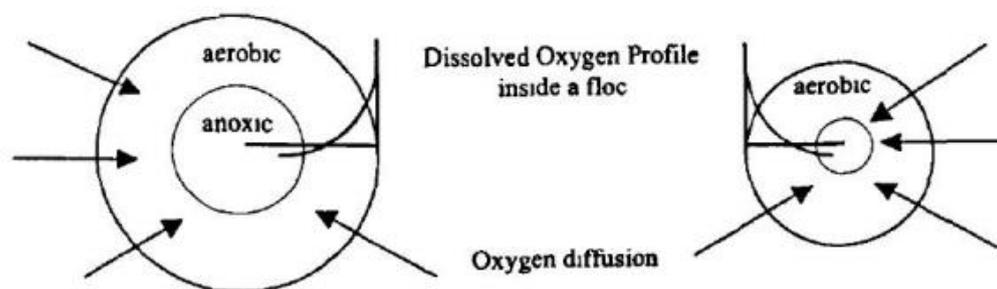
Figura 10 – Esquema de floco de lodo ativado mostrando zonas internas aeróbias e anóxicas



FONTE: Pochana e Keller (1999)

Em estudo, para determinar a ocorrência de NDS e confirmar o efeito do tamanho do floco na desnitrificação, Pochana e Keller (1999) operaram um reator de batelada contínua (SBR) a partir da lagoa da planta de tratamento de águas residuais do matadouro. Eles alcançaram uma taxa total de remoção de nitrogênio de até 95%. Os autores concluíram que a fonte de carbono biodegradável é essencial para a desnitrificação. Eles também verificaram que o controle de oxigênio dissolvido é fundamental para as duas fases do processo, observaram que o tamanho dos flocos afeta a eficiência do processo (figura x), criando um gradiente de difusão de oxigênio dissolvido nos flocos, permitindo o aparecimento de zonas anóxicas em seu interior e criando condições para que a nitrificação e desnitrificação ocorram simultaneamente.

Figura 11 – Influência do tamanho do floco na difusão do OD no interior do floco.



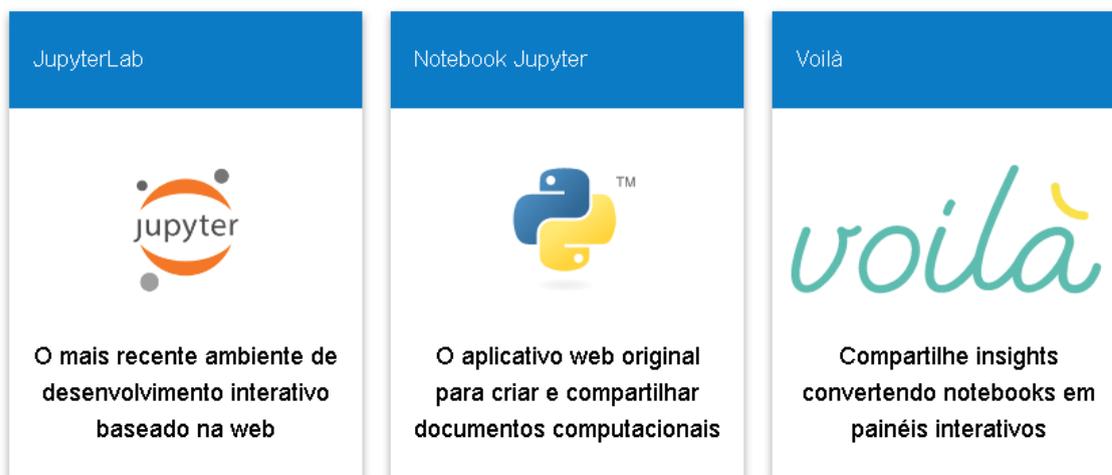
FONTE: Pochana e Keller (1999).

3.6. PYTHON

A linguagem Python foi criada em 1991, por Guido van Rossum, com a prioridade de destacar o esforço do programador sobre o esforço computacional, priorizando a legibilidade do código com uma sintaxe elegante, concisa e clara. É uma linguagem interpretada de alto nível que pode ser usada para desenvolver uma ampla variedade de aplicativos. Possui estruturas de dados complexas, módulos, exceções, tipagem dinâmica, vinculação dinâmica, além de multiplataformas (SILVA, 2019).

Neste trabalho foi utilizado o Python 3 (versão mais atualizada) dentro da plataforma Jupyter, um sistema que concentra diversos aplicativos computacionais que permite os usuários configurarem e organizarem diferentes fluxos de trabalhos. No caso da linguagem Python dentro do ambiente Jupyter, ela é formalizada por Jupyter Notebook, Figura 12.

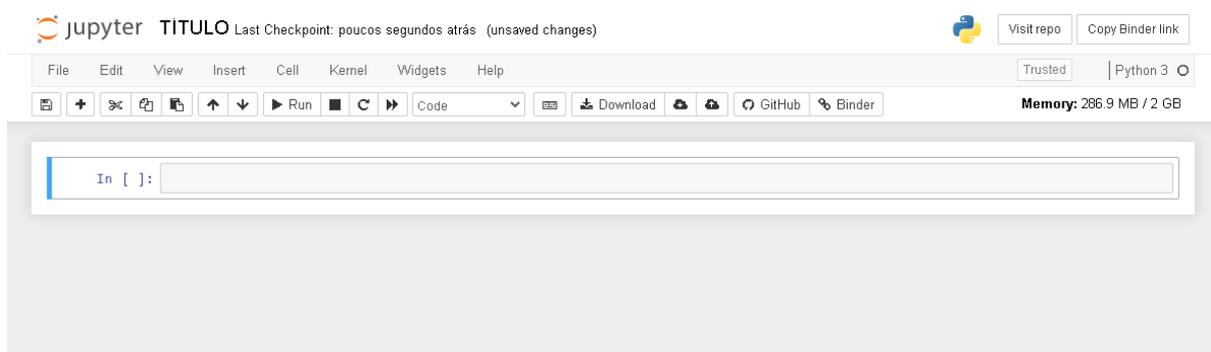
Figura 12 – Plataforma Jupyter apresentando a linguagem Python (Jupyter Notebook)



FONTE: Os autores (2022)

Foi optado pela linguagem Python, no presente trabalho, pela facilidade de entrada de dados, organização e visualização completa do modelo gerado a todo momento, uso de loopings para diferentes repetições de resultados, além de toda biblioteca Python que permite milhares de interações matemáticas e montagem de gráficos.

Figura 13 – Sistema Python dentro da plataforma Jupyter pronta para uso



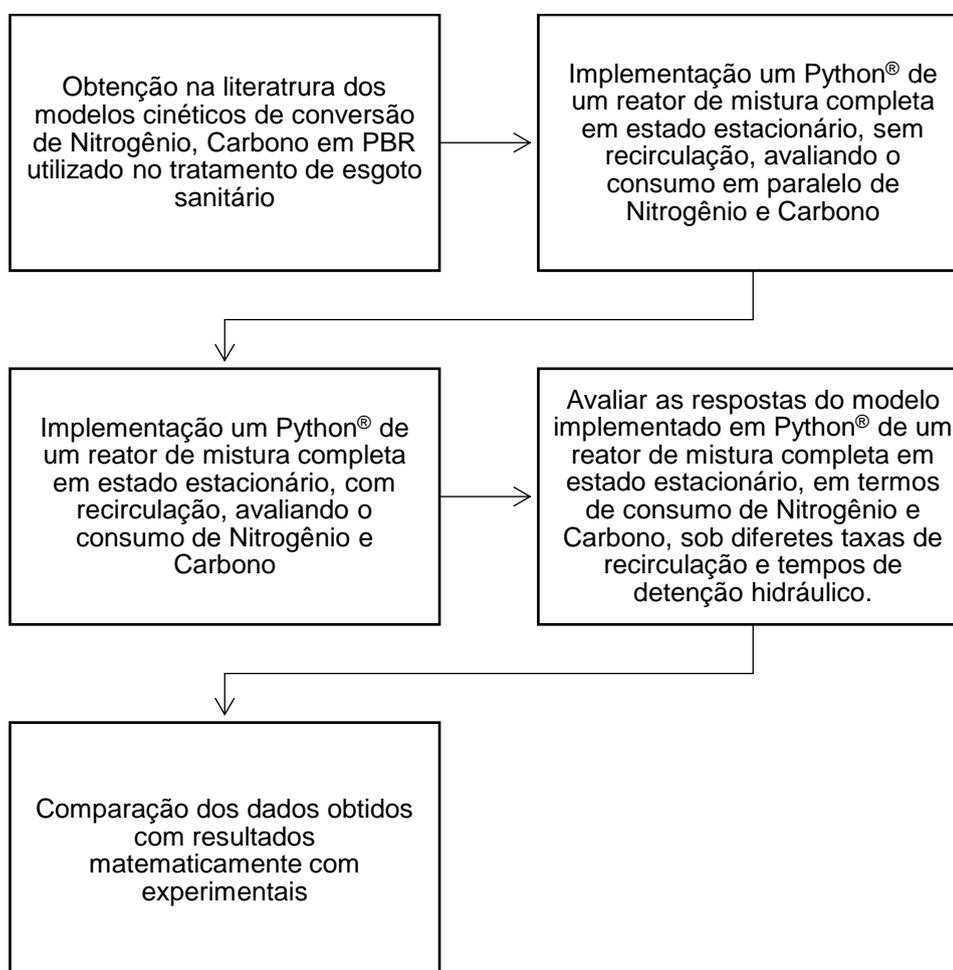
FONTE: Os autores (2022)

4. METODOLOGIA DA PESQUISA

4.1 INTRODUÇÃO

Utilizando os parâmetros cinéticos disponíveis na literatura, e na tentativa de descrever a remoção de Carbono e Nitrogênio em um reator de leito fixo, um modelo de um reator aerado de mistura perfeita com recirculação e em estado estacionário foi implementado em Python®. Diferentes condições de entrada foram aplicadas ao modelo, e as respostas servirão de subsídios para testes laboratoriais futuros. As principais etapas dessa pesquisa estão apresentadas no fluxograma da Figura 14.

Figura 14 – Fluxograma do trabalho de conversão de Nitrogênio e Carbono em um biorreator de leito fixo



Algumas tabelas foram construídas, constituídas de valores de constantes cinéticas importantes presentes na literatura, citadas neste trabalho em 3.3.2, para que fossem utilizados e estudados seus devidos comportamentos na etapa de

conversão de Nitrogênio e Carbono em um biorreator presente no tratamento de esgoto sanitário.

Com o passar do trabalho o modelo se tornou mais robusto, para que se estude como as diferentes formas, desde as mais simples, podem trazer resultados significativos e que serão avaliados e comparados com a literatura. Foi adicionada, no estudo, a recirculação, visando verificar o comportamento do reator frente a essa nova perturbação.

Nas etapas seguintes foram variados a taxa de recirculação, e tempos de detenção hidráulica, com a finalidade de obter diferentes resultados.

Todos os valores de resultados matemáticos foram comparados e interpretados com os resultados obtidos experimentalmente por Oliveira (2020)

Em todas as etapas foram geradas gráficos, os quais foram comparados com o resultado final, tendo em vista se há necessidade de um modelo completo pra chegar em uma resposta coerente.

4.2 DESCRIÇÃO DO REATOR E CONDIÇÕES EXPERIMENTAIS

O reator a ser modelado foi um reator com 5,65 m³ de volume útil e leito de Biobob[®] (Figura 15). Este reator constitui das mesmas características do reator estudado por Oliveira (2020).

Figura 15 – Foto do Biorreator de leito fixo a ser utilizado



FONTE: Oliveira (2020)

O substrato utilizado para alimentar o modelo é efluente doméstico, com as características apresentadas por Oliveira (2020), o qual é composto por uma mistura de esgoto bruto e de efluente do RALF na proporção de 1:1. Essa proposta foi feita a partir da observação dos resultados obtidos nos trabalhos de Wendling (2018), Jenzura et al., (2018) e Oliveira (2016).

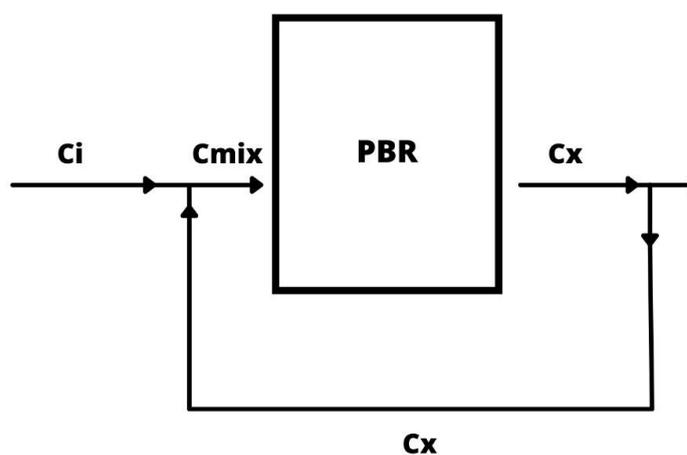
5. MODELO MATEMÁTICO E RESULTADOS

5.1 MONTAGEM E ENTRADA DE DADOS NO MODELO MATEMÁTICO

A montagem do modelo consistiu-se em trazer as equações e constantes cinéticas da literatura, bem como dados gerados por Oliveira (2020) para dentro das funções disponíveis na linguagem Python, e assim estudar os diferentes resultados para o consumo de Nitrogênio e Carbono.

Reatores com biomassa imobilizada podem ser modelados como combinações de reatores de mistura perfeita e de fluxo pistonado. No entanto, conforme estudo (detalhado em 5.2.1) observa-se que para regime de escoamento pistonado, a velocidade de consumo de substrato é consideravelmente superior aos observados na prática, conforme os dados operacionais do mesmo autor. Dessa forma, o modelo hidrodinâmico para representar o reator foi o de mistura completa. (Figura 16).

Figura 16 – Diagrama de blocos para o escoamento no reator



C_i = Concentração de entrada
 C_x = Concentração de saída
 C_{mix} = Concentração de mistura

FONTE: Os autores (2022)

Por meio deste modelo foi avaliada a influência da recirculação e do TDH na remoção de carbono e nitrogênio, as respostas do modelo foram comparadas com os dados de Oliveira (2020).

O substrato estudado nesta pesquisa foi avaliado em termos de concentração de matéria orgânica carbonácea, expressa pela DQO, e compostos nitrogenados, expressos pelo NTK. De acordo com os dados de Oliveira (2020), as NTK e DQO de entrada no modelo foram 54,5 mg/L e 512 mg/L, respectivamente. Considerou-se todo o carbono como facilmente biodegradável e que o nitrogênio se encontrava na forma de nitrato.

O balanço de massa para cada câmara do reator foi obtido de acordo com a Equação 29, onde TDH é o tempo de detenção hidráulico, C_x é a concentração de saída do reator, C_i é a concentração de entrada no reator, e r_s é a velocidade de reação, determinada pelo modelo cinético.

$$TDH = \frac{C_x - C_i}{r_s} \quad (29)$$

Ao introduzir um fluxo de recirculação, a concentração de alimentação do reator muda em função da eficiência global do sistema. Assim, foi necessário incluir a Equação 30 no modelo, que calcula o C_{mix} , a concentração da mistura afluenta ao reator. Na Equação 30, Rec é a razão de recirculação.

$$C_{,mix} = \frac{Rec \cdot C_x + C_i}{Rec + 1} \quad (30)$$

Foi utilizado o modelo de Monod, Equação 22, para descrever a cinética deste estudo, os valores das constantes cinéticas que foram usadas para nitrogênio e carbono estão detalhados em 5.1.1 e 5.1.2, respectivamente.

O código para previsão numérica da remoção de nitrogênio e carbono é apresentado no Apêndice A e B, respectivamente.

5.1.1 Modelo matemático para consumo de Nitrogênio

Como citado anteriormente, os valores iniciais foram retirados do estudo de Oliveira (2020), para NTK:

Tabela 1 – Concentração inicial de NTK obtida por Oliveira

Condição	T (°C)	Afluente (mg L ⁻¹)		Efluente (mg L ⁻¹)				Nitrif. (%)	Desnitrif. (%)	Remoção de NT (%)
		NTK	N-NH ₄ ⁺	NTK	N-NH ₄ ⁺	N-NO ₂ ⁻	N-NO ₃ ⁻			
1	18 ^b	53,1 ± 3,9	49,6 ± 3,6	18,7 ± 2,6	14,3 ± 5,9	0,7 ± 0,4	0,9 ± 0,3	64,6	97,6	61
2	22 ^a	54,5 ± 3,2	52,1 ± 3,4	10,6 ± 2,6	8,2 ± 3,2	0,8 ± 0,4	1,5 ± 0,4	80,3	98,0	76
3	21 ^a	55,8 ± 5,2	50,0 ± 3,4	14,3 ± 4,6	12,6 ± 3,2	1,0 ± 1,1	0,8 ± 0,7	73,9	97,5	71
2A	18 ^b	51,0 ± 2,2	45,6 ± 3,0	12,7 ± 1,7	9,5 ± 1,4	0,6 ± 0,4	0,7 ± 0,3	75,0	98,3	72
2B	20 ^a	54,1 ± 6,3	50,4 ± 5,0	8,1 ± 1,3	6,5 ± 2,0	0,8 ± 0,5	0,9 ± 0,6	84,1	98,0	81

FONTE: Oliveira (2020)

Com esta tabela, escolheu-se a condição 2, por possuir valor de remoção, em porcentagem, intermediário em relação as demais, deste modo, utilizou-se o valor de 54,5 mg/L de nitrogênio para o modelo. Os valores das constantes cinéticas $r_{\text{máx}}$ e K_s foram retirados da Tabela 2 organizada da literatura:

Tabela 2 – Constantes cinéticas retiradas da literatura

Fatores cinéticos de utilização para nitrogênio		
Constante	Valores	Referências
$r_{\text{máx}}$ (mg.L ⁻¹ .h ⁻¹)	20	DOLD <i>et al.</i> , (1980) <i>apud</i> VAN HAANDEL (2006).
	5,0 - 40,0	METCALF e EDDY (2003)
K_s (mg.L ⁻¹)	5	DOLD <i>et al.</i> , (1980) <i>apud</i> VAN HAANDEL (2006).
	5 - 15	METCALF E EDDY (2003)

FONTE: adaptado de (VAN HAANDEL e MARAIS, 1999; METCALF e EDDY, 2003)

Deste modo, para o $r_{\text{máx}}$, utilizou-se o valor de 10 mg. L⁻¹.h⁻¹ definido por Metcalf e Eddy (2003) que, em dias, ficou estabelecido por 240 mg.L⁻¹.d⁻¹ e 12 mg.L⁻¹ para K_s , também definido pelos mesmos autores. Para o TDH, estabeleceu-se o seu estudo em 1 dia (24h) variando a cada 1,2 h. Iniciou-se com rec de 200% para se ter uma base de valor.

Possuindo os dados iniciais e sabendo que (VON SPERLING,2005):

$$TDH = \frac{1}{k_1} \ln \frac{C_{A0}}{C_A} \quad (31)$$

Pôde-se utilizar as Equações 22, 29 e 30 com a Expressão 31, sendo possível deixar o TDH em função de todas as constantes cinéticas para um reator de leito fixo com fluxo pistonado, Equação (32), equação inclusive estudada em Von Sperling (2005).

$$TDH = \frac{1}{r_{\text{max}}} \ln \frac{\frac{Rec \cdot Cx + C_i}{Rec + 1}}{\frac{Cx}{K_S + Cx}} \quad (32)$$

Chamou-se a concentração inicial de C_i , a concentração de saída de C_x , e todas as constantes serão acompanhadas do número 1 em sua frente para simbolizar os cálculos envolvendo Nitrogênio e com o número 2 para Carbono, exceto a recirculação que será a mesma em módulo.

Passando todos esses valores para a linguagem Python:

Figura 17 – Implementação dados de NTK em Python para fluxo pistonado

```
In [8]: tdh1 = np.arange(0,1,0.05)
        rmax1 = 240
        Ci1= 54.5
        Ks1= 12
        rec= 2
```

FONTE: Os autores (2022)

Nota-se que com o *arange*¹ mostrado na linguagem Python, designou-se que o TDH varie de 0 à 1 dia ao passo de 1,2 h (1,2 h em 1,2 h) como citado anteriormente. Ora, se 24 horas representa 1 dia, então 1,2h são 0,05 dias. Assim, de 0 à 1 dia a cada 0,05 partes de dia representado, em Python, por (0, 1, 0.05).

Figura 18 – Implementação do modelo em Python e obtenção dos resultados para NTK com fluxo pistonado

```
In [8]: tdh1 = np.arange(0,1,0.05)
        rmax1 = 240
        Ci1= 54.5
        Ks1= 12
        rec= 2
```

```
In [9]: resolucoes2 = list()
        for tdh in tdh1:
            eqn1=Eq(tdh,(1/rmax1)*ln(((rec*Cx1+Ci1)/(rec+1))/(Cx1/(Cx1+Ks1))))
            resolucoes2.append(Eq(Cx1, solve(eqn1)[0]))
```

```
In [10]: resolucoes2
```

```
Out[10]: [Cx1 = -24.2847712520956, Cx1 = 0.0013396536812637, Cx1 = 8.22979331465804 · 10-9, Cx1 = 6.46684732067275 · 1015, Cx1
= 1.05251038681464 · 1021, Cx1 = 1.71301108472353 · 1026, Cx1 = 2.78800761792619 · 1031, Cx1 = 4.53761598330171 · 1036, Cx1
= 7.38518742901809 · 1041, Cx1 = 1.20197463960009 · 1047, Cx1 = 1.95627131759045 · 1052, Cx1 = 3.18392530253413 · 1057, Cx1
= 5.18199098507632 · 1062, Cx1 = 8.43393861911255 · 1067, Cx1 = 1.37266392079435 · 1073, Cx1 = 2.23407630117276 · 1078, Cx1
= 3.63606622411512 · 1083, Cx1 = 5.91787199891541 · 1088, Cx1 = 9.63162022827842 · 1093, Cx1 = 1.56759234128051 · 1099]
```

FONTE: Os autores (2022)

¹ Arange (arranjo) representa, em Python, um arranjo contendo uma sequência de valores especificados em um intervalo com início e fim definidos, espaçados de maneira uniforme.

A Equação 32 foi inserida no software Python, bem como um looping gerando respectivos resultados para cada valor de TDH que está sendo variado de uma maneira completa, sem que se precisasse fazer individualmente. Outra linguagem utilizada "list" faz com que os termos se organizem em matriz.

Como mostrado e citado no tópico anterior, os resultados foram tão elevados que se tornam incompatíveis com Oliveira (2020), informando que tudo seria consumido de uma maneira extremamente rápida, sendo inviável para o modelo.

Com base nisso, e já mencionado anteriormente, considerou-se que o reator em estudo deste trabalho é de leito fixo de mistura completa, que através das Expressões 22, 29 e 30, se encontrou uma nova equação (32) bem conhecida dentro de Von Sperling (2005).

$$TDH = \frac{\frac{Rec \cdot C + C_o}{Rec + 1} - C}{r_{max} \frac{C}{K_S + C}} \quad (32)$$

Implementando o novo modelo em Python:

Figura 19 – Implementação do modelo em Python e obtenção dos resultados para NTK com mistura completa

```
In [12]: tdh1 = np.arange(0,1,0.05)
tdhgraf= np.arange(0,24,1.2)
rmax1 = 240
Ci1= 54.5
Ks1= 12
rec1= np.arange(0,2.5,0.5)
y = dict()

In [13]: resolucoes = list()
for rec in rec1:
    print("rec=",rec)
    y[rec] = list()
    for tdh in tdh1:
        print(f"\ttdh={tdh:.2f}")
        eqn1=Eq(tdh,(((rec*Cx1+Ci1)/(rec+1))-Cx1) / (rmax1*Cx1/(Cx1+Ks1)))
        solucao = solve(eqn1)[1]
        resolucoes.append(Eq(Cx1, solucao))
        print("\t\t",Eq(Cx1, solucao))
    y[rec].append(float(solucao))
```

FONTE: Os autores (2022)

Foi criado um novo arange para o TDH, mas desta vez em horas, com o nome de `tdhgraf`, devido ao fato que os gráficos respostas foram construídos na escala temporal de horas, para facilitar a compreensão. Porém nos cálculos do modelo segue em dias, essas informações repetem-se para DQO. Observa-se também um arange, para a recirculação indo de 0 à 2.5 variando no passo de 0.5. Vale destacar-se também que dentro da linguagem Python o último termo variado sempre irá finalizar na etapa anterior. Por exemplo, no caso da recirculação variando de 0 à 2.5, passo 0.5, irá finalizar em 2.0 e não em 2.5. Outro exemplo, seria nosso TDH que varia de 0 a 1, passo 0.05, ele finalizará em 0.95 e não 1.0.

Obtêm-se:

Figura 20– Resultados de concentração de saída gerados pelo modelo NTK para recirculação de 0%

```

rec= 0.0
  t dh=0.00      Eq(Cx1, 54.5)
  t dh=0.05      Eq(Cx1, 45.0251994115908)
  t dh=0.10      Eq(Cx1, 36.4448984186373)
  t dh=0.15      Eq(Cx1, 29.0291097596484)
  t dh=0.20      Eq(Cx1, 22.9708572951992)
  t dh=0.25      Eq(Cx1, 18.2789196972428)
  t dh=0.30      Eq(Cx1, 14.7722373813368)
  t dh=0.35      Eq(Cx1, 12.1826965188094)
  t dh=0.40      Eq(Cx1, 10.2576005706936)
  t dh=0.45      Eq(Cx1, 8.80192534648665)
  t dh=0.50      Eq(Cx1, 7.67803571119502)
  t dh=0.55      Eq(Cx1, 6.79185192637145)
  t dh=0.60      Eq(Cx1, 6.07923983302962)
  t dh=0.65      Eq(Cx1, 5.49598380618624)
  t dh=0.70      Eq(Cx1, 5.01106920644036)
  t dh=0.75      Eq(Cx1, 4.60231761846384)
  t dh=0.80      Eq(Cx1, 4.25356004636753)
  t dh=0.85      Eq(Cx1, 3.95278921027335)
  t dh=0.90      Eq(Cx1, 3.69093376342374)
  t dh=0.95      Eq(Cx1, 3.46103107232559)

```

FONTE: Os autores (2022)

Figura 21– Resultados de concentração de saída gerados pelo modelo NTK para recirculação de 50%

```
rec= 0.5
tdh=0.00      Eq(Cx1, 54.5)
tdh=0.05      Eq(Cx1, 40.6059958386229)
tdh=0.10      Eq(Cx1, 29.0291097596484)
tdh=0.15      Eq(Cx1, 20.4618770789121)
tdh=0.20      Eq(Cx1, 14.7722373813368)
tdh=0.25      Eq(Cx1, 11.1507521408923)
tdh=0.30      Eq(Cx1, 8.80192534648665)
tdh=0.35      Eq(Cx1, 7.2098049424219)
tdh=0.40      Eq(Cx1, 6.07923983302962)
tdh=0.45      Eq(Cx1, 5.24278806144571)
tdh=0.50      Eq(Cx1, 4.60231761846384)
tdh=0.55      Eq(Cx1, 4.09780082567888)
tdh=0.60      Eq(Cx1, 3.69093376342374)
tdh=0.65      Eq(Cx1, 3.35631917289634)
tdh=0.70      Eq(Cx1, 3.07653894102323)
tdh=0.75      Eq(Cx1, 2.83928981686097)
tdh=0.80      Eq(Cx1, 2.63565508063512)
tdh=0.85      Eq(Cx1, 2.45902540440416)
tdh=0.90      Eq(Cx1, 2.30440398673506)
tdh=0.95      Eq(Cx1, 2.16794660276316)
```

FONTE: Os autores (2022)

Figura 22– Resultados de concentração de saída gerados pelo modelo NTK para recirculação de 100%

```
rec= 1.0
  t dh=0.00
      Eq(Cx1, 54.5)
  t dh=0.05
      Eq(Cx1, 36.4448984186373)
  t dh=0.10
      Eq(Cx1, 22.9708572951992)
  t dh=0.15
      Eq(Cx1, 14.7722373813368)
  t dh=0.20
      Eq(Cx1, 10.2576005706936)
  t dh=0.25
      Eq(Cx1, 7.67803571119502)
  t dh=0.30
      Eq(Cx1, 6.07923983302962)
  t dh=0.35
      Eq(Cx1, 5.01106920644036)
  t dh=0.40
      Eq(Cx1, 4.25356004636753)
  t dh=0.45
      Eq(Cx1, 3.69093376342374)
  t dh=0.50
      Eq(Cx1, 3.25765902617313)
  t dh=0.55
      Eq(Cx1, 2.91425339569165)
  t dh=0.60
      Eq(Cx1, 2.63565508063512)
  t dh=0.65
      Eq(Cx1, 2.405249626108)
  t dh=0.70
      Eq(Cx1, 2.2116141829834)
  t dh=0.75
      Eq(Cx1, 2.04664952977099)
  t dh=0.80
      Eq(Cx1, 1.90445983234838)
  t dh=0.85
      Eq(Cx1, 1.78065463494135)
  t dh=0.90
      Eq(Cx1, 1.67189923733046)
  t dh=0.95
      Eq(Cx1, 1.57561652374871)
```

FONTE: Os autores (2022)

Figura 23– Resultados de concentração de saída gerados pelo modelo NTK para recirculação de 150%

```

rec= 1.5
  t dh=0.00
      Eq(Cx1, 54.5)
  t dh=0.05
      Eq(Cx1, 32.5760802247505)
  t dh=0.10
      Eq(Cx1, 18.2789196972428)
  t dh=0.15
      Eq(Cx1, 11.1507521408923)
  t dh=0.20
      Eq(Cx1, 7.67803571119502)
  t dh=0.25
      Eq(Cx1, 5.77362976163332)
  t dh=0.30
      Eq(Cx1, 4.60231761846384)
  t dh=0.35
      Eq(Cx1, 3.81747398435106)
  t dh=0.40
      Eq(Cx1, 3.25765902617313)
  t dh=0.45
      Eq(Cx1, 2.83928981686097)
  t dh=0.50
      Eq(Cx1, 2.51523721077108)
  t dh=0.55
      Eq(Cx1, 2.25706318531306)
  t dh=0.60
      Eq(Cx1, 2.04664952977099)
  t dh=0.65
      Eq(Cx1, 1.87193057815986)
  t dh=0.70
      Eq(Cx1, 1.72457179371739)
  t dh=0.75
      Eq(Cx1, 1.59863646978521)
  t dh=0.80
      Eq(Cx1, 1.48978409905872)
  t dh=0.85
      Eq(Cx1, 1.39476923801643)
  t dh=0.90
      Eq(Cx1, 1.31111752929523)
  t dh=0.95
      Eq(Cx1, 1.23691005406286)

```

FONTE: Os autores (2022)

Figura 24– Resultados de concentração de saída gerados pelo modelo NTK para recirculação de 200%

```

rec= 2.0
  t dh=0.00
      Eq(Cx1, 54.5)
  t dh=0.05
      Eq(Cx1, 29.0291097596484)
  t dh=0.10
      Eq(Cx1, 14.7722373813368)
  t dh=0.15
      Eq(Cx1, 8.80192534648665)
  t dh=0.20
      Eq(Cx1, 6.07923983302962)
  t dh=0.25
      Eq(Cx1, 4.60231761846384)
  t dh=0.30
      Eq(Cx1, 3.69093376342374)
  t dh=0.35
      Eq(Cx1, 3.07653894102323)
  t dh=0.40
      Eq(Cx1, 2.63565508063512)
  t dh=0.45
      Eq(Cx1, 2.30440398673506)
  t dh=0.50
      Eq(Cx1, 2.04664952977099)
  t dh=0.55
      Eq(Cx1, 1.84048826855253)
  t dh=0.60
      Eq(Cx1, 1.67189923733046)
  t dh=0.65
      Eq(Cx1, 1.5315029348077)
  t dh=0.70
      Eq(Cx1, 1.4127931000142)
  t dh=0.75
      Eq(Cx1, 1.31111752929523)
  t dh=0.80
      Eq(Cx1, 1.22306301193782)
  t dh=0.85
      Eq(Cx1, 1.14606940285136)
  t dh=0.90
      Eq(Cx1, 1.07817923951689)
  t dh=0.95
      Eq(Cx1, 1.01787052159201)

```

FONTE: Os autores (2022)

A leitura dos resultados é feita observando primeiramente a taxa de recirculação desejada, depois o TDH, e por último a concentração de saída neste tempo específico. Por exemplo:

Figura 25– Exemplo de leitura dos resultados obtidos pelo modelo

```

rec= 1.0
tdh=0.00      Eq(Cx1, 54.5)
tdh=0.05      Eq(Cx1, 36.4448984186373)
tdh=0.10      Eq(Cx1, 22.9708572951992)
tdh=0.15      Eq(Cx1, 14.7722373813368)
tdh=0.20      Eq(Cx1, 10.2576005706936)
tdh=0.25      Eq(Cx1, 7.67803571119502)

```

FONTE: Os autores (2022)

Para este caso, está informando que para a recirculação de 1.0 (100%), no TDH de 0.15 dia, a concentração de saída de nitrogênio no reator é de 14,772 mg/L.

Considerando que para cada taxa de recirculação (rec) obtêm-se um conjunto de valores de concentração de saída ao longo do tempo (TDH), e que cada concentração é um ponto no gráfico. Foram organizados no software Python cada conjunto de concentrações para as taxas de recirculação em matrizes resposta para que fosse possível gerar em gráfico da relação da concentração de saída (no eixo y) ao longo do tempo (no eixo x), da seguinte maneira no Python:

Figura 26– Linguagem no Python para criação do gráfico de consumo de Nitrogênio

```
In [34]: x = np.linspace(0, 1, 100)
# y1= ([54.5, 40.6059958386229, 29.0291097596484, 20.4618770789121, 14.7722373813368,
#      7.2098049424219, 6.07923983302962 , 5.24278806144571, 4.60231761846384, 4.0:

# y2=( [54.5, 36.4448984186373, 22.9708572951992, 14.7722373813368, 10.2576005706936, 7.67803:

for yrec in y:
    plt.plot(tdhgraf, y[yrec], label=f'rec {yrec:.2f}')

plt.xlabel('TDH (h)')
plt.ylabel('N (saída) (mg/L)')

plt.title("Consumo de Nitrogênio")

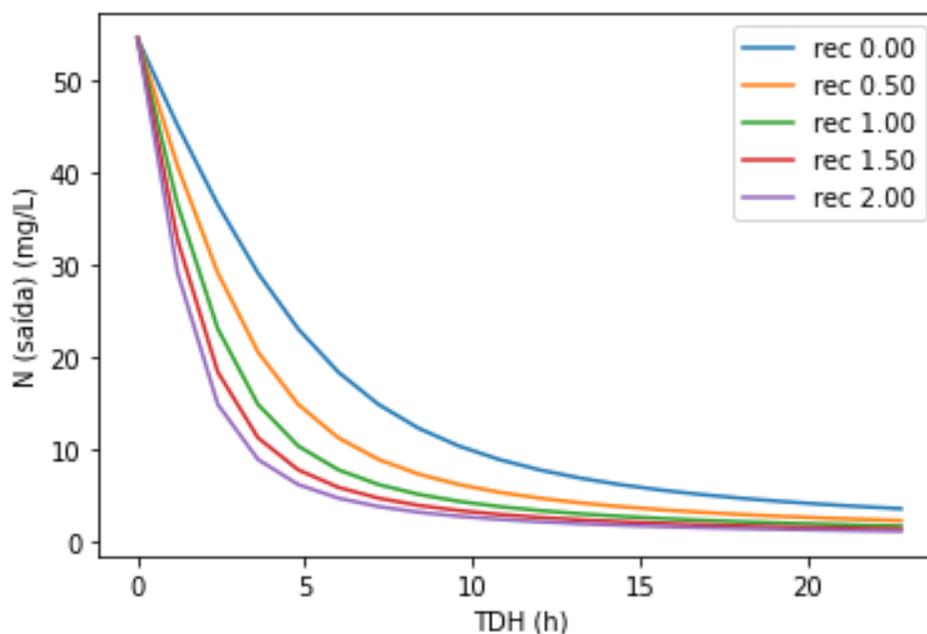
plt.legend()

plt.show()
```

FONTE: Os autores (2022)

Obtendo o gráfico (1):

Figura 27– Gráfico (1), gerado em Python, de consumo de NKT para diferentes taxas de recirculação



FONTE: Os autores (2022)

5.2.2 Modelo matemático para consumo de Carbono

Semelhantemente ao modelo criado para consumo de nitrogênio:

Foram obtidos os dados através de Oliveira (2020), os valores de DQO (mg L^{-1}) de uma eficiência intermediária:

Tabela 3– Concentração inicial de DQO obtida por Oliveira

Condição	Aeração (ON/OFF) (min)	Duração (dias)	T (°C)	DQO (mg L^{-1})		Eficiência de remoção de DQO (%)	Estação do ano
				Afluente	Efluente		
1	120/60	79	18 ^b	555 ± 60	125 ± 9	77 ^b	Inverno
2	Contínua	130	22 ^a	512 ± 46	108 ± 40	80 ^a	Primavera/verão
3	60/120	112	21 ^a	562 ± 30	133 ± 26	73 ^b	Verão/outono
2A	Contínua	147	18 ^b	516 ± 38	100 ± 24	82 ^a	Inverno/primavera
2B	Contínua	74	20 ^a	524 ± 61	67 ± 22	87 ^a	Verão

FONTE: Oliveira (2020)

Foi escolhida a condição 2 da tabela. Para os valores das constantes cinéticas $r_{\text{máx}}$ e K_s , foram utilizadas as constantes cinéticas estimados por Mulchandani et al. (1989), sendo:

Tabela 4– Constantes cinéticas da literatura para DQO

Constante	Valor
$r_{\text{máx}}$	125 $\text{mg.L}^{-1}.\text{h}^{-1}$
K_s	234 mg.L^{-1}

FONTE: Mulchandani et al. (1989)

Ao implementar as expressões e valores das constantes cinéticas e concentração inicial no Python, em dias, com o mesmo intervalo de tempo utilizado para o nitrogênio em TDH (de 0 a 1 dia, no passo de 0,05), e também com as mesmas taxas de recirculação (de 0 a 2,5, no passo de 0,5) obtêm-se:

Figura 28– Implementação do modelo em Python e obtenção dos resultados para DQO com mistura completa

```
In [26]: tdh2 = np.arange(0,1,0.05)
tdhgraf= np.arange(0,24,1.2)
rmax2 = 3000
Ci2= 512
Ks2= 234
rec2= np.arange(0,2.5,0.5)
y = dict()

In [29]: resolucoes = list()
for rec in rec2:
    print("rec=",rec)
    y[rec] = list()
    for tdh in tdh2:
        print(f"\ttdh={tdh:.2f}")
        eqn2=Eq(tdh,(((rec*Cx2+Ci2)/(rec+1))-Cx2) / (rmax2*Cx2/(Cx2+Ks2)))
        solucao = solve(eqn2)[1]
        resolucoes.append(Eq(Cx2, solucao))
        print("\t\t",Eq(Cx2, solucao))
    y[rec].append(float(solucao))
```

FONTE: Os autores (2022)

Assim, são obtidos os seguintes resultados para cada taxa de recirculação e TDH:

Figura 29– Resultados de concentração de saída gerados pelo modelo DQO para recirculação de 0%

```

rec= 0.0
tdh=0.00      Eq(Cx2, 512.0)
tdh=0.05      Eq(Cx2, 416.0)
tdh=0.10      Eq(Cx2, 335.307666678057)
tdh=0.15      Eq(Cx2, 270.656697679996)
tdh=0.20      Eq(Cx2, 220.744679072283)
tdh=0.25      Eq(Cx2, 182.931975385026)
tdh=0.30      Eq(Cx2, 154.326766906869)
tdh=0.35      Eq(Cx2, 132.463113442027)
tdh=0.40      Eq(Cx2, 115.479834859815)
tdh=0.45      Eq(Cx2, 102.047020210893)
tdh=0.50      Eq(Cx2, 91.2314433290495)
tdh=0.55      Eq(Cx2, 82.3775113835646)
tdh=0.60      Eq(Cx2, 75.0197366091305)
tdh=0.65      Eq(Cx2, 68.822634553314)
tdh=0.70      Eq(Cx2, 63.5404044984487)
tdh=0.75      Eq(Cx2, 58.9899521048037)
tdh=0.80      Eq(Cx2, 55.0327056139529)
tdh=0.85      Eq(Cx2, 51.5622088968645)
tdh=0.90      Eq(Cx2, 48.4955339341224)
tdh=0.95      Eq(Cx2, 45.7672469316851)

```

FONTE: Os autores (2022)

Figura 30– Resultados de concentração de saída gerados pelo modelo DQO para recirculação de 50%

```

rec= 0.5
tdh=0.00      Eq(Cx2, 512.0)
tdh=0.05      Eq(Cx2, 373.645862714796)
tdh=0.10      Eq(Cx2, 270.656697679996)
tdh=0.15      Eq(Cx2, 200.511591310328)
tdh=0.20      Eq(Cx2, 154.326766906869)
tdh=0.25      Eq(Cx2, 123.455436941621)
tdh=0.30      Eq(Cx2, 102.047020210893)
tdh=0.35      Eq(Cx2, 86.5920010447672)
tdh=0.40      Eq(Cx2, 75.0197366091305)
tdh=0.45      Eq(Cx2, 66.0798263053544)
tdh=0.50      Eq(Cx2, 58.9899521048037)
tdh=0.55      Eq(Cx2, 53.2422671761248)
tdh=0.60      Eq(Cx2, 48.4955339341224)
tdh=0.65      Eq(Cx2, 44.513249204846)
tdh=0.70      Eq(Cx2, 41.1269410582152)
tdh=0.75      Eq(Cx2, 38.213663519666)
tdh=0.80      Eq(Cx2, 35.6817615569515)
tdh=0.85      Eq(Cx2, 33.4616072291077)
tdh=0.90      Eq(Cx2, 31.4994132984761)
tdh=0.95      Eq(Cx2, 29.7530044350976)

```

FONTE: Os autores (2022)

Figura 31– Resultados de concentração de saída gerados pelo modelo DQO para recirculação de 100%

```

rec= 1.0
tdh=0.00      Eq(Cx2, 512.0)
tdh=0.05      Eq(Cx2, 335.307666678057)
tdh=0.10      Eq(Cx2, 220.744679072283)
tdh=0.15      Eq(Cx2, 154.326766906869)
tdh=0.20      Eq(Cx2, 115.479834859815)
tdh=0.25      Eq(Cx2, 91.2314433290495)
tdh=0.30      Eq(Cx2, 75.0197366091305)
tdh=0.35      Eq(Cx2, 63.5404044984487)
tdh=0.40      Eq(Cx2, 55.0327056139529)
tdh=0.45      Eq(Cx2, 48.4955339341224)
tdh=0.50      Eq(Cx2, 43.3251048101362)
tdh=0.55      Eq(Cx2, 39.1383809195874)
tdh=0.60      Eq(Cx2, 35.6817615569515)
tdh=0.65      Eq(Cx2, 32.7811692280622)
tdh=0.70      Eq(Cx2, 30.3133856829266)
tdh=0.75      Eq(Cx2, 28.1888649672801)
tdh=0.80      Eq(Cx2, 26.3410327277391)
tdh=0.85      Eq(Cx2, 24.7194009162878)
tdh=0.90      Eq(Cx2, 23.285007502075)
tdh=0.95      Eq(Cx2, 22.0073179558082)

```

FONTE: Os autores (2022)

Figura 32– Resultados de concentração de saída gerados pelo modelo DQO para recirculação de 150%

```

rec= 1.5
tdh=0.00      Eq(Cx2, 512.0)
tdh=0.05      Eq(Cx2, 301.014305858859)
tdh=0.10      Eq(Cx2, 182.931975385026)
tdh=0.15      Eq(Cx2, 123.455436941621)
tdh=0.20      Eq(Cx2, 91.2314433290495)
tdh=0.25      Eq(Cx2, 71.7931977213197)
tdh=0.30      Eq(Cx2, 58.9899521048037)
tdh=0.35      Eq(Cx2, 49.982836005475)
tdh=0.40      Eq(Cx2, 43.3251048101362)
tdh=0.45      Eq(Cx2, 38.213663519666)
tdh=0.50      Eq(Cx2, 34.1706132460792)
tdh=0.55      Eq(Cx2, 30.8951110254037)
tdh=0.60      Eq(Cx2, 28.1888649672801)
tdh=0.65      Eq(Cx2, 25.9161094778189)
tdh=0.70      Eq(Cx2, 23.9808764211731)
tdh=0.75      Eq(Cx2, 22.313467211706)
tdh=0.80      Eq(Cx2, 20.8620716474271)
tdh=0.85      Eq(Cx2, 19.5873928230923)
tdh=0.90      Eq(Cx2, 18.4590948420292)
tdh=0.95      Eq(Cx2, 17.4533925933958)

```

FONTE: Os autores (2022)

Figura 33– Resultados de concentração de saída gerados pelo modelo DQO para recirculação de 200%

```

rec= 2.0
tdh=0.00      Eq(Cx2, 512.0)
tdh=0.05      Eq(Cx2, 270.656697679996)
tdh=0.10      Eq(Cx2, 154.326766906869)
tdh=0.15      Eq(Cx2, 102.047020210893)
tdh=0.20      Eq(Cx2, 75.0197366091305)
tdh=0.25      Eq(Cx2, 58.9899521048037)
tdh=0.30      Eq(Cx2, 48.4955339341224)
tdh=0.35      Eq(Cx2, 41.1269410582152)
tdh=0.40      Eq(Cx2, 35.6817615569515)
tdh=0.45      Eq(Cx2, 31.4994132984761)
tdh=0.50      Eq(Cx2, 28.1888649672801)
tdh=0.55      Eq(Cx2, 25.5046051193718)
tdh=0.60      Eq(Cx2, 23.285007502075)
tdh=0.65      Eq(Cx2, 21.4194556567424)
tdh=0.70      Eq(Cx2, 19.8297543742044)
tdh=0.75      Eq(Cx2, 18.4590948420292)
tdh=0.80      Eq(Cx2, 17.2652285298774)
tdh=0.85      Eq(Cx2, 16.2160930988348)
tdh=0.90      Eq(Cx2, 15.2869227808606)
tdh=0.95      Eq(Cx2, 14.4582879484526)

```

FONTE: Os autores (2022)

Com a mesma linguagem em Python para Nitrogênio, mas desta vez com os resultados do modelo de Carbono:

Figura 34– Linguagem no Python para criação do gráfico de consumo de Carbono

```
In [31]: x = np.linspace(0, 1, 100)
# y1= ([54.5, 40.6059958386229, 29.0291097596484, 20.4618770789121, 14.7722373813368, 11.
#      7.2098049424219, 6.07923983302962, 5.24278806144571, 4.60231761846384, 4.0978008
# y2=([54.5, 36.4448984186373, 22.9708572951992, 14.7722373813368, 10.2576005706936, 7.67803571115
for yrec in y:
    plt.plot(tdhgraf, y[yrec], label=f'rec {yrec:.2f}')

plt.xlabel('TDH (h)')
plt.ylabel('C (saída) (mg/L)')

plt.title("consumo de carbono")

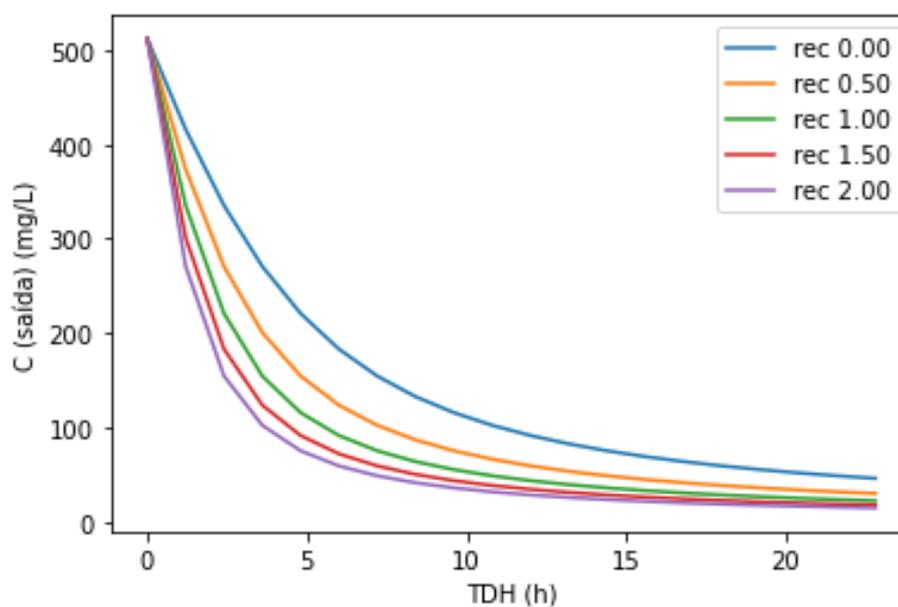
plt.legend()

plt.show()
```

FONTE: Os autores (2022)

Sendo assim, obtemos o seguinte gráfico (2):

Figura 35 - Gráfico (2) gerado em Python de consumo de DQO para diferentes taxas de recirculação



FONTE: Os autores (2022)

6. DISCUSSÃO

6.1 EFICIÊNCIA ALMEJADA

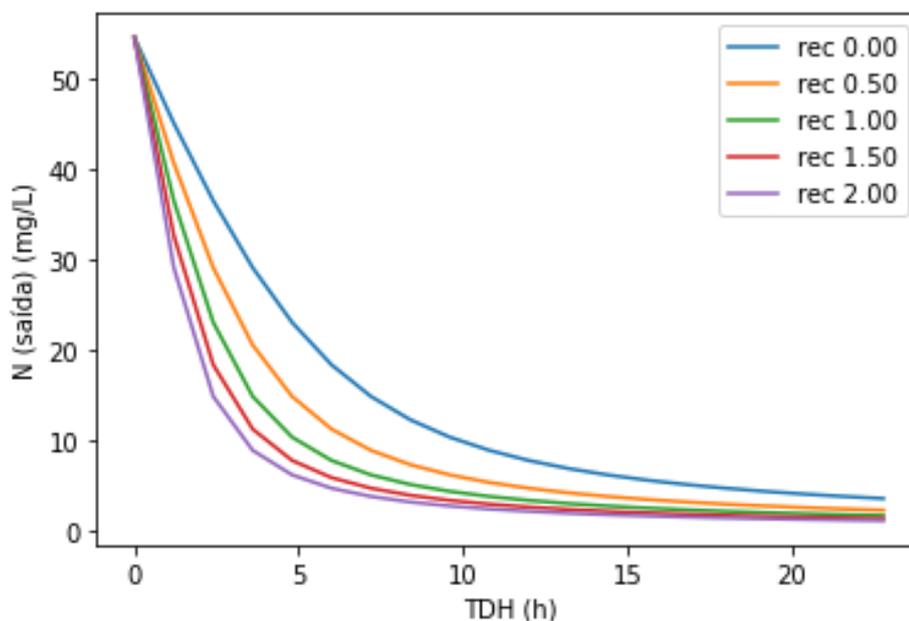
A Resolução CONAMA 430/2011 recomenda uma eficiência de remoção mínima de Carbono e Nitrogênio de 60%, sendo que este limite só poderia ser reduzido caso houvesse um estudo de autodepuração do corpo receptor. Dessa forma, além de comparar com os valores reais de Oliveira (2020) será verificado se foi atingindo valores dentro da literatura do CONAMA.

Os testes realizados por Oliveira (2020) na condição 2, a qual foi escolhida neste trabalho como visto anteriormente, eram verificados após 10 horas com taxa de recirculação de 200%. Seu resultado para NTK foi cerca de 98% de remoção e DQO 80%.

6.2 REMOÇÃO DE NITROGÊNIO

Considerando o Gráfico (1):

Figura 36– Gráfico (1), gerado em Python, de consumo de NKT para diferentes taxas de recirculação



FONTE: Os autores (2022)

Pode-se notar que para as diferentes recirculações estudadas, a recirculação de 0%, ou seja, o modelo mais simples, já conseguiu atingir resultados excelentes para a Resolução do CONAMA em menos de 24 horas. Em um TDH de 0,70 (16,8 h) o modelo já apresentou 90% de remoção de NTK. Essa porcentagem foi encontrada e organizada na Tabela 5 para as demais taxas de recirculação estudadas:

Tabela 5– Alcance de 90% de consumo para NTK

Alcance de 90% de consumo	TDH (horas)
REC 0%	16,8
REC 50%	10,8
REC 100%	8,4
REC 150%	7,2
REC 200%	6

FONTE: Os autores (2022)

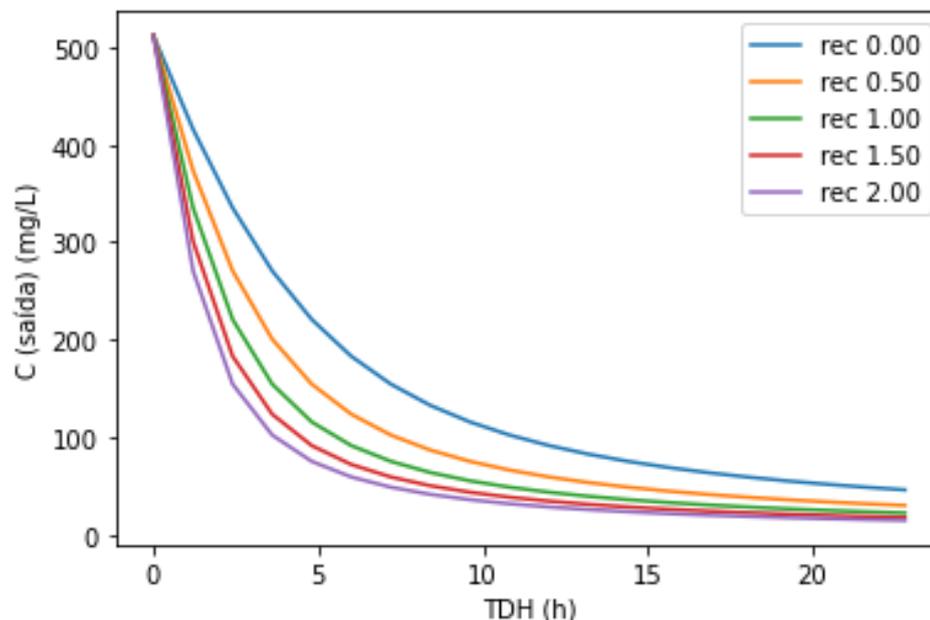
Percebe-se que a partir da recirculação de 100%, e aumentando-se em 50%, o TDH possui uma redução de apenas 1,2h (5%), ou seja, para a cada 50% a mais de recirculação ganha-se apenas 5% de tempo considerando que a eficiência já é de 90%. Então, utilizar-se condições cada vez mais altas e robustas de recirculação, não seria vantajoso levando em consideração que uma recirculação mais simples já atinge resultados muito eficientes em tempo equiparáveis.

Nota-se também, que a recirculação de 200% e TDH de 9,6 h apresentou 93% de remoção, sendo equiparado ao valor de 98% com TDH de 10 h encontrado nos mesmos parâmetros de estudo por Oliveira (2020).

6.3 REMOÇÃO DE CARBONO

Analogamente, considerando o Gráfico (2):

Figura 37 - Gráfico (2) gerado em Python de consumo de DQO para diferentes taxas de recirculação



FONTE: Os autores (2022)

Pode-se notar que para as diferentes recirculações estudadas, a recirculação de 0%, ou seja, o modelo mais simples, também já conseguiu atingir resultados excelentes para a Resolução do CONAMA em menos de 24 horas. Em um TDH de 0,90 (21,6 h) o modelo já apresentou 90% de remoção de Nitrogênio. Essa porcentagem foi encontrada e organizada na Tabela 6 para as restantes recirculação estudadas:

Tabela 6– Alcance de 90% de consumo para DQO

Alcance de 90% de consumo	TDH (horas)
REC 0%	21,6
REC 50%	14,4
REC 100%	10,8
REC 150%	8,4
REC 200%	7,2

FONTE: Os autores (2022)

Percebe-se que diferentemente do NTK, mesmo apresentando um valor de $r_{\text{máx}}$ maior, foi a partir da recirculação de 150%, e aumentando-se em 50%, que o DQO apresentou um TDH com uma redução de apenas 1,2 h (5%). Isso se deve ao fato que as concentrações iniciais de DQO foram quase 10 vezes maiores que NTK, e mesmo dessa forma apresentou resultados equiparáveis. Com isso, nota-se, mais uma vez, que aumentar-se as condições de recirculação não seria vantajoso em consideração que uma recirculação mais simples já atinge resultados muito eficientes em tempo equiparáveis.

Observa-se também, que a recirculação de 200% e TDH de 9,6 h apresentou 93% de remoção, sendo superior ao valor de 80% com TDH de 10 h encontrado nos mesmos parâmetros por Oliveira (2020). Mesmo possuindo essa pequena diferença, podendo ser por motivos de manuseio, diferentes parâmetros cinéticos, entre outros, ambos os valores estão compatíveis e eficientes dentro da literatura.

6.4 COMPARAÇÃO ENTRE NITROGÊNIO E CARBONO

Fazendo a interpretação de ambos os gráficos, levando em consideração o critério de tempo de testes estabelecido por Oliveira (2020) citado anteriormente (TDH = 10 h) e resultados excelentes (90% de consumo) para NTK e DQO, encontra-se o ponto TDH igual a 0,40 (9,6h) na recirculação de 100%. Este ponto base para o modelo considera 92% e 90% de eficiência de consumo para NTK e DQO, respectivamente, podendo servir de parâmetro para modelos e estudos futuros.

7. CONCLUSÃO

Conclui-se neste trabalho que através de um modelo matemático é possível obter resultados coerentes para a resposta de um PBR a perturbações na entrada. Nem sempre aumentar o grau de complexidade do modelo será o melhor caminho para obter respostas satisfatórias, podendo ter apenas uma variação mínima de melhoria para uma exigência muito grande. Averiguou-se que aumentando em 50% o valor de recirculação no reator, a partir de um certo momento, não traria melhorias significativas para o resultado final.

O modelo matemático obtido revela que a taxa de recirculação e TDH adequado para a remoção de Nitrogênio, considerando eficiência excelente de consumo (90%) dentro de um dia, são 0% e 0,70 (16,8 h), respectivamente.

O modelo também evidencia que a taxa de recirculação e TDH apropriado para a remoção de Carbono, para uma eficiência excelente (90%) dentro de um dia, são 0% e 0,90 (21,6h), respectivamente.

O ponto base harmonioso para ambos os substratos estudados, taxa de recirculação 100% e TDH 0,40 (9,6h), é designado pelo modelo, considerando o critério de teste de 10 horas por Oliveira (2020) e eficiência excelente (90%). Este ponto poderá ser utilizado de parâmetros para novos estudos.

Por último, constata-se por meio de comparação com outro estudo base para este trabalho, Oliveira (2020), que o modelo matemático gerado em Python possui proximidade com realidade, sendo possível utilizar futuramente pra diversos fins e novos reatores.

REFERÊNCIAS

- ADEOLA, O. **Nutrient management procedures to enhance environmental conditions: Introduction**, 1999.
- APHA, A. **Standart Methods For The Examination Of Wastewater**, 19th Edition, Washington, USA. 1998.
- BAILEY, J.E. & OLLIS D.F. **Biochemical Engineering Fundamentals**. 2 ed. New York, McGraw-Hill, 1986.
- CHERNICHARO, C. A. L. **Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias: reatores anaeróbios**. Vol. 5. Belo Horizonte: Ed. UFMG, 2007.
- COUTINHO FILHO, U. **Estabilidade de invertase imobilizada em sílica**. Anais do Simpósio Nacional de Fermentação, 2005.
- FOGLER, H.S. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**. 4ª Ed. LTC. Rio de Janeiro. 2009.
- HUILIÑIR, C.; ROMERO, R.; MUÑOZ, C.; BORNHARDT, C.; ROECKEL, M.; ANTILEO, C. Dynamic modeling of partial nitrification in a rotating disk biofilm reactor: Calibration, validation and simulation. **Biochemical Engineering Journal**, 2010.
- IWAI, S.; KITAO, T. **Wastewater treatment with microbial films**. Lancaster: Technomic Publishing Company, 1994.
- LEVENSPIEL, O. **Engenharia das Reações Químicas**. São Paulo: Edgard Blücher, 2000, 3ed.
- LUBBERDING, H.J. **Applied Anaerobic Digestion. International Course on Anaerobic Tratament**. Wageningen Agricultural University / IHE. Wageningen, 1995.
- MAIER, R. M. **Environmental Microbiology**. Amsterdam; Boston: Elsevier/Academic Press, 2000.
- METCALF e EDDY, Inc. **Wastewater Engineering: Treatment and Reuse. McGraw Hill, 4th edition**, p.1819, 2003.
- MÜNCH, E., LANT, P. E KELLER, J. Simultaneous nitrification and denitrification in bech scale sequencing batch reactors. **Water Research**, 1966.
- OLIVEIRA, J.G.B. **Pós Tratamento de Efluente de UASB em reator de leito empacotado com aeração intermitente em escala piloto**. 2020, 70 f. Tese (Doutorado em Ciência e Tecnologia de Alimentos) – Faculdade de Engenharia Civil, Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa 2020
- POCHANA, K. & KELLER, J. Study of factors affecting simultaneous nitrification and denitrification (SND). **Water Science and Technology**, 1999.

TANG, K. Bacteria of the sulphur cycle: An overview of microbiology, biokinetics and their role in petroleum and mining industries. **Biochemical Engineering Journal**, 2009.

VAN HAANDEL, A. C. **Anaerobic Sewage Treatment: Optimization of Process and Physical Design of Anaerobic and Complementary Processes**. London: IWA Publishing, 2019.

VAN HAANDEL, A. C., MARAIS, G. v. R. **O Comportamento do Sistema de Lodo Ativado: Teoria e Aplicações para Projetos e Operações**. Campina Grande: epgraf, 472 p., 1999.

VON SPERLING, M. **Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos**. 3. ed. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, 2005.

VON SPERLING, M. **Lodos ativados**. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, 1997. v. 4.

VON SPERLING, M. **Princípios básicos do tratamento de esgotos**. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, 1996. v. 2.

Y, H.; A, K-H.; L, H-J.; L, K-H.; K, Y-J.; S, K-G. Nitrogen removal from synthetic wastewater by simultaneous nitrification and denitrification (NDS) via nitrite in an intermittently-aerated reactor. **Water Resource**, 1999.

MULCHANDANI, A.; LUONG, J. H. T.; GROOM, C. Substrate inhibition kinetics for microbial growth and synthesis of poly- β -hydroxybutyric acid by *Alcaligenes eutrophus* ATCC 17697. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 30, p. 11-17, 1989.

APÊNDICE A – CÓDIGO EM PYTHON MODELO ETAPA NITROGÊNIO

```

import matplotlib.pyplot as plt
from sympy import *
from sympy.plotting import *
init_printing(pretty_print=True)
import numpy as np
from pprint import pprint

tdh1 = np.arange(0,1,0.05)
tdhgraf= np.arange(0,24,1.2)
rmax1 = 240
Cil= 54.5
Ks1= 12
rec1= np.arange(0,2.5,0.5)
y = dict()

    resolucoes = list()
for rec in rec1:
    print("rec=",rec)
    y[rec] = list()
    for tdh in tdh1:
        print(f"\ttdh={tdh:.2f}")
        eqn1=Eq(tdh,(((rec*Cx1+Cil)/(rec+1))-Cx1) / (rmax1*Cx1/(Cx1+Ks1)))
        solucao = solve(eqn1)[1]
        resolucoes.append(Eq(Cx1, solucao))
        print("\t\t",Eq(Cx1, solucao))
        y[rec].append(float(solucao))

x = np.linspace(0, 1, 100)
# y1= ([54.5, 40.6059958386229, 29.0291097596484, 20.4618770789121,
14.7722373813368, 11.1507521408923, 8.80192534648665,
# 7.2098049424219, 6.07923983302962, 5.24278806144571,
4.60231761846384, 4.09780082567888, 3.69093376342374, 3.35631917289634,
3.07653894102323, 2.83928981686097, 2.63565508063512, 2.45902540440416,
2.30440398673506, 2.16794660276316])

#
y2= ([54.5,36.4448984186373,22.9708572951992,14.7722373813368,10.2576005
706936,7.67803571119502,6.07923983302962,5.01106920644036,4.25356004636
753,3.69093376342374,3.25765902617313,2.91425339569165,2.63565508063512
,2.405249626108,2.2116141829834,2.04664952977099,1.90445983234838,1.780
65463494135,1.67189923733046,1.57561652374871])

for yrec in y:
    plt.plot(tdhgraf, y[yrec], label=f'rec {yrec:.2f}')

plt.xlabel('TDH (h)')
plt.ylabel('N (saída) (mg/L)')

plt.title("Consumo de Nitrogênio")

plt.legend()

plt.show()

```

APÊNDICE B – CÓDIGO EM PYTHON MODELO ETAPA CARBONO

```

tdh2 = np.arange(0,1,0.05)
tdhgraf= np.arange(0,24,1.2)
rmax2 = 3000
Ci2= 512
Ks2= 234
rec2= np.arange(0,2.5,0.5)
y = dict()

resolucoes = list()
for rec in rec1:
    print("rec=",rec)
    y[rec] = list()
    for tdh in tdh2:
        print(f"\ttdh={tdh:.2f}")
        eqn2=Eq(tdh,(((rec*Cx2+Ci2)/(rec+1))-Cx2) / (rmax2*Cx2/(Cx2+Ks2)))
        solucao = solve(eqn2)[1]
        resolucoes.append(Eq(Cx2, solucao))
        print("\t\t",Eq(Cx2, solucao))
        y[rec].append(float(solucao))

for yrec in y:
    plt.plot(tdhgraf, y[yrec], label=f'rec {yrec:.2f}')

plt.xlabel('TDH (h)')
plt.ylabel('C (saída) (mg/L)')

plt.title("consumodecarbono")

plt.legend()

plt.show()

```