



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
CAMPUS DO SERTÃO
CURSO DE ENGENHARIA CIVIL

ANDERSON DE SOUZA FRANÇA

**SIMULAÇÃO DO COMPORTAMENTO DE REATORES EM FLUXO CONTÍNUO
TRATANDO EFLUENTES DE DIFERENTES NATUREZAS**

Delmiro Gouveia
2022

ANDERSON DE SOUZA FRANÇA

**SIMULAÇÃO DO COMPORTAMENTO DE REATORES EM FLUXO CONTÍNUO
TRATANDO EFLUENTES DE DIFERENTES NATUREZAS**

Trabalho de conclusão de curso apresentado como requisito parcial para a obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Civil pela Universidade Federal de Alagoas – UFAL, Campus do Sertão.

Orientador: Prof. Dr. Antônio Pedro de O. Netto.

Delmiro Gouveia
2022

Catálogo na fonte

Universidade Federal de Alagoas

Biblioteca do Campus Sertão

Sede Delmiro Gouveia

Bibliotecária responsável: Renata Oliveira de Souza CRB-4 2209

F3814s França, Anderson de Souza

Simulação do comportamento de reatores em fluxo contínuo tratando efluentes de diferentes naturezas / Anderson de Souza França. – 2022.

56 f.: il.

Orientação: Antônio Pedro de Oliveira Netto.
Monografia (Engenharia Civil) – Universidade Federal de Alagoas. Curso de Engenharia Civil. Delmiro Gouveia, 2022.

1. Tratamento de efluentes. 2. Reator de fluxo pistonado. 3. Modelagem de sistemas. 4. Vensim PLE. I. Oliveira Netto, Antônio Pedro de. II. Título.

CDU: 628.21

Folha de Aprovação

ANDERSON DE SOUZA FRANÇA

SIMULAÇÃO DO COMPORTAMENTO DE REATORES BIOLÓGICOS DE FLUXO CONTÍNUO TRATANDO EFLUENTES DE DIFERENTES NATUREZAS

Trabalho de Conclusão de Curso (TCC)
apresentado ao colegiado do curso de Engenharia
Civil da Universidade Federal de Alagoas,
Campus do Sertão, como parte dos requisitos para
obtenção do título de Bacharel em Engenharia
Civil



Documento assinado digitalmente
ANTONIO PEDRO DE OLIVEIRA NETTO
Data: 28/11/2022 09:02:50-0300
Verifique em <https://verificador.iti.br>

Orientador: Prof. Dr. Antonio Pedro de Oliveira Netto

Banca Examinadora:



Documento assinado digitalmente
REGINA CAMARA LINS
Data: 28/11/2022 08:29:15-0300
Verifique em <https://verificador.iti.br>

Profa. Dra. Regina Câmara Lins

Eng. João Victor Tenório da Silva Santos

“...e a luz resplandece nas trevas, e as trevas não a compreenderam. ”

João 1:5.

AGRADECIMENTOS

À minha família. Muito obrigado pelo apoio e pela generosidade.

Ao Professor Antônio Pedro de Oliveira Netto, pela sempre prestimosa orientação, pela confiança e generosidade. Uma palavra o define: Mestre!

Aos Professores João Victor Tenório da Silva Santos e Regina Câmara Lins pela participação na banca avaliadora deste trabalho.

Aos colegas do curso de Engenharia Civil, em especial aos amigos Arthur Cunha, Lucas Cavalcante e Maxlander Paixão.

À minha namorada e amigos, que não recusaram orientação, conselhos e ajuda, quando preciso.

Aos Professores que me auxiliaram nesse caminho, Jéssica Beatriz, Francisca Rodrigues, e Odair Barbosa, Rogério Jesus, Thiago Bento e Vinicius Correia.

À Universidade Federal de Alagoas – Campus Sertão por ser um centro de excelência acadêmica e proporcionar aos seus alunos condições para a aquisição do conhecimento.

A todos aqueles que, de forma direta ou indireta, contribuíram para que essa etapa da jornada tenha sido realizada.

RESUMO

O Brasil apresenta um déficit considerável em relação ao tratamento de efluentes, uma vez que segundo o IBGE (2017), apenas 57,6% dos municípios brasileiros apresentam sistema de tratamento de água e esgoto, nessa perspectiva, a digestão anaeróbia se apresenta como uma solução, tanto para suprir a demanda por tratamento de resíduos de distintas origens, quanto para gerar energia elétrica de forma indireta, através do biogás. Diante disso, estudos voltados à modelagem de unidades de tratamento são de extrema importância, a fim de proporcionar economia de tempo e recursos por meio da adequada calibração dos modelos obtidos. Este estudo fundamentou-se nos dados do reator de Magassy e Oliveira Netto (2017), que se utilizou de um RCAALF (Reator Combinado Anaeróbio-Aeróbio de Leito Fixo) com recirculação da fase líquida tratando esgoto sanitário, e nos dados do reator de Gois (2017), que se utilizou de um RALF (Reator Anaeróbio de Leito Fluidizado), tratando afluente proveniente da vinhaça da cana-de-açúcar, para produção de hidrogênio e metano. Logo, utilizou-se do software Vensim PLE®, a fim de simular o comportamento da remoção de matéria orgânica, em reatores contínuos, tratando efluentes de diferentes naturezas, utilizando-se parâmetros cinéticos extraídos com auxílio de equações de modelos de escoamento ideal e dados de operação em escala laboratorial. Para verificar a similaridade entre os dados simulados e os obtidos em laboratório, foi utilizado a medição estatística do *coeficiente de correlação Pearson* (ρ). Nas simulações realizadas, as melhores correlações foram de $\rho=1$, enquanto o resultado mais fraco foi de $\rho=0,199$. A representatividade satisfatória demonstra que a simulação pode ser utilizada em processos de degradação da matéria orgânica nas condições operacionais (regime de escoamento e substrato utilizado) dos estudos avaliados.

Palavras Chaves: Tratamento de Efluentes. Reatores de Fluxo Pistonado. Vensim PLE®.

ABSTRACT

Brazil has a considerable deficit in regards of wastewater treatment, since according to IBGE (2017), only 57.6% of Brazilian municipalities have a water and sewage treatment system, on this perspective, anaerobic digestion presents itself as a solution, not only for treatment of waste from diferente sources, but also as means of indirect electricity generation, through biogas. Studies in regards of modeling treatment units are of extreme importance, in order to provide economy in time and resources through the use of the proper calibration of the obtained models. This study fundamentals itself on the data obtained via the Magassy reator and Oliveira Netto (2017), that used a CAAFBR (Combined Anaerobic-Aerobic Fixed Bed Reactor), with recirculation on the liquid stage of the sewer waste, and also using the data provided by the Gois (2017) reactor, that utilized a AFBR (Anaerobic Fluid Bed Reactor) treating sugar cane vinasse based affluent, for the production of hydrogen and methane. The software utilized was Vensim PLE®, in order to simulate the behavior of organic matter, in continuous reactors, treating effluents of different natures, using kinetic parameters extracted with the aid of equations of ideal flow models and laboratory scale operation data. To verify the similarity between the simulated data and those obtained in the laboratory, the statistical measurement of the Pearson correlation coefficient (ρ) was used. In the simulations performed, the best correlation was $\rho=1$, while the weakest result was $\rho=0.199$. The satisfactory results demonstrates that the simulation can be used in processes of degradation of organic matter in the operational conditions (flow regime and substrate used) of the evaluated studies.

Keywords: Effluent Treatment. Plug flow reactor. Vensim PLE®.

LISTA DE SIGLAS

CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
DQO	Demanda Química de Oxigênio
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
PIBIC	Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica
PNSB	Pesquisa Nacional de Saneamento Básico
RALF	Reator Anaeróbico de Leito Fluidizado
RCAALF	Reator Combinado Aeróbico Anaeróbico de Leito Fixo

LISTA DE SÍMBOLOS

rc	Velocidade de reação	$mL^{-3} \cdot h^{-1}$
k	Constante de reação	h^{-1}
C	Concentração de reação	mL^{-3}
n	Ordem da reação global	
c_0	Concentração no Afluente	mL^{-3}
$\frac{dm}{dt}$	Acúmulo de massa em função do tempo	$kg \cdot d^{-1}$
m_E	Fluxo mássico de entrada	$kg \cdot d^{-1}$
m_S	Fluxo mássico de saída	$kg \cdot d^{-1}$
m_R	Fluxo mássico que reage no interior do reator	$kg \cdot d^{-1}$
Q	Vazão	$L^3 T^{-1}$
V	Volume do reator ou volume elementar do qual reator	L^3
θ_H	Tempo de detenção hidráulico	h
K_{pr}	Constante cinética para reator pistão com recirculação	h^{-1}
C_m	Valor médio das concentrações de entrada e saída do reator	mL^{-3}
$E(\%)$	Eficiência de remoção de matéria orgânica	$\%$

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.1. Problema da Pesquisa	3
1.2. Objetivos da Pesquisa	3
1.2.1 Objetivo Geral.....	3
1.2.2 Objetivos Específicos	4
2. REFERENCIAL TEÓRICO	4
2.1. A água como garantia fundamental	4
2.2. Tratamento dos efluentes no Brasil	6
2.3. Utilização de Softwares na Pesquisa Científica	8
2.4. Principais softwares de modelagem de sistemas	12
2.4.1. Anaerobic Digestion Model N.1 (ADM1)	13
2.4.2. AquaSim.....	14
2.4.3. Vensim PLE	15
2.5. Análise Cinética em Reatores	15
3. METODOLOGIA	16
3.1. Caracterização da pesquisa	16
3.2. Coleta de dados	17
3.3. Procedimentos Metodológicos	17
3.3.1. Equacionamento da constante cinética (K) a partir do Balanço de Massa..	18
3.3.2. Simulando um reator Contínuo PFR utilizando o Vensim PLE®	23
3.3.3. Eficiência de reatores descontínuos	24

3.3.4.	Similaridade de gráficos utilizando correlação Pearson (ρ).....	25
4.	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	26
4.1.	Análise do reator contínuo de Magassy e Oliveira Netto (2017)	26
4.2.	Analisando o reator contínuo de Gois (2017)	30
5.	CONSIDERAÇÕES FINAIS	37
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	39

1. INTRODUÇÃO

Não é incomum encontrar pesquisadores e literários que considerem a água como o recurso mais importante da humanidade. Em verdade, tal afirmação encontra sua fundamentação se considerarmos as teorias evolutivas da vida no planeta terra, onde a água pode ser considerada como fator essencial para a complexa equação de fatores que resultaram na vida baseada em carbono.

Contudo, o Brasil apresenta uma situação precária tanto no que diz respeito ao tratamento de água, quanto ao saneamento básico, especialmente no que diz respeito ao tratamento de efluentes, com o crescimento acelerado dos centros urbanos, assim como o desenvolvimento das indústrias, culminaram em um aumento acentuado de poluição ambiental, principalmente nos recursos hídricos, pois, ainda hoje existem corpos de água recebendo diariamente o lançamento de efluentes em seu meio, contribuindo para a degradação desse recurso indispensável.

Efluentes não tratados lançados em corpos hídricos sofrem um processo de decomposição de sua matéria orgânica, resultando na queda drástica do OD (oxigênio dissolvido) presente no meio aquático e na geração de gases malcheirosos e corrosivos, além do fator patogênico.

Nessa perspectiva, são de grande importância pesquisas voltadas para o desenvolvimento de novas tecnologias que possam ajudar e otimizar o processo de tratamento de efluentes, visando garantir alta eficiência de suas unidades e o melhor aproveitamento do volume útil de reação e menor área de implantação.

A partir de tal premissa, a presente pesquisa possui como principal escopo a busca por melhores técnicas de tratamento deste recurso que está diretamente ligado com a qualidade de vida da sociedade.

De início, este trabalho buscou qualificar a água com conceitos que transcendessem a lógica materialista. Portanto, tal recurso hídrico foi apresentado a partir da lógica do Direito brasileiro, sendo tratado como garantia fundamental para todos os cidadãos. Tal lógica depreende-se dos recursos como bem capital, sendo compreendido tão somente como direito inerente a todos os seres humanos. Com isso, foi defendida a tese de que por força do princípio da dignidade da

pessoa humana o Estado brasileiro necessariamente deveria dispor a todos os indivíduos o acesso a água potável.

Ato contínuo, por intermédio da lógica apresentada no parágrafo anterior, a presente pesquisa passou a discutir a realidade dos sistemas de tratamento de efluentes no Brasil. Apesar de não ser o foco principal da presente pesquisa, foi abordado a precariedade da gestão nacional no tratamento de água e esgoto. De acordo com a última pesquisa do Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE), no ano de 2017, apenas 57,6% dos municípios brasileiros possuem tratamento de esgoto.

A partir de tal realidade, o presente trabalho encontra sua relevância, pois como será abordado nos capítulos seguintes, tem como objetivo principal o estudo da utilização de softwares gratuitos no planejamento de sistemas de tratamento de efluentes.

Devido à natureza do método científico, é necessário que o pesquisador utilize diversos mecanismos para o gerenciamento e simulação dos dados captados. Para tanto, o presente trabalho apresenta a utilização do Vensim PLE®, software elaborado para simular o comportamento de sistemas reais.

Desta maneira, é cediço que existem no mercado diversos outros softwares de modelagem científica, como é o caso do Aquasim, ADM1, Simulink, Vensim PLE, entre outros, que possam realizar a análise proposta na presente pesquisa. Contudo, tais programas de computador não possuem fácil acesso para todos os pesquisadores, seja devido à falta de um plano gratuito para estudante, impossibilitando assim o seu acesso, em especial para aqueles que estão inseridos na realidade das Universidades Públicas. Sendo assim, a busca de métodos diversos para a captação e simulação de dados norteiam a presente pesquisa.

Para tanto, a presente pesquisa utilizou-se do software Vensim PLE® para a análise dos dados operacionais da Demanda Química de Oxigênio (DQO), tomando como base literária as pesquisas desenvolvidas nos laboratórios de saneamento da Universidade Federal de Alagoas – UFAL.

As primeiras amostras físicas foram desenvolvidas no laboratório de saneamento da Universidade Federal de Alagoas, Campus Sertão, tendo como orientação o estudo feito por Magassy e Oliveira Netto (2017), onde foi analisado o sistema combinado de leito fixo (RCAALF), com recirculação na fase líquida, tratando esgoto sanitário. A segunda parte das

amostras, foram extraídas do estudo idealizado por Gois (2017), no laboratório de saneamento ambiental, no Centro de Tecnologia (CETEC) da Universidade Federal de Alagoas, Sede, no qual foi utilizado um reator anaeróbio de leito fluidizado (RALF) para produzir hidrogênio e metano a partir da vinhaça da cana-de-açúcar. Dessa forma, os dados captados foram inseridos no sistema do Vensim PLE® para a devida elaboração dos gráficos que denotam a remoção de matéria orgânica no reator, assim como a produção de ácidos orgânicos, dos quais foram objetos da análise comparativa entre os resultados coletados na base literária.

1.1. Problema da Pesquisa

Uma vez verificada a necessidade de utilização de softwares científicos dentro do cenário de pesquisa das Universidades Públicas originou-se a necessidade de utilização de programas mais acessíveis. Para tanto, a presente pesquisa se propõe a responder a seguinte problemática: **Poderia o software Vensim PLE® simular o comportamento da remoção de carbono (em termos de DQO) e a formação de ácidos orgânicos de reatores contínuos do tipo pistão tratando de efluentes de diferentes naturezas?**

A justificativa do trabalho está intrinsecamente ligada a necessidade de adaptação da simulação de dados em sua concepção por softwares gratuitos, afim de prever e observar fenômenos e situações com acurácia e precisão, com o objetivo de democratizar a produção de conhecimento científico.

Por fim, foi adotada a seguinte hipótese: O Vensim PLE®, em seu plano gratuito conseguiu de fato realizar a devida simulação da hidrodinâmica do reator contínuo tipo pistão?

1.2. Objetivos da Pesquisa

Para responder ao problema de pesquisa foi definido um objetivo geral, além de um conjunto de objetivos específicos, conforme detalhados a seguir.

1.2.1 Objetivo Geral

Realizar a análise comparativa entre os resultados experimentais da operação de reatores cinéticos contínuos e os dados obtidos através da simulação realizada com apoio do Vensim

PLE®, em prol da validação do software para acompanhamento do comportamento de sistemas biológicos.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Obter modelos e parâmetros cinéticos para a remoção de matéria orgânica, em termos de DQO, em reatores de fluxo contínuo;
- Obter modelos e parâmetros cinéticos para produção de ácidos orgânicos em reatores de fluxo contínuo;
- Validar os modelos obtidos fazendo comparações com os dados experimentais de sistemas de tratamento similares;

2. REFERENCIAL TEÓRICO

2.1. A água como garantia fundamental

A água é um elemento indispensável para a vida humana, animal e vegetal, tratando-se de um bem fundamental para toda a vida no planeta terra. Como tal a água “é bem essencial à sobrevivência dos seres bióticos, estando intrinsecamente ligada à saúde e à dignidade da pessoa humana” (FLORES, 2011, p. 2).

Contudo, a literatura não considera a água como um mero bem, visto que se trata de um requisito essencial para a manutenção da vida. O conceito de água transcende a qualidade de coisa expressada no nosso ordenamento jurídico. Nesse sentido, colaciono a seguinte definição acerca de água e recursos hídricos:

Assim, grosso modo, sustenta-se que o termo água serve para designar o elemento natural, bem comum, desprovido de valor econômico, tal como a água das chuvas, dos rios, lagos e oceanos. Enquanto que a expressão recurso hídrico, bem econômico, é utilizado quando faz-se referência a sua utilização, quando pode ser valorada e cobrada, como por exemplo, a água que abastece as casas e as indústrias, ou mesmo, a destinada à irrigação da lavoura (FLORES, 2011, p. 3).

Conclui-se, portanto, que o termo água se trata de um gênero, onde recursos hídricos são entendidos como espécie. Dessa forma o termo água pode ser utilizado tanto para expressar aquele bem indispensável à vida no planeta, bem como ao produto comercializado pela administração pública por meio das empresas concessionárias de água. Para tanto, na presente pesquisa será utilizado o termo água de forma genérica, abrangendo, portanto, as duas definições aqui apresentadas.

Inicialmente, vale ressaltar que apesar de tratar-se de um bem indispensável para a vida no planeta, a água não possui tratamento de serviço ou bem essencial pelo nosso ordenamento jurídico. Em nenhum dos 250 artigos da Constituição Federal há a previsão expressa de que a água é um direito fundamental de todos os cidadãos brasileiros.

Contudo, isso não significa dizer que o Estado brasileiro não possui a obrigação de dispor de um sistema de distribuição e tratamento de água para com a sua população. Na verdade, mesmo não havendo previsão expressa do direito fundamental à água na Carta Magna, ainda assim o Estado deverá garanti-lo a todos.

Existem na doutrina brasileira diversos argumentos que sustentam a tese de que o Estado brasileiro reconhece indiretamente o direito fundamental à água. O principal argumento que sustenta a tese do direito fundamental a água advém de uma interpretação extensiva do princípio constitucional da dignidade da pessoa humana, nesse sentido colaciono a seguinte afirmação:

O acesso a água é um dos serviços essenciais a serem prestados ao cidadão, sendo protegido por um dos princípios pilares da nossa Constituição, que é o princípio constitucional da dignidade humana [...] (SOUZA, 2021).

O princípio da dignidade da pessoa humana norteia todo o ordenamento jurídico pátrio, ao qual está previsto no Art. 1º, inciso III da Constituição Federal de 1988. Percebe-se, portanto, que o constituinte originário destinou um tratamento especial para este princípio ao elenca-lo expressamente logo em seu primeiro artigo.

Antes de irmos adiante se faz necessário discutirmos o princípio da dignidade da pessoa humana, pois o mesmo será considerado como fundamento jurídico para a garantia a todos ao acesso da água potável perante o Estado brasileiro.

Em suma o princípio da dignidade da pessoa humana “se refere à garantia das necessidades vitais de cada indivíduo, ou seja, um valor intrínseco como um todo” (PEREIRA, 2020). Sendo assim, o ordenamento jurídico brasileiro deve dispor de diversos sistemas e mecanismos que

tragam o mínimo existencial para os indivíduos. Ainda sobre a definição do princípio supracitado colaciono o seguinte entendimento:

Assim, a dignidade da pessoa humana, ao compor o rol dos princípios fundamentais, constitui um princípio de feições absolutas, razão pela qual sempre e em todos os casos haverá de prevalecer (no sentido de harmonização, integração e correlação) em relação aos demais princípios, por ser o valor fonte da ordem jurídica, e o homem, o valor fonte dos direitos humanos, em razão de possuir a essência que é a dignidade, de ter direito a ter direitos à saúde, à previdência, à assistência social, ao lazer, à educação, à moradia – a um mínimo existencial (SILVA, 2022).

Logo, se a dignidade da pessoa humana é um dos princípios norteadores do direito constitucional, e infraconstitucional, brasileiro subentende-se que o direito à água está incluso naquele princípio. Ora, se é obrigação do Estado dispor das necessidades vitais de cada indivíduo o livre acesso à água está incluso nessa obrigação.

Ademais, é importante salientar que ainda por força do princípio da dignidade da pessoa humana o cidadão tem o direito à água limpa e potável, visto que de nada adiantaria a mera disposição do recurso hídrico impróprio para o consumo humano.

Dessa forma, a partir de tal afirmação conclui-se que o poder público possui a obrigação de distribuir água própria para o consumo humano, animal e vegetal para todos os cidadãos brasileiros.

Sendo assim, a presente pesquisa trata-se, em última instância, da concretização do princípio da dignidade da pessoa humana. Especialmente por buscar formas mais eficazes de planejamento dos sistemas de tratamento de água e efluentes.

2.2. Tratamento dos efluentes no Brasil

Como foi abordado anteriormente, não basta somente que o Estado disponha dos recursos hídricos para a população. É necessário que estes recursos estejam em condições de uso de um modo geral, seja para consumo ou não.

Contudo, apesar do grande volume de água doce presente no Brasil, é necessário que o Estado disponha de mecanismos de tratamento destes recursos. Para tanto, existem diversos sistemas de tratamento de efluentes, dos quais são objetos de discussão do presente capítulo.

De acordo com o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE) o tratamento dos recursos hídricos configura atividade essencial para o efetivo combate a diversos tipos de doenças. Para tanto, transcrevo o seguinte enunciado:

Após a utilização da água para consumo humano, o esgoto gerado deve ter uma destinação adequada a fim de garantir não só a prevenção de uma série de doenças, como também condições dignas de habitação e a preservação do meio ambiente (IBGE, 2020, p. 57).

Dessa forma, o poder público utiliza-se de um sistema de coleta e tratamento de saneamento básico ao qual é composto pelas “infraestruturas e instalações operacionais adequadas de coleta, transporte, tratamento e disposição final do esgoto sanitário” (IBGE, 2020, p. 57).

Preliminarmente, salienta-se que a última Pesquisa Nacional de Saneamento Básico (PNSB) aconteceu em 2017. Sendo assim, estes dados podem não mais representar a realidade nacional, contudo por se tratarem de uma pesquisa realizada em todo território nacional pelo órgão de geografia e estatística deverá ser utilizada como base para este capítulo.

De início a pesquisa aponta que cerca de 3.206 dos municípios possuíam serviço de esgotamento sanitário por rede coletora em todo território nacional (IBGE, 2020, p. 57 e 58). Apesar de parecer uma boa quantidade, na realidade este número representa cerca de 57,6% de todos municípios brasileiros. Dessa forma, aproximadamente boa parte dos Municípios não possuem um tratamento, por menos adequado que seja, de tratamento de esgoto.

Tal discrepância é mais perceptível quando analisamos as regiões do Brasil isoladamente, onde ao norte do país este número é ainda maior, vejamos:

Na região sudeste, a maioria dos municípios (95,9%) possuía serviço de esgotamento sanitário, enquanto, nas demais regiões, esse percentual situou-se abaixo de 50%: na região nordeste, 49,0%; na região sul, 40,9%; na região centro-oeste, 38,1%; e, na região norte, 13,8% (IBGE, 2020, p. 57 e 58).

A pesquisa aponta ainda que cerca de 11 dos estados brasileiros possuem mais de 50% dos municípios com sistema de tratamento de esgoto, onde “sendo os extremos representados pelos estados de São Paulo (100%) e Maranhão (6,5%)” (IBGE, 2020, p. 58).

Ademais, percebe-se ainda que nos municípios mais populosos há uma frequência maior da presença de tratamento dos esgotos. Onde cerca de 97,6% das cidades com mais de 500 mil habitantes dispõem de estação de tratamento (IBGE, 2020, p. 58).

Em relação aos domicílios a pesquisa aponta uma grande discrepância em relação ao acesso ao tratamento do esgoto sanitário. Onde de acordo com a Associação Mineira de Municípios (2020):

São 34,1 milhões de domicílios sem serviço de esgotamento sanitário no Brasil, o que representa 49,9% do total. As informações são fruto de um cruzamento de dados com a Pesquisa Nacional por Amostra de Domicílios Contínua (Pnad Contínua). Só na região nordeste são 13,6 milhões de domicílios que não possuíam o serviço, representando 74,6% do total da região (AMM, 2020).

Ainda sobre o esgotamento sanitário os números apontam que apenas 67% do esgoto emitido foi coletado pela rede de tratamento. Dessa forma, todo o restante é conduzido sem o devido tratamento (AMM, 2020).

Menos da metade dos municípios com tratamento de esgoto dispõe de agência reguladora, o que pode refletir na ineficácia do sistema de tratamento. Nesse mesmo entendimento colaciono:

Somente 46,5% dos municípios com serviços por rede coletora de esgotamento sanitário em funcionamento possuíam órgão regulador. Nos serviços de abastecimento de água, esse percentual atingiu 69,5%. E apenas 11 estados possuíam prazo médio até 2030 ou menos, ano de referência nos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável, para universalização dos serviços de abastecimento de água e esgotamento sanitário (MUNDOGEO, 2021).

Diante da necessidade, é essencial a manutenção de uma proposta de intervenção acerca da problemática da falta de cobertura de coleta, assim como o tratamento de efluentes. Afim de solucionar essa problemática, o investimento no desenvolvimento tecnológico do setor de saneamento é imprescindível, pois com ajuda de novas tecnologias e softwares especializados, é possível ter uma gestão mais integrada, automatizada, e de menor custo.

2.3. Utilização de Softwares na Pesquisa Científica

Desde a antiguidade a humanidade vem produzindo conhecimento científico havendo, portanto, inúmeros exemplos em diversos momentos históricos. Tal afirmação pode ser comprovada a partir do fato de que as pirâmides do Egito necessitaram de um sistema complexo de logística para sua construção. Ademais, há ainda exemplos clássicos na Grécia e Roma antiga, onde diversos conceitos de cartografia e filosofia foram produzidos.

A literatura costuma dividir a produção de conhecimento científico como ciência antiga e ciência moderna, onde aquela era caracterizada pela compreensão do mundo e dos fenômenos da natureza a partir de conceitos místicos e religiosos. Em contra partida, a chamada ciência moderna é caracterizada pelo chamado método científico (MUNDO, 2022).

Sendo assim, a produção do conhecimento científico passou por diversas mudanças e adaptações no decorrer do tempo. Porém, as principais mudanças advêm do constante avanço nas ferramentas de pesquisa e análise de dados.

Dessa forma, temos em pouco menos de 50 anos a chamada a revolução tecnológica, onde especialmente depois da segunda guerra mundial os dispositivos tecnológicos foram desenvolvidos de maneira estrondosa. E com isso, as ferramentas de produção de conhecimento científico se desenvolveram proporcionalmente com este fenômeno. Ato contínuo, atualmente a produção científica vem sendo auxiliada por diversos mecanismos tecnológicos, segundo Martins e Theóphilo (2009) “durante os últimos 20 anos, o campo da estatística sofreu uma mudança extraordinária pelo desenvolvimento de softwares para realizar análises”.

Grandes centros de pesquisas utilizam os chamados supercomputadores para as mais diversas pesquisas. Por exemplo a Universidade Federal de Goiás adquiriu para o seu acervo de pesquisa um dos supercomputadores mais potentes da América Latina, onde colaciono:

O Centro de Excelência em Inteligência Artificial (Ceia) da UFG inaugurou, nesta quinta-feira (21/10), um supercomputador para inteligência artificial com configuração inédita na América Latina. O equipamento foi adquirido com investimento de R\$ 1,4 milhão da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás (Fapeg) e aporte de recursos da Procuradoria Geral do Estado de Goiás (PGE-GO). O evento de inauguração foi realizado no Instituto de Informática (INF) da UFG, com mediação do diretor Eliomar Lima, e contou com a participação da Reitoria e dos parceiros na iniciativa.

Porém, a utilização de tecnologias na produção científica não se limita ao manuseio de equipamentos eletrônicos superdesenvolvidos. A realidade da maioria dos centros de pesquisas pelos brasileiros não está embarcada com supercomputadores ou colisores de partículas. Na verdade, a maior parte do conhecimento produzido no Brasil advêm das universidades públicas, onde essencialmente não dispõem de uma estrutura robusta. Sendo assim, a produção de conhecimento científico no território nacional está mais associada as ferramentas de pesquisas de fácil acesso.

Nesse cenário, um dos meios mais comum na produção de conhecimento científico é a utilização de softwares que auxiliam a captação e simulação de dados. Software é uma terminação tecnológica que se refere a “coleção de dados ou instruções que informam a um mecanismo como trabalhar”, onde, de maneira mais simplificada, são os programas e aplicativos utilizados no celular ou computador (COSTA, 2020).

Os softwares são aplicações elaborados por programadores, dos quais possuem uma infinidade possibilidades de uso. Onde dentro do cenário de produção de conhecimento científico podem auxiliar o pesquisador na captação e na simulação dos dados. Devido a sua utilidade diversificada, os softwares possuem diversas denominações, na presente pesquisa focaremos nos chamados softwares científicos. Sendo assim, colaciono a seguinte definição acerca da referida espécie de software:

O campo científico não é exceção e os cientistas do século XXI não utilizam mais somente os métodos do passado. Os Softwares Científicos, desenvolvidos especificamente para atender às necessidades de cada cientista em sua respectiva área de atuação, tornaram-se com isso muito importante tanto em seu desenvolvimento quanto em sua utilização (Hannay et al., 2009) e, dependendo da natureza da atividade científica em questão, essenciais (SOUZA, 2011, p. 17).

Contudo, a mera existência de softwares especializados na área acadêmica não pressupõe a sua utilização generalizada. Em verdade, os pesquisadores não estavam acostumados com o manuseio e utilização de computadores e internet, portanto, não haveria também uma utilização efetiva dos softwares científicos. Contribuindo com este pensamento trago a seguinte afirmação:

Entretanto, ainda na atualidade, os dados das pesquisas científicas são processados e montados de maneira arcaica, gerando um grande trabalho manual para processamento dos dados. Isto ocorre pela falta de conhecimento nas ferramentas que já existem e para que servem (GONÇALVES, 2016, p. 39).

Desde então, os pesquisadores, após uma certa trava inicial, passaram cada vez mais a utilizarem os mecanismos produção de conhecimento científico com o uso dos chamados softwares científicos. Este fenômeno é definido por Nívea Bellose Oliveira de Souza (2011) como computação científica, onde nos termos da autora:

A computação científica tem crescido rapidamente através do uso de tecnologias avançadas e resolução de problemas complexos e ela completa os pilares tradicionais da Ciência: teoria e experimentação (SOUZA, 2011).

Uma vez ultrapassada tal barreira, a produção de conhecimento científico tornou-se cada vez mais informatizada e, portanto, mais célere. Com a utilização de computadores e da rede de internet o conhecimento acadêmico passou a ser cada vez mais difundido. Nesse sentido, o pesquisador Fermino (2019) dispõe que:

A produção de artigos científicos, monografias, dissertações e teses podem ser facilitadas com auxílio de softwares, tornando os pesquisadores muito mais produtivos e focados. Assim como o Lightroom ajuda fotógrafos e o AutoCAD ajuda engenheiros, há muito a se aprender com o uso de ferramentas digitais na

organização, redação e análise de dados quantitativos e qualitativos de trabalhos acadêmicos (FERMINO, 2019).

Dessa forma, a utilização dos chamados softwares científicos traz para a pesquisa científica inúmeros benefícios, dos quais transcendem a mera captação e análise dos dados. A utilização de meios tecnológicos na produção de conhecimento auxilia a produção de conhecimento até mesmo no ato de catalogar as referências, onde:

Catalogar referências pode ser um pesadelo, se feito manualmente, mas se torna uma tarefa muito tranquila com uso algumas ferramentas gratuitas, tais como o Zotero (www.zotero.org) e Mendeley (www.mendeley.com), que são os dois softwares de gerenciamento de citações mais utilizados atualmente no mundo acadêmico (FERMINO, 2019).

A utilização de softwares científicos auxilia a reduzir o tempo gasto na análise e codificação dos dados, permitindo a documentação de todas as partes da pesquisa, resultando assim em um método mais transparente e objetivo. (PREDIGER e ALLEBRANDT, 2016, p. 2).

Um dos exemplos de softwares que são indispensáveis para a pesquisa científica moderna é o Excel. Como uma das ferramentas do pacote Office, o Excel foi desenvolvido com o intuito de ser ferramenta básica para o cotidiano administrativo empresarial. Contudo, devido a sua ampla aplicabilidade e seu fácil manuseio, o Excel, assim como o próprio Word também do pacote Office, tem sido amplamente utilizado na pesquisa científica. A ferramenta possui diversos utilitários internos, dos quais destacam-se:

O Excel é utilizado como base para banco de dados, sendo possível adicionar um banco de dados a partir de uma planilha e com a disposição das mesmas funções de um banco de dados: consultar, buscar, ordenar, filtrar, calcular, etc. Também utilizado para armazenar dados de compras e vendas de produtos, custos e orçamentos familiares (GONÇALVES, 2016, p. 43).

A ferramenta supracitada também é bastante utilizada no campo das ciências exatas, pois [...] é possível economizar tempo e etapas utilizando as extensões de Ferramentas de análise do Excel (GONÇALVES, 2016, p. 44).

Outra ferramenta amplamente utilizada no meio acadêmico é o Stat Action Pro, ao possui uma maior flexibilidade e agilidade nos dados inseridos no Excel. Onde de acordo com Bruna Beza da Silva Gonçalves (2016) o programa:

[...] é um sistema estatístico essencial para quem precisa realizar as principais análises estatísticas. O sistema possui diversas ferramentas básicas, análises gráficas de variância, modelos de regressão, testes de hipóteses paramétricas e

não paramétricas, cálculo do tamanho da amostra, análise e previsão de séries temporais entre outros (GONÇALVES, 2016, p. 45).

Fora das ciências exatas a ferramenta NVIVO possui ampla utilidade quando se trata de pesquisa que utilizem grandes volumes de dados textuais em pesquisas quantitativas ou qualitativas. A ferramenta pode ser descrita como:

[...] um sistema que suporta métodos qualitativos e variados de pesquisa. Foi projetado para auxiliar na organização, na análise e ao encontrar informações em dados não estruturados ou qualitativos como: entrevistas, respostas abertas de pesquisa, artigos, mídias social e conteúdo web (GONÇALVES, 2016, p. 47).

Existem ainda inúmeras outras ferramentas que podem ser utilizados no processo de produção de conhecimento científico. Dentre as principais utilidades temos: ferramentas para a publicação de pesquisas, citações, escrita, revisão, detecção de plágio e aprimoramento da redação, ferramentas para produzir visualmente dados, gráficos e informações, análise e coleta de dados, e até mesmo ferramentas para se conectar com pesquisadores (EVEN3BLOG, 2022).

Depreende-se que atualmente a produção científica está intrinsecamente ligada a utilização de mediação tecnológica. Dessa forma, seria virtualmente, e humanamente, impossível trazer para o corpo da presente pesquisa todos os casos e programas que podem impactar diretamente na produção de conhecimento científico.

Isto posto, uma vez que a presente pesquisa possui como escopo principal a avaliação da utilização de simulação de dados por meio de softwares de modelagem, passaremos a análise dos softwares de modelagem acerca do tratamento de efluentes mais conhecidos no mundo acadêmico.

2.4. Principais softwares de modelagem de sistemas

Sistemas contendo mecanismos biológicos apresentam grande variabilidade de desempenho, e fatores internos e externos podem afetar direta e indiretamente o funcionamento normal dos biorreatores. Afim de tentar descrever e reproduzir tal funcionamento, a modelagem matemática desempenha um papel fundamental. Devido à complexidade do modelo e dos processos bioquímicos e físico-químicos que ele representa, várias etapas devem ser seguidas para garantir um bom desempenho e confiabilidade dos resultados. Os passos no processo de modelagem incluem: definição do objetivo e conceituação do modelo, formulação matemática, calibração, análise de sensibilidade, verificação e validação (Jorgensen, 2011; Orlob, 1983).

Entre os diversos softwares amplamente utilizados para a criação de modelos baseados em dinâmica de sistemas, pode-se mencionar: o ADM1, AquaSim, Powersim, Vensim PLE e Simulink. Segundo Ford (2009), os modelos podem ser vistos como uma coleção de equações diferenciais de primeira ordem, com uma equação diferente para cada variável de acumulação. As equações necessárias para criar modelos realistas são quase sempre não lineares, portanto, faz sentido resolver as equações através da diferenciação e a integração numérica.

2.4.1. Anaerobic Digestion Model N.1 (ADM1)

O principal objetivo do grupo de trabalho por trás do ADM1 era promover uma aplicação de modelo genérico de digestão anaeróbica, que por sua vez englobasse os diversos estudos realizados anteriormente, ou seja, que servisse como base para simulações dinâmicas dos processos de tratamento doméstico (águas residuais e lamas) até aplicações industriais especializadas, e padronizasse os parâmetros e as variáveis dos modelos de digestão anaeróbia. Com isso, o objetivo do modelo contemplava ampliar o conhecimento, aplicação, operação e otimização do processo de digestão anaeróbia e englobar quase todos os processos presentes nos diversos fenômenos da digestão anaeróbia (Silva, 2015).

O desenvolvimento do ADM1 possibilita a utilização generalizada do largo campo do conhecimento sobre o processo anaeróbio, facilitando os estudos de pesquisa e a experiência operacional. Além disso, o ADM1 pode ser executado no software Matlab que é de fácil acesso e possui um padrão de linguagem universal.

As saídas do modelo incluem variáveis de processo comuns, como fluxo e composição de gás, pH, ácidos orgânicos separados e amônio. A estrutura foi concebida para encorajar extensões ou modificações específicas quando necessário, mas ainda manter uma plataforma comum. (IWA TASK GROUP FOR MATHEMATICAL MODELLING OF ANAEROBIC DIGESTION PROCESSES, 2002).

O ADM1 inclui: 19 taxas de processos bioquímicos e de transferência da fase gasosa para líquida, 105 parâmetros cinéticos e estequiométricos e 6 processos cinéticos adicionais do equilíbrio ácido-base (Silva, 2015). Assim como também permite ao usuário construir uma equação diferencial de primeira ordem para cada composto bioquímico/químico introduzido na simulação. Em sua aplicação o modelo genérico do ADM1 propõe vários benefícios, tais como:

- Aumento da aplicação do modelo na otimização de projetos de ampla escala e operação
- Desenvolvimento de trabalhos adicionais em otimização e controle de processos, destinado a implementação direta em projetos de larga escala;
- Base comum para o desenvolvimento de modelos e estudos de validação para gerar resultados mais comparáveis e compatíveis;
- Auxílio tecnológico transferido da pesquisa para a indústria.

Entretanto, como qualquer outro modelo, o ADM1 apresenta algumas limitações. Durante a sua elaboração, alguns processos foram excluídos, na maioria dos casos, devido à escassez de informação disponível na literatura da época (Batstone *et al.*, 2002a).

2.4.2. AquaSim

O AquaSim 2.0® é um software livre que permite realizar a simulação e análise de dados de sistemas aquáticos através da definição de substâncias a serem modeladas e dos processos envolvidos (REICHERT, 1994). Trata-se de um instrumento numérico de simulação ambiental que permite identificar, testar virtualmente e analisar dados de sistemas aquáticos, naturais ou artificializados. O software por sua vez, permite-se a utilização em diferentes campos, como, a modelação de águas interiores com disfunções ambientais, RODRIGUES *et al.* (2006), sistemas de tratamento de águas residuais, NOGUEIRA *et al.* (2005), e contaminação de solos, MARTINS *et al.* (2005).

O modelo consiste na definição de um sistema de equações diferenciais parciais e/ou ordinárias que, de forma determinística, descrevem as interações das variáveis de estado do sistema aquático. As equações diferenciais para o fluxo de água e transporte das substâncias são selecionadas pela escolha do compartimento, sendo a descrição dos processos biogeoquímicos caracterizada por uma estrutura aberta. O AquaSim disponibiliza um procedimento de análise de sensibilidade sendo passível de simular condições transientes, SHANAHAN *et al.* (1998).

A maior limitação do programa é que este considera os gradientes de variação espacial de substrato e de microrganismos junto ao biofilme, somente na direção perpendicular do material suporte – substratum (Wanner e Morgenroth, 2004).

2.4.3. Vensim PLE

O software elaborado pela Ventana Systems, Inc., tem como principal objetivo melhorar o desempenho de sistemas reais. Ele é utilizado para desenvolver, analisar e empacotar modelos de feedback dinâmico. Segundo Logatti (2019), o Vensim PLE® (Personal Learning Edition) tem como função introduzir o usuário ao sistema de modelos dinâmicos, ele é gratuito para o uso educacional e acadêmico. A principal função do software é o Causal Tracing TM que permite descobrir quais coisas estão fazendo com que outras mudem.

Dentre os programas, citados anteriormente, todos apresentam uma interface, o que permite a criação e o desenvolvimento de modelos com clareza visual. O Vensim foi empregado na presente pesquisa para desenvolver o modelo proposto, devido a sua facilidade na aprendizagem, e pela capacidade de simular o comportamento dinâmico com maior facilidade e nitidez visual, características também mencionadas por Ford (2009). No âmbito dos recursos hídricos e de tratamento de águas, o Vensim tem sido aplicado em vários trabalhos, como os de Liu et al. (2008), Gonçalves (2009) e Wei et al. (2012), Cunha (2022) entre outros. No relacionado, especificamente, ao uso do Vensim para simulação e análise de reatores, pode-se citar o trabalho de Cunha (2022) que por sua vez utilizou-se de métodos matemáticos para validar os dados simulados a partir do software.

2.5. Análise Cinética em Reatores

O projeto de implantação de um reator conta com o auxílio de uma série de áreas de estudos, como termodinâmica, hidrodinâmica, cinética química, mecânica dos fluidos, transferência de calor, transferência de massa e análise econômica. A engenharia das reações químicas engloba grande parte destas vertentes científicas, que em conjunto possibilitam a concepção adequada de um reator (LEVENSPIEL, 2000).

Assim como a cinética e a hidrodinâmica de reatores são dois fatores que afetam consideravelmente a digestão anaeróbia no tratamento de efluentes, também é importante determinar a sua ordem de reação. A ordem de uma reação química é a relação matemática que existe entre a taxa de desenvolvimento ou velocidade da reação e a concentração em quantidade de matéria dos reagentes. Von Sperling (1996) representa a associação entre a velocidade de

reação, a concentração do reagente e a ordem da reação, através da seguinte expressão:

$$r_c = \pm kC^n \quad (1)$$

Onde:

r_c = velocidade de reação ($mL^{-3} \cdot h^{-1}$);

k = constante da reação (h^{-1});

C = concentração do reagente (mL^{-3});

n = ordem da reação global.

Sobre reações que ocorrem no tratamento de efluentes, em sua maioria, elas seguem uma cinética de primeira ordem. Vale ressaltar que o mecanismo de processamento do tratamento através de biorreatores envolve vários componentes que podem afetar todo o processo, assim como seu resultado.

3. METODOLOGIA

3.1. Caracterização da pesquisa

Este estudo foi desenvolvido em caráter quantitativo e experimental por meio da análise de dados operacionais de reatores em escala de bancada (laboratorial), incluindo o uso do software de modelagem de dinâmica de sistemas, Vensim PLE[®], para simulação de dados da concentração da Demanda Química de Oxigênio (DQO) efluente, assim como a produção de ácidos orgânicos, intermediários do processo de digestão anaeróbia. A pesquisa buscou realizar

a análise comparativa entre valores reais e simulados, verificando assim suas similaridades entre as linhas de gráfico, como também suas respectivas eficiências com relação a remoção de matéria orgânica.

3.2. Coleta de dados

Para o estudo, foi realizada uma revisão bibliográfica de dados de periódicos, artigos, livros e documentos que abordam a temática. Em seguida, foram analisados dados operacionais de estudos científicos anteriores relacionados à avaliação do desempenho de filtro biológico como pós-tratamento de reatores com tendência ao escoamento pistonado.

Os trabalhos utilizados para fornecimento dos dados de concentrações de afluente foram desenvolvidos por Magassy e Oliveira Netto (2017) com um reator Combinado Anaeróbio-Aeróbio de Leito Fixo (RCAALF), com recirculação na fase líquida, alimentado pelo efluente da Universidade Federal de Alagoas-UFAL / Campus Sertão e por Gois (2017) que se utilizou de um Reator Anaeróbio de Leito Fluidizado (RALF), tratando afluente proveniente da vinhaça da cana-de-açúcar, para produção de hidrogênio e metano.

Após a coleta de dados, foi realizado um equacionamento da constante cinética de acordo com as características dos reatores, para que assim possam ser feitos os cálculos para cada amostra de cada pesquisa estudada, lançando suas informações e resultados das constantes cinéticas obtidas no Vensim PLE[®], extraíndo o comportamento das curvas do consumo de DQO e, por fim, foi feita sua verificação por meio da correlação de Pearson entre os dados da demanda química de oxigênio em laboratório, dos ácidos orgânicos e os gerados pelo software utilizado.

3.3. Procedimentos Metodológicos

Quanto aos procedimentos metodológicos, a pesquisa foi desenvolvida em caráter quantitativo, pois para a construção desta monografia foram utilizados dados experimentais de reatores operados por outros pesquisadores, tendo como seu escopo a realização da análise comparativa do comportamento operacional entre os reatores em laboratório com o executado pelo Vensim PLE[®]. Este formato de pesquisa, conforme Proetti (2018), tem como objetivo demonstrar, de forma quantificada, a importância de dados coletados em uma verificação,

tratando-se de mensurar para comprovar medidas, de maneira precisa e confiável, a análise estatística.

3.3.1. Equacionamento da constante cinética (K) a partir do Balanço de Massa

Após a investigação de dados operacionais coletados, sendo eles o tempo de detenção hidráulico, assim como as concentrações nos afluentes e efluentes o próximo passo consistiu na aplicação de conhecimentos sobre cinética química para elaborar o equacionamento da constante cinética (K) para reatores em fluxo pistão, a partir da sentença matemática do balanço de massa, dada pela seguinte expressão:

$$ACÚMULO = ENTRADA - SAÍDA \pm REAÇÃO \quad (2)$$

Onde:

Entrada de Matéria – Entrada física do componente no sistema expresso em vazão mássica;

Saída de Matéria – Saída física do componente do sistema expresso em vazão mássica;

Conversão da Matéria (reação) – O termo de conversão será positivo quando se tratar de formação ou geração e negativo quando se tratar de consumo. Este é um termo tipicamente bioquímico e é neste termo que se insere o modelo cinético como velocidades de consumo, formação ou geração;

Acúmulo de Matéria – Este termo se refere à variação da grandeza (concentração de substrato, produto ou biomassa) em função do tempo (estado transiente). Em sistemas contínuos em regime permanente este termo é nulo.

Sendo reescrita como:

$$\frac{dm}{dt} = m_E - m_S - m_R \quad (3)$$

Onde:

$\frac{dm}{dt}$: acúmulo de massa em função do tempo ($kg. d^{-1}$);

m_E : Fluxo mássico de entrada ($kg. d^{-1}$);

m_S : Fluxo de mássico de saída ($kg. d^{-1}$);

m_R : Fluxo mássico que reage no interior do reator ($kg. d^{-1}$).

Von Sperling (1996, p. 196) afirma que lagoas com relação entre comprimento e largura (L/D) próxima a 1 tendem a mistura perfeita, enquanto o recomendado para lagoas facultativas normalmente recai na faixa entre 2 e 4, que se adequam melhor ao fluxo pistonado. Como a relação (L/D) entre a altura e diâmetro em ambos os reatores é maior do que 3, considerou-se que se tratavam de reatores com tendência a escoamento tubular ideal Plug-Flow Reactor (PFR), sendo regidos pelo mesmo equacionamento em seu sentido radial. Segundo Mushtaq (2014), o comportamento de um reator tubular ideal prevê que não existem misturas axiais e nem gradientes radiais de temperatura ou concentração, logo:

$$\frac{dm}{dt} = 0 \quad (4)$$

Assim, analisou-se uma porção infinitesimal de seu volume para chegarmos em uma equação válida. Dessa forma, aplicando tais considerações na equação de balanço de massa para reator operado sem recirculação, obtém-se:

$$0 = Q C_{(x)} - Q C_{(x+\Delta x)} + \int_0^V r dV \quad (5)$$

$$Q (C_{(x+\Delta x)} - C_{(x)}) = r V \quad (6)$$

A diferença entre o ponto x+1 e o ponto x = dC

$$Q (dC) = r V \quad (7)$$

$$dC = r \frac{V}{Q} \quad (8)$$

A razão entre o volume e a vazão é o tempo de detenção hidráulica, θ_H

$$dC = r \theta_H \quad (9)$$

Para uma equação de primeira ordem ($r = kC$):

$$dC = -k C \theta_H \quad (10)$$

$$\frac{dC}{C} = -k \theta_H \quad (11)$$

$$\int_{C_0}^C \frac{dC}{C} = -k \theta_H \quad (12)$$

$$\ln C - \ln C_0 = -k \theta_H \quad (13)$$

Por fim, calculou-se a constante de reação (k) em reatores PFR que não operam com recirculação, isolando-a da seguinte maneira:

$$\therefore k = -\frac{1}{\theta_H} * \ln\left(\frac{C}{C_0}\right) \quad (15)$$

Onde:

k : Constante cinética para reator pistão sem recirculação;

θ_H : Tempo de detenção hidráulica;

C : Concentração inicial;

C_0 : Concentração final.

No caso em que o reator foi operado em estado de recirculação da fase líquida, foram feitas considerações empíricas. Determinou-se que a concentração do parâmetro analítico na parte infinitesimal da entrada do reator foi o valor encontrado através da equação de diluição de vazões (Equação 16). Essa consideração é razoável pois os dois fluxos (alimentação e recirculação) se misturaram após o efluente retornar à linha de fluxo na entrada do reator.

Expressando a constante de reação para recirculação $r=1$ (Vazão de recirculação igual a de alimentação):

$$\therefore K_{pr} = -\frac{1}{\theta_h} \ln \frac{C_f}{C_m} \quad (16)$$

Onde:

C_m – Valor médio das concentrações de entrada e saída do reator;

K_{pr} – Constante cinética para reator pistão com recirculação.

Para a determinação do valor médio das concentrações (C_m), afim de usá-lo para os cálculos da constante cinética com recirculação, partimos da equação 2, fazendo as devidas modificações temos:

$$(Q \cdot C_i + Q_r \cdot C_f) - (Q + Q_r) \cdot C_m = 0 \quad (17)$$

Onde:

Q_r : Vazão de recirculação.

Isolando C_m na equação supracitada, obtemos a equação do valor de mistura das concentrações para razão de recirculação ($r=1$), onde (r) é a relação entre a vazão de recirculação e a de alimentação, (Equação 18):

$$1 = \frac{Q_r}{Q} \quad \therefore Q = Q_r \quad (18)$$

Temos:

$$C_m = \frac{Q \cdot C_i + Q_r \cdot C_f}{(Q + Q_r)} \quad (19)$$

Para determinar a equação para ($r=2$), temos:

$$2 = \frac{Q_r}{Q} \quad \therefore \quad 2Q = Q_r \quad (20)$$

Logo:

$$cm = \frac{Q \cdot C_i + 2Q_r \cdot C_f}{(3Q)} \quad (21)$$

Expressando a constante de reação para razão de recirculação ($r=2$), vazão de recirculação igual a de alimentação, tem-se:

$$\therefore K_{pr} = -\frac{1}{\theta_h} \ln \frac{C_f}{C_m} \quad (22)$$

Onde:

K_{pr} : Constante cinética para reator pistão com recirculação (h^{-1}).

A partir das equações previamente desenvolvidas, foram calculadas as constantes de reação de cada amostra desenvolvidas em laboratório, de acordo com proposições tanto de Magassy e Oliveira Netto (2017) quanto de Gois (2017). Em seguida, foram utilizados dados de Demanda Química de Oxigênio – (DQO) e carboidratos utilizados para a produção dos ácidos butírico, propiônico e acético afluente e efluente tratado de cada experimento, sendo a de entrada para cada amostra e a de saída a sua média aritmética, por se tratar de uma simulação, e para minimizar a influência das variações nas condições amostrais.

Partindo da análise cinética de reatores PFR, foram utilizados dados da demanda química de oxigênio (DQO) afluente e efluente obtidos em laboratório por Magassy e Oliveira Netto (2017), que por sua vez trabalharam com o reator em um período de 8 horas de reação, tanto para as operações com recirculação da fase líquida, como para as operações sem tal procedimento. Os valores médios de DQO apresentados para os dados de recirculação nula ($r = 0$) foram de $331 \pm 107 \text{ mg.L}^{-1}$ e $98 \pm 24 \text{ mg.L}^{-1}$, respectivamente para afluente e efluente. Já os valores médios de DQO apresentados para os dados de recirculação afluente e efluente foram, $327 \pm 66,45 \text{ mg.L}^{-1}$ e $104 \pm 53 \text{ mg.L}^{-1}$ para a primeira recirculação ($r = 1$) e $309 \pm 68 \text{ mg.L}^{-1}$ e $98 \pm 28 \text{ mg.L}^{-1}$ para a segunda recirculação ($r = 2$).

Para obtenção das constantes de reação (K), foi empregado o valor médio de saída junto com os valores de entrada de cada amostra, seguindo as fórmulas previamente desenvolvidas da constante em reatores contínuos. Para a operação sem recirculação, foi utilizada a equação (16), e para as demais operações utilizou-se de uma equação distinta. Como a recirculação se trata da reentrada do efluente no reator, para representar esse processo, foi utilizada a expressão de diluição de vazões resultando na equação (22).

Em sua pesquisa Gois (2017) dá ênfase na produção dos ácidos, butírico, propiônico e acético, os quais são considerados majoritários em termos de concentração na transformação dos carboidratos em ácidos, em comparação, os demais ácidos provenientes dessa transformação, apesar de serem muitos, teriam valores irrisórios de concentração, desta forma, foi optado por manter o foco nos três ácidos que demonstrassem maiores índices de concentração. Reproduzindo a metodologia feita com o reator operado por Magassy e Oliveira Netto (2017), levando-se em consideração a recirculação nula ($r = 0$), e desta vez com o tempo de detenção hidráulico de 4, 6 e 12 horas, para obtenção das constantes de reação (K). Nesse caso em específico, foi empregado o valor médio de afluente, que foi utilizado para encontrar o percentual de carboidratos utilizados para a produção dos ácidos butírico, propiônico e acético, em seus diferentes tempos de detenção hidráulica. Após encontrar os resultados em percentual, o próximo passo foi calcular os carboidratos restantes, a fim de se obter um valor de concentração de efluente, para se utilizar na equação da constante de reação.

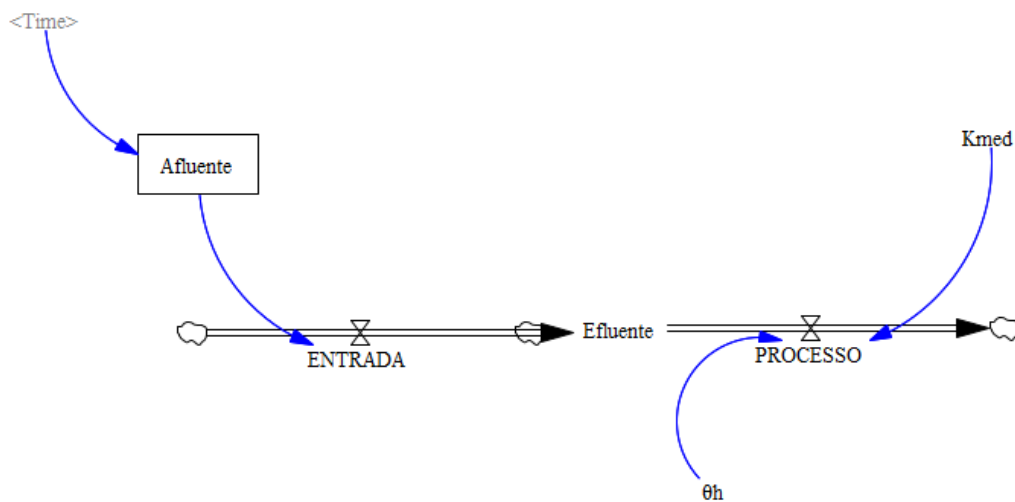
3.3.2. Simulando um reator Contínuo PFR utilizando o Vensim PLE®

Após a obtenção dos valores das constantes cinéticas de reação, levando-se em consideração os dados da operação dos reatores avaliados, faz-se a sua média (K_{med}), com o intuito de inseri-lo no software de simulação contínua Vensim PLE®. A interface do software fornece uma maneira simples de como construir modelos a partir de diagramas de causalidades ou ações e taxas.

Com a média das constantes cinéticas obtidas (K_{med}), o próximo passo foi a montagem do processo do reator em pistão utilizando o software de simulação de sistemas Vensim PLE®. Para isso, foi inserido no sistema: Uma taxa de entrada – Onde foram programados dois comandos para o seu funcionamento, sendo um a variável fantasma $\langle \text{Time} \rangle$ (para que possa ser inserido os valores do estoque a seguir), e o outro o estoque de substrato Afluente

(Processo onde é inserido os valores obtidos em laboratório para a plotagem de gráficos); Uma taxa de Processo – ponto onde será recebido dois estoques: o valor médio da constante de reação (k_{med}), e o tempo de detenção hidráulico (θ_h), por meio da expressão $1 + (\theta_h * k_{med})$; e a taxa intermediária Efluente – Ponto em que, de forma automática, é a razão entre a taxa de entrada e a taxa de processo. O esquema, a plotagem e a análise comparativa serão demonstradas nas figuras a seguir:

Figura 01: Esquema de reator em pistão (PFR) utilizando o software Vensim PLE ®.



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Logo após a simulação do comportamento dos sistemas, foi feito o estudo comparativo na forma de plotagem de gráficos dos substratos efluente, e com isso verificar, tanto de forma analítica quanto estatística (coeficiente de correlação Pearson), a validação dessa ferramenta para simulação do comportamento de reatores biológicos na remoção de DQO e produção de ácidos orgânicos.

3.3.3. Eficiência de reatores descontínuos

Segundo Wendling et al. (2022), para a eficiência de remoção de matéria orgânica do reator, calcula-se utilizando a fórmula abaixo:

$$E(\%) = \frac{C_o - C}{C_o} * 100 \quad (23)$$

Com relação aos parâmetros de sua eficiência, para determinar o nível de remoção do reator, faz-se a análise comparativa quantitativa por meio de valores de outros estudos de pesquisa de mesmo tipo de operação, já que não tem um valor regulamentado pela resolução 430/2011 do CONAMA.

3.3.4. Similaridade de gráficos utilizando correlação Pearson (ρ)

Em termos de análise matemática, para aprimorar a validação do software Vensim PLE® no quesito remoção de matéria orgânica, foi utilizado uma medição estatística denominada coeficiente de correlação Pearson (ρ) em que a mesma tem como finalidade apresentar o grau de relação entre duas variáveis distintas, demonstrando assim o seu teor de similaridade ou associação entre ambas, seja em variações de característica crescente ou decrescente. Para Filho e Júnior (2009, p. 119), o coeficiente de correlação Pearson (ρ) possui o parâmetro de -1 a 1, onde o sinal indica a direção positiva ou negativa do relacionamento entre as curvas e o valor sugere a força da relação entre as variáveis. Desta forma, quanto mais próximo de -1, ambas as variáveis possuem relações lineares inversamente proporcionais, ou seja, quando uma aumenta a outra diminui e vice-versa, no entanto, quanto mais próximo de 1, as variáveis em análise possuem linearidades diretamente proporcionais, em outros termos, apresentam comportamentos semelhantes de aumento e decremento entre elas. Já uma correlação de valor 0 indica que não há relação linear entre as variáveis, cabendo assim uma investigação por outros meios estatísticos para este caso específico.

Em relação a classificação de similaridade entre as variáveis, cada autor interpreta de forma distinta, contudo, de acordo com Filho e Junior (2009):

Todavia, como valores extremos (0 ou 1) dificilmente são encontrados na prática é importante discutir como os pesquisadores podem interpretar a magnitude dos coeficientes. Para Cohen (1988), valores entre 0,10 e 0,29 podem ser considerados pequenos; escores entre 0,30 e 0,49 podem ser considerados como médios; e valores entre 0,50 e 1 podem ser interpretados como grandes. Dancey e Reidy (2005) apontam para uma classificação ligeiramente diferente: $r = 0,10$ até 0,30 (fraco); $r = 0,40$ até 0,6 moderado); $r = 0,70$ até 1 (forte) (FILHO e JÚNIOR, 2009, p. 119).

Para a realização dos cálculos, foi escolhido o método de classificação utilizado por Dancey e Reidy, por ser um estudo mais recente e levar em consideração os estudos anteriores, também foi utilizado o programa Windows Excel, por meio do código de comando inserido na

cédula chamado “CORREL”, em que selecionando os valores de duas matrizes dos dados operacionais de reatores descontínuos, sendo uma matriz com os valores em laboratório e outra com dados simulados pelo Vensim PLE®, consegue chegar a um resultado fixo, para que o comparativo possa ser classificado de acordo com os parâmetros de similaridade citados anteriormente.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com base nos modelos analisados, observou-se o comportamento dos dados operacionais obtidos de reatores contínuos, em específico, tratando-se de reatores de tendência tubular ideal, tanto na simulação quanto no laboratório. Os parâmetros analisados foram a demanda química de oxigênio (DQO) afluente e efluente, para o reator operado por Magassy e Oliveira Netto (2017), bem como os carboidratos utilizados para produção dos ácidos majoritários na produção de hidrogênio, proveniente do afluente do reator operado por Gois (2017), originando a plotagem de seus respectivos gráficos, tendo como foco a comparação de resultados e avaliação do uso do Software Vensim PLE® como forma de simular o comportamento de reatores biológicos. Os resultados dos cálculos desenvolvidos a partir da equação (16), assim como a simulação no Software Vensim PLE®, levaram em consideração as especificidades dos reatores operados e seus respectivos substratos.

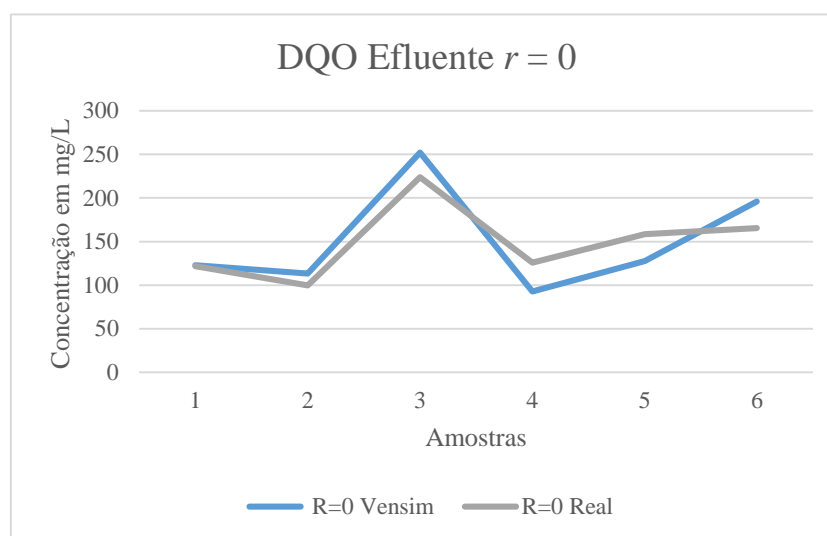
4.1. Análise do reator contínuo de Magassy e Oliveira Netto (2017)

Partindo da análise do reator operado por Magassy e Oliveira Netto (2017), após as constantes de reação encontradas em cada amostra, fez-se a média aritmética de seus dados operacionais, encontrando a constante média $k_{med} = 0,1494 h^{-1}$, para $r = 0$, $k_{med} = 0,1152 h^{-1}$, para $r = 1$ e $k_{med} = 0,0706 h^{-1}$, para $r = 2$.

Com o Kmed revelado, houve a inserção do seu valor dentro do seu estoque no software Vensim PLE®, colocando o seu tipo como constant e, em seguida, checando-se a sintaxe para validação do estoque criado. Estabelecendo o tempo de reação de 8 horas no seu estoque produzido, juntamente com a fixação de dados de DQO afluente em laboratório em sua caixa de armazenagem de dados, a simulação foi reproduzida com sucesso e assim um gráfico inédito foi gerado, para que a análise comparativa fosse feita posteriormente.

Unindo os dados em laboratório com os dados obtidos através do Vensim PLE®, foi desenvolvido um novo gráfico plotado em Excel (Figura 02), mostrando o comportamento das curvas de DQO efluente real e DQO efluente simulado, tudo isso com a finalidade de realizar o comparativo de forma analítica, observando a olho nu traços de similaridade entre as curvas.

Figura 02. Comparativo da DQO do reator (MAGASSY E OLIVEIRA NETTO, 2017) operado sem recirculação (R=0) e TDH=8h.



Fonte: Autor (2022).

O comportamento da curva da DQO efluente real, apesar de apresentar traços semelhantes ao da DQO efluente simulado via Vensim PLE®, apresentou resultado moderado em termos de análise matemática. Utilizando-se do coeficiente de correlação Pearson, observou-se que a precisão do software utilizado foi de ($\rho = 0,465$), onde segundo o parâmetro estabelecido por Dancey e Reidy (2005), é indicado que se o resultado encontrado estiver entre ($\rho = 0,40$) e ($\rho = 0,60$), esse por sua vez é constatado como moderado.

Em se tratando de eficiências, a partir dos resultados encontrados por intermédio da equação (23), enquanto em laboratório foi em torno de 70,39%, o Vensim PLE® teve em média 62,87%. Apesar do reator contínuo real ser mais eficiente do que o simulado, ambos tiveram remoção satisfatória e valores bem próximos quando comparados. Em relação a estudos similares, pode-se observar que ambos os reatores apresentaram eficiência abaixo da média, como pode-se ver no quadro 01, a natural diferença entre suas performances pode ser justificada pelo fato de os reatores operarem com cargas de DQO diferentes, assim como suas respectivas vazões e tempo de retenção hidráulica.

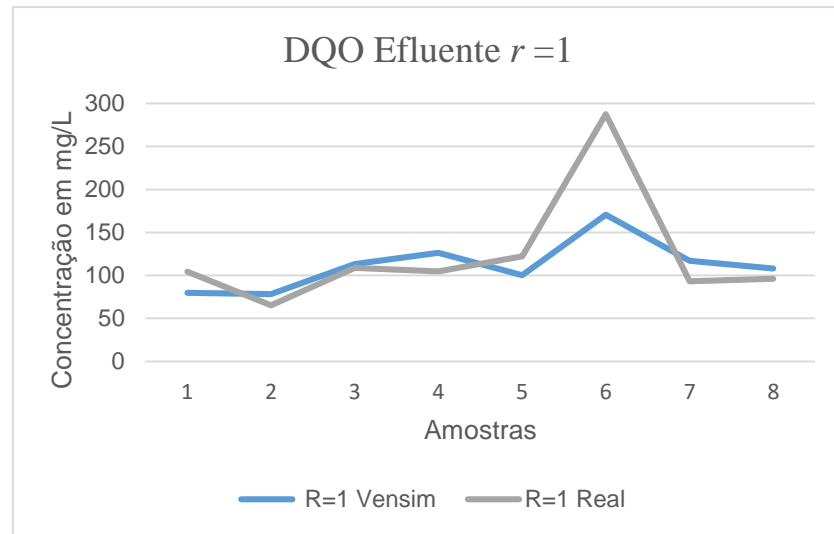
Quadro 01: Estudo de outros autores relacionados a eficiência de remoção de DQO em reatores contínuos.

Autor(es)	Contexto	TDH	Eficiência
Oliveira Netto (2012)	Reator anaeróbio-aeróbio de leito fixo, com recirculação da fase líquida, aplicado ao tratamento de esgoto sanitário	12 horas	90,23%
Oliveira Netto e Zaiat (2011)	Tratamento de esgoto doméstico em reator anaeróbio-aeróbio de leito fixo com recirculação da fase líquida.	11,4 horas	95,05%
Lopes (1999)	Desenvolvimento de reator anaeróbio-aeróbio de leito fixo para tratamento de esgoto sanitário.	12 horas	77,0%
Almeida (2010)	Desenvolvimento de reator anaeróbio-aeróbio de leito fixo para tratamento de esgoto sanitário.	12 horas	79%

Fonte: Autor (2022).

A figura (03) apresenta o primeiro resultado de dados do reator operando com recirculação da fase líquida, para vazão de recirculação igual a vazão de alimentação ($r = 1$). Apesar da aparência visual entre as curvas real e simulada via Vensim PLE® divergirem, a precisão obtida em relação aos valores das curvas pelo coeficiente de correlação Pearson foi de ($\rho = 1$), ou seja, o valor máximo segundo Dancey e Reidy (2005), deixando a entender que a curva apesar de divergir em termos visuais, o seu comportamento é bastante similar. Para eficiência dos reatores por sua vez, os resultados encontrados foram: 68,19% para o reator operado no laboratório e 65,38% para o reator simulado.

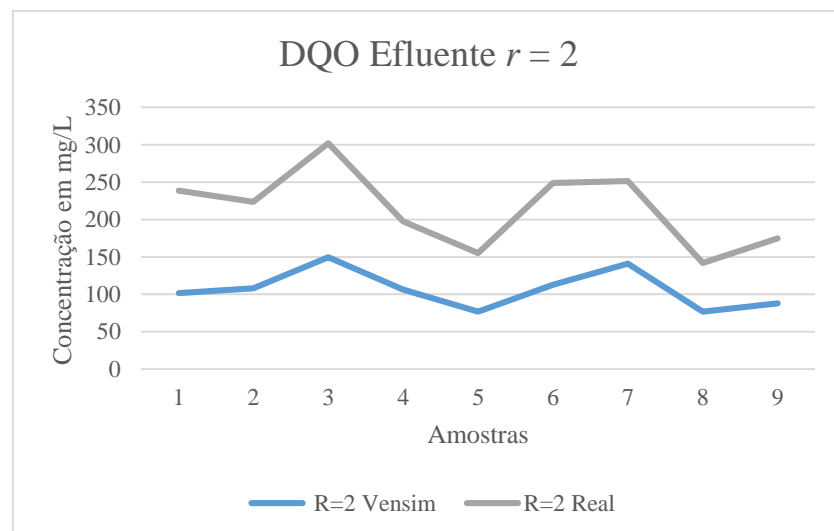
Figura 03. Comparativo da DQO do reator (MAGASSY E OLIVEIRA NETTO, 2017) operado com recirculação ($R=1$) e TDH=8h.



Fonte: Autor (2022).

A figura (04) por sua vez, apresenta os dados provenientes da operação com recirculação ($r = 2$). Apesar de mais uma vez, visualmente os gráficos apresentarem pequenas divergências, dessa vez em questão de valores de concentração, onde os valores apresentados pelo software Vensim PLE® ficaram abaixo dos valores recolhidos em laboratório, a precisão foi de ($\rho = 0,999$) de coeficiente de correlação Pearson, demonstrando mais um excelente resultado segundo o parâmetro estabelecido por Dancey e Reidy (2005). Já as suas eficiências de remoção de DQO, a partir dos resultados encontrados, foram obtidos 68,28% para o reator operado em laboratório, e 65,6% para o reator simulado via software.

Figura 04. Comparativo da DQO do reator (MAGASSY E OLIVEIRA NETTO, 2017) operado com recirculação ($R=2$) e TDH=8h.



Fonte: Autor (2022).

4.2. Analisando o reator contínuo de Gois (2017)

Utilizando-se dos resultados encontrados através da equação da constante cinética, assim como dos dados de operação de Gois (2017), foi possível sintetizar esses dados através da tabela 01, onde se tem os dias de operação, os valores de concentração, tanto dos afluentes quanto dos efluentes, assim como os ácidos trabalhados, acrescido do valor da constante cinética encontrado via equacionamento.

Tabela 01: Dados de Produção de H₂ em laboratório, incluindo as constantes de reação (K).

Dias de Operação	Carboidratos afluente (mg/l)	TDH (h)	Efluente Ac butírico (mg/l)	Efluente Ac. propiônico (mg/l)	Efluente Ac acético (mg/l)	K (h ⁻¹)
22/11	4648,2676	4	3619,29	1367,42	323,15	0,048125747
24/11	4758,15895	4	1542,59	735,74	86,49	0,033546099
25/11	5747,1811	4	3196,60	1189,58	261,81	0,093481115
29/11	4786,6493	4	3190,65	1005,96	595,90	0,08402172
24/08	5401,23	6	8314,07	3268,46	2795,20	0,022849445
13/09	5000,19	6	1160,95	350,62	393,57	0,020330457
15/09	6019,87	6	4188,79	1769,09	2168,29	0,023236343
29/09	5629,15	6	2024,92	1101,88	1686,25	0,01841278
13/07	8388,64	12	3921,90	2143,88	2873,94	0,0323201
20/07	7244,96	12	2027,84	1324,72	2766,65	0,050142412
27/07	7533,93	12	3297,49	1189,98	402,79	0,007163017
11/08	8710,18	12	5052,40	1576,99	1325,31	0,015187507

Fonte: Adaptado de Gois (2017).

Tendo encontrado todas as constantes de reação para cada amostra, foi realizado a média aritmética a partir dos resultados obtidos, encontrando constantes médias para cada ácido,

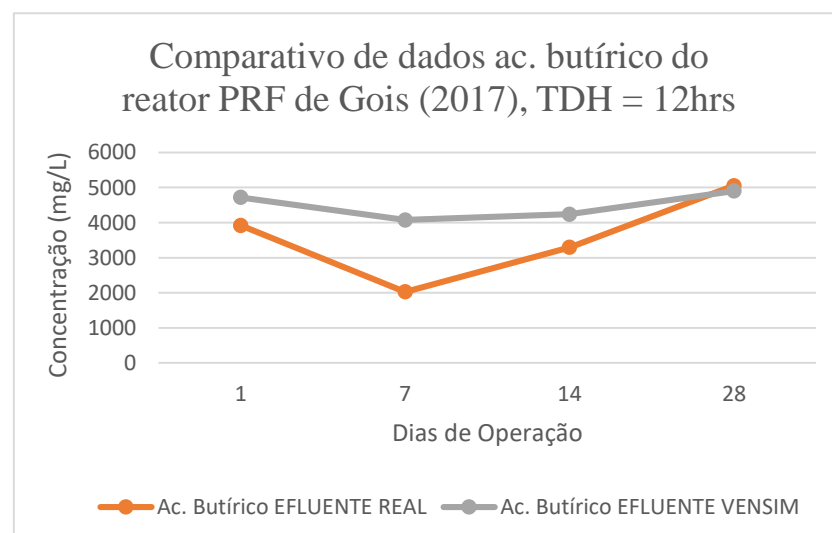
fazendo-se cada um referente a um tempo de detenção hidráulico distinto, como pode ser observado no quadro 02.

Quadro 02: demonstrativo da média das constantes cinéticas em diferentes TDH.

Ácido	TDH	Média da constante cinética (K_{med})
Butírico	12h	0,06479 h ⁻¹
	6h	0,20765 h ⁻¹
	4h	0,27397 h ⁻¹
Propiônico	12h	0,02120 h ⁻¹
	6h	0,05759 h ⁻¹
	4h	0,07510 h ⁻¹
Acético	12h	0,02620 h ⁻¹
	6h	0,07521 h ⁻¹
	4h	0,01817h ⁻¹

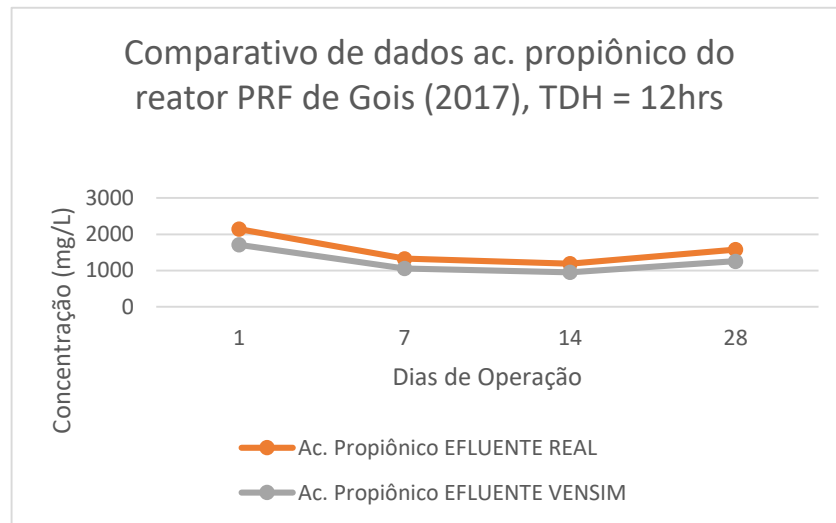
Fonte: Autor (2022).

Figura 05: comparativo de dados de ácido butírico do reator PFR de Gois (2017), com TDH = 12.



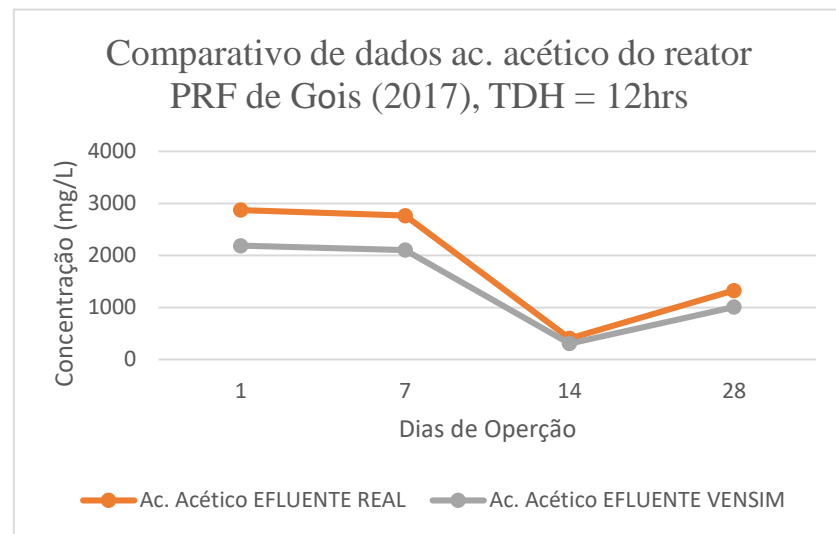
Fonte: Autor (2022).

Figura 06: comparativo de dados de ácido propiônico do reator PFR de Gois (2017), com TDH = 12.



Fonte: Autor (2022).

Figura 07: comparativo de dados de ácido acético do reator PFR de Gois (2017), com TDH = 12.

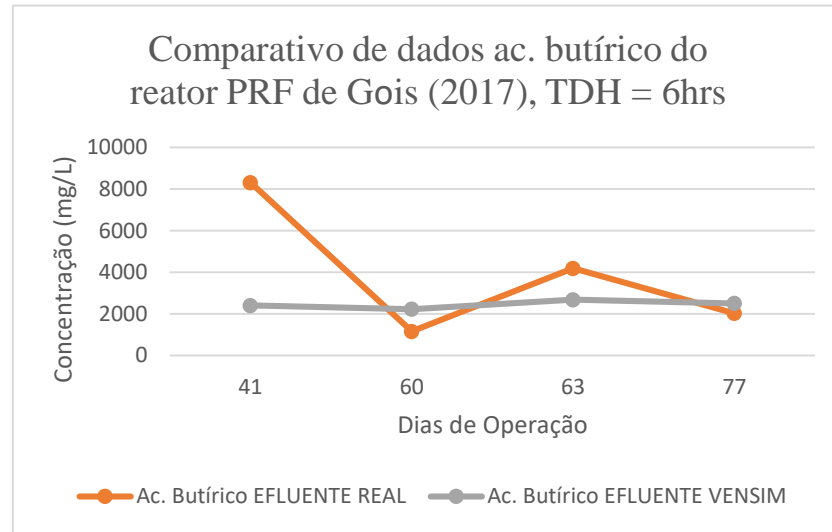


Fonte: Autor (2022).

As figuras 05, 06 e 07 demonstram os resultados encontrados no reator acerca da formação dos ácidos butírico, propiônico e acético respectivamente, num TDH de 12 horas, onde foram inseridos em gráficos os valores de efluente real e efluente simulado, sendo feita uma análise de precisão entre os valores dos efluentes. A precisão entre o comportamento das curvas analisadas por sua vez foi feita de forma matemática, utilizando-se do coeficiente de Pearson. Para a figura 05 a taxa encontrada foi de ($p=0,946$) um valor excelente em termos de coeficiente. O da figura 06, demonstra como a forma gráfica simulada está bem parecida com a real, a

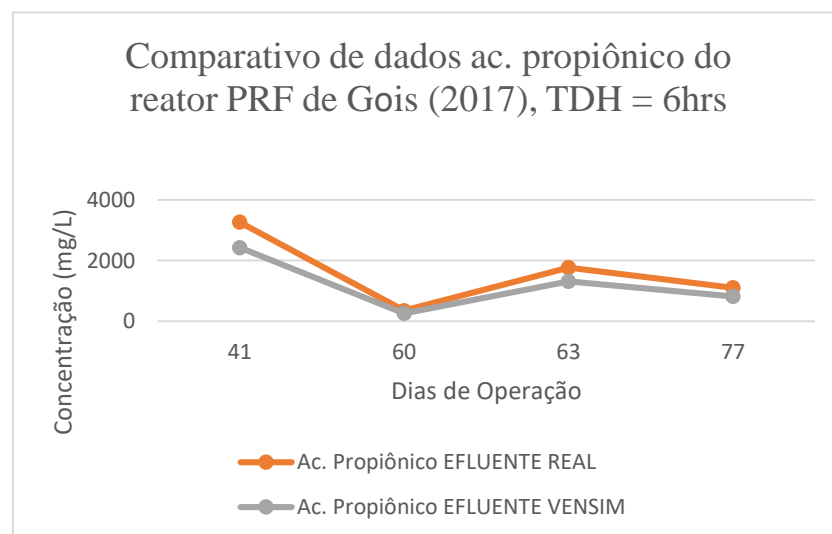
correlação entre os dois gráficos foi ($\rho = 1$), mais um resultado perfeito segundo Dancey e Reidy (2005). Assim como a figura 06, observando visualmente, as curvas apresentadas pelo o gráfico da figura 07 já demonstram grandes semelhanças, quando analisadas estatisticamente via coeficiente de Pearson. Seu grau de precisão demonstrou-se ($\rho = 1$), alcançando mais uma vez o valor máximo imposto por Dancey e Reidy (2005).

Figura 08: comparativo de dados de ácido butírico do reator PFR de Gois (2017), com TDH = 6.



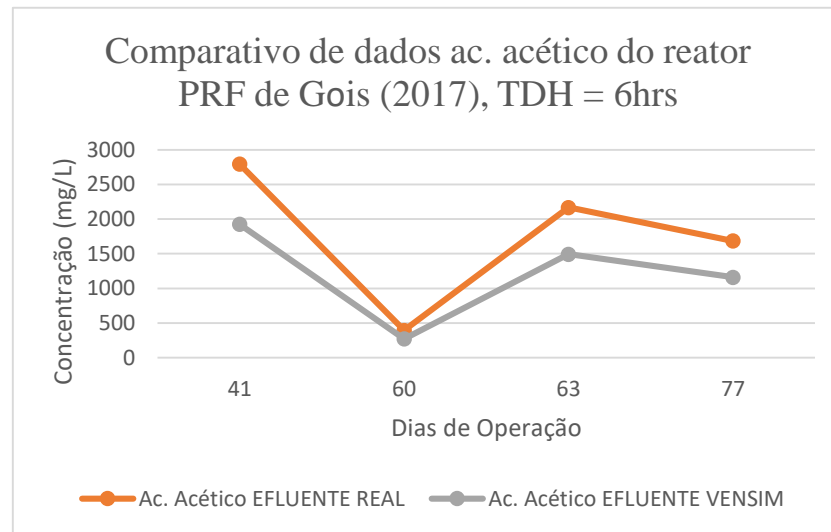
Fonte: Autor (2022).

Figura 09: comparativo de dados de ácido propiônico do reator PFR de Gois (2017), com TDH = 6.



Fonte: Autor (2022).

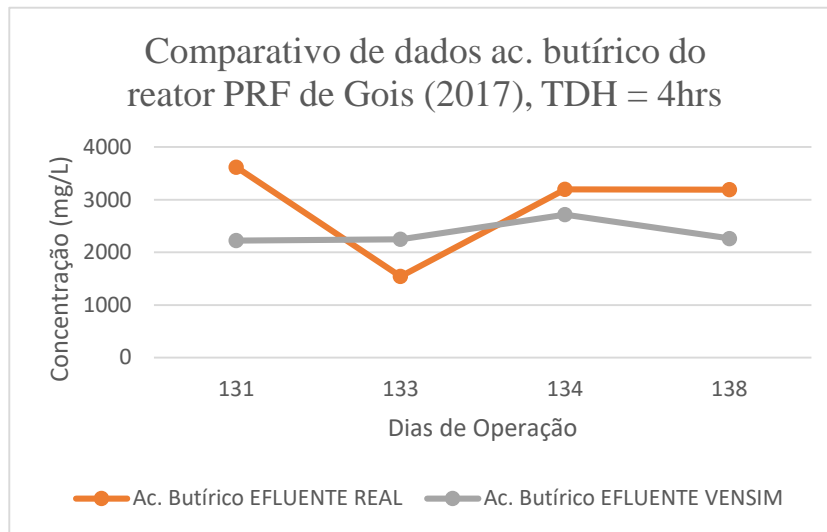
Figura 10: Comparativo de dados de ácido acético do reator PFR de Gois (2017), com TDH = 6hrs.



Fonte: Autor (2022).

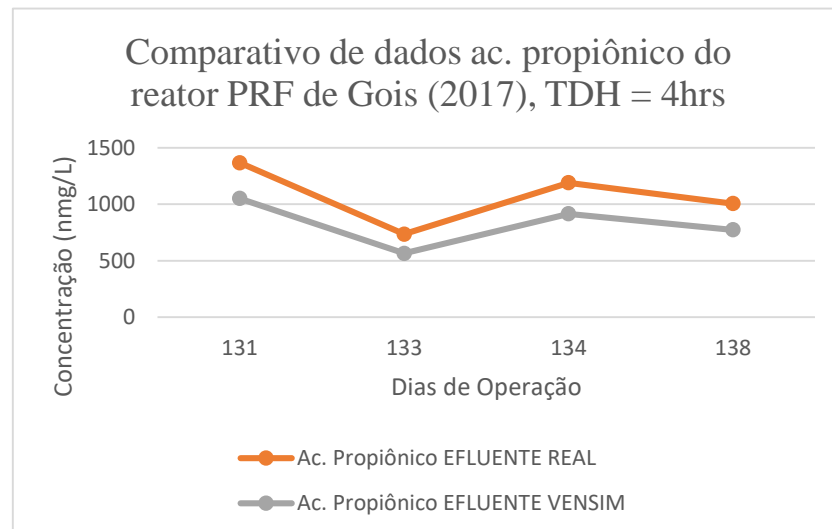
As figuras 08, 09 e 10, por sua vez apresentam os resultados obtidos no reator operando num TDH de 6 horas. A figura 08 denota os resultados referente ao ácido butírico, a comparação entre as curvas apresentadas no gráfico demonstra grandes divergências em termos visuais e de concentração, quando avaliado pelo coeficiente de Pearson, o resultado foi ($\rho = 0,2055$), um valor considerado fraco segundo Dancey e Reidy (2005). Já para os dados da produção do ácido propiônico, as curvas representadas na figura 09, mostram-se semelhantes em termos visuais, até mesmos os valores de concentração das amostras demonstraram-se ligeiramente parecidos, em relação ao coeficiente de Pearson alcançou ($\rho = 1$). A figura 10 por sua vez, caracteriza os resultados adquiridos através dos dados de ácido acético do reator operando com o TDH de 6 horas. Através do coeficiente de Pearson foi obtida uma taxa de ($\rho=1$), o valor mais alto, demonstrando assim que as curvas entre o efluente real, e o efluente simulado através do software Vensim PLE são altamente similares. A média de ácido acético produzida através dos carboidratos nesse período de detenção foi cerca de 25%.

Figura 11: Gráfico comparativo de dados de ácido propiônico do reator PFR de Gois (2017), com TDH = 4hrs.



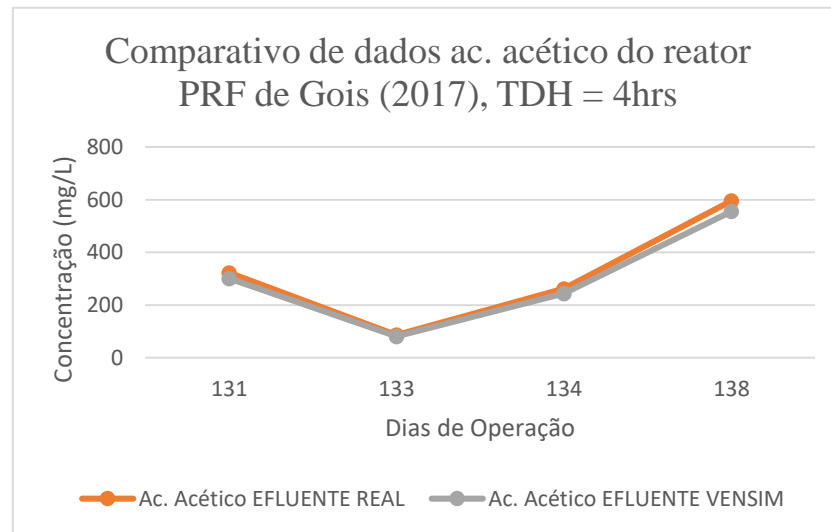
Fonte: Autor (2022).

Figura 12: Comparativo de dados de ácido propiônico do reator PFR de Gois (2017), com TDH = 4hrs.



Fonte: Autor (2022).

Figura 13: Comparativo de dados de ácido acético do reator PFR de Gois (2017), com TDH = 4hrs.



Fonte: Autor (2022).

Analisando o reator com o tempo de detenção hidráulico de 4 horas, as figuras 11, 12 e 13 representam os resultados dos ácidos butírico, propiônico e acético respectivamente. A figura 11 foi aquela que obteve o resultado mais baixo em relação a coeficiente de Pearson, quando comparado aos demais resultados obtidos no reator com TDH de 4 horas, obtendo uma taxa de ($\rho=0,199$), um valor fraco segundo Dancey e Reidy (2005). Em contrapartida, o resultado apresentado pela figura 12, obteve o mais alto valor de coeficiente de Pearson, resultando em ($\rho=1$). A figura 13 por sua vez, apresenta o melhor resultado em termos visuais, onde as curvas real e simulada estão quase sobrepostas, apresentando apenas uma pequena divergência entre valores de concentração, resultando em mais um valor excelente em termos de coeficiente de Pearson, com ($\rho=1$).

Por fim, foi realizada uma análise em percentual acerca dos ácidos produzidos a partir dos carboidratos presentes em cada TDH, tendo como resultado para o TDH de 12 horas: 52% dos carboidratos foram convertidos em ácido butírico, 22% para ácido propiônico e 26% para ácido acético. Para o TDH de 6 horas, por sua vez, temos: 53% convertidos em ácido butírico, 21% em ácido propiônico e 25% em acético. Por fim para o TDH de 4 horas, foram convertidos 67% para ácido butírico, 26% em propiônico e apenas 7% em acético.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Simular o comportamento da remoção de matéria orgânica em termos de demanda química de oxigênio, em reatores com regime de escoamento contínuo e tratando de efluentes de diferentes naturezas não é uma questão simples, torna-se algo de alta complexidade por envolver muitas variáveis de difícil controle, como interferência de rotas metabólicas, cinética reacional e fatores hidrodinâmicos por exemplo. Em virtude a todas essas variáveis, torna-se algo praticamente impossível elaborar formulações de um modelo cinético que inclua todos os aspectos e detalhes envolvidos. Logo, faz-se necessário desenvolver métodos mais simplificados, a fim de tornar o modelo mais aplicável.

A idealização do fluxo do reator é útil porque simplifica as equações matemáticas. Obviamente, um reator real não se comporta como ideal, mas sempre haverá um modelo ideal como referência ao projetar, simular ou dimensionar um reator real. Modelos de reatores reais são frequentemente derivados de modelos ideais, levando em consideração os desvios da idealidade.

O presente estudo demonstrou que reatores combinados como o RCLF, operado por Magassy e Oliveira Netto (2017), apresentou valores cinéticos superiores quando comparados com outros reatores não combinados, tendo valores similares ou próximos somente aos reatores que se utilizaram da mesma tecnologia. Os valores apresentados pelas constantes cinéticas estimadas indicam a capacidade de reatores combinados que operam com recirculação em tratar efluentes, não apenas para remoção de DQO, mas também alguns estudos confirmam sua aplicação e função na remoção de nutrientes e outras matérias orgânicas, como foi apresentado no caso do reator operado por Gois (2017), onde foi possível fazer a análise da produção dos ácidos proveniente desses carboidratos e simular o comportamento dessa produção através do Vensim PLE®

As equações encontradas com auxílio dos balanços de massa realizados para os reatores estudados possibilitaram a estimativa e comparação dos valores das constantes cinéticas aparentes para remoção da matéria orgânica, gerando dados necessários para alimentar o programa de simulação (Vensim PLE®). O software Vensim PLE® demonstrou-se como uma ferramenta de grande valia acerca de pesquisa para simulação de reatores, mostrando números excelentes em percentuais de eficácia entre reatores reais e reatores modelados no software, o

que viabilizaria que outros passos da concepção fossem tomados, poupando assim tempo e recursos.

Por meio do coeficiente de correlação Pearson, pode-se observar, na maior parte dos casos, forte correlação positiva ($\rho \geq 0,70$) entre as curvas simuladas e os resultados obtidos em laboratório. Para as situações com correlação moderada ($0,40 \leq \rho \leq 0,60$), ou mesmo fraca ($0,20 \leq \rho \leq 0,40$), provavelmente a consideração da cinética de degradação tenha influenciado o resultado.

Para modelação e análise de biorreatores para tratamento de águas residuárias são necessários dois conhecimentos fundamentais: o modelo hidrodinâmico do sistema e o modelo cinético com as constantes determinadas. Nesse sentido, a alteração da cinética de degradação, de primeira para segunda ordem, por exemplo, pode trazer benefícios ao coeficiente de correlação, principalmente nas situações de reatores tratando efluentes com cargas orgânicas elevadas sendo esta uma das sugestões para investigações futuras.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMM, A. M. D. M. Portal AMM. Pesquisa do IBGE analisa situação do saneamento básico no Brasil, 2020. Disponível em: <<https://portalamm.org.br/pesquisa-do-ibge-analisa-situacao-do-saneamento-basico-no-brasil/>>. Acesso em: 31 junho 2022.

BATSTONE, D. J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhny, S., Pavlostathis, S., Rozzi, A., Sanders, W., Siegrist, H., Vavilin, V. (2002). Anaerobic digestion model. No.1. Scientific and Technical Report No. 13, IWA Publishing, Londres, Inglaterra, 77p.

BRASIL, C. D. D. Lei N° 14.026 de julho de 2020. Marco Legal do Saneamento Básico, Brasília, julho 2020.

BRASIL, S. F. Constituição (1988). Constituição da República Federativa do Brasil, Brasília, 5 outubro 1988.

CONAMA - Conselho Nacional do Meio Ambiente. Resolução nº 430, 13 de maio de 2011. Ministério do Meio Ambiente, 2011.

COSTA, M. B. Canal Tech. O que é um software? Entenda o significa, 2020. Disponível em: <<https://canaltech.com.br/software/o-que-e-software/>>. Acesso em: 15 julho 2022.

CUNHA, Arthur Lima da Simulação do comportamento de reatores descontínuos tratando efluentes de diferentes naturezas / Arthur Lima da Cunha. - 2022. 45 f.: il.

ENGIE. Além da Energia. ENGIE, 2022. Disponível em: <https://www.alemdaenergia.engie.com.br/tudo-o-que-voce-precisa-saber-sobre-a-criese-hidrica/?gclid=Cj0KCQjw2_OWbhdqARIsAAUNTTTHDWXGFF00ZD8i4kxxtgddVohVERm2kImZD82xuHAcKd18qyFyjEJEaAqIcEALw_wcB>. Acesso em: 25 junho 2022.

DANCEY, Christine & REIDY, John. (2006). Estatística Sem Matemática para Psicologia: Usando SPSS para Windows. Porto Alegre, Artmed.

EVEN3BLOG. Even3Blog. O guia completo das ferramentas de pesquisa, 2022. Disponível em: <<https://blog.even3.com.br/guia-completo-das-ferramentas-de-pesquisa/>>. Acesso em: 24 junho 2022.

FERMINO, V. Pesquisa científica com apoio de softwares: organização e produtividade, São Paulo, 04 abril 2019.

FILHO, D. B. F; JÚNIOR, J. A. D. S. Desvendando os Mistérios do Coeficiente de Correlação de Pearson (r). Revista Política Hoje, Vol. 18, n. 1, 2009.

FORD, F. A. Modeling the environment: an introduction to system dynamics models of environmental systems. 2. ed. Washington D.C.: Island Press, 2009. 400 p.

FLORES, K. M. O RECONHECIMENTO DA ÁGUA COMO DIREITO FUNDAMENTAL E SUAS IMPLICAÇÕES, 19 junho 2011.

GOIS, G. N. S. B. Produção de hidrogênio e metano a partir da vinhaça de cana-de-açúcar em reatores anaeróbios de leito fluidizado, 2017. Disponível em: <www.repositorio.ufal.br>. Acesso em: 20 Set. 2021.

GONÇALVES, J. C. S. I. Desenvolvimento de modelo numérico para a simulação da qualidade da água em rios utilizando o software Vensim PLE. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil), Universidade de São Paulo, 2009.

IBGE, C. D. P. E. I. S. Pesquisa nacional de saneamento básico 2017: abastecimento de água e esgotamento sanitário, Rio de Janeiro, 2020.

IWA Task Group For Mathematical Modelling Of Anaerobic Digestion Processes (2002). Anaerobic Digestion Model No.1 (ADM1). Disponível em <<https://www.iwapublishing.com/books/9781900222785/anaerobic-digestion-model-no1-adm1>>. Acesso em: 27 de julho de 2022.

JÚNIOR, J. Agência Câmara de Notícias Câmara dos Deputados. Proposta muda Constituição para tornar acesso à água potável direito fundamental, 2021. Disponível em: <<https://www.camara.leg.br/noticias/751772-proposta-muda-constituicao-para-tornar-acesso-a-agua-potavel-direito-fundamental/#:~:text=Proposta%20muda%20Constitui%C3%A7%C3%A3o%20para%20tornar%20acesso%20%C3%A0%20%C3%A1gua%20pot%C3%A1vel%20direito%20fundament>>. Acesso em: 10 junho 2022.

JORGENSEN, S. E., Fath, B. D. (2011). Fundamentals of Ecological Modelling: applications in environmental management and research. Elsevier, Oxford, UK, 385p.

LEVENSPIEL, Octave. Engenharia das Reações Químicas. 3 ed. São Paulo: Edgar BlucherLTDA, 2000. 563 p.

LIU, Y.; GUO, H.; YU, Y.; DAI, Y.; ZHOU, F. Ecological–economic modeling as a tool for watershed management: a case study of Lake Qionghai watershed, China. *Limnologica-Ecology and Management of Inland Waters*, 38(2), p. 89–104, 2008.

LOGATTI, Bruna. Aplicação Da Dinâmica De Sistemas Na Implementação De Modelo Computacional Para Estimção Da Qualidade Do Efluente De Lagoas Facultativas, 2019. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/bitstream/handle/ufscar/11648/LOGATTIB_APLICA%C3%87%C3%83O%20DA%20DIN%C3%82MICA%20DE%20SISTEMAS%20NA%20IMPLEMENTA%C3%87%C3%83O%20DE%20MODELO%20COMPUTACIONAL%20PARA%20ESTIMA%C3%87%C3%83O%20DA%20QUALIDADE%20DO%20EFLUENTE%20DE%20LAGOAS%20FACULTATIVAS.pdf?sequence=4&isAllowed=y>. Acesso em 22 de junho de 2022.

MARTINS G., RIBEIRO D., NOGUEIRA R., BRITO A. - “Modelação da contaminação do solo com ferramenta AQUASIM”. II Encontro Internacional DEPURANAT – Gestão sustentável de águas residuais, 2005, Vila Verde - Portugal.

MARTINS, Gilberto de Andrade; THEÓPHILO, Carlos Renato. Método da investigação científica para ciências sociais aplicadas. 2. ed. São Paulo: Atlas, 2009.

MAGASSY, T. B. ; FAGUNDES, J. V. C. ; ARAUJO, A. S. ; de Oliveira Netto, A. P. . Utilizacao Da Bucha Vegetal De Cucurbitacea Como Material Suporte Em Reator Anaerobio De Leito Fixo / Use Of Cucurbitaceous Bush As Support Material In Anaerobic Fixed Bed Reactor. *Revista Brasileira De Engenharia De Biosistemas (UNICAMP)*, v. 11, p. 142, 2017.

MDR, M. D. D. R. Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA). Novo Marco Regulatório do Saneamento, 2020. Disponível em: <<https://www.gov.br/ana/pt-br/assuntos/saneamento-basico/novo-marco-legal-do-saneamento>>. Acesso em: 10 junho 2022.

MUSHTAQ, F. Analysis and Validation of Chemical Reactors performance models developed in a commercial software platform. 2014. Master of Science Thesis - KTH School of Industrial Engineering and Management, 2014.

MUNDO, C. D. Conceitos do Mundo. Ciência antiga, 2022. Disponível em: <[MUNDOGEO. MundoGeo. IBGE lança novo Atlas do Saneamento no Brasil, 2021. Disponível em: <\[NOGUEIRA R., ELENTER D., BRITO A.G, MELO L. F., Wagner M. and Morgenroth E. - “Evaluating heterotrophic growth in a nitrifying biofilm reactor using fluorescence in situ hybridization and mathematical modelling”. *Wat. Sci. Tech.*, 52 \\(7\\), 2005, pp. 135-145.\]\(https://mundogeo.com/2021/11/24/ibge-lanca-novo-atlas-do-saneamento-no-brasil/>. Acesso em: 15 julho 2022.</p></div><div data-bbox=\)](https://conceitosdomundo.pt/ciencia-antiga/#:~:text=A%20ci%C3%A2ncia%20moderna%20%C3%A9%20governada%20pelo%20M%C3%A9todo%20Cient%C3%ADfico.,fossem%20v%C3%AAlidas%20logicamente%2C%20ou%20seja%2C%20no%20pensamento%20formal.>. Acesso em: 25 julho 2022.</p></div><div data-bbox=)

OLIVEIRA NETTO, A. P. (2012). Reator anaeróbio-aeróbio de leito fixo em escala piloto, com recirculação da fase líquida, aplicado ao tratamento de esgoto sanitário. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

OLIVEIRA NETTO, A. P; ZAIAT, M. (2011). Treatment of domestic sewage in an anaerobic–aerobic fixed-bed reactor with recirculation of the liquid phase. *Clean – Soil, Air, Water*, 40 (9), 965–971.

ORLOB, G. T. (1983). *Mathematical modeling of water quality: streams, lakes, and reservoirs*. John Wiley & Sons, California, U.S.A., 551p.

PEREIRA, A. R. O princípio da dignidade da pessoa humana no ordenamento jurídico, 17 dezembro 2020.

PREDIGER, R. P.; ALLEBRANDT, S. L. USO DE SOFTWARES EM PESQUISA QUALITATIVA, 2016.

PROETTI, Sidney. As pesquisas qualitativa e quantitativa como métodos de investigação científica: Um estudo comparativo e objetivo. *Revista Lumen-ISSN: 2447-8717*, v. 2, n. 4, 2018. Disponível em: <<http://www.periodicos.unifai.edu.br/index.php/lumen/article/view/60>>. Acesso em: 11 Mai. 2022. Doi: <<http://dx.doi.org/10.32459/revistalumen.v2i4.60>>.

Reichert, P. (1994). AQUASIM – A TOOL FOR SIMULATION AND DATA ANALYSIS OF AQUATIC SYSTEMS. *Water Science and Technology*, 30(2), 21–30. <https://doi.org/10.2166/wst.1994.0025>.

RODRIGUES, A., PACHECO, D., RIBEIRO, D., BRUNS, S., NOGUEIRA, R., COUTINHO, R., BRITO, A.G., - “Modelling as a tool to assess phosphorus exchange between sediments and water in eutrophic lakes”. In *Modelling, identification and control*, 6-8 Feb., 2006, Lanzarote.

SHANAHAN, P., HENZE, M., KONCSOS, L., RAUCH, W., REICHERT, P., SOMLYÓDY, L. AND VANROLLEGHEM, P. - “River Water Quality Modelling: II. Problems of the Art”. Presented at the IAWQ Biennial International Conference, Vancouver, British Columbia, Canada, 21-26 June 1998.

SILVA, C. E. P. M. (2015). Modelagem matemática e simulação da remoção simultânea de carbono e nitrogênio em reator anaeróbio-anóxico: uma aplicação do ADM1. Dissertação de Doutorado, Universidade Federal da Bahia, Escola Politécnica, Salvador, BA, 139p.

SILVA, R. S. D. Dignidade humana. Enciclopédia Jurídica da PUCSP, São Paulo, março 2022.

SOUZA, A. B. D. Acesso a água e o princípio da dignidade da pessoa humana, 17 março 2021.

SOUZA, N. B. O. D. CARACTERIZAÇÃO DE SOFTWARE CIENTÍFICO: UM ESTUDO DE CASO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL, Juiz de Fora, janeiro 2011.

SOVERAL, F. Universidade Federal de Goiás. UFG inaugura supercomputador para IA inédito na América Latina, 2021. Disponível em: <<https://www.ufg.br/n/147648-ufg-inaugura-supercomputador-para-ia-inedito-na-america-latina>>. Acesso em: 02 julho 2022.

VON SPERLING, Marcos. Introdução à qualidade das águas e ao Tratamento de Esgotos. 2 ed. Belo Horizonte – MG: SEGRAC, 1996. vol. 1. 243 p.

VON SPERLING, Marcos. Princípios do tratamento biológico de águas residuárias: princípios básicos do tratamento de esgotos. 1 ed. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais, 1996b. 211 p. v.2.

WANNER, O., Morgenroth, E. (2004). Biofilm modeling with AQUASIM. *Wat.Sci.Tech.*, v. 49, n. 1112, pp. 137-144.

WEI, S.; YANG, H.; SONG, J.; ABBASPOUR, K. C.; XU, Z. System dynamics simulation model for assessing socio-economic impacts of different levels of environmental flow allocation in the Weihe River Basin, China. *European Journal of Operational Research*, v. 221, n. 1, p. 248–262, 2012.

WENDLING, Ana Claudia; JENZURA, Nathanna Tessari; BARANA, Ana Cláudia. II-143-Remoção de DQO e nitrogênio total de esgoto sanitário combinado com efluente de RALF em reator de leito estruturado com aeração intermitente. Artigo científico publicado no XIV SIBESA, Ponta Grossa-PR. Disponível em: <<https://abesnacional.com.br/XP/XP-EasyArtigos/Site/Uploads/Evento40/TrabalhosCompletoPDF/II-143.pdf>>. Acesso em: 30 Abr 2022.