

## **I-146 – IDENTIFICAÇÃO DE PARAMETROS CINÉTICOS EM PROCESSOS BIOLÓGICOS: ESTUDO DE CASO – RETAORES BIOLÓGICOS OPERANDO EM BATELADA ALIMENTADA**

**Hélder de Carvalho da Silva Fernandes**

Graduando de Engenharia Química (UFCG). Aluno de Iniciação Científica PIBIC/UFCG

**Fernando Fernandes Vieira**

Engenheiro Químico (UFPB, 1986), Mestre em Engenharia Química (UFPB, 1989), Doutor em Engenharia Mecânica (UFPB, 2002). Professor Titular do Departamento de Química da Universidade Estadual da Paraíba (UEPB).

**Carlos Antônio Pereira de Lima**

Engenheiro Químico (UFPB, 1988), Mestre em Engenharia Química, (UFPB, 1992), Doutor em Engenharia Mecânica, (UFPB, 2002). Professor Titular do Departamento de Química (UEPB).

**Geralda Gilvânia de Lima**

Engenheira Química (UFPB, 1988), Mestre em Engenharia Química, (UFPB, 1992), Doutora em Engenharia Mecânica, (UFPB, 2002). Professora Titular do Departamento de Química (UEPB).

**Endereço<sup>(1)</sup>:** Rua Acre, 545 – Liberdade – Campina Grande - PB - CEP: 58470-111 - Brasil - Tel: (83) 8852-1461 - e-mail: [hellder@gmail.com](mailto:hellder@gmail.com)

### **RESUMO**

Devido à crescente modernização, ocasionada pela necessidade do homem de fabricar produtos em maior escala, temos gerado uma quantidade cada vez maior de efluentes poluidores dos corpos aquáticos devido às suas características com elevada concentração de compostos orgânicos e inorgânicos, os quais devem receber um tratamento adequado antes de serem lançados em um corpo receptor, evitando sérios danos ao meio ambiente. A consciência crescente de que o tratamento de águas residuárias é de vital importância para a saúde pública e para o combate a poluição das águas de superfície, levou à necessidade de se desenvolver sistemas que combinam alta eficiência à custos baixos de construção e de operação. Assim, nas últimas décadas, desenvolveram-se vários sistemas que se baseiam na aplicação de reatores biológicos para a redução da carga poluidora das águas residuárias. Atualmente uma forma de se minimizar custos no desenvolvimento de novos sistemas de tratamento é a aplicação da modelagem matemática aplicada aos reatores biológicos. A atividade da modelagem matemática pode ser definida como sendo o processo de aplicação de conhecimento fundamental ou experimental para simular ou descrever o comportamento de um sistema real para alcançar determinados objetivos. No entanto para que seja feita a simulação computacional dos sistemas modelados, existe a necessidade da avaliação dos parâmetros do modelo. Este trabalho tem como objetivo propor uma metodologia capaz de avaliar os parâmetros cinéticos de reatores biológicos com base em experimentação numérica. Para resolução dessas equações que compõem o modelo matemático, fez o uso do aplicativo computacional SCILAB 5.3.1

**PALAVRAS-CHAVE:** Reatores Biológicos, Modelagem Matemática, Simulação Computacional, Identificação de Parâmetros.

### **INTRODUÇÃO**

A consciência crescente de que o tratamento de águas residuárias é de vital importância para a saúde pública e para o combate a poluição das águas de superfície, levou à necessidade de se desenvolver sistemas que combinam alta eficiência à custos baixos de construção e de operação. Assim, nas últimas décadas, desenvolveram-se vários sistemas que se baseiam na aplicação de processos biológicos para a remoção do material orgânico de águas residuárias (CHERNICHARRO, 1997)

Os modelos matemáticos que descrevem o comportamento de um processo biológico podem ser fenomenológicos (baseados em pressupostos teóricos) ou empíricos (baseados em dados experimentais).

No caso de procedimentos fenomenológicos, a construção de modelos matemáticos se inicia com a dedução das equações dos balanços materiais e das equações cinéticas, as quais representam a influência das variáveis de estado do sistema. As variáveis de estado definem em cada instante (e/ou cada posição) o estado do sistema como, por exemplo, as concentrações de células, de substratos e de produtos. Os modelos cinéticos aplicados em processos biológicos podem ser classificados quanto ao número de componentes usados na representação celular e quanto à heterogeneidade da população microbiana.

Os processos biológicos se desenvolvem através da atividade vital de microrganismos, havendo a transformação das substâncias presentes no substrato. Estes agentes responsáveis pelas transformações, os microrganismos, assimilam diversos materiais, se reproduzem e produzem outras substâncias alterando a composição do substrato (SCHMIDELL *et al.*, 2001).

Os reatores químicos ou biológicos podem ser classificados usando-se diversos critérios. Uma das formas mais frequentes baseia-se no tipo de fluxo e grau de mistura dentro do reator. Tais características determinam a quantidade de tempo que material permanece dentro do reator, o qual por sua vez determina o grau de extensão da transformação química sofrida pelo material. Com base nestes critérios, podemos classificar os reatores como de mistura completa e de escoamento pistonado. No caso dos reatores de mistura completa não existem gradientes de concentração no interior do mesmo, e a taxa de reação é a mesma em todos os pontos do reator. Como consequência, podemos afirmar que a concentração do efluente de um reator de mistura completa é igual à concentração dentro do reator.

Por outro lado os reatores de fluxo pistonado são caracterizados pela existência de gradientes de concentração, ou seja, as concentrações e as taxas de reação variam espacialmente dentro do reator. Logo os modelos desenvolvidos para reatores completamente misturados, são classificados como “modelos concentrados”, enquanto que os modelos de reatores de fluxo pistonado, são “modelos distribuídos”.

Os reatores de mistura completa e de fluxo pistonado são denominados de reatores ideais. Os reatores reais apresentam comportamento intermediário entre estes dois casos limites. Este desvio apresentado pelos reatores reais é devido à existência de canais preferenciais e zonas de estagnação dentro do reator; os efeitos de entrada e saída; efeito de parede entre outros. O grau de não-idealidade dos reatores pode ser quantificado através da “Distribuição do Tempo de Residência” (RTD).

Por mais rigorosos que sejamos no projeto e construção de reatores químicos ou biológicos, os mesmos sempre apresentarão desvios com relação ao comportamento ideal, isto implica que a modelagem destes reatores pode se tornar muito complexa. No entanto podemos usar os modelos de reatores ideais para aproximar o comportamento dos reatores reais, como por exemplo.

Embora exista uma grande quantidade de dados relativos a evolução temporal dos reatores biológicos, a modelagem matemática e a simulação computacional aplicada ao projeto e a operação destes reatores sistemas anaeróbios tem sido ainda pouco utilizada, devido a ao grande número de fatores que afetam os valores dos parâmetros cinéticos. (SANTOS *et al.*, 2006)

Com relação aos métodos de estimação de parâmetros, temos que levar em consideração a linearidade ou não das equações obtidas. Quando o modelo é linear em relação à todos os coeficientes, estes podem ser estimados por procedimentos denominados “regressão linear”. Entretanto, caso os coeficientes apareçam na função na forma não-linear, a estimativa é referida como “regressão não-linear”. É importante destacar que o ajuste de modelos teóricos (ou fenomenológicos) e empíricos (ou estatísticos ou estocásticos) requer que o número de dados experimentais seja igual ou superior ao número de coeficientes do modelo.

## MATERIAIS E MÉTODOS

A operação de reatores biológicos modo descontínuo alimentado (batelada alimentada) tem como é caracterizada A característica fundamental de um biorreator operado no modo batelada alimentada é que o biorreator é carregado inicialmente com um determinado volume de inóculo (cerca de 10 a 20% do volume de trabalho), iniciando-se a alimentação de um ou mais nutrientes durante o processo, permanecendo no biorreator todo o meio em reação biológica até o término do processo, sendo então retirado para as operações de separação e purificação. Esta retirada pode ser total, no processo tradicional, ou apenas parcial, no processo

denominado batelada alimentada repetida ou sequencial. Esta última alternativa de operação permite o prolongamento do tempo de operação do biorreator necessitando, entretanto, que a biomassa permaneça ativa.

Para o desenvolvimento das equações de balanço, foi adotado o seguinte esquema de um reator biológico (Fig. 01), onde admitimos que o mesmo seja isotérmico, tenha volume constante e seja perfeitamente agitado.

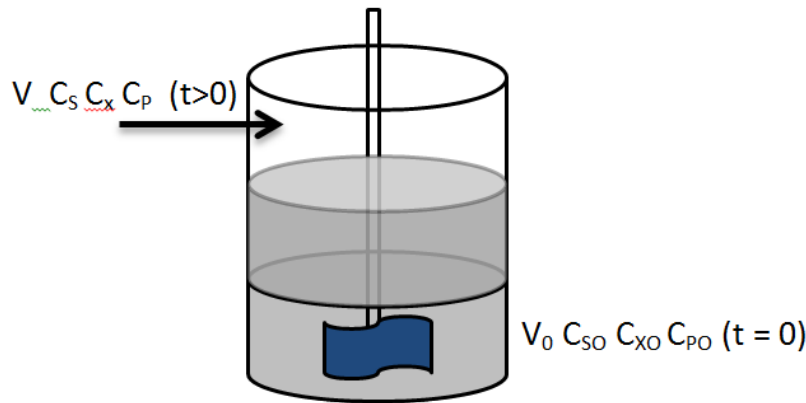


Fig. 01 - Esquema do Reator Biológico, operando em batelada alimentada

A forma geral do balanço material aplicada a qualquer processo é a seguinte:

$$[\text{Acumulo}] = [\text{Entrada} + \text{Geração}] - [\text{Saída} + \text{Consumo}]$$

Assim sendo, podemos escrever os balanços materiais para células, substrato e produto através das seguintes equações:

$$\frac{d(C_X \cdot V)}{dt} = \mu_X C_X V \quad (01)$$

$$\frac{d(C_S \cdot V)}{dt} = F \cdot C_{SF} - \frac{1}{Y_{X/S}} \mu C_X V \quad (02)$$

$$\frac{d(C_P \cdot V)}{dt} = \mu_P C_X V \quad (03)$$

Analisamos a cinética do reator, usando-se o modelo de crescimento celular proposto por Monod. Em cada um destes modelos foi estudada a influência da variação dos diversos parâmetros presentes na equação cinética. O conjunto de equações diferenciais, formado pelas equações (1,2 e 3) foi resolvida através de rotinas numéricas, presentes no pacote computacional SCILAB Versão 5.3.1 (PIRES, 2004)

O critério de ajuste teve como função objetivo a minimização do somatório dos desvios ao quadrado dos valores obtidos pelo modelo em relação aos valores da experimentação numérica.

## RESULTADOS

O sistema modelado possui as seguintes características operacionais:  $V_{\text{inicial}} = 2,0 \text{ L}$ ;  $V_{\text{final}} = 5,0 \text{ L}$ ;  $C_{X0} = 1,0 \text{ g/L}$ ;  $C_{SF} = 10,0 \text{ g/L}$ ;  $C_{P0} = C_{S0} = C_{PF} = C_{XF} = 0,0 \text{ g/L}$ . Para avaliar a consistência do procedimento de identificação de parâmetros, foi gerado a partir de uma simulação computacional, cinco conjuntos de pontos experimentais, usando-se os parâmetros cinéticos, mostrados na Tabela 1:

Experimento	$\mu_{MAX}$	$k_s$
1	0.50	0.10
2	0.25	0.10
3	0.75	0.10
4	0.10	0.10
5	0.10	1.00
6	0.10	10.00

O fator de rendimento ( $Y_{X/S}$ ) foi mantido constante e igual a 0,50. Logo em seguida estes valores obtidos foram contaminados com ruídos aleatórios para simular erros que existem na realização de medidas experimentais.

As Figuras 2 a 7 mostram o resultado do processo de identificação dos parâmetros para os diversos experimentos

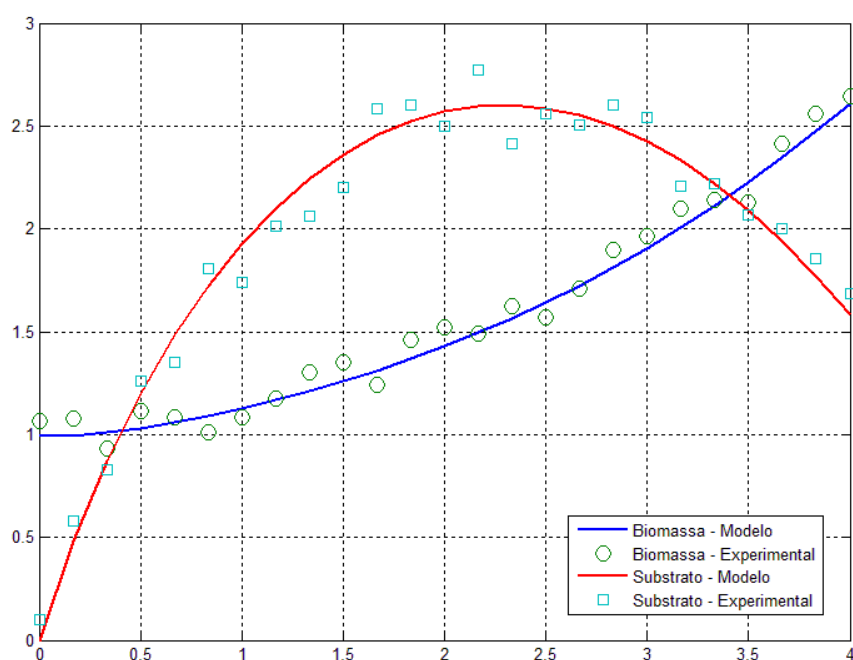


Figura 02 – Perfis de Concentração de Biomassa e Substrato para  $\mu_{MAX} = 0,50$  e  $k_s = 0,10$

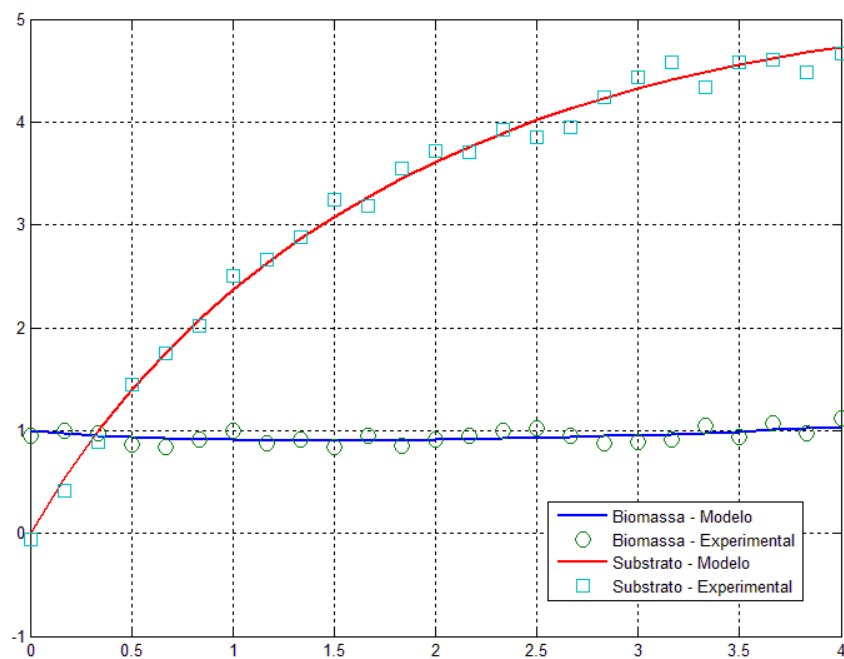


Figura 03 – Perfis de Concentração de Biomassa e Substrato para  $\mu_{MAX} = 0,25$  e  $k_S = 0,10$

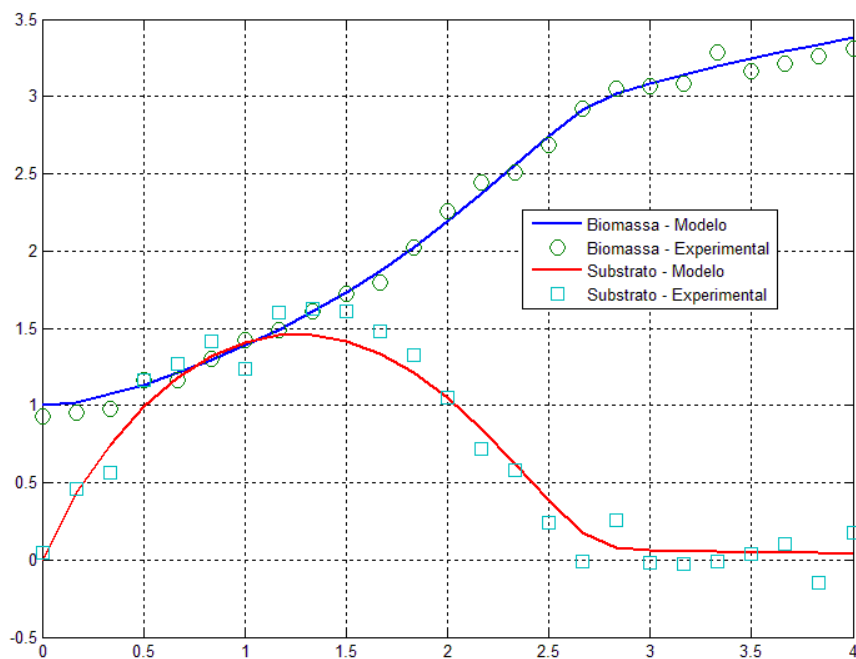


Figura 04 – Perfis de Concentração de Biomassa e Substrato para  $\mu_{MAX} = 0,75$  e  $k_S = 0,10$

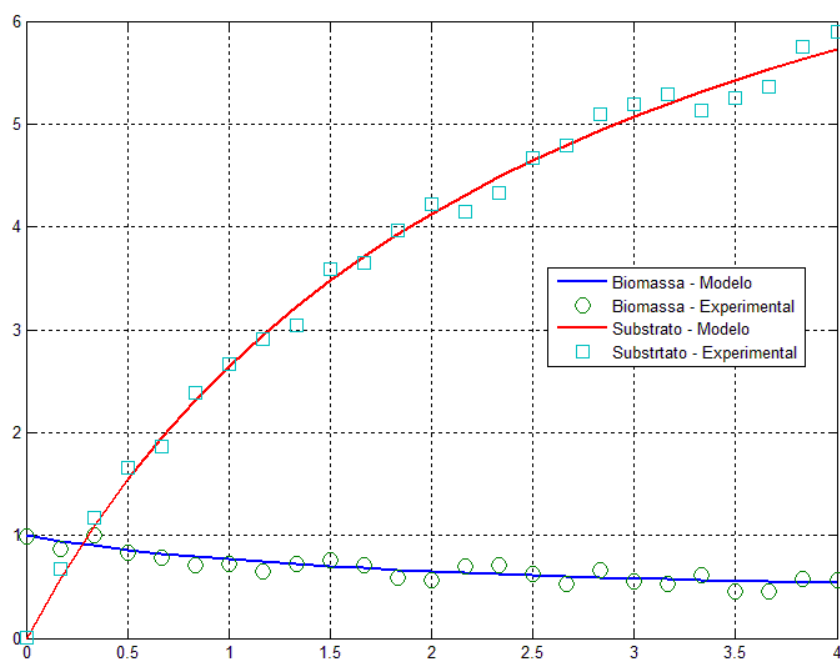


Figura 05 – Perfis de Concentração de Biomassa e Substrato para  $\mu_{MAX} = 0,10$  e  $k_S = 0,10$

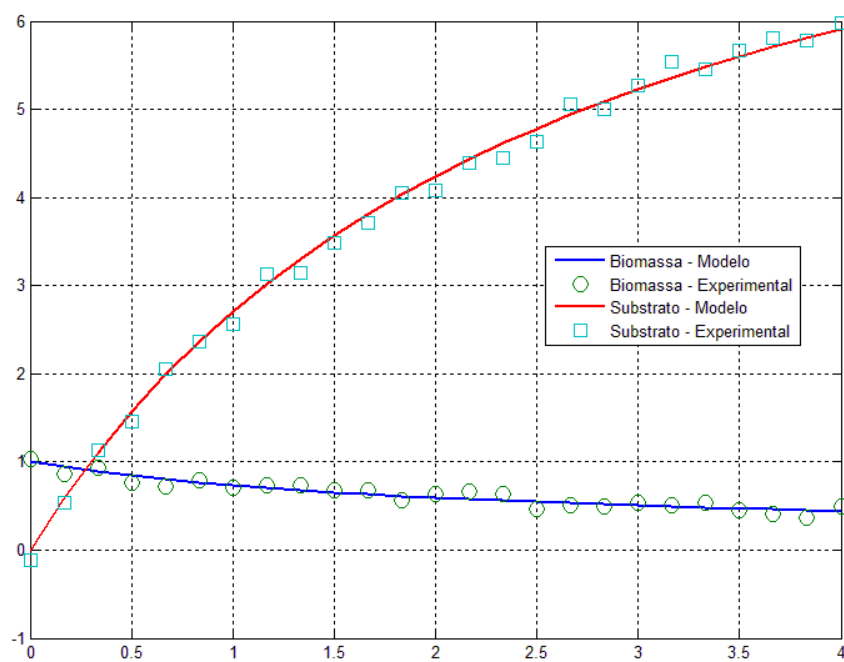


Figura 06 – Perfis de Concentração de Biomassa e Substrato para  $\mu_{MAX} = 0,10$  e  $k_S = 1,00$

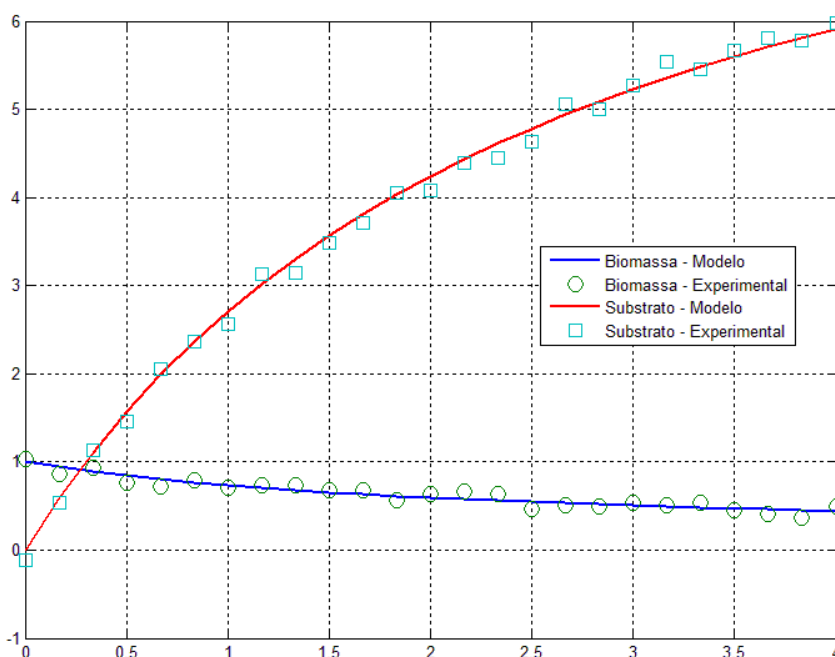


Figura 07 – Perfis de Concentração de Biomassa e Substrato para  $\mu_{MAX} = 0,10$  e  $k_S = 10,00$

A tabela 03 mostra os valores obtidos identificados a partir dos experimentos numéricos

Tabela 03 – Parâmetros Cinéticos Estimados

Experimento	$\mu_{MAX}$	$k_S$
1	$0.48 \pm 0.027$	$0.11 \pm 0.025$
2	$0.26 \pm 0.030$	$0.10 \pm 0.033$
3	$0.76 \pm 0.025$	$0.12 \pm 0.029$
4	$0.08 \pm 0.043$	$0.12 \pm 0.012$
5	$0.11 \pm 0.038$	$1.04 \pm 0.028$
6	$0.11 \pm 0.052$	$10.09 \pm 0.054$

Através da análise dos gráficos e dos parâmetros identificados se aproximam de forma satisfatória, dos valores usados na geração do conjunto de pontos experimentais simulados, de onde pode dizer que o processo de identificação de parâmetros é confiável para o estudo do comportamento cinético de reatores biológicos.

## CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos podemos concluir que o uso de modelos matemáticos combinado com técnicas de identificação de parâmetros, para o estudo cinético de reatores biológicos operando em batelada alimentada, se mostrou como uma excelente ferramenta para o entendimento do funcionamento, projeto e controle deste tipo de sistema. Na resolução dos modelos matemáticos e identificação de parâmetros, a aplicação do software SCILAB Versão 5.3.1 também se mostrou bastante eficiente, uma vez que se trata de um software de fácil manipulação e distribuição gratuita (freeware).

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. CHERNICHARO, C.A.L., **Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias**. Belo Horizonte: UFMG, 1997. 246p.
2. NIRMALAKHANDAN, N. *Modeling tools for Environmental Engineers and Scientists*. New York: CRC Press, 2001
3. PIRES, P.S.M., **Introdução ao Scilab Versão 3.0**. Rio Grande do Norte: Departamento de Engenharia de Computação e Automação da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2004.
4. SCHMIDELL, W.; LIMA, U.A.; AQUARONE, E.; BORZANI, W. *Biotecnologia Industrial – Engenharia Bioquímica*. Edgard Blücher, São Paulo, 2001.