

Desenvolvimento de Software de Modelagem Matemática para Sistema de Lodos Ativados: Uma Revisão do *Activated Sludge Model No. 1* (ASM1)

Mateus Iuri Melo Popoff^{1*}, Andressa Gomes Barroso², Livia Maria Z. Passari³

¹Mestrando em Mecânica dos Fluidos Computacional, Universidade de São Paulo, Brasil. (*Autor correspondente: mateuspopoff@gmail.br)

²Mestranda em Ciências da Engenharia Ambiental, Universidade de São Paulo, Brasil.

³Doutora em Química, Universidade Anhembi Morumbi, Brasil.

Histórico do Artigo: Submetido em: 02/02/2023 – Revisado em: 13/03/2023 – Aceito em: 15/04/2023

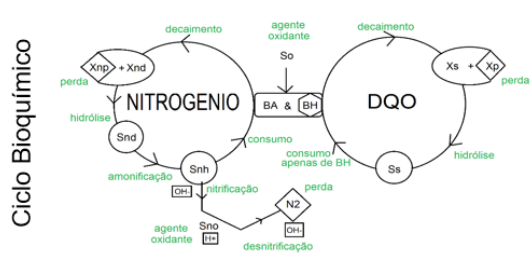
RESUMO

Este artigo apresenta uma revisão bibliográfica do modelo matemático ASM1 e sua aplicação no processo de tratamento pela tecnologia de Lodos Ativados ao utilizar software programado em linguagem Python. O objetivo compreende expor os principais mecanismos desta modelagem e seus parâmetros cinéticos e estequiométricos. É realizada simulação de reator aeróbio, reator anóxico, decantador e sistema de lodos ativados com desnitrificação em que o programa computa o sistema até atingir uma condição de estabilidade. Conclui-se que os resultados estão de acordo com os ciclos biológicos e fluxos de sólidos suspensos apresentados nessa revisão. O software desenvolvido é capaz de representar os principais fenômenos físicos e bioquímicos que ocorrem no sistema selecionado, a fim de otimizar a previsibilidade e o controle dos processos de tratamento de efluentes.

Palavras-Chaves: Modelagem; Tratamento de Esgoto; Sistema de Lodos Ativados; Python; ASM1.

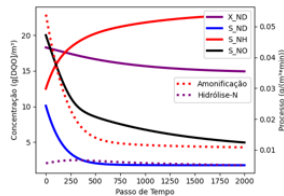
RESUMO GRÁFICO – GRAPHICAL ABSTRACT

Desenvolvimento de Software de Modelagem Matemática para Sistema de Lodos Ativados: Uma Revisão do ASM1

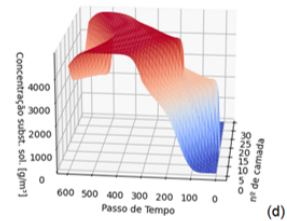
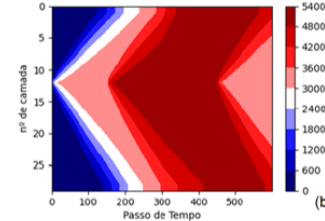
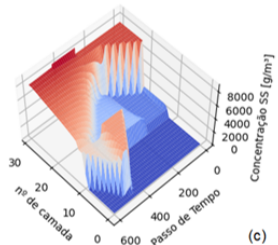
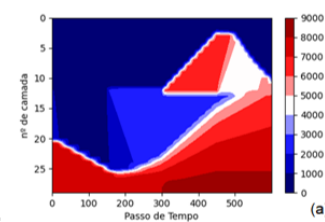


O tratamento de efluentes em combinação com a simulação computacional permite otimizar o processo, examinando os parâmetros físicos, químicos e biológicos e seus respectivos resultados.

Simulação de Aerador



Simulação de Decantador



(+ Código do software para livre acesso)

Popoff, M. I. M., Barroso, A. G., Passari, L. M. Z. (2023). Desenvolvimento de Software de Modelagem Matemática para Sistema de Lodos Ativados: Uma Revisão do *Activated Sludge Model No. 1* (ASM1). *Revista Brasileira de Meio Ambiente*, v.11, n.2, p.140-163.



Development of Mathematical Modelling Software for Activated Sludge System: A Review of ASM1

ABSTRACT

This article presents a bibliographic review of the ASM1 mathematical model and its application in the treatment process using Activated Sludge technology using software programmed in Python language. The objective comprises exposing the main mechanisms of this modelling and its kinetic and stoichiometric parameters. An aerobic reactor, anoxic reactor, decanter and activated sludge system with denitrification are simulated in which the program computes the system until it reaches a stability condition. It is concluded that the results are in accordance with the biological cycles and flows of suspended solids presented in this review. The developed software can represent the main physical and biochemical phenomena that occur in the selected system, in order to optimize the predictability and control of the effluent treatment processes.

Keywords: Modelling; Sewage Treatment; Activated Sludge System; Python; ASM1.

1. Introdução

O tratamento de esgotos é um processo complexo que envolve conhecimentos de física, química e biologia. Além disso, o efluente tratado costuma ser variado de diversas maneiras, seja pela sua taxa do fluxo, como também pela sua composição em combinação com as reações causadas por microrganismos, o que torna esse processo sem linearidade e instável (Serdarevic & Dzibur, 2016). Para se medir a eficiência de uma estação de tratamento de esgoto (ETE), normalmente se avalia a qualidade da água tratada ao final do processo e, caso não atinja um padrão de qualidade considerado aceitável pela legislação, torna-se necessária uma avaliação de todas as etapas de tratamento a fim de se chegar à causa do problema.

Modelos matemáticos são tão antigos quanto a matemática e buscam representar ou descrever um sistema de interesse de forma a se aproximar ao da realidade, para fins de planejamento, operação e manutenção (Ferreira et al., 2013; Henze et al., 2008). Com o advento da tecnologia, os softwares de simulação que usam estes modelos possibilitam testar e aprimorar qualquer projeto que seja apto a se tornar realidade sem ocasionar grandes despesas. Assim, em 1987 surge o “*Activated Sludge Model No. 1*” (Modelo de Lodos Ativados nº 1 – ASM1), capaz de gerar fluxogramas dos mais variados compostos presentes nos esgotos nas estações de tratamento. Outros modelos foram desenvolvidos para ampliar suas aplicabilidades, como o ASM2 e ASM3, que abarcam a remoção de fósforo além da degradação de matéria orgânica, nitrificação e desnitrificação, por exemplo (Langergraber et. al., 2004).

A modelagem do tratamento de efluentes permite otimizar processos, examinando os parâmetros físicos, químicos e biológicos e seus respectivos resultados. Langergraber et. al (2004) afirmam que a simulação dinâmica de ETEs é uma ferramenta usada para obter uma visão detalhada dos sistemas internos, sendo que o potencial de sucesso depende do refinamento dos métodos numéricos e disponibilidade de dados. Esta descrição intencional dos sistemas também requer aprofundamento nos conhecimentos em simulação computacional, sendo que para isso é necessário tanto experiência como guias de estudo (Serdarevic, et al. 2021).

Diante disso, este artigo realiza uma revisão bibliográfica do ASM1 em conjunto com um decantador para ampliar e difundir o conhecimento científico a respeito desse tema. Serão apresentados as variáveis, os coeficientes e a base teórica necessária para sustentar o modelo matemático para o sistema de lodos ativados.

2. Desenvolvimento

2.1 O modelo ASM1

O modelo matemático *Activated Sludge Model No. 1* (ASM1) desenvolvido pela equipe de Henze et. al, (1987) buscou simplificar alguns fenômenos para que a simulação dos reatores biológicos dos sistemas de

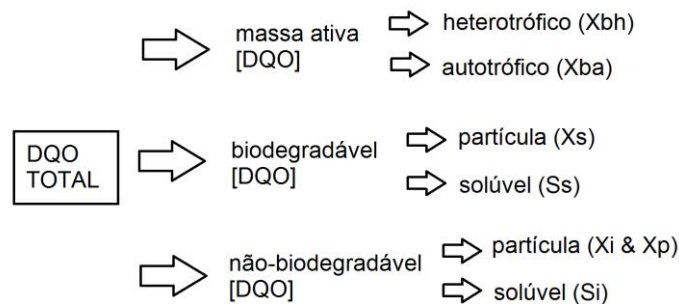
lodos ativados pudesse se tornar prático.

Os processos fundamentais incorporados nos reatores biológicos são: o crescimento e decaimento da biomassa heterotrófica e autotrófica, amonificação dos compostos orgânicos nitrogenados e a ‘hidrólise’ de partículas orgânicas e nitrogenadas contidas nos bioflocos.

Em consequência, o modelo fica restrito a uma série de condições pré-estabelecidas, são elas (Henze et al., 1987): 1) O sistema opera em temperatura constante; 2) O pH é constante e próximo da neutralidade; 3) Todos os reatores possuem uma mistura completa; 4) Todo material lentamente biodegradável é considerado partícula; 5) O processo de hidrólise não requer energia; 6) A hidrólise de matéria orgânica e nitrogênio orgânico são acoplados e ocorrem simultaneamente, com taxas proporcionais; 7) Os parâmetros estequiométricos e cinéticos são constantes; 8) Os efeitos limitantes de nitrogênio, fósforo e outros nutrientes inorgânicos não foram considerados no consumo dos substratos orgânicos e no crescimento bacteriano; 9) A biomassa heterotrófica é homogênea e sua biodiversidade não é considerada; 10) A absorção da matéria orgânica particulada na biomassa ocorre instantaneamente; 11) A hidrólise da matéria orgânica e do nitrogênio orgânico ocorre simultaneamente, em taxas equivalentes; 12) O tipo de acceptor de elétrons presente não afeta o decaimento de biomassa ativa.

A Demanda Química de Oxigênio (DQO) se mostrou a medida mais adequada pois providencia uma equivalência entre substâncias orgânicas biodegradáveis e não-biodegradáveis (Figura 1).

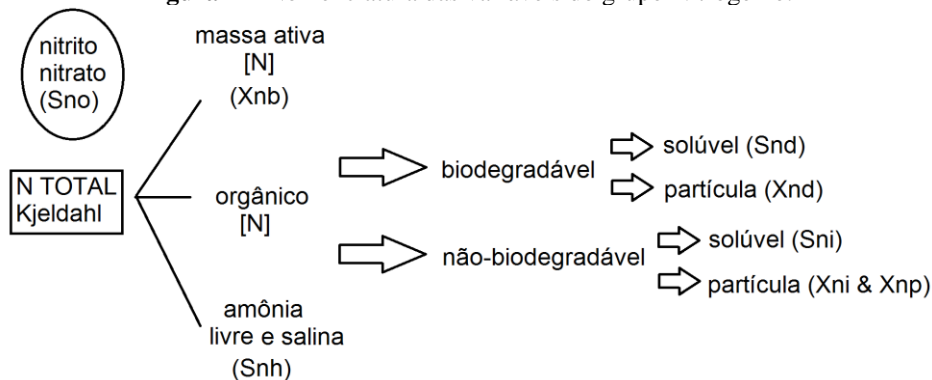
Figura 1 – Nomenclatura das variáveis do grupo DQO.



Fonte: Elaboração própria.

Existem 14 variáveis no modelo e a maioria estão separadas entre DQO ($g[DQO]/m^3$) e Nitrogênio ($g[N]/m^3$), e subdivididas entre partículas (X) e solutos (S), podendo ser, ou não, biodegradáveis, com exceção da alcalinidade, expressa em $mol HCO_3^-/m^3$. A Figura 2 representa a nomenclatura das variáveis do grupo Nitrogênio.

Figura 2 – Nomenclatura das variáveis do grupo Nitrogênio.



Fonte: Elaboração própria.

Jacques-Monod (1949) realizou um estudo sobre a taxa de crescimento populacional que pode ser escrita como uma função que depende da concentração da população de bactérias e substratos. A relação entre a taxa de crescimento exponencial e concentração de nutrientes limitantes é dada através de evidências empíricas por uma relação hiperbólica. Seja a seguinte equação:

$$\frac{S}{(K + S)} \quad (1)$$

Onde: S é a concentração de algum nutriente limitante e K , a constante de meia-saturação.

Quando S tende ao infinito o valor da hipérbole será 1 (um) e quando o nutriente zerar, a equação também zera, isso pode ser interpretado como 100% e 0%. K é conhecido como coeficiente de meia-saturação, o seu valor irá mudar a quantidade necessária de S para que a hipérbole dê 50%, isso é entendido como um parâmetro de sensibilidade para que um processo ocorra na sua velocidade máxima.

Unindo as observações de Monod e Herbert (Henze et al., 1987), criou-se um modelo matemático para descrever a variação de microrganismos em um sistema. A equação elaborada para descrever a variação da concentração de biomassa heterotrófica em um reator aeróbico é a seguinte (Equação 2):

$$\frac{dXbh}{dt} = \mu h \cdot Xbh \cdot \frac{Ss}{Ks + Ss} \cdot \frac{So}{Koh + So} - bh \cdot Xbh \quad (2)$$

Onde: Xbh é a concentração de bactérias heterotróficas, t é o tempo, μh é a taxa de crescimento específico máximo de bactérias heterotróficas, Ss é a concentração de substratos solúveis biodegradáveis, Ks é o coeficiente de meia-saturação de substratos solúveis biodegradáveis para as bactérias heterotróficas, So é a concentração de oxigênio solúvel, Koh é o coeficiente de meia-saturação de oxigênio solúvel para a biomassa heterotrófica e bh é o coeficiente de decaimento para as bactérias heterotróficas.

Conceitualmente, lê-se conforme Equação 3:

$$[acumulação \ de \ biomassa] = [crescimento \ populacional] - [decaimento \ populacional] \quad (3)$$

É sabido que as bactérias heterotróficas aeróbicas dependem de substratos prontamente biodegradáveis (Ss) e de oxigênio dissolvido (So) para crescer enquanto o decaimento é um processo que ocorre independentemente de quaisquer fatores limitantes, conforme premissa 8 (oito) citada anteriormente (Herbert, 1958).

Em reatores anóxicos, apenas uma fração de bactérias heterotróficas são capazes de sobreviver, pois possuem a capacidade de trocar o oxigênio em nitrito ou nitrato como acceptor final de elétrons para respiração celular. Essa fração é representada como o parâmetro de correção de μh para condições anóxicas (ηg) (Henze et al., 1987). Seja Sno , nitrito e nitrato, a equação que representa a variação da concentração dessas bactérias em meios anóxicos é dada por (Equação 4):

$$\frac{dXbh}{dt} = \eta g \cdot \mu h \cdot Xbh \cdot \frac{Ss}{Ks + Ss} \cdot \frac{Koh}{Koh + So} \cdot \frac{Sno}{Kno + Sno} - bh \cdot Xbh \quad (3)$$

Onde: ηg é o fator de correção para o crescimento de bactérias heterotróficas anóxicas, Sno é a concentração de nitrito e nitrato, Kno é o coeficiente de meia-saturação de nitrito e nitrato para as bactérias heterotróficas desnitrificantes.

Uma diferença importante é a hipérbole:

$$\frac{Koh}{(Koh + So)} \quad (4)$$

Distintivamente do que Monod propôs, tal hipérbole serve apenas como uma função indicativa de que o oxigênio está ausente. Ou seja, quando So tende a zero, esta hipérbole recebe o valor 1 (um). Por fim, ao modelar o balanceamento da concentração de bactérias heterotróficas para condições aeróbias, anóxicas e para o decaimento, têm-se a Equação 6 (Henze et al., 1987).

$$\frac{dXbh}{dt} = Xbh \cdot \left(\mu h \cdot \frac{Ss}{Ks + Ss} \cdot \frac{So}{Koh + So} + \eta g \cdot \mu h \cdot \frac{Ss}{Ks + Ss} \cdot \frac{Koh}{Koh + So} \cdot \frac{Sno}{Kno + Sno} - bh \right) \quad (5)$$

Pode-se entender como (Equação 7):

$$[acumulação\ de\ biomassa] = [crescimento\ aeróbio] + [crescimento\ anóxico] - [decaimen] \quad (6)$$

Semelhante é para as bactérias autotróficas, porém estas utilizam da amônia para produzir energia através da respiração aeróbica (Henze et al., 1987). Esta equação é dada por (Equação 8):

$$\frac{dXba}{dt} = \mu a \cdot Xba \cdot \frac{Snh}{Knh + Snh} \cdot \frac{So}{Koa + So} - ba \cdot Xba \quad (7)$$

Onde: Xba é a concentração de bactérias autotróficas, μa é a taxa de crescimento específico máximo de bactérias autotróficas, Snh é a concentração de amônia livre e salina, Knh é o coeficiente de meia-saturação de amônia para as bactérias autotróficas, Koa é o coeficiente de meia-saturação de oxigênio para as bactérias autotróficas e ba é o coeficiente de decaimento para as bactérias autotróficas.

O oxigênio dissolvido (So) foi definido conforme Equação 9. O termo “O2 Controle” que aparece ao final da equação significa a entrada contínua de oxigênio externo através do sistema de aeração. A constante 4.57 representa a demanda de oxigênio teórica associada com a oxidação da amônia como alimento (Henze et al., 1987).

$$\frac{dSo}{dt} = -\frac{1 - Yh}{Yh} \cdot \mu h \cdot Xbh \cdot \frac{Ss}{Ks + Ss} \cdot \frac{So}{Koh + So} - \frac{4.57 - Ya}{Ya} \cdot \mu a \cdot Xba \cdot \frac{Snh}{Knh + Snh} \cdot \frac{So}{Koa + So} + [O_2\ Controle] \quad (8)$$

Onde: Yh representa a produtividade de bactérias heterotróficas e Ya é a produtividade de bactérias autotróficas.

Conceitualmente, pode ser entendido como (Equação 10):

$$\begin{aligned}
 & [\text{acumulação de } O_2] \\
 & = - [\text{consumo de } O_2 \text{ por heterotróficas aeróbias}] \\
 & \quad - [\text{consumo de } O_2 \text{ pelas autotróficas}] + [\text{fontes externas}]
 \end{aligned} \tag{9}$$

Em outras palavras, Y é a parcela da energia produzida pela oxidação do substrato que se transforma em biomassa, enquanto $1 - Y$ é o restante utilizado para outros fins, tal como atividades de sobrevivência. Na equação de dSs/dt o mesmo parâmetro, no formato $1/Y$, representa a quantidade de DQO oxidada necessária para a formação de corpo bacteriano, atrelando a taxa de crescimento populacional para uma perspectiva de consumo da DQO (Henze et al., 1987).

Da mesma forma, é possível conhecer a quantidade de DQO utilizada para produzir a energia de consumo, a qual seja o suficiente para sustentar o fundamental processo de incorporação na biomassa. É isso que significa o fator $(1 - Y)/Y$. O modelo considera que apenas o consumo de energia para atividades bacterianas reduz efetivamente a concentração de oxigênio, enquanto a incorporação de DQO na biomassa, não. Ou seja (Equação 11):

$$[Y] = \frac{[\text{formação de novas células}]}{[\text{DQO oxidada}]} \tag{10}$$

O destino dos restos mortais dos microrganismos foi dividido em duas partes com base na hipótese de morte-regenerativa: as partículas biodegradáveis (Xs) e as não-biodegradáveis (Xp). Uma fração delas é nitrogenada, também divididas entre partículas nitrogenadas biodegradáveis (Xnd) e as não-biodegradáveis (Xnp).

O parâmetro que representa essa repartição é chamado de fração de biomassa que leva a produtos particulados não-biodegradáveis (fp), portanto, a fração que representa a parte biodegradável é calculada por $1 - fp$ (Henze et al., 1987). Portanto Xp e Xs podem ser calculados como (Equações 12 e 14):

$$\frac{dXp}{dt} = fp \cdot bh \cdot Xbh + fp \cdot ba \cdot Xba \tag{11}$$

Onde: Xp são as partículas não-biodegradáveis, fp são os produtos particulados não-biodegradáveis.

Sendo assim, compreende-se a Equação 12 como expresso na Equação 13 (conceitual):

$$\begin{aligned}
 & [\text{acumulação de partículas não biodegradáveis dos produtos endógenos}] \\
 & = [\text{decaimento da população de bactérias heterotróficas}] \\
 & \quad + [\text{decaimento da população de bactérias autotróficas}]
 \end{aligned} \tag{12}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{dXs}{dt} = & (1 - fp) \cdot bh \cdot Xbh + (1 - fp) \cdot ba \cdot Xba - kh \cdot Xbh \cdot \frac{\frac{Xs}{Xbh}}{Kx + \frac{Xs}{Xbh}} \cdot \frac{So}{Koh + So} \\
 & - kh \cdot \eta h \cdot Xbh \cdot \frac{\frac{Xs}{Xbh}}{Kx + \frac{Xs}{Xbh}} \cdot \frac{Koh}{Koh + So} \cdot \frac{Sno}{Kno + Sno}
 \end{aligned} \tag{13}$$

Onde: kh é taxa de hidrólise específica máxima, Kx representa o coeficiente de meia-saturação para a hidrólise de substratos lentamente biodegradáveis e ηh , o fator de correção para hidrólise em condições anóxicas.

Em síntese (Equação 15):

$$\begin{aligned}
 & [\text{acumulação de partículas biodegradáveis}] \\
 & = [\text{decaimento da população de bactérias heterotróficas}] \\
 & + [\text{decaimento da população de bactérias autotróficas}] \\
 & - [\text{hidrólise de partículas biodegradáveis pelas bactérias heterotróficas aeróbias}] \\
 & - [\text{hidrólise de partículas biodegradáveis pelas bactérias heterotróficas anóxicas}]
 \end{aligned} \tag{14}$$

A teoria do bisubstrato distingue os tipos de substratos presentes, os prontamente e lentamente biodegradáveis, enquanto a hidrólise é o mecanismo microbiológico que une a adsorção e síntese que faz a transformação de Xs em Ss . O coeficiente nh é um fator de correção porque a taxa desse processo em ambientes anaeróbios é menor nessas condições, comparado com ambientes aeróbios (Henze et al., 1987).

O termo Xs/Xbh na hipérbole de saturação representa uma proporção entre a disponibilidade de partículas biodegradáveis e da concentração de bactérias heterotróficas. Isso ocorre porque a hidrólise é um processo que depende não só da presença de Xs no tanque, mas da ação das bactérias. A concentração de Xnd (Equação 16) é influenciada pelos mesmos fatores que Xs , pois representa apenas uma fração do seu valor, representada numericamente por ixb , ixp e Xnd/Xs .

$$\begin{aligned}
 \frac{dXnd}{dt} = & (ixb - fp \cdot ixp) \cdot (bh \cdot Xbh + ba \cdot Xba) - kh \cdot Xbh \cdot \frac{Xnd}{Xs} \cdot \frac{\frac{Xs}{Xbh}}{Kx + \frac{Xs}{Xbh}} \\
 & \cdot \left(\frac{So}{Koh + So} + \eta h \cdot \frac{Koh}{Koh + So} \cdot \frac{Sno}{Kno + Sno} \right)
 \end{aligned} \tag{16}$$

Onde: Xnd é a concentração de partículas nitrogenadas biodegradáveis, ixb é a proporção entre a massa de N pela massa de DQO no corpo bacteriano, ixp é a fração nitrogenada nas partículas inertes produzidas pelo decaimento e Xnp é a acumulação de partículas nitrogenadas não-biodegradáveis dos produtos endógenos.

Pode-se entender como (Equação 17):

$$\begin{aligned}
 & [\text{acúmulo de partículas } N \text{ biodegradáveis}] \\
 & = [\text{fração nitrogenada do decaimento da população de} \\
 & \quad \text{bactérias heterotróficas e autotróficas}] \\
 & - [\text{hidrólise de partículas biodegradáveis nitrogenadas} \\
 & \quad \text{pelas bactérias heterotróficas aeróbias e anóxicas}]
 \end{aligned} \tag{17}$$

Esta acumulação de partículas nitrogenadas não-biodegradáveis dos produtos endógenos (Xnp) pode simplesmente ser encontrada (Equação 18), dada que sua fórmula é similar à de Xp (Equação 12), de modo que:

$$\frac{dXnp}{dt} = (fp \cdot ixp) \cdot (bh \cdot Xbh + ba \cdot Xba) \quad (18)$$

Conceitualmente, lê-se (Equação 19):

$$\begin{aligned} & [\text{acumulação de partículas nitrogenadas não biodegradáveis dos produtos endógenos}] \\ & = [\text{decaimento da população de bactérias heterotróficas e autotróficas}] \end{aligned} \quad (19)$$

Os substratos solúveis biodegradáveis são apenas consumidos pelas bactérias heterotróficas (Henze et al., 1987), e sua equação simplificada é dada por (Equação 20):

$$\begin{aligned} \frac{dSs}{dt} = & -\frac{1}{Yh} \cdot \mu h \cdot Xbh \cdot \frac{Ss}{Ks + Ss} \cdot \left(\frac{So}{Koh + So} + \eta g \cdot \frac{Koh}{Koh + So} \cdot \frac{Sno}{Kno + Sno} \right) + kh \\ & \cdot Xbh \cdot \frac{\frac{Xs}{Xbh}}{Kx + \frac{Xs}{Xbh}} \cdot \left(\frac{So}{Koh + So} + \eta g \cdot \frac{Koh}{Koh + So} \cdot \frac{Sno}{Kno + Sno} \right) \end{aligned} \quad (20)$$

Entende-se como (Equação 21):

$$\begin{aligned} & [\text{acumulação de substratos solúveis biodegradáveis}] \\ & = - [\text{consumo de substratos relacionados ao crescimento de} \\ & \quad \text{bactérias heterotróficas aeróbias e anóxicas}] \\ & + [\text{hidrólise de partículas biodegradáveis por bactérias} \\ & \quad \text{heterotróficas aeróbias e anóxicas}] \end{aligned} \quad (21)$$

O parâmetro ka depende da concentração de substratos solúveis biodegradáveis nitrogenados e de bactérias heterotróficas. O termo (Xnd / Xs) , a ser apresentado na Equação 22, representa a proporção entre a produção de DQO e N, uma vez que foi considerado que a hidrólise de DQO e N ocorrem simultaneamente e em taxas proporcionais. Sendo assim, a amonificação feita pelas bactérias heterotróficas é dada pela seguinte equação (Henze et al., 1987):

$$\begin{aligned} \frac{dSnd}{dt} = & -ka \cdot Snd \cdot Xbh + \frac{Xnd}{Xs} \cdot kh \cdot Xbh \cdot \frac{\frac{Xs}{Xbh}}{Kx + \frac{Xs}{Xbh}} \\ & \cdot \left(\frac{So}{Koh + So} + \eta h \cdot \frac{Koh}{Koh + So} \cdot \frac{Sno}{Kno + Sno} \right) \end{aligned} \quad (22)$$

Onde: ka representa a taxa de amonificação.

Ou, conceitualmente (Equação 23):

$$\begin{aligned}
 & [\text{acúmulo de substrato orgânico solúvel biodegradável nitrogenado}] \\
 & = - [\text{amonificação pelas bactérias heterotróficas}] \\
 & + [\text{hidrólise de partículas biodegradáveis nitrogenadas} \\
 & \quad \text{por bactérias heterotróficas aeróbicas e anóxicas}]
 \end{aligned} \quad (23)$$

A amônia livre e salina (S_{nh}) é consumida de duas formas. Pelas bactérias heterotróficas ocorre apenas o seu consumo para incorporação mássica, assim como pelas bactérias autotróficas, mas com a diferença de que estas também utilizam S_{nh} como fonte de energia primária (Henze et al., 1987). A equação a seguir exemplifica isso (Equação 24):

$$\begin{aligned}
 \frac{dS_{nh}}{dt} = & -i_{xb} \cdot \mu_h \cdot X_{bh} \cdot \frac{S_s}{K_s + S_s} \cdot \left(\frac{S_o}{K_{oh} + S_o} + \eta_g \cdot \frac{K_{oh}}{K_{oh} + S_o} \cdot \frac{S_{no}}{K_{no} + S_{no}} \right) \\
 & - \left(i_{xb} + \frac{1}{Y_a} \right) \cdot \mu_a \cdot X_{ba} \cdot \frac{S_{nh}}{K_{nh} + S_{nh}} \cdot \frac{S_o}{K_{oa} + S_o} + k_a \cdot X_{bh} \cdot S_{nd}
 \end{aligned} \quad (24)$$

Em outras palavras (Equação 25):

$$\begin{aligned}
 [\text{acúmulo de amônia}] = & - [\text{incorporação mássica de nitrogênio pelas bactérias} \\
 & \quad \text{heterotróficas e autotróficas relacionada à taxa de crescimento}] \\
 & - [\text{consumo de amônia pelas bactérias autotróficas}] + [\text{taxa de amonificação}]
 \end{aligned} \quad (25)$$

O sentido de $1/Y_a$ é o mesmo de $1/Y_h$ visto para o consumo de S_s pelas bactérias heterotróficas. O nitrito e nitrato (S_{no}) possuem uma capacidade de oxidação menor do que o oxigênio, por isso há um fator de 2.86 presente no seu coeficiente para crescimento anóxico de bactérias heterotróficas (Equação 26), o qual representa a equivalência ao oxigênio (Henze et al., 1987).

$$\begin{aligned}
 \frac{dS_{no}}{dt} = & - \frac{1 - Y_h}{2.86 \cdot Y_h} \cdot \mu_h \cdot \eta_g \cdot X_{bh} \cdot \frac{S_s}{K_s + S_s} \cdot \frac{K_{oh}}{K_{oh} + S_o} \cdot \frac{S_{no}}{K_{no} + S_{no}} + \frac{1}{Y_a} \cdot \mu_a \cdot X_{ba} \\
 & \cdot \frac{S_{nh}}{K_{nh} + S_{nh}} \cdot \frac{S_o}{K_{oa} + S_o}
 \end{aligned} \quad (26)$$

Ou (Equação 27):

$$\begin{aligned}
 & [\text{acúmulo de nitrito e nitrato}] \\
 & = - [\text{crescimento de bactérias heterotróficas anóxicas}] \\
 & + [\text{consumo de amônia pelas bactérias autotróficas}]
 \end{aligned} \quad (27)$$

O valor $1/14$ e 7 (sete) presentes na Equação 28 representam os 7.14 g/m^3 de CaCO_3 destruídos para cada $\text{g[N]}/\text{m}^3$ de nitrito ou nitrato formado, ou amônia oxidada (Searce et al., 1980). A desnitrificação e a amonificação geram a perda de íons H^+ enquanto a incorporação de amônia e o seu consumo produzem íons H^+ (DOLD et al., 1986), se a concentração de S_{alk} , na forma de carbonato de cálcio (CaCO_3) cair por volta de 50 g/m^3 ($1 \text{ mol total alk}/\text{m}^3$ ou $1 \text{ mol HCO}_3/\text{m}^3$), então os valores de pH se tornam instáveis e caem para baixo de 6. Portanto, a alcalinidade (S_{alk}) não representa o pH do reator, mas provê informações sobre a possibilidade de sua mudança (Henze et al., 1987).

$$\frac{dS_{alk}}{dt} = -\frac{ixb}{14} \cdot \left(\mu h \cdot Xbh \cdot \frac{Ss}{Ks + Ss} \cdot \frac{So}{Koh + So} + \mu h \cdot \eta g \cdot Xbh \cdot \frac{Ss}{Ks + Ss} \cdot \frac{Koh}{Koh + So} \right. \\ \cdot \frac{Sno}{Kno + Sno} + \mu a \cdot Xba \cdot \frac{Sno}{Knh + Snh} \cdot \frac{So}{Koa + So} \left. \right) + \frac{1}{14 \cdot 2.86 \cdot Yh} \cdot \mu h \\ \cdot \eta g \cdot Xbh \cdot \frac{Ss}{Ks + Ss} \cdot \frac{Koh}{Koh + So} \cdot \frac{1}{Kno + Sno} - \frac{1}{7 \cdot Ya} \cdot \mu a \cdot Xba \\ \cdot \frac{Sno}{Knh + Snh} \cdot \frac{So}{Koa + So} + \frac{1}{14} \cdot ka \cdot Xbh \cdot Snd \quad (28)$$

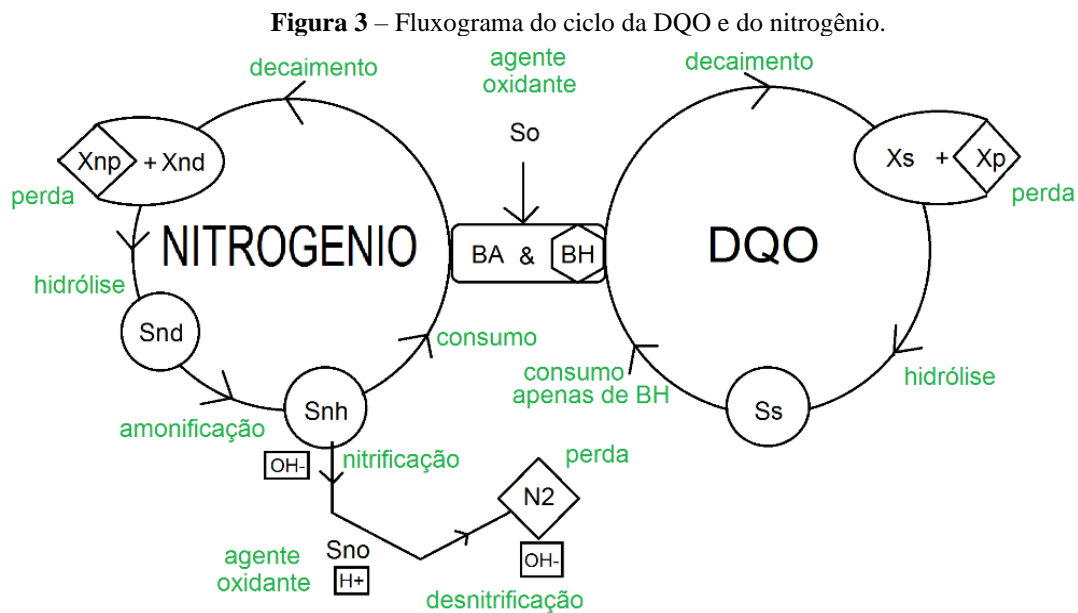
Onde: S_{alk} representa a alcalinidade total.

Em síntese (Equação 29):

[acumulação de alcalinidade]
 = - [incorporação de amônia pelas autotróficas e heterotróficas aeróbias e anóxicas] + [desnitrificação do nitrito e nitrato pelas heterotróficas anóxicas] - [consumo de amônia pelas bactérias autotróficas] + [amonificação] (29)

Por fim, Xi e Si são partículas e solutos inertes, respectivamente, e não possuem nenhuma reação biológica.

Um resumo do ciclo da DQO e do nitrogênio conforme sugerido no modelo se encontra na Figura 3.



Fonte: Elaboração própria.

2.2 O Modelo de Decantador

Decantação é o processo de separação entre líquidos e sólidos suspensos (SS). No processo em que o efluente dos reatores é direcionado para o decantador, é necessário que ocorra a transformação das unidades, de $g[DQO]/m^3$ para $g[SS]/m^3$, que é obtida pela seguinte proporção, conforme Equação 30 (Jeppsson, 1996):

$$xf = 0.9 \cdot (Xbh + Xba) + 0.75 \cdot (Xp + Xi + Xs) \quad (30)$$

Onde: xf é a concentração de sólidos suspensos do efluente dos reatores.

Alguns fatores que influenciam são: temperatura do efluente, morfologia do design, direção do fluxo, variações nos parâmetros de entrada, características do lodo e predadores de bactérias (protozoários) (Jeppsson, 1996).

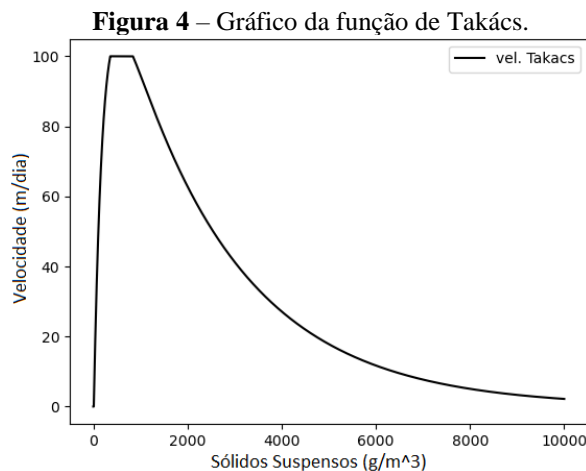
Seguem premissas para viabilizar a construção do simulador de clarificador simplificado: 1) Todas as partículas possuem mesmo tamanho, forma e densidade; 2) A velocidade de decantação depende apenas da concentração de partículas local; 3) A distribuição de partículas em um volume finitesimal é homogênea durante o passo de tempo; 4) O fluxo total de decantação é relativo apenas à taxa de assentamento das partículas do efluente e dos fluxos volumosos de saída, no fundo e no topo do decantador; 5) O Decantador não exibe dispersões verticais na sua entrada; 6) O fundo do decantador representa um limite físico da separação de sólidos e do seu fluxo devido à sedimentação gravitacional ser igual à zero no fundo; 7) Não há reações biológicas significativas afetando a concentração de massas no decantador; 8) As concentrações das variáveis biológicas são distribuídas igualmente nas camadas.

Uma função matemática que descreve o comportamento dos SS nos decantadores, proposta por Takács (1991), foi utilizada na elaboração deste software por permitir não só a representação da zona de adensamento, mas também de incluir a modelagem na zona de clarificação (Equação 31). Sendo:

$$Vs(x) = \max \left(0, \left(V'_0, V_0 \left(e^{-\gamma h(x-x_{min})} - e^{\gamma p(x-x_{min})} \right) \right) \right) \quad (31)$$

Onde: x é a concentração de sólidos suspensos, Vs é a velocidade de sedimentação, V'_0 é a velocidade máxima prática, V_0 é a velocidade máxima teórica, γh é o parâmetro associado com o comportamento da decantação na zona de adensamento, γp é o parâmetro associado com o comportamento da decantação em baixas concentrações de sólidos suspensos, x_{min} é a menor concentração de sólidos suspensos possível que sofre com os efeitos da gravidade.

O aumento excessivo da concentração atrapalha a capacidade de decantação (Figura 4).



Fonte: Elaboração própria.

À medida que se eleva as concentrações, as partículas começam a sedimentar por causa da gravidade, até alcançar uma velocidade máxima.

O fluxo de SS entre as camadas é regido por dois fenômenos: o fluxo de sedimentação gravitacional e o fluxo volumoso. O fluxo gravitacional é causado pela força da gravidade que atua nas partículas suspensas. O fluxo volumoso é aquele correspondente ao movimento do fluido, que carrega os sólidos suspensos. Os fluxos volumosos são calculados conforme Equações 32, 33 e 34:

$$Js(x) = Vs(x) \cdot x \quad (32)$$

$$Jup(x) = Qe \cdot x / A \quad (33)$$

$$Jdn(x) = Qu \cdot x / A \quad (34)$$

Onde: Js representa o fluxo de sedimentação gravitacional, Jup representa o fluxo volumoso de sólidos ascendente, Jdn representa o fluxo volumoso de sólidos descendente, Qe é a vazão ascendente, Qu é a vazão descendente e A é a área de secção transversal.

O comportamento da propagação de substâncias solúveis no decantador é estabelecido apenas pelos fluxos volumosos. Seja a combinação desses dois fluxos em uma única função, conforme Jeppsson (1996) (Equações 35 e 36):

$$f(x) = Js(x) + Jdn(x) \quad (35)$$

$$g(x) = Js(x) - Jup(x) \quad (36)$$

Onde: $f(x)$ é o fluxo na zona de adensamento e $g(x)$ é o fluxo na zona de clarificação.

O método de Godunov (1959) é um método numérico de discretização que respeita a lei da conservação de massa. Esse método, sugerido por Jeppsson, foi utilizado para calcular a relação de fluxo entre as camadas do volume discretizado no decantador. A estrutura é 1D (unidimensional) e os fluxos entre as cada camada são calculadas pelas Equações 37 a 40.

$$F_{i-0.5}^j = \text{se } x_{i-1}^j \leq x_i^j \therefore \min(f(x_i^j), f(x_{i-1}^j)); \text{ se } x_{i-1}^j > x_i^j \therefore \max(f(x_i^j), f(x_{i-1}^j)) \quad (37)$$

$$F_{i+0.5}^j = \text{se } x_i^j \leq x_{i+1}^j \therefore \min(f(x_i^j), f(x_{i+1}^j)); \text{ se } x_i^j > x_{i+1}^j \therefore \max(f(x_i^j), f(x_{i+1}^j)) \quad (38)$$

$$G_{i-0.5}^j = \text{se } x_{i-1}^j \leq x_i^j \therefore \min(g(x_i^j), g(x_{i-1}^j)); \text{ se } x_{i-1}^j > x_i^j \therefore \max(g(x_i^j), g(x_{i-1}^j)) \quad (39)$$

$$G_{i+0.5}^j = \text{se } x_i^j \leq x_{i+1}^j \therefore \min(g(x_i^j), g(x_{i+1}^j)); \text{ se } x_i^j > x_{i+1}^j \therefore \max(g(x_i^j), g(x_{i+1}^j)) \quad (40)$$

Onde: j é a variável referente ao tempo, i é o número da camada, relativo à sua posição, F é o fluxo entre camadas resultante pela aplicação do método de Godunov na zona de adensamento e G é o fluxo entre camadas resultante pela aplicação do mesmo método, na zona de clarificação.

O cálculo usado para definir a concentração de SS em cada camada do decantador são diferentes para cada região. A Equação 41 é referente à zona de clarificação, a Equação 42 se trata da camada “feed”, a qual entra o efluente dos reatores, enquanto a Equação 43 se refere à zona de adensamento.

$$xi^{j+i} = xi^j + \frac{t}{h} (G_{i-0.5}^j - G_{i+0.5}^j) \quad i = 2, 3, \dots, m - 1 \quad (41)$$

$$xm^{j+1} = xm^j + \frac{t}{h} (G_{i-0,5}^j - F_{i+0,5}^j + S^j) \quad i = m \quad (42)$$

$$xi^{j+i} = xi^j + \frac{t}{h} (F_{i-0,5}^j - F_{i+0,5}^j) \quad i = m + 1, m + 2, \dots, n - 1 \quad (43)$$

Onde: t é o passo de tempo, h é a altura da camada, m é o número da camada “feed”.

A entrada de SS a partir do efluente dos reatores na camada “feed” é dada por (Equação 44):

$$S^j = \frac{Qf^j \cdot xf^j}{A} \quad (44)$$

Onde: S é o fluxo de SS que vem do efluente dos reatores, Qf é a vazão do efluente dos reatores, xf é a concentração de SS do efluente dos reatores.

As fronteiras do sistema estão condicionadas à dois eventos importantes. Na parte superior da zona de clarificação, caso a camada do topo tiver a presença de SS, haverá partículas capazes de sair pelo efluente do decantador sem perceber o efeito da gravidade. Na parte inferior da zona de adensamento, caso a camada do fundo tiver um acúmulo excessivo de SS, poderá ser formado um “cobertor de lodo” e impedir a passagem de partículas, resultando no entupimento de todo o decantador. Note que as camadas topo e fundo são respectivamente x_2 e $x_n - 1$. Logo, x_1 e x_n são apenas “camadas imaginárias” para aplicar esses eventos, na parte superior e inferior do decantador, respectivamente. Essas camadas são calculadas em (Equações 45 e 46):

$$xn^{j+1} = se \ x_{n-1}^{j+1} \in [0, xm) \cup (xM, xmax] \therefore x_{n-1}^{j+1}; \ se \ x_{n-1}^{j+1} \in [xm, xM] \therefore xM \quad (45)$$

$$x_1^{j+1} = se \ x_2^{j+1} \in [0, xG) \cup (xg, xmax] \therefore x_2^{j+1}; \ se \ x_2^{j+1} \in [xG, xg] \therefore xG \quad (46)$$

Onde: xm e xM são parâmetros para representar a ocorrência do “cobertor de lodo”, xg e xG são parâmetros para representar a saída de SS que não são tão sensíveis a força da gravidade e $xmax$ é a concentração máxima de SS em uma camada.

O valor de xG serve para simular a saída de SS caso haja sua presença na camada x_2 , devido à insensibilidade de algumas partículas em relação a gravidade. O valor de xm representa o limite de concentração de SS na última camada, para que não se forme um “cobertor de lodo” na zona de adensamento, causando um acúmulo excessivo de lodo em todo o decantado (Jeppsson, 1996).

As Figuras 6 e 7 apontam a localização dos parâmetros xM , xm , xG e xg , que podem ser obtidos pelo método da bissecção. Ressalta-se que $f(xM)$ e $g(xG)$ são mínimos locais (Equações 47 a 50) e assim, $f(xm)$ e $g(xg)$ são:

$$f(xM) = f(xm) \quad (47)$$

$$xM \neq xm \quad (48)$$

$$g(xG) = g(xg) \quad (49)$$

$$xG \neq xg \quad (50)$$

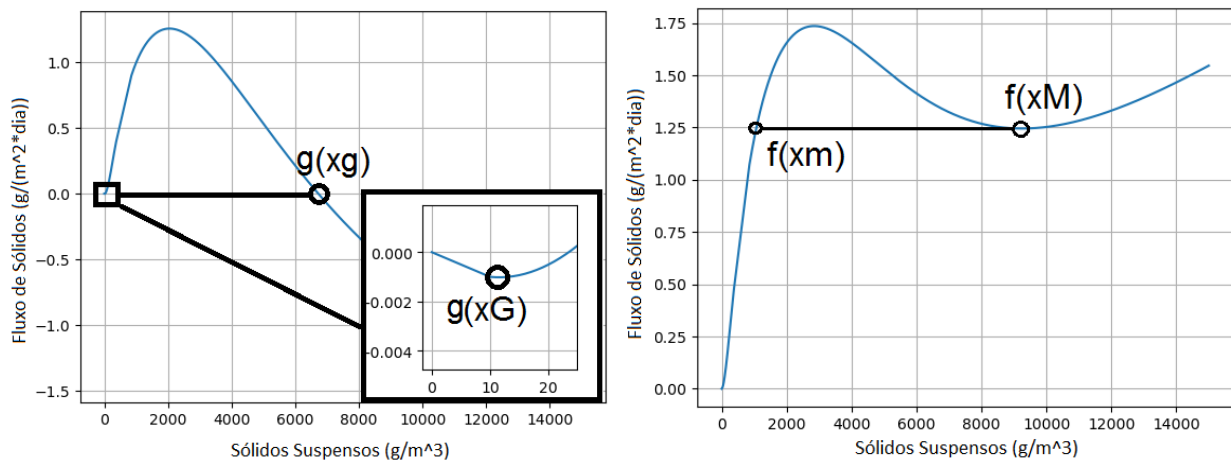
Observa-se que o fluxo de sólidos na Figura 5 toma um sentido inverso ao da gravidade quando a concentração da camada é maior que x_g , significando uma ascensão de SS na zona de clarificação. Sendo assim, as camadas relativas à saída de SS do sistema, ou seja, que estão fora do Decantador, são x_e e x_u , e são calculadas nas Equações 51 e 52 a seguir:

$$x_u^j = x_n^j + x_n^j \cdot Js(x_n^j) \cdot A/Qu \quad (51)$$

$$x_e^j = x_0^j - x_0^j \cdot Js(x_0^j) \cdot A/Qe \quad (52)$$

Onde: x_e é a concentração de SS na camada relativo à saída de SS pela zona de clarificação, enquanto x_u é a concentração de SS na camada que representa a saída de SS através da zona de adensamento.

Figura 5 – Fluxo de sólidos na zona de adensamento com a localização dos parâmetros x_m e x_M (à dir.). Fluxo de sólidos na zona de clarificação com a localização dos parâmetros x_g e x_G (à esq.).



Fonte: Elaboração própria.

A modelagem do lodo de retorno consiste em transformar a concentração de sólidos suspensos nas diversas outras variáveis, que são levadas em conta no ciclo bioquímico. Logo, é necessário calcular o acúmulo de todos os elementos considerados nos reatores, dentro decantador, considerando as suas entradas e saídas. Sendo assim, é possível definir a porcentagem de todas as substâncias bioquímicas presentes no decantador, e, multiplicando pelas concentrações de saída e entradas, dadas por x_u , x_e e x_f , é possível dimensionar o valor correto do fluxo individual de cada substância presente no decantador para as saídas. Vale ressaltar que a propagação de cada componente bioquímico através do decantador não está sendo simulada, mas apenas uma simplificação disso, para solucionar o processo de desempacotamento das variáveis bioquímicas, agrupadas em sólidos suspensos.

O balanço do fluxo de massa no decantador, pode ser obtido pela seguinte equação (Equação 53).

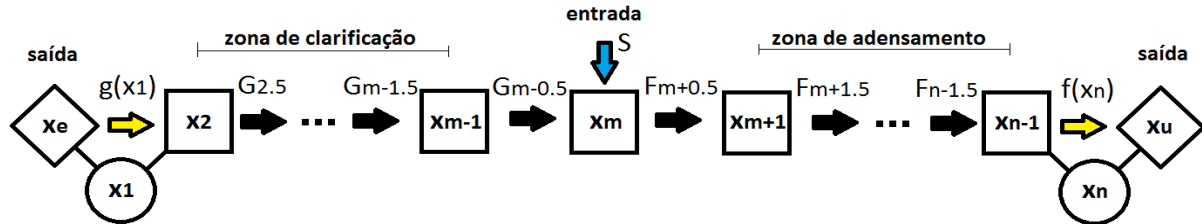
$$x_f \cdot Q_f = x_u \cdot Q_u + x_e \cdot Q_e \quad (53)$$

A propagação de substâncias solúveis no decantador pode ser calculada de forma semelhante. A diferença é que a força gravitacional não atua nesses elementos, assim, o método de Godunov não precisa ser aplicado. O cálculo se trata apenas de um balanço de fluxo em cada camada, com as equações de $Jup(x)$ e

$Jdn(x)$, considerando se é entrada ou saída. Em termos de concentração, basta multiplicar os fluxos pelo tempo e dividir pela altura da camada, tal como são as Equações 41, 42 e 43.

O resumo geral do esquema do decantador é dado pela Figura 7. O sentido das setas é o mesmo que o da gravidade, isso justifica o sinal negativo na equação 23, pois $g(x)$ está apontado para o interior do decantador, enquanto $f(x)$ aponta para fora. Esse sentido é representado pela área positiva no eixo da ordenada da Figura 6.

Figura 6 – Esquema de fluxos e camadas do decantador com base no método de Godunov 1D (unidimensional).



LEGENDA: F_i & G_i : fluxo entre camadas (com Godunov) S : fluxo de sólidos suspensos efluente dos reatores
 $f(x_i)$ & $g(x_i)$: fluxo entre camadas (sem Godunov) i : número relativo à camada, tal que
 x_i : volume finitesimal da concentração de sólidos suspensos $i = e, 1, 2, \dots, m-1, m, m+1, \dots, n-1, n, u$

Fonte: Elaboração própria.

2.3 Aplicação do Modelo

Apoiado nos fundamentos teóricos, foi desenvolvido um software em Python 3.9 para exercitar os conceitos apresentados. Definiu-se quatro modelos diferentes: 1) Reator aeróbio; 2) Reator anóxico; 3) Decantador; 4) Sistema de lodos ativados. Utilizou-se o método de Euler para se calcular as derivadas, em relação ao tempo, dos reatores.

O passo de tempo foi fixado em 60 segundos para cada iteração, diferentemente do que foi proposto por Henze et al. (1987), devido a simplicidade de programação e o intuito desse trabalho. Apesar de perder qualidade da representatividade do software, ainda é possível observar os comportamentos esperados para as substâncias presentes nos reatores.

Os valores dos parâmetros estequiométricos e cinéticos de entrada (Tabela 1 e 2), em todos os modelos, foram obtidos no trabalho de Henze et al. (1987).

Tabela 1 – Valores dos parâmetros cinéticos dos reatores

Parâmetros Cinéticos													
μ_h (1/dia)	b_h (1/dia)	K_s (gDQO/m ³)	K_{oh} (gO ₂ /m ³)	K_{no} (gN/m ³)	μ_a (1/dia)	b_a (1/dia)	K_{oa} (gO ₂ /m ³)	K_{nh} (gN/m ³)	η_g	η_h	k_a (m ³ /gDQOdia)	k_h (1/dia)	K_x (gDQO/gDQO)
4	0.5	20	0.25	0.5	0.879	0.132	0.5	0.741	0.8	0.35	0.08	1.5	0.02

Fonte: Henze et al. (1987).

Tabela 2 – Valores dos parâmetros estequiométricos dos reatores

Parâmetros Estequiométricos				
Y_a (gDQO/gN)	Y_h (gDQO/gDQO)	f_p (gDQO/gDQO)	i_{xb} (gN/gDQO)	i_{xp} (gN/gDQO)
0.24	0.57	0.1	0.07	0.06

Fonte: Henze et al. (1987).

Os valores de entrada foram embasados nos trabalhos de Henze et al. (1987) e Jeppsson (1996), mas foram feitas alterações necessárias para poder demonstrar o comportamento nos experimentos avaliados. Ressalta-se que nos reatores aeróbios, tanto no primeiro, como no quarto modelo, o oxigênio (*So*) foi aplicado em cada iteração com a fonte externa igual a 2, vista pela Equação 10. Os dados de entrada e saída do primeiro modelo se encontram na Tabela 3, o volume do reator aeróbio é de 1000 m³ e vazão de 1000 m³/dia, além disso, houve 800 iterações para gerar os resultados abaixo.

Tabela 3 – Dados de entrada e de saída do primeiro modelo.

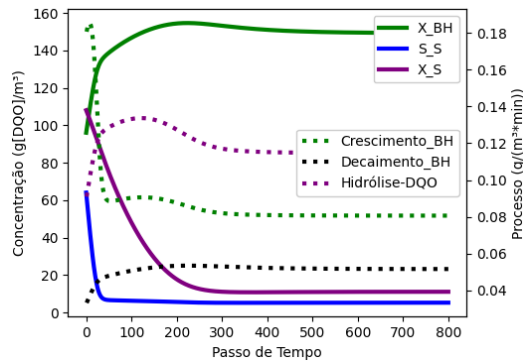
Valores de Entrada												
<i>Salk</i> (molHCO ₃ /m ³)	<i>Si</i> (gDQO/m ³)	<i>Snd</i> (gN/m ³)	<i>Snh</i> (gN/m ³)	<i>Sno</i> (gN/m ³)	<i>So</i> (gO ₂ /m ³)	<i>Ss</i> (gDQO/m ³)	<i>Xba</i> (gDQO/m ³)	<i>Xbh</i> (gDQO/m ³)	<i>Xi</i> (gDQO/m ³)	<i>Xnd</i> (gN/m ³)	<i>Xp</i> (gDQO/m ³)	<i>Xs</i> (gDQO/m ³)
6	40	10.1	12.5	10	0	64	5	96	40	18.28	0	108
Valores de Saída												
3.96	40	2.41	6.75	32.7	0.61	5.22	9.9	149.24	40	1.42	7.56	11.05

Fonte: Elaboração própria.

As Figuras 7 e 8 se referem ao primeiro modelo, e demonstram a relação entre as suas principais variáveis. A Figura 7, apresenta todas as substâncias e processos presentes no ciclo da DQO. Nota-se o rápido consumo de substâncias solúveis biodegradáveis (*Ss*) associado ao crescimento igualmente acentuado de bactérias heterotróficas (*Xbh*) e no alto valor do processo de crescimento de *Xbh* no início do gráfico. À medida que a concentração de *Ss* diminui, o processo de hidrólise de DQO conseqüentemente aumenta, resultando na queda gradual da concentração de partículas biodegradáveis (*Xs*), que sustenta o crescimento de *Xbh*.

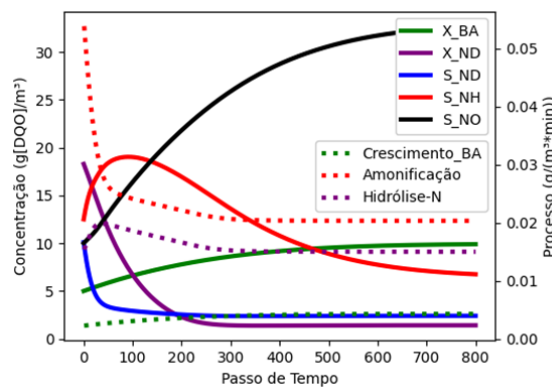
Além disso, o decaimento de *Xbh* aumenta proporcionalmente com a própria concentração de *Xbh*. A Figura 8 demonstra parcialmente o ciclo do nitrogênio, através da amonificação e nitrificação. Ocorre acentuada queda na concentração de substâncias solúveis biodegradáveis nitrogenadas (*Snd*) pois o processo de amonificação é maior do que a hidrólise de partículas nitrogenadas. Em outras palavras, o consumo de *Snd* é maior do que a sua produção. Como há uma concentração expressiva de bactérias autotróficas (*Xba*), o processo de nitrificação é visível, pois a amônia (*Snh*) se transforma continuamente em nitrito e nitrato (*Sno*), conforme a população de *Xba* aumenta. A queda gradual de partículas biodegradáveis nitrogenadas (*Xnd*) é conseqüência da hidrólise. A alcalinidade (*Salk*) está acima de 1, indicando uma estabilidade no pH.

Figura 7 – Ciclo DQO no reator aeróbio.



Fonte: Elaboração própria.

Figura 8 – Ciclo N no reator aeróbio.



Fonte: Elaboração própria.

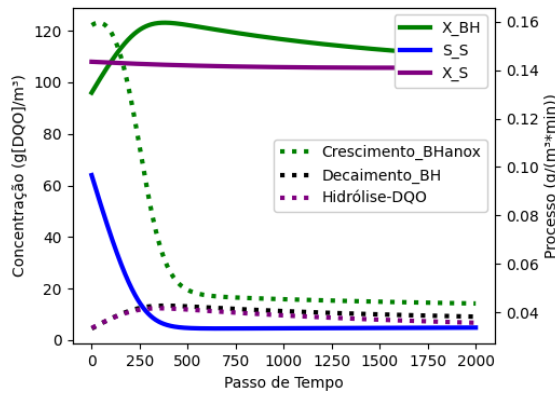
O segundo modelo é do reator anóxico, os resultados são apresentados pela Tabela 4, Figura 9 e 10, e foram gerados após 2000 iterações. O reator possui 1000 m³ e possui uma vazão de entrada igual a 1000 m³/dia. A desnitrificação ocorre nesses reatores, tal que é possível observar a redução da concentração de *Sno* no final da simulação, indicando êxito na remoção de N. Contudo, os processos de hidrólise de DQO e N, e do crescimento populacional de *Xbh*, são menores em comparação ao primeiro modelo. Uma vantagem disso é que o reator anóxico é menos suscetível ao crescimento excessivo de *Xbh*, porém, é ineficaz na remoção de DQO e de material particulado no sistema. Além disso, a ausência de *Xba* permite ao acúmulo de *Snh* no reator, pois assim, não há nitrificação.

Tabela 4 – Dados de entrada e de saída do segundo modelo.

Valores de Entrada												
<i>Salk</i>	<i>Si</i>	<i>Snd</i>	<i>Snh</i>	<i>Sno</i>	<i>So</i>	<i>Ss</i>	<i>Xba</i>	<i>Xbh</i>	<i>Xi</i>	<i>Xnd</i>	<i>Xp</i>	<i>Xs</i>
(molHCO ₃ /m ³)	(gDQO/m ³)	(gN/m ³)	(gN/m ³)	(gN/m ³)	(gO ₂ /m ³)	(gDQO/m ³)	(gDQO/m ³)	(gDQO/m ³)	(gDQO/m ³)	(gN/m ³)	(gDQO/m ³)	(gDQO/m ³)
6	40	10.1	12.5	20	0	64	0	96	40	18.28	0	108
Valores de Saída												
7.82	40	1.77	22.9	5	0	4.8	0	110.1	40	14.93	4.3	105.72

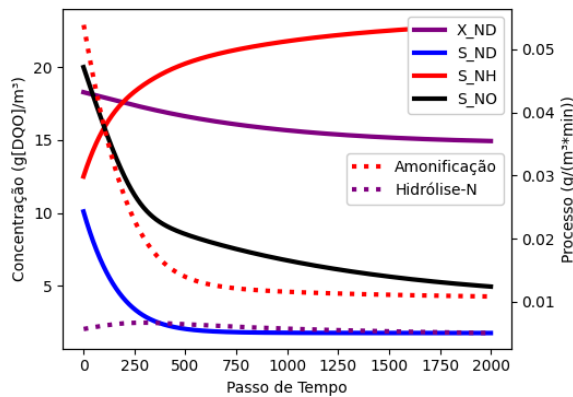
Fonte: Elaboração própria.

Figura 9 – Ciclo DQO no reator anóxico.



Fonte: Elaboração própria.

Figura 10 – Desnitrificação no reator anóxico.



Fonte: Elaboração própria.

A seguir, é dado os parâmetros do decantador, que foram retirados do trabalho de Jeppsson (1996) conforme a Tabela 5, utilizado no terceiro e quarto modelo. A Tabela 6 apresenta as dimensões do decantador utilizado no terceiro caso.

Tabela 5 – Parâmetros do decantador

Parâmetros do decantador				
V_o (m/dia)	V'_o (m/dia)	γ_p (m³/g)	γ_h (m³/g)	X_{min} (mg/l)
145	100	0.005	0.00042	10

Fonte: Jeppsson (1996).

Tabela 6 – Dimensões do decantador do terceiro modelo

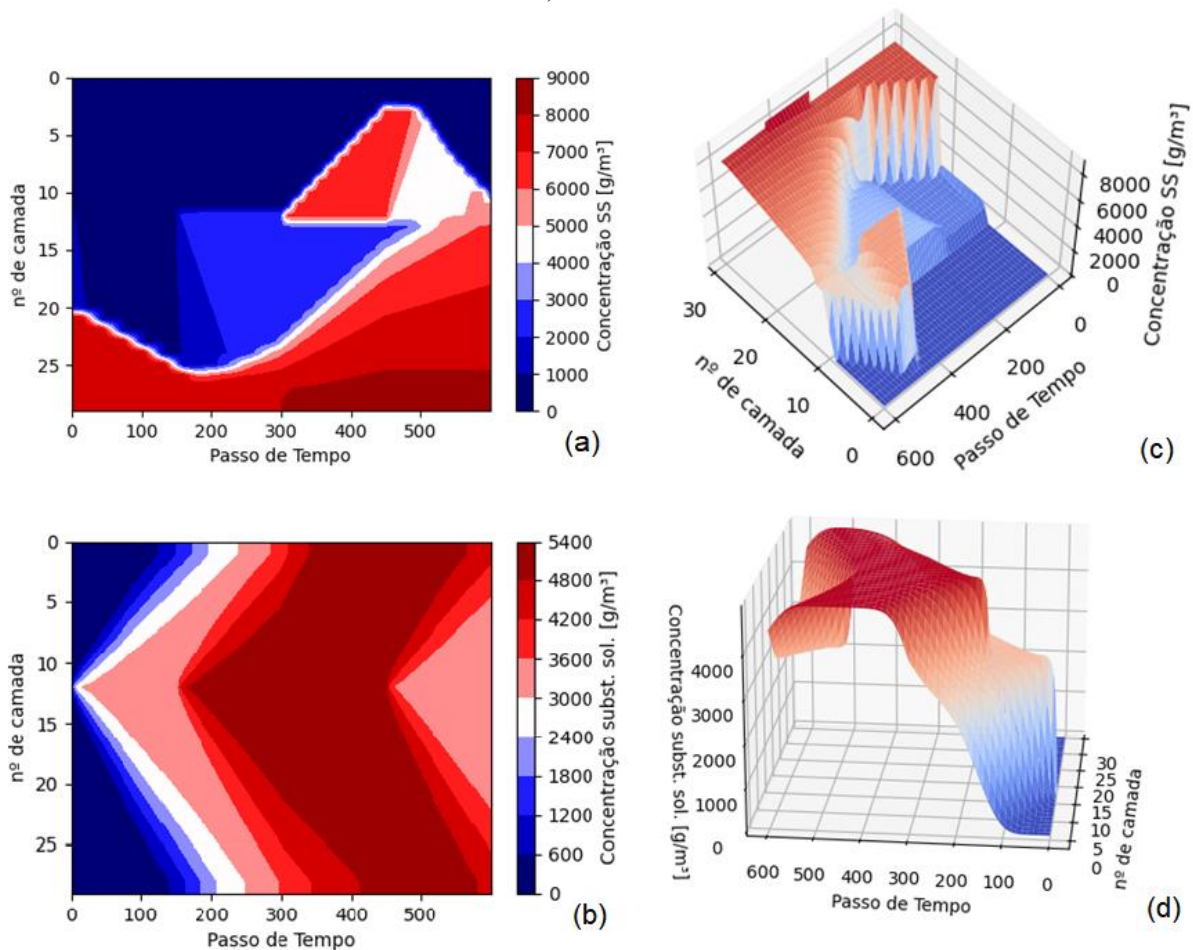
Dimensões do decantador					
Área (A) (m²)	Altura (H) (m)	Altura entrada (m)	Q_u (%Qf)	Q_e (%Qf)	Nº Camadas
200	3	1.8	55.6%	44.4%	30

Fonte: Elaboração própria.

A Figura 11 representa os resultados do terceiro modelo, o decantador. Os 600 passos de tempo foram divididos igualmente em quatro etapas nas quais há variação na entrada, tanto na concentração de sólidos suspensos (x_f), quanto na vazão (Q_f) e na concentração de substâncias solúveis (s_f). Em primeiro momento, Q_f é igual a 180 m³/h, x_f é 4766 g/m³ e s_f é 3246.15 g/m³. Após 150 passos de tempo, altera-se o valor de x_f para 7339.64 g/m³ e s_f por 4999.07 g/m³. Em seguida, depois de 300 passos de tempo, a vazão de entrada Q_f aumenta para 240 m³/h, alterando-se também os valores de x_M e x_m , iguais à 8860 g/m³ e 1192 g/m³ respectivamente, além disso, toda a vazão excedente é direcionada para a zona de clarificação do decantador, tal que x_G e x_g alteram-se para 20.13 g/m³ e 4829 g/m³.

Como condição inicial, a zona de adensamento é dividida em duas partes, o lado superior inicia com uma concentração de S.S. de 1558 g/m³, enquanto o lado inferior possui 7974 g/m³ em suas camadas, relativo aos valores de x_M e x_m no início da simulação. Por fim, depois de 450 passos de tempo se retorna às condições da primeira etapa. Como condição inicial, a zona de adensamento é dividida em duas partes, o lado superior inicia com uma concentração de S.S. de 1558 g/m³, enquanto o lado inferior possui 7974 g/m³ em suas camadas, relativo aos valores de x_M e x_m no início da simulação.

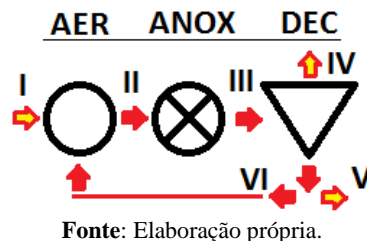
Figura 11 – Distribuição de sólidos suspensos (a – vista superior e b – 3D) e substâncias solúveis (c– vista superior e d – 3D) no decantador.



Fonte: Elaboração própria.

O quarto modelo é o sistema de lodos ativados, que consiste em um reator aeróbio, seguido de um reator anóxico com um decantador com fluxo de retorno no final (Figura 12).

Figura 12 – Fluxograma do sistema de lodos ativados e dos fluxos de vazão.



O balanço de massa das vazões nesse sistema é dado por $I = IV + V$ e $II = III = I + VI$, logo, é necessário determinar os valores de I , VI , e a porcentagem de saída entre IV e V . Nesse modelo, a proporção entre IV e V é de 50% cada um, conforme apresenta a Tabela 6, dados por Q_e e Q_w respectivamente. A vazão I e VI é de 800 m³/dia e 300 m³/dia respectivamente, tal que a vazão VI é representada por Q_r na tabela. O reator aeróbio e anóxico possuem 500 m³ e 1000 m³ cada. Os parâmetros estequiométricos, cinéticos e do decantador, são os mesmos que nos casos anteriores. Os valores iniciais de entrada são através da vazão I . Portanto, o resultado após 20000 iterações, é comparado com os valores de entrada na Tabela 7.

Tabela 6 – Dimensões do decantador do quarto modelo

Dimensões do decantador						
Área (A) (m ²)	Altura (H) (m)	Altura entrada (m)	Q_w (% Q_f)	Q_e (% Q_f)	Q_r (m ³ /dia)	Nº Camadas
300	3.35	1.8	50%	50%	300	30

Fonte: Elaboração própria.

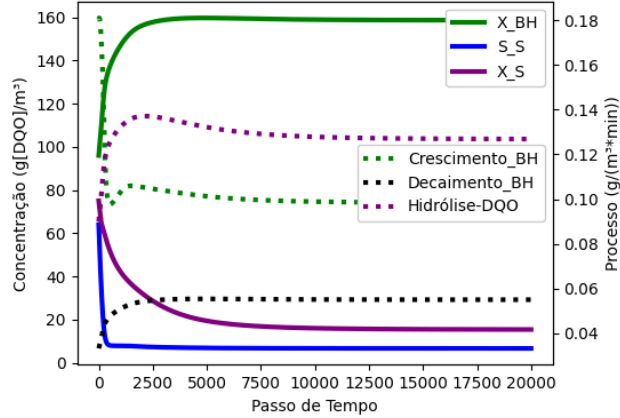
Tabela 7 – Dados de entrada e de saída do quarto modelo.

Valores de Entrada												
$Salk$ (molHCO ₃ /m ³)	S_i (gDQO/m ³)	S_{nd} (gN/m ³)	S_{nh} (gN/m ³)	S_{no} (gN/m ³)	S_o (gO ₂ /m ³)	S_s (gDQO/m ³)	X_{ba} (gDQO/m ³)	X_{bh} (gDQO/m ³)	X_i (gDQO/m ³)	X_{nd} (gN/m ³)	X_p (gDQO/m ³)	X_s (gDQO/m ³)
6	40	10.1	7.5	5	0	64	2	96	40	18.28	0	75
Valores de Saída (no fundo do decantador)												
7.52	40	0.68	24.8	1.08	0.007	4.8	5.6	199.7	79.9	3.8	25.9	41.2

Fonte: Elaboração própria.

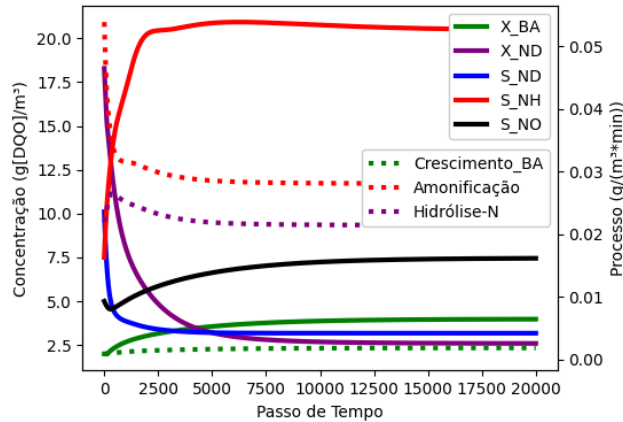
Esse resultado demonstra que o sistema é capaz de realizar remoção de DQO e desnitrificação e é expresso em mais detalhes pelas Figuras 13, 14, 15, 16 e 17.

Figura 13 – Ciclo DQO no reator aeróbio.



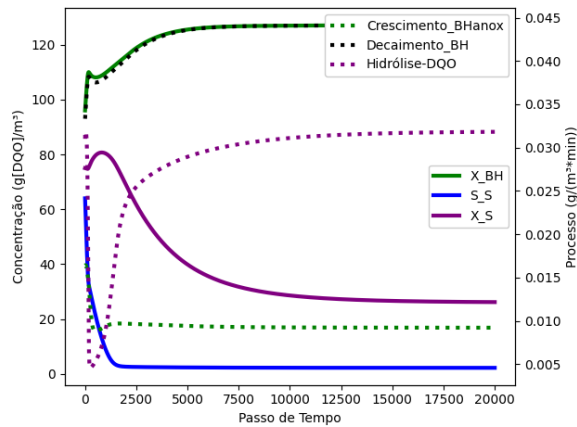
Fonte: Elaboração própria.

Figura 14 – Nitrificação no reator aeróbio.



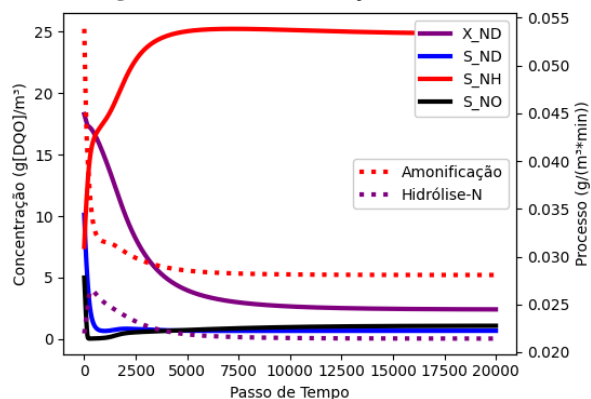
Fonte: Elaboração própria.

Figura 15 – Ciclo DQO no reator anóxico



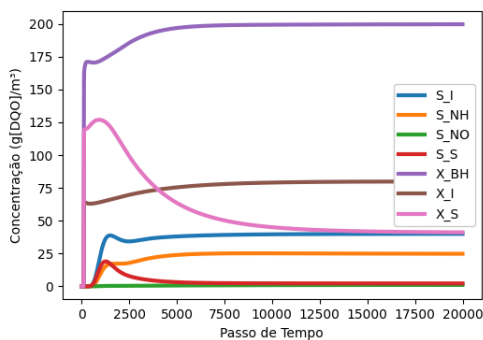
Fonte: Elaboração própria.

Figura 16 – Desnitrificação no reator anóxico



Fonte: Elaboração própria.

Figura 17 – Concentração dos componentes biológicos na saída inferior do decantador



Fonte: Elaboração própria.

Não houve SS na zona de clarificação, apenas as substâncias solúveis que saem junto com o fluxo volumétrico, sendo assim, toda a DQO presente em estado sólido foi retida pelo sistema. A concentração total de DQO particulado é elevada devido ao lodo de recirculação, conforme indica o aumento na concentração de partículas inertes (X_i), uma vez que não reagem com os reatores. O decaimento de X_{bh} eleva os níveis de partículas não-biodegradáveis (X_p) e alimenta a concentração de X_s .

O sistema apresenta um alto desempenho na desnitrificação, no reator anóxico, mesmo apesar da nitrificação no reator aeróbio. A concentração de amônia (S_{nh}) aumentou porque a população de bactérias autotróficas não é suficiente para sustentar uma nitrificação maior do que o processo de amonificação. A alcalinidade (S_{alk}) mantém valores superiores a 1, indicando uma estabilidade do pH. A Figura 18 apresenta a concentração de alguns componentes biológicos presentes na saída inferior do decantador. É possível observar que no início não há presença de substância alguma, isso ocorre devido ao tempo que demora para as partículas e solutos alcançarem o fundo do decantador. Note que as partículas alcançam a fronteira do decantador antes das substâncias solúveis.

Sendo assim, os resultados exemplares dos reatores aeróbio e anóxico demonstram como a metodologia abordada é capaz de fornecer informações detalhadas para se avaliar o tratamento do efluente. Havendo um influente característico, o ASM1 é uma ferramenta que ajuda no dimensionamento dos reatores. É necessário realizar múltiplas simulações com diferentes proporções entre vazão de entrada e volume do reator, para atingir uma configuração otimizada relativo a um conjunto de valores de entrada. O modelo de decantador também se enquadra nessa perspectiva, ao considerar também a área de seção transversal e as

vazões de fluxo ascendente e descendente como parâmetros dimensionais.

A avaliação do sistema de lodos ativados completa é mais complexa, porque qualquer mudança nos parâmetros dimensionais influencia no desempenho de todo o sistema. Ou seja, se um parâmetro for alterado em algum reator, ou decantador, o resultado será diferente mesmo que todo o resto se mantenha igual. Nesse caso, é mais importante avaliar o sistema como um todo do que cada componente que o integra, com o foco nos valores de entrada e saída. A ineficiência da redução da DQO pode ser resolvida através de modificações nos reatores, principalmente aeróbios. Já problemas de nitrificação exigirão um melhor desempenho do reator anóxico. Evitar a formação de cobertor de lodo necessita de atenção nos processos de hidrólise dos reatores e na vazão de retorno do decantador, no intuito de diminuir a quantidade de sólidos suspensos do sistema.

3. Conclusão

Conclui-se que os resultados obtidos pela simulação estão de acordo com os ciclos bioquímicos e com a dinâmica de fluxos de sólidos suspensos apresentados. Tais previsões harmonizam com o que é discutido na literatura presente na bibliografia consultada, porém, sem a realização de comparativos do programa com softwares mais sofisticados, ou outra forma de validação. No entanto, este simulador em linguagem Python tem potencial para se tornar uma ferramenta capaz de avaliar o comportamento dos elementos presentes em uma ETE de forma assertiva e rápida, com inúmeras possibilidades de configuração. Através dele é possível planejar e otimizar a remoção de DQO e nitrogênio, além de prever e evitar problemas, como a formação do cobertor de lodo no fundo do Decantador, ou a queda excessiva da população de microrganismos nos reatores. É válido ressaltar que o uso correto desta ferramenta poderá ser especialmente útil para contribuir com a preservação dos corpos hídricos e do meio ambiente.

4. Apêndice

O código desta simulação encontra-se disponível em:

<https://github.com/mateuspopoff/Modelo-Lodos-Ativados>

5. Referências

Dold, P. L. & Marais, G. V. R. (1986). Evaluation of the general activated sludge model proposed by IAWPRC task group. **Water Science Technology**, 18(6), 63-89.

Ferreira, G., P.; Silveira, A.; Silva, L. A. da. A Modelagem Matemática ao longo da História e o surgimento da modelação no Brasil. In: **Encontro Nacional de Educação Matemática**, 11., 2013, Curitiba. Anais do XI Encontro Nacional de Educação Matemática. Curitiba: 2013.

Godunov, S.K. (1959). **A Finite Difference Method for the Numerical Computations of Discontinuous Solutions of the Equations of Fluid Dynamics**. Mat. Sb., pp. 271-290.

Henze, M.; Grady, Jr. C.P.L.; Gujer, W.; Marais, G.V.R. & Matsuo, T. (1987). **Activated Sludge Model No. 1**. IAWQ Scientific and Technical Report No. 1, IAWQ, London, Great Britain 1987.

Herbert, D. (1958). Some principles of continuous culture. Recent Progress in Microbiology, G. Tuneval (Ed.). **Almquist and Wiksell**, Stock-holm, pp 381-396.

Jeppsson, U. (2012). **Modelling Aspects of Wastewater Treatment Processes**. Department of Industrial

Electrical Engineering and Automation (IEA) & Lund Institute of Technology (LTH). 427 p.

Monod, J. (1949). The growth of bacterial cultures. **Annual Review of Microbiology**. 3: 371–394.

Scarce, S. N.; Benninger, R. W.; Weber, A. S. & Sherrard, J. H. Prediction of Alkalinity Changes in the Activated Sludge Process. **Journal (Water Pollution Control Federation)**. Vol. 52, No. 2 (Feb., 1980), pp. 399-405 (7 pages).

Serdarevic, Amra; Dzibur, Alma. Wastewater process modeling. **Coupled systems mechanics**, v. 5, n. 1, p. 21-39, 2016.

Takács, I.; Patry, G.G. & Nolasco, D. (1991). A Dynamic Model of the Clarification-Thickening Process. **Wat. Res.**, vol. 25, no. 10, pp. 1263-1271.

Venners, B. (2003). **The Making of Python: A Conversation with Guido van Rossum, Part I**. Artima Developer.