

II-255 – MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE UM REATOR BIOLÓGICO OPERANDO EM BATELADA UTILIZANDO O MODELO CINÉTICO DE CONTOIS

Flávia Lima Cordeiro de Moura⁽¹⁾

Graduanda em Engenharia Sanitária e Ambiental pela Universidade Estadual da Paraíba.

Laíse Alves Candido

Graduanda em Engenharia Sanitária e Ambiental pela Universidade Estadual da Paraíba.

Antônio Henrique Araújo Costa

Engenheiro Sanitarista e Ambiental pela Universidade Estadual da Paraíba. Mestrando em Engenharia Urbana e Ambiental Universidade Federal da Paraíba.

Maria Gorethe de Sousa Lima

Engenheira Química pela Universidade Federal da Paraíba. Mestre em Engenharia Civil pela Universidade Federal da Paraíba. Doutora em Engenharia de Processos pela Universidade Federal de Campina Grande. Professora da Universidade Federal do Ceará.

Lenilson Sergio Candido

Graduado em Licenciatura Plena em Matemática pela Universidade Estadual da Paraíba. Mestre em Desenvolvimento Regional e Meio Ambiente pela Universidade Federal de Rondônia. Doutorando Interinstitucional em Educação Matemática (DINTER) pelas Universidades Estadual Paulista e Federal de Rondônia. Professor da Universidade Federal de Rondônia.

Endereço⁽¹⁾: Rua José Francisco Sobrinho, 254 - Centenário – Campina Grande - PB - CEP: 58428-140 - Brasil - Tel: (83) 3341-6325 - e-mail: flavialcmoura@gmail.com

RESUMO

O presente trabalho tem como objetivo principal avaliar o comportamento da concentração de substrato, biomassa e produto dentro de um reator biológico operando em batelada, frente a diferentes concentrações iniciais de biomassa e substrato, diferentes fatores de conversão de substrato em biomassa e considerando a velocidade específica de formação do produto parcialmente associada à velocidade específica de crescimento. Para tal, utilizou-se a simulação matemática, através do SCILAB 5.2.2, considerando o modelo cinético de Contois. Variou-se as concentrações iniciais de biomassa (2g/l e 4g/l) e substrato (25 g/l e 50 g/l), assim como o rendimento de conversão de substrato em biomassa (0,5 e 0,8). Verificou-se maior eficiência no consumo de substrato, com menor geração de biomassa e de produto quando utilizadas as concentrações iniciais de biomassa e de substrato de 4 g/l e 50 g/l, respectivamente, e rendimento de conversão de substrato em biomassa de 0,5, sendo estas as melhores condições para operação de biorreator no tratamento de esgoto sanitário, quando utilizada a formação do produto parcialmente associada à velocidade específica de crescimento.

PALAVRAS-CHAVE: Reator Biológico, Modelo Cinético, Modelagem Matemática, Simulação Computacional, Tratamento de Esgoto.

INTRODUÇÃO

O tratamento dos principais poluidores dos mananciais hídricos, os efluentes, resulta na produção de um resíduo denominado biomassa, que é o concentrado, especialmente da fração orgânica do efluente produzido durante o tratamento. Ele origina-se durante a sedimentação primária, que remove cerca de 70% dos sólidos sedimentáveis, durante o tratamento químico, na forma de precipitado, e durante o tratamento biológico, no qual o carbono orgânico é oxidado para formar células biológicas. O desenvolvimento biológico excessivo é removido durante a sedimentação secundária como biomassa secundária (PIKE, 1986 apud SIMONETI, 2006).

A biomassa é constituída, em boa parte, por microorganismos vivos. Como a eficiência dos processos biológicos está ligada à quantidade de células vivas atuantes no processo, os sistemas de tratamento mantêm o efluente em um meio rico em biomassa. Um processo biológico é considerado eficiente e econômico se puder ser operado com baixos tempos de retenção hidráulica e tempos de retenção de sólidos suficientemente longos para permitir o crescimento de microorganismos. Portanto, para processos de tratamento biológico de efluente, o

seu excesso passa a ser considerado um resíduo. O momento e as condições em que a biomassa deixa de ser matéria-prima para se transformar em resíduo dependem da tecnologia do sistema de tratamento e de sua operação (SIMONETI, 2006).

A análise de processos biológicos tem por base a complexidade dos fenômenos físicos e das reações microbianas, além da heterogeneidade destes sistemas que podem ser aplicados em diferentes atividades. Desta forma, o conhecimento dos processos físicos que determinam a hidrodinâmica de um biorreator é de extrema importância quando se deseja atingir a otimização destas unidades de bioprocessamento, para se atingir níveis específicos de reações biológicas. Neste contexto, a modelagem matemática e a simulação computacional tornam-se uma ferramenta eficiente na compreensão destes fenômenos, mesmo nos casos em que a aplicação em termos de projeto e de aumento de escala não seja direta e viável.

A modelagem matemática de processos biológicos pode ser definida como um artifício que permite reproduzir, através da resolução de equações matemáticas e de condições iniciais e de contorno, a realidade física de um determinado sistema. Ou seja, são capazes de equacionar os balanços de massa para cada componente no biorreator, associando-os às complexas transformações bioquímicas que ocorrem no processo e às velocidades em que essas transformações de processam.

Sendo assim, o objetivo deste trabalho é avaliar a influência da variação de parâmetros cinéticos das reações biológicas, assim como da variação das concentrações iniciais de substrato e biomassa em um reator biológico operando em batelada, através da aplicação dos princípios da modelagem matemática e da simulação computacional.

MATERIAIS E MÉTODOS

A operação de biorreatores em batelada, também chamados de descontínuos, é caracterizada pela adição do inóculo e de todo o meio de cultivo a uma determinada vazão não necessariamente constante, e pela retirada do líquido fermentado após o período de reação, de modo que o biorreator tenha um período de enchimento rápido em relação à etapa de reação com volume constante, na qual tem-se a ocorrência das transformações de interesse, definindo, assim, o tempo da batelada. Desta forma, é importante citar que as variáveis que caracterizam o estado do sistema (também denominadas de variáveis de estado – concentrações de biomassa, de substrato e de produto) permanecem variáveis ao longo do período de operação do biorreator.

O esquema de um biorreator operando em batelada é mostrado na Figura 1, onde se admite que o mesmo seja isotérmico com volume constante e perfeitamente agitado, ou seja, um reator ideal.

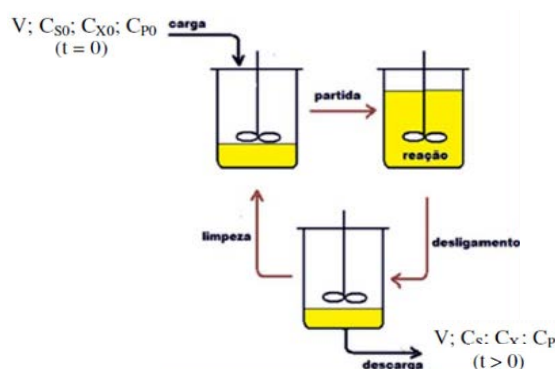


Figura 1. Esquema de um biorreator descontínuo.

Onde, V - volume de meio no biorreator (L);

C_{X0} e C_X - concentração de biomassa inicial e final, respectivamente (g-X/L);

C_{S0} e C_S - concentração de substrato inicial e final, respectivamente (g-S/L);

C_{P0} e C_P - concentração de produto inicial e final, respectivamente (g-P/L);

t - tempo de batelada.

Neste caso, a equação generalizada para o balanço de massa é a seguinte:

$$\text{Acúmulo} = \text{Entrada} - \text{Saída} + \text{Geração} - \text{Consumo}$$

Desta forma, fez-se inicialmente o balanço material para a biomassa, obtendo-se:

$$\text{Acúmulo} = \text{Geração} - \text{Consumo}$$

$$\frac{d(C_X V)}{dt} = v_X V$$

Onde, v_X - velocidade de produção de biomassa (g-X/L·h).

Entretanto, esta velocidade é função da quantidade de microrganismos presentes. Logo, a definição de velocidade é feita em termos específicos, ou seja, por concentração celular:

$$\mu_X = \mu = \frac{v_X}{C_X}$$

Onde, μ_X - velocidade específica de produção de biomassa (g-X/g-X·h).

Assim,

$$\frac{d C_X}{dt} = \mu_X C_X$$

equação (1)

De forma análoga ao efetuado para o microrganismo, fez-se o balanço material para o substrato limitante, obtendo-se:

$$\frac{d C_S}{dt} = -\mu_S C_X$$

Onde, μ_S - velocidade específica de consumo de substrato (g-S/g-S·h).

Entretanto, ao se considerar que o processo de crescimento celular obedece às lei de conservação de matéria, ou seja, é possível admitir proporções estequiométricas para o consumo de substrato durante o estudo cinético, pôde-se relacionar as velocidades específicas de crescimento celular e consumo de substrato por um parâmetro denominado fator de conversão:

$$Y_{X/S} = \frac{C_X - C_{X0}}{C_{S0} - C_S} = \frac{\mu}{\mu_S}$$

Onde, $Y_{X/S}$ - fator de conversão de substrato a biomassa (g-X/g-S).

Assim, a equação de balanço de massa para o consumo de substrato resulta em:

$$\frac{d C_S}{dt} = -\frac{\mu}{Y_{X/S}} C_X$$

equação (2)

Da mesma forma, fez-se o balanço de massa para a formação de produto, obtendo-se:

$$\frac{d C_P}{dt} = \mu_P C_X$$

Onde, μ_P - velocidade específica de formação de produto (g-P/g-P·h);

Com relação à cinética de formação de produto, o modelo de Leudeking & Piret que combina a velocidade específica de formação do produto associada, parcialmente associada e não associada à velocidade específica de crescimento foi considerado. Logo,

$$\frac{d C_P}{dt} = (\alpha \mu + \beta) C_X \quad \text{equação (3)}$$

Onde, α e β - constantes cinéticas (adimensional e g-P/g-P·h ou h⁻¹, respectivamente).

Finalmente, admitiu-se como válido o modelo cinético proposto por Contois, apresentado a seguir:

$$\mu = \mu_{max} \frac{C_S}{K_X C_X + C_S}$$

Onde, μ_{max} - velocidade específica máxima de crescimento celular (h⁻¹)
 K_X - constante cinética.

Desta forma, as equações 1, 2 e 3 puderam ser reapresentadas da seguinte forma, respectivamente:

$$\frac{d C_X}{dt} = \left(\mu_{max} \frac{C_S}{K_X C_X + C_S} \right) C_X$$

$$\frac{d C_S}{dt} = - \frac{1}{Y_{X/S}} \left(\mu_{max} \frac{C_S}{K_X C_X + C_S} \right) C_X$$

$$\frac{d C_P}{dt} = \left[\alpha \left(\mu_{max} \frac{C_S}{K_X C_X + C_S} \right) + \beta \right] C_X$$

De posse das equações matemáticas acima, pôde-se obter os perfis das concentrações de biomassa, substrato e produto, através de experimentos numéricos, utilizando-se o pacote matemático SCILAB 5.2.2 e a rotina numérica de Runge-Kutta de 4ª ordem e passo variável, considerando os seguintes dados:

$$\mu_{max} = 0,50$$

$$K_X = 0,25$$

$$\alpha = 1,0$$

$$\beta = 0,5$$

O planejamento experimental consistia em avaliar a influência da variação das concentrações de substrato, biomassa dentro do reator biológico, frente a alterações nas concentrações iniciais de biomassa e substrato, e supondo diferentes rendimentos de conversão de substrato em biomassa. Nas Tabelas 1 e 2 são apresentados o planejamento e a matriz experimental utilizados na simulação.

Tabela 1: Planejamento experimental.

Parâmetros	Níveis	
Concentração inicial de biomassa (C_{X0})	2	4
Concentração inicial de substrato (C_{S0})	25	50
Rendimento de conversão de substrato em biomassa ($Y_{X/S}$)	0,5	0,8

Tabela 2: Matriz experimental.

Experimento	C_{X0}	C_{S0}	$Y_{X/S}$
1	2	25	0,5
2	2	25	0,8
3	2	50	0,5
4	2	50	0,8
5	4	25	0,5
6	4	25	0,8
7	4	50	0,5
8	4	50	0,8

RESULTADOS

Através da simulação computacional obtiveram-se dados sobre o comportamento da concentração de substrato, biomassa e produto, para os experimentos apresentados na matriz experimental. As figuras 2 a 9 apresentam estes perfis de concentração, admitindo o modelo cinético de Contois e de formação de produto parcialmente associada ao crescimento.

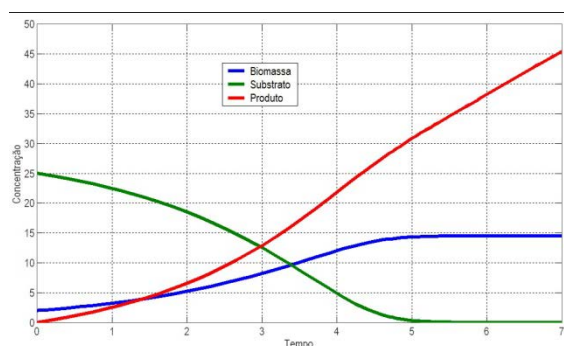


Figura 2: $C_{X0} = 2\text{g/l}$, $C_{S0} = 25\text{g/l}$, $Y_{X/S} = 0,5$
 $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

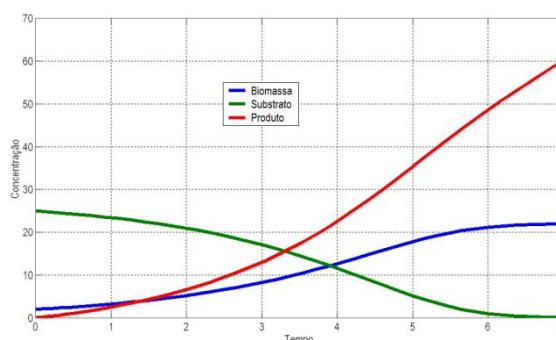


Figura 3: $C_{X0} = 2\text{g/l}$, $C_{S0} = 25\text{g/l}$, $Y_{X/S} = 0,8$
 $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

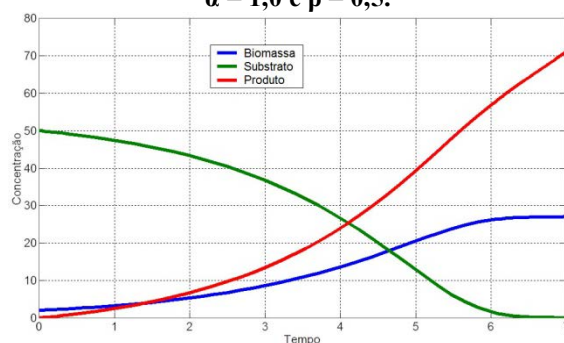


Figura 4: $C_{X0} = 2\text{g/l}$, $C_{S0} = 50\text{g/l}$, $Y_{X/S} = 0,5$
 $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

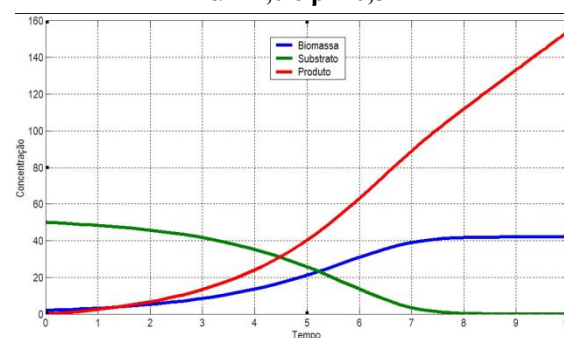


Figura 5: $C_{X0} = 2\text{g/l}$, $C_{S0} = 50\text{g/l}$, $Y_{X/S} = 0,8$
 $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

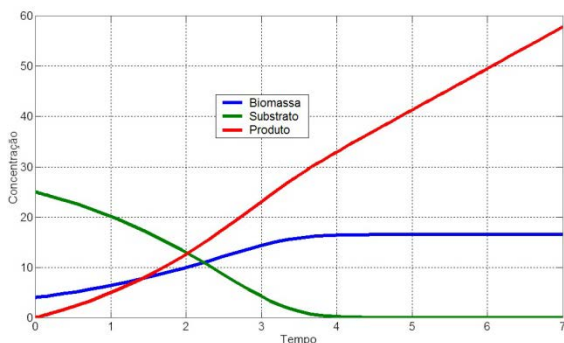


Figura 6: $C_{X0} = 4\text{g/l}$, $C_{S0} = 25\text{g/l}$, $Y_{X/S} = 0,5$
 $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

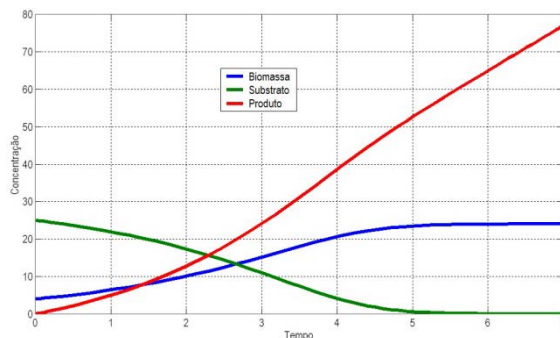


Figura 7: $C_{X0} = 4\text{g/l}$, $C_{S0} = 25\text{g/l}$, $Y_{X/S} = 0,8$
 $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

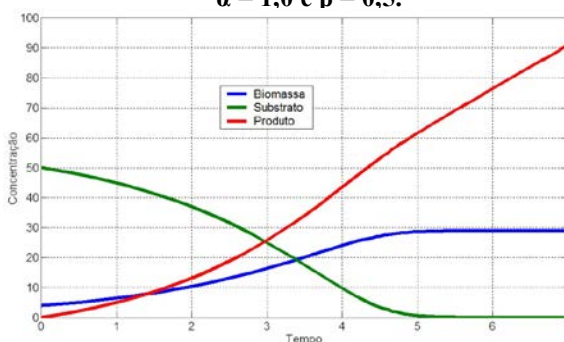


Figura 8: $C_{X0} = 4\text{g/l}$, $C_{S0} = 50\text{g/l}$, $Y_{X/S} = 0,5$
 $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

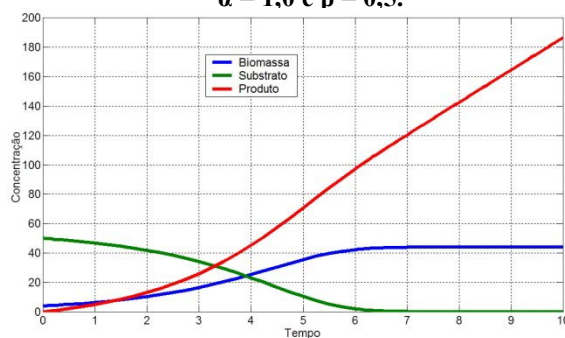


Figura 9: $C_{X0} = 4\text{g/l}$, $C_{S0} = 50\text{g/l}$, $Y_{X/S} = 0,8$
 $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

Como esperado, os resultados apresentam o decaimento da concentração de substrato, consumido durante a reação, assim como o aumento da concentração de biomassa e produto. As curvas de biomassa e produto são inversamente proporcionais e quando alcançam a estabilidade o reator está operando em regime permanente. Observamos que o modelo matemático não prevê a estagnação da formação de produto, uma vez que, mesmo após o equilíbrio entre o consumo de substrato e o aumento da biomassa, a concentração de produto continua aumentando.

Pudemos observar também variações nas concentrações de biomassa e produto durante o regime permanente e no tempo de estabilização, para cada experimento como mostra a Tabela 3.

Tabela 3. Variações nas concentrações de biomassa e produto durante o regime permanente e no tempo de estabilização.

Experimento	Tempo (h)	Concentração de Biomassa (g/l)	Concentração de Produto (g/l)
1	5,9931	14,4955	37,8009
2	7,8587	21,9923	70,5558
3	7,3723	26,9957	76,1255
4	9,5621	41,9932	144,9301
5	4,8331	16,4958	39,9254
6	6,7454	23,9926	73,9373
7	6,1034	28,9952	77,9216
8	8,2072	43,9921	147,0456

O aumento da concentração inicial de biomassa de 2g/l para 4g/l ocasiona uma redução do tempo de estabilização do reator, de aproximadamente 1,3 h, gerando um aumento de aproximadamente 2g/l nas concentrações finais de biomassa e produto.

Os experimentos com maior carga inicial de substrato apresentam quase o dobro das concentrações finais de biomassa e de produto.

A taxa de conversão de substrato em biomassa indica a proporção de biomassa produzida por determinada quantidade de substrato. Ao aumentar esta taxa, causamos um aumento no tempo de estabilização do reator, uma vez que o substrato será consumido em menor quantidade para a produção de dado montante de biomassa.

Verificamos que o *experimento 5* alcançou o equilíbrio no menor tempo, atingindo as segundas menores concentrações de biomassa e de produto, o que o torna o mais adequado para processos de tratamento de esgoto sanitário, uma vez que produzirá menor quantidade de lodo, gases e material inerte. No entanto, se analisarmos a carga de substrato consumida no *experimento 7*, observamos que este consome duas vezes mais substrato, com menos de 50% de aumento no tempo de estabilização e produzindo quantidades menores de biomassa e produto, proporcionalmente ao *experimento 5*. Sendo assim, é mais eficiente utilizar um reator biológico para tratar todo o volume de efluente, do que utilizar unidades menores. Estes experimentos apresentam maior carga inicial de biomassa, o que diminui seu tempo de geração, aumentando a taxa de crescimento biológico e consequentemente acelerando as reações. A menor taxa de conversão de substrato em biomassa indica maior consumo de substrato com menor geração de biomassa, tornando o processo mais rápido e gerando menos resíduos.

Quando deseja-se aproveitar a biomassa ou o produto, em processos industriais, por exemplo, deve-se observar as condições que melhor se adéquem ao comportamento desejado.

CONCLUSÃO

Como esperado, os resultados apresentam o decaimento da concentração de substrato, consumido durante a reação, assim como o aumento da concentração de biomassa e produto. As curvas de biomassa e produto são inversamente proporcionais e quando alcançam a estabilidade o reator está operando em regime permanente. Observamos que o modelo matemático não prevê a estagnação da formação de produto, uma vez que, mesmo após o equilíbrio entre o consumo de substrato e o aumento da biomassa, a concentração de produto continua aumentando.

Verificou-se maior eficiência no consumo de substrato, com menor geração de biomassa e de produto quando utilizadas as concentrações iniciais de biomassa e de substrato de 4 g/l e 50 g/l, respectivamente, e rendimento de conversão de substrato em biomassa de 0,5. Sendo estas as melhores condições para operação de biorreator no tratamento de esgoto sanitário, quando utilizada a velocidade específica de formação do produto parcialmente associada à velocidade específica de crescimento.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. FERNANDES, H de C. da S. *et al.* Estudo cinético de reatores biológicos operando em batelada, através da modelagem matemática e simulação computacional. In: Simpósio Ítalo-Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental, 10., 2010, Maceió. Anais eletrônicos... Maceió: ABES, 2010.
2. RODRIGUES, J. A. D.; RATUSZNEI, S. M. & DAMASCENO, L. H. S. Análise de processos biológicos. 2006. 130f. Texto de apoio didático (Pós-graduação em Engenharia, área de concentração hidráulica e saneamento) – Escola de Engenharia de São Carlos – EESC. São Carlos, 2006.
3. SIMONETI, M de F. Inativação térmica de ovos de helmintos em água e em biossólidos: cinética de um reator batelada e modelagem matemática em reator tubular. 2006. 251p. Tese (Doutorado em Engenharia, na área de Engenharia Sanitária) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. São Paulo, 2006.
4. STREMEL, D. P. Cinética de Utilização de Substrato, Formação de Produtos e Produção de Biomassa. Disponível em: < http://www.eqm.unisul.br/prof/dile/arquivos/EB/EB_2009/cap_6_8_09.pdf>. Acesso em: 09 set 2010.