

II-256 - MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE UM REATOR BIOLÓGICO OPERANDO EM MODO CONTÍNUO COM RECICLO DE BIOMASSA UTILIZANDO O MODELO CINÉTICO DE CONTOIS

Laise Alves Candido⁽¹⁾

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

Flávia Lima Cordeiro de Moura

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 pela 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 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 Joana d'Arc de Arruda, 42A - José Pinheiro - Campina Grande - PB - CEP: 58407-380 - Brasil - Tel: (83) 3321-9267 - e-mail: laise_candidocg@yahoo.com.br

RESUMO

O presente trabalho tem como objetivo principal avaliar o perfil de concentração de substrato, biomassa e produto de um reator biológico operando em modo contínuo com reciclo externo de biomassa, frente a variações de parâmetros operacionais, fração da vazão do líquido de saída do biorreator que é recirculado e o fator de concentração de biomassa obtido no separador de células, e considerando a velocidade específica de formação do produto parcialmente associada à velocidade específica de crescimento. Para a análise da cinética do biorreator, utilizou-se o modelo de crescimento celular proposto por Contois e as equações obtidas foram resolvidas através da simulação matemática, utilizando-se o software SCILAB 5.2.2 Variou-se a fração de recirculação em 10% e 20% e o fator de concentração em 2 e 3 vezes. O reator com reciclo externo de biomassa apresentou ótimos resultados para o experimento com fração da vazão do líquido de saída do biorreator recirculando de 20% e fator de concentração de biomassa obtido no separador de células de 3 vezes.

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

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 apud FERNANDES, 2010)

São considerados como processos biológicos de tratamento de esgotos, os processos que dependem da ação de microorganismos presentes nos esgotos e que procuram reproduzir, em dispositivos racionalmente projetados, os fenômenos biológicos observados na natureza, condicionando-os em área e tempo economicamente justificáveis.

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).

O estudo cinético de um dado fenômeno ou processo é o estudo da evolução em função do tempo deste sistema, através da quantificação de certas grandezas que caracterizam adequadamente esta evolução. Desta forma, o estudo cinético destes processos requer a escolha de quais substâncias consumidas e produzidas deverão ser consideradas, de quais métodos analíticos deverão ser utilizados para a quantificação destas substâncias além da medida de biomassa, responsável pelas reações. Normalmente, efetuam-se as medidas das concentrações de microrganismos presentes (Cx), do substrato que limita o processo (Cs) e do produto de interesse (Cp).

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.

O objetivo principal da simulação, como ferramenta do desenvolvimento tecnológico de processos biológicos, é prever o comportamento dinâmico e estacionário do processo, inclusive em condições não testadas empiricamente, possibilitando a determinação das condições operacionais economicamente ótimas do sistema, auxiliando no projeto de algoritmos de controle, no qual o modelo matemático formulado passa a ser parte integrante do processo.

Sendo assim, o objetivo deste trabalho é avaliar a influência da variação de parâmetros operacionais de reatores biológicos operando de forma contínua, com reciclo externo de biomassa, através da aplicação dos princípios da modelagem matemática e da simulação computacional.

MATERIAIS E MÉTODOS

A operação de biorreatores no modo contínuo é caracterizada pela alimentação contínua do substrato a uma determinada vazão necessariamente constante, de modo que o volume do biorreator, após o período inicial de enchimento, permaneça constante. A condição de volume constante é fundamental para o estabelecimento do regime permanente, na qual as variáveis que caracterizam o estado do sistema permanecem constantes ao longo do período de operação do biorreator.

O processo contínuo é extremamente versátil quanto às suas possibilidades de operação, podendo ser executado em um único biorreator ou em vários biorreatores em série:

- sem reciclo de biomassa
- com reciclo de biomassa

Basicamente, existem duas formas de se realizar o reciclo da biomassa: recirculação interna, na qual a biomassa é mantida pela sedimentação que ocorre internamente ao biorreator, e recirculação externa, no qual a biomassa é separada do meio fermentado externamente ao biorreator com o auxílio de filtros, sedimentadores ou centrífugas.

Neste trabalho, será descrito e modelado o comportamento do biorreator contínuo com reciclo externo de biomassa.

ANÁLISE DO BIORREATOR CONTÍNUO COM RECICLO EXTERNO DE BIOMASSA

No biorreator operando de modo contínuo com o reciclo de biomassa, o líquido efluente circula através de um separador de células, de maneira que uma corrente concentrada em biomassa retorna ao biorreator, enquanto

uma outra (filtrada ou permeado) sai praticamente isenta de biomassa. Na Figura 1 observamos um esquema do sistema, onde admite-se agitação perfeita, volume e vazão constante e controle da temperatura.

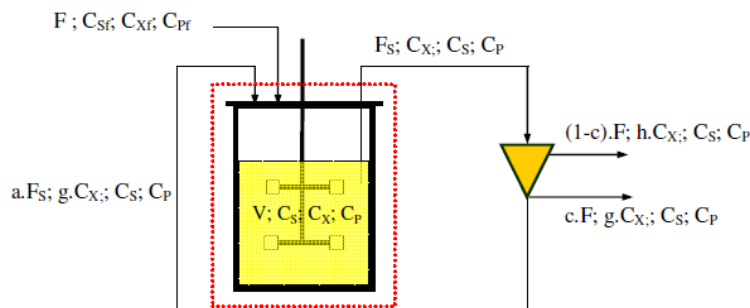


Figura 1: Esquema de um biorreator contínuo com reciclo externo de biomassa.

Onde, V - volume do biorreator (L);

F - vazão de alimentação (L/h);

C_X - concentração de biomassa (g-X/L);

C_{Xf} - concentração de biomassa na vazão de alimentação (g-X/L);

C_S - concentração de substrato (g-S/L);

C_{Sf} - concentração de substrato na vazão de alimentação (g-S/L);

C_P - concentração de produto (g-P/L);

C_{Pf} - concentração de produto na vazão de alimentação (g-P/L);

F_s - vazão de recirculação do líquido de saída do biorreator (L/h);

a - fração da vazão do líquido de saída do biorreator que é recirculado;

g - fator de concentração de C_X obtido no separador de células ($g > 1$);

c - fração do líquido efluente concentrado removida do biorreator;

h - fator de diluição da concentração celular obtido no líquido filtrado ($h < 1$).

Através do esquema acima, desenvolveu-se as equações de balanço material para biomassa, substrato e produto, apresentadas a seguir:

$$\frac{dC_X}{dt} = (\mu_X - BD)C_X \quad \text{equação (1)}$$

$$\frac{dC_S}{dt} = D(C_{Sf} - C_S) - \frac{1}{Y_{X/S}} \mu_S C_X \quad \text{equação (2)}$$

$$\frac{dC_P}{dt} = D(C_{Pf} - C_P) + \mu_P C_X \quad \text{equação (3)}$$

Onde, D - vazão específica de alimentação, F/V (h^{-1});

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

μ_S - velocidade específica de consumo de substrato (g-S/g-S·h);

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

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

$$B = \frac{1 - ag}{1 - a}.$$

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,

$$\frac{dC_P}{dt} = D(C_{Pf} - C_P) + (\alpha\mu + \beta)C_X$$

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

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 maneira, respectivamente:

$$\frac{dC_X}{dt} = \left(\mu_{\max} \frac{C_S}{K_X C_X + C_S} - BD \right) C_X \quad \text{equação (4)}$$

$$\frac{dC_S}{dt} = D(C_{Sf} - C_S) - \frac{1}{Y_{X/S}} \left(\mu_{\max} \frac{C_S}{K_X C_X + C_S} \right) C_X \quad \text{equação (5)}$$

$$\frac{dC_P}{dt} = D(C_{Pf} - C_P) + \left[\alpha \left(\mu_{\max} \frac{C_S}{K_X C_X + C_S} \right) + \beta \right] C_X \quad \text{equação (6)}$$

Foi estudada a influência da variação dos diversos parâmetros operacionais presentes nas equações, obtendo-se os perfis de concentração de biomassa, substrato e produto.

O conjunto de equações diferenciais, formado pelas equações (4, 5 e 6) foi resolvido através experimentos numéricos, utilizando-se o pacote matemático SCILAB 5.2.2 e a rotina numérica de Runge-Kutta de 4ª ordem e passo variável.

O planejamento experimental consistia em avaliar a influência variação da fração da vazão do líquido de saída do biorreator que é recirculado (a) e o fator de concentração de C_X obtido no separador de células (g). Nas Tabelas 1 e 2 são apresentados o planejamento e a matriz experimental utilizados na simulação.

Tabela 1: Planejamento experimental.

Parâmetros	Níveis	
a	0,1	0,2
g	2	3

Tabela 2: Matriz experimental.

Experimento	a	g
1	0,1	2
2	0,1	3
3	0,2	2
4	0,2	3

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, referentes ao reator contínuo com reciclo externo de biomassa (Figuras 2 a 5), admitindo o modelo cinético de Contois e de formação de produto parcialmente associada ao crescimento.

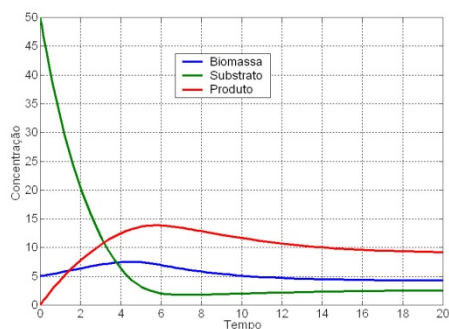


Figura 2: $C_{XF} = 2,0\text{g/l}$, $C_{SF} = 10,0\text{g/l}$, $F = 20$
 $a = 0,1$, $g = 2,0$, $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

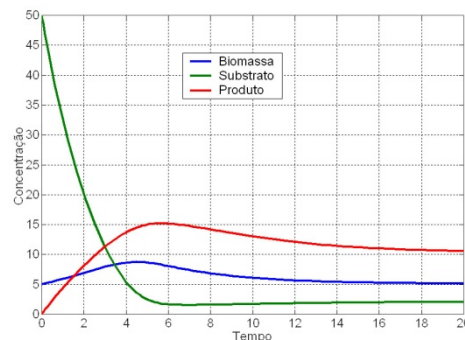


Figura 3: $C_{XF} = 2,0\text{g/l}$, $C_{SF} = 10,0\text{g/l}$, $F = 20$
 $a = 0,1$, $g = 3,0$, $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

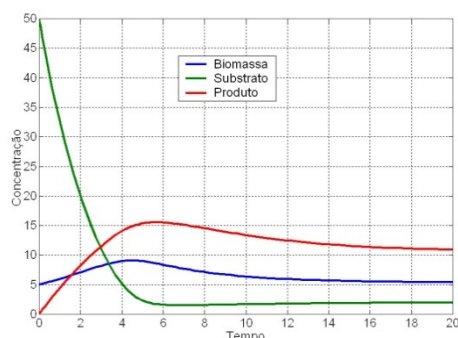


Figura 4: $C_{XF} = 2,0\text{g/l}$, $C_{SF} = 10,0\text{g/l}$, $F = 20$
 $a = 0,2$, $g = 2,0$, $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

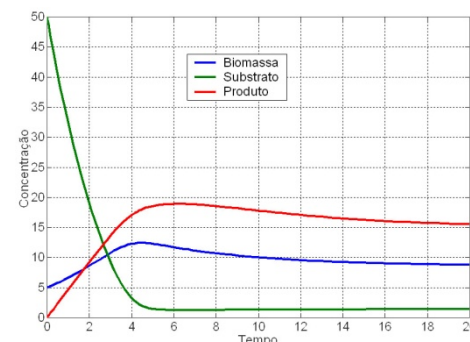


Figura 5: $C_{XF} = 2,0\text{g/l}$, $C_{SF} = 10,0\text{g/l}$, $F = 20$
 $a = 0,2$, $g = 3,0$, $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,5$.

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 substrato não é completamente consumido, ou seja, parte dele sai do reator durante o fluxo.

Como se utilizaram concentrações iniciais de biomassa (C_X) e substrato (C_S), no interior do reator, maiores que suas respectivas concentrações na vazão de alimentação (C_{XF}) e (C_{SF}), foi possível observar um aumento e posterior redução das concentrações de biomassa e produto, até a estabilização. Explicado pelo fato do volume de controle ser o volume total do reator.

Pudemos observar também variações nas concentrações de biomassa, substrato 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 Substrato (g/l)	Concentração de Produto (g/l)
1	7,3294	6,1681	1,7653	13,2624
2	6,7913	7,5365	1,5514	15,3765
3	6,4450	8,0609	1,5223	18,8712
4	5,8559	11,8014	1,2699	14,8807

O reator com reciclo externo de biomassa apresentou ótimos resultados para o experimento 4, com maior fração da vazão do líquido de saída do biorreator recirculando e maior fator de concentração de biomassa obtido no separador de células. Com essas condições obteve-se a menor concentração final de substrato, com o menor tempo e a segunda menor geração de produto, entretanto, com uma maior quantidade de biomassa.

Quando for de interesse capturar e utilizar os gases provenientes da digestão anaeróbia, pode-se optar pelo experimento 3, capaz de gerar maior quantidade de produto (gases) em detrimento do montante de biomassa. Além de utilizar o gás há uma diminuição da quantidade de lodo a ser tratado e disposto.

CONCLUSÕES

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.

O reator com reciclo externo de biomassa apresentou ótimos resultados para o experimento com fração da vazão do líquido de saída do biorreator recirculando de 20% e fator de concentração de biomassa obtido no separador de células de 3 vezes. Pode-se utilizar a fração da vazão do líquido de saída do biorreator recirculando de 20% e fator de concentração de biomassa obtido no separador de células de 2 vezes, gerando maior quantidade de produto em detrimento do montante de biomassa, permitindo a utilização do gás e a diminuição da quantidade de lodo a ser tratado e disposto.

Quando for de interesse capturar e utilizar os gases provenientes da digestão anaeróbia, pode-se optar pelo experimento 3, capaz de gerar maior quantidade de produto (gases) em detrimento do montante de biomassa. Além de utilizar o gás há uma diminuição da quantidade de lodo a ser tratado e disposto.

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, se mostrou 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 5.2.2 também se mostrou bastante eficiente, uma vez que se trata de um software de fácil manipulação e distribuição gratuita (freeware).

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.