

**UNIVERSIDADE DO VALE DO RIO DOS SINOS – UNISINOS
UNIDADE ACADÊMICA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL
NÍVEL MESTRADO**

CRISTIANO COSTA DE SOUZA

**SIMULAÇÃO DA OPERAÇÃO DE UMA ESTAÇÃO DE TRATAMENTO DE
ESGOTOS POR LODOS ATIVADOS COM O MODELO IWA-ASM3 (*ACTIVATED
SLUDGE MODEL N. 3*) A PARTIR DE DADOS DE MONITORAMENTO**

São Leopoldo

2021

CRISTIANO COSTA DE SOUZA

**SIMULAÇÃO DA OPERAÇÃO DE UMA ESTAÇÃO DE TRATAMENTO DE
ESGOTOS POR LODOS ATIVADOS COM O MODELO IWA-ASM3 (*ACTIVATED
SLUDGE MODEL N. 3*) A PARTIR DE DADOS DE MONITORAMENTO**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade do Vale do Rio dos Sinos – UNISINOS

Orientador: Prof. Dr. Luis Alcides Schiavo Miranda

São Leopoldo

2021

S729s

Souza, Cristiano Costa de

Simulação da operação de uma estação de tratamento de esgotos por lodos ativados com o modelo IWA-ASM3 (Activated Sludge Model n. 3) a partir de dados de monitoramento / Cristiano Costa de Souza. -- 2021.

235 f. ; il. ; 30cm.

Dissertação (mestrado em Engenharia de Civil) -- Universidade do Vale do Rio dos Sinos, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Civil, São Leopoldo, RS, 2021.

Orientador: Prof. Dr. Luis Alcides Schiavo Miranda.

1. Engenharia civil. 2. Modelo - Lodo ativado. 3. Tratamento - Lodo - Esgoto. 4. Simulação dinâmica. 5. Calibração. I. Título. II. Miranda, Luis Alcides Schiavo.

CDU 628.3

CRISTIANO COSTA DE SOUZA

**SIMULAÇÃO DA OPERAÇÃO DE UMA ESTAÇÃO DE TRATAMENTO DE
ESGOTOS POR LODOS ATIVADOS COM O MODELO IWA-ASM3 (*ACTIVATED
SLUDGE MODEL N. 3*) A PARTIR DE DADOS DE MONITORAMENTO**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade do Vale do Rio dos Sinos – UNISINOS

Aprovado em 25 de março de 2021

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Mauricio Mancio – Presidente da Banca – Unisinos

Prof. Dr. Luis Alcides Schiavo Miranda – Orientador – Unisinos

Prof^a Dr^a Luciana Paulo Gomes – Avaliadora – Unisinos

Prof. Dr. Lademir Luiz Beal – Avaliador – UCS

Às minhas filhas, a quem dedico o prazer pela leitura e pelo conhecimento, a satisfação pelas descobertas e a conquista de objetivos um dia tão sonhados.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos engenheiros Allan Guedes Pozzebon e Alessandro Brutti, do Departamento Municipal de Água e Esgotos de Porto Alegre – DMAE, pelo fornecimento de todos os subsídios referentes à Estação de Tratamento de Esgotos São João-Navegantes, fundamentais à realização do trabalho, bem como pela dedicação durante a etapa de planejamento das coletas de amostras e, especialmente, por acreditar no projeto, desde o princípio. Agradeço também pela paciência que dispensaram em todas as fases de coletas, envolvendo ao todo mais de uma centena de frascos e logística de armazenamento apropriada. Por fim, agradeço à equipe do DMAE que realizou as coletas de amostras em diversos horários do dia, incluindo a madrugada, diante do frio, da chuva e do calor: Aureo L. Barbieri, Calin Moura da Rosa, Cristiano Weeck Figueira, Daniel R. Ninov, George R. Dias, Letícia de Melo, Paulo Roberto A. da Silva e Tiago Ogura.

RESUMO

O tratamento de esgotos por lodos ativados é amplamente adotado em nível mundial, inclusive no Brasil, sendo uma alternativa robusta e confiável, capaz de produzir um efluente de alta qualidade. Nesse sentido, um modelo matemático capaz de simular a operação de uma estação de tratamento de esgotos (ETE) em escala real é oportuno, sendo útil para monitoramento, melhorias e otimização de recursos, bem como na tomada de decisões quanto a novos investimentos. Os modelos ASM da IWA são mundialmente reconhecidos, dentre os quais se destaca o ASM3, que abrange remoção de carbono, nitrogênio e sólidos suspensos. Sua aplicação, porém, exige a disponibilidade de dados que são obtidos com uso intensivo de laboratório, o que nem sempre é viável para a maioria das estações. O presente trabalho propôs a simulação da operação de uma ETE em escala real a partir de dados operacionais comuns e ensaios de monitoramento padrão a um número limitado de amostras, com o uso do ASM3, sendo selecionada a ETE São João-Navegantes, localizada em Porto Alegre/RS. Foram realizadas coletas de amostras durante 24 horas em três estações do ano – inverno, primavera e verão –, visando a obtenção de perfis afluentes heterogêneos. O fracionamento da DQO foi alcançado através do método STOWA, com algumas modificações necessárias para o presente caso. Após a configuração do modelo, as simulações foram realizadas em modo estacionário para a calibração e em modo dinâmico para a validação. Para comparação com os dados reais, calculou-se as médias dos resultados obtidos entre 48 e 96 horas nas simulações, para cada parâmetro avaliado. Para o efluente final, o erro para as formas nitrogenadas e alcalinidade em módulo resultou abaixo de 1 mg/L, para as três estações do ano em que houve ensaios. Para DQO e SST, de modo geral, o erro ficou entre 5 e 10 mg/L. Complementarmente, em modo estacionário, o resultado para DQO apresentou erro menor do que 5 mg/L para as campanhas de primavera e verão. Em modo dinâmico, o erro para DQO foi menor do que 5 mg/L na primavera, e para SST, menor do que 5 mg/L no verão. Concluiu-se que a metodologia permitiu a aplicação do ASM3 com resultados dentro de uma faixa de erro aceitável para os parâmetros monitorados, compatíveis com os padrões de lançamento vigentes e com o contexto da ETE, ressalvadas as limitações do próprio modelo e dos métodos utilizados.

Palavras-chave: modelos de lodos ativados, ASM, simulação dinâmica, calibração.

ABSTRACT

Wastewater treatment by activated sludge is widely adopted worldwide, including in Brazil, being a robust and reliable alternative, capable of producing a high-quality effluent. Therefore, a mathematical model capable of simulating the operation of a sewage treatment plant (WWTP) on a full scale is relevant, being useful for monitoring, improving and optimizing resources, as well for decision making regarding new investments. The IWA ASM models are recognized worldwide, among which the ASM3 stand out, embracing the removal of carbon, nitrogenous and suspended solids. Its application, however, requires the availability of data that is obtained with intensive use of the laboratory for testing samples, which are not always feasible at most stations. The present work proposed the simulation of the operation of a full-scale WWTP from common operational data and standard monitoring tests to a limited number of samples, using ASM3, being selected the São João-Navegantes WWTP, located in Porto Alegre/Brazil. Sample collections were carried out for 24 hours in three seasons – winter, spring and summer –, aiming to obtain heterogeneous affluent profiles. COD fractions was achieved through the STOWA protocol, with some necessary modifications for the present case. After configuring the model, the simulations were performed in stationary mode for calibration and in dynamic mode for validation. For comparison with the actual data, averages for the results obtained between 48 and 96 hours in simulations were calculated for each evaluated parameter. For the final effluent, the error for nitrogen forms and alkalinity in modulus resulted below 1 mg/L, for the three seasons in which the tests were set. For COD and TSS, in general, the error was between 5 and 10 mg/L. In addition, in a stationary mode, COD error was smaller than 5 mg/L in the spring and summer campaigns. In dynamic mode, COD error was smaller than 5 mg/L in spring, and for TSS, smaller than 5 mg/L in summer. It was concluded that the methodology used allowed the application of ASM3 with results within an acceptable error range for the monitored parameters, compatible with the current standards for treated effluent and with the context of WWTP, with due regard for the limitations of the model itself and of the methods used.

Keywords: activated sludge models, ASM, dynamic simulation, calibration.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esquema de operação de um reator de fluxo contínuo com recirculação de lodo.....	28
Figura 2 – Comparação do fluxo da DQO nos modelos ASM1 e ASM3: ciclo fechado no primeiro modelo, e fluxos paralelos no segundo.....	52
Figura 3 – Exemplo de ajuste da curva de DBO aos pontos obtidos por medição, para determinação de k_{DBO} , DBO_{tot} e DQO_B	66
Figura 4 – Fluxograma iterativo de calibração de um processo.....	74
Figura 5 – Modelo de decantador em camadas de fluxo vertical.....	81
Figura 6 – Balanço de sólidos através das camadas do decantador.....	83
Figura 7 – Fluxograma de trabalho	95
Figura 8 – SES Navegantes, em Porto Alegre, atendido pela ETE São João-Navegantes	97
Figura 9 – Implantação da ETE São João-Navegantes	98
Figura 10 – Calhas Parshall do desarenador (ponto de coleta “P1-Marrom”)	99
Figura 11 – Reator de lodos ativados (ponto de coleta “P2-Verde”).....	100
Figura 12 – Decantadores secundários e calhas de coleta (ponto de coleta “P4-Azul”)	101
Figura 13 – Bombas parafuso para recirculação de lodo.....	102
Figura 14 – Calha de distribuição dos reatores; o lodo recirculado (à direita) se mistura ao afluyente bruto (à esquerda). O ponto P5 refere-se ao lodo recirculado.....	102
Figura 15 – Esquema geral da ETE São João-Navegantes e definição dos pontos de coleta de amostras (P1-Marrom, P2-Verde, P3-Laranja, P4-Azul e P5-Preto).....	103
Figura 16 – Tipos de dados necessários à simulação e à calibração.....	107
Figura 17 – Coletas de amostras de lodo (madrugada, à esquerda) e do efluente final (manhã, à direita) no dia 21/08/2020	109
Figura 18 – Fracionamento da DQO	114
Figura 19 – Lançamento inicial dos processos no software Stoat	123
Figura 20 – Tela de configuração inicial da simulação	125
Figura 21 – Tela de configuração das condições iniciais dentro do reator	126
Figura 22 – Tela de configuração da operação do decantador secundário	126
Figura 23 – Tela de configuração das condições iniciais no decantador.....	127
Figura 24 – Tela de configuração do modelo de decantação	128

Figura 25 – Nova configuração das unidades no software Stoaat.....	130
Figura 26 – Tela de configuração da operação do “Reator Anoxico”	132
Figura 27 – Tela de configuração dos parâmetros para calibração.....	134
Figura 28 – Tela de configuração dos valores a serem atingidos durante a calibração	135
Figuras 29 e 30 – Formação e acúmulo de espuma em um reator aeróbio, no verão	208
Figuras 31 e 32 – Formação de fina camada de gelo, superficial, no canal de recirculação de lodo e espuma com cristais de gelo no reator aeróbio, no inverno	209
Figura 33 – Acúmulo de espuma no decantador secundário e escape de lodo através das calhas de coleta (efluente final com presença de lodo)	209

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 – Parâmetros de afluente bruto fornecidos pelo DMAE	142
Gráfico 2 – Parâmetros de efluente tratado disponibilizados pelo DMAE.....	143
Gráfico 3 – Variação da DQO afluente para nas diferentes estações (sendo I – inverno; P – primavera; V – verão)	154
Gráfico 4 – Linha de tendência para a variação da DQO medida em todas as estações	154
Gráfico 5 – Comparação do perfil de 24 h real em um dia de verão com a linha de tendência para a variação da DQO medida em todas as estações.....	156
Gráficos 6, 7 e 8 – Variação dos principais parâmetros do afluente para dados de inverno, primavera e verão.....	157
Gráficos 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15 e 16 – Perfis de 72 h para afluente bruto.....	158
Gráficos 17, 18 e 19 – Resultados para o efluente na saída do reator, recirculação de lodo e efluente final – simulação 01, médias de primavera	171
Gráficos 20, 21 e 22 – Resultados para o efluente na saída do reator, recirculação de lodo e efluente final – simulação 02, médias de primavera	174
Gráficos 23, 24, 25, 26, 27 e 28 – Resultados da simulação para médias de inverno	178
Gráficos 29 e 30 – Resultados da simulação para médias de inverno (lodo).....	179
Gráficos 31, 32, 33, 34, 35 e 36 – Resultados para médias de primavera	181
Gráficos 37 e 38 – Resultados da simulação para médias de primavera (lodo).....	182
Gráficos 39, 40, 41, 42, 43 e 44 – Resultados da simulação para médias de verão	184
Gráficos 45 e 46 – Resultados da simulação para médias de verão (lodo).....	185
Gráficos 47, 48 e 49 – Variação das frações da DQO, SST e NH ₃ -N do afluente para validação da calibração.....	188
Gráficos 50, 51, 52, 53 e 54 – Resultados da simulação dinâmica para inverno ...	189
Gráficos 55, 56, 57, 58 e 59 – Resultados da simulação dinâmica para primavera	191
Gráficos 60, 61, 62, 63 e 64 – Resultados da simulação dinâmica para verão	193
Gráficos 65, 66, 67 e 68 – Resultados da simulação para os grupos afluentes calculados por médias históricas	195
Gráficos 69, 70, 71, 72, 73 e 74 – Resultados da simulação para os grupos afluentes calculados por médias históricas (continuação).....	196

Gráficos 75, 76, 77, 78, 79 e 80 – Resultados da simulação para retirada de reatores	199
Gráficos 81, 82, 83 e 84 – Resultados para retirada de reatores, 60 dias.....	200
Gráficos 85, 86, 87, 88, 89 e 90 – Resultados para retirada de decantadores.....	201
Gráficos 91, 92, 93 e 94 – Resultados para retirada de decantadores, 60 dias	202
Gráficos 95 e 96 – Resultados para interrupção do descarte de lodo, 60 dias.....	203
Gráficos 97 e 98 – Resultados da simulação para alteração do esgoto afluente quanto a vazão (Q) e concentração (X)	204
Gráficos 99 e 100, 101, 102, 103 e 104 – Resultados da simulação para alteração do esgoto afluente quanto a vazão (Q) e concentração (X) (continuação).....	205

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Processos cinéticos e estequiométricos para o crescimento heterotrófico em um ambiente aeróbio.....	45
Quadro 2 – Processos cinéticos e estequiométricos do modelo ASM1 (Matriz de Gujer)	49
Quadro 3 – Matriz estequiométrica e de composição do ASM3	56
Quadro 4 – Equações para taxas cinéticas dos processos do ASM3.....	57
Quadro 5 – Notação modificada para variáveis de estado	64
Quadro 6 – Métodos experimentais para fracionamento da DQO	69
Quadro 7 – Principais <i>softwares</i> disponíveis para modelos de lodos ativados.....	93
Quadro 8 – Pontos de coleta de amostras na ETE e parâmetros analisados	108
Quadro 9 – Configuração inicial das unidades no software	123
Quadro 10 – Configuração inicial das unidades no software	131

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Coeficientes cinéticos para utilização do substrato e crescimento da biomassa a 20°C, para sistemas de lodos ativados.....	28
Tabela 2 – Quantidade de processos, variáveis de estado e parâmetros dos principais modelos de lodos ativados.....	44
Tabela 3 – Demanda teórica de oxigênio (ThOD) para alguns elementos fundamentais	53
Tabela 4 – Critérios de aceitação baseados em erros máximos admissíveis.....	75
Tabela 5 – Valores modificados para parâmetros do ASM3.....	77
Tabela 6 – Métodos para análise de parâmetros utilizados nos ensaios de laboratório	111
Tabela 7 – Relações típicas para esgoto bruto e lodo ativado	111
Tabela 8 – Média, desvio padrão e coeficiente de variação para NA, DBO ₅ , DQO e SST, para afluente bruto e efluente tratado	144
Tabela 9 – Parâmetros do afluente bruto e do efluente tratado selecionados e agrupados por faixas de DQO afluente (unidades em mg/L exceto onde indicado)	145
Tabela 10 – Médias consolidadas para cada grupo de amostras, para fins de simulação (valores em mg/L exceto onde indicado)	146
Tabela 11 – Resultados das análises laboratoriais para inverno (parte 1)	147
Tabela 12 – Resultados das análises laboratoriais para inverno (parte 2)	148
Tabela 13 – Resultados das análises laboratoriais para primavera (parte 1)	149
Tabela 14 – Resultados das análises laboratoriais para primavera (parte 2)	150
Tabela 15 – Resultados das análises laboratoriais para verão (parte 1)	151
Tabela 16 – Resultados das análises laboratoriais para verão (parte 2)	152
Tabela 17 – Relações encontradas para esgoto bruto e lodo ativado nas amostras	153
Tabela 18 – Resultados de DQO afluente e efluente em 24 horas em dia de verão	155
Tabela 19 – Resultados para fracionamento da DQO – inverno, tarde	160
Tabela 20 – Resultados para fracionamento da DQO – inverno, noite.....	160
Tabela 21 – Resultados para fracionamento da DQO – inverno, madrugada	161
Tabela 22 – Resultados para fracionamento da DQO – inverno, manhã	161
Tabela 23 – Resultados para fracionamento da DQO – primavera, manhã	162

Tabela 24 – Resultados para fracionamento da DQO – primavera, tarde	162
Tabela 25 – Resultados para fracionamento da DQO – primavera, noite	163
Tabela 26 – Resultados para fracionamento da DQO – primavera, madrugada	163
Tabela 27 – Resultados para fracionamento da DQO – verão, tarde	164
Tabela 28 – Resultados para fracionamento da DQO – verão, noite	164
Tabela 29 – Resultados para fracionamento da DQO – verão, madrugada	165
Tabela 30 – Resultados para fracionamento da DQO – verão, manhã	165
Tabela 31 – Resultados para fracionamento da DQO afluente e efluente para as médias do DMAE	166
Tabela 32 – Dados iniciais calculados para o reator aeróbio, referentes aos dados históricos fornecidos pelo DMAE, agrupados por médias.....	170
Tabela 33 – Resultados reais quanto a formas nitrogenadas e alcalinidade – médias de primavera, por ensaios de laboratório.....	172
Tabela 34 – Resultados para amostras de lodo coletadas pelo DMAE	173
Tabela 35 – Resultados da calibração do software e valores adotados para verificação (valores provisórios)	175
Tabela 36 – Resultados da calibração por tentativas e testes de verificação.....	176
Tabela 37 – Comparação entre médias reais e da simulação para 48-96 h, inverno	180
Tabela 38 – Comparação entre médias reais e da simulação para 48-96 h, primavera	183
Tabela 39 – Comparação entre médias reais e da simulação para 48-96 h, verão	186
Tabela 40 – Comparação entre médias reais e da simulação dinâmica para 48-96 h, inverno.....	190
Tabela 41 – Comparação entre médias reais e da simulação dinâmica para 48-96 h, primavera	192
Tabela 42 – Comparação entre médias reais e da simulação dinâmica para 48-96 h, verão	194
Tabela 43 – Resultados para grupos selecionados nos dados secundários fornecidos pelo DMAE, em médias do efluente tratado.....	197
Tabela 44 – Valores padrão para parâmetros do ASM3.....	234

LISTA DE SIGLAS

A/M	Relação Alimento-Microrganismo
ADM1	<i>Anaerobic Digestion Model N. 1</i>
AGV	Ácidos Graxos Voláteis
ANO	<i>Autotrophic Nitrifying Organisms</i>
AOB	<i>Ammonia-Oxidizing Bacteria</i>
ASM	Modelo de Lodos Ativados (<i>Activated Sludge Model</i>)
C/N	Relação Carbono-Nitrogênio
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DBO ₅	Demanda Bioquímica de Oxigênio em cinco dias
DBO ₂₀	Demanda Bioquímica de Oxigênio em 20 dias
DBO _{tot}	Demanda Bioquímica de Oxigênio Total
DMAE	Departamento Municipal de Água e Esgoto De Porto Alegre
DOUT	<i>Task Group on Design and Operations Uncertainty</i>
DQO	Demanda Química de Oxigênio
EAWAG	<i>Swiss Federal Institute of Aquatic Science and Technology</i>
ETE	Estação De Tratamento de Efluentes; Estação de Tratamento de Esgotos
GMP-TG	<i>Good Modelling Practice – Task Group</i>
HSG	<i>Hochschulgruppe Simulation</i>
IAWPR	<i>International Association on Water Pollution Research</i>
IAWQ	<i>International Association on Water Quality</i>
IFAK	<i>Institut Für Automation und Kommunikation</i>
IWA	<i>International Water Association</i>
IWSA	<i>International Water Services Association</i>
MAE	<i>Mean Absolute Error</i>
MBR	Reatores Biológicos por Membrana
NBR	Normas Brasileiras de Regulação
NA	Nitrogênio Amoniacal
NH ₄ -N	Nitrogênio Amoniacal
NOB	<i>Nitrite-Oxidizing Bacteria</i>
NTK	Nitrogênio Total Kjendahl

NT	Nitrogênio Total
OD	Oxigênio Dissolvido
OHO	<i>Ordinary Heterotrophic Organisms</i>
OUR	Taxa de Oxigênio Utilizada
PAO	<i>Phosphate Accumulating Organisms</i>
PHA	Poli-Hidroxialcanoatos
RBC	Rotatores Biológicos de Contato
RMSE	<i>Root Mean Squared Error</i>
RSM	<i>Response Surface Methodology</i>
SAD	Processo Simultâneo Anammox e Desnitrificação
SAS	Lodos Ativados com Seletores
SBR	Reatores em Batelada Sequencial
SES	Sistema de Esgotos Sanitários
SST	Sólidos Suspensos Totais
SSTA	Sólidos Suspensos no Tanque de Aeração
SSV	Sólidos Suspensos Voláteis
SSVnb	SSV não Biodegradáveis
SSVTA	Sólidos Suspensos Voláteis no Tanque de Aeração
TG	<i>Task Group</i>
TDH	Tempo de Detenção Hidráulica
ThOD	Demanda Teórica de Oxigênio
UCT	Universidade do Cabo
WERF	<i>Water Environment Research Foundation</i>
WRC	<i>Water Research Centre</i>
WRRF	<i>Water Resource Recovery Facilities</i>
WWTP	<i>Wastewater Treatment Plant</i>

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	Objetivos	22
1.1.1	Objetivo Geral	22
1.1.2	Objetivos Específicos	22
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	23
2.1	Tratamento de Esgotos por Microrganismos	24
2.1.1	Crescimento da biomassa e consumo de substrato	24
2.1.2	Idade do lodo e relação alimento/microrganismo.....	28
2.1.3	Nitrificação.....	32
2.1.4	Demanda de oxigênio	34
2.1.5	Transferência de oxigênio	35
2.1.6	Desnitrificação	38
2.2	Modelos de Lodos Ativados	39
2.2.1	Modelo de Lodos Ativados N. 1 – ASM1.....	44
2.2.2	Modelo de Lodos Ativados N. 3 – ASM3.....	50
2.2.3	Caracterização do esgoto e estimativa dos parâmetros do modelo	58
2.2.4	Notação de variáveis e parâmetros dos modelos ASM	63
2.2.5	Outros métodos para o fracionamento da DQO.....	64
2.2.6	Calibração e verificação	71
2.2.7	Novos padrões para parâmetros cinéticos e estequiométricos.....	76
2.2.8	Aplicações recomendadas e limitações do ASM3	78
2.3	Modelo de decantação	79
2.4	Iniciativas recentes e tendências em modelagem de lodos ativados	84
2.5	Softwares	87
3	METODOLOGIA	94
3.1	Avaliação da ETE e definição dos pontos de coleta de amostras	96
3.1.1	Operação da ETE e Definição dos Pontos de Coleta de Amostras	98
3.2	Obtenção de dados operacionais e consolidação	103
3.2.1	Tratamento de dados secundários e segregação por grupos.....	104
3.2.2	Campanhas de coletas de amostras <i>in loco</i> e análises em laboratório .	106
3.2.3	Elaboração de perfis diários de parâmetros do efluente.....	112
3.2.4	Fracionamento da DQO	113

3.2.5	Informações adicionais necessárias à modelagem.....	121
3.3	Configuração do modelo no software de modelagem.....	122
3.3.1	Testes de funcionalidade da configuração inicial proposta.....	124
3.3.2	Nova configuração do modelo e testes de funcionalidade.....	129
3.4	Calibração e validação do modelo	133
3.4.1	Calibração inicial do modelo utilizando a ferramenta automática do software	133
3.4.2	Calibração do modelo pelo método de tentativa e erro.....	136
3.4.3	Validação da calibração	137
3.5	Simulação da operação da ETE utilizando diferentes cenários	139
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	141
4.1	Resultados referentes aos dados operacionais.....	141
4.1.1	Resultados obtidos no tratamento de dados secundários	142
4.1.2	Resultados obtidos através de ensaios em coletas de amostras	146
4.1.3	Resultados da elaboração de perfis diários do efluente	153
4.1.4	Resultados obtidos no fracionamento da DQO referente aos dados secundários e às amostras coletadas	159
4.1.5	Dados adicionais necessários à modelagem.....	167
4.2	Resultados quanto aos testes de funcionalidade do modelo.....	170
4.3	Coefficientes cinéticos, estequiométricos e de temperatura modificados no procedimento de calibração	175
4.4	Simulações em regime estacionário com médias obtidas durante as campanhas de coleta	177
4.4.1	Resultados das simulações em regime estacionário com as médias de inverno.....	177
4.4.2	Resultados das simulações em regime estacionário com médias de primavera	181
4.4.3	Resultados das simulações em regime estacionário com as médias de verão	184
4.5	Resultados da validação com simulações em regime dinâmico.....	187
4.5.1	Resultados da simulação dinâmica com perfil afluente de inverno.....	187
4.5.2	Resultados da simulação dinâmica com perfil afluente de primavera ...	191
4.5.3	Resultados da simulação dinâmica com perfil afluente de verão	193

4.6	Resultados da validação com simulações em regime estacionário com dados secundários (médias históricas).....	195
4.7	Resultados das simulações em regime dinâmico utilizando diferentes cenários.....	198
4.7.1	Simulação da retirada de tanques de operação.....	198
4.7.2	Simulação da interrupção do descarte de lodo	203
4.7.3	Simulação da alteração das características do esgoto bruto afluente ...	204
4.8	Considerações quanto às limitações do modelo empregado	207
4.8.1	Limitações em modelos matemáticos	207
4.8.2	Considerações quanto aos coeficientes para calibração	210
4.8.3	Considerações quanto ao fracionamento da DQO	211
4.8.4	Considerações quanto aos ensaios de laboratório	213
4.8.5	Outras considerações	214
4.9	Aceitação dos resultados	217
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	220
	REFERÊNCIAS.....	221
	APÊNDICE A – VALORES PADRÃO PARA PARÂMETROS DO ASM3	234

1 INTRODUÇÃO

O tratamento de esgotos envolve uma ampla gama de processos não lineares que compreendem atividades físicas, químicas e biológicas fortemente interligadas. Por esse motivo, os bons modelos preditivos são dimensionalmente complexos e demandam soluções intensivas em termos computacionais. (ARAROMI *et al.*, 2018). Devido a essa não-linearidade, embora o mecanismo de remoção de matéria orgânica carbonácea e nutrientes esteja bem estabelecida na literatura, quando os problemas de qualidade do efluente surgem, a experiência do operador torna-se decisiva na manutenção da estabilidade do sistema. (KIM *et al.*, 2019).

Dentre as tecnologias consagradas, o tratamento de esgotos por lodos ativados consiste numa opção muito eficaz, sendo a mais empregada no mundo e capaz de tratar grandes volumes de efluentes domésticos e industriais em reduzidos espaços para implantação. Embora robusta, a tecnologia requer conhecimento especializado do operador, a quem cabe a tomada de decisões importantes quanto a uma grande quantidade de parâmetros que visam obter, fundamentalmente, um efluente dentro dos padrões de lançamento com os menores custos operacionais. Ao operador cabe compensar o comportamento dinâmico não linear dos processos envolvidos e as variações causadas pelas decisões operacionais em planta. (BRAULT *et al.*, 2011).

O sistema tem custos elevados tanto em termos de implantação, demandando bombas, aeradores, decantadores e equipamentos, como também em termos de operação, sobretudo em gastos energéticos em aeração. Sendo uma alternativa dispendiosa, é necessário compreender que o tratamento de esgotos por lodos ativados nem sempre é suficientemente aproveitado em todo o seu potencial. (MUOIO *et al.*, 2019). Ademais, é comum a ocorrência de falhas ou desperdícios no processo, eventualmente sendo necessário a nova partida do sistema. (NI; YU; SUN, 2008). Situações extremas podem ser evitadas através da adoção de políticas de monitoramento e promoção de ações de emergência. (LEU *et al.*, 2009).

No Brasil, segundo a Pesquisa Nacional de Saneamento Básico 2008 (INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA, 2010), havia no país 215 municípios que empregavam lodos ativados ou valos de oxidação em tratamento de esgotos, representando cerca de 14% dos municípios que realizavam tratamento com ETE. Considerando que emprego de lodos ativados em ETE se adéqua a grandes vazões, estima-se que o volume tratado de esgotos no país através dessa tecnologia

atinja um percentual ainda mais expressivo. Diante desse cenário, entende-se que a pesquisa de um método que forneça subsídios na tomada de decisões operacionais em estações é oportuna. As possibilidades em termos de otimização de processos são potencializadas com o auxílio uma ferramenta computacional apropriada, no entanto a maioria das estações implantadas no Brasil carecem de dados mínimos necessários à modelagem matemática.

O projeto de ETE é realizado tradicionalmente através de equações de balanço de massa, considerando carga orgânica volumétrica e parâmetros cinéticos padrões para microrganismos em regime estacionário. Porém o tratamento biológico de esgotos, sendo constituído por processos não lineares (ARAROMI *et al.*, 2018), envolve processos dinâmicos difíceis de serem compreendidos e gerenciados dada as alterações que estações reais apresentam em termos de vazão, carga orgânica e concentração de microrganismos por unidade de tempo (GERNAEY *et al.*, 2004; MORAL; AKSOY; GOKCAY, 2008). Sendo assim, é possível que os métodos tradicionais de dimensionamento não sejam completamente adequados às situações reais enfrentadas pelo operador.

Nesse sentido, modelos capazes de simular tais processos são alternativas úteis para gerenciamento, operação, proposição de ações de contingenciamento e monitoramento de estações de tratamento, inclusive para projeto e, especialmente, para estudo de alternativas de otimização de estações operativas. Em modo geral, foi comprovado que tais modelos, quando devidamente calibrados, são capazes de descrever a cinética bioquímica dos lodos ativados predizendo resultados para efluente tratado, sendo úteis na tomada de decisões operacionais e de projeto. O sucesso na aplicação de tais modelos se deve, em parte, pela riqueza de informações e dos parâmetros necessários para o seu uso. (GLOVER *et al.*, 2006; HAUDUC *et al.*, 2011).

Desde o lançamento do primeiro modelo até a presente data, já se passaram mais de trinta anos. Embora o emprego desses modelos ainda seja desafiador em termos de calibração (ANDRAKA *et al.*, 2018; HAUDUC *et al.*, 2009), seu uso encontra-se razoavelmente consagrado em diversos países desenvolvidos (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). No Brasil, as pesquisas nesses termos ainda não proporcionaram aos modelos o reconhecimento já alcançado em outros países, e um dos motivos é a escassez de dados de toda a sorte, desde informações quanto à vazão até quanto à capacidade do sistema de aeração. Não raro, também faltam

dados quanto ao comportamento dinâmico do afluente e quanto à sedimentabilidade do lodo, necessários à modelagem. Os parâmetros do esgoto bruto e tratado são normalmente limitados a ensaios comuns, enquanto o fracionamento da DQO é indispensável para as simulações. Nesse contexto, são diversos os obstáculos a serem vencidos para que o emprego de modelos matemáticos seja uma prática em estações de tratamento no país.

O presente trabalho busca contribuir com uma tentativa de aplicação prática de um modelo ASM da IWA em uma ETE em escala real no Brasil, a partir parâmetros de monitoramento padrão como DBO_5 , DQO, sólidos suspensos e formas nitrogenadas. A ETE escolhida está localizada no Estado do Rio Grande do Sul, onde o emprego de lodos ativados é comum para médias e grandes vazões de projeto. Nesta pesquisa, foi utilizado o modelo ASM3, que abrange matéria orgânica carbonácea e nitrogenada, com o suporte de ensaios laboratoriais padrão aplicado a um número limitado de amostras, porém minimamente suficiente para a definição de um perfil dinâmico. Os ensaios foram divididos por estações climáticas (inverno, primavera e verão), visando a delineação de perfis afluentes heterogêneos. A pesquisa também contou com dados secundários históricos fornecidos pela equipe de operação da ETE.

Ao contrário de pesquisas semelhantes que contam com alto suporte laboratorial – especialmente testes de biodegradabilidade da DQO em reator fechado, empregados nos estudos envolvendo este tipo de modelo matemático –, o presente trabalho baseou-se na consolidação de dados obtidos a partir de poucas amostras em um conjunto adaptado às necessidades do modelo. Contando com uma metodologia de fracionamento de DQO adaptada para o presente caso, as simulações foram realizadas a partir de dados de monitoramento comuns em ETE em operação no país. Tal metodologia foi validada após análise dos resultados da simulação, comparando-os com os resultados reais de campo. Também foi investigada a aplicabilidade da ferramenta computacional na simulação de cenários alternativos para a ETE, em operações distintas da atualmente empregada.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo Geral

Simular o tratamento de esgotos em uma ETE de lodos ativados com o modelo matemático ASM3 a partir de perfis heterogêneos de afluentes, com variação diária em características e vazão, a partir de parâmetros de monitoramento obtidos a partir de ensaios em amostras coletadas na estação.

1.1.2 Objetivos Específicos

Os objetivos específicos da presente pesquisa são:

- a) testar uma metodologia adaptada para a obtenção das frações da DQO do esgoto bruto afluente, da biomassa, do lodo ativado, do efluente do reator e do efluente final, a partir de ensaios comuns em amostras coletadas no campo;
- b) avaliar o desempenho do modelo matemático na simulação dinâmica da ETE a partir de uma calibração única para diferentes perfis afluentes originados em três estações climáticas, dentro do contexto da pesquisa;
- c) verificar o comportamento operacional da ETE a partir de cenários envolvendo paralisação de unidades, mudanças de carga orgânica, de vazão e de descarte de lodo.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O projeto de estações de tratamento por lodos ativados é fundamentado nas equações de balanço de massas originadas em parâmetros cinéticos padrões para microrganismos em esgotos sanitários (ABYAR *et al.*, 2018; HENZE *et al.*, 2008). No Brasil, são compilados em parâmetros de controle operacional e de projeto na NBR 12209:2011 (ABNT, 2011), tendo em destaque parâmetros simples como a idade do lodo, relação alimento/microrganismos (A/M) e concentração de sólidos suspensos voláteis (SSV) no tanque de aeração e na recirculação de lodo.

Em contraste, os modelos matemáticos se valem diretamente das equações diferenciais que descrevem as reações bioquímicas dos lodos ativados e da relação delas entre si, proporcionando simulações em estado não estacionário, requerendo grande esforço computacional (ARAROMI *et al.*, 2018; GUJER, 2006; SIN *et al.*, 2008). Somente para o modelo ASM1 são necessários 19 parâmetros, enquanto para o ASM2, mais de 50 (TOMIDA *et al.*, 2001).

Por outro lado, a grande quantidade de parâmetros traz consigo um obstáculo para a sua aplicação prática e disseminada na área. (ANDERSON *et al.*, 2000; GLOVER *et al.*, 2006). Para superar essa dificuldade, a IWA, através do *Good Modelling Practice – Task Group* (GMP-TG), consolidou os principais protocolos de modelagem e calibração de modelos através de um relatório técnico denominado *Guidelines for Using Activated Sludge Models*, no qual apresenta uma proposta unificada para aplicação e uso de modelos para projeto, monitoramento, otimização e treinamento em ETE em escala real. (RIEGER *et al.*, 2013).

A fundamentação teórica está dividida em cinco partes, sendo a primeira referente à revisão da cinética das reações bioquímicas envolvidas no tratamento de esgotos por lodos ativados, originadas com a equação de Monod e seus parâmetros clássicos para esgotos sanitários, as quais subsidiaram a criação dos modelos matemáticos. Outras equações para cálculo de parâmetros operacionais são apresentadas e expressam a alternativa mais comum vigente para projeto, monitoramento e diagnóstico de estações de tratamento por lodos ativados.

Na segunda parte, são apresentados os modelos de lodos ativados ASM1 e ASM3 e a diferença entre eles quanto ao número de parâmetros e processos envolvidos e a abrangência de cada um. Ambos são detalhados através da Matriz de Gujer, a qual expressa as relações entre as equações diferenciais que descrevem a

estabilização da matéria orgânica carbonácea e nitrogenada, o crescimento e decaimento de microrganismos e o consumo de oxigênio. Ainda na segunda parte, são apresentadas as metodologias mais indicadas para a caracterização do esgoto e métodos para o fracionamento da DQO, além de metodologia para calibração do modelo. Novos parâmetros padrão são apresentados a partir de pesquisas mais recentes, bem como as limitações e recomendações do modelo ASM3.

A terceira parte versa brevemente sobre o modelo de decantação de (TAKÁCS; PATRY; NOLASCO, 1991), amplamente empregado em simulações, inclusive no presente trabalho. A quarta parte trata de novas iniciativas e tendências em modelagem em face das pesquisas recentes em lodos ativados, sendo importante para contextualizar o presente trabalho dentro do que se tem estudado atualmente na área. A quinta e última parte refere-se aos principais *softwares* disponíveis para a aplicação dos modelos e uma comparação entre eles quanto às funcionalidades disponíveis e custos.

2.1 Tratamento de Esgotos por Microrganismos

O item a seguir versa sobre os fundamentos da cinética microbiana para crescimento da biomassa e do consumo de substrato (matéria orgânica carbonácea e nitrogenada) que regem o tratamento de esgotos, bem como da respiração endógena e dos requisitos de oxigênio ou nitrato para as reações bioquímicas que ocorrem dentro do reator biológico. Tais fundamentos são baseados em equações diferenciais as quais originam as equações de balanço de massas que norteiam o dimensionamento corrente de unidades e o cálculo de parâmetros operacionais, e os modelos matemáticos de simulação em lodos ativados.

2.1.1 Crescimento da biomassa e consumo de substrato

Atualmente, qualquer introdução à cinética de remoção de substratos inicia pela equação de Monod proposta em 1942 de modo empírico para a taxa crescimento de culturas puras em função da concentração de alimento apresentada em forma de equação diferencial de primeira ordem e expressa conforme a Equação 1: (MARAIS; EKAMA, 1976, p. 169)

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S}{K_s + S} \quad (1)$$

Sendo:

μ : taxa de crescimento específico de microrganismos, em g de novas células/g de células existentes.d;

μ_{\max} : taxa máxima de crescimento específico, em d⁻¹;

S: concentração de substrato biodegradável (nutriente limitante), em g/m³ ou mg/L;

K_s : constante de meia-saturação, ou seja, concentração do substrato quando $\mu = \mu_{\max}/2$, em g/m³ ou mg/L.

A equação qual foi adotada para sistemas mistos de substratos e de culturas, definindo o campo do tratamento biológico de esgotos, sendo a base dos modelos matemáticos para descrever a cinética das reações bioquímicas em lodos ativados. (HENZE *et al.*, 2008; ORHON *et al.*, 2009; VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). Através da caracterização das frações de DQO em função de diferentes graus de biodegradabilidade, a equação é validada em termos de DQOrb (DQO rapidamente biodegradável), SSV e biomassa ativa (X_B). (COKGOR *et al.*, 2009; ORHON *et al.*, 2009).

As limitações ocorrem quando uma comunidade microbiana realiza adaptações fisiológicas em virtude da falta de substrato, conseguindo ajustar sua taxa de crescimento em certas condições ambientais. (INSEL; ORHON; VANROLLEGHEM, 2003; KOVÁROVÁ-KOVAR; EGLI, 1998; LAVALLÉE; LESSARD; VANROLLEGHEM, 2005). Apesar disso, a equação permanece sendo a base de estudos de cinética microbiana inclusive na remoção de formas nitrogenadas e na redução de sulfatos, variando-se somente os coeficientes cinéticos para microrganismos. (CARMINATI *et al.*, 2018; XU *et al.*, 2013).

A forma simplificada da equação de Monod reduz uma cultura inteira a uma única enzima expressa em uma única intensidade, relacionando o metabolismo biológico apenas como função da concentração de substrato disponível. (LAVALLÉE; LESSARD; VANROLLEGHEM, 2005). Partindo dessa premissa, também pode-se

deduzir que a taxa de crescimento microbiano em um reator de lodos ativados também será expressa como função da própria concentração de células, conforme a Equação 2: (MARAIS; EKAMA, 1976, p. 169-170)

$$\frac{dX}{dt} = \mu X = \mu_{\text{máx}} \frac{S}{K_s + S} X \quad (2)$$

Sendo:

X: concentração de microrganismos (biomassa) em g SSV/m³ ou mg SSV/L.

Sendo a taxa de crescimento microbiano função de sua própria concentração e da concentração do substrato, a taxa de consumo de substrato também é função desses mesmos parâmetros e pode ser expressa conforme a Equação 3. (METCALF & EDDY, 2003, p. 581). Introduzindo uma constante de proporcionalidade $Y = \mu_{\text{máx}}/k$, é reescrita como a Equação 4. (HENZE *et al.*, 2000, p. 7; METCALF & EDDY, 2016, p. 571).

$$\frac{dS}{dt} = k \frac{X S}{K_s + S} \quad (3)$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{Y} \frac{\mu_{\text{máx}} S}{K_s + S} X \quad (4)$$

Sendo:

k: taxa máxima de consumo de substrato em g/m³.d ou d⁻¹.

Y: constante de proporcionalidade da formação de biomassa pelo consumo de substrato, em g SSV/g DBO ou DQO biodegradável.

Reescrevendo a Equação 2 com a Equação 4, e introduzindo o decaimento endógeno expresso por $-b.X$, obtém-se: (HENZE *et al.*, 2000, p. 7; METCALF & EDDY, 2016, p. 572)

$$\frac{dX_B}{dt} = Y \frac{dS}{dt} - b X \quad (5)$$

Sendo:

b : coeficiente de respiração endógena em d^{-1} .

Para condições finitas de tempo, a Equação 5 é reescrita em termos de remoção de substrato ($S_{INF} - S_{EFF}$) para um intervalo de tempo t . (VON SPERLING, 2016, p. 47).

$$\frac{\Delta X}{\Delta t} = Y \frac{(S_{INF} - S_{EFF})}{t} - b X \quad (6)$$

Sendo:

S_{INF} : concentração de substrato do afluente;

S_{EFF} : concentração de substrato do efluente;

t : tempo, em unidade compatível com a dos parâmetros Y e b .

Assim, estabelecidos os parâmetros cinéticos Y e b , é possível calcular a produção de biomassa em função da remoção de substrato. Na absoluta ausência de testes laboratoriais para a determinação desses parâmetros, o projetista adotará valores referenciais encontrados na bibliografia para esgotos domésticos, sendo alguns expressos na Tabela 1.

Tabela 1 – Coeficientes cinéticos para utilização do substrato e crescimento da biomassa a 20°C, para sistemas de lodos ativados

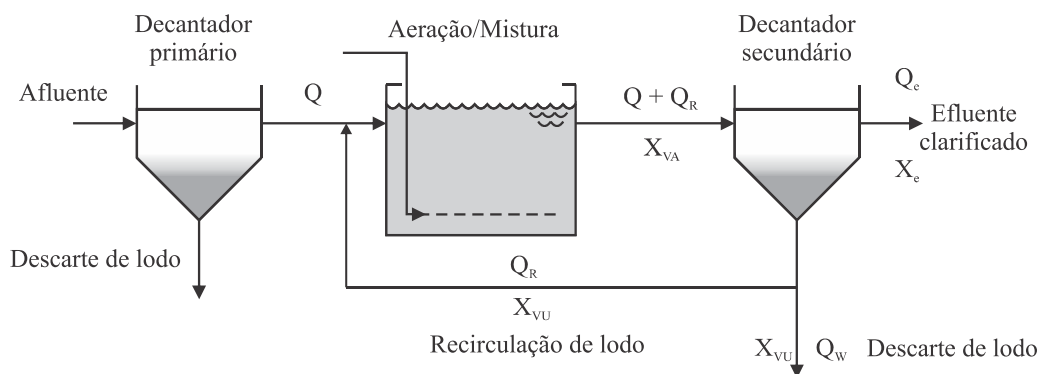
Coeficiente	Unidade	Faixa	Típico
μ_{max}	g SSV/g SSV.d	3–13,2	6
k	g DQObs/g SSV.d	2–10	5
K_s	mg/L DBO	25–100	60
	mg/L DQOb	5–40	20
	mg/L DQObs	10–60	40
Y	mg SSV/mg DBO	0,4–0,8	0,6
	mg SSV/mg DQOb	0,3–0,5	0,4
	mg SSV/mg DQObs	0,3–0,6	0,4
b	g SSV/g SSV.d	0,06–0,2	0,12

Fonte: Adaptado de Metcalf & Eddy (2003, p. 585, 704; 2016, p. 573, 726)

2.1.2 Idade do lodo e relação alimento/microrganismo

Um sistema de lodos ativados de fluxo contínuo pode ser representado pelo esquema da Figura 1, onde um reator alimentado continuamente (Q) recebe uma vazão de recirculação de lodo Q_R proveniente do decantador secundário. O descarte de lodo é efetuado a partir deste a uma vazão Q_W .

Figura 1 – Esquema de operação de um reator de fluxo contínuo com recirculação de lodo



Fonte: Adaptado de Metcalf & Eddy (2016, p. 724).

Considerando o fluxo típico apresentado na Figura 1, a idade do lodo é calculada através da Equação 7. (METCALF & EDDY, 2016, p. 578).

$$\theta_c = \frac{V X_B}{(Q_W X_R) + (Q_E X_E)} \quad (7)$$

Sendo:

θ_c : idade do lodo, em d;

V: volume do reator (volume no tanque de aeração), em m³;

X_B : concentração do lodo no reator aeróbio, em g SSV/m³;

Q_W : vazão de descarte de lodo;

X_R : concentração do lodo no descarte, em g SSV/m³;

Q_E : vazão do efluente tratado;

X_E : concentração de SSV do efluente tratado, em g SSV/m³.

A concentração da biomassa em termos da idade do lodo e do tempo de retenção hidráulica $t (= V/Q)$ pode ser expressa através da Equação 8: (METCALF & EDDY, 2016, p. 579)

$$X_B = \frac{\theta_c Y (S_{INF} - S)}{t (1 + b \theta_c)} \quad (8)$$

Dessa maneira, considerando os parâmetros cinéticos típicos para esgotos sanitários, é possível, a partir de uma única equação, relacionar idade do lodo (θ_c), vazão média do sistema (Q), remoção de substrato ($S_{INF}-S$), concentração de biomassa, volume do reator e tempo de retenção hidráulica.

Até o momento, as equações apresentadas expressam as concentrações de lodo ou biomassa ativa em termos de SSV. No entanto o controle operacional da produção de lodo deve levar em consideração a massa não biodegradável de SSV, normalmente calculadas como uma fração da quantidade total de SSV do sistema. (ANDREOLI; VON SPERLING; FERNANDES, 2007; ÇOKGÖR *et al.*, 1998; RAMDANI *et al.*, 2010). A concentração de SSV no licor misto é um parâmetro de controle operacional que deve normalmente ser mantido em valor constante. (LABELLE *et al.*,

2017). O volume de lodo a ser descartado por dia para se manter a concentração constante do licor misto é dado pela Equação 9. (METCALF & EDDY, 2016, p. 580).

$$P_{X,SSV} = \frac{X_T V}{\theta_c} \quad (9)$$

Sendo:

$P_{X,SSV}$: massa de sólidos a serem descartados por dia em g SSV/d;

X_T : concentração total de SSV no licor misto (no tanque de aeração), em g SSV/m³.

A fração de SSV sobre sólidos suspensos totais (SST) em lodos ativados está comumente em faixa entre 0,75-0,80, enquanto a fração de SSV não biodegradáveis (SSVnb) sobre SST estaria num intervalo de 0,15-0,30. A fração SSVnb/SSV (f_d) seria de 0,40 para o esgoto bruto, e entre 0,10-0,20 para o reator de lodos ativados (ANDREOLI; VON SPERLING; FERNANDES, 2007; RAMDANI *et al.*, 2010). A fração não biodegradável de SSV (SSVnb) é composta pela fração não biodegradável do esgoto bruto afluente ($X_{I,INF}$) e pelo resíduo da respiração endógena (X_E) (RAMDANI *et al.*, 2010), não podendo ser isoladas ou medidas independentemente (LABELLE *et al.*, 2017). A taxa de crescimento do resíduo endógeno não biodegradável é calculado pela Equação 10. (RAMDANI *et al.*, 2010, p. 2180).

$$\frac{dX_E}{dt} = f b X_B \quad (10)$$

Sendo:

X_E : resíduo endógeno não biodegradável em g SSV/m³;

f : fração de resíduo endógeno, entre 0,10-0,20 g SSV/g biomassa SSV reduzida por decaimento.

A geração líquida de SSVnb no tanque de aeração será expressa pela Equação 11. (METCALF & EDDY, 2016, p. 581).

$$\frac{dX_I}{dt} V = Q X_{I,INF} - \frac{X_I V}{\theta_c} + f b X_B V \quad (11)$$

Sendo:

X_I : concentração de SSVnb no licor misto em g SSV/m³;

$X_{I,INF}$: SSVnb do esgoto bruto (afluente) em g SSV/m³.

Para $dX_U/dt = 0$, obtém-se:

$$X_I = \frac{Q}{V} \theta_c X_{I,INF} + f b X_B \theta_c \quad (12)$$

Sendo $X_T = X_B + X_I$, e $t = V/Q$, então:

$$X_T = \frac{Q \theta_c Y (S_{INF} - S)}{V (1 + b \theta_c)} + \frac{Q}{V} \theta_c X_{I,INF} + f b X_B \theta_c \quad (13)$$

Substituindo X_B pela Equação 8 e expressando a produção de SSV por volume ($P_{X,SSV} = X_T \cdot V / \theta_c$):

$$P_{X,SSV} = \frac{Q Y (S_{INF} - S)}{1 + b \theta_c} + Q X_{I,INF} + \frac{f b Q Y \theta_c (S_{INF} - S)}{1 + b \theta_c} \quad (14)$$

Sendo assim, a produção de lodo diária será calculada analiticamente pela Equação 14, que inclui a biomassa ativa em crescimento, a biomassa endógena e os SSVnb presentes no esgoto bruto afluente. A idade do lodo presente no denominador indica que, quanto maior for, menor será a produção de lodo no sistema (MUOIO *et al.*, 2019).

A fundamentação resumidamente exposta permite o dimensionamento do reator e o cálculo dos principais parâmetros operacionais para lodos ativados com objetivo de remoção de DQO carbonácea, inclusive a produção de lodo, cálculo da

vazão de recirculação e de descarte. Os parâmetros cinéticos comumente empregados em projetos encontram-se referenciados em bibliografia consagrada (METCALF & EDDY, 2016), conforme Tabela 1 anteriormente apresentada.

2.1.3 Nitrificação

A cinética da nitrificação também pode ser expressa através da equação de Monod adaptada (Equação 1), sendo o substrato representado pela concentração nitrogênio amoniacal (expresso por S_{NH}): (VON SPERLING, 2016, p. 290)

$$\mu_A = \mu_{\text{máx},A} \frac{S_{NH}}{K_{A,NH} + S_{NH}} \quad (15)$$

Sendo:

$\mu_{\text{MAX},A}$: taxa de crescimento específico de bactérias nitrificantes, em g SSV/g SSV.d;

S_{NH} : concentração de nitrogênio amoniacal em mg/L;

$K_{A,NH}$: coeficiente de meia saturação para nitrogênio amoniacal, em mg/L.

Sendo válida a equação de Monod para a nitrificação, os devidos ajustes nos coeficientes cinéticos são feitos para que a concentração de amônia seja o substrato para as bactérias oxidantes de amônia – AOB (*ammonia-oxidizing bacteria*), predominantemente do gênero *Nitrosomonas*. As AOB são bactérias autotróficas, embora haja alguma parcela de bactérias heterotróficas oxidantes de amônia em esgotos domésticos (predominantemente do gênero *Candidatus Nitrosotenuis*). (HOLMES; DANG; SMITH, 2019, p. 14-15).

A nitratação é realizada por bactérias oxidantes de nitrito – NOB (*nitrite-oxidizing bacteria*), das quais se destacam as do gênero *Nitrobacter*, mas com predominância em esgotos as dos gêneros *Candidatus Nitrotoga* e *Candidatus Nitrospira* (HOLMES; DANG; SMITH, 2019, p. 25-26) – sendo também bactérias autotróficas. As equações cinéticas também permanecem válidas em forma para a nitratação, substituindo-se o substrato pela concentração de nitrito ($N-NO_2$) e ajustando-se os respectivos coeficientes cinéticos.

As AOB e NOB em conjunto são denominados organismos autotróficos nitrificantes – ANO (*autotrophic nitrifying organisms*). Considerando o metabolismo combinado dos dois grupos, utilizando-se os coeficientes cinéticos com subscrito “A” como referência às bactérias autotróficas, a taxa de consumo de nitrogênio amoniacal é descrito pela Equação 16 (semelhante à Equação 4). (METCALF & EDDY, 2016, p. 604).

$$r_{\text{NH}} = \left(\frac{\mu_{\text{máx,A}}}{Y_A} \right) \left(\frac{S_{\text{NH}}}{S_{\text{NH}} + K_{\text{A,NH}}} \right) \left(\frac{S_{\text{O}_2}}{S_{\text{O}_2} + K_{\text{A,O}_2}} \right) X_A \quad (16)$$

Sendo:

r_{NH} : taxa de consumo de nitrogênio amoniacal, em g $\text{NH}_3\text{-N/d}$;

S_{O_2} : concentração de OD, em g/m^3 ou mg/L ;

X_A : concentração de ANO, em g SSV/ m^3 ;

Y_A : síntese de ANO, em g SSV/g DQO utilizado;

$K_{\text{A,O}_2}$: coeficiente de meia-velocidade para OD, para ANO, em g/m^3 .

A Equação 8 adaptada para a nitrificação resulta na Equação 17. (METCALF & EDDY, 2016, p. 604).

$$X_A = \frac{Q \theta_c Y_A (S_{\text{NH,INF}})}{V (1 + b_{\text{A,O}_2} \theta_c)} \quad (17)$$

Sendo:

$S_{\text{NH,INF}}$: concentração de $\text{NH}_3\text{-N}$ na vazão afluente que é nitrificada, em g/m^3 ;

$b_{\text{A,O}_2}$: taxa específica de decaimento endógeno em condições aeróbias das ANO, em g SSV/g SSV.d.

Rearranjando as equações apresentadas, a taxa de nitrificação pode ser expressa pela Equação 18. (METCALF & EDDY, 2016, p. 605).

$$r_{NH} = \mu_{\max,A} \left(\frac{S_{NH}}{S_{NH} + K_{A,NH}} \right) \left(\frac{S_{O_2}}{S_{O_2} + K_{A,O_2}} \right) \left[\frac{Q \theta_c (S_{NH,INF})}{V (1 + b_{A,O_2} \theta_c)} \right] \quad (18)$$

Desta maneira, a Equação 18 relaciona a nitrificação à idade do lodo, ao volume do reator, à concentração de OD e a parâmetros cinéticos tabelados. Analogamente, a equação da produção de lodo calculada através da Equação 14 pode ser reescrita para a nitrificação através da Equação 19 (METCALF & EDDY, 2016, p. 693), que incorpora a produção de biomassa autotrófica à heterotrófica, sendo desprezados os efeitos da idade do lodo sobre a produção da biomassa autotrófica considerando que o metabolismo das heterotróficas é significativamente superior ao das nitrificantes.

$$P_{X,SSV} = \frac{Q Y (S_{INF}-S)}{1 + b \theta_c} + \frac{f b Q Y \theta_c (S_{INF}-S)}{1 + b \theta_c} + \frac{Q Y_A (S_{NH,INF})}{1 + b_{A,O_2} \theta_c} + Q X_{I,INF} \quad (19)$$

Sendo:

Y_A : produção de células nitrificantes em virtude do substrato consumido, em g SSV/g SSV.

2.1.4 Demanda de oxigênio

A demanda de oxigênio num sistema de lodos ativados é necessária, fundamentalmente, para o consumo de matéria orgânica carbonácea, para a nitrificação e para o decaimento endógeno, conforme modelo geral proposto na Equação 20: (LEU *et al.*, 2009)

$$\frac{dOD}{dt} = \frac{1}{t} (OD_{INF}-OD) + OTR-DO_N-DO_C-DO_D \quad (20)$$

Sendo:

dOD/dt : demanda de oxigênio em mg/L.h;

t : tempo de detenção hidráulica, em h;

- OD_{INF}: concentração de oxigênio dissolvido no afluente, em mg/L;
 OD: concentração de oxigênio dissolvido no tanque de aeração, em mg/L;
 OTR: taxa de transferência de oxigênio, em mg/L.h;
 DO_N: demanda de oxigênio para a nitrificação, em mg/L;
 DO_C: demanda de oxigênio para consumo da matéria orgânica carbonácea, em mg/L;
 DO_D: demanda de oxigênio para o decaimento endógeno, em mg/L.

A biomassa expressa em termos de C₅H₇NO₂ possui um oxigênio equivalente de 1,42 g DQO/g de biomassa como SSV. Para conversão de N-NH₄ a N-NO₂ são necessários 3,43 g O₂/g N-NH₄ e para a conversão de N-NO₂ a N-NO₃, 1,14 g O₂/g N-NO₂, totalizando 4,57 g O₂/g N-NH₄ oxidado a N-NO₃ (METCALF & EDDY, 2016, p. 602-606). A demanda de oxigênio, de modo geral, pode ser calculada conforme a Equação 21, considerando um único reator para fluxo contínuo. Para múltiplos reatores, um balanço de massas deve ser realizado considerando a recirculação interna entre reatores, se houver, e suas entradas e saídas. (METCALF & EDDY, 2016, p. 695)

$$R_O = Q (S_{INF} - S) - 1,42 P_{X,bio} + 4,57 Q (S_{NH,INF}) \quad (21)$$

Sendo:

R_O: demanda de oxigênio para as reações bioquímicas, em g/d;

P_{X,bio}: biomassa descartada com g SSV/d (três primeiros termos de P_{X,SSV}, expresso pela Equação 19).

2.1.5 Transferência de oxigênio

A taxa de transferência de oxigênio para o esgoto em um reator aeróbio de lodos ativados possui referência a coeficiente de correção em função da temperatura, fator de correção para sólidos dissolvidos e fator de tamanho de bolhas do equipamento (LEU *et al.*, 2009), fatores a serem considerados conforme as condições particulares da ETE em estudo. A taxa de transferência de ar para o líquido pode ser calculada através da Equação 22: (METCALF & EDDY, 2016, p. 401)

$$r_V = K_L \frac{A}{V} (C_S - C_L) \quad (22)$$

Sendo:

r_V : taxa de transferência de massa de ar transferida por unidade de tempo e de volume, em g/h.m³;

V : volume do tanque, em m³;

K_L : coeficiente de difusão do oxigênio no líquido, em m/h;

A : área interfacial, ou área de contato da superfície ar-líquido, em m²;

C_S : concentração de saturação do OD no líquido à temperatura T , em g/m³;

C_L : concentração de oxigênio dissolvido no líquido, em g/m³.

Considerando a taxa de transferência de ar como a vazão de entrada N dividida pelo volume do reator, considerando o emprego do coeficiente volumétrico de transferência de massa $K_{La} = K_L.A$, tem-se:

$$\frac{N}{V} = K_{La} (C_S - C_L) \quad (23)$$

Sendo:

N : massa de ar transferida por unidade de tempo, em g/h;

K_{La} : coeficiente volumétrico de transferência de massa, em h⁻¹.

O termo K_{La} depende da qualidade da água (esgoto) e do equipamento utilizado na aeração, sendo determinado experimentalmente, devendo ser compatível com a assimilação de oxigênio pelos microrganismos. Sendo assim, a taxa de transferência r_V deve ser compatível com a demanda aeróbia dentro do tanque de aeração. Normalmente, a concentração de oxigênio dissolvido no tanque é mantido entre 1 e 3 mg/L, sendo rapidamente consumido assim que é fornecido (METCALF & EDDY, 2016, p. 401, 408).

O efeito da temperatura no valor de k_{La} deve ser corrigido pela Equação 24. (METCALF & EDDY, 2016, p. 409).

$$K_{La(T)} = K_{La(20^{\circ}\text{C})} \theta^{T-20} \quad (24)$$

Sendo:

θ : coeficiente de temperatura (varia de 1,015 a 1,040, sendo típico 1,024).

A correção referente às características do esgoto e da intensidade da mistura é efetuada pela Equação 25: (METCALF & EDDY, 2016, p. 411)

$$\alpha = K_{La(\text{esg})} / K_{La(\text{água})} \quad (25)$$

Sendo:

α : fator de correção referente às características do esgoto e intensidade da mistura (varia de 0,4 a 0,8 para ar difuso).

A correção da solubilidade do oxigênio em esgoto em relação à água é dado pela Equação 26: (METCALF & EDDY, 2016, p. 411)

$$\beta = C_{S(\text{esg})} / C_{S(\text{água})} \quad (26)$$

Sendo:

β : correção da concentração de saturação (varia de 0,8 a 1).

As equações de transferência de oxigênio por equipamentos (aeradores mecânicos ou de ar difuso) não levam em consideração a eficiência destes, devendo as devidas correções serem introduzidas nos cálculos. Para difusores feitos de tubos de membranas perfuradas, a eficiência padrão de transferência de oxigênio (EPTO) varia da ordem de 19 a 29% para uma submersão de 4,5 m. (METCALF & EDDY, 2016, p. 417). Von Sperling (2016, p. 145) indica a eficiência entre 10 e 30% para difusores de bolhas finas, de 6 a 15% para bolhas médias e de 4 a 8% para bolhas grossas.

2.1.6 Desnitrificação

A desnitrificação, sendo resultado do consumo de matéria orgânica por microrganismos heterotróficos, igualmente pode ser representada pela cinética de Monod, apenas substituindo o consumo de oxigênio por nitrato. Por esta razão, as mesmas equações anteriormente apresentadas, tanto para consumo de substrato, crescimento bacteriano e decaimento endógeno, são válidas a parte do ajuste de parâmetros cinéticos.

A taxa de consumo de nitrato em função da taxa de utilização de substrato é expressa pela Equação 27. (METCALF & EDDY, 2016, p. 617).

$$\frac{r_S}{r_{NO}} = \frac{2,86}{1 - 1,42 Y_H} \quad (27)$$

Sendo:

r_S : taxa de consumo de substrato orgânico, em g DQO/d;

r_{NO} : taxa de utilização de N-NO₃ como acceptor de elétrons, em g N-NO₃/d;

$Y_{H,NOX}$: síntese de bactérias heterotróficas em condições anóxicas, em g SSV/g DQO utilizado.

Com efeito, o consumo de N-NO₃ em virtude da utilização de substrato pode ser expresso por uma equação de forma similar à Equação 16, sendo incluída uma expressão que considera a inibição desnitrificação pela presença de OD no reator: (METCALF & EDDY, 2016, p. 618)

$$r_{NO} = \left(\frac{1 - 1,42 Y_H}{2,86} \right) \left[\frac{\mu_{máx,H} S}{Y_H (K_S + S)} \right] \left(\frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \right) \left(\frac{K'_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \right) \eta_{NOX} X_H \quad (28)$$

Sendo:

$\mu_{máx,H}$: taxa de crescimento específico das bactérias heterotróficas, em g de novas células/g de células existentes.d

S_{NOX} : concentração de N-NO₃, em g/m³ ou mg/L;

K_{NOX} : coeficiente de meia velocidade para consumo de $N-NO_3$, em g/m^3 ou mg/L ;

K'_{O_2} : coeficiente de inibição do consumo de $N-NO_3$ devido à presença da OD, em g/m^3 ou mg/L

η_{NOX} : fração de bactérias desnitrificantes na biomassa, em $g\ SSV/g\ SSV$;

X_H : concentração de bactérias heterotróficas, em $g\ SSV/m^3$ ou $mg\ SSV/L$.

O consumo de matéria orgânica pelos microrganismos heterotróficos está descrito através dos termos $\mu_{máx,H}$, S , Y_H e K_S , adaptados para condições anóxicas e de acordo com o substrato orgânico utilizado. Metcalf & Eddy (2016, p. 825) trazem referências para condições anóxicas com a utilização de metanol como fonte externa de carbono. Para a utilização do próprio esgoto bruto recirculado ou alimentando diretamente uma zona anóxica, os valores definidos na Tabela 1 podem ser utilizados na aplicação da Equação 28.

No presente item foram revistas brevemente algumas das equações básicas utilizadas em dimensionamento de reatores (em termos de volume) e para o controle operacional de estações de tratamento. Também descrevem a demanda de oxigênio para a estabilização da matéria orgânica carbonácea em condições aeróbias e para nitrificação, bem como a produção de lodo.

Em contraponto, o item a seguir versa sobre os modelos de lodos ativados, que possuem os mesmos princípios utilizados nas formulações das equações apresentadas. Portanto, a fundamentação teórica destas fornece os subsídios mínimos para a compreensão dos conceitos empregados nos modelos. Para facilitar a eventual comparação, a notação empregada nas equações buscou referência, na medida do possível, na notação utilizada na concepção original do modelo ASM3.

2.2 Modelos de Lodos Ativados

A construção dos *Activated Sludge Models* (ASM) da IWA remontam ao início dos anos 1980, quando a *International Association on Water Pollution Research* (IAWPR), através do *Task Group* (Grupo de Tarefas), reuniu os modelos mais relevantes até então desenvolvidos de forma independente numa plataforma unificada (IWA, 2019). A primeira constituição do *Task Group* foi formada por Mogens Henze

(Universidade Técnica da Dinamarca), como presidente, junto aos professores Gerrit van Rooyen Marais (Universidade do Cabo), Leslie Grady (Clemson *University*), Willy Gujer (Swiss Federal Institute of Aquatic Science and Technology – EAWAG) e Tomonori Matsuo (Universidade de Tokyo). (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). Em 1986, a IAWPRC mudou seu nome para *International Association on Water Quality* (IAWQ), e sob essa nova denominação foi lançado o primeiro Modelo de Lodos Ativados (“*Activated Sludge Model*”), em 1987 (HENZE *et al.*, 1987; HU; WENTZEL; EKAMA, 2003).

Abreviado como ASM1, tornou-se referência entre muitos pesquisadores e usuários práticos até hoje, estando presente em praticamente todos os *softwares* comerciais na simulação de estações que removem nitrogênio (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). Baseado no modelo cinético de Monod, o ASM1 simula a remoção de DQO e N, o consumo de oxigênio e a produção de lodo em termos de sete componentes dissolvidos e seis particulados presentes no esgoto, dois tipos de biomassa, sete frações de DQO e quatro frações de nitrogênio (HENZE *et al.*, 2000; VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015).

Nos anos seguintes, os trabalhos avançaram através com a incorporação da remoção de fósforo no modelo, o que resultou na publicação do “Modelo de Lodos Ativados n. 2: Remoção Biológica de Fósforo” (“*Activated Sludge Model no. 2: Biological phosphorus removal*”), abreviado como ASM2 (GUJER *et al.*, 1995). Na publicação, os autores declararam estar cientes de que os processos envolvidos na remoção biológica de fósforo (P) ainda não estavam plenamente compreendidas. (GUJER *et al.*, 1995). O modelo considerou a incorporação de fosfato por organismos acumuladores de fosfato (PAO) crescendo em condições exclusivamente anaeróbias, com reações anaeróbias, anóxicas e aeróbias correspondentes (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015).

Em 1999, com a compreensão da desnitrificação na remoção biológica de fosfato, foi lançado o “Modelo de Lodos Ativados n. 2D, ASM2D” (“*Activated Sludge Model no. 2D, ASM2D*”) (HENZE *et al.*, 1999). Sendo uma extensão do ASM2, o modelo ASM2d incorpora dois processos anóxicos adicionais para as PAO as quais usam poli-hidroxialcanoatos (PHA) para crescer e absorver P para armazená-lo como poli-fosfatos. (HU; WENTZEL; EKAMA, 2003). O *Task Group*, que em 1996 incluiu Mark van Loosdrecht (Universidade de Tecnologia de Delft) no grupo de pesquisadores, informa no artigo que o modelo “[...] não é a resposta final para

modelos com remoção biológica de fósforo [...]", mas que é um "[...] compromisso entre a complexidade e a simplicidade, e entre os vários pontos de vista sobre os quais o modelo correto deveria ser [...]" (HENZE *et al.*, 1999, p. 266, tradução nossa).

Ao mesmo tempo em que o modelo ASM2d era apresentado, o *Task Group* desenvolveu o "Modelo de Lodos Ativados n. 3" ("*Activated Sludge Model No. 3*"), com o intuito de corrigir algumas falhas do ASM1, incluindo a incorporação (estoque) de substratos orgânicos por microrganismos como novos processos, como os poli-hidróxi-alcanoatos e glicogênio (GUJER *et al.*, 1999). O ASM3 também substituiu a lise (decaimento) por um processo de respiração endógena, bem como incluiu expressões para simular a limitação de N e alcalinidade de organismos heterotróficos (GUJER *et al.*, 1999; VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). Ao contrário dos modelos ASM2 e ASM2d, o novo modelo não considera a remoção de P, considerando apenas a remoção de carbono e N, consistindo assim num aprimoramento do AMS1 (GUJER *et al.*, 1999; HAUDUC *et al.*, 2013; VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015).

Em setembro de 1999, a IAWQ juntou-se à *International Water Services Association* (IWSA), associação fundada em Amsterdã em 1947, para fundar a *International Water Association – IWA* – e, até a presente data tem papel importante na promoção de pesquisas, eventos, *lobbying* e ativismo na busca de soluções sustentáveis para a água (UIA, 2020). Sob a nova formação, em 2000, o *Task Group* publicou um relatório com a apresentação completa dos quatro modelos onde afirmaram que o ASM3 não é um "modelo geral", e que embora pesquisadores buscassem um "modelo geral último", esse tipo de abordagem possui vida curta em face da evolução das pesquisas quanto a lodos ativados (HENZE *et al.*, 2000).

Embora não se tenha nos dias de hoje um "modelo final", e apesar de todos os esforços de modeladores em criar modelos genéricos definitivos, o modelo mais utilizado ainda é o ASM1 (CLIMENT *et al.*, 2018a; HAUDUC *et al.*, 2013; VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). Para fins práticos e para a maioria das aplicações de engenharia, os modelos são considerados suficientemente desenvolvidos (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). Desde o lançamento do primeiro modelo, várias outros foram concebidos, além das extensões propostas sobre os modelos da IWA, no entanto, os usuários frequentemente acham que os modelos são muito complexos para aplicação prática ou não confiáveis (HAUDUC *et al.*, 2009, 2013). Quanto maior a complexidade do modelo, maior a quantidade de parâmetros que devem ser

calibrados ou medidos, sendo que muitos, sendo essa a maior dificuldade encontrada por usuários práticos (HAUDUC *et al.*, 2013).

Dentre os trabalhos mais relevantes desenvolvidos por outras iniciativas merece destaque o “Módulo Bio-P da EAWAG para Modelo de Lodos Ativado N. 3” (“*The EAWAG Bio-P Module for Activated Sludge Model no. 3*”), de 2001, que consiste num módulo adicional para contemplar a remoção biológica de P sobre a base da versão calibrada do ASM3, contemplando componentes do ASM2d com simplificações de ordem prática (RIEGER *et al.*, 2001).

Outro modelo relevante é o desenvolvido pela Universidade Técnica de Delft, Holanda (TUD), denominado ASM2d + TUD, que combina o modelo metabólico de remoção biológica de P com as reações heterotróficas e autotróficas do modelo ASM2d (MEIJER, 2004). Também denominado “Modelo Delft”, trata-se de um modelo cinético e metabólico híbrido com relevância quanto ao crescimento anóxico de PAO associada à desnitrificação (HU; WENTZEL; EKAMA, 2003).

O modelo Barker & Dold (1997), frequentemente citado em referências, é baseado no ASM1 quanto aos organismos heterotróficos e nitrificantes e inclui modelo cinético para PAO, com várias modificações, dentre as quais a captação anóxica de P e desnitrificação pelas PAO e o perda de DQO (HU; WENTZEL; EKAMA, 2003). O modelo, também denominado de BIOWIN no programa de computador homônimo (MULLER *et al.*, 2003), inclui processo de fermentação para a conversão de DQO_{RB} para ácidos graxos de cadeia curta e hidrólise de DQO lentamente biodegradável em condições anóxicas e anaeróbias, bem como o crescimento anóxico de PAO (BARKER; DOLD, 1997).

Ainda merece menção o modelo UCTOLD, desenvolvido no início dos anos 1980 em pesquisa da Universidade do Cabo (UCT), que reuniu o modelo cinético proposto por Dold *et al.* (1980) para sistemas aeróbios com a desnitrificação estudada por Van Haandel, Ekama e Marais (1981). Neste modelo o TG baseou os modelos cinéticos para remoção de matéria orgânica carbonácea e nitrogenada para elaborar o modelo ASM1. Ambos os modelos são semelhantes em termos das reações aeróbias e anóxicas baseadas na cinética de Monod, porém com diferenças quanto à utilização da DQO_{LB} (HU; WENTZEL; EKAMA, 2003).

O modelo UCTPHO – abreviação de *UTC* e *phosphate* –, por sua vez, é o resultado da extensão do modelo UCTOLD e do ASM1 para incluir a remoção biológica de P, proposto por Wentzel *et al.* (1992). Este modelo inclui interações entre

organismos heterotróficos, autotróficos nitrificantes e PAO na fermentação de ácidos em condições anaeróbias da DQO_{RB} fermentável em ácidos graxos de cadeia curta mediados por organismos heterotróficos, que serão absorvidos pelos PAO e armazenados como PHA. Nessas condições, os PAO liberam P, para depois absorvê-lo em condições aeróbicas para a formação de poli-P (HU; WENTZEL; EKAMA, 2003). Por fim, o modelo UCTPHO+ é uma atualização do modelo UCTPHO proposto por Hu, Wentzel e Ekama (2007) incluindo a absorção de P anóxica e desnitrificação associada.

A Tabela 2 expressa as diferenças entre sete principais modelos mencionados – ASM1, BIOWIN, ASM2d, ASM3, ASM3+BioP, UCTPHO+ e ASM2d + TUD – quanto ao número de processos, variáveis de estado e parâmetros. Observa-se que os modelos que incorporam a remoção biológica de P abrangem cerca de 150 processos versus variáveis, enquanto os modelos restritos a matéria orgânica e N, quais sejam, o ASM1 e o ASM3, apresentam 31 e 72 respectivamente. A quantidade de parâmetros estequiométricos e cinéticos para os modelos envolvendo P também são numericamente mais expressivos, requerendo maior esforço em termos de calibração, representando um importante obstáculo quanto à sua aplicabilidade prática por usuários (HAUDUC *et al.*, 2011).

Na referida tabela não foram considerados os modelos ASM2, UCTOLD e UCTPHO pois foram incorporados em modelos mais atuais com correções (ASM2d e UCTPHO+). O modelo ASM3 não incorpora ASM1, mas sim, traz outra abordagem ao ASM1 com a absorção de compostos por microrganismos; ademais, o ASM1, sendo ainda o modelo mais utilizado na prática, torna-se ainda mais relevante em termos de comparação com os demais, sendo ainda o modelo de referência (SÁNCHEZ RAMÍREZ; MEJÍA FAJARDO; AMOROCHO CRUZ, 2015; VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015).

Observa-se que os modelos ASM 1 e 3 possuem a menor quantidade total de parâmetros da lista, comparativamente com os demais modelos que envolvem a remoção biológica de fósforo. O modelo ASM3 possui oito parâmetros de composição de matriz enquanto o ASM1 possui somente dois, o que confere a este uma vantagem em termos de simplicidade. Um dos motivos iniciais que levaram à escolha do ASM3 para aplicação no presente trabalho, embora envolva maior quantidade de processos em relação ao ASM1, é o fato de ter sido aplicado em menor quantidade de estudos (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015, p. 706).

Tabela 2 – Quantidade de processos, variáveis de estado e parâmetros dos principais modelos de lodos ativados

Modelo	ASM1	Baker & Dold	ASM2d	ASM3	ASM3 + BioP	UCT PHO+	ASM2d + TUD		
Substratos	CN	CNP	CNP	CN	CNP	CNP	CNP		
Processos	8	36	21	12	23	35	22		
Variáveis de estado	13	19	19	13	17	16	18		
Processos versus variáveis	31	153	136	72	148	169	154		
Composição da matriz	2	16	13	8	15	12	16		
Ajustamento de temperatura	7	18	12	10	13	10	15		
Quantidade de parâmetros	Parâmetros estequiométricos	Hidrólise	-	2	1	1	-	1	
		OHO	1	5	1	4	4	3	2
		ANO	1	2	1	1	1	2	2
		PAO	-	8	3	-	5	7	12
		Biomassa geral	1	0	1	1	1	-	-
	Parâmetros cinéticos	Hidrólise	3	4	6	2	2	-	6
		OHO	6	9	12	13	13	13	12
		ANO	5	5	6	6	7	4	6
		PAO	-	11	18	-	21	14	26
		Biomassa geral	-	1	-	-	-	1	-
Totais	26	81	74	46	83	66	98		

OHO: organismos heterotróficos comuns (*ordinary heterotrophic organisms*)

ANO: organismos autotróficos nitrificantes (*autotrophic nitrifying organisms*)

PAO: organismos acumuladores de fosfato (*phosphate accumulating organisms*)

Fonte: Adaptado de Hauduc *et al.* (2013, p. 25).

Os itens a seguir versam especificamente sobre os modelos ASM 1 e 3 e as diferenças entre eles, com o intuito de evidenciar a evolução do segundo em relação ao primeiro na modelagem de processos bioquímicos durante o tratamento de esgotos.

2.2.1 Modelo de Lodos Ativados N. 1 – ASM1

Um modelo é uma representação simplificada da realidade, que pode ser um objeto, um caso ou um processo. Um modelo numérico é uma tentativa de representar uma situação real utilizando equações matemáticas. (RIEGER *et al.*, 2013). Um modelo matematicamente viável deverá considerar os processos fundamentais mais importantes e representativos do sistema, devendo quantificar aspectos cinéticos

(dependência taxa-concentração) e estequiométricos (relações que um componente tem com outro em uma reação) de cada processo. (HENZE *et al.*, 2000, p. 6).

O modelo mais simples possível para descrever a estabilização de matéria orgânica carbonácea em lodos ativados consideraria as concentrações de biomassa, substrato e oxigênio dissolvido, considerando dois processos fundamentais – o aumento de biomassa através do crescimento celular e a diminuição com a respiração endógena – através da matriz apresentada no Quadro 1: (HENZE *et al.*, 2000)

Quadro 1 – Processos cinéticos e estequiométricos para o crescimento heterotrófico em um ambiente aeróbio

		Continuidade →			
Balço de massa ↓	Componente → <i>i</i>	1	2	3	Taxa do Processo, ρ_i
	<i>j</i> Processo ↓	X_B	S_S	S_O	$[ML^{-3}T^{-1}]$
	1 Crescimento	1	$-\frac{1}{Y}$	$-\frac{1-Y}{Y}$	$\frac{\hat{\mu} S_S}{K_S + S_S} X_B$
	2 Decréscimo	-1		-1	bX_B
Taxas de conversão observadas $ML^{-3}T^{-1}$	$r_i = \sum_j r_{ij} = \sum_j v_{ij} \rho_j$			Parâmetros cinéticos:	
Parâmetros estequiométricos:				Taxa máxima de crescimento específico: $\hat{\mu}$	
Produção real de novas células: Y	Biomassa $[M(DQO) L^{-3}]$	Substrato $[M(DQO) L^{-3}]$	Oxigênio (DQO negativa) $[M(-DQO) L^{-3}]$	Constante de meia-velocidade: K_S	
				Taxa de decaimento específico: b	

Fonte: Henze *et al.* (2000, p. 7, tradução nossa).

A matriz apresentada para o sistema simples apresenta dois processos através das linhas “j”, sendo 1 – “Crescimento” e 2 – “Decréscimo” de três componentes expressos através das colunas “i”, sendo 1 – X_B , 2 – S_S e 3 – S_O (respectivamente, concentração de microrganismos, concentração de substrato e concentração de OD, conforme previamente explicitados). Uma linha “j” e uma coluna “i” correspondem a um coeficiente estequiométrico v_{ij} , por exemplo, para o crescimento do substrato S_S será o coeficiente $v_{21} = -\frac{1}{Y}$.

A taxa de crescimento ou decréscimo de um componente “i” será calculada através do somatório das taxas obtidas para cada linha “j”, ou seja:

$$r_i = \sum_j r_{ij} = \sum_j v_{ij} \rho_j \quad (29)$$

Por exemplo, o crescimento líquido de microrganismos heterotróficos será calculado com o coeficiente estequiométrico $v_{11}\rho_1 + v_{12}\rho_2$, resultando na taxa dada pela Equação 30, que é fundamentalmente a mesma Equação 2 já apresentada, acrescida do decaimento endógeno $-b X_B$:

$$r_1 = \frac{\hat{\mu} S_S}{K_S + S_S} X_B - b X_B \quad (30)$$

O consumo do substrato (crescimento negativo) é obtido com o coeficiente estequiométrico $v_{21}\rho_1 + v_{22}\rho_2$, resultando na Equação 31, que é a mesma Equação 4 apresentada anteriormente:

$$r_2 = -\frac{1}{Y} \frac{\hat{\mu} S_S}{K_S + S_S} X_B \quad (31)$$

O consumo de oxigênio dissolvido, de modo análogo, é obtido com o coeficiente estequiométrico $v_{31}\rho_1 + v_{32}\rho_2$, através da equação 32:

$$r_3 = -\frac{1-Y}{Y} \frac{\hat{\mu} S_S}{K_S + S_S} X_B - b X_B \quad (32)$$

O modelo simples, que levou em conta três componentes, possui um parâmetro estequiométrico Y (constante na célula inferior esquerda) e três parâmetros cinéticos, $\hat{\mu}$, K_S e b (previamente definidos e constantes na célula inferior direita), portanto quatro

parâmetros. O balanço de massas deve ser procedido quando da utilização do modelo, considerando a Equação 33. (HENZE *et al.*, 2000, p. 7).

$$\text{Entrada} - \text{Saída} + \text{Reação} = \text{Acumulação} \quad (33)$$

“Entrada” e “Saída” são termos de transporte que dependem das características físicas do sistema, enquanto que “Reação” refere-se às taxas obtidas através da utilização da matriz (HENZE *et al.*, 2000, p. 7). O teste de continuidade deve ser realizado através da soma dos coeficientes estequiométricos ao longo da matriz, devendo resultar em zero. No processo de crescimento bacteriano, a DQO do substrato diminui enquanto a das células aumenta, sendo a diferença igual ao oxigênio consumido no processo “c”.

O ASM1 é expresso em termos organizados no mesmo tipo de matriz como a do exemplo anterior. Como componentes da matriz do ASM1, os autores subdividiram a matéria orgânica em categorias, iniciando pela distinção entre matéria orgânica solúvel e particulada. A matéria orgânica solúvel não biodegradável, S_I , é considerada inerte e sai do sistema na mesma concentração na qual entrou. A matéria orgânica suspensa inerte, X_I , é removida do sistema através do descarte de lodo. A matéria orgânica solúvel rapidamente biodegradável, S_S , é composta por simples moléculas e é diretamente consumida pelos microrganismos heterotróficos para o seu crescimento. A matéria orgânica lentamente biodegradável, X_S , é considerada particulada, formada por moléculas complexas, e que devem ser convertidas em material solúvel através de hidrólise. (HENZE *et al.*, 2000, p. 9).

A hidrólise ocorre sem acceptor de elétrons associada a ela, porém a taxa específica de hidrólise ocorre em velocidade maior em meio aeróbio do que em meio anóxico. O crescimento da biomassa heterotrófica é limitado pela ausência de OD, portanto cessa em meio anaeróbio. O decaimento da biomassa resulta na conversão em matéria orgânica suspensa, X_S , e particulada, X_P , esta considerada inerte por não sofrer biodegradação dentro sistema. A perda da biomassa ocorre em taxa independente do acceptor de elétrons do meio, porém a conversão do X_S resultante em S_S é influenciada pelo tipo de acceptor envolvido. (HENZE *et al.*, 2000, p. 9).

De modo análogo, o nitrogênio (N) pode ser considerado não biodegradável, estando associado à concentração de X_I , e biodegradável na forma de amônia (ou íon

amônio), S_{NH} , solúvel orgânico, S_{ND} , e particulado X_{ND} . O N em forma de amônia (S_{NH}) serve de fonte de energia para o crescimento das bactérias autotróficas nitrificantes e como fonte para a síntese da biomassa heterotrófica. O N solúvel orgânico (S_{ND}) é convertido em S_{NH} pelas heterotróficas, enquanto o N particulado orgânico (X_{ND}) é hidrolisado em S_{ND} paralelamente à hidrólise de X_S . O decaimento da biomassa resulta na produção de X_{ND} , que é reincorporado no ciclo. A conversão de amônia em nitrato, S_{NO} , é considerada no ASM1 uma etapa que requer oxigênio. A formação de nitrito como etapa intermediária à formação de nitrato é ignorada para efeitos do modelo ASM1. (HENZE *et al.*, 2000, p. 9-10).

A incorporação da alcalinidade no modelo, S_{ALK} , em termos de $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$, permite a avaliação do sistema quanto ao equilíbrio da alcalinidade, com o objetivo de se manter o pH em faixa adequada para as reações. A nitrificação e a desnitrificação são reações que causam a diminuição e o aumento da alcalinidade, respectivamente. A nitrificação ocorre com a liberação de 8 elétrons e 10 prótons e posterior tomada de 8 elétrons e 8 prótons pelo oxigênio, sobrando 2 prótons e, portanto, com a redução da alcalinidade. A desnitrificação, com o NO_3^- comoceptor de elétrons, resulta na incorporação de 1 próton no balanço final, aumentando a alcalinidade. Num sistema equilibrado, a redução de alcalinidade ocasionada por uma reação será compensada pelo aumento ocasionada pela outra, porém se a alcalinidade alcançar valores inferiores a 50 g/m^3 de CaCO_3 , o pH pode se tornar inferior a 6 de modo irreversível caso não haja a adição de produtos químicos. (HENZE *et al.*, 2000, p. 12).

Os processos contemplados no modelo ASM1 referem-se fundamentalmente ao crescimento e decaimento da biomassa (heterotrófica e autotrófica), amonificação do nitrogênio orgânico solúvel e a hidrólise da matéria orgânica absorvida nos flocos de lodo ativado, totalizando oito processos conforme as linhas “j” da matriz de Gujer, conforme constam no Quadro 2 (HENZE *et al.*, 2000, p. 12). Nas colunas “i” tem-se, portanto, 13 variáveis as quais, exceto a matéria orgânica particulada X_P , todas constam no efluente. Conforme se observa na matriz, o modelo possui 31 processos versus variáveis e 19 parâmetros (cinco estequiométricos e 14 cinéticos) que devem ser estimados conforme recomendações originalmente publicadas no artigo de Henze *et al.* (1987) quando da apresentação do ASM1, as quais serão brevemente expostas no item a seguir, e que foram incorporadas na metodologia mais recente publicada pela IWA (RIEGER *et al.*, 2013) para utilização dos modelos de lodos ativados.

Quadro 2 – Processos cinéticos e estequiométricos do modelo ASM1 (Matriz de Gujer)

Componentes → <i>i</i>		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Taxa do Processo, ρ_i (ML ⁻³ T ⁻¹)
<i>j</i>	Processos ↓	S_I	S_S	X_I	X_S	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}	
1	Crescimento aeróbico das heterotróficas		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{-i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$
2	Crescimento anóxico das heterotróficas		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2,86 Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14 \times 2,86 Y_H}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \times \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_g X_{B,H}$
3	Crescimento aeróbico das autotróficas						1		$-\frac{4,57 - Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-\frac{i_{XB}}{Y_A}$			$\frac{-i_{XB}}{14} - \frac{1}{7Y_A}$	$\hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$
4	Decaimento das heterotróficas				$1 - f_P$	-1		f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_H X_{B,H}$
5	Decaimento das autotróficas				$1 - f_P$		-1	f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_A X_{B,A}$
6	Amonificação do nitrogênio orgânico solúvel										1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$
7	Hidrólise da matéria orgânica absorvida		1		-1										$k_h \frac{\frac{X_S}{X_{B,H}}}{K_X + \left(\frac{X_S}{X_{B,H}} \right)} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H}$
8	Hidrólise do nitrogênio orgânico absorvido											1	-1		$\rho_7 \left(\frac{X_{ND}}{X_S} \right)$
Taxas de conversão observadas (ML ⁻³ T ⁻¹)		$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$													
Parâmetros estequiométricos:															Parâmetros cinéticos:
Produção heterotrófica: Y_H															Crescimento e decaimento heterotrófico:
Produção autotrófica: Y_A															$\hat{\mu}_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO}, b_H$
Fração de produtos particulados da biomassa: f_P															Crescimento e decaimento autotrófico:
Massa de N/Massa de DQO na biomassa: i_{XB}															$\hat{\mu}_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A$
Massa de N/Massa de DQO em produtos provenientes da biomassa: i_{XP}															Fator de correção para crescimento anóxico heterotrófico:
															η_g
															Amonificação: k_a
															Hidrólise: k_h, K_X
															Fator de correção para hidrólise anóxica: η_h

Fonte: Henze *et al.* (2000, p. 11, tradução nossa).

2.2.2 Modelo de Lodos Ativados N. 3 – ASM3

O modelo de lodos ativados n. 3, ASM3 (GUJER *et al.*, 1999), foi lançado após cerca de dez anos do lançamento do ASM1 e, no período, o *Task Group* identificou alguns defeitos no modelo anterior, tais como: a ausência de expressões cinéticas para limitações de N e alcalinidade para organismos heterotróficos, dificuldade em caracterizar as formas nitrogenadas orgânicas em solúvel e particulada, dificuldade para quantificar parâmetros cinéticos da amonificação, dificuldade em diferenciar matéria orgânica particulada inerte quanto à sua origem (se proveniente do afluente ou do decaimento da biomassa), dificuldade na identificação de parâmetros cinéticos para a hidrólise e seus efeitos no consumo de oxigênio e na desnitrificação, ausência da predição da concentração de SS no licor misto, entre outros. (GUJER *et al.*, 1999, p. 183-184; HENZE *et al.*, 2000, p. 103).

Embora o ASM3 tenha surgido como um modelo que corrige os defeitos identificados no ASM1 (GUJER *et al.*, 1999), a maior importância foi a introdução de três taxas de consumo de oxigênio no processo: a de degradação da DQO rapidamente biodegradável, sendo uma taxa rápida, a de degradação da DQO lentamente biodegradável, em taxa lenta, e a de respiração endógena, ainda mais lenta (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015, p. 700). Tendo o ASM1 apenas uma taxa, esse fato traz consigo uma dificuldade maior de calibração (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015, p. 700).

Ainda quanto ao ASM1, o modelo se baseia no processo cíclico da DQO, em que decaimento bacteriano produz DQO particulada a ser hidrolisada e reintegrada ao processo para, então, estar novamente disponível para o crescimento microbiano. Esse fato traz uma dificuldade adicional quanto à calibração do modelo, uma vez que cada parâmetro traz influência em todo o processo. No ASM3, essa dificuldade é superada com a introdução da respiração endógena, eliminando o ciclo da DQO. (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015, p. 701).

Conceitualmente, o modelo ASM3 substitui a ênfase em hidrólise, que havia no ASM1, pelo armazenamento de substratos orgânicos pelos microrganismos. Consequentemente, a DQO rapidamente biodegradável SS deve ser agora estimada em termos de armazenamento pelos microrganismos ao invés de ser em termos do seu crescimento (HENZE *et al.*, 2000, p. 105). Os componentes solúveis são definidos

como: S_{O_2} , como oxigênio dissolvido, que pode ser medido diretamente; S_I , como matéria orgânica solúvel inerte, a ser estimada a partir da DQO residual do efluente de uma planta com baixa carga orgânica; S_S , como DQO solúvel rapidamente biodegradável, que será absorvida primeiro pelos organismos heterotróficos na forma de X_{STO} , devendo ser determinada com auxílio de respirometria; S_{NH_4} , como nitrogênio amoniacal, observando que compostos orgânicos possuem uma fração fixa de nitrogênio orgânico e que portanto a concentração de nitrogênio amoniacal do afluente ($S_{NH_4,0}$) não pode ser observada diretamente, e sim calculada a partir do NTK; S_{N_2} , como nitrogênio gasoso liberado na desnitrificação; S_{NOX} , como nitrato e nitrito, assumindo-se a presença de somente nitrato nos cálculos estequiométricos; e S_{ALK} , como alcalinidade de modo a aproximar a conservação da carga iônica nas reações biológicas. (HENZE *et al.*, 2000, p. 106-107).

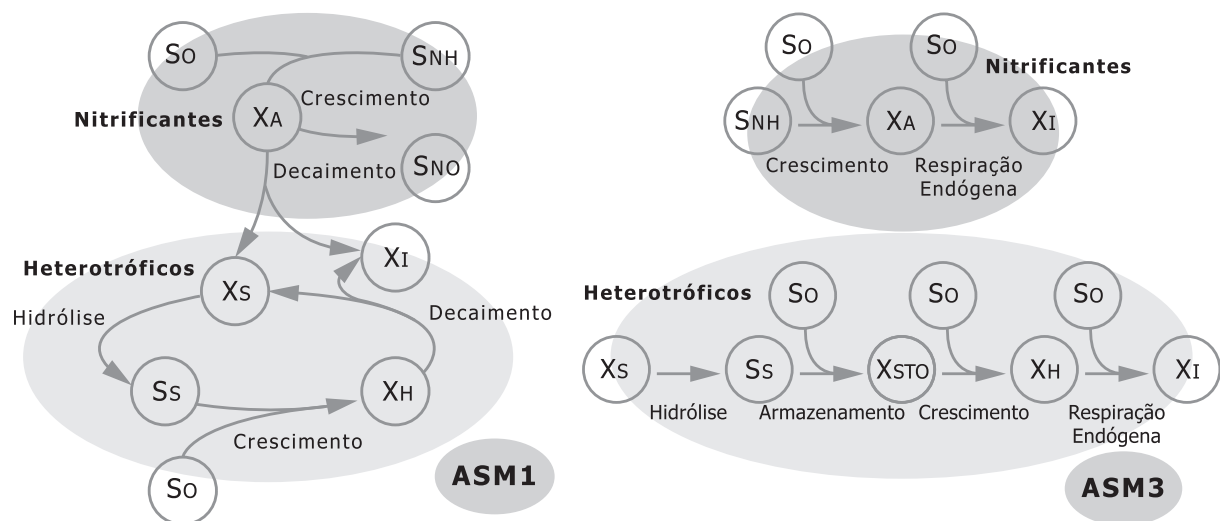
Os componentes particulados são definidos como: X_S , como DQO lentamente biodegradável, compostos por substrato de alto peso molecular, bem como substratos orgânicos particulados, coloidais e solúveis que necessitam sofrer hidrólise extra celular antes de estarem disponíveis para degradação – no ASM3, toda a parcela de X_S provém do afluente –; X_H , como organismos heterotróficos que podem crescer em meio aeróbio e anóxico, responsáveis pela hidrólise de X_S e responsáveis pela degradação de S_S , podendo armazenar produtos na forma de PHA ou glicogênio, podendo realizar hidrólise em meio anaeróbio (contemplado no ASM3); X_{STO} , como armazenamento de DQO no interior das células dos organismos heterotróficos, incluindo PHA e glicogênio, não podendo ser medida quimicamente, sendo um componente funcional para a modelagem na forma de polihidroxibutirato ($C_4H_6O_2$)_n; X_A , como organismos nitrificantes, considerados como oxidantes de S_{NH_4} produzindo diretamente S_{NOX} ; X_{SS} , como sólidos suspensos, sendo introduzidos no modelo para possibilitar seu cálculo por estequiometria, considerando ser este um parâmetro de medição diária na operação. (HENZE *et al.*, 2000, p. 107).

Os processos definidos no ASM3 são: hidrólise, que torna todo o substrato lentamente biodegradável disponível, embora com menor importância em relação ao AMS1 quanto às taxas de oxigênio demandadas e para desnitrificação; armazenamento aeróbio de DQO rapidamente biodegradável, no qual as células armazenam S_S em forma de X_{STO} , requerendo energia na forma de ATP através da respiração; armazenamento anóxico de DQO rapidamente biodegradável, com processo similar ao anterior durante a desnitrificação, sem distinção no modelo quanto

ao tipo de microrganismos heterotróficos envolvidos; crescimento aeróbico dos microrganismos heterotróficos, sendo realizado a partir do substrato armazenado X_{STO} ; crescimento anóxico dos microrganismos heterotróficos, de modo similar ao processo anterior; respiração endógena aeróbia, que descreve a perda da biomassa com consumo de oxigênio dissolvido, englobando decaimento, lise, predação, morte das células, etc.; respiração endógena anóxica, em processo similar ao anterior, tipicamente mais lenta; respiração aeróbia dos componentes armazenados, em processo análogo à respiração endógena porém com o decaimento dos produtos juntamente com a biomassa; respiração anóxica dos componentes armazenados, em processo similar ao anterior durante a desnitrificação. (GUJER *et al.*, 1999, p. 186-187).

O armazenamento de compostos pelos organismos ocorre em duas vias paralelas e separadas, uma realizada pelos heterotróficos e outra pelos nitrificantes, sem que haja fluxo de DQO de uma via para a outra. Comparativamente com o ASM1, neste há um ciclo fechado, com apenas uma entrada de oxigênio dissolvido (expresso por S_o), conforme ilustrado na Figura 2. No ASM3, há várias entradas de oxigênio dissolvido, com taxas de utilização distintas, dependendo do substrato utilizado: a taxa para armazenamento em X_{STO} é maior do que para crescimento bacteriano, que por sua vez é maior do que para a respiração endógena. (GUJER *et al.*, 1999, p. 186-187).

Figura 2 – Comparação do fluxo da DQO nos modelos ASM1 e ASM3: ciclo fechado no primeiro modelo, e fluxos paralelos no segundo



Fonte: Elaborado pelo autor, baseado em Henze *et al.* (2000, p. 105).

Outra modificação importante no modelo é a introdução da Demanda Teórica de Oxigênio (ThOD), sendo uma aproximação analítica da DQO para efeitos de cálculos estequiométricos, realizados a partir do potencial redox de compostos inorgânicos, como CO_2 , NH_4^+ e SO_4^{2-} . Trata-se de uma forma conservativa de DQO, sendo, na maioria dos casos, a ThOD analiticamente similar aos resultados obtidos com as análises padrão de dicromato [de potássio] para compostos orgânicos. (HENZE *et al.*, 2000, p. 106, 109). Na Tabela 3 constam valores de ThOD para alguns elementos fundamentais. Cada elétron reativo é equivalente a uma ThOD de 8 g/mol e cada elemento pode ser associado a uma ThOD relativa ao referencial redox de H_2O , CO_2 , NH_4^+ , SO_4^{2-} e PO_4^{3-} .

Tabela 3 – Demanda teórica de oxigênio (ThOD) para alguns elementos fundamentais

Elemento	Símbolo	ThOD equivalente
Carbono	C	+32 g ThOD (mol C) ⁻¹
Nitrogênio	N	-24 g ThOD (mol N) ⁻¹
Hidrogênio	H	+8 g ThOD (mol h) ⁻¹
Oxigênio	O	-16 g ThOD (mol O) ⁻¹
Enxofre	S	+48 g ThOD (mol S) ⁻¹
Fósforo	P	+40 g ThOD (mol P) ⁻¹
Carga negativa	-	+8 g ThOD (mol (-)) ⁻¹
Carga positiva	+	-8 g ThOD (mol (+)) ⁻¹

Fonte: Henze *et al.* (2000, p. 107, tradução nossa).

O coeficiente de composição para o N_2 gerado na desnitrificação será de [-24 g ThOD/mol N x 2 átomos N/ N_2 / 28,0134 g N/mol =] -1,71 g ThOD/g N_2 . Para o NO_3^- -N será de -4,57 g ThOD/g NO_3^- -N e para o O_2 será de -1 g ThOD/g O_2 . (HENZE *et al.*, 2000, p. 109). Esses valores estão expressos na matriz de composição na linha k=1 (ThOD) para as colunas i=1, 5, e 6, respectivamente, conforme apresentado no Quadro 5.

O modelo ASM1 é expresso na forma da matriz estequiométrica $v_{j,i}$, ou Matriz de Gujer. O ASM3, além desta matriz, é expresso na forma de uma matriz de composição $l_{k,i}$, referente aos conservativos ThOD, nitrogênio e carga iônica. Como exemplo, o valor $l_{2,3}$ está preenchido na matriz de composição com o valor $i_{N,S,S}$, que se refere à composição do substrato orgânico rapidamente biodegradável

(SS) em termos de nitrogênio, sendo esta uma caracterização do esgoto afluente a ser realizada. (HENZE *et al.*, 2000, p. 109). A publicação de Gujer *et al.* (1999) traz valores referenciais para parâmetros de composição, como $i_{N,SS}$, porém com a ressalva de se tratarem de exemplos que não fazem parte do ASM3. (GUJER *et al.*, 1999, p. 190).

Os valores expressos na matriz estequiométrica $v_{j,i}$ como x_j , y_j e z_j são obtidos através da Equação 34, denominada equação de conservação para os três conservativos k ThOD, nitrogênio e carga iônica: (GUJER *et al.*, 1999, p. 187)

$$\sum_i v_{j,i} \cdot l_{k,i} = 0 \quad \text{para } i=1 \text{ a } 12 \quad (34)$$

Os coeficientes estequiométricos para os SS (X_{SS}) observáveis são obtidos a partir da Equação 35: (GUJER *et al.*, 1999, p. 187)

$$v_{j,13} = \sum_i v_{j,i} \cdot l_{4,i} \quad \text{para } i=8 \text{ a } 12 \quad (35)$$

Considerando que a respiração anóxica produz uma energia ATP menor do que a respiração aeróbia, e assumindo a produção de energia pela via anóxica $\eta_{\text{anoxic}}=0,7$ da energia produzida pela respiração aeróbia, as relações expressas pela Equação 36 são aplicadas no ASM3: (HENZE *et al.*, 2000, p. 109)

$$\frac{1-Y_{\text{STO},O_2}}{Y_{\text{STO},O_2}} = \frac{\eta_{\text{anoxic}}(1-Y_{\text{STO},\text{NOX}})}{Y_{\text{STO},\text{NOX}}} \quad \text{e} \quad \frac{1-Y_{\text{H},O_2}}{Y_{\text{H},O_2}} = \frac{\eta_{\text{anoxic}}(1-Y_{\text{H},\text{NOX}})}{Y_{\text{H},\text{NOX}}} \quad (36)$$

Sendo:

Y_{STO,O_2} : coeficiente de crescimento de produtos armazenados a partir do S_s em meio aeróbio, em g $\text{DQO}_{X_STO}/\text{g } \text{DQO}_{S_S}$;

$Y_{\text{STO},\text{NOX}}$: coeficiente de crescimento de produtos armazenados a partir do S_s em meio anóxico, em g $\text{DQO}_{X_STO}/\text{g } \text{DQO}_{S_S}$;

Y_{H,O_2} : coeficiente de produção de novas células (biomassa heterotrófica) em meio aeróbio, em g DQO_{X_H}/g DQO_{X_STO};

$Y_{H,NOX}$: coeficiente de produção de novas células (biomassa heterotrófica) em meio anóxico, em g DQO_{X_H}/g DQO_{X_STO}.

Assim, a produção líquida de biomassa heterotrófica X_H produzida por unidade de substrato solúvel rapidamente degradável S_S removida (Y_{net,O_2} em meio aeróbio e $Y_{net,NOX}$ em meio anóxico) no ASM3 é obtida através da Equação 37: (HENZE *et al.*, 2000, p. 109)

$$Y_{net,O_2} = Y_{STO,O_2} \cdot Y_{H,O_2} \text{ e } Y_{net,NOX} = Y_{STO,NOX} \cdot Y_{H,NOX} \quad (37)$$

No Quadro 4 é apresentada a matriz estequiométrica $v_{j,i}$ e a matriz de composição $\iota_{k,i}$ do ASM3. No Quadro 5 são apresentadas as expressões cinéticas ρ_j para os 12 processos do modelo ASM3.

Quadro 3 – Matriz estequiométrica e de composição do ASM3

j ↓	Processos Expressos como →	Componentes i →												
		1 S_{O_2} O ₂	2 S_I DQO	3 S_S DQO	4 S_{NH_4} N	5 S_{N_2} N	6 S_{NOX} N	7 S_{ALK} Moles	8 X_I DQO	9 X_S DQO	10 X_H DQO	11 X_{STO} DQO	12 X_A DQO	13 X_{SS} SS
1	Hidrólise		f_{S_I}	x_1	y_1			z_1		-1				$-i_{X_S}$
Organismos heterotróficos, desnitrificação														
2	Armazenamento aeróbico de S_S	x_2		-1	y_2			z_2				Y_{STO,O_2}		t_2
3	Armazenamento anóxico de S_S			-1	y_3	$-x_3$	$-x_3$	z_3				$Y_{STO,NOX}$		t_3
4	Crescimento aeróbio de X_H	x_4			y_4			z_4		1	$-\frac{1}{Y_{H,O_2}}$			t_4
5	Crescimento anóxico (desnitrificação)				y_5	$-x_5$	$-x_5$	z_5		1	$-\frac{1}{Y_{H,NOX}}$			t_5
6	Respiração endógena aeróbia	x_6			y_6			z_6	f_I		-1			t_6
7	Respiração endógena anóxica				y_7	$-x_7$	$-x_7$	z_7	f_I		-1			t_7
8	Respiração aeróbia de X_{STO}	x_8			y_8			z_8				-1		t_8
9	Respiração anóxica de X_{STO}				y_9	$-x_9$	$-x_9$	z_9				-1		t_9
Organismos autotróficos, nitrificação														
10	Crescimento aeróbio de X_A	x_{10}			y_{10}		$\frac{1}{Y_A}$	z_{10}					1	t_{10}
11	Respiração endógena aeróbia	x_{11}			y_{11}			z_{11}	f_I				-1	t_{11}
12	Respiração endógena anóxica				y_{12}	$-x_{12}$	$-x_{12}$	z_{12}	f_I				-1	t_{12}
Matriz de composição $l_{k,i}$														
k	Conservativos													
1	ThOD (g ThOD)	-1	1	1		-1,71	-4,57		1	1	1	1	1	
2	Nitrogênio (g N)		i_{N,S_I}	i_{N,S_S}	1	1	1		i_{N,X_I}	i_{N,X_S}	$i_{N,BM}$		$i_{N,BM}$	
3	Carga iônica (moles +)				$\frac{1}{14}$		$-\frac{1}{14}$	-1						
Observáveis														
4	SS (g SS)								i_{SS,X_I}	i_{SS,X_S}	$i_{SS,BM}$	0,60	$i_{SS,BM}$	

Fonte: Henze *et al.* (2000, p. 110, tradução nossa).

Quadro 4 – Equações para taxas cinéticas dos processos do ASM3

j Processos	Equações para taxas dos processos ρ_j
1 Hidrólise	$k_H \cdot \frac{\frac{X_S}{X_H}}{K_X + \frac{X_S}{X_H}} \cdot X_H$
Organismos heterotróficos, desnitrificação	
2 Armazenamento aeróbico de S_S	$k_{STO} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \cdot X_H$
3 Armazenamento anóxico de S_S	$k_{STO} \cdot \eta_{NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \cdot X_H$
4 Crescimento aeróbio de X_H	$\mu_H \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{K_{ALK} + S_{ALK}} \cdot \frac{\frac{X_{STO}}{X_H}}{K_{STO} + \frac{X_{STO}}{X_H}} \cdot X_H$
5 Crescimento anóxico (desnitrificação)	$\mu_H \cdot \eta_{NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{K_{ALK} + S_{ALK}} \cdot \frac{\frac{X_{STO}}{X_H}}{K_{STO} + \frac{X_{STO}}{X_H}} \cdot X_H$
6 Respiração endógena aeróbia	$b_{H,O_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot X_H$
7 Respiração endógena anóxica	$b_{H,NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot X_H$
8 Respiração aeróbia de X_{STO}	$b_{STO,O_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot X_{STO}$
9 Respiração anóxica de X_{STO}	$b_{STO,NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot X_{STO}$
Organismos autotróficos, nitrificação	
10 Crescimento aeróbio de X_A	$\mu_A \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{A,O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{A,NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{K_{A,ALK} + S_{ALK}} \cdot X_A$
11 Respiração endógena aeróbia	$b_{A,O_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{A,O_2} + S_{O_2}} \cdot X_A$
12 Respiração endógena anóxica	$b_{A,NOX} \cdot \frac{K_{A,O_2}}{K_{A,O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{A,NOX} + S_{NOX}} \cdot X_A$

Fonte: Henze *et al.* (2000, p. 111, tradução nossa).

Na publicação de Gujer *et al.* (1999) e no relatório técnico da IWA de Henze *et al.* (2000) foram apresentadas tabelas com valores típicos para parâmetros cinéticos para o ASM3 para temperaturas referenciais de 10 e 20°C, bem como para os parâmetros estequiométricos utilizados no modelo. Nas publicações é informado que “[...] tais valores não fazem parte do modelo, sendo apresentados meramente como referência para teste do código computacional e como primeira estimativa, a partir da qual os verdadeiros parâmetros devem ser identificados com maior precisão”. (HENZE *et al.*, 2000, p. 114-115, tradução nossa).

Para temperaturas diferentes das informadas (10 e 20°C), os autores sugerem a realização de interpolação entre os valores para os parâmetros cinéticos – $k(T)$, sendo T a temperatura em °C –, fazendo referência às equações 38 e 39: (HENZE *et al.*, 2000, p. 111)

$$k(T)=k(20^{\circ}\text{C}).\exp(\theta_T.(T-20^{\circ}\text{C})) \quad (38)$$

$$\text{sendo } \theta_T = \frac{\ln \left[\frac{k(T_1)}{k(T_2)} \right]}{T_1 - T_2} \quad (39)$$

2.2.3 Caracterização do esgoto e estimativa dos parâmetros do modelo

O uso dos modelos ASM requer a caracterização do esgoto afluyente e do lodo ativado como dados de entrada, incluindo a definição de diversos parâmetros para os processos bioquímicos envolvidos. A caracterização envolve o fracionamento da DQO total em: DQO rapidamente biodegradável (S_s), DQO lentamente biodegradável (X_s), DQO solúvel inerte (S_i) e DQO particulada inerte (X_i). Além disso, uma parcela da DQO refere-se à biomassa a qual deve ser fracionada em organismos heterotróficos comuns (X_H), organismos autotróficos nitrificantes (X_A) e produtos armazenados pelos organismos (X_{STO}).

A publicação do modelo ASM1 já demonstrava metodologia para a caracterização do esgoto, sendo aplicável para o ASM3. Nela, é indicada a montagem de um reator de bancada com operação de batelada, alimentado constantemente, em mistura completa aerado, em um tempo de retenção de sólidos em excesso durante 10 dias. Segundo a publicação, a taxa de crescimento das heterotróficas, Y_H , é determinada através da observação da formação de biomassa no reator de bancada em uma amostra alimentada com DQO solúvel, calculada como a razão do aumento da biomassa ($\Delta\text{DQO células}$) pelo consumo de DQO solúvel ($\Delta\text{DQO solúvel}$), calculados pelas equações 40 e 41. (HENZE *et al.*, 2000, p. 16).

$$\text{DQO células} = \text{DQO total} - \text{DQO solúvel} \quad (40)$$

$$Y_H = \frac{\Delta \text{DQO células}}{\Delta \text{DQO solúvel}} \quad (41)$$

Quanto à concentração da DQO rapidamente biodegradável, os mesmo autores indicam a medição da taxa de oxigênio utilizada (*oxygen uptake rate* – OUR) no reator operado num padrão de alimentação intermitente de 12h (12h com alimentação, 12h sem), num período de dois dias, conforme método indicado por Ekama, Dold e Marais (1986). A taxa de oxigênio utilizada imediatamente após a interrupção da alimentação cairá a um valor correspondente à DQO lentamente biodegradável, portanto a diferença entre a taxa anterior à interrupção da alimentação e aquela imediatamente após à interrupção corresponderá à parcela rapidamente biodegradável de DQO, que será calculada pela Equação 42 : (HENZE *et al.*, 2000, p. 17)

$$S_s = \frac{\Delta \text{OUR} V}{Q(1 - Y_H)} \quad (42)$$

Sendo:

ΔOUR : diferença da taxa de utilização de OD imediatamente antes e após a interrupção da alimentação [$\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$];

V: volume do reator [L^3];

Q: vazão de alimentação anterior à interrupção [L^3T^{-1}].

Quanto ao lodo, Henze *et al.* (2000) indicam a sua proveniência de quatro fontes: 1) o crescimento dos microrganismos heterotróficos em S_s e X_s , proporcionalmente à degradação do substrato numa taxa Y_H ; 2) a produção de lodo particulado inerte pelo decaimento da biomassa, em uma taxa constante b_H que resulta numa fração da biomassa f_P ; 3) a acumulação de matéria orgânica inerte S_i e X_i a partir da alimentação, e; 4) a acumulação de substrato lentamente biodegradável X_s . É indicada que a fração f_P em literatura varia em torno de 0,8 g DQO/g DQO. Para idade de lodo superior a 5 dias, S_s e X_s podem ser desprezíveis em comparação à alimentação. (HENZE *et al.*, 2000, p. 18).

Segundo os mesmos autores, o valor de X_I deve ser estimado a partir da estimativa da geração de lodo com o modelo comparando-se com a produção real, em método de tentativa e erro ou iterativo até se obter erros quadráticos mínimos. A partir do valor obtido para X_I , obtém-se $X_S = \text{DQO total} - (S_S + X_I + S_I)$. (HENZE *et al.*, 2000, p. 18).

Já as concentrações de OD, nitrato+nitrito, amônia e alcalinidade devem ser medidos diretamente por métodos químicos e, segundo a mesma publicação, as concentrações de nitrogênio solúvel e inorgânico podem ser obtidas a partir da medição da concentração de nitrogênio total Kjendahl (NTK) assumindo-se que a proporção de cada fração é a mesma encontrada para S_S e X_S . Os autores indicam valores de Y_A encontrados na literatura próximos de 0,24 mg DQO/N oxidado. Segundo eles, a massa de nitrogênio por massa de DQO das células i_{XB} é de 0,086 g N/g DQO, e do nitrogênio particulado i_{XP} é de 0,06 g N/g DQO. (HENZE *et al.*, 2000, p. 18).

Quanto aos parâmetros cinéticos, o mais crítico é a taxa máxima específica de crescimento das autotróficas, $\hat{\mu}_A$, que determina a idade do lodo mínima abaixo da qual a perda de biomassa nitrificante ocorrerá. Para sua determinação, é recomendado um teste dinâmico no qual se aumentará a idade do lodo até se obter a nitrificação total. A medição da concentração de nitrato gerado corresponde à nitrificação que ocorreu e o crescimento é proporcional ao crescimento da população das bactérias autotróficas. O logaritmo natural da concentração de nitrato plotado em gráfico se aproximará de uma reta cuja inclinação é dada por $\hat{\mu}_A - \frac{1}{\theta_X} - b'_A$, sendo θ_X é a idade do lodo conhecida e b'_A é a taxa de decaimento tipicamente conhecida para as bactérias nitrificantes. (HENZE *et al.*, 2000, p. 19).

Outro coeficiente de importância a ser determinado é o de decaimento endógeno, b_H , tanto para a obtenção de correta produção de lodo quanto para os requisitos de oxigênio. Na mesma publicação, os autores indicam a alimentação do reator de bancada com taxa constante de utilização de oxigênio com lodo de um reator de mistura completa, segundo método de Ekama, Dold e Marais (1986). O gráfico com o logaritmo natural da taxa de utilização de oxigênio versus o tempo se aproximará de uma reta cuja declividade será o coeficiente de decaimento tradicional b'_H . O coeficiente de decaimento do modelo será expresso pela Equação 43. (HENZE *et al.*, 2000, p. 19).

$$b_H = \frac{b'_H}{1 - Y_H(1 - f_P)} \quad (43)$$

Quanto à desnitrificação, os parâmetros η_g e η_h , respectivamente o fator de correção que ajusta a mudança em $\hat{\mu}_A$ para condições anóxicas e o fator de correção para hidrólise da matéria orgânica lentamente biodegradável em condições anóxicas, podem ser medidos simultaneamente em dois reatores de bancada, um operando com oxigênio e outro em condições anóxicas, ambos alimentados com uma razão A/M que possibilite a identificação de duas fases: a primeira concernente ao crescimento das heterotróficas em face do substrato rapidamente biodegradável, com alta taxa de utilização do aceptor de elétrons (OD ou nitrato), e a segunda referente ao consumo do substrato resultante da hidrólise da matéria orgânica lentamente biodegradável, com baixa taxa de utilização do aceptor de elétrons. Os parâmetros podem ser calculados a partir das equações 44 e 45. (HENZE *et al.*, 2000, p. 20).

$$\eta_g = \frac{2,86 \text{ NUR}_g}{\text{OUR}_g} \quad (44)$$

$$\eta_h = \frac{2,86 \text{ NUR}_h}{\text{OUR}_h} \quad (45)$$

Sendo:

NUR_g : taxa de utilização de nitrato no reator anóxico, no primeiro período, em $\text{mg NO}_3^-/\text{L.h}$;

OUR_g : taxa de utilização de OD no reator aeróbio no primeiro período, em $\text{mg O}_2/\text{L.h}$;

NUR_h : taxa de utilização de nitrato no reator anóxico, no segundo período, em $\text{mg NO}_3^-/\text{L.h}$;

OUR_h : taxa de utilização de OD no reator aeróbio no segundo período, em mg $O_2/L.h$;

Os valores de $\hat{\mu}_H$ e K_S , que são a taxa máxima específica para o crescimento da biomassa heterotrófica e o coeficiente de meia saturação para a biomassa heterotrófica, respectivamente, segundo (HENZE *et al.*, 2000), são mais difíceis de serem determinados experimentalmente, exigindo técnicas respirométricas em reator de escala de laboratório. Por outro lado, os mesmos autores indicam que o sistema não é muito sensível a esses parâmetros, uma vez que a concentração de substrato solúvel rapidamente biodegradável é geralmente baixa. Valores de referência na literatura sugerem $\hat{\mu}_H$ entre 3 e 6 d^{-1} e K_S de 20 g DQO/ m^3 . (HENZE *et al.*, 2000, p. 20-24).

Os parâmetros k_h e K_X , respectivamente a taxa máxima específica de hidrólise e o coeficiente de meia saturação para a hidrólise do substrato lentamente biodegradável, são determináveis com a operação de um reator de mistura completa com idade do lodo baixa, alimentado com substrato lentamente biodegradável em um ciclo diário em padrão conforme procedimento indicado por Ekama, Dold e Marais (1986). Quando a alimentação cessa, a taxa de utilização de oxigênio (OUR) cairá a um padrão correspondente à hidrólise da biomassa lentamente biodegradável. No estabelecimento de um platô nesta fase (OUR constante), tem-se a taxa máxima de hidrólise e, portanto, permitindo a avaliação do coeficiente k_h . O padrão de queda da taxa de utilização de oxigênio é determinado pelo coeficiente K_X , portanto a determinação dos valores desses coeficientes pode ser realizada com a utilização do modelo a partir de tentativa e erro, tentando aproximar a curva obtida no modelo à obtida a partir dos ensaios. (HENZE *et al.*, 2000, p. 21).

A metodologia de fracionamento da DQO e estimação de parâmetros expressa na publicação original do modelo ASM1, resumidamente apresentada no presente item, foi alvo de diversos estudos nos anos subsequentes. Rieger *et al.* (2013) resumem os métodos experimentais referendados na caracterização do esgoto e da biomassa, sintetizados no Quadro 6. Observa-se que os métodos constantes na publicação original ainda são vigentes, inclusive aqueles indicados por Ekama, Dold e Marais (1986). A maioria dos testes requerem o uso de reatores de bancada e respirômetros.

Quanto aos demais parâmetros do ASM3, consta na publicação original de (GUJER *et al.*, 1999) valores típicos para 21 coeficientes cinéticos e 15 coeficientes estequiométricos utilizados no modelo. Embora haja a ressalva na referida publicação de que os valores são referenciais e que não fazem parte do modelo, a maioria deles ainda é considerada como “padrão” na modelagem, sendo ponto de partida nos processos de calibração. Conforme (MELCER *et al.*, 2003), a determinação dos coeficientes através de ensaios é difícil e dispendiosa, motivo pelo qual os trabalhos focam na determinação dos componentes do esgoto e da biomassa mais relevantes para a modelagem.

2.2.4 Notação de variáveis e parâmetros dos modelos ASM

A notação de variáveis de estado e de parâmetros cinéticos e estequiométricos que constam nas publicações origidas dos modelos de lodos ativados foram substituídas ao longo dos anos por um novo padrão, adotado em trabalhos mais recentes. Henze e Comeau (2008) haviam proposto as seguintes diretrizes quanto às variáveis de estado, sendo base para novo padrão:

- A primeira letra maiúscula se refere ao tamanho da partícula: S para solúvel, C para coloidal, X para particulado e T para total ($= S + C + X$);
- As letras em subscrito indicam o componente ou a sua natureza, com a adoção de vírgulas para indicar, quando necessário, se um componente é parte de outro.

Ainda conforme Henze e Comeau (2008), as letras em subscrito B e U devem se referir, respectivamente, a biodegradável e não biodegradável (*unbiodegradable*). Assim, S_B se refere à DQO solúvel biodegradável, substituindo a notação original S_s , referenciada anteriormente como DQO rapidamente biodegradável. X_B , por sua vez, refere-se à DQO particulada biodegradável, substituindo a notação original X_s referenciada anteriormente como DQO lentamente biodegradável. A biomassa, por sua vez, é expressa como X_{OHO} para organismos heterotróficos (*ordinary heterotrophic organisms*), substituindo X_H , e X_{ANO} para organismos autotróficos nitrificantes (*autotrophic nitrifying organisms*), substituindo X_A .

A consolidação das propostas de alteração de notação é de Corominas *et al.* (2010), sendo referendado em publicações da IWA (RIEGER *et al.*, 2013). O Quadro 5 sintetiza a notação atual para variáveis de estado no ASM3, indicando a substituição

em relação à publicação original do modelo por Gujer *et al.* (1999). A notação atualizada dos parâmetros, quando necessária, é apresentada nos itens subsequentes.

Quadro 5 – Notação modificada para variáveis de estado

Variáveis de Estado	Notação atual Corominas <i>et al.</i> (2010)	Notação original Gujer <i>et al.</i> (1999)
DQO		
DQO rapidamente biodegradável (solúvel)	S _B	S _s
DQO solúvel não biodegradável	S _U	S _i
Oxigênio dissolvido	S _{O2}	S _O
DQO lentamente biodegradável (particulada e coloidal)	X _{CB}	X _s
DQO particulada não biodegradável	X _U	X _i
Nitrogênio		
Amônia e amônio (NH ₄ + NH ₃)	S _{NHX}	S _{NH}
Nitrito e nitrato (NO ₃ + NO ₂)	S _{NOX}	S _{NO}
Biomassa		
Organismos heterotróficos	X _{OHO}	X _H
Organismos nitrificantes autotróficos	X _{ANO}	X _A
Componentes armazenados pelos heterotróficos	X _{OHO,stor}	X _{STO}

Fonte: Adaptado de Corominas *et al.* (2010)

2.2.5 Outros métodos para o fracionamento da DQO

O fracionamento da DQO é um dos principais desafios para o uso de modelos. Exemplos encontrados na literatura em geral são diversos, incluindo métodos físicos combinados com bioensaios (BAQUERO-RODRÍGUEZ; LARA-BORRERO; MARTELO, 2016, p. 840). Dentre os métodos mais aceitos destacam-se o WERF (*Water Environment Research Foundation*) (MELCER *et al.*, 2003) e o STOWA (do holandês *Stichting Toegepast Onderzoek Water* – Fundação Holandesa para Pesquisas Aplicadas em Água, em tradução livre) (HULSBEEK *et al.*, 2002; ROELEVELD; VAN LOOSDRECHT, 2002), juntamente com o HSG (*Hochschulgruppe Simulation*) (LANGERGRABER *et al.*, 2004) e o BIOMATH (PETERSEN *et al.*, 2002; VANROLLEGHEM *et al.*, 2003). (HENZE; COMEAU, 2008).

No método WERF, conforme Quadro 6, a determinação da DQO solúvel inerte do esgoto afluente baseia-se na medição da DQO filtrada do efluente (isto é, a DQO do efluente que passou por filtro 0,45 µm), assumindo-se que a toda a DQO solúvel do efluente tratado é inerte, portanto $S_U = DQO_{EFF,f0,45}$.

No método STOWA, a DQO solúvel inerte é calculada através das equações 46 e 47, conforme o caso: (ROELEVELD; VAN LOOSDRECHT, 2002, p. 87)

$$S_U = 0,9 \text{ DQO}_{\text{EFF},f0,45}, \text{ (para sistema com baixa carga)} \quad (46)$$

$$S_U = 0,9 \text{ DQO}_{\text{EFF},f0,45} - 1,5 \text{ DBO}_{5,\text{EFF}} \text{ (para sistema com alta carga)} \quad (47)$$

Sendo:

$\text{DQO}_{\text{EFF},f0,45}$: DQO filtrada do efluente final com filtro de 0,45 μm , em mg/L;

$\text{DBO}_{5,\text{EFF}}$: DBO_5 do efluente final, em mg/L.

Observa-se que no método STOWA assume que uma parte da DQO solúvel do efluente final é biodegradável. A partir da determinação da DQO solúvel do esgoto afluente, tem-se que a DQO rapidamente biodegradável é igual a DQO solúvel do afluente menos a DQO inerte do efluente, ou seja, $S_B = \text{DQO}_{f0,45} - S_U$.

Para a determinação das frações da DQO particulada, os métodos indicam a medição da DQO total biodegradável (T_B) através de respirometria ou estimativas a partir da DBO. A DBO_5 representa a DQO oxidada em cinco dias, que corresponde de 50 a 95% da DBO total (DBO_{tot}). A DBO total (DBO_{tot}) pode ser estimada a partir da DBO_5 através da Equação 48. (ROELEVELD; VAN LOOSDRECHT, 2002, p. 79).

$$\text{DBO}_{\text{tot}} = \frac{1}{1 - e^{-k_{\text{DBO}} t}} \text{DBO}_t \quad (48)$$

Sendo

k_{DBO} : constante de taxa de primeira ordem para a DBO no tempo t , em d^{-1} ;

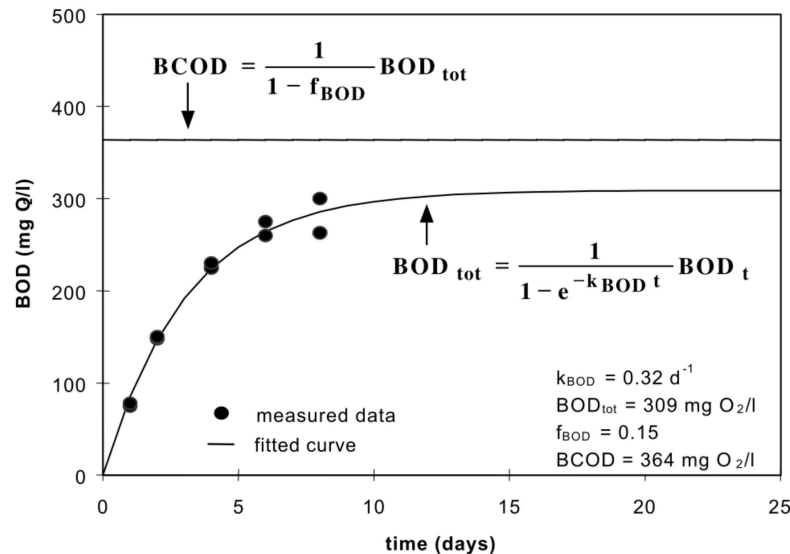
t : tempo, em dias (para DBO_5 , $t=5$);

DBO_t : DBO medida no tempo t (para $t=5$, para $\text{DBO}_t = \text{DBO}_5$).

A determinação de k_{DBO} é realizada a partir da medição da DBO do esgoto para diferentes tempos t . Em gráfico com t no eixo horizontal e a DBO no eixo vertical, a

curva da Equação 48 pode ser ajustada aos pontos medidos através de função de mínimos quadrados. A Figura 3 representa um exemplo do ajuste da curva e a consequente determinação da DBO_{tot} . (ROELEVELD; VAN LOOSDRECHT, 2002, p. 79).

Figura 3 – Exemplo de ajuste da curva de DBO aos pontos obtidos por medição, para determinação de k_{DBO} , DBO_{tot} e DQO_B



Fonte: Roeleveld e Van Loosdrecht (2002, p. 79).

Segundo (BRDJANOVIC *et al.*, 2015, p. 96) para esgotos sanitários, o valor de k_{DBO} pode variar de 0,15 a 0,6 d^{-1} , sendo padrão o valor de 0,23 d^{-1} , embora outras publicações indiquem faixas mais amplas (PŁUCIENNIK-KOROPCZUK; MYSZOGRAJ, 2019; ROELEVELD; VAN LOOSDRECHT, 2002). O valor de k_{DBO} é específico para cada planta e tem grande influência na determinação da DQO particulada inerte e biodegradável. Durante a aplicação de modelos, uma pequena alteração no valor de k_{DBO} provoca mudanças significativas na qualidade do efluente e na produção de lodo para sistemas com idade do lodo elevadas. (BRDJANOVIC *et al.*, 2015, p. 102).

Com a determinação da DBO_{tot} , a DQO biodegradável é calculada através da Equação 49, sendo introduzido o fator de correção f_{DBO} , pois o teste de longo prazo da DBO resulta na conversão de parte da DQO biodegradável em fração inerte. A faixa indicada para f_{DBO} é entre 0,1 e 0,2 (sendo padrão o valor de 0,15). (BRDJANOVIC *et al.*, 2015; ROELEVELD; VAN LOOSDRECHT, 2002).

$$DQO_B = \frac{1}{1 - f_{DBO}} DBO_t \quad (49)$$

Sendo

DQO_B : DQO biodegradável, em mg/L;

f_{DBO} : fator de correção, adimensional.

Com a obtenção da DQO_B , calcula-se a DQO particulada e coloidal (XC_B) através da Equação 50: (BRDJANOVIC *et al.*, 2015; RIEGER *et al.*, 2013)

$$XC_B = DQO_B - S_B \quad (50)$$

As frações remanescentes são a DQO particulada não biodegradável (X_U) e a biomassa (X_{OHO} , X_{ANO} e $X_{Stor,OHO}$). No esgoto afluente, a fração da biomassa (X_{BIO}) é desprezada em modelagem, porém o trabalho de Spérandio e Etienne (2000) mostrou afluentes com 15% da DQO em biomassa. A determinação das concentrações de X_{OHO} , X_{ANO} e $X_{Stor,OHO}$ em lodo ativado é comumente realizada por respirometria, conforme indicado no Quadro 6. Pasztor, Thury e Pulai (2009) indicam a concentração de 7 a 20% de biomassa heterotrófica no esgoto bruto. Henze e Comeau (2008) apresentaram as concentrações para diversos componentes em um processo Phoredox com idade do lodo de cinco dias operado a 12°C.

Outro método de fracionamento utilizado amplamente na prática é o da norma alemã ATV-DVWK A131 (DVWK, 2000) que em parte se assemelha aos métodos WERF e STOWA. Conforme aquela norma, DQO inerte solúvel S_U é igual à DQO solúvel do efluente, como no método WERF. A DQO particulada biodegradável XC_B é calculada pela Equação 51:

$$XC_B = (DBO_5 / k_1) - S_B \quad (51)$$

Sendo:

k_1 : taxa constante de degradação bioquímica, em d^{-1} .

O valor de k_1 é estabelecido em $0,1 \text{ d}^{-1}$, onde a $\text{DBO}_{\text{TOT}} = \text{DBO}_5 / 0,6$. Płuciennik-Koropczuk e Myszograj (2019) propuseram modificação na metodologia, assumindo que parte da DQO solúvel do efluente é biodegradável e propondo revisão na estimativa do valor de k_1 . Na realidade, o método proposto baseia-se na adoção das equações 48 e 49 do método STOWA, apresentando resultados para os fatores k_{DBO} obtidos em curvas ajustadas a medições de DBO de afluente bruto e efluente tratado (obtiveram k_{DBO} de $0,225 \text{ d}^{-1}$ e $0,174 \text{ d}^{-1}$, respectivamente para afluente e efluente).

Outros autores fizeram análises comparativas entre métodos de fracionamento, como Myszograj, Płuciennik-Koropczuk e Jakubaszek (2017), que testaram sete métodos, dentre os quais os de Ekama, Dold e Marais (1986), Henze *et al.* (2000) e o da norma alemã (DVWK, 2000). Drewnowski *et al.* (2019b), também de grupo de pesquisadores da Polônia, compararam método baseado em testes respirométricos combinados com estimativas em modelo (RT-ME) com método por floculação/filtração de DQO combinado com medição de DBO (FF-BOD), resultando em diferenças importantes entre eles. Em ambos os casos, o fracionamento resultou dentro das faixas esperadas para países europeus: S_B entre 3,0%–35%; S_U entre 2,0%–8,5%; X_{C_B} entre 28%–66,2%, X_U entre 10%–39%.

Segundo Ruiz, Pérez e Gómez (2014), o fracionamento da DQO tem alta influência no comportamento dos modelos, sendo que diferenças na caracterização do esgoto e do lodo levam a resultados diferentes para a mesma calibração. Em seu estudo, a DQO do lodo sobrenadante e do licor misto foi melhor estimada quando se utilizou testes respirométricos na caracterização do esgoto afluente.

Quadro 6 – Métodos experimentais para fracionamento da DQO

Objetivo	Método	Princípio	Material	Duração do teste	Análise de resultado	Referência
DQO total biodegradável (DQO _{TOT,B})	Teste de DBO de longo-termo	Monitoramento de DBO	Medidor de DBO	8 a 10 dias	Determinação da taxa constante de primeira ordem	(ROELEVELD; VAN LOOSDRECHT, 2002)
	Teste de bancada aeróbio com alta razão S/X	Respirometria: monitoramento da OUR após alimentação do lodo ativado com substrato	Respirômetro	Horas	Área sob a curva de OUR	(SPÉRANDIO <i>et al.</i> , 2001)
DQO rapidamente biodegradável (S _B)	Método físico-químico	Tamanho do poro = 0,1 µm	Filtro	Horas (incluindo análises químicas)	S _B = DQO _{f0,1} – S _U (requer determinação de S _U)	(ROELEVELD; VAN LOOSDRECHT, 2002)
	Método físico-químico	Floculação (Zn + filtração) Tamanho do poro = 0,45 µm	Filtro Frasco agitado	Horas (incluindo análises químicas)	S _B = DQO _{f0,45} – S _U (requer determinação de S _U)	(MAMAIS; JENKINS; PITT, 1993)
	Teste aeróbio de fluxo	Respirometria: monitoramento da OUR num reator contínuo	Reator contínuo	3 idades do lodo (piloto), horas	Área sob a curva de OUR	(EKAMA; DOLD; MARAIS, 1986)
	Teste de bancada aeróbio com razão A/M intermediário	Respirometria: monitoramento da OUR após alimentação do lodo ativado com substrato	Respirômetro	Horas	Área sob a curva de OUR	(EKAMA; DOLD; MARAIS, 1986)
	Teste de bancada aeróbio com baixa razão S/X	Respirometria: monitoramento da OUR em uma amostra aerada de esgoto	Respirômetro	10-20 horas	Modelagem das curvas de OUR (requer a separação do valor de DQO _{TOT,B})	(WENTZEL; MBEWE; EKAMA, 1995) (SPÉRANDIO <i>et al.</i> , 2001)
	Teste de bancada anóxico	Respirometria anóxica e monitoramento de N-NO ₃	Reator de bancada agitado	4-6 horas	Cálculos simples baseados na inclinação da reta	(NAIDOO; URBAIN; BUCKLEY, 1998)

(Continuação)

Objetivo	Método	Princípio	Material	Duração do teste	Análise de resultado	Referência
DQO total não-biodegradável ($DQO_{tot,U}$)	Teste de bancada aeróbio de longo-termo	Monitoramento de DQO em reatores aerados	Dois reatores aerados (amostras brutas e filtradas)	20-40 dias	Determinação dos produtos microbianos residuais utilizando o reator inicialmente cheio com esgoto filtrado	(LESOUÉF <i>et al.</i> , 1992) (ORHON <i>et al.</i> , 1997) (STRICKER <i>et al.</i> , 2003)
DQO solúvel não biodegradável (S_U)	Método físico-químico	Filtração do efluente	Filtros	Horas (incluindo análises químicas)	$S_U = DQO_{EFF,f0,45}$ $S_U = 0,9 DQO_{EFF,f0,45}$ (sistema com baixa carga) $S_U = 0,9 DQO_{EFF,f0,45} - 1,5 DBO_{5,EFF}$ (sistema com alta carga)	(MELCER <i>et al.</i> , 2003) (ROELEVELD; VAN LOOSDRECHT, 2002)
DQO partic. não biodegradável (X_U)	Calibração do modelo	Operação de reator de batelada ou dados de escala real + calibração de um modelo de lodos ativados	Reator SBR piloto	Mínimo 3 idades do lodo	Calibração do modelo da planta piloto	Melcer <i>et al.</i> (2003)
Biomassa heterotrófica (X_{OHO})	Respirometria baseada em OUR	Monitoramento da OUR de uma amostra aerada de esgoto	Respirômetro	10-20 horas	Modelagem da curva de OUR	(KAPPELER; GUJER, 1992) (WENTZEL; MBEWE; EKAMA, 1995)

Fonte: Rieger *et al.* (2013, p. 40-41, tradução nossa).

2.2.6 Calibração e verificação

O uso de um modelo exige que ele seja alimentado com informações específicas de uma certa estação de tratamento, contendo toda a natureza dos processos bioquímicos envolvidos e em compatibilidade com os tipos de parâmetros exigidos por ele; na prática, tais informações são disponíveis após intensas análises laboratoriais na estação, o que na prática não ocorre. (ANDRAKA *et al.*, 2018). Na maioria dos casos, os dados históricos de uma ETE real compreendem os parâmetros básicos como DBO, DQO, SST, NT e P, os quais não podem ser utilizados diretamente para fins de modelagem. (ANDRAKA *et al.*, 2018). Nesse contexto, procedimentos que visam o ajuste desses parâmetros às necessidades dos modelos, visando a sua aplicação prática em ETE reais, são necessários. (ANDRAKA *et al.*, 2018; RIEGER *et al.*, 2013; SOCHACKI *et al.*, 2009).

Os parâmetros a ser calibrados são categorizados como físicos, operacionais, estequiométricos ou cinéticos e partem de diferentes fontes de informação, podendo ser classificadas como: (PETERSEN *et al.*, 2002)

- padrão, quando se refere a um valor tabelado, validado por diferentes estações de tratamento, constante em literatura, comumente utilizado em modelos não modificados e geralmente utilizado como ponto de partida para a calibração;
- obtidos junto à estação em escala real, referentes a coleta de amostras, medições em tempo real (dados online), medições em reatores para caracterizar a dinâmica do processo;
- testes de biomassa, obtidos a partir de experimentos de laboratório sobre coletas realizadas na estação real.

Os parâmetros obtidos por experimentos ou medidos junto à estação de tratamento são referidos como “parâmetros medidos”, enquanto os ajustados através de algoritmo para adequar o modelo aos dados reais são referidos como “parâmetros calibrados”. (ANDRAKA *et al.*, 2018).

Conforme o protocolo unificado do GMP-TG (*Good Modelling Practice – Guidelines for Use of Activated Sludge Models – Task Group*), da IWA (RIEGER *et al.*, 2013), a calibração e verificação dos parâmetros podem ocorrer segundo as seguintes etapas:

- a) Definição da qualidade da predição do modelo: consiste na definição de critérios ou funções que determinarão a qualidade da predição, que determinam o momento de interrupção do processo de calibração. Duas das funções mais empregadas são o erro absoluto médio (*mean absolute error* – MAE) e o erro quadrático médio (*root mean squared error* – RMSE), este expresso pela Equação 52:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (r_i)^2} \quad (52)$$

Sendo:

r_i : resíduo, definido como a diferença entre o valor observado (O_i) e o predito (P_i), ou seja, $r_i = P_i - O_i$

- b) Definição do critério de parada e dos testes de validação: pode ser baseado em valores mínimos para a função escolhida, ou em base no máximo número de iteração, ou no valor mínimo de alteração dos resultados de predição ou no valor máximo de alteração dos parâmetros a serem alterados.
- c) Execução inicial do modelo: separando os dados em dois grupos, sendo um para calibração e outro para testes, a execução inicial é realizada e se obtém os primeiros resultados, que são comparados com os valores medidos, iniciando-se um processo iterativo de alteração dos valores de parâmetros, configurações e, até mesmo, a estrutura do modelo para se obter dados realísticos.
- d) Calibração: ocorrendo o erro maior do que o admissível, primeiro se confere se o modelo e os dados estão corretos. A partir de então, inicia-se um processo iterativo de se modificar os valores dos parâmetros selecionados, que pode ser um processo manual ou através de um algoritmo numérico.
- e) Validação: testes específicos para condições críticas podem ser estabelecidos dependendo do objetivo do projeto, como para simulações dinâmicas. A validação pode incluir uma comparação dos resultados obtidos

através do modelo com os resultados de outros métodos (por exemplo, com equações ou gráficos de projeto), bem como através da comparação com os resultados obtidos na estação para uma situação específica.

O algoritmo de calibração, definido em 'c', inicia com a alteração da configuração do modelo para que melhor se ajuste às características hidrodinâmicas da estação, incluindo a quantidade de tanques em série para representar um reator de fluxo de pistão. Não havendo dados referentes a picos hidráulicos, através da alteração do número de tanques em série será possível calibrar um pico de concentração no esgoto afluente.

Como segundo passo, deve-se ajustar as características do afluente e a recirculação até se obter a produção de lodo observada, corrigindo-se desta maneira a idade do lodo do modelo. Não havendo sucesso nesse passo, deve-se considerar a modificação do layout do modelo. Em seguida, os parâmetros relativos à decantação devem ser modificados até que se obtenha os valores observados em escala real. Em sequência, o modelo escolhido para a aeração deve ser verificado até que se compatibilize os valores de OD do modelo com o do tanque de aeração. Como etapa final, as modificações dos parâmetros biocinéticos devem ser procedidas, preferencialmente justificadas por uma particularidade do processo biológico.

O critério de sensibilidade proposto por Liwarska-Bizukojc e Biernacki (2010) pode ser utilizado para auxiliar o processo de calibração e baseia-se na análise da sensibilidade normalizada, dada pela Equação 53:

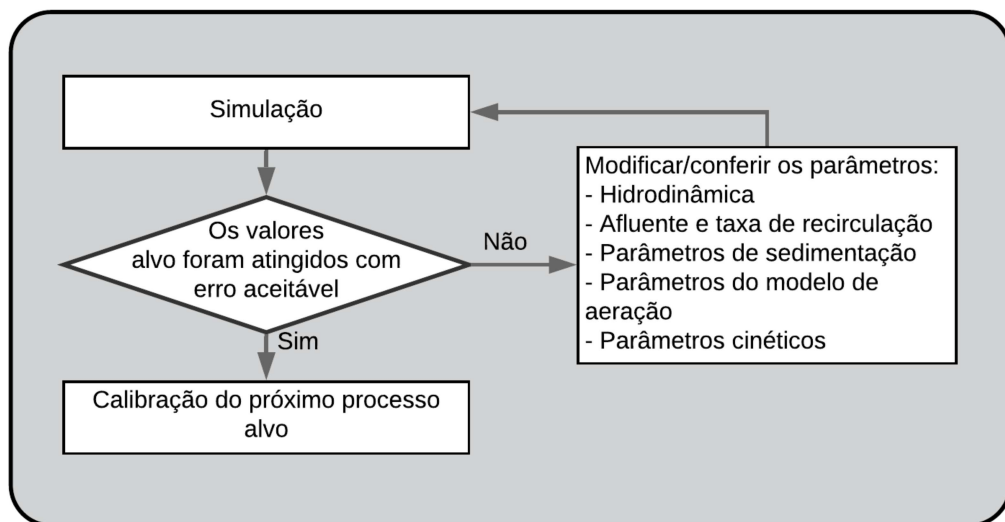
$$S_{i,j} = \frac{\frac{\Delta y_i}{y_i}}{\frac{\Delta x_i}{x_i}} \quad (53)$$

Sendo:

Δy_i : incremento em uma variável de saída (por exemplo, N-NH₄, NT, DQO, etc.) em relação a um incremento Δx_i em uma variável de entrada (por exemplo, um parâmetro cinético ou estequiométrico do modelo).

Seguindo o proposto por Liwarska-Bizukojc e Biernacki (2010), sendo realizado um incremento de 10% nos valores de variáveis de entrada. Para $S_{i,j} > 1$, o parâmetro de entrada será considerado significativamente influente e este critério embasará o procedimento iterativo de calibração. Em forma esquemática, a sequência de calibração de um determinado processo deve seguir o fluxo iterativo esquematizado na Figura 4.

Figura 4 – Fluxograma iterativo de calibração de um processo



Fonte: Adaptado de Rieger *et al.* (2013, p. 72).

Os parâmetros devem ser preferencialmente medidos diretamente, ou então calculados a partir de medições indiretas. A influência de um determinado parâmetro no resultado final do modelo deve ser significativa para justificar alguma alteração visando calibração. Os parâmetros cinéticos devem ser alterados dentro de uma faixa realística.

Critérios de aceitação do modelo são sugeridos conforme a Tabela 4, que resume a opinião de especialistas, representando a experiência do grupo que forma o GMP-TG. (RIEGER *et al.*, 2013).

Tabela 4 – Critérios de aceitação baseados em erros máximos admissíveis

Objetivo	Afluente	Simulação	Período médio	Variável alvo	Erro máximo admissível (\pm)
Cálculo da produção de lodo	Estacionário	Estacionário	Média mensal	SSTA	10%
				SSVTA/SSTA	5%
				Massa de lodo produzida	5%
				SST Efluente	5 mg/L
				Idade do lodo	1 d ou 15% para $\Theta_c < 5$ d
Projeto de sistema de aeração	Dinâmico	Dinâmico	Picos horários médios diários	Taxa de aeração	10%
				OD (perfil)	0,3 mg/L
				Taxa utilização OD	10 mg/L/h
Configuração de processo para remoção de N	Estacionário	Estacionário	Média mensal ou anual	NHx-N	1,0 mg/L
				NOx-N	
				Ntot	
Avaliar a capacidade da planta para remoção de N	Dinâmico	Dinâmico	Média mensal ou anual	NHx-N	1,0 mg/L
				NOx-N	
				Ntot	
Projetar um sistema de tratamento para atender aos limites máximos de nitrogênio do efluente	Dinâmico	Dinâmico	Valores instantâneos	NHx-N	0,5 mg/L
				NOx-N	
				Ntot	
Otimizar o controle de aeração	Dinâmico	Dinâmico	Média horária	Taxa de fluxo de ar	10%
				Perfil de OD	0,5 mg/L
				NHx-N do efluente	0,5 mg/L
Efeito de teste de retirada de tanques de serviço	Dinâmico	Dinâmico	Média mensal	NHx-N	1,0 mg/L
				NOx-N	
				Ntot	
Usar modelo para desenvolver estratégia de descarte de lodo	Dinâmico	Dinâmico	Média semanal ou média diária	Massa de lodo produzida	10%
				Idade do lodo	1 d
				NHx-N	1,0 mg/L
Desenvolver uma estratégia para contornar picos de vazão devido a tempestades	Dinâmico	Dinâmico	Horária	SSTA	10%
				SST Efluente	10 mg/L/h
				NHx-N	1,0 mg/L
				NOx-N	1,0 mg/L
Desenvolver um modelo específico para treinamento de operadores	Dinâmico	Dinâmico	Mensal	SSTA	10%
				Massa de lodo produzida	5%
				SST Efluente	5,0 mg/L
				NHx-N	1,0 mg/L
				NOx-N	1,0 mg/L
				Taxa de aeração	10%
OD (perfil)	0,5 mg/L				

Fonte: Adaptado de Rieger *et al.* (2013).

Os parâmetros para nitrificação estão bem documentados na literatura, porém alguns talvez tenham que ser medidos em planta. A determinação do pH é importante pois é fator inibidor. A aeração é fator determinante na nitrificação, portanto é recomendado que, para separar a calibração da aeração e do modelo cinético, a concentração de OD seja ajustada para um valor constante ou que seja controlada com medições permanentes nessa etapa. O perfil de aeração é de conhecimento fundamental para uma correta calibração e as concentrações obtidas na planta devem ser passadas corretamente ao modelo para evitar distorções. (RIEGER *et al.*, 2013).

2.2.7 Novos padrões para parâmetros cinéticos e estequiométricos

O trabalho de Hauduc *et al.* (2011) sintetizou experiências práticas de usuários na utilização dos principais modelos de lodos ativados, criando uma base de dados acessível a novos usuários dentro do escopo do Grupo de Tarefas para Boas Práticas de Modelagem – Diretrizes para Uso de Modelos de Lodos Ativados (GMP-TG – *Good Modelling Practice – Guidelines for Use of Activated Sludge Models – Task Group*), da IWA. A pesquisa, realizada em forma de questionário submetido aos usuários, indicou que a calibração do modelo é a atividade que mais consome esforço de modelagem – 27% em média do tempo – sendo considerada, inclusive, o principal obstáculo para o uso disseminado dos modelos. (HAUDUC *et al.*, 2011, p. 15).

A base de dados possibilitou a identificação dos parâmetros mais modificados pelos usuários e as faixas, visando auxiliar novos usuários nos processos de calibração dos modelos de lodos ativados mais empregados. (HAUDUC *et al.*, 2011). Em que pese a pesquisa ter sido realizada com 96 usuários para todos os modelos, o ASM3 apresentou número reduzido de participantes (cinco). Para este, um novo conjunto de parâmetros padrão se baseou no trabalho de Koch *et al.* (2000), sendo referenciados no trabalho de Hauduc *et al.* (2011, p. 29) e de Rieger *et al.* (2013, p. 250), sintetizados na Tabela 5. A notação indicada está de acordo com o trabalho de Corominas *et al.* (2010).

Tabela 5 – Valores modificados para parâmetros do ASM3

Parâmetros	Notação modificada Corominas <i>et al.</i> (2010)	Unidade	Notação original Gujer <i>et al.</i> (1999)	Valor padrão original Gujer <i>et al.</i> (1999)	Novo valor proposto Koch <i>et al.</i> (2000)
Parâmetros estequiométricos					
Produção de X_{OHO} por $X_{OHO,STOR}$ (aeróbio)	$Y_{STOR_OHO,OX}$	g X_{OHO} / g X_{STOR}	$Y_{H,O2}$	0,85	0,8
Produção de X_{OHO} por $X_{OHO,STOR}$ (anóxico)	$Y_{STOR_OHO,AX}$	g X_{OHO} /g X_{STOR}	$Y_{H,NOX}$	0,8	0,7
Produção de $X_{OHO,STOR}$ por S_B (aeróbio)	$Y_{SB_STOR,OX}$	g X_{STOR} /g S_B	$Y_{STO,O2}$	0,63	0,8
Produção de $X_{OHO,STOR}$ por S_B (anóxico)	$Y_{SB_STOR,AX}$	g X_{STOR} /g S_B	$Y_{STO,NOX}$	0,54	0,65
Coefficientes de conversão					
Concentração de N por X_U	$i_{N,XU}$	g N/g XU	$i_{N,XI}$	0,02	0,04
Concentração de N por X_{CB}	$i_{N,XCB}$	g N/g XCB	$i_{N,XCB}$	0,04	0,03
Parâmetros cinéticos					
Taxa máxima específica de hidrólise	$q_{XCB_SB,hyd}$	g XCB/ g $X_{OHO.d}$	k_H	3	9
Organismos heterotróficos comuns					
Taxa máxima de crescimento de X_{OHO}	$\mu_{OHO,Max}$	d^{-1}	μ_H	2	3
Coefficiente de meia saturação para S_B	$K_{SB,OHO}$	g S_B /m ³	K_S	2	10
Coefficiente de meia saturação para $X_{OHO,STOR}/X_{OHO}$	K_{STOR_OHO}	g X_{STOR} / g X_{OHO}	K_{STO}	1	0,1
Taxa de respiração endógena para X_{OHO} (aeróbia)	$m_{OHO,OX}$	d^{-1}	$b_{H,O2}$	0,2	0,3
Taxa de respiração endógena para X_{OHO} (anóxica)	$m_{OHO,AX}$	d^{-1}	$b_{H,NOX}$	0,1	0,15
Taxa de respiração endógena para X_{STO} (aeróbia)	$m_{STO,OX}$	d^{-1}	$b_{STO,O2}$	0,2	0,3
Taxa de respiração endógena para X_{STO} (anóxica)	$m_{STO,AX}$	d^{-1}	$b_{STO,NOX}$	0,1	0,15
Organismos autotróficos nitrificantes					
Taxa máxima de crescimento de X_{ANO}	$\mu_{ANO,Max}$	d^{-1}	μ_A	1	1,3
Taxa de respiração endógena para X_{ANO} (aeróbia)	$m_{ANO,OX}$	d^{-1}	$b_{A,O2}$	0,15	0,2
Taxa de respiração endógena para X_{ANO} (anóxica)	$m_{ANO,AX}$	d^{-1}	$b_{A,NOX}$	0,05	0,1
Coefficiente de meia-saturação para S_{NHX}	$K_{NHX,ANO}$	g S_{NHX} /m ³	$K_{A,NH4}$	1	1,4

Fonte: Adaptado de Hauduc *et al.* (2011, p. 29)

2.2.8 Aplicações recomendadas e limitações do ASM3

Como observado, os modelos ASM1 e ASM3 diferem-se conceitualmente quanto à absorção de produtos, quanto à respiração endógena, quanto à taxa de consumo de oxigênio (dividida em três processos, quais seja, absorção de produtos, crescimento e respiração endógena), entre outras diferenças. Essas diferenças trazem uma vantagem importante do ASM3 para reatores do tipo fluxo de pistão e para lodos ativados com seletores (SAS), estes dedicados à prevenção do crescimento excessivo de microrganismos filamentosos responsáveis pela formação de lodo volumoso (*bulking sludge*), sendo os casos mais importantes para a aplicação do modelo (MAKINIA; ROSENWINKEL; PHAN, 2006).

Outra aplicação relevante do ASM3 concerne a plantas com pré-desnitrificação operando com idades do lodo reduzidas, onde há uma diferença importante se houve ou não armazenamento de DQO pelos microrganismos e a quantidade de DQO lentamente biodegradável que está presente no esgoto (YUAN; OEHMEN; INGILDTSEN, 2002). Para altas cargas orgânicas, ou para baixas idades do lodo, o ASM3 pode trazer melhores previsões em virtude de serem sistemas mais sensíveis quanto à razão entre a DQO lentamente biodegradável e a DQO rapidamente biodegradável. Em sistemas com alta carga, como aqueles que tratam efluentes industriais, a acumulação de DQO na forma de polímeros armazenados e seu carregamento na fase aeróbia pode ser relevante (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015, p. 701).

Em suma, o uso do ASM3 é recomendado nas seguintes situações: (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015, p. 701)

- a) simulação de um sistema com alta carga realizando nitrificação-desnitrificação com tempo de retenção anóxica curto (ou em volume);
- b) modelagem de SAS;
- c) estudo das demandas de aeração para sistemas de fluxo de pistão;
- d) durante operações de alimentação por *step-feed*;
- e) quando alta carga orgânica ou grandes quantidades de componentes industriais estão presentes no influente;
- f) para calibragem automatizada simples.

Para outras situações o ASM1 poderá trazer resultados igualmente satisfatórios (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015, p. 702). Ambos os modelos foram concebidos para uma faixa de temperatura entre 8 e 23°C, para uma faixa de pH entre 6,5 e 7,5. Para idades de lodo inferiores a 1 d, o ASM3 pode apresentar previsões imprecisas pois a absorção de X_S e armazenamento tornam-se limitantes. (HENZE *et al.*, 2000, p. 113)

O ASM3 não lida com a remoção de fósforo, no entanto foi concebido para ser o núcleo de modelos diferentes, podendo ser combinados com outros modelos que incluam precipitação química, crescimento de microrganismos filamentosos e cálculos de pH, entre outros (HENZE *et al.*, 2000, p. 104). O ASM3+BioP, da EAWAG, é um exemplo disso, no qual a remoção de fósforo é combinada com o ASM3 em um módulo adicional, contemplando componentes do ASM2d (RIEGER *et al.*, 2001).

Outro exemplo é o estudo de Kaelin *et al.* (2009), o qual propôs uma extensão ao ASM3 para a modelagem de nitrificação e desnitrificação de duas etapas (*two-step nitrification and denitrification*), onde foi incluído o nitrito como componente adicional, com a substituição de X_A por dois componentes (AOB e NOB), com a inclusão de três processos adicionais de crescimento e decaimento das nitrificantes, e com a inclusão de processo adicional referente ao metabolismo heterotrófico anóxico, totalizando quatro novos processos.

2.3 Modelo de decantação

Os modelos para decantadores primário e secundário são objeto de estudos específicos em várias frentes, em vários graus de complexidade. Este trabalho está delimitado aos modelos de lodos ativados e, por esta razão, a presente revisão se limitará ao modelo baseado em fluxo (unidimensional) (TAKÁCS; PATRY; NOLASCO, 1991), mais simples em comparação aos modelos tridimensionais, como os que incorporam Dinâmica Computacional de Fluidos (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) (DO-QUANG *et al.*, 1998).

A teoria de fluxo sólido é comumente aplicada no projeto e operação de decantadores secundários, baseada na medição das velocidades de sedimentação em diferentes faixas de concentração de lodo, em testes de bancada. (BAKIRI; CHEBLI; NACEF, 2012; VANDERHASSELT; VANROLLEGHEM, 2000). Nesta teoria, a relação entre a concentração de lodo X numa determinada camada e a velocidade de sedimentação V_S é descrita pela Equação de Vesilind, cujos parâmetros permitem

a determinação da curva de fluxo vertical de sólidos em um decantador em operação, dada pela Equação 54. (TAKÁCS; PATRY; NOLASCO, 1991; VANDERHASSELT; VANROLLEGHEM, 2000).

$$v_s = v_0 e^{-nX} \quad (54)$$

Sendo:

v_s : velocidade de sedimentação, em m/h;

v_0 : velocidade máxima de sedimentação, em m/h;

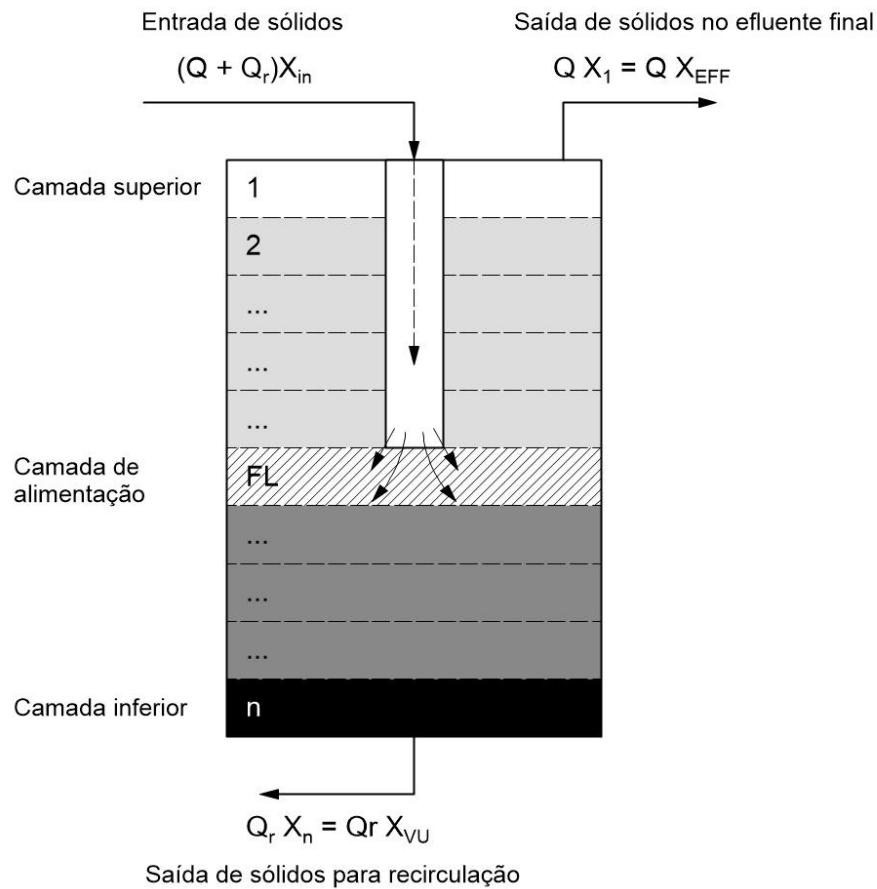
n : parâmetro do modelo, em m^3/g ;

X : concentração de sólidos, em g/m^3 .

Os parâmetros V_0 e n , quando não houver realização de ensaios, podem ser estimados através de funções empíricas que os correlacionam com o índice volumétrico de lodo (IVL), índice volumétrico de lodo diluído (IVLD) e índice volumétrico de lodo com agitação (IVLA) (ZHANG *et al.*, 2016). Vanderhasselt e Vanrolleghem (2000) propuseram um método para estimativa dos parâmetros baseado em ensaio de uma batelada única. Algumas referências para lodos em diferentes cargas podem ser encontradas na literatura (DAIGGER; REDMOND; DOWNING, 2018).

O modelo de Takács, Patry e Nolasco (1991) é baseado na teoria de fluxo sólido para um decantador de área superficial contínua, dividido em n camadas, alimentado por um dispositivo de distribuição até a camada de alimentação FL (*feed layer*), a partir da qual o fluxo é dividido em ascendente (J_{up}), até a calha de coleta do efluente, e descendente (J_{dn}), até a retirada de lodo para recirculação. Através do balanço de massas, os fluxos de entrada, saída e entre as camadas são calculados. A entrada de sólidos é expressa para vazão da ETE somada à vazão de recirculação, multiplicada pela concentração de sólidos suspensos. O fluxo de saída é calculado pela vazão de recirculação multiplicada pela concentração de sólidos do lodo. A saída do efluente final é expressa pela vazão da ETE multiplicada pela concentração de sólidos do efluente. A Figura 5 representa o esquema do modelo de decantador em ' n ' camadas.

Figura 5 – Modelo de decantador em camadas de fluxo vertical



Fonte: Adaptado de Takács, Patry e Nolasco (1991, p. 1265).

A transferência de sólidos entre uma camada e outra é calculada através de um balanço de massas de dois termos: um convectivo e outro gravitacional. O termo gravitacional tem como fundamento a equação de Vesilind ajustada para incorporar a sedimentação em zona impedida (quando as forças inter-particulares impede a sedimentação), expressa da seguinte forma:

$$v_{sj} = v_0 e^{-r_h X_j^i} - v_0 e^{-r_p X_j^i}; \quad 0 \leq v_{sj} \leq v'_0 \quad (55)$$

Sendo:

v_{sj} : velocidade de sedimentação das partículas sólidas na camada j , em m/d;
 r_h : parâmetro característico de sedimentação da zona de sedimentação impedida, em m^3/g ;

r_p : parâmetro característico de sedimentação para concentração baixa de sólidos, em m^3/g ;

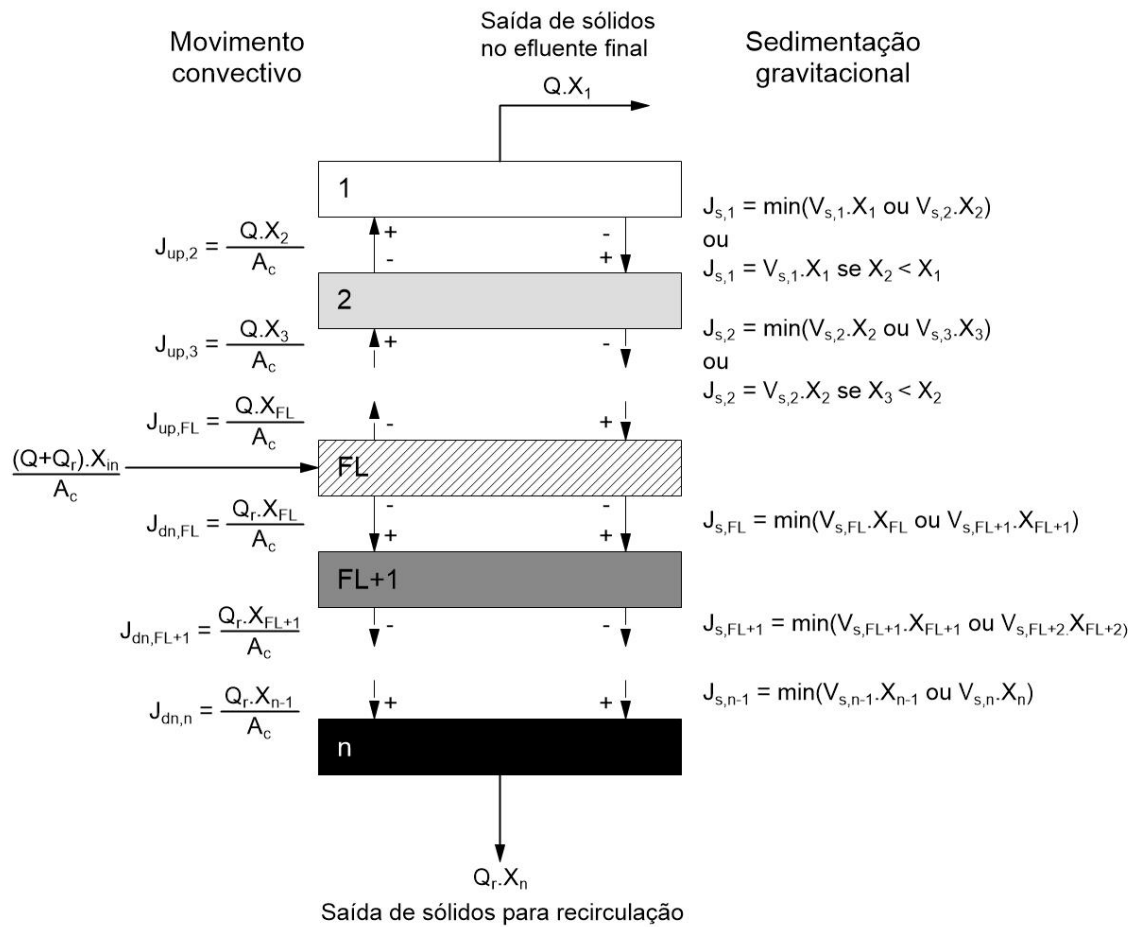
$X_j^* = X_j - X_{min}$; X_j : concentração de sólidos na camada, em g/m^3 ; X_{min} : concentração mínima de sólidos atingível na camada, em g/m^3 , sendo $X_{min} = f_{ns} \cdot X_{in}$, sendo X_{in} a concentração de sólidos suspensos na entrada do decantador, em g/m^3 , e f_{ns} a fração não sedimentável de X_{in} ;

v'_0 : máxima velocidade de sedimentação resultante, em g/m^3 .

O termo convectivo do modelo reflete a vazão do fluxo vertical, considerando apenas a hidráulica aplicada à concentração de sólidos em cada camada. O fluxo de massa de sólidos é expresso pela vazão vertical J da camada multiplicada pela concentração X . Conforme ilustrado na Figura 6, para as camadas acima da alimentação FL (em cinza claro), o fluxo convectivo entre elas será para cima (*up*) calculado pela vazão Q multiplicada pela concentração X de sólidos da camada anterior. Para as camadas abaixo da alimentação FL (em cinza escuro), o fluxo será para baixo (*dn – down*) calculado pela vazão de recirculação Q_r multiplicada pela concentração X de sólidos da camada anterior.

Observa-se que o fluxo idealizado para este modelo de decantador é do tipo pistão, em que as camadas acima da camada hachurada FL (em cinza claro), são referidas como compartimentos de clarificação, enquanto as inferiores (em cinza escuro), são referidas como compartimentos de adensamento de lodo (BAKIRI; CHEBLI; NACEF, 2012). Os termos referentes ao movimento convectivo são somados ao cálculo da sedimentação gravitacional, expresso pela Equação 55 multiplicada pela concentração de sólidos da camada em questão (observadas as condições expressas na Figura 6), respeitados os sinais + e – indicados junto às setas que representam o sentido do fluxo.

Figura 6 – Balanço de sólidos através das camadas do decantador



Fonte: Adaptado de Takács, Patry e Nolasco (1991, p. 1266).

Em suma, o modelo de Takács, Patry e Nolasco (1991) impõe várias simplificações à decantação, especialmente quanto ao fluxo uni-dimensional. Além disso, o modelo versa exclusivamente quanto a questão de transferência de massas, sem levar em consideração reações bioquímicas que acontecem na unidade, cujo tempo de detenção hidráulica chega a ser superior ao do reator aeróbio. Novos estudos versaram sobre modelos de decantação nos anos subsequentes, com bons progressos (BÜRGER; KARLSEN; TOWERS, 2005; DE CLERCQ *et al.*, 2008; GUJER, 2008; KREBS, 1995; PLÓSZ *et al.*, 2007; TAKÁCS, 2008), em especial os que incorporam CFD a modelos bioquímicos (CLIMENT *et al.*, 2018b). No entanto, o modelo de Takács, Patry e Nolasco (1991) ainda tem sido amplamente utilizado, em parte devido à sua disponibilidade em softwares computacionais, mas também em razão do foco preferencial dos modeladores nos processos biológicos que ocorrem no reator de lodos ativados (PLÓSZ *et al.*, 2011, p. 1728).

2.4 Iniciativas recentes e tendências em modelagem de lodos ativados

A IWA, atualmente através do Grupo de Especialistas (*Specialists Group*), vinculado ao GMP-TG, tem como objetivo aprimorar diversos aspectos de modelagem e simulação, incluindo algoritmos de otimização e predição, ferramentas computacionais para análise e suporte a decisão, análise de incertezas, experimentos de projeto e modelagem global. (INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION, 2016). Segundo levantamento realizado pelo Grupo de Especialistas, a tecnologia está alterando a forma de se encarar os processos de tratamento de esgoto, passando do caráter de remoção ao de “recuperação” (por exemplo, de nutrientes) (XIAO *et al.*, 2016) e inclusive de “produção” (por exemplo, biogás e bioplásticos) (KARTAL; KUENEN; VAN LOOSDRECHT, 2010).

Lizarralde *et al.* (2018, p. 149) consideram que as “estações de tratamento de águas residuárias” (*wastewater treatment plant – WWTP*) estão mudando para “estações de recuperação de recursos da água” (*water resource recovery facilities – WRRF*) com o advento de tecnologias de recuperação de material orgânico, nutrientes e energia. Nesse ensejo, os novos modelos, que fundamentalmente são dedicados a remoção de nutrientes, aeração e produção de lodo, deverão considerar conjuntamente as transformações bioquímicas, físico-químicas, reações químicas e produção de energia, num contexto da estação de tratamento de modo global, incluindo processos de precipitação-redissolução, transferência gás-líquido, reações ácido-base, entre outros. (LIZARRALDE *et al.*, 2018, p. 150-151).

Os modelos ASM ainda carecem de uma abordagem adequada de processos físico-químicos envolvidos no tratamento de esgotos (INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION, 2016), com limitações devido a descrições simplistas, sem consideração à precipitação de minerais sólidos (KAZADI MBAMBA *et al.*, 2015). O pH é um dos parâmetros mais importantes em processos biológicos/químicos e, portanto, os futuros modelos devem promover sua adequada consideração em termos de, por exemplo, recuperação de P como fertilizantes, digestão anaeróbica de águas salinas, nitrificação/desnitrificação de águas com alta concentração de N e remoção biológica de P. (BATSTONE *et al.*, 2012). Além disso, as interações entre P e outros componentes, como Ca, Mg e Fe, requerem a consideração de condições não ideais em termos de iônicos. (KAZADI MBAMBA *et al.*, 2015; SOLON *et al.*, 2015). Nesse contexto, um dos novos Grupos de Tarefas da IWA – Grupo de Trabalho sobre

Estrutura Físico-Química Generalizada (*Task Group on Generalized Physicochemical Framework*) – está dedicado a estudos de novos modelos para que envolvam os aspectos físico-químico complexos presentes no tratamento de esgotos. (INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION, 2016)

Modelos que combinam os parâmetros cinéticos e o comportamento dinâmico dos fluidos têm sido objeto de pesquisas com o advento da Dinâmica Computacional de Fluidos (*Computational Fluid Dynamics – CFD*). (NOPENS *et al.*, 2014; VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). Nesse tipo de abordagem, a simulação bioquímica de processos é combinada à hidrodinâmica dos reatores e dos decantadores, considerando o comportamento dos fluidos, permitindo que se modele uma curva de distribuição de tempo de retenção hidráulica e perfis de velocidades, possibilitando a análise de elementos internos das unidades, zonas mortas e curtos-circuitos hidráulicos. (BRANNOCK, 2003; BRANNOCK; WANG; LESLIE, 2010; PARK; YOON, 2018). Recentemente, Climent *et al.* (2018) propuseram um modelo híbrido baseado em CFD e no ASM1 (CFD-ASM) para otimizar uma estação de tratamento na qual o reator apresentava mau funcionamento quanto à remoção de N, validando os resultados com as medições experimentais. Segundo o professor Willi Gujer, a complexidade dos modelos biocinéticos atingiram um limite prático, e os avanços futuros estão em modelos com resolução espacial aprimorada, como CFD, bem como na identificação de parâmetros para organismos únicos e modelos integrados. (GUJER, 2006). Segundo Van Loosdrecht *et al.* (2015), a análise espacial por CFD contribuirá para o estudo das limitações da difusão e de gradientes, bem como das interações entre a morfologia bacteriana e da competição por nutrientes, levando a previsões melhores quanto ao acúmulo de lodo e sedimentabilidade. O Grupo de Trabalho em CFD – *Working Group on CFD* –, da IWA, publicou recomendações junto às do GMP-TG visando a aplicação de CFD em modelagens para processos unitários em tratamento de esgotos. (INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION, 2016)

As dificuldades de calibração dos modelos ainda permanece sendo o principal obstáculo em modelagem, sendo realizadas a partir da alteração das taxas de crescimento de microrganismos e parâmetros relativos à afinidade ao substrato, sendo adaptados sem justificativa apropriada e num mero exercício de ajuste, o que reduz a sua capacidade preditiva. (INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION, 2016). Segundo Nopens *et al.* (2014), a razão para isso reside no fato de que alguns processos se encontram super parametrizados, levando a uma complexidade

injustificada de alguns métodos, enquanto outros permanecem simplistas, como por exemplo os modelos de decantação. A maioria dos modelos relativos à decantação primária, ou mesmo referente ao tratamento primário como um todo, não foram atualizados desde a sua concepção inicial. (NOPENS *et al.*, 2014). Outra necessidade se refere à elaboração de modelos combinados ASM com digestão anaeróbia (como o *Anaerobic Digestion Model N. 1 – ADM1*), onde ainda há desafios relativos à descrição dos processos de digestão de lodo tanto em adensadores de lodo quanto em digestores anaeróbios. (BATSTONE *et al.*, 2012; VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015).

Diante as lacunas dos modelos, bem como do conhecimento que ainda não está totalmente consolidado em alguns processos, a IWA formou um Grupo de Trabalho sobre Incerteza de Projeto e Operações – *Task Group on Design and Operations Uncertainty (DOUT)* – gerenciado pelo Grupo de Especialistas, que tem como objetivo a avaliação da incerteza no tratamento de esgotos, identificando as lacunas nos métodos conhecidos. (IWA CONNECT, [s.d.]). Como resultado, são propostos métodos científicos para medir o grau de confiança para a tomada de decisões de projeto e operacionais que envolvam riscos, benefícios e custos, desenvolvendo modelos que incorporem avaliações explícitas de incertezas. (INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION, 2016)

Novas iniciativas também abrangem modelos considerando o sistema como um todo – incluindo a rede de coleta, a estação de tratamento e o corpo receptor, como contemplado pelo pacote Mike Urban, BioWin e o HEC-RAS (US ARMY CORPS OF ENGINEERS, [s.d.]) –, com a vantagem do uso com foco em gerenciamento (VOJINOVIC; ABBOTT, 2017), através do Grupo de Trabalho sobre Gestão Integrada da Água Urbana (*Working Group on Integrated Urban Water Management*). (INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION, 2016). Modelos da emissão de gases de efeito estufa são foco do Grupo de Trabalho Modelagem de emissões de gases de efeito estufa de estações de tratamento esgotos (*Task Group on Modelling of greenhouse gas emissions from wastewater treatment plants*) – (INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION, 2016; VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). Outras tendências em modelagem e avaliação integrada em curso abrangem: sistemas AB, em processos de dois estágios nos quais o estágio-A é destinado à geração de energia, e o estágio-B no tratamento de efluentes aos parâmetros de lançamento; pesquisas em técnicas numéricas, visando melhores eficiências em *software* para solução de

equações diferenciais ordinárias e conjunto multidimensionais de equações algébricas implícitas, lidando com sistemas de equações diferenciais parciais; e projeto de experimentos baseados em metodologia da superfície de resposta (*response surface methodology* – RSM) e regressão simbólica, em que são elaborados sub-modelos de processos unitários avançados para descrever fenômenos complexos bioquímicos e físicos. (INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION, 2016). A técnica de RSM se baseia no uso de uma sequência de experimentos estatisticamente projetados para obter uma superfície que representa a resposta de um processo estudado, sendo proposta por Box e Wilson (1951). A regressão simbólica é uma análise de regressão que procura num dado espaço de expressões matemáticas a combinação delas para produzir uma equação que descreva um determinado fenômeno, em algoritmo baseado em inteligência artificial, sem que se conheça a natureza do fenômeno físico em questão. (SCHMIDT; LIPSON, 2009).

A respeito de técnicas de inteligência artificial, com o avanço da capacidade dos computadores pessoais, a sua aplicação tem adquirido espaço nos mais variados campos, inclusive em modelagem de lodos ativados. Diversos estudos propuseram a modelagem de estações de tratamento, sem a utilização de qualquer modelo ASM ou outro modelo determinístico. Outros propuseram o uso de técnicas como auxílio da calibração de modelos ASM, ou como uma combinação de técnicas, como Redes Neurais Artificiais, Lógica Difusa e outras técnicas combinadas. (CÔTÉ *et al.*, 1995; LEE *et al.*, 2002; GÜÇLÜ; DURSUN, 2008; YANG *et al.*, 2014; KESKITALO; LEIVISKÄ, 2015; DAI *et al.*, 2017; PANG *et al.*, 2019). Por outro lado, cabe considerar que a principal desvantagem do uso de técnicas como ANN, por não levar em conta as reações bioquímicas envolvidas no processo, é a dificuldade de se visualizar as relações de causa e efeito obtidas no modelo, ao que é atribuído o termo *black-box* (BAGHERI *et al.*, 2015; KESKITALO; LEIVISKÄ, 2015).

2.5 Softwares

A complexidade dos modelos de lodos ativados, que utilizam equações diferenciais em relações não lineares entre diferentes processos bioquímicos e uma quantidade considerável de parâmetros e processos, exige a utilização de *softwares* capazes de realizar soluções numéricas para equações intrincadas entre si e, dessa forma, realizar a simulação do tratamento de efluentes por lodos ativados. (KIM *et al.*,

2019). O *software* de simulação permite a experimentação de diversas configurações para um projeto de uma ETE, em diferentes graus de complexidade, numa maneira que dificilmente seria possível com equações algébricas de balanços de massas. (AYESA ITURRATE; LARREA URCOLA, 2005).

Softwares de simulação que incorporam os ASM existem desde o início dos anos 1990, porém a implementação prática dos modelos demorou mais para ocorrer, possivelmente devido à falta de confiança inicial e entendimento destes. (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). A partir das pesquisas com aplicação dos modelos, especialmente após a publicação do relatório consolidado com todos os modelos ASM (HENZE *et al.*, 2000), e conseqüentemente o aumento do número de publicações que ocorreu a partir dos anos 2000 (VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015), o desenvolvimento de *softwares* comerciais evoluiu. Hoje em dia, a sofisticação dos *softwares* comerciais tem proporcionado a elaboração de projetos baseados em abordagem sistêmica que representam a hidrodinâmica do reator combinado com os modelos matemáticos. (LE MOULLEC *et al.*, 2011).

Cabe esclarecer a diferença entre um modelo de lodos ativados e um modelo de estação de tratamento. Este consiste num conjunto de tanques de lodos ativados interligados entre si ou a decantadores em processos aeróbios, anóxicos ou anaeróbios, incluindo modelagem hidráulica e modelo de transferência de oxigênio, enquanto o primeiro expressa o conjunto de equações diferenciais que representam as reações bioquímicas que ocorrem em lodos ativados. (GERNAEY *et al.*, 2004). De forma geral, os *softwares* comerciais são mais completos em termos de processos que evoluem uma ETE, incluindo desidratação de lodos e processos físico químicos, enquanto os *softwares* de uso acadêmico são mais restritos aos modelos de lodos ativados e à cinética das reações bioquímicas envolvidas. Os *softwares* do tipo freeware geralmente apresentam funcionalidade limitada, interface menos flexível e carecem de suporte técnico do desenvolvedor. (ANDRAKA *et al.*, 2018)

O uso de um *software* ou pacote computacional dotado de um modelo numérico que, utilizando equações matemáticas, representam uma determinada situação real (como, por exemplo, um processo bioquímico), consiste em um ato de “simular” essa situação da vida real – portanto os *softwares* também são chamados de “simuladores”. (RIEGER *et al.*, 2013). Nesse contexto, “modelos” e “simuladores” são distintos na medida em que um simulador incorpora um modelo para representar o funcionamento de um processo real. (ENVIROSIM ASSOCIATES LTD., 2017; RIEGER *et al.*, 2013).

Um dos primeiros *softwares* que incorporou os modelos de lodos ativados foi o ASIM, desenvolvido pela *Swiss Federal Institute for Water Resources and Water Pollution Control*, EAWAG, em Dübendorf, Suíça, do qual participou o Prof. Willi Gujer (EAWAG, [s.d.]), integrante do *Task Group*. A versão mais difundida é a 3.0, de 1994 (SÁNCHEZ RAMÍREZ; MEJÍA FAJARDO; AMOROCHO CRUZ, 2015), não tendo caráter comercial até a presente data. Na realidade, no artigo de apresentação do *software*, Gujer e Larsen (1995) afirmam que o programa tem caráter didático, mas que tem potencial suficiente para auxiliar um profissional na atividade de projeto.

O *software* contempla todos os modelos da IWA e propicia ao usuário escolher os parâmetros cinéticos e modelar as unidades de tratamento de modo intuitivo e simples, podendo incluir até dez reatores em série. (EAWAG, [s.d.]). Por outro lado, comparativamente com outros modelos comerciais, a plataforma é simples e carece de ferramentas para simular operações mais sofisticadas. O *software* continua em atualização, encontrando-se na versão 5, de 2016, sendo desenvolvido um módulo para digestão anaeróbia de lodo. (EAWAG, [s.d.]).

Outro *software* pioneiro é o BIOWIN, desenvolvido pelo Prof. Peter Dold na Universidade de McMaster, no Canadá, Fortran, incorporando inicialmente o modelo elaborado na Universidade da Cidade do Cabo (UCT) junto com os professores Gerrit van Rooyen Marais e George Ekama. (SÁNCHEZ RAMÍREZ; MEJÍA FAJARDO; AMOROCHO CRUZ, 2015). Atualmente, o *software* incorpora o modelo de Barker e Dold (1997) e os ASM, sendo de propriedade da EnviroSim Associates, do Canadá, estando na versão 6.0. O custo da licença perpétua varia de US\$ 8.000 a US\$ 10.000; não há versão de avaliação disponível. (ENVROSIM ASSOCIATES, [s.d.]). Contempla 47 processos incluindo digestão anaeróbia, fermentação e digestão aeróbia e anaeróbia, produção de metano, interação de processos físico-químicos, decantação primária e secundária, desidratação de lodo e desinfecção. (LIWARSKA-BIZUKOJC; BIERNACKI, 2010).

O GPS-X foi lançado em 1991 sendo resultado de pesquisa da Universidade de McMaster, em Hamilton, Canadá, com a participação dos pesquisadores Imre Takacs (atual CEO da empresa Dynamita, responsável pelo *software* SUMO) e Gilles Patry, sendo a versão comercial desenvolvida pela empresa canadense Hydromantis. (OLSSON *et al.*, 2014). O *software* incorpora, além dos modelos ASM da IWA, modelos próprios, quais sejam: Mantis, sendo baseado no ASM1 com modificação na descrição da desnitrificação aeróbia; 2-Step Mantis, sendo modificação do modelo

anterior com nitrificação em duas fases; e *New General*, baseado no ASM1 combinado com o modelo de Barker e Dold (1997). (HYDROMANTIS, 2020; SÁNCHEZ RAMÍREZ; MEJÍA FAJARDO; AMOROCHO CRUZ, 2015). Apresenta ambiente modular multifuncional para simulação de estações municipais e industriais, permitindo gerar esquemas de planta piloto sem limite de tamanho, com ferramentas para comparação de dados reais e simulados, gerando relatórios estatísticos. (NASR *et al.*, 2011).

Atualmente, o GPS-X encontra-se na versão 8.0.1 e inclui o modelo ADM1 da IWA e modelos para remoção biológica de S, geração de gases de efeito estufa (Mantis 3), efluentes industriais (Mantis IW) e uma ampla biblioteca de processos incluindo tanque de equalização, decantadores, caixas de areia, centrífugas, digestor anaeróbio de lodo, unidades de dosagem química, entre outros. (HYDROMANTIS, 2020). O *software* é de uso comercial e custa atualmente de US\$ 3.200 a US\$ 8.900 por ano, dependendo das ferramentas escolhidas no pacote, havendo versão de demonstração disponível. (HYDROMANTIS, 2020). É considerado o principal simulador de ETE do mundo, tendo sido objeto de aplicação em pesquisas em diversas estações. (NASR *et al.*, 2011; ONTARIO WATER CONSORTIUM, [s.d.]).

O *software* EFOR também foi um dos primeiros programas desenvolvidos para simular lodos ativados, entre o fim dos anos 1980 e início dos 1990, tendo sido iniciado por um grupo de pesquisadores da Universidade Técnica da Dinamarca e pela empresa VKI, a qual posteriormente integrou a empresa DHI (*Danish Hydraulic Institute*), responsável pelo *software* WEST. (SÁNCHEZ RAMÍREZ; MEJÍA FAJARDO; AMOROCHO CRUZ, 2015). Após a sua aquisição do *software* pela DHI, em 2000, o EFOR acabou sendo incorporado à família de outros *softwares* desta companhia, sendo descontinuado a partir de 2002. (MP ASSOCIATES, [s.d.]).

O DHI Group possui 50 anos, com sede em mais de 30 países, tendo matriz na cidade de Hørsholm, Dinamarca, atuando fundamentalmente na área de água, energia, ecossistema, meio ambiente e segurança ambiental. (DHI, [s.d.]). Dentre as soluções para água, desenvolvem um pacote de *software* sob a denominação MIKE *Powered by* DHI, no qual se insere o *software* WEST (*World Wide Engine for Simulation, Training and Automation*), originalmente desenvolvido pela empresa Hemmis N. V. de Kortrijk, na Bélgica, no início dos anos 1990, junto à Universidade de Ghent, Bélgica. (SÁNCHEZ RAMÍREZ; MEJÍA FAJARDO; AMOROCHO CRUZ, 2015; VANHOOREN *et al.*, 2003). A versão mais completa se chama WEST+ e

contempla todos os modelos da IWA, inclusive o ADM1, bem como um modelo para Anammox, com capacidade para modelar processos variados como físico-químicos e recuperação de nutrientes e unidades como decantadores, valos de oxidação, lodos ativados de leito fixo, reatores biológicos por membrana (MBR), reatores em batelada sequencial (SBR), desidratação de lodo, tanques de dosagem e desinfecção. (DHI GROUP, 2019) . O *software* integra o pacote Urban Utilities, custa € 750 por mês e não possui versão de avaliação. (DHI GROUP, [s.d.]).

O *software* SIMBA foi desenvolvido pela IFAK (*Institut für Automation und Kommunikation*), de Magdeburg, Alemanha, em conjunto com a Otterpohl Wasserkonzepte em Barleben, Alemanha. Baseado na plataforma Simulink/Mathlab (MATHWORKS, [s.d.]), possibilita ao usuário a modelagem por blocos e a edição de processos bioquímicos através de um editor do tipo notação de matriz, tal como os modelos ASM. (SCHÜTZE; BUTLER; BECK, 2011). O *software* integra os modelos ASM 1, ASM3 e ASM3+BioP, além do modelo de sedimentação primária e secundária de três camadas de lodo da Otterpohl e outros processos, incluindo digestão anaeróbia de lodo, biofilme de leito fixo e SBR. (SCHÜTZE; BUTLER; BECK, 2011). A versão SIMBA#, atualmente na 3.x, não é mais rodado sobre o Simulink, sendo uma versão de instalação *stand alone* que permite, dentre diversas aplicações, a análise do consumo de energia em lodos ativados e a otimização de projeto e operação de estações de tratamento existentes. Preços e versão de avaliação são disponibilizados mediante contato com o distribuidor local. (IFAK, [s.d.]).

O *software* STOAT foi desenvolvido pela WRC (*Water Research Centre*), do Reino Unido, como parte de um programa de gestão da contaminação urbana no país, sendo a primeira versão lançada em 1994. (SÁNCHEZ RAMÍREZ; MEJÍA FAJARDO; AMOROCHO CRUZ, 2015). O programa contempla todos os modelos ASM1, ASM2d e ASM3 da IWA e processos como tanques de equalização, decantadores primário e secundário, valos de oxidação, SBR compartimentado, filtros biológicos, rotatores biológicos de contato (RBC), desinfecção, flotação por ar dissolvido e incineração de lodo. (WRC PLC, 2012). O *software* é freeware para pesquisas, sendo uma alternativa viável para uso no presente projeto de pesquisa.

Como última menção, o *software* SUMO, da Dynamita – empresa com sede em Nyons, França –, é um dos mais completos programas comerciais, contemplando, além dos modelos da IWA, os modelos ASM2d+TUD, ASM3+BioP e modelos próprios de produção de lodo, nitrificação/desnitrificação one-step, anammox, Bio-P, remoção

biológica de S, fermentação e digestão anaeróbia, recuperação de nutrientes, geração de gases de efeito estufa e dosagem de metanol. (DYNAMITA, 2019). Os processos simulados pelo *software* incluem remoção química de P, transferência de gases, valores de oxidação, SBR, fermentadores, digestores anaeróbios, MBR, lodos ativados granulares, decantadores primário e secundário, centrífugas, filtros e processos de hidrólise térmica. O pacote custa € 1800 por ano e tem versão de demonstração completa disponível, porém sem opção de salvar ou exportar o modelo. (DYNAMITA, 2019).

O Quadro 7 resume as características de cada *software* mencionado, os quais são os principais disponíveis para simular lodos ativados. (ANDRAKA *et al.*, 2018; OLSSON *et al.*, 2014; VAN LOOSDRECHT *et al.*, 2015). Como observado, todos contemplam os modelos ASM, portanto, todos seriam viáveis para a simulação pretendida no presente estudo, devendo ser escolhida alguma opção que tenha versão de avaliação, demonstração ou educacional para a pesquisa.

Quadro 7 – Principais *softwares* disponíveis para modelos de lodos ativados

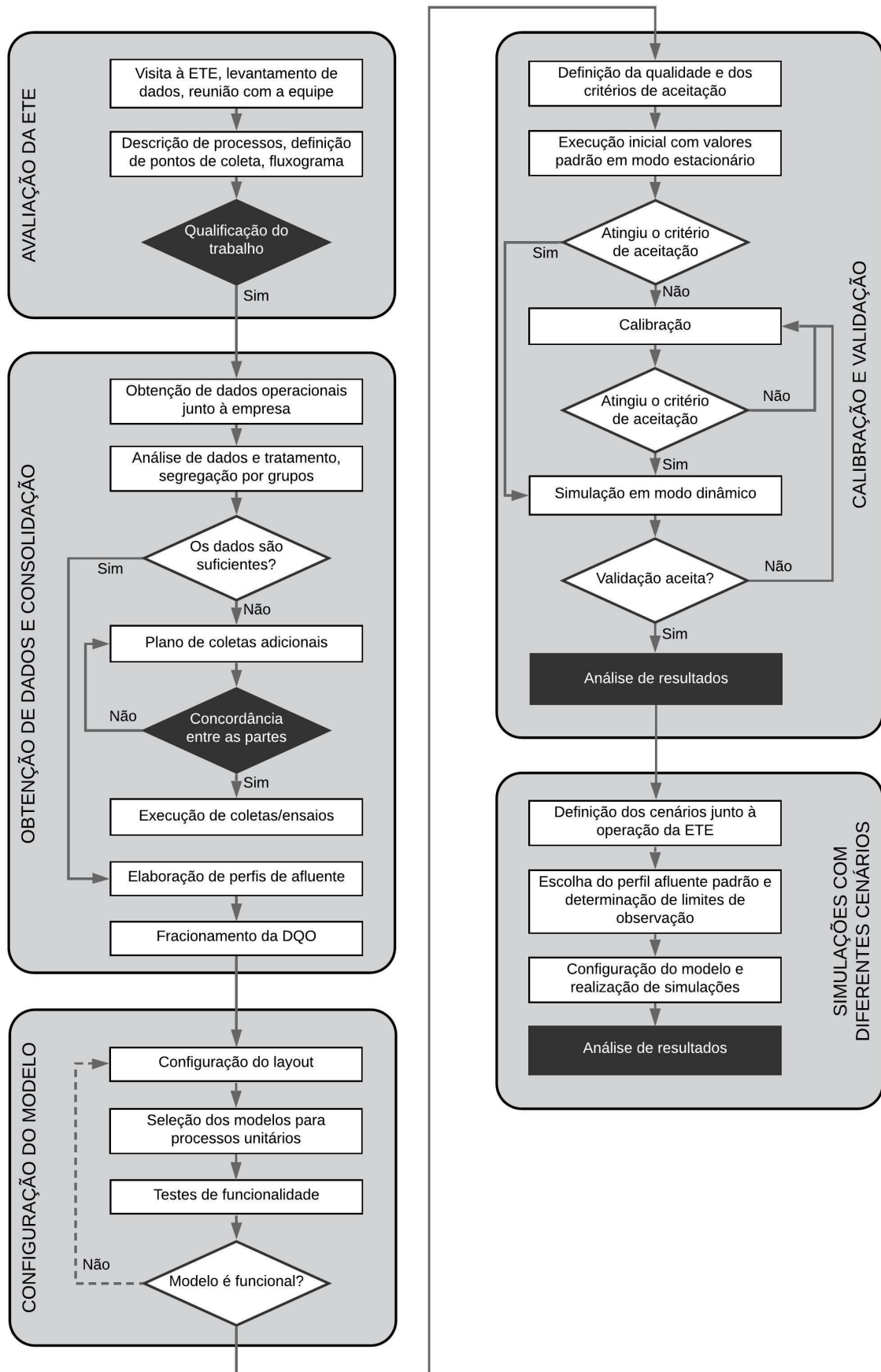
Software	Organização	Head Office	Versão	Ano	Modelos	Alguns Adicionais	Preço licença	Referência
BioWin	Envirosim Associates Ltd.	Hamilton, Canada	6.0	2019	ASM 1, 2, 2d, 3; ADM; Baker & Dold; Cinética de Monod e Haldane	Remoção química de P; Remoção biológica de S; Matéria orgânica industrial; Anammox; Fe Redox; Recuperação de P; Celulose; Processos físico-químicos; Produção de metano; Decantadores primário e secundário; Desidratação de lodos; Desinfecção	US\$ 8.000 sem controlador; US\$ 10.000 com controlador (perpétuas)	Envirosim (2020)
GPS-X	Hydromantis	Hamilton, Canada	8.0.1	2019	ASM; ADM1; Mantis2; Mantis2S (Remoção de S); Mantis3 (gases de efeito estufa)	MantisIW (esgoto industrial); Biblioteca de processos (tanque de equalização, decantadores, caixas de areia, centrífugas, digestor de lodo, etc.); Unidades de dosagem química; Reator de fluxo de pistão e de mistura completa	De US\$ 3.200 a 8.900 por ano; Demonstração disponível	Hydromantis (2020)
SIMBA#	IFAK – Institut für Automation und Kommunikation	Magdeburg, Alemanha	3.x	2019	ASM 1, 3, 3+BioP	Digestão anaeróbia de lodo; Processo de biofilme de leito fixo; Decantador primário simples; Decantador secundário de 3 camadas de lodo	Versão de avaliação disponível	IFAK (2020)
SUMO	Dynamita Process Modeling	Nyons, França	19	2019	ASM1; ASM2d; ASM2d+TUD; ASM3; ASM3+bio-P; Barker-Dold; ADM1; Modelos próprios (Produção de lodo; One step nitrification/denitrification; Anammox; Bio-P; Remoção biológica de S; Fermentação e digestão anaeróbia; Gases de efeito estufa)	Remoção química de P; Transferência de gases; Valos de oxidação, SBR, fermentadores, digestores anaeróbios, MBR, lodos ativados granulares; Decantadores primário e secundário; Centrífugas; Filtros; Processos de hidrólise térmica; Recuperação de nutrientes; Dosagem de metanol	€ 1800/ano; demonstração disponível (sem opção salvar ou exportar)	Dynamita (2020)
WEST	DHI	Horsholm, Dinamarca	NI	2019	ASM 1, 2, 2d, 3; ADM1; Anammox	Tanque de equalização; Decantadores; Valos de oxidação; Integração com MBBR e leito fixo; SBR; Tratamento de lodo; Unidades de dosagem química; Desinfecção; Recuperação de nutrientes	Disponível West+ no pacote Urban Utilities (€ 750 /mês)	DHI (2020)
ASIM	Eawag Aquatic Research	Dübendorf, Suíça	5	2016	ASM 1, 2, 2d, 3	Varição de carga orgânica; simulação de 10 reatores em série; SBR; digestão anaeróbia de lodo em desenvolvimento	Freeware para pesquisas	EAWAG (2020)
STOAT	WRC – Water Research Centre	Swindon, Reino Unido	NI	2012	ASM	Tanque de equalização; Decantadores; Valos de oxidação; SBR compartimentado; Filtros biológicos; Rotatores biológicos de contato; Desinfecção; Flotação por ar dissolvido; Incineração de lodo	Freeware para pesquisas	WRC PLC (2020)

3 METODOLOGIA

A metodologia empregada no presente baseou-se parcialmente no Protocolo Unificado do GMP-TG (*Good Modelling Practice – Task Group*), da International Water Association – IWA (RIEGER *et al.*, 2013), de acordo com o fluxograma apresentado na Figura 7 e de acordo com as seguintes etapas:

- Avaliação da ETE e definição dos pontos de coleta de amostras;
- Obtenção de dados operacionais e consolidação, incluindo;
 - Realização de coletas de amostras e ensaios;
 - Definição de perfis diários;
 - Fracionamento da DQO;
- Configuração do modelo;
- Calibração e validação;
- Simulação da operação da ETE utilizando diferentes cenários operacionais.

Figura 7 – Fluxograma de trabalho



3.1 Avaliação da ETE e definição dos pontos de coleta de amostras

A ETE selecionada para o presente trabalho é a Estação de Tratamento São João-Navegantes, do Departamento Municipal de Água e Esgoto de Porto Alegre (DMAE). Está localizada no Bairro Navegantes, na Av. A. J. Renner, n. 495, em Porto Alegre/RS, em uma área de aproximadamente 7,5 ha.

A ETE São João-Navegantes trata os esgotos sanitários de todo o Sistema de Esgotos Sanitários Navegantes (SES Navegantes), localizado na região noroeste de Porto Alegre, abrangendo integralmente 16 bairros e parcialmente outros oito bairros, conforme a Figura 8, numa abrangência de 3.622,75 ha, atendendo uma população de 184.800 habitantes, representando 13,11% da população total da cidade. A malha de redes e coletores tronco do SES Navegantes em operação em 2013 era de 307,75 km, restando a implantação de 232,46 km para a universalização do sistema. (DEPARTAMENTO MUNICIPAL DE ÁGUA E ESGOTO, 2013). A estação também trata lodo de fossas sépticas, aportado diariamente por caminhões do tipo limpa-fossa em frequência variável.

A ETE São João-Navegantes utiliza lodos ativados convencional, dotada de tanques de aeração com ar difuso, recirculação de lodo, decantadores secundários, sistema de adensamento de lodo por centrífugas, tratamento de lodo por digestão anaeróbia e desidratação final por centrífugas, com uma capacidade implantada para tratar uma vazão nominal de 444 L/s. Como emissário final da ETE tem-se o coletor geral pluvial do Bairro Humaitá, atendido por casa de bombas, cujo lançamento final é efetuado junto ao Delta do Rio Jacuí, no Saco do Cabral, próximo à foz do Rio Gravataí. (DEPARTAMENTO MUNICIPAL DE ÁGUA E ESGOTO, 2013, p. 72-73).

A ETE foi projetada para implantação em três módulos com capacidade para tratar nominalmente 222 L/s cada, dos quais dois encontram-se implantados. Segundo o Plano Municipal de Saneamento Básico, era prevista a contratação do terceiro módulo juntamente com melhorias como:

- a) Modificação do sistema de adensamento do lodo;
- b) Ampliação do dispositivo de *bypass* para limitar a vazão de esgoto afluyente nos períodos de grande contribuição de esgoto pluvial;
- c) Modificação do sistema de difusão de ar dos tanques de lodos ativados;
- d) Execução de unidades de tratamento complementar visando a remoção de nutrientes e desinfecção.

Figura 8 – SES Navegantes, em Porto Alegre, atendido pela ETE São João-Navegantes



Fonte: Departamento Municipal de Água e Esgoto (2013, p. 62).

Atualmente, não há previsão para a implantação das melhorias previstas no Plano Municipal de Saneamento Básico. Observa-se que as melhorias mencionadas envolvem objetivos relativos à produção de lodo, ao excesso de vazão por conta de chuva, ao sistema de aeração e à remoção de nutrientes. Nas simulações realizadas, avaliou-se cenários visando algumas sobrecargas no sistema de modo a se avaliar a os efeitos no efluente tratado.

3.1.1 Operação da ETE e Definição dos Pontos de Coleta de Amostras

A ETE São João-Navegantes foi vistoriada em visitas durante os meses de janeiro-março/2020. O sistema opera em fluxo contínuo e, conforme a Figura 9, o efluente passa por um canal de chegada e poço de sucção (1), elevatória de esgoto bruto (2), desarenador (3), quatro reatores aeróbios (4), quatro decantadores secundários (5), dois digestores anaeróbios de lodo (6) e sistema de desidratação de lodo.

Figura 9 – Implantação da ETE São João-Navegantes



Fonte: Google Earth (2020).

O afluente bruto é encaminhado pelo sistema de bombeamento a um canal de chegada com gradeamento mecanizado. O poço de chegada do afluente bruto é dotado de vertedouro para *by-pass*, ou seja, o afluente que ultrapassa esta cota não passa pelo tratamento pela ETE e é encaminhado diretamente ao corpo receptor. O afluente bruto é bombeado por uma elevatória de três conjuntos motor-bomba (sendo um reserva) ao poço de chegada para o desarenador.

O desarenador é composto de três módulos de caixas de areia, sendo a areia removida mecanicamente por bombas parafuso, sendo uma para cada módulo. A

areia removida é disposta em caçambas para encaminhamento a aterro sanitário. O efluente do desarenador passa por calhas Parshall e, em seguida, ao partidor dos reatores aeróbios.

Para efeitos de nomenclatura utilizada nos pontos de coleta, adotou-se como ponto “P1-Marrom” o canal a jusante de uma das calhas Parshall do desarenador, onde foram coletadas amostras do afluente bruto do reator aeróbio. A escolha de nomenclatura por cores teve como objetivo facilitar o entendimento da equipe do DMAE que auxiliou na coleta de amostras. A cor marrom remete ao esgoto bruto afluente. A Figura 10 mostra as calhas Parshall do desarenador, de onde foram coletadas amostras do afluente bruto.

Figura 10 – Calhas Parshall do desarenador (ponto de coleta “P1-Marrom”)



Fonte: Registrado pelo autor.

O afluente dos reatores é encaminhado ao um canal distribuidor no qual ocorre a mistura com o lodo recirculado dos decantadores secundários. O efluente é tratado por um conjunto de quatro reatores aeróbios, em dois módulos de dimensões de 30x30 m cada, totalizando o volume útil de 8.100 m³. O conjunto possui 2.880 difusores de ar dispostos no fundo das unidades, em uma distribuição uniforme. A Figura 11 mostra um dos reatores (mais ao sul), cuja porção central foi denominada

como ponto “P2-Verde” para coleta de amostras de lodo. A cor verde remete à vida da biomassa ativa do sistema de lodos ativados.

Figura 11 – Reator de lodos ativados (ponto de coleta “P2-Verde”)



Fonte: Registrado pelo autor.

O efluente do reator 1 é coletado por calha de coleta, sendo o local denominado como ponto “P3-Laranja” para coletas de amostras. A cor escolhida remete ao esgoto tratado no reator, que passou da cor marrom para laranja após ação da biomassa, no imaginário comum, sempre com o objetivo de facilitar o entendimento pela equipe que auxiliou na coleta – muito embora as cores não tenham referência alguma à realidade do processo.

Em etapa seguinte, o efluente é distribuído a um conjunto de quatro decantadores secundários retangulares, cada um com dimensões de 15x48 m, em um volume útil total de 11.520 m³. O lodo sedimentado é aspirado por sistema mecanizado que se desloca ao longo do comprimento das unidades. O efluente final é coletado em calhas de coleta dispostas na porção final das unidades, conforme a Figura 12. A calha de coleta do decantador 1 (sul) foi denominada de ponto “P4-Azul”, onde foram retiradas amostras do efluente final tratado. A cor azul remete ao efluente límpido, supostamente adequado para o lançamento no rio.

Figura 12 – Decantadores secundários e calhas de coleta (ponto de coleta “P4-Azul”)



Fonte: Registrado pelo autor.

O lodo aspirado do fundo dos decantadores é bombeado por um conjunto de quatro bombas parafuso (Figura 13), que encaminham o lodo a um canal distribuidor. O canal de retorno de lodo a montante do reator 1 foi denominado de ponto “P5-Preto” para coleta de amostras. A cor preta remete à cor intensa do lodo que retorna ao reator aeróbio. A mistura do lodo ao afluente bruto proveniente dos desarenadores ocorre no encontro dos canais, conforme ilustrado na Figura 14.

O lodo em excesso é retirado do canal de distribuição (a jusante das bombas parafuso) e encaminhado a um sistema de desidratação por centrífugas, sendo após encaminhado a um conjunto de dois digestores anaeróbios de lodo. Foram construídas duas unidades adicional para digestão secundária, as quais encontram-se inoperantes. O efluente dos digestores é encaminhado ao sistema final de desidratação de lodo, sendo, após, dispostos em aterro sanitário.

A Figura 15 representa o esquema geral da ETE São João-Navegantes, sendo identificados os pontos de coleta P1 a P5, referentes às amostragens utilizadas no trabalho (a figura foi elaborada pelo autor com base em um diagrama fornecido pelo DMAE).

Figura 13 – Bombas parafuso para recirculação de lodo



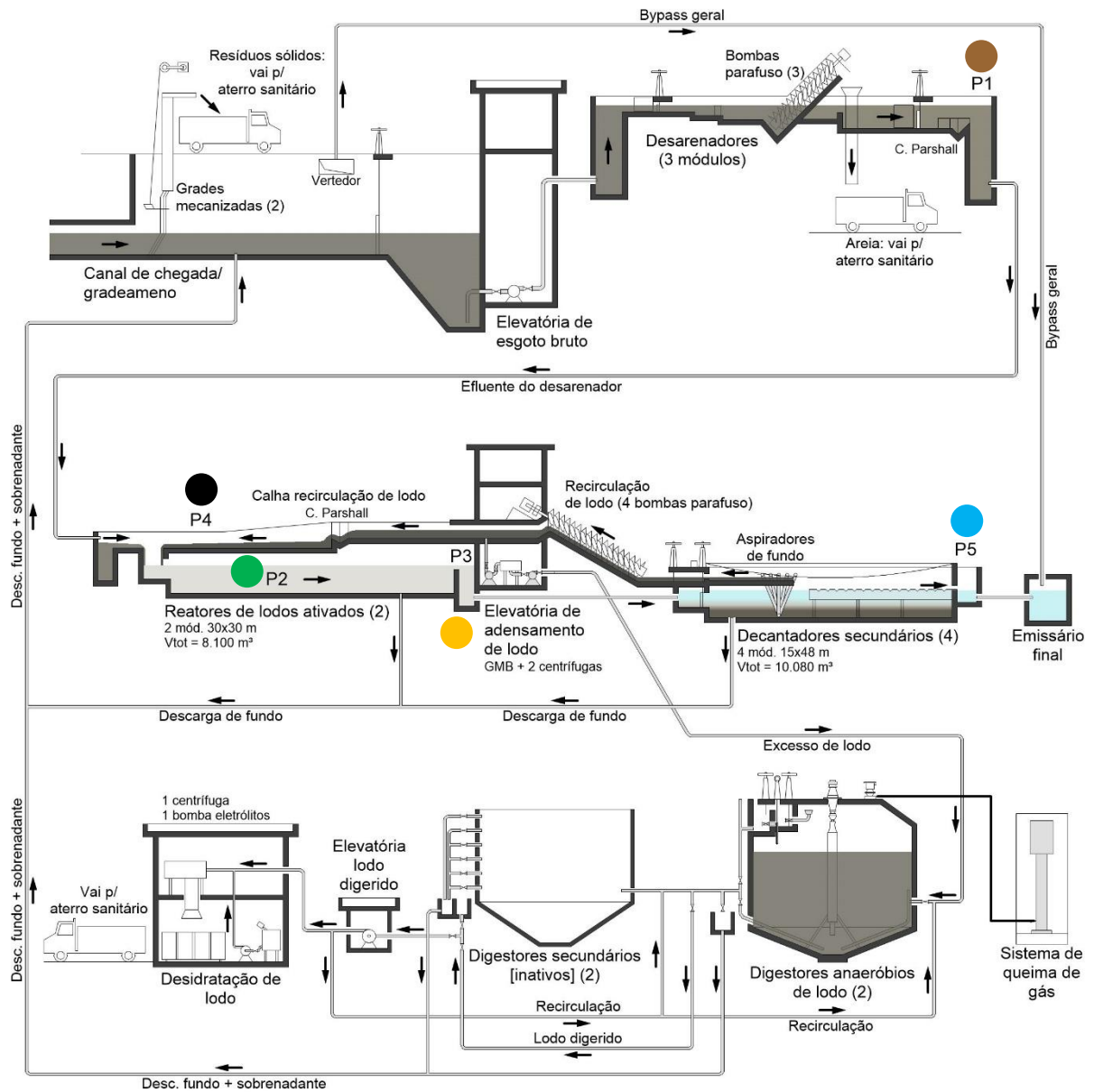
Fonte: Registrado pelo autor.

Figura 14 – Calha de distribuição dos reatores; o lodo recirculado (à direita) se mistura ao afluente bruto (à esquerda). O ponto P5 refere-se ao lodo recirculado



Fonte: Registrado pelo autor.

Figura 15 – Esquema geral da ETE São João-Navegantes e definição dos pontos de coleta de amostras (P1-Marrom, P2-Verde, P3-Laranja, P4-Azul e P5-Preto)



Fonte: Elaborado pelo autor.

3.2 Obtenção de dados operacionais e consolidação

Durante nova inspeção *in loco* e reuniões com a equipe de operação da ETE, foram obtidos os dados históricos do afluente e do efluente tratado em formato de planilha eletrônica, referentes ao período de jan/2006 a jan/2013. Segundo a equipe, não havia dados históricos mais recentes. Na planilha fornecida, constaram resultados de análise do esgoto bruto afluente e do efluente tratado, englobando os seguintes

parâmetros: DBO, DQO, nitrogênio amoniacal, nitrito, nitrato, nitrogênio total, NTK, SST, temperatura e volume de esgoto tratado mensal.

O modelo dinâmico requer a inserção de dados completos quanto ao comportamento do afluente ao longo do dia e quanto aos dados operacionais do sistema, o incluindo o sistema de aeração, a recirculação do lodo e a vazão. Além disso, é necessária a correspondência exata entre dados de afluente bruto e efluente tratado, levando-se em conta o tempo de detenção hidráulica das unidades. Como tais dados não foram disponibilizados, decidiu-se pela realização de coletas adicionais e os respectivos ensaios de laboratório.

Os itens a seguir versam sobre a metodologia para tratamento de dados secundários, fornecidos pelo DMAE, segregados por grupos para obtenção de médias representativas, e quanto às campanhas de coletas de amostras para ensaios em laboratório.

3.2.1 Tratamento de dados secundários e segregação por grupos

Para a estruturação de um modelo estacionário, ou seja, para um esgoto afluente sem variação de vazão e de características, pode-se utilizar valores médios obtidos nos dados secundários fornecidos pelo DMAE. No intuito de se obter um padrão sazonal, os dados foram segregados em faixas, conforme os meses do ano, sendo: janeiro-março, verão; abril-junho, outono; julho-setembro-inverno; outubro-dezembro, primavera. Totalizou-se, assim, quatro faixas de dados.

Para cada faixa, foram calculadas as médias (\bar{X}) e os desvios padrão (s). O coeficiente de variação (CV) foi calculado para cada conjunto de dados analisado, dado pela razão do desvio padrão pela média (s/\bar{X}), em percentual, sendo este o indicador escolhido para analisar a dispersão dos valores, verificando-se se a média obtida é representativa para o conjunto de dados em análise. Para efeitos do presente trabalho, considerou-se que a média é representativa para $CV \leq 20\%$. Para $CV > 20\%$, considerou-se que a faixa tem muita dispersão quanto aos parâmetros, portanto a média não seria um dado representativo para o conjunto.

Alternativamente, realizou-se a identificação das datas cujos dados referentes a DBO_5 , DQO, nitrogênio amoniacal, NO_3-N , SST e temperatura foram levantados conjuntamente, para afluente bruto e efluente tratado. Em sequência, os dados foram segregados por faixas de DQO do esgoto bruto afluente de maneira a se obter grupos

com menor coeficiente de variação possível. Assim, os dados foram organizados em cinco grupos cujas faixas de DQO afluentes. Utilizando-se o mesmo critério adotado para as faixas sazonais, para um $CV \leq 20\%$, os valores dos parâmetros possuem baixa dispersão, portanto a média foi considerada representativa para o conjunto de dados.

Havendo lacunas nos dados após a segregação por faixas de DQO, adotou-se o seguinte critério para o seu preenchimento:

- NO_3 afluente: considerado igual a 0,00 para todos os casos;
- SST afluente e efluente: considerada a média dos valores disponibilizados, independentemente das lacunas;
- Temperatura do afluente: adotada a temperatura do efluente, quando houve, ou utilizado o valor observado para o mesmo mês em outra amostra;
- Vazão: utilizada a média geral das amostras disponíveis, quando não houver informação de determinada faixa.

Desse modo, para o objetivo de simular a operação da ETE em regime estacionário, foram utilizadas as médias dos parâmetros para faixas de DQO selecionadas, totalizando cinco grupos e, portanto, cinco simulações neste regime. Para a utilização desses dados no modelo ASM3, foi necessário ainda:

- Fracionamento da DQO;
- Determinação das condições iniciais dentro do tanque de aeração;
- Determinação da faixa de aeração do tanque expresso em K_{La} ou em $\text{mg O}_2/\text{L}$;
- Dados complementares como SSV, pH e alcalinidade.

Os procedimentos e critérios adotados para a complementação dessas informações são abordados posteriormente. A consolidação desses dados secundários possibilitou a utilização do modelo ASM3, com o devido tratamento, para simulações em regime estacionário.

Para simulações dinâmicas, tornou-se necessária a realização de campanhas adicionais de coleta e as respectivas análises laboratoriais. Tais análises possibilitaram, inclusive, o preenchimento das lacunas para a simulação com dados

secundários, como as condições iniciais dentro do reator e a alcalinidade do esgoto bruto.

3.2.2 Campanhas de coletas de amostras *in loco* e análises em laboratório

Os dados secundários disponibilizados, embora em quantidade razoável para o período amostrado, não fornecem informações quanto à variação diária das características do afluente e do tratamento, motivo pelo qual optou-se pela realização de campanhas de coleta de amostras *in loco*. De acordo com o tratamento dado ao conjunto de dados, foi possível apenas caracterizar afluentes médios (em faixas de DQO), apropriados para simulações em regime estacionário. Além disso, os dados não forneceram subsídios quanto às características da biomassa, do lodo ou do efluente do reator aeróbio, necessários para uma modelagem com mais qualidade.

Desse modo, a partir de um número mínimo de coletas, sendo quatro por dia para cada ponto indicado na ETE (P1 a P5), para estações do ano distintas, procurou-se desenvolver de um perfil afluente que representasse as variações das características do esgoto ao longo de 24 h e em diferentes climas. No ensejo, foram obtidas as informações faltantes quanto à biomassa e quanto ao efluente do reator aeróbio, além de dados operacionais como vazão de recirculação e vazão de descarte de lodo.

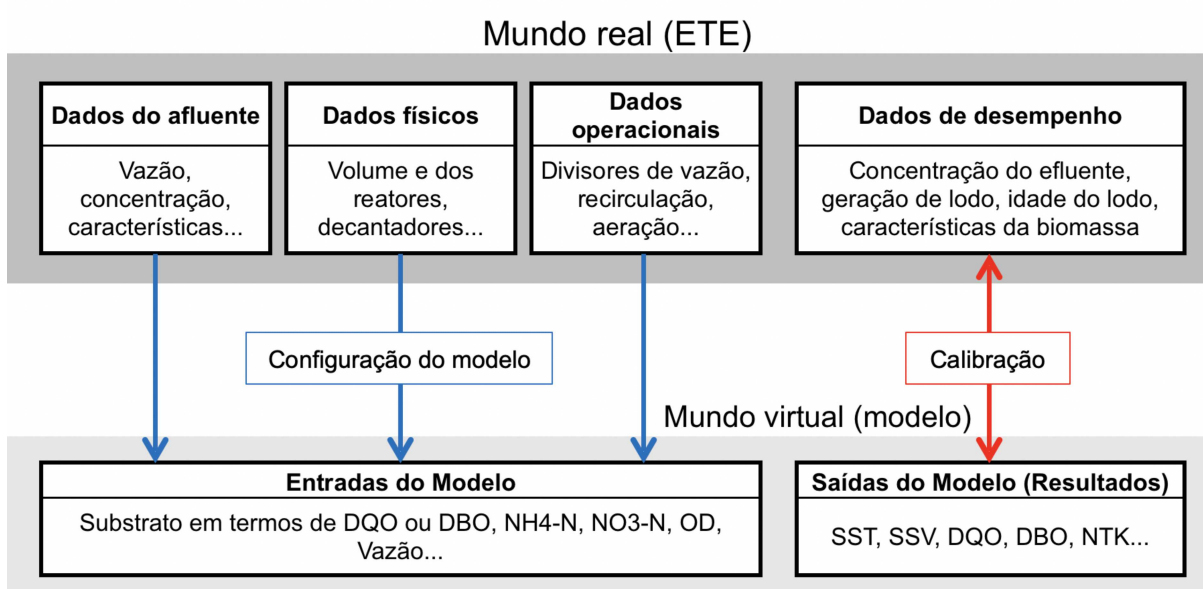
Essa metodologia contrasta com estudos semelhantes em estações mais bem aparelhadas, onde a quantidade e frequência de dados é maior e mais representativa. Em razão da disponibilidade limitada de recursos tanto financeiros (custos de ensaios) quanto físicos (recursos humanos para a realização das coletas em maior frequência e infraestrutura para armazenamento), no presente trabalho, elaborou-se um plano de coletas que propiciasse as informações estritamente necessárias para a simulações, porém abrangendo mais estações do ano possível e na maior quantidade possível.

Os parâmetros obtidos a partir das análises de laboratório limitaram-se aos padrões de monitoramento: DBO₅, DQO, sólidos suspensos, nitrogênio amoniacal, nitrogênio total, NTK, nitrito, nitrato e alcalinidade. Não contando com estrutura para a realização de testes de bancada, para ensaios de biodegradabilidade da DQO, nem com o monitoramento do OD dentro do tanque de aeração, o trabalho assim se aproximou da realidade das estações de tratamento do país. Caso os dados coletados

não fossem suficientes para o estudo, considerar-se-ia, neste trabalho, que os modelos matemáticos não seriam aplicáveis à realidade local.

De modo geral, os dados típicos necessários às simulações são classificados em dados de entrada (parâmetros do esgoto), dados físicos (volumes das unidades e vazões), dados operacionais (separação de fluxos, vazão de recirculação, parâmetros de aeração e dosagem de produtos químicos) e dados de desempenho (produção de lodo e consumo de oxigênio), sucintamente ilustrado no diagrama da Figura 16. Uma boa frequência dos dados implica em maior qualidade para a modelagem, no entanto nem sempre os dados são suficientemente levantados, como no caso presente.

Figura 16 – Tipos de dados necessários à simulação e à calibração



Originalmente, plano previu a realização de quatro campanhas, de um dia cada, uma para cada estação do ano, a começar pelo outono/2020, para que se obtivesse a maior variação possível de parâmetros. Coletou-se uma amostra a cada 6 horas (quatro conjuntos de amostras num período de 24 h), em cada ponto de coleta definido durante a análise da ETE. Para cada dia, sendo cinco pontos localizados na ETE, foram coletadas, portanto, 20 amostras. Para o trabalho integral (todas as estações), totalizou 80 coletas. Como cada amostra demanda mais de um tipo de frasco, o trabalho envolveu mais de uma centena de coletas e a devida armazenagem até a realização dos ensaios. A quantidade, embora expressiva, foi considerada a mínima necessária para uma modelagem apropriada.

O Quadro 8 resume os pontos de coleta definidos, os objetivos e os parâmetros analisados para cada campanha de amostras. As coletas foram realizadas gentilmente pelo pessoal do DMAE, inclusive na madrugada, respeitando os intervalos de horário constantes no planejamento inicial.

Quadro 8 – Pontos de coleta de amostras na ETE e parâmetros analisados

Ponto de coleta	Local	Objetivo	Ensaio
P1-Marrom	Efluente do desarenador	Caracterizar o afluente bruto, sem areia	DQO, DBO5, NTK, NH ₃ -N, NO ₂ , NO ₃ , SST, pH, alcalinidade
P2-Verde	Interior de um reator aerado	Caracterizar o lodo ativado no interior do reator	SST, SSV, pH, alcalinidade
P3-Laranja	Calha de coleta de um reator aerado	Caracterizar o efluente tratado pelo reator aerado	DQO, DBO5, NTK, NH ₃ -N, NO ₂ , NO ₃ , SST, pH, alcalinidade
P4-Azul	Calha de coleta de um decantador secundário	Caracterizar o efluente final; observar desnitrificação no decantador secundário	DQO, DBO5, NTK, NH ₃ -N, NO ₂ , NO ₃ , SST, pH, alcalinidade
P5-Preto	Calha de lodo recirculado	Caracterizar o lodo ativado sedimentado no decantador secundário	SST, SSV, pH, alcalinidade

Considerando o tempo de detenção hidráulica (TDH) do reator aeróbio e do decantador, calculou-se o intervalo necessário entre as diferentes coletas. Considerando a vazão média informada de 250 L/s, a vazão de recirculação de 736 L/s, o TDH do reator aeróbio foi calculado em $8.100 \text{ m}^3 / (0,25 \text{ m}^3/\text{s} + 0,74 \text{ m}^3/\text{s}) = 8.182 \text{ s} = 2,27 \text{ h}$. O TDH do decantador foi calculado em $11.520 \text{ m}^3 / (0,25 \text{ m}^3/\text{s} + 0,74 \text{ m}^3/\text{s}) = 11.636 \text{ s} = 3,23 \text{ h}$. Por conveniência, os valores foram arredondados conforme segue:

- TDH do reator aeróbio: 2,5 h;
- TDH do decantador secundário: 3,5 h.
- TDH total considerado: 6 h.

Sendo o ponto P1-Marrom o início do processo, para um tempo $t = 0$, o efluente do reator aeróbio no ponto P3-Laranja foi coletado 2,5 h após, no tempo $t = 2,5 \text{ h}$, pois considerou-se que a partícula que entrou no reator saiu 2,5 h após. Dentro dessa lógica, o efluente do decantador secundário no ponto P4-Azul foi coletado 3,5 h após

a coleta do ponto P3-Laranja, no tempo $t = (2,5 \text{ h} + 3,5 \text{ h}) = 6 \text{ h}$. As coletas no interior do reator (ponto P2-Verde) e do lodo recirculado (ponto P5-Preto) também ocorreram no tempo $t=0$, sendo o primeiro referente ao estágio inicial do reator e o último referente ao lodo que entra do reator junto com o afluente bruto.

Em suma esse procedimento trouxe conveniência para a coleta das amostras, pois no tempo $t = 0$ foram coletadas amostras em três pontos quase simultaneamente, e no tempo $t = 6\text{h}$, referente ao segundo turno, coletas as amostras dos mesmos três pontos e mais o do efluente final. Os turnos foram denominados em manhã (A, referente a “amanhecer”), tarde (T), noite (N), madrugada (D, referenciando “de madrugada”) e último (U, referente à coleta do último efluente final). No momento da coleta, foram registradas: hora, vazão da ETE, vazão de recirculação, temperatura do ar e observações pertinentes (como chuva, aporte de lodo de fossa séptica, paralisações, etc.).

As coletas relativas ao outono ocorreram nos dias 2-3/6/2020, iniciando às 13h30. As coletas no inverno, nos dias 20-21/08/2020, iniciando às 13h30. As da primavera, em 28-29/10/2020, iniciando às 9h. As do verão, em 21-22/12/2020, às 12h (meio-dia). Para facilitar a localização na ETE, os pontos de coleta na estação foram devidamente identificados com placas coloridas, especialmente porque houve troca de turno dos operadores ao longo do dia, com coletas inclusive na madrugada. A Figura 17 mostra o procedimento realizado na madrugada e na manhã do dia 21/08/2020, por equipes distintas.

Figura 17 – Coletas de amostras de lodo (madrugada, à esquerda) e do efluente final (manhã, à direita) no dia 21/08/2020



Fonte: Registrado pelo autor.

Os resultados laboratoriais referente à campanha de outono apresentaram inconsistências injustificáveis quanto à relação DQO/DBO e DQO/SST em diversos pontos do sistema. Alguns valores de DQO e SST resultaram incompatíveis com o lodo ativado e com o efluente do reator, enquanto a presença de nitrogênio amoniacal não foi detectada no afluente bruto, somente no efluente final. Sem adentrar em maiores detalhes, no presente trabalho, optou-se pelo descarte total dos resultados de outono. O erro dessas primeiras análises levou à mudança no método de armazenamento dos frascos e na melhoria na identificação destes, minimizando o eventual risco de trocas.

Para as campanhas subsequentes, foram disponibilizadas caixas individuais para cada ponto de coleta, para cada horário. Todas as amostras foram armazenadas em geladeira disponibilizada pelo DMAE até o momento de encaminhamento ao laboratório. Os frascos foram etiquetados com localização dos pontos, horário, turno e data, e selados em embalagem plástica, sendo abertos somente no momento da coleta. Foram adotados frascos descartáveis, sem necessidade de ambientação, minimizando o risco de ser ambientado um frasco com conservante.

A coleta foi realizada, em cada ponto, com o auxílio de um balde, um béquer e um funil. No interior do reator aeróbio, foi selecionado um ponto central, sendo o balde lançado a uma profundidade média de 2 m. Nos canais, o balde foi lançado a uma profundidade suficiente para ficar totalmente mergulhado. O conteúdo do balde foi coletado com o béquer e transferido para o frasco com o auxílio do funil. Os frascos foram enchidos até a boca, sendo vedados com tampa rosqueável. O transporte dos frascos contendo amostras, quando retirados da geladeira do DMAE, foi realizado em embalagens térmicas com gelex. Na chegada ao laboratório (empresa particular prestadora de serviços de análises ambientais, credenciada pela Fepam – Fundação Estadual de Proteção Ambiental Henrique Luiz Roessler), as amostras, quando não foram imediatamente para análise, foram armazenadas em geladeiras.

Os procedimentos de análise utilizados e os limites de quantificação e detecção estão referenciados na Tabela 6, sendo da Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater (SMWW), Ed. 23., 2017, da American Public Health Association (APHA), e da U.S. Environmental Protection Agency (EPA).

Tabela 6 – Métodos para análise de parâmetros utilizados nos ensaios de laboratório

Parâmetro	Método	Unidade	Limite de Quantificação	Limite de Detecção	U95%
Alcalinidade Total	SMWW – Método 2320 B	mg/L CaCO ₃	1,63	0,49	±0,7
DBO ₅	SMWW – Método 5210 B	mg/L O ₂	2,34	0,75	±1,1
DQO	SMWW – Método 5220 D	mg/L O ₂	5,3	1,61	±0,57
Nitratos	SMWW – Método 4110 B	mg/L N	0,04	0,01	±0,004
Nitritos	SMWW – Método 4110 B	mg/L N	0,02	0,006	±0,003
NA	PE 013/PE 089	mg/L N	0,09	0,027	±3,89
NTK	PE 025	mg/L N	0,022	0,0027	±0,38
pH	SMWW – Método 4550 H+ B	-	Faixa: 2 a 12	-	±0,1
SST	SMWW – Método 2540 D, E	mg/L	5,16	1,56	±2,5

SMWW: Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater, 23^a edição, 2017;

PE 013: EPA 350.2 – 1974 Nitrogen, Ammonia (Colorimetric, Titrimetric, Potentiometric Distillation);

PE 89: Standard Methods for the Examinations Water and Wastewater, 23^a edição, 2017 – 4500-Norg B. Macro-Kjeldahl Method e 4500-NH₃ C. Titrimetric Method e EPA 350.2 – 1974, Nitrogen, Ammonia (Colorimetric, Titrimetric, Potentiometric Distillation Procedure);

PE 25: Standard Methods for the Examinations Water and Wastewater 23^a edição 2017 – 4500-Norg B. Macro-Kjeldahl Method e 4500-NH₃ C. Titrimetric Method e EPA 351.3 – 1978, Nitrogen, Kjeldahl, Total (Colorimetric; Titrimetric; Potentiometric).

Após a disponibilização dos resultados, foi procedida uma conferência considerando as seguintes relações: $NTK > NH_x-N$; $DQO > DBO_5$; $SST > SSV$; $SST_{LODO} > SST_{REATOR}$. Dessa forma, foi identificado erro de digitação no ensaio de DQO em uma das amostras, oportunidade na qual o valor foi corrigido.

A segunda conferência se baseou na comparação das relações entre parâmetros com os valores típicos encontrados para esgotos sanitários, conforme pesquisa de Hauhuc (2010, p. 56) sintetizada na Tabela 7.

Tabela 7 – Relações típicas para esgoto bruto e lodo ativado

Local	Relação	Unidade	Amostras	Média	Desvio Padrão	Mediana	Mín.	Máx.
Esgoto bruto	Ntot/DQO	g N/g DQO	12	0,095	17%	0,091	0,05	0,15
	N-NH _x /NTK	g N/g N	13	0,684	8%	0,67	0,5	0,9
	DQO/DBO ₅	g DQO/g DBO	12	2,060	11%	2,05	1,41	3
	SST/DQO	g SST/g DQO	12	0,503	18%	0,5	0,35	0,7
	Alcalinidade	Mol_eq/L	11	5,173	35%	5	1,5	9
Lodo	DQO/SSV	g DQO/g SS	9	1,434	7%	1,42	1,266	1,6
Ativado	SSV/SST	g SS/g SS	10	0,729	8%	0,75	0,65	0,9

Fonte: Hauhuc (2010, p. 56).

3.2.3 Elaboração de perfis diários de parâmetros do efluente

A partir da aceitação dos resultados laboratoriais das amostras coletadas, elaborou-se um perfil de 24 h para os parâmetros do afluente, em procedimento também adotado para o efluente durante o processo de tratamento: licor misto, efluente do reator aeróbio, lodo ativado (retorno de lodo) e efluente final. O estabelecimento de um perfil diário tem como finalidade a simulação dinâmica da ETE com o modelo matemático.

A frequência da amostragem adotada, todavia, resulta em quantidade escassa para o estabelecimento de um perfil diário preciso, havendo somente uma amostra por turno diário (quatro amostras por ponto por dia). Conforme afirmado anteriormente, a realidade prática do estudo não é diferente das estações de médio porte no país: as coletas são manuais, não há sensores automatizados, os recursos laboratoriais são limitados, etc.

Cabe repisar que um dos objetivos desse estudo é verificar se a limitação de dados restringe a utilização do modelo matemático. A bibliografia é abundante em estudos semelhantes com o uso intenso de laboratório e equipamentos de medição em tempo real, e a estimativa de alguns parâmetros “[...] requerem ensaios avançados que nunca são realizados em estações em operação, pertencendo tipicamente ao domínio de pesquisas.” (GORI *et al.*, 2011, p. 5860). Conforme Hauduc *et al.* (2009), a escassez de dados típica da realidade de muitas estações é uma das principais dificuldades na aplicação prática de modelos de lodos ativados. Neste sentido, o presente trabalho é uma tentativa de superar tais dificuldades práticas e propor o uso do modelo computacional como ferramenta de uso operacional.

O estabelecimento de um perfil diário a partir de quatro valores para cada parâmetro em 24 h é naturalmente suscetível a erros, sendo uma das limitações deste trabalho. Num dado ponto, um parâmetro pode estar tanto em elevação quanto em declínio. Visando superar essa dificuldade, optou-se pelo levantamento de dados em horários distintos em cada campanha de coletas: inverno iniciando às 13h30 (com coletas às 7h30, 19h30 e 1h30), primavera iniciando às 9h (com coletas às 15h, 21h e 3h) e verão iniciando ao meio-dia (com coletas às 18h, 0h e 6h), ou seja, em intervalos alternados de 3 h. Esta estratégia possibilitou a obtenção de um perfil de variação de cada parâmetro em relação à sua média diária. Para DQO, por exemplo, essa variação é obtida utilizando-se a Equação 56.

$$\text{Variação}(t) = \frac{\text{DQO}(t)}{X} \quad (56)$$

Sendo:

Variação(t): variação da DQO no tempo t;

DQO(t): valor da DQO no tempo t, em mg/L;

X: média da DQO no dia em estudo (média das quatro amostras coletadas no dia), em mg/L.

A partir de uma linha de tendência, buscou-se identificar um padrão de variação diária válida para os parâmetros analisados. Adicionalmente, realizou-se um levantamento da DQO do afluente bruto em frequência horária durante 24 h pela equipe do DMAE através de método colorimétrico por refluxo fechado (SMWW método 5220 D, idem ao realizado pelo laboratório externo). O levantamento foi realizado em um dia de verão (29/12/2020) e, no ensejo, também foi medida a DQO do efluente tratado.

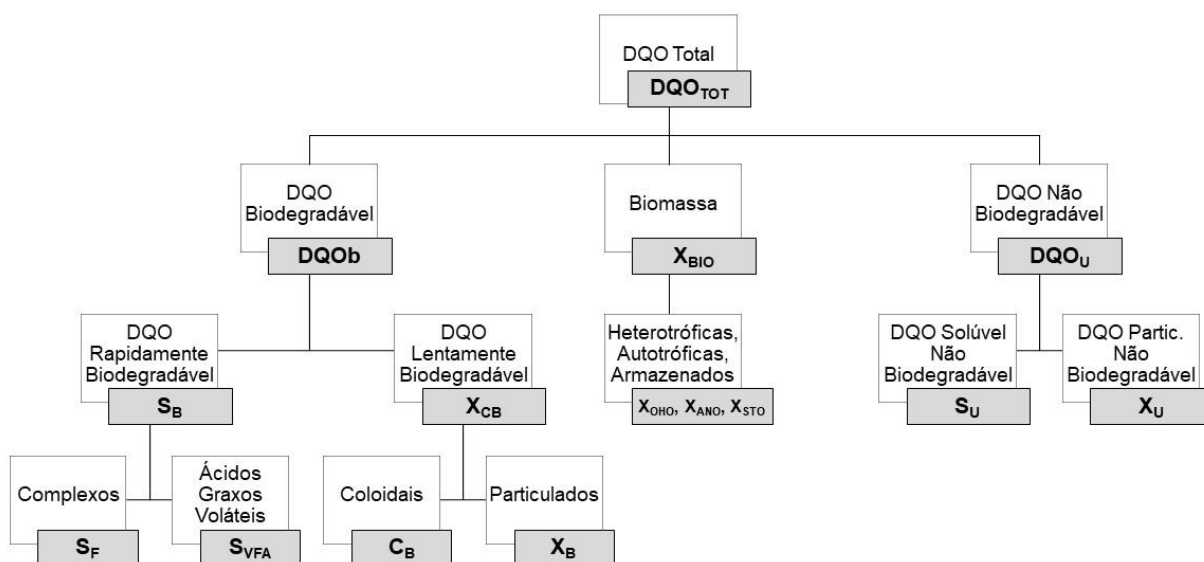
Outra alternativa para o perfil diário foi considerar uma variação linear entre os dados coletados nas diferentes horas do dia. Para isso, interpolou-se os valores a cada duas amostras subsequentes obtendo-se, assim, uma mudança linear das características do afluente a cada turno. Esta metodologia, apesar de simples, propiciou a menor variação possível diante as incertezas dadas pela limitação do número de amostras.

3.2.4 Fracionamento da DQO

O uso de modelos de lodos ativados requer o fracionamento da DQO dos dados entrada no sistema, sendo eles o afluente do reator aeróbio (ponto de coleta P1-Marron) e o licor misto em suas condições iniciais (ponto de coleta P2-Verde). Os valores de DQO constantes nos dados secundários (fornecidos pelo DMAE), bem como os obtidos nas análises das amostras coletadas, referem-se à DQO total (DQO_{TOT}), sendo necessário o seu fracionamento, conforme item 2.2.5, em: DQO rapidamente biodegradável (S_B), DQO lentamente biodegradável (X_{C_B}), DQO não biodegradável solúvel (S_U) e DQO não biodegradável particulada (X_U).

Uma parcela da DQO total refere-se à biomassa (X_{BIO}), a qual deve ser fracionada em organismos heterotróficos comuns (X_{OHO}), organismos autotróficos nitrificantes (X_{ANO}) e produtos armazenados pelos organismos (X_{STO}). A DQO rapidamente biodegradável pode ser expressa em produtos complexos fermentáveis (S_F), ácidos graxos voláteis (S_{VFA}). A DQO lentamente biodegradável pode ser dividida em coloidais (C_B) e particulados (X_B). A Figura 18 ilustra o fracionamento da DQO necessário aos modelos de lodos ativados. Para o ASM3, é desnecessária a subdivisão de S_B em produtos complexos, ácidos graxos, e a de X_{CB} em coloidais e particulados.

Figura 18 – Fracionamento da DQO



Fonte: Adaptado de Rieger *et al.* (2013, p. 167).

As metodologias disponíveis requerem a separação da DQO filtrada e particulada, tanto do afluente bruto quanto do efluente tratado. Também exigem testes com respirômetros e testes de bancada, conforme exposto no Quadro 6. Os dados normalmente disponibilizados nas ETE no país não demonstram a separação da DQO em filtrada e particulada. Também é rara a disponibilidade de respirômetros, mesmo para uma ETE como a São João Navegantes.

Um dos objetivos do presente estudo foi avaliar a metodologia de fracionamento a seguir apresentada, que não conta com informações quanto à DQO filtrada, nem quanto à taxa de utilização de oxigênio por respirômetros. É importante reconhecer que a metodologia apresentada, baseada apenas em cálculos, não é capaz de informar as verdadeiras frações da DQO do esgoto. Muito pelo contrário, no

presente estudo, compreende-se que os valores encontrados são meras estimativas, isso quando forem arbitrados para o fechamento de alguma equação. De qualquer forma, a proposta foi baseada em alguns critérios que visavam fornecer subsídios para a utilização do modelo ASM3 em toda a demanda que este exige.

Fracionamento da DQO do efluente tratado:

O fracionamento iniciou pela determinação da DQO solúvel não biodegradável do efluente tratado. Conforme o método WERF e a norma alemã ATV-DWVK A131, considera-se que toda a DQO solúvel do efluente é não biodegradável, ou seja, $S_U = DQO_{EFF, f0,45}$. Por outro lado, para todas as amostras, a DBO_5 do efluente final não resultou desprezível, motivo pelo qual entendeu-se que a DQO solúvel biodegradável do efluente não poderia ser desprezada. As equações 48 e 49 do método STOWA consistiram em uma alternativa viável, porém considerou-se necessário que os parâmetros obtidos atendessem simultaneamente às seguintes relações:

$$DQO_{TOT} = S_B + S_U + X_{CB} + X_U + X_{BIO} \quad (57)$$

$$DQO_{SOL} = S = S_B + S_U \quad (58)$$

$$DQO_{PART} = X = X_{CB} + X_{BIO} + X_U \quad (59)$$

$$DQO_B = S_B + X_{CB} + X_{BIO} \quad (60)$$

$$DQO_U = S_U + X_U \quad (61)$$

$$DQO_B + DQO_U = DQO_{TOT} \quad (62)$$

As relações acima, embora elementares, apresentam algum desafio em ser plenamente obedecidas ao se adotar um método ou outro. No presente trabalho, iniciou-se pela estimativa da DQO biodegradável do efluente ($DQO_{B,EFF}$) a partir da DBO_5 , conforme as equações 48 e 49 (ROELEVELD; VAN LOOSDRECHT, 2002, p. 79). Analisando as relações acima, pareceu evidente que a determinação da $DQO_{B,EFF}$ tem papel chave na determinação de todas as frações da DQO_{TOT} .

Sem a possibilidade de realizar testes de DBO do efluente para a determinação do valor de k_{DBO} , este teve que ser estimado. A faixa recomendada é ampla, sendo comum entre 0,1 a 0,6 (BRDJANOVIC *et al.*, 2015, p. 96). Procedeu-se então à seguinte dedução: quanto maior for o valor da DQO_B do efluente, menor serão as parcelas inertes (equações 61 e 62) X_U e S_U , e a DQO_{TOT} tenderá a ser totalmente biodegradável. Considerando um percentual solúvel para a DQO do efluente de 30% a 60%, a fração S_B do efluente resulta demasiada elevada e incompatível com o modelo. Quanto menor for o valor de k_{DBO} adotado, maior será o percentual biodegradável da DQO do efluente; para valores próximos a 0,2, a DQO_B resultou praticamente igual à DQO total do efluente. Considerando que o efluente já passou pela etapa de tratamento, há de se supor que o percentual biodegradável é o menor possível, ou seja, que o valor de k_{DBO} estaria próximo do limite oposto.

Dessa forma, no cálculo da DBO total do efluente ($DBO_{TOT,EFF}$) através da Equação 48, utilizou-se $k_{DBO} = 0,6$ (o valor máximo da faixa recomendada), supondo-se que a maior parte das frações biodegradáveis já foram consumidas durante o tratamento. Ainda que se tenha estimado incorretamente o valor de k_{DBO} , o erro básico de se considerar a DBO total inferior à DBO_5 é evitado, ou seja, a DBO total é no mínimo igual ou superior à DBO_5 . A partir da determinação da $DBO_{TOT,EFF}$, calculou-se a DQO biodegradável do efluente ($DQO_{B,EFF}$) através da Equação 49, com $f_{DBO} = 0,1$ (o valor recomendado é de 0,1 a 0,2, sendo adotado o valor mínimo para que a estimativa DQO_B fosse a menor possível para o efluente).

Pela Equação 62, obtém-se a DQO não biodegradável ($DQO_{U,EFF}$), que deve ser fracionada em solúvel e particulada. Observando-se as relações típicas demonstradas em alguns trabalhos (HENZE; COMEAU, 2008; MYSZOGRAJ;

PŁUCIENNIK-KOROPCZUK; JAKUBASZEK, 2017; PŁUCIENNIK-KOROPCZUK; MYSZOGRAJ, 2019) adotou-se $S_{U,EFF} = 40\% DQO_{U,EFF}$. Consequentemente, pela Equação 60, obtiveram a fração particulada não biodegradável $X_{U,EFF}$.

O valor da $DQO_{B,EFF}$ calculado devem ser “distribuído” em frações solúvel e particulada. Os métodos WERF e ATV-A131 indicam o percentual biodegradável solúvel (S_B) do efluente igual a zero. O método STOWA indica para S_B o percentual de 10% da DQO filtrada para baixa carga orgânica. Assim, tem-se como patamar mínimo $S_{B,EFF} = 0$ e máximo de $S_{B,EFF} = 0,1 DQO_{SOL,EFF}$. Se considerássemos, ainda que incorretamente, que toda a DQO do efluente é solúvel, então $DQO_{SOL,EFF} = DQO_{EFF}$, então $S_{B,EFF} = 0,1 DQO_{TOT,EFF}$, representando um patamar máximo.

É sabido que os patamares mínimos e máximos estão incorretos para qualquer caso: a DBO_5 do efluente possui valor representativo, portanto $S_{B,EFF}$ não poderia ser igual a “zero”. O percentual da $DQO_{SOL,EFF}$ para esse patamar é obtida por $S_{U,EFF}/DQO_{TOT,EFF}$. Quanto ao patamar máximo, foi obtido considerando toda a DQO do efluente ser solúvel o que é evidentemente incorreto. Assim, tem-se para a DQO solúvel as seguintes faixas:

$$DQO_{SOL} = S = S_B + S_U = 0 + S_U = S_U \text{ (patamar mínimo)}$$

$$DQO_{SOL} = S = S_B + S_U = 0,1 DQO_{TOT,EFF} + S_U \text{ (patamar máximo)}$$

A determinação de um percentual para a DQO solúvel do efluente observou, portanto, esses patamares, sendo estimado um percentual condizente com todas as amostras e num valor médio entre eles. No presente estudo, foi adotado de 20%. Valores diferentes das faixas indicadas levaram a cálculos incorretos para as equações 57 a 62, com valores negativos para alguns parâmetros. Esta verificação quanto a patamares mínimo e máximo para a solubilidade da DQO do efluente foi realizada para todas as amostras.

Fracionamento da DQO do afluente (após desarenação):

O fracionamento do esgoto bruto afluente (após desarenação) iniciou pela determinação da DQO solúvel não biodegradável ($S_{U,INF}$), considerada igual à do efluente, embora alguma parcela seja criada durante o processo de tratamento. Analogamente ao realizado para o efluente, a DQO biodegradável foi calculada a partir da DBO_5 com as equações 48 e 49, utilizando-se $k_{DBO} = 0,23 \text{ d}^{-1}$ e $f_{DBO} = 0,15$, que são valores recomendados por (BRDJANOVIC *et al.*, 2015). A fração não biodegradável do afluente foi calculada pela diferença $DQO_{U,INF} = DQO_{TOT,INF} - DQO_{B,INF}$. A DQO particulada não biodegradável foi obtida por $X_{U,INF} = DQO_{U,INF} - S_{U,INF}$.

A parcela particulada biodegradável da DQO do afluente bruto inclui a biomassa. Embora Spérandio e Etienne (2000) e Henze e Comeau (2008) façam referência a uma faixa de biomassa de 10 a 15% da DQO, Rieger *et al.* (2013) mencionam que esta parcela é normalmente desprezada. No presente trabalho, o percentual de biomassa ativa no esgoto bruto foi desprezado, tendo gerado resultados compatíveis com o uso do modelo. Sendo assim, a $DQO_{B,INF} = S_{B,INF} + X_{C,B,INF}$.

Da mesma maneira que o adotado para o efluente final, considerou-se 20% como sendo o percentual da solúvel DQO do afluente. A bibliografia informa valores superiores a este (HENZE; COMEAU, 2008), tendo sido adotado inicialmente o valor de 40% da DQO total afluente no presente trabalho. Todavia, tal percentual não trouxe resultados melhores, com o uso do modelo, comparativamente ao percentual adotado de 20%. Com isso, tem-se que a DQO solúvel $DQO_{S,INF} = 0,2 DQO_{TOT,INF}$. As demais parcelas foram obtidas por diferenças, conforme as relações das equações 57 a 62.

Fracionamento da DQO do lodo ativado – licor misto e retorno de lodo:

Como ponto de partida, adotou-se como valores para a DQO solúvel biodegradável (S_B) e não biodegradável (S_U) os mesmos valores já calculados para o efluente final, supondo-se que ambas se referem a parcelas que permaneceram no sistema após o tratamento. O cálculo seguinte foi o da DQO biodegradável que, analogamente ao realizado para o afluente bruto, utilizou as equações 50 e 51 com $k_{DBO} = 0,38 \text{ d}^{-1}$ e $f_{DBO} = 0,15$ para o reator aeróbio e $k_{DBO} = 0,45 \text{ d}^{-1}$ e $f_{DBO} = 0,15$ para o lodo ativado, definidos experimentalmente com ajustes no modelo e observação dos

resultados para diversas amostras. Com as equações 61 e 62, definiu-se a parcela particulada não biodegradável X_U .

A fração particulada biodegradável da DQO inclui a biomassa. Na falta de um método para a sua fração sem a utilização de respirômetros e teste de bancada e sem utilizar, simplesmente, frações em percentuais indicados na literatura, o presente trabalho valeu-se de equações básicas presentes em Metcalf & Eddy (2016) para a obtenção do valor de sólidos suspensos voláteis biodegradáveis (SSVb) no licor misto e lodo. A fração de DQO por SSV (SSV_{DQO}) é obtida com a Equação 63. (METCALF & EDDY, 2016).

$$SSV_{DQO} = (DQO_{TOT} - DQO_{SOL,EFF}) / SSV \quad (63)$$

A concentração de SSV não biodegradáveis (SSVnb) é dada pela Equação 64. (METCALF & EDDY, 2016).

$$SSVnb = X_U / SSV_{DQO} \quad (64)$$

A concentração de SSV biodegradáveis (SSVb) é a diferença entre a concentração de SSV totais e SSVnb:

$$SSVb = SSV - SSVnb \quad (65)$$

No presente trabalho, definiu-se que a concentração da biomassa é igual a 80% da concentração de SSVb. O percentual foi definido a partir de testes com a utilização do modelo para diferentes concentrações de DQO afluente, sendo observada uma média de 20% de bactérias (microrganismos) “não-viáveis” em relação à biomassa total. Para efeitos do modelo, biomassa “não-viável” não realiza atividade bioquímica, muito embora, dependendo das condições e da ausência de células viáveis, consigam realizar parte da sua atividade original (WRC, 2012, p. 33). Ainda que este método se demonstre incorreto em alguma proporção adotada, mantém coerência ao propor alguma relação entre a concentração de biomassa ativa e a concentração de SSV biodegradáveis presentes no lodo ativado.

Dessa forma, considerou-se no reator aeróbio $X_{\text{BIO,AT}} = 0,8 \text{ SSVb}$. Deste valor, com base nos resultados testados no modelo, fracionou-se 70% para microrganismos heterotróficos, ou seja, $X_{\text{OHO,AT}} = 0,7 X_{\text{BIO,AT}}$; 5% para as bactérias autotróficas nitrificantes, ou seja, $X_{\text{ANO,AT}} = 0,05 X_{\text{BIO,AT}}$; e 25% para os produtos armazenados nas células, ou seja, $X_{\text{Stor,AT}} = 0,25 X_{\text{BIO,AT}}$. Método análogo foi adotado para o lodo ativado.

A fração remanescente é a DQO particulada biodegradável X_{CB} , obtida por diferença conforme a Equação 60. Para finalizar, foi realizada uma verificação da validade das equações 57 a 62 para cada ponto.

Fracionamento da DQO do efluente do reator aeróbio:

O efluente do reator aeróbio, em tese, não precisaria ser fracionado para a utilização do modelo, pois os parâmetros que dele foram diretamente medidos podem ser comparados com os resultados do modelo. Por outro lado, optou-se por realizar o seu fracionamento para subsidiar a comparação de resultados fracionados que o modelo proporciona, bem como para a rotina de calibração efetuada.

Para o efluente do reator aeróbio ($A_{\text{T,EFF}}$ – *aeration tank effluente*) adotou-se o mesmo procedimento realizado para o lodo ativado, conforme anteriormente exposto. O k_{DBO} utilizado para o cálculo da DQO_{B} foi de 0,38 (idêntico ao utilizado para o reator aeróbio). Quando ao parâmetro SSV, que não foi medido nos ensaios para este ponto, foi adotada a proporção $\text{SSV} = 0,6 \text{ SST}$.

Fracionamento da DQO referente aos dados históricos fornecidos do DMAE:

De modo similar ao realizado para as amostras coletadas, a metodologia iniciou pela determinação das frações da DQO do efluente, sendo obtidos os valores da $DQO_{\text{B,EFF}}$, com $k_{\text{DBO}} = 0,6$ e $f_{\text{DBO}} = 0,1$. O cálculo de S_{U} obedeceu ao mesmo critério anterior, adotando-se 40% da DQO_{U} .

A fração solúvel biodegradável do efluente $S_{\text{B,EFF}}$ foi calculada a partir da estimativa da DQO solúvel do efluente. De modo geral, a estimativa de 20% DQO_{TOT} , adotada para as amostras coletadas durante este trabalho (itens anteriores), não resultou adequada para este caso. Assim, a estimativa da DQO solúvel foi realizada observando-se o cálculo dos patamares “mínimo” e “máximo”, conforme demonstrado no item anterior referente ao fracionamento da DQO do efluente. Como verificação,

verificou-se a validade de $S_{B,EFF} < 0,1 DQO_{TOT,EFF}$, inequação adaptada do método STOWA (Equação 46) a qual determina que a DQO solúvel biodegradável não pode ser superior a 10% da DQO total do efluente. Os demais parâmetros do efluente $X_{U,EFF}$ e $X_{C,B,EFF}$ foram calculados por diferenças, sendo desprezado o valor para X_{BIO} .

É importante registrar que a metodologia para o fracionamento adotada, embora tenha fornecido os dados necessários para a utilização do modelo, não indica necessariamente as frações verdadeiras da DQO nos diferentes pontos de coleta da estação. Tal metodologia, eivada de critérios subjetivos, teve como finalidade básica a obtenção de dados mínimos que pudessem possibilitar o uso do ASM3, portanto a devida ressalva deve ser considerada.

3.2.5 Informações adicionais necessárias à modelagem

O fracionamento da DQO, conforme explicado no item anterior, forneceu os principais subsídios para a modelagem da ETE. Para as amostras coletadas, os demais parâmetros foram medidos diretamente: SST, SSV, pH, alcalinidade, nitrogênio amoniacal, nitritos e nitratos. A temperatura ambiente também foi medida, bem como as vazões de entrada afluente e de recirculação de lodo.

O coeficiente K_{La} , necessário para estimar a taxa de aeração do reator, foi calculado a partir dos dados do catálogo técnico dos aeradores, fornecidos pela equipe de operação da ETE, e de acordo com as equações constantes na Fundamentação Teórica.

Quanto aos valores históricos fornecidos pelo DMAE para simulação estacionária, faltou também informações mínimas quanto às condições dentro do tanque de aeração, que são: DQO, DBO_5 e SSV. A DQO ainda precisou ser fracionada para servir como dados de entrada do modelo. A estimativa da concentração de lodo ativado com base desses parâmetros também foi necessária.

Para suprir essas lacunas, uma das hipóteses seria utilizar as médias calculadas com base dos ensaios realizados para as coletas de amostras. Outra alternativa seria o cálculo da concentração da biomassa dentro do reator, com base na Equação 8 apresentada na Fundamentação Teórica, que foi a escolhida para o presente trabalho.

Quanto às condições iniciais do decantador secundário, o presente trabalho está limitado ao modelo ASM3 aplicado ao reator de lodos ativados, estando excluído o decantador secundário. Por outro lado, foi necessária para a escolha de um modelo para as simulações, sendo escolhido o modelo de decantador de Takács, Patry e Nolasco (1991), disponível no software. As condições iniciais escolhidas são descritas no item referente à configuração do modelo.

3.3 Configuração do modelo no *software* de modelagem

Primeiramente, o *software* para a modelagem precisava ser definido. Dois softwares comerciais foram escolhidos preliminarmente para o trabalho, o SIMBA# e o GPS-X, sendo realizados contatos com os representantes para concessão de licença temporária para fins acadêmicos, sem sucesso. Para viabilizar o estudo, foi selecionado o STOAT, da WRC (*Water Research Centre*), que é *freeware* para pesquisas.

Comparativamente com os softwares comerciais, o STOAT é limitado em processos, unidades, ligações e configurações. A interface é rígida, as alterações do modelo são trabalhosas. A troca de alguma configuração implica na perda das simulações já realizadas. Os testes são estáticos, os gráficos não são configuráveis e o programa aborta frequentemente ao iniciar nova simulação ou calibração. Por outro lado, quando configurado com sucesso, o *software* apresenta resultados em forma de planilhas com variação de parâmetros ao longo do tempo as quais, uma vez transferidas ao Excel, podem ser tratadas e gerar de gráficos.

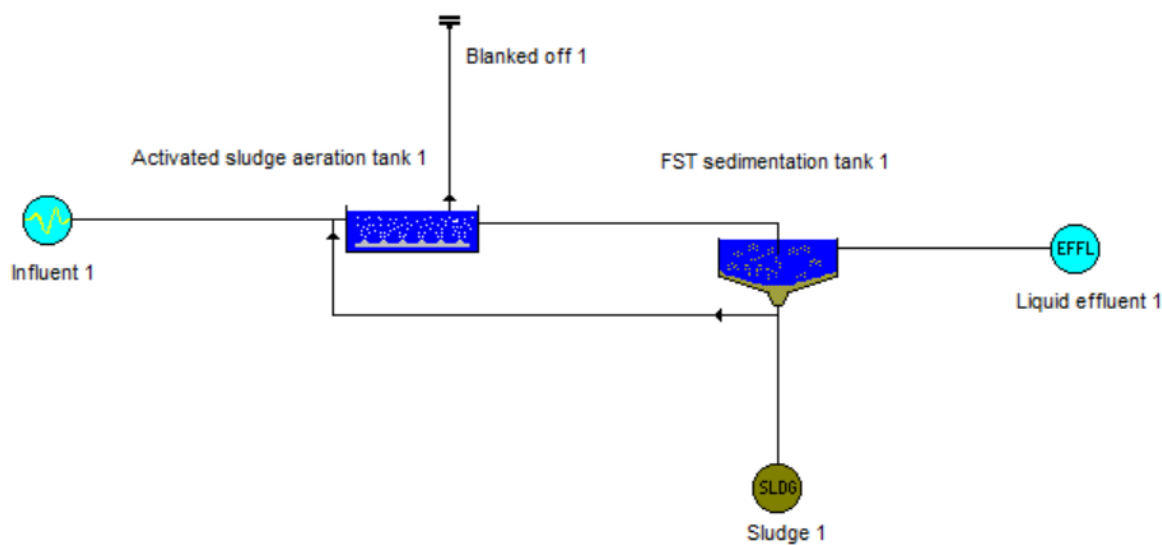
A configuração do modelo iniciou pela seleção de reator aeróbio de fluxo contínuo em *Processes*, tipo *Activated sludge*. Embora a ETE seja dotada de quatro reatores e decantadores, optou-se inicialmente por uma modelagem em unidades únicas com o volume equivalente à soma das respectivas unidades. As características dessas unidades são apresentadas no Quadro 9.

Escolheu-se inicialmente, portanto, uma modelagem em reator único com o volume dos dois reatores reais somados, 8.100 m^3 . A saída deste reator foi conectada a um decantador secundário genérico com área superficial total de 2.800 m^2 , que é a área total dos quatro decantadores secundários em operação, com altura de 4 m, alimentado à profundidade de 2 m. O esquema está representado na Figura 19.

Quadro 9 – Configuração inicial das unidades no software

Configuração	Reator aeróbio	Decantador
Processo	<i>Suspended growth</i>	<i>Suspended growth</i>
Unidade	<i>Activated sludge</i>	<i>FST</i>
Quantidade	1	1
Modelo	ASM3	Genérico
Volume (m ³)	8.100	11.520
Número de estágios	1	
Método de descarte	Nenhum	Taxa variável sobre o tempo
Profundidade de alimentação (m)		2
Retorno de lodo		Taxa
Número de camadas verticais	1	8
Operação	Reator aeróbio	Decantador
Vazão de retorno de lodo (m ³ /h)	0	2.118,6
Vazão de descarte de lodo (m ³ /h)	0	9,15
Tempo de funcionamento da bomba de descarte (h)	0	24
Tempo de ciclo do descarte (h)	0	24

Figura 19 – Lançamento inicial dos processos no software Stoat



Fonte: Elaborado pelo autor no software Stoat.

Embora o modelo de decantação não seja o foco do trabalho, a escolha de um tipo no software foi necessária para a sedimentação do efluente do reator e comparação de resultados. O modelo de decantação é baseado no trabalho de Takács, Patry e Nolasco (1991), apresentado brevemente no item 2.3. A determinação dos parâmetros v_0 , r_h , r_p foi feita pela correlação do software (WRC, 2012, p. 55-56) com o índice volumétrico de lodo com agitação (em inglês SSVI – *stirred specific volume index*), para o qual foi adotado o valor padrão do software de 100 mL/g para um lodo de 3500 mg/L. Quanto à fração não sedimentável f_{ns} , foi adotado o valor “zero”, que é o padrão do software. Quanto à aeração do reator, foi estabelecido inicialmente um K_{La} fixo obtido conforme o item 3.2.5.

A partir das presentes definições, as simulações foram processadas inicialmente a partir das médias de inverno e primavera, em modo estacionário, segundo a metodologia exposta nos itens a seguir.

3.3.1 Testes de funcionalidade da configuração inicial proposta

As simulações iniciais com o modelo configurado foram realizadas em estado estacionário (sem alterações nas características do afluente e das condições de operação ao longo do período) para um período de 48 h. Para isso, foram calculadas as médias para todos os parâmetros obtidos através dos ensaios de laboratório das amostras coletadas, bem como para todas as frações de DQO, em todos os pontos, inclusive para as vazões da ETE e de recirculação, segregando-se por estação climática considerada (inverno, primavera e verão). Uma simulação foi iniciada com os critérios constantes na Figura 20, para 48 h, 20°C e passo de 0,1 h.

Figura 20 – Tela de configuração inicial da simulação

Parameter	Value
Name of run:	Medias P v01 coef orig
Start date and time (dd/mm/yy hh:mm):	21/01/2021 00:00
End date and time (dd/mm/yy hh:mm):	23/01/2021 00:00
Input timestep (h):	0.1
Output timestep (h):	.1
Average sewage temperature (°C):	20
COD removed per unit non-biomass VS removed:	1.48
COD removed per unit biomass removed:	1.48

Buttons: OK, Cancel, Reset, More, Help

Fonte: Elaborado pelo autor no software Stoa.

As frações médias da DQO do afluente foram utilizadas para gerar um afluente no software com parâmetros constantes, em vazão contínua, a partir das opções “*Advanced...-Constant*”. O tipo de perfil é genérico para diversos modelos. Os dados não pertinentes ao ASM3 foram deixados com valor zero.

A seguir, foi configurado o controle do reator em “*Stage data...*”, onde a principal informação é quanto ao sistema de aeração. Foi configurado o K_La fixo em 10 h^{-1} em conformidade com os valores calculados.

As condições iniciais dentro do reator foram selecionadas a partir dos resultados de fracionamento da DQO no ponto P2-Verde. Quanto aos valores de $\text{NH}_3\text{-N}$ e $\text{NO}_3\text{-N}$, foram escolhidos os valores medidos na saída do reator, no ponto P3-Laranja. A Figura 21 demonstra a tela de configuração das condições iniciais, em “*Initial conditions...*”. O manual do software indica, alternativamente, o uso das condições pré-estabelecidas no programa, onde são informadas concentrações de biomassa e sólidos sem correspondência com a realidade medida na ETE.

Figura 21 – Tela de configuração das condições iniciais dentro do reator

Initial data		Stage1
1	Dissolved oxygen (mg/l):	1.00
2	Nonbiodegradable soluble COD (mg/l):	3.69
3	Biodegradable soluble COD (mg/l):	0.73
4	Ammoniacal nitrogen (mg/l):	1.44
5	Dissolved nitrogen gas (mg/l):	0.00
6	Nitrate nitrogen (mg/l):	7.26
7	Alkalinity (mmole/l):	3.02
8	Nonbiodegradable particulate COD (mg/l):	2822.57
9	Biodegradable particulate COD (mg/l):	1180.21
10	Heterotrophs (mg COD/l):	1173.69
11	Stored COD (mg/l):	419.18
12	Autotrophs (mg COD/l):	83.84
13	Total suspended solids (mg/l):	6005.60
14	Soluble P (mg P/l):	56.84
15	Temperature (°C):	20.00

OK Cancel Reset Help

Fonte: Elaborado pelo autor no software StoaT.

A operação do decantador quanto à recirculação de lodo e descarte de lodo é configurada em “*Operation...*”. A vazão de recirculação informada é a média obtida nas coletas, e para o descarte de lodo foi informado o volume diário retirado dividido por 24 h de operação constante. A condição de descarte considerada é constante, portanto não foram efetuadas alterações nas abas seguintes, conforme Figura 22. Valores que não se referem ao ASM3 foram deixados conforme o padrão do software.

Figura 22 – Tela de configuração da operação do decantador secundário

Operation data			
		Initial	Change 1
1	Change at time (h):	0.00	0.00
2	RAS flow (m³/h):	2118.60	0.00
3	RAS ratio:	1.00	0.00
4	Sludge wastage flow (m³/h):	9.15	0.00
5	Wastage pump run time (h):	24.00	0.00
6	Wastage cycle time (h):	24.00	0.00
7	MLSS set-point (mg/l):	3000.00	0.00
8	Fe addition:	Dose	Dose
9	Fe dose (mg/l Fe):	0.00	0.00
10	Fe flow (m³/h):	0.00	0.00
11	Fe conc. (mg/l Fe):	0.00	0.00

Fonte: Elaborado pelo autor no software StoaT.

As condições iniciais dentro do decantador também precisavam ser informadas. Para isso, foram consideradas as frações da DQO do lodo ativado e do efluente final, com o seguinte critério: para frações dissolvidas, foram consideradas as concentrações do efluente final, uniformemente distribuídas nas oito camadas do decantador; para as frações particuladas, foram consideradas na primeira camada as concentrações do efluente final, e na última, as do lodo. Nas demais camadas, foram calculados percentuais de distribuição com o auxílio do próprio software após algumas simulações para um período de 10 dias, até se obter um fluxo e distribuição constante para que se observasse um padrão médio. A tela de dados foi acessada em “*Initial conditions...*” e é apresentada parcialmente na Figura 23. Os parâmetros não apresentados não são calculados pelo ASM3 e foram deixados com valor zero.

Figura 23 – Tela de configuração das condições iniciais no decantador

Initial data									
	Stage1	Stage2	Stage3	Stage4	Stage5	Stage6	Stage7	Stage8	
1	Temperature:	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00
2	VFA (mg/l COD):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	Sol. Deg. COD (mg/l):	0.73	0.73	0.73	0.73	0.73	0.73	0.73	0.73
4	Soluble inert COD (mg/l):	3.69	3.69	3.69	3.69	3.69	3.69	3.69	3.69
5	Part. Deg. COD (mg/l):	12.15	26.86	134.30	805.82	2014.54	2148.84	2283.14	2686.05
6	Particulate inert COD (mg/l):	5.54	36.70	183.50	1100.98	2752.46	2935.96	3119.45	3669.95
7	Volatile solids (mg/l):	19.37	61.74	308.70	1852.19	4630.48	4939.18	5247.88	6173.98
8	Non-volatile solids (mg/l):	12.91	39.39	196.93	1181.56	2953.89	3150.82	3347.75	3938.53
9	Ammonia (mg/l):	1.44	1.44	1.44	1.44	1.44	1.44	1.44	1.44
10	Nitrate (mg/l):	7.26	7.26	7.26	7.26	7.26	7.26	7.26	7.26
11	Soluble organic nitrogen (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	Particulate organic N (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	Phosphate (mg/l):	0.22	0.22	0.22	0.22	0.22	0.22	0.22	0.22
14	Dissolved oxygen (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	PolyP in viable P removers (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	PolyP in non-viable P removers (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	PHB in viable P removers (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	PHB in non-viable P removers (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	Viable autotrophs (mg/l):	0.00	1.31	6.57	39.39	98.48	105.04	111.61	131.30
20	Non-viable autotrophs (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	Viable heterotrophs (mg/l):	0.00	18.38	91.91	551.48	1378.70	1470.61	1562.52	1838.26
22	Non-viable heterotrophs (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	Viable P removers (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	Non-viable P removers (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	Metal salt precipitate (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	Metal phosphate precipitate (mg/l):	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	Alkalinity (mmol/l as CaCO3):	0.69	0.69	0.69	0.69	0.69	0.69	0.69	0.69

Fonte: Elaborado pelo autor no software StoaT.

Como última etapa da primeira simulação, foi estabelecida a correlação entre os parâmetros do modelo de Takács, Patr; e Nolasco (1991) com o valor de IVLA padrão do software, acessível em “*Sewage calibration data...*”, conforme apresentado na Figura 24.

Figura 24 – Tela de configuração do modelo de decantação

Sewage calibration data : Page 1 of 2

Correlation

No correlation

WRc correlation

Extended aeration correlation

BNR correlation

SSVI @ 3.5 g/l: 100

Vesilind velocity (m/h): 9.15

Maximum velocity (m/h): 8

Hindered settling parameter (V/mg): 0.00058

Discrete parameter (V/mg): 0.029

Onset of flocculation (mg/l): 350

Non-settleable fraction: 0.001

OK Cancel Reset More Help

Fonte: Elaborado pelo autor no software Stoa.

Os resultados da simulação são apresentados individualmente para cada unidade e para cada linha de fluxo no item 4.2, sendo analisadas as seguintes linhas: saída do reator aeróbio, equivalente ao ponto P3-Laranja nas campanhas de coleta; saída do efluente final do decantador, equivalente ao ponto P4-azul; recirculação do lodo, equivalente ao ponto P5-Preto. Dentre a ampla gama de parâmetros que são as saídas do modelo – frações da DQO, biomassa heterotrófica, autotrófica, sólidos suspensos, etc. – observou-se inicialmente o comportamento das formas nitrogenadas ($\text{NH}_3\text{-N}$ e $\text{NO}_3\text{-N}$), da alcalinidade e do oxigênio dissolvido.

Conforme exposto no item 4.2, os testes de funcionalidade indicaram uma incompatibilidade quanto às formas nitrogenadas, havendo excesso de $\text{NO}_3\text{-N}$ na saída do reator, no efluente final e na recirculação de lodo, comparativamente com os resultados obtidos na escala real. Como parte da metodologia, caso isso não acontecesse, uma nova configuração deveria ser proposta visando eliminar o problema observado. Sendo assim, foi realizada uma nova configuração de modo a diminuir a concentração de nitrato no sistema, considerando que poderia estar ocorrendo alguma desnitrificação dentro do decantador secundário.

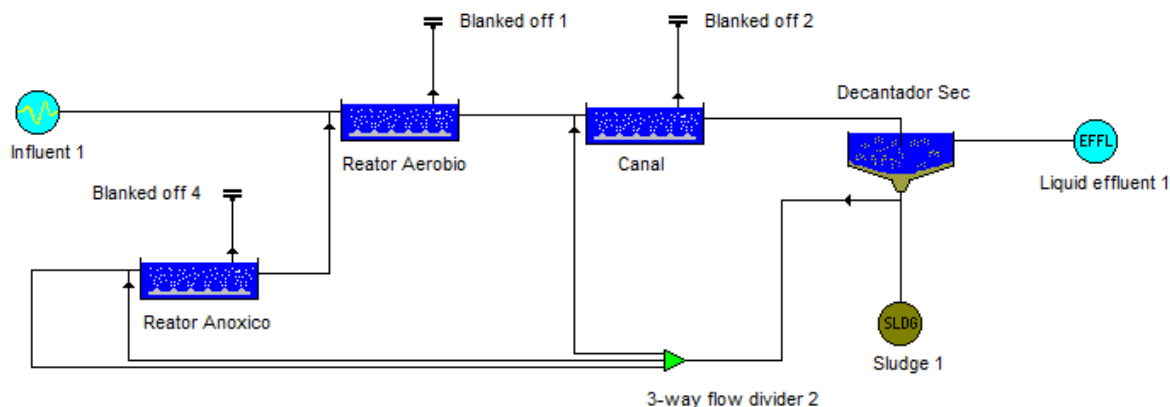
3.3.2 Nova configuração do modelo e testes de funcionalidade

Pelo exposto no item anterior, alguns ajustes na configuração do modelo foram necessários para se ajustar os resultados quanto ao retorno de nitrato e alcalinidade ao reator através da recirculação de lodo. Considerando que pode estar ocorrendo desnitrificação no decantador, na escala real, e considerando que o modelo de decantador não simula reações bioquímicas, foi acrescentado na configuração um reator de lodos ativados na recirculação de lodo. Não há aeração neste novo reator adicionado e nem recirculação de lodo, sendo esperado que este simule reações ambiente anóxico, com consumo de nitrato e consequente elevação da alcalinidade.

O objetivo do acréscimo desta unidade na linha de recirculação foi gerar um lodo que retornasse ao reator aeróbio com menor concentração de $\text{NO}_3\text{-N}$ e alcalinidade compatível com os resultados reais de laboratório. A denominação utilizada no software para esta unidade foi “Reator Anóxico”, embora se trate de uma parcela do decantador na qual ocorreriam reações bioquímicas. O volume desta unidade foi testado com 15%, 20% e 25% em relação ao volume do decantador secundário, diminuindo-se o volume deste na mesma proporção para que não houvesse alteração do tempo de detenção hidráulica no conjunto.

Outra alteração no modelo consistiu no acréscimo de um novo reator entre o reator aeróbio e o decantador secundário, de forma a simular o comportamento do efluente durante o canal real existente na ETE entre as referidas unidades. Na planta da ETE, o canal que conduz o efluente do reator até o decantador tem seção média de $1,25 \text{ m}^2$ e comprimento de aproximadamente 80 m, portanto 100 m^3 . Nesta nova unidade acrescentada também não há aporte de OD. Considerou-se para esta unidade um reator de lodos ativados sem recirculação de lodo, com oito estágios de forma a simular um fluxo de pistão. O nome da unidade adotado no software foi simplesmente “Canal”, conforme nova configuração apresentada na Figura 25.

Figura 25 – Nova configuração das unidades no software Stoa



Fonte: Elaborado pelo autor no software Stoa.

Com o lançamento dos novos reatores, foi necessária a ligação destes a linhas de reciclo de lodo, conforme a figura. Essa necessidade é intrínseca ao software, mas na modelagem foi ajustado o divisor de vazão (*3-way flow divider 2*) para que todo o retorno de lodo do decantador fosse encaminhado ao “Reator Anoxico”.

Os testes para estabelecer o volume do “Reator Anoxico” foram realizados com simulações, observando-se se a concentração de $\text{NO}_3\text{-N}$ e a alcalinidade no canal de lodo alcançavam valores compatíveis com as obtidas nos ensaios, sem prejuízo à decantação. Em testes de tentativa e erro, empiricamente, chegou-se ao valor de 22% para o volume deste “Reator Anoxico” em relação ao decantador original, portanto $0,22 (11.520 \text{ m}^3) = 2.534 \text{ m}^3$. O novo volume do decantador informado passou a ser de $(11.520 - 2.534) \text{ m}^3 = 8.986 \text{ m}^3$. Quanto ao descarte de lodo, a vazão foi dividida proporcionalmente entre as unidades conforme o seu volume.

Quanto ao reator aeróbio, na nova configuração foi alterado o número de estágios para três, visando a possibilidade de testes de aeração por zonas. Os dados com a nova configuração das unidades são detalhados no Quadro 10.

Quadro 10 – Configuração inicial das unidades no software

Configuração	Reator aeróbio	Canal	Decantador	Reator Anóxico
Processo	<i>Suspended growth</i>	<i>Suspended growth</i>	<i>Suspended growth</i>	<i>Suspended growth</i>
Unidade	<i>Activated sludge</i>	<i>Activated sludge</i>	<i>FST</i>	<i>Activated sludge</i>
Quantidade	1	1	1	1
Modelo	ASM3	ASM3	Genérico	ASM3
Volume (m ³)	8.100	100	8.986	2.534
Número de estágios	3	8	1	1
Método de descarte	Nenhum	Nenhum	Taxa variável sobre o tempo	Taxa contínua
Profundidade de alimentação (m)			2	
Retorno de lodo			Taxa	
Número de camadas verticais	1	1	8	1
Operação	Reator aeróbio	Canal	Decantador	Reator Anóxico
Vazão de retorno de lodo (m ³ /h)	0	0	2.118,60	0
Vazão de descarte de lodo (m ³ /h)	0	0	7,14	2,013
Tempo de funcionamento da bomba de descarte (h)	0	0	24	24
Tempo de ciclo do descarte (h)	0	0	24	24

A configuração de cada unidade seguiu os mesmos critérios anteriores, adotados na configuração inicial, bem como os parâmetros e vazão do afluente bruto. Quanto ao “Reator Anoxico”, como não há aeração, foi fixado o $K_L a$ em zero, conforme ajustado em “*Stage data...*”, conforme apresentado na Figura 26. Os dados iniciais adotados foram as médias dos parâmetros o lodo recirculado, ponto P5-Preto, pois este equivale a uma parte do decantador onde o lodo estaria supostamente adensado.

Figura 26 – Tela de configuração da operação do “Reator Anoxico”

Flow distribution data

		Stage 1
1	Volume fraction:	1.000
2	Feed distribution:	1.000
3	RAS distribution:	1.000
4	DO Control:	Fixed KLa ▼
5	Minimum KLa (1/h):	2.00
6	KLa setting 1 (1/h):	7.00
7	KLa setting 2 (1/h):	4.00
8	Maximum KLa (1/h):	0.00
9	DO Setpoint (mg/l):	2.00
10	Nitrate on (mg/l):	5.00
11	Nitrate off (mg/l):	20.00
12	DO on (mg/l):	1.00
13	DO off (mg/l):	3.00
14	DO on 1 (mg/l):	1.00
15	DO on 2 (mg/l):	2.00
16	DO on 3 (mg/l):	3.00
17	Aeration on time (h):	0.80
18	Aeration cycle time (h):	1.00
19	DO Control stage:	1
20	Gain:	1.30
21	Integral time:	0.50

OK Cancel Reset Help

Fonte: Elaborado pelo autor no software StoaT.

Para a unidade “Canal”, por se tratar de um volume pouco expressivo no contexto, foram deixadas as condições iniciais padrão do software. Para uma vazão de 300 L/s da ETE e mais a recirculação na faixa de 700 L/s, o tempo de detenção hidráulica neste canal será de 100 s, aproximadamente. Na realidade, a inclusão deste canal na modelagem seria desnecessária devido ao seu volume pouco representativo, não fosse o fato de haver nitrificação após o reator, o que suscitou dúvidas quanto à possibilidade de ocorrer reação dentro deste. A partir desta nova configuração, foi efetuada nova simulação com os mesmos dados de entrada anteriormente adotados, a partir das quais concluiu-se haver uma melhor correspondência entre os resultados reais e os obtidos com o modelo.

Como próximo passo adotado, uma vez definida a configuração do modelo, foi a calibração dos coeficientes cinéticos e estequiométricos do ASM3 visando a obtenção do menor erro possível em relação aos resultados reais medidos nas campanhas. A metodologia adotada é descrita no próximo item.

3.4 Calibração e validação do modelo

A calibração de 46 coeficientes cinéticos, estequiométricos e de temperatura que o ASM3 possui é uma tarefa pouco prática para o uso corrente. Mesmo no referido trabalho, não foi encontrado método prático para a verificação de todos os parâmetros em questão e seus efeitos nos resultados. Em que pese os modelos representarem bem os processos bioquímicos envolvidos em lodos ativados, a dificuldade na calibração continua sendo o maior obstáculo na sua implementação de modo generalizado, sendo necessário ajustá-los para diferentes reatores, tipos de esgotos e condições ambientais. (HAUDUC *et al.*, 2013; ZAGHLOUL *et al.*, 2018).

Inicialmente, é necessário definir os critérios de aceitação do modelo. No presente trabalho, valeu-se dos critérios expostos na Tabela 4, dentre os quais se destaca o erro admissível de 5 mg/L ou 10% para SST no efluente tratado e 1 mg/L para as formas nitrogenadas. Não consta erro admissível para DQO, sendo adotado o mesmo limite referente a SST, de 5 mg/L ou 10%. Trata-se de uma faixa estreita, considerando o contexto do trabalho e da quantidade de ensaios realizados.

A execução do modelo com valores padrão, em modo estacionário, foi realizada inicialmente, sendo observados os erros nos principais parâmetros monitorados no efluente final: DQO, NH₃-N, NO₃-N e SST. Como os resultados fugiram do critério de aceitação definidos, iniciou-se o processo de calibração do modelo, sendo definidos inicialmente os parâmetros alvo e os resultados esperados em termos do efluente final, efluente do reator e canal de lodo.

3.4.1 Calibração inicial do modelo utilizando a ferramenta automática do software

Visando praticidade ao método, selecionou-se como alvo os parâmetros que foram alterados em estudos na bibliografia, apresentados na Tabela 5, sendo 20 no total. Destes, identificou-se através de série de tentativas e erros que os parâmetros que produziram mais alterações nos resultados frente a uma mesma alteração percentual foram os cinéticos referentes a crescimento e respiração endógena de microrganismos (especialmente das bactérias autotróficas) e a taxa de hidrólise, totalizando seis parâmetros. Além destes, observa-se, na referida tabela, que os estudos referenciais propuseram grandes alterações nos seguintes parâmetros: constante de meia saturação do substrato orgânico, constante de meia saturação para

os produtos armazenados nas células e constante de meia saturação de $\text{NH}_3\text{-N}$ (autotróficas), totalizando mais três parâmetros. Dessa maneira, dos 44 parâmetros do modelo, selecionou-se nove para a calibração.

O software possui uma ferramenta para calibração por iterações através dois algoritmos e quatro critérios, a serem escolhidos pelo usuário. Para quaisquer opções, os parâmetros a serem modificados são informados em caixa de diálogo na qual é inserido o local da aplicação (por exemplo, o reator aeróbio), o estágio e as faixas para testes. Na Figura 27 é apresentada a tela de configuração dos parâmetros para calibração, na qual foram inseridos os nove selecionados e as suas respectivas faixas (definidas pelo valor padrão de cada coeficiente e o valor proposto na Tabela 5, com uma margem de 10% para cada lado).

Figura 27 – Tela de configuração dos parâmetros para calibração

	Name	Stage	Determinand	Lower bound	Upper bound
1	Reator Aerobio	1	Heterotroph growth rate @ 15°C	0.05	0.15
2	Reator Aerobio	1	Autotroph growth rate @ 15°C	0.02	0.06
3	Reator Aerobio	1	Heterotroph death rate (aerobic) @ 15°C	0.005	0.015
4	Reator Aerobio	1	Autotroph death rate (aerobic) @ 15°C	0.003	0.009
5	Reator Anoxico	1	Autotroph death rate (anoxic) @ 15°C	0.001	0.005
6	Reator Aerobio	1	COD half-rate constant	1.8	12
7	Reator Aerobio	1	COD storage half-rate constant	0.1	1.2
8	Reator Aerobio	1	NH3 half-rate constant (autotrophs)	0.9	1.5
9	Reator Aerobio	1	Hydrolysis rate @ 15°C	0.1	0.4
10					
11					

Fonte: Elaborado pelo autor no software StoaT.

Como objetivo do processo, selecionaram-se parâmetros do efluente tratado, da saída do reator e do canal de lodo a serem atingidos, conforme médias calculadas para a estação primavera, obtidas nas campanhas de coleta. Na Figura 28 é apresentada a tela de configuração dos valores alvo, os pesos e as faixas de aceitação, sendo definidas para 24 e 48 h (esperando-se uma estabilidade do sistema após as primeiras 24 h).

Figura 28 – Tela de configuração dos valores a serem atingidos durante a calibração

Data entry										
	Time	Value	Weight	Lower	Upper	Type	Name	Stage	Determinand	▲
1	24	1.44	1	1	2	Stream	Saida Dec		Ammonia (mg/l)	
2	48	1.44	2	1	2	Stream	Saida Dec		Ammonia (mg/l)	
3	24	7.26	1	6.5	8	Stream	Saida Dec		Nitrate (mg/l)	
4	48	7.26	2	6.5	8	Stream	Saida Dec		Nitrate (mg/l)	
5	24	22.11	1	20	25	Stream	Saida Dec		Total COD (mg/l)	
6	48	22.11	2	20	25	Stream	Saida Dec		Total COD (mg/l)	
7	24	32.28	1	30	35	Stream	Saida Dec		Total suspended	
8	48	32.28	2	30	35	Stream	Saida Dec		Total suspended	
9	24	5229	1	5000	5500	Stream	Saida Reator		Total COD (mg/l)	
10	48	5229	2	5000	5500	Stream	Saida Reator		Total COD (mg/l)	
11	24	5326	1	5000	5500	Stream	Saida Reator		Total suspended	
12	48	5326	2	5000	5500	Stream	Saida Reator		Total suspended	
13	24	0.1	1	0	0.2	Stream	Entrada Lodo Re.		Nitrate (mg/l)	
14	48	0.1	2	0	0.2	Stream	Entrada Lodo Re.		Nitrate (mg/l)	
15										

Fonte: Elaborado pelo autor no software StoaT.

O algoritmo selecionado foi o simplex para o critério dos mínimos quadrados, para um máximo de 500 iterações (o padrão do software é de 1000 iterações) e tolerância de convergência de 0,001 (o padrão do software é de 0,0001). O tempo de processamento para cada tentativa foi da ordem de 20 a 30 minutos, mesmo com equipamento de excelente configuração.

Após o procedimento, verificou-se os valores dos parâmetros modificados pelo software, sendo identificados aqueles que atingiram os limites das suas respectivas faixas. Os resultados foram observados em forma de gráficos, sendo preliminarmente desejável que houvesse estabilidade para cada parâmetro após as 24 h iniciais da simulação. Resultados com grande flutuação no período após 48h foram considerados incorretos, independentemente de terem atingido o valor alvo no horário proposto.

A ferramenta foi utilizada para as médias das outras estações de coletas (inverno e verão), para diferentes temperaturas médias. Uma vez definidos os novos valores para coeficientes cinéticos, verificou-se a calibração através da simulação em 240h em modo estacionário, utilizando-se os valores médios para cada estação. Embora o modelo apresentasse estabilidade para os parâmetros após as 24 h iniciais, os resultados ficaram incompatíveis para alguns parâmetros do efluente do reator e do decantador, quando definidos como critérios de aceitação as faixas limites dadas pela Tabela 4 (considerando para DQO a mesma margem para SST no efluente).

3.4.2 Calibração do modelo pelo método de tentativa e erro

Não havendo sucesso na calibração automática, partiu-se para uma calibração manual, por tentativas e erros, até se obter o melhor ajuste das curvas dos parâmetros de efluente e de lodo no canal de recirculação, observando as tolerâncias dadas na Tabela 4. Até onde se buscou na literatura, não há um algoritmo universal indicado para a calibração do modelo, nem mesmo no protocolo unificado do GMP-TG, o qual não demonstrou aplicabilidade prática para o presente caso.

Conceitualmente, a calibração por tentativa e erro baseou-se em rodar simulações tantas vezes quanto necessárias, com diferentes valores de parâmetros cinéticos e estequiométricos do modelo, observando-se os efeitos no efluente final, na saída do reator, no lodo ativado e em outros pontos do sistema, sempre que necessário. É importante lembrar que as simulações para calibração foram efetuadas em modo estacionário, utilizando-se as médias de cada campanha de coleta.

Ao se buscar um conjunto de coeficientes que atendessem bem às médias de uma estação (por exemplo, dos dados da primavera), este era testado com as médias das outras campanhas (inverno e verão) através de novas simulações, em regime estacionário. Dessa maneira, a calibração consistiu em promover modificações nos coeficientes do modelo e observar os seus efeitos em diversos pontos do sistema, rodando-se simulações.

O desafio dessa etapa é o maior de todos: obter-se, por tentativa e erro, um conjunto de coeficientes cinéticos e estequiométricos modificados do modelo que atenda, simultaneamente, aos conjuntos de dados médios de cada campanha de amostras. É muito difícil que um conjunto ajustado aos dados obtidos em uma determinada estação climática seja perfeitamente adequado às demais. Por esta razão, nesta etapa, buscou-se uma solução que atendessem razoavelmente aos resultados das três campanhas de coletas.

Para facilitar a tarefa, a calibração por tentativas iniciou pela identificação dos parâmetros obtidos pela calibração automatizada que fugiram da faixa compreendida entre o valor original e valor proposto na Tabela 5. Assim, preferiu-se utilizar valores mais próximos possíveis dos novos padrões, sendo realizados testes com cada um deles. Em seguida, observou-se que os parâmetros que mais fugiram dos limites de aceitação eram os das formas nitrogenadas: $\text{NH}_3\text{-N}$, $\text{NO}_3\text{-N}$ e alcalinidade. Identificou-se que a nitrificação é o processo mais difícil de calibração, portanto os esforços foram

voltados aos parâmetros quanto à cinética das bactérias autotróficas. Embora inúmeros ajustes tenham sido tentados, não houve plena concordância entre os resultados simulados e reais, optando-se por valores do padrão original do modelo tanto quando possível.

Quanto à simulação da matéria orgânica carbonácea, o modelo apresentou resultados mais satisfatórios, de forma mais frequente nas simulações, sendo válidos alguns padrões sugeridos na Tabela 5. No final do procedimento, com muitas tentativas exaustivas e testes de verificação, optou-se por uma calibração manual adotando-se parcialmente os valores novos recomendados na literatura. Para cada parâmetro não conforme, os coeficientes responsáveis pela sua cinética foram ajustados, sendo observados os efeitos no efluente final.

Ao comparar os resultados entre a campanha de inverno (com temperatura média de 15°C para o efluente) com as demais (com temperaturas superiores a 21°C), verificou-se extrema sensibilidade das bactérias autotróficas quanto à variação de temperatura. Assim, além dos nove parâmetros inicialmente selecionados para calibração, ajustou-se três coeficientes de temperatura para as bactérias autotróficas. Os resultados da calibração manual encontram-se descritos no item 4.3.

3.4.3 Validação da calibração

O procedimento de calibração baseou-se em rodar simulações, em modo estacionário, com um conjunto de coeficientes cinéticos e estequiométricos ajustados para atender, simultaneamente, aos resultados obtidos nas três campanhas de coletas de amostras. Não havendo outro conjunto de dados para validar a calibração, optou-se por utilizar dos perfis dinâmicos do afluente, comparando-se os resultados para o efluente do reator e do decantador com os parâmetros reais, medidos nas campanhas de coleta. Foram realizadas três simulações independentes, uma para cada perfil, referentes às estações de coleta: inverno, primavera e verão.

Conceitualmente, a validação consistiu em rodar as simulações com variações diárias do afluente, tanto em termos de parâmetros quanto de vazão e temperatura. As simulações para validação do modelo foram realizadas para um período de 10 dias (240 h) utilizando-se o mesmo perfil afluente de 24 h, sendo este repetido para completar o tempo. O fracionamento da DQO do afluente foi necessário, ainda que

esta apresentasse variação diária. Portanto, para simulações em modo dinâmico, também se tem variação das frações da DQO do afluente ao longo do dia.

Para as condições iniciais do reator aeróbio, utilizou-se os dados obtidos para o ponto P2-Verde (tanque de aeração) no tempo $t=0$ de cada campanha de coleta, fracionados conforme procedimento demonstrado anteriormente.

Quanto às condições iniciais do decantador secundário, que é dividido em oito camadas, utilizou-se para as frações dissolvidas os dados do efluente final no tempo $t=6h$ (ponto P4-azul, primeira coleta de efluente, em cada campanha), distribuídas uniformemente em todas as camadas. Para as frações particuladas, foram consideradas na primeira camada as concentrações do efluente final, e para a última, os dados do lodo ativado coletados no tempo $t=0$ (ponto P5-preto, primeira coleta em cada campanha). Para as camadas intermediárias, foram calculados percentuais de distribuição com o auxílio do próprio software após algumas simulações para um período de 10 dias, até se obter um fluxo e distribuição constante para que se observasse um padrão médio.

Quanto às condições iniciais do chamado “Reator Anóxico”, considerando que este equivale a uma parte do decantador onde o lodo estaria supostamente adensado, foram considerados os dados do lodo ativado obtidos no tempo $t=0$ (ponto P5-Preto, primeira coleta em cada campanha), tal como efetuado no item 3.3.2.

Os resultados obtidos para as primeiras 24 h de simulação foram desconsiderados para os testes de validação, pois entendeu-se que este seria o tempo mínimo necessário para a estabilização do sistema frente às condições iniciais propostas. Segundo o manual do software, ao selecionar condições iniciais apropriadas, reduz-se o tempo que essas condições influenciam o resultado das simulações (WRC, 2012b). Uma vez que os dados medidos na estação refletem razoavelmente as condições iniciais do reator, havendo alguma incerteza quanto ao fracionamento, compreendeu-se que as primeiras 48h seria o tempo necessário para a estabilização da simulação.

Ao final das simulações, comparou-se os resultados para o efluente do reator aeróbio quanto a DQO e SST, para o efluente final quanto a DQO, $\text{NH}_3\text{-N}$, $\text{NO}_3\text{-N}$ e SST, e para o canal de lodo quando a DQO, SST e SSV. Os parâmetros escolhidos para comparação foram baseados na prática da operação da ETE, sendo valores obtidos por medição direta nos ensaios de laboratório durante as campanhas.

Como validação alternativa, utilizou-se os valores médios obtidos com os dados históricos do DMAE, dados pela Tabela 10, para afluente em estado estacionário. De modo análogo, foram desconsiderados os resultados para as primeiras 48 h de simulação a título de estabilização do sistema.

3.5 Simulação da operação da ETE utilizando diferentes cenários

A partir do modelo validado, procedeu-se à simulação em cenários sugeridos pela equipe do DMAE, para avaliação do efeito no efluente final e na geração de sólidos suspensos totais. São eles:

- 1) Operação com número reduzido de tanques:
 - a) 3 reatores + 4 decantadores;
 - b) 2 reatores + 4 decantadores;
 - c) 1 reator + 4 decantadores;
 - d) 4 reatores + 3 decantadores;
 - e) 4 reatores + 2 decantadores;
 - f) 4 reatores + 1 decantador;
- 2) Interrupção do descarte de lodo, como consequência de uma falha em equipamentos;
- 3) Aumento e diminuição da idade do lodo;
- 4) Aumento da carga orgânica volumétrica como consequência do adensamento de redes, com aumento da vazão média afluente;
- 5) Aumento da carga orgânica volumétrica sem aumento da vazão média afluente;
- 6) Aumento da vazão média afluente como consequência de infiltração nas redes, sem aumento da carga orgânica volumétrica (consequente diminuição das concentrações afluentes).

Para todos os cenários, as simulações foram realizadas em modo dinâmico. Como dados do afluente “comum”, considerou-se o perfil determinado através da campanha de verão, pois nesta observou-se menor variação diária tanto em termos de vazão quanto da relação DQO/DBO₅. As condições iniciais do decantador secundário adotadas são referentes às médias observadas nos ensaios de verão.

Para o “Reator Anóxico”, sendo este uma parcela simulada do decantador, foram utilizados os dados da camada 8 (lodo adensado).

Quanto às simulações propostas pelo DMAE (cenários), estas podem ser tão ou mais complexas quanto se queira. Dentro da finalidade prática do presente trabalho, optou-se por simulações simples adotando-se as seguintes premissas:

- simulações estacionárias para o máximo de 240 horas, descartando-se as 48 primeiras a título de estabilização do sistema, sendo testados os efeitos ao longo de 60 dias, quando for o caso;
- temperatura constante de 20°C;
- sistema de aeração em operação constante, com os mesmos parâmetros adotados anteriormente na calibração e validação;
- para o item 4, o aumento da carga orgânica volumétrica é consequência do aumento simples da vazão afluyente;
- para o item 5, o aumento de carga orgânica volumétrica é consequência da multiplicação das concentrações de todos os parâmetros por um fator “k”, sendo $k=2$.
- para o item 6, o aumento da vazão por um fator “k1” implica numa diminuição das concentrações de todos os parâmetros por um fator “k2”, (dado por $k_2 = 1/k_1$), sendo o limite $k_1=2$;
- devido à dificuldade de configuração das unidades do software, a redução do número de unidades do item 1 será realizada pela diminuição proporcional dos volumes do reator e do decantador, sem mexer no número de unidades e nas ligações entre elas.

Para cada simulação realizada, observou-se estritamente os efeitos para o efluente final quanto aos parâmetros DQO, nitrogênio amoniacal, nitrato e sólidos suspensos totais. A produção de lodo foi observada a partir da evolução da concentração de SST no efluente final e na saída do reator aeróbio, sendo este um critério fácil e prático de monitoramento.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados do trabalho são apresentados inicialmente quanto ao tratamento de dados secundários e segregação em médias, quanto aos ensaios de laboratório realizados em amostras coletadas, quanto à elaboração de perfis do afluente e quanto ao fracionamento da DQO proposto. Esses resultados subsidiaram a alimentação e a configuração do modelo para que este pudesse produzir os primeiros resultados em termos de simulação.

Em sequência, os resultados são apresentados quanto à calibração (sendo informados os coeficientes cinéticos e estequiométricos modificados em relação aos valores padrão) e quanto à verificação da calibração, para regime estacionário (conforme item 3.4 da metodologia), através de simulações propriamente ditas, com o uso do modelo. Também são apresentados os resultados quanto à validação da calibração, para regime afluente dinâmico (conforme item 3.4.3 da metodologia) e, alternativamente, com as médias referentes aos dados secundários. Tais itens objetivam verificar a aderência do modelo à realidade verificada na ETE, a partir dos ensaios realizados através de coletas de campo.

Os resultados quanto à simulação da operação da ETE sob diferentes cenários sugeridos pela equipe de operação do DMAE são apresentados (conforme item 3.5 da metodologia). Verifica-se, dessa forma, se o modelo ASM3 é aplicável como ferramenta de gestão em uma estação de tratamento de esgotos.

Na sequência, são feitas considerações quanto às limitações do trabalho, considerando o próprio modelo e a metodologia empregada. No final, versa-se sobre a aceitação dos resultados obtidos com o modelo em simulação da operação da ETE selecionada.

4.1 Resultados referentes aos dados operacionais

Os itens a seguir versam sobre os resultados quanto aos dados secundários obtidos junto à equipe de operação da ETE e quanto às análises de laboratório realizadas nas amostras coletadas. Os métodos empregados no tratamento dos dados foram descritos nos itens anteriores e visaram a transformação destes em parâmetros que pudessem servir de entrada no o modelo.

4.1.1 Resultados obtidos no tratamento de dados secundários

A partir da planilha de coleta de amostras fornecida pela equipe de operação da ETE, observou-se que as frequências das análises amostrais são irregulares, dependendo do parâmetro levantado. Há maior frequência de análise de DBO₅ durante todo o período citado. Análise das formas nitrogenadas foram menos frequentes e abrangeram período menor (dez/2007 a jul/2012). Os dados referentes a SST foram disponibilizados de jul/2010 a ago/2012. Há poucas datas em que todos os parâmetros foram ensaiados de forma conjunta, para afluente e efluente. Os gráficos 1 e 2 evidenciam a distribuição dos parâmetros e seus valores ao longo do período.

Gráfico 1 – Parâmetros de afluente bruto fornecidos pelo DMAE

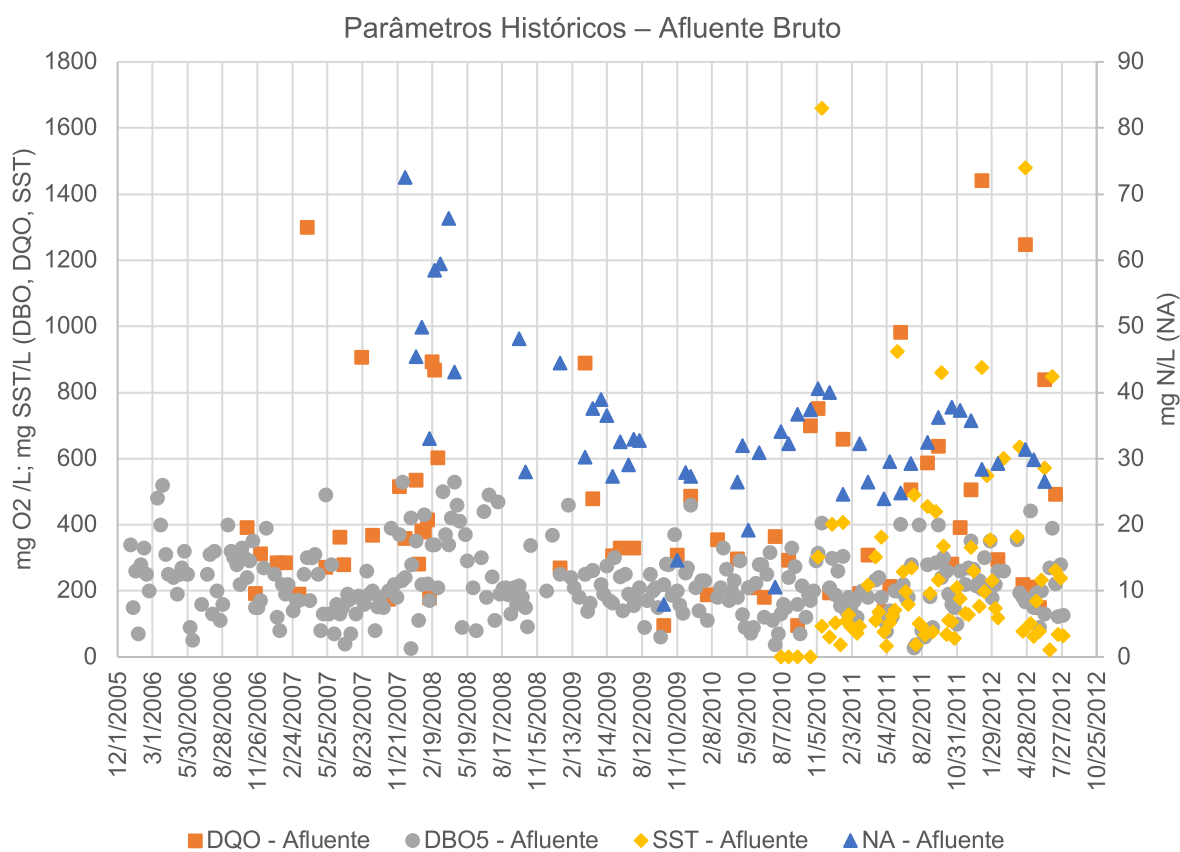
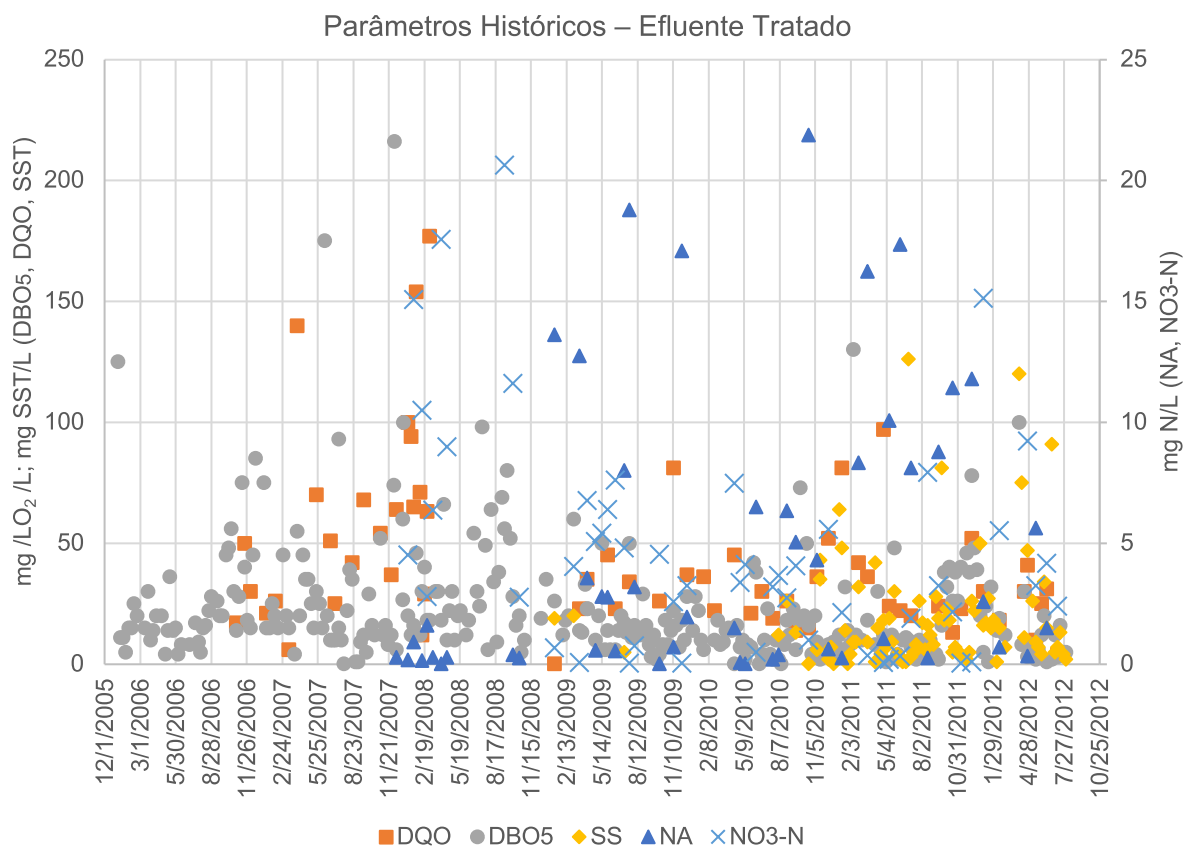


Gráfico 2 – Parâmetros de efluente tratado disponibilizados pelo DMAE



Os gráficos demonstram dispersão de dados e falta de frequência regular para alguns parâmetros. Por exemplo, os volumes mensais de esgoto tratado referem-se somente de jan/2008 a jul/2011. Também foi observada uma grande amplitude dos parâmetros e falta da identificação de um padrão de comportamento. Não há dados sobre o horário da coleta das amostras do afluente e nem a devida correspondência com as amostras do efluente final. Há carência de dados relativos ao reator biológico e quanto à produção, vazão de descarte e recirculação de lodo.

Na Tabela 8 são expressas as médias (\bar{X}), os desvios padrão (s) para cada conjunto de parâmetros segregados por estação do ano. O coeficiente de variação (CV) foi calculado para cada conjunto de dados analisado. Para efeitos do presente trabalho, considerou-se que a média é representativa para $CV \leq 20\%$.

Tabela 8 – Média, desvio padrão e coeficiente de variação para NA, DBO₅, DQO e SST, para afluente bruto e efluente tratado

Estação	Parâmetro	NA		DBO		DQO ₅		SST	
		Afluente	Efluente	Afluente	Efluente	Afluente	Efluente	Afluente	Efluente
Verão	Média (X)	40,64	4,43	238,66	22,38	471,00	52,67	253,76	18,06
	DP (s)	13,67	5,80	99,01	22,15	313,65	45,86	224,81	15,83
	CV	34%	131%	41%	99%	67%	87%	89%	88%
Outono	Média (X)	30,67	3,40	224,29	20,17	455,06	43,53	280,17	29,83
	DP (s)	5,98	4,51	104,69	23,95	373,89	31,41	327,30	35,99
	CV	20%	133%	47%	119%	82%	72%	117%	121%
Inverno	Média (X)	32,22	5,41	196,96	19,75	442,00	25,36	285,06	15,18
	DP (s)	8,44	5,35	98,22	21,29	207,76	17,39	244,83	16,24
	CV	26%	99%	50%	108%	47%	69%	86%	107%
Primavera	Média (X)	33,91	8,29	244,40	30,29	377,40	39,13	256,24	15,29
	DP (s)	15,20	9,54	92,49	31,36	182,19	18,85	364,39	15,04
	CV	45%	115%	38%	104%	48%	48%	142%	98%
Geral	Média (X)	34,24	5,21	224,66	22,84	439,84	42,38	270,07	19,93
	DP (s)	11,88	6,71	100,69	25,12	293,10	34,27	298,69	24,28
	CV	35%	129%	45%	110%	67%	81%	111%	122%

Mesmo com a segregação dos dados por estações do ano, observou-se que os coeficientes de variação resultaram elevados para todos os parâmetros. Além disso, a separação de dados por época do ano não contribuiu para a diminuição da variação dos valores, com CV por vezes superiores aos obtidos para média geral.

Por esta razão, os dados foram então segregados por faixas de DQO, sendo identificados os dados em que os levantamentos abrangem DBO₅, DQO, nitrogênio amoniacal, NO₃-N, SST e temperatura de forma conjunta, embora ainda com algumas lacunas referentes a volume de esgoto tratado, SST e temperatura. Selecionou-se, assim, 31 conjuntos de dados.

As faixas selecionadas foram: 1) de 96 a 138 mg/L; 2) de 195 a 3330 mg/L; 3) de 391 a 587 mg/L; 4) de 638 a 983 mg/L; 5) de 1248 a 1441 mg/L. Na Tabela 9 são apresentados os grupos e os valores dos seus parâmetros para afluente e efluente, incluindo a média, desvio padrão e coeficiente de variação para cada conjunto. Os valores em vermelho foram excluídos do cálculo da média pois a DBO₅ está maior do que a DQO, nesses casos.

Tabela 9 – Parâmetros do afluente bruto e do efluente tratado selecionados e agrupados por faixas de DQO afluente (unidades em mg/L exceto onde indicado)

Data Coleta	NA		DBO		DQO		NO ₃		SST		Temp. (°C)		Q (L/s)
	Aflu	Eflu	Aflu	Eflu	Aflu	Eflu	Aflu	Eflu	Aflu	Eflu	Aflu	Eflu	
03/01/2012	28,4	2,6	206,0	5,0	1441,0	30,0	0,1	15,1	876,0	16,0	24,9	25,5	
24/04/2012	31,4	0,3	167,0	3,0	1248,0	41,0	0,1	9,2	1480,0	47,0	22,7	25,0	
<i>Média</i>	29,9	1,5	186,5	4,0	1344,5	35,5		12,2	1178,0	31,5	23,8	25,3	
<i>DP</i>	1,5	1,1	19,5	1,0	96,5	5,5		2,9	302,0	15,5	1,1	0,3	
<i>CV</i>	5%	78%	10%	25%	7%	15%		24%	26%	49%	5%	1%	
07/06/2011	24,8	17,4	402,0	2,0	983,0	22,0	0,0	0,3	924,0	4,0	18,7	20,9	292,7
17/03/2009	30,2	12,7	250,0	14,0	890,0	23,0		0,1			25,6	25,7	246,3
12/06/2012	26,5	1,5	130,0	1,0	838,0	31,0	0,0	4,2	572,0	15,0	18,7	20,4	
08/11/2010	40,6	4,3	314,0	9,0	752,0	36,0			302,0	6,0	25,8	23,6	254,7
19/10/2010	37,4	21,9	170,0	16,0	699,0	15,0		1,0		0,0	22,4	22,2	277,6
11/01/2011	24,6	0,3	305,0	6,0	658,0	81,0		2,1	408,0	48,0	26,4	25,7	269,0
13/09/2011	36,2	8,8	400,0	2,0	638,0	24,0	0,1	3,2	232,0	19,0	21,5	19,3	
<i>Média</i>	32,6	8,2	261,5	8,0	779,7	35,0		2,1	378,5	17,6	23,4	22,8	261,9
<i>DP</i>	5,9	7,4	90,9	5,6	119,0	21,6		1,5	128,1	16,6	2,8	2,8	12,1
<i>CV</i>	18%	90%	35%	70%	15%	62%		70%	34%	94%	12%	11%	5%
16/08/2011	32,5	0,3	280,0	3,0	587,0	3,0	0,0	7,9	456,0	16,0	21,7	18,7	
04/07/2011	29,2	8,1			506,0	20,0	0,0	1,9				18,0	328,4
06/12/2011	35,7	11,8	350,0	78,0	505,0	52,0	0,1	0,1	332,0	26,0	24,9	26,2	
15/12/2009	27,3	1,9	460,0	28,0	487,0	37,0		3,2				24,6	267,8
06/04/2009	37,6	3,6	262,0	23,0	478,0	35,0		6,8			25,4	26,9	216,0
08/11/2011	37,3	29,2	260,0	40,0	391,0	23,0	0,1	0,0	176,0	4,0	25,1	23,7	
<i>Média</i>	33,3	9,2	322,4	18,0	492,3	23,8		3,3	321,3	15,3	24,3	23,0	270,7
<i>DP</i>	4,0	9,8	76,2	10,8	57,5	13,7		3,1	114,6	9,0	1,5	3,5	45,9
<i>CV</i>	12%	107%	24%	60%	12%	58%		92%	36%	59%	6%	15%	17%
21/07/2009	32,9	18,8	155,0	50,0	330,0	34,0		0,0				19,9	253,5
16/06/2009	32,6	0,5	242,0	6,0	329,0	23,0		7,6				22,9	246,6
10/11/2009	14,6	0,7	200,0	22,0	309,0	81,0		2,6					289,3
16/03/2011	26,4	16,2	180,0	18,0	308,0	36,0	0,1	0,4	218,0	9,0	25,6	26,6	278,3
27/05/2009	27,3	2,8	163,0	14,0	307,0	45,0		6,4			22,9	22,3	240,7
13/04/2010	26,5	1,5	180,0	0,0	297,0	45,0		7,5			25,1	25,4	255,0
13/02/2012	29,3	0,7	260,0	19,0	294,0	18,0	0,1	5,5	118,0	15,0	28,7	27,0	
24/08/2010	32,3	6,3	240,0	18,0	293,0	26,0		2,7		26,0	22,8	17,7	274,2
18/10/2011	37,8	11,4	160,0	26,0	281,0	13,0	0,0	2,2	106,0	5,0	22,7	25,1	
13/01/2009	44,4	13,6	250,0	26,0	270,0	0,0		0,7		19,0	25,1	25,1	289,8
10/05/2011	29,6	10,1	140,0	10,0	214,0	24,0	0,0	0,2	104,0	19,0	21,9	21,4	285,0
15/05/2012	29,9	5,6	150,0	2,0	211,0	10,0	0,0	3,3	63,0	9,0	21,6	24,0	
07/12/2010	40,0	0,6	210,0	8,0	195,0	52,0		5,6	61,0	2,0	23,3	25,1	268,2
<i>Média</i>	31,0	6,8	194,6	10,9	279,8	38,0		3,4	111,7	13,0	24,0	23,5	268,1
<i>DP</i>	7,0	6,3	40,3	7,2	43,3	19,7		2,7	52,2	7,6	2,1	2,7	17,2
<i>CV</i>	23%	92%	21%	66%	15%	52%		78%	47%	58%	9%	11%	6%
26/04/2011	24,0	1,1	110,0	12,0	138,0	97,0	0,0	0,1	76,0	18,0	23,5	24,6	298,1
15/09/2010	36,7	5,0	160,0	6,0	96,0	14,0		4,1		13,0	20,5	21,4	316,3
<i>Média</i>	30,3	3,0	110,0	9,0	138,0	55,5		2,1	76,0	15,5	22,0	23,0	307,2
<i>DP</i>	6,4	2,0	0,0	3,0	0,0	41,5		2,0	0,0	2,5	1,5	1,6	9,1
<i>CV</i>	21%	65%	0%	33%	0%	75%		97%	0%	16%	7%	7%	3%

Desse modo, para o objetivo de simular a operação da ETE em regime estacionário, foram utilizadas as médias dos parâmetros de cada um dos cinco grupos apresentados na Tabela 9, totalizando, portanto, cinco simulações. Dada a grande variação percebida para alguns parâmetros de efluente, nas simulações realizadas, os resultados obtidos foram considerados satisfatórios quando o erro percentual fosse inferior ao CV da referida faixa.

Após o preenchimento de lacunas, adotados os critérios elencados na metodologia, os valores médios foram consolidados para cada grupo e encontram-se na Tabela 10, sendo estes os valores finais utilizados nas simulações. Os valores em vermelho representam lacunas preenchidas conforme metodologia exposta no item 3.2.1.

Tabela 10 – Médias consolidadas para cada grupo de amostras, para fins de simulação (valores em mg/L exceto onde indicado)

Grupo		NA		DBO		DQO		NO ₃		SST		Temp. (°C)		Q (L/s)
		Aflu	Eflu	Aflu	Eflu	Aflu	Eflu	Aflu	Eflu	Aflu	Eflu	Aflu	Eflu	
1	<i>Média</i>	29,9	1,5	186,5	4,0	1344,5	35,5	0,0	12,2	1178,0	31,5	23,8	25,3	271,5
	<i>DP</i>	1,5	1,1	19,5	1,0	96,5	5,5	0,0	2,9	302,0	15,5	1,1	0,3	0,0
	<i>CV</i>	5%	78%	10%	25%	7%	15%	0%	24%	26%	49%	5%	1%	0%
2	<i>Média</i>	32,6	8,2	261,5	8,0	779,7	35,0	0,0	2,1	378,5	17,6	23,4	22,8	261,9
	<i>DP</i>	5,9	7,4	90,9	5,6	119,0	21,6	0,0	1,5	128,1	16,6	2,8	2,4	12,1
	<i>CV</i>	18%	90%	35%	70%	15%	62%	0%	70%	34%	94%	12%	11%	5%
3	<i>Média</i>	33,3	9,2	322,4	18,0	492,3	23,8	0,0	3,3	321,3	15,3	23,3	23,0	270,7
	<i>DP</i>	4,0	9,8	76,2	10,8	57,5	13,7	0,0	3,1	114,6	9,0	2,7	3,5	45,9
	<i>CV</i>	12%	107%	24%	60%	12%	58%	0%	92%	36%	59%	11%	15%	17%
4	<i>Média</i>	31,0	6,8	194,6	10,9	279,8	38,0	0,0	3,4	111,7	13,0	23,7	23,6	268,1
	<i>DP</i>	7,0	6,3	40,3	7,2	43,3	19,7	0,0	2,7	52,2	7,6	2,1	2,6	17,2
	<i>CV</i>	23%	92%	21%	66%	15%	52%	0%	78%	47%	58%	9%	11%	6%
5	<i>Média</i>	30,3	3,0	110,0	9,0	138,0	55,5	0,0	2,1	76,0	15,5	22,0	23,0	307,2
	<i>DP</i>	6,4	2,0	0,0	3,0	0,0	41,5	0,0	2,0	0,0	2,5	1,5	1,6	9,1
	<i>CV</i>	21%	65%	0%	33%	0%	75%	0%	97%	0%	16%	7%	7%	3%

4.1.2 Resultados obtidos através de ensaios em coletas de amostras

Os resultados das análises laboratoriais estão expressos nas tabelas 11 a 16 a seguir. Nas linhas em cinza, foram calculados os valores para NT, convertida a alcalinidade para Mol_{eq}/L e calculadas as principais relações entre parâmetros.

Tabela 11 – Resultados das análises laboratoriais para inverno (parte 1)

Descrição	Unidade	Afluyente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final	Afluyente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final
Data da Coleta		20/08/2020	20/08/2020	20/08/2020	20/08/2020	20/08/2020	20/08/2020	20/08/2020	20/08/2020	20/08/2020	21/08/2020
Hora Coleta		13:30	13:30	13:30	16:00	19:30	19:30	19:30	19:30	22:10	01:30
Turno		T	T	T	T	N	N	N	N	N	D
Q ETE	L/s	292,00	292,00	292,00	292,00	292,00	292,00	292,00	292,00	292,00	292,00
Q Recirc. de Lodo	L/s	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00
Temp. do Ar	°C	11,00	11,00	11,00	11,00	9,00	9,00	9,00	9,00	8,00	8,00
Alcalinidade Total	mg/L CaCO3	223,70	217,30	127,20	132,50	10,60	195,00	201,40	121,90	127,20	13,80
DBO5	mg/L O2	238,60	3.153,40	1.058,60	1.494,80	13,50	173,20	2.607,95	1.643,80	920,40	28,30
DQO	mg/L O2	482,60	6.287,78	2.088,26	3.146,96	24,55	332,34	5.193,79	3.252,83	1.805,94	55,30
Nitratos	mg/L N	0,08	N.M.	N.M.	0,19	14,84	0,06	N.M.	N.M.	0,22	13,97
Nitritos	mg/L N	0,01*	N.M.	N.M.	0,01*	0,01*	0,01*	N.M.	N.M.	0,01*	0,01
NA	mg/L N	37,70	N.M.	N.M.	8,70	0,13	31,10	N.M.	N.M.	7,91	0,29
NTK	mg/L N	63,37	N.M.	N.M.	249,67	4,16	53,40	N.M.	N.M.	217,00	3,62
pH	-	6,31	6,00	6,10	6,20	6,05	6,10	6,16	6,10	6,16	6,12
SST	mg/L	155,70	6.240,00	3.016,10	3.740,00	1,56*	117,10	8.210,00	3.977,50	3.335,00	1,56*
SSV	mg/L	N.M.	4.065,00	1.922,60	N.M.	0,94	N.M.	5.425,00	2.737,50	N.M.	N.M.
NT	mg/L N	44,02			14,91	6,19	37,21			14,08	6,42
NT/DQO	g N/g DQO	0,09			0,00	0,25	0,11			0,01	0,12
N-NHx/NTK	g N/g N	0,59			0,03	0,03	0,58			0,04	0,08
DQO/DBO5	g DQO/g DBO	2,02	1,99	1,97	2,11	1,82	1,92	1,99	1,98	1,96	1,95
SST/DQO	g SS/g SS	0,32	0,99	1,44	1,19	0,06	0,35	1,58	1,22	1,85	0,03
SSV/SST	g SS/g SS		0,65	0,64				0,66	0,69		
Alcalinidade	Mol_eq/L	4,47	4,35	2,54	2,65	0,21	3,90	4,03	2,44	2,54	0,28
DQO/SSV	g DQO/g SS		1,55	1,09				0,96	1,19		

Legenda: (*): Considerado o limite de detecção; (N.M.): não medido.

Tabela 12 – Resultados das análises laboratoriais para inverno (parte 2)

Descrição	Unidade	Afluyente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final	Afluyente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final
Data da Coleta		21/08/2020	21/08/2020	21/08/2020	21/08/2020	21/08/2020	21/08/2020	21/08/2020	21/08/2020	21/08/2020	21/08/2020
Hora Coleta		01:30	01:30	01:30	04:00	07:45	07:30	07:30	07:30	10:00	13:35
Turno		D	D	D	D	A	A	A	A	A	U
Q ETE	L/s	292,00	292,00	292,00	292,00	240,00	240,00	240,00	240,00	240,00	252,00
Q Recirc. de Lodo	L/s	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00	600,00
Temp. do Ar	°C	8,00	8,00	8,00	4,00	5,00	5,00	5,00	5,00	9,00	19,00
Alcalinidade Total	mg/L CaCO3	176,00	212,00	132,50	95,40	13,80	206,70	196,10	159,00	190,80	13,80
DBO5	mg/L O2	127,80	2.601,05	2.021,40	804,20	14,10	471,40	1.899,30	1.311,60	2.091,80	11,20
DQO	mg/L O2	240,59	5.193,79	4.029,22	1.594,20	26,83	923,69	3.782,18	2.617,61	4.170,38	19,98
Nitratos	mg/L N	0,07	N.M.	N.M.	0,05	13,76	0,10	N.M.	N.M.	0,12	14,50
Nitritos	mg/L N	0,01*	N.M.	N.M.	0,01*	0,01*	0,01*	N.M.	N.M.	0,01*	0,01*
NA	mg/L N	29,50	N.M.	N.M.	7,32	0,03*	19,10	N.M.	N.M.	9,91	0,25
NTK	mg/L N	42,45	N.M.	N.M.	122,56	2,23	70,63	N.M.	N.M.	240,21	1,67
pH	-	6,14	6,03	6,05	6,16	6,04	5,92	6,07	6,00	6,02	6,07
SST	mg/L	33,70	6.963,30	3.295,00	3.283,30	22,00	750,00	4.770,00	4.390,00	3.930,00	14,00
SSV	mg/L	N.M.	4.756,70	2.287,50	N.M.	N.M.	N.M.	3.370,00	3.060,00	N.M.	N.M.
NT	mg/L N	35,65			13,49	6,04	25,03			15,94	6,32
NT/DQO	g N/g DQO	0,15			0,01	0,23	0,03			0,00	0,32
N-NHx/NTK	g N/g N	0,69			0,06	0,00	0,27			0,04	0,15
DQO/DBO5	g DQO/g DBO	1,88	2,00	1,99	1,98	1,90	1,96	1,99	2,00	1,99	1,78
SST/DQO	g SS/g SS	0,14	1,34	0,82	2,06	0,82	0,81	1,26	1,68	0,94	0,70
SSV/SST	g SS/g SS		0,68	0,69				0,71	0,70		
Alcalinidade	Mol_eq/L	3,52	4,24	2,65	1,91	0,28	4,13	3,92	3,18	3,82	0,28
DQO/SSV	g DQO/g SS		1,09	1,76				1,12	0,86		

Legenda: (*): Considerado o limite de detecção; (N.M.): não medido.

Tabela 13 – Resultados das análises laboratoriais para primavera (parte 1)

Descrição	Unidade	Afluyente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final	Afluyente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final
Data da Coleta		28/10/2020	28/10/2020	28/10/2020	28/10/2020	28/10/2020	28/10/2020	28/10/2020	28/10/2020	28/10/2020	28/10/2020
Hora Coleta		09:00	09:00	09:00	11:30	15:00	15:00	15:00	15:00	17:30	21:00
Turno		A	A	A	A	T	T	T	T	T	N
Q ETE	L/s	372,00	372,00	372,00	372,00	364,00	364,00	364,00	364,00	364,00	310,00
Q Recirc. de Lodo	L/s	581,00	581,00	581,00	581,00	580,00	580,00	580,00	580,00	580,00	598,00
Temp. do Ar	°C	20,00	20,00	20,00	23,00	24,00	24,00	24,00	24,00	24,00	23,00
Alcalinidade Total	mg/L CaCO3	137,40	205,00	164,00	123,00	28,70	192,70	51,30	133,30	194,80	39,00
DBO5	mg/L O2	53,00	893,30	771,55	913,20	12,00	159,50	4.514,85	2.365,65	2.151,60	17,30
DQO	mg/L O2	339,27	9.019,39	5.594,50	5.383,40	23,36	367,23	8.253,28	5.038,05	4.478,88	35,22
Nitratos	mg/L N	0,00	N.M.	N.M.	0,92	7,47	0,00	N.M.	N.M.	0,46	6,37
Nitritos	mg/L N	0,01*	N.M.	N.M.	0,01*	0,01*	0,01*	N.M.	N.M.	0,01*	0,01*
NA	mg/L N	15,07	N.M.	N.M.	17,93	0,72	25,11	N.M.	N.M.	17,22	2,87
NTK	mg/L N	27,38	N.M.	N.M.	45,11	1,64	43,63	N.M.	N.M.	334,85	6,35
pH	-	7,22	6,67	6,62	6,69	6,55	7,25	6,68	6,73	6,55	6,74
SST	mg/L	257,10	11.210,00	6.566,10	5.878,60	1,56	208,90	9.870,00	4.862,50	4.195,00	82,00
SSV	mg/L	N.M.	8.514,30	4.541,70	N.M.	N.M.	N.M.	3.014,30	3.771,40	N.M.	N.M.
NT	mg/L N	22,30			24,63	7,28	32,37			23,78	9,62
NT/DQO	g N/g DQO	0,07			0,00	0,31	0,09			0,01	0,27
N-NHx/NTK	g N/g N	0,55			0,40	0,44	0,58			0,05	0,45
DQO/DBO5	g DQO/g DBO	6,40	10,10	7,25	5,90	1,95	2,30	1,83	2,13	2,08	2,04
SST/DQO	g SS/g SS	0,76	1,24	1,17	1,09	0,07	0,57	1,20	0,97	0,94	2,33
SSV/SST	g SS/g SS		0,76	0,69				0,31	0,78		
Alcalinidade	Mol_eq/L	2,75	4,10	3,28	2,46	0,57	3,85	1,03	2,67	3,90	0,78
DQO/SSV	g DQO/g SS		1,06	1,23				2,74	1,34		

Legenda: (*): Considerado o limite de detecção; (N.M.): não medido.

Tabela 14 – Resultados das análises laboratoriais para primavera (parte 2)

Descrição	Unidade	Afluyente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final	Afluyente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final
Data da Coleta		28/10/2020	28/10/2020	28/10/2020	28/10/2020	29/10/2020	29/10/2020	29/10/2020	29/10/2020	29/10/2020	29/10/2020
Hora Coleta		21:00	21:00	21:00	23:30	03:00	03:00	03:00	03:00	05:30	09:00
Turno		N	N	N	N	D	D	D	D	D	U
Q ETE	L/s	310,00	310,00	310,00	310,00	300,00	300,00	300,00	300,00	300,00	352,00
Q Recirc. de Lodo	L/s	598,00	598,00	598,00	598,00	595,00	595,00	595,00	595,00	595,00	586,00
Temp. do Ar	°C	23,00	23,00	23,00	23,00	21,00	21,00	21,00	21,00	22,00	20,00
Alcalinidade Total	mg/L CaCO3	186,60	82,00	153,80	235,80	34,90	157,90	102,50	153,80	246,00	34,90
DBO5	mg/L O2	111,30	5.882,70	2.832,40	2.623,70	14,00	38,30	4.869,00	2.293,20	2.768,50	0,75
DQO	mg/L O2	241,42	9.371,63	6.296,19	5.317,64	28,23	80,66	9.301,73	5.806,91	5.737,01	1,61
Nitratos	mg/L N	0,09	N.M.	N.M.	0,12	7,32	0,06	N.M.	N.M.	0,20	7,88
Nitritos	mg/L N	0,01*	N.M.	N.M.	0,01*	0,01*	0,01*	N.M.	N.M.	0,01*	0,01*
NA	mg/L N	27,98	N.M.	N.M.	17,94	0,72	22,25	N.M.	N.M.	19,37	1,44
NTK	mg/L N	35,59	N.M.	N.M.	386,36	3,11	32,79	N.M.	N.M.	310,96	1,22
pH	-	7,13	6,73	6,75	6,51	6,50	7,08	6,70	6,79	6,70	6,70
SST	mg/L	38,90	10.410,00	7.170,00	4.625,00	44,00	60,00	8.960,00	5.423,80	6.608,30	1,56
SSV	mg/L	N.M.	5.727,30	4.391,70	N.M.	N.M.	N.M.	7.440,00	4.264,30	N.M.	N.M.
NT	mg/L N	35,12			24,46	7,23	29,34			26,08	8,15
NT/DQO	g N/g DQO	0,15			0,00	0,26	0,36			0,00	5,06
N-NHx/NTK	g N/g N	0,79			0,05	0,23	0,68			0,06	1,18
DQO/DBO5	g DQO/g DBO	2,17	1,59	2,22	2,03	2,02	2,11	1,91	2,53	2,07	2,15
SST/DQO	g SS/g SS	0,16	1,11	1,14	0,87	1,56	0,74	0,96	0,93	1,15	0,97
SSV/SST	g SS/g SS		0,55	0,61				0,83	0,79		
Alcalinidade	Mol_eq/L	3,73	1,64	3,08	4,72	0,70	3,16	2,05	3,08	4,92	0,70
DQO/SSV	g DQO/g SS		1,64	1,43				1,25	1,36		

Legenda: (*): Considerado o limite de detecção; (N.M.): não medido.

Tabela 15 – Resultados das análises laboratoriais para verão (parte 1)

Descrição	Unidade	Afluente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final	Afluente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final
Data da Coleta		21/12/2020	21/12/2020	21/12/2020	21/12/2020	21/12/2020	21/12/2020	21/12/2020	21/12/2020	21/12/2020	22/12/2020
Hora Coleta		12:00	12:00	12:00	14:30	18:00	17:45	17:45	17:45	20:35	00:00
Turno		T	T	T	T	N	N	N	N	N	D
Q ETE	L/s	300,00	300,00	300,00	300,00	300,00	300,00	300,00	300,00	300,00	260,00
Q Recirc. de Lodo	L/s	755,00	755,00	755,00	755,00	755,00	755,00	755,00	755,00	755,00	770,00
Temp. do Ar	°C	27,00	27,00	27,00	28,50	27,00	27,00	27,00	27,00	23,00	20,00
Alcalinidade Total	mg/L CaCO3	230,00	124,20	88,20	78,20	44,90	207,00	115,00	126,50	92,00	67,30
DBO5	mg/L O2	217,40	4.324,30	2.546,80	2.667,70	6,30	225,10	4.052,60	2.250,40	2.382,00	6,00
DQO	mg/L O2	444,12	8.812,45	5.349,83	5.734,26	13,30	472,08	8.393,08	4.720,76	5.105,19	12,80
Nitratos	mg/L N	0,06	N.M.	N.M.	0,31	7,04	0,06	N.M.	N.M.	0,77	4,93
Nitritos	mg/L N	0,01*	N.M.	N.M.	0,01*	0,01*	0,01*	N.M.	N.M.	0,01*	0,01*
NA	mg/L N	56,90	N.M.	N.M.	23,70	0,59	41,70	N.M.	N.M.	23,30	0,82
NTK	mg/L N	57,96	N.M.	N.M.	68,69	3,22	45,08	N.M.	N.M.	162,80	4,78
pH	-	7,35	6,72	6,78	6,90	6,93	7,26	6,86	6,87	6,87	6,92
SST	mg/L	195,00	13.770,00	5.015,00	4.090,00	1,56*	136,00	7.205,00	4.630,00	4.440,00	1,56*
SSV	mg/L	N.M.	11.680,00	3.635,00	N.M.	N.M.	N.M.	5.280,00	3.363,30	N.M.	N.M.
NT	mg/L N	64,26			30,61	7,52	48,97			30,18	7,75
NT/DQO	g N/g DQO	0,14			0,01	0,57	0,10			0,01	0,61
N-NHx/NTK	g N/g N	0,98			0,35	0,18	0,93			0,14	0,17
DQO/DBO5	g DQO/g DBO	2,04	2,04	2,10	2,15	2,11	2,10	2,07	2,10	2,14	2,13
SST/DQO	g SS/g SS	0,44	1,56	0,94	0,71	0,12	0,29	0,86	0,98	0,87	0,12
SSV/SST	g SS/g SS		0,85	0,72				0,73	0,73		
Alcalinidade	Mol_eq/L	4,60	2,48	1,76	1,56	0,90	4,14	2,30	2,53	1,84	1,35
DQO/SSV	g DQO/g SS		0,75	1,47				1,59	1,40		

Legenda: (*): Considerado o limite de detecção; (N.M.): não medido.

Tabela 16 – Resultados das análises laboratoriais para verão (parte 2)

Descrição	Unidade	Afluente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final	Afluente	Canal Lodo	Meio Reator	Saida Reator	Efluente Final
Data da Coleta		22/12/2020	22/12/2020	22/12/2020	22/12/2020	22/12/2020	22/12/2020	22/12/2020	22/12/2020	22/12/2020	22/12/2020
Hora Coleta		00:00	00:00	00:00	02:30	06:00	06:00	06:00	06:00	08:30	12:00
Turno		D	D	D	D	A	A	A	A	A	U
Q ETE	L/s	260,00	260,00	260,00	260,00	260,00	260,00	260,00	260,00	260,00	280,00
Q Recirc. de Lodo	L/s	770,00	770,00	770,00	770,00	770,00	770,00	770,00	770,00	775,00	755,00
Temp. do Ar	°C	20,00	20,00	20,00	19,00	18,00	18,00	18,00	18,00	22,00	23,00
Alcalinidade Total	mg/L CaCO3	209,30	115,00	103,50	95,80	46,00	165,60	88,20	95,80	69,00	48,30
DBO5	mg/L O2	157,00	3.994,60	2.874,10	2.643,30	9,20	114,70	3.464,90	2.648,90	2.850,70	5,20
DQO	mg/L O2	353,25	8.253,28	5.909,00	5.769,21	18,83	251,90	7.344,63	5.559,52	5.909,00	11,79
Nitratos	mg/L N	0,06	N.M.	N.M.	0,21	6,50	0,06	N.M.	N.M.	1,04	6,52
Nitritos	mg/L N	0,01	N.M.	N.M.	0,01	0,01	0,01	N.M.	N.M.	0,01	0,01
NA	mg/L N	40,50	N.M.	N.M.	21,70	0,03	26,90	N.M.	N.M.	21,00	0,21
NTK	mg/L N	41,22	N.M.	N.M.	162,80	1,93	29,90	N.M.	N.M.	54,25	2,73
pH	-	7,26	6,84	6,86	6,92	6,82	7,15	6,80	6,76	6,96	7,30
SST	mg/L	95,70	7.536,70	4.790,00	4.830,00	17,00	75,60	6.156,70	4.656,70	4.980,00	1,56
SSV	mg/L	N.M.	5.473,30	3.433,30	N.M.	N.M.	N.M.	4.453,30	3.316,70	N.M.	N.M.
NT	mg/L N	47,77			28,63	6,85	34,06			27,97	7,52
NT/DQO	g N/g DQO	0,14			0,00	0,36	0,14			0,00	0,64
N-NHx/NTK	g N/g N	0,98			0,13	0,01	0,90			0,39	0,08
DQO/DBO5	g DQO/g DBO	2,25	2,07	2,06	2,18	2,05	2,20	2,12	2,10	2,07	2,27
SST/DQO	g SS/g SS	0,27	0,91	0,81	0,84	0,90	0,30	0,84	0,84	0,84	0,13
SSV/SST	g SS/g SS		0,73	0,72				0,72	0,71		
Alcalinidade	Mol_eq/L	4,19	2,30	2,07	1,92	0,92	3,31	1,76	1,92	1,38	0,97
DQO/SSV	g DQO/g SS		1,51	1,72				1,65	1,68		

Legenda: (*): Considerado o limite de detecção; (N.M.): não medido.

A partir dos dados disponibilizados e conferência inicial, comparou-se a relações entre os parâmetros conforme a relação expressa na Tabela 7. As relações grifadas em vermelho na Tabela 17, a seguir, foram aquelas consideradas fora da faixa considerada típica, porém considerados ainda compatíveis dentro do escopo do estudo. Desse modo, os resultados das análises laboratoriais foram aceitos como parâmetros a serem utilizados no modelo.

Tabela 17 – Relações encontradas para esgoto bruto e lodo ativado nas amostras

Local	Relação	I-T	I-N	I-D	I-A	P-A	P-T	P-N	P-D	V-T	V-N	V-D	V-A
Esgoto bruto	Ntot/DQO	0,09	0,11	0,15	0,03	0,07	0,09	0,15	0,36	0,14	0,10	0,14	0,14
	N-NHx/NTK	0,59	0,58	0,69	0,27	0,55	0,58	0,79	0,68	0,98	0,93	0,98	0,90
	DQO/DBO5	2,02	1,92	1,88	1,96	6,40	2,30	2,17	2,11	2,04	2,10	2,25	2,20
	SST/DQO	0,32	0,35	0,14	0,81	0,76	0,57	0,16	0,74	0,44	0,29	0,27	0,30
	Alcalinidade	4,47	3,90	3,52	4,13	2,75	3,85	3,73	3,16	4,60	4,14	4,19	3,31
Lodo Ativado	DQO/SSV	1,55	0,96	1,09	1,12	1,06	2,74	1,64	1,25	0,75	1,59	1,51	1,65
	SSV/SST	0,65	0,66	0,68	0,71	0,76	0,31	0,55	0,83	0,85	0,73	0,73	0,72
Legenda:		I-T: inverno, tarde				P-A: primavera, manhã;				V-T: verão, tarde			
		I-N: inverno, noite;				P-T: primavera, tarde;				V-T: verão, noite;			
		I-D: inverno, madrugada;				P-N: primavera, noite;				V-T: verão, madrugada;			
		I-A: inverno, manhã;				P-D: primavera, madrugada;				V-T: verão, manhã.			

4.1.3 Resultados da elaboração de perfis diários do efluente

O método descrito no item 3.2.3 visou a elaboração de um perfil de variação típico dos parâmetros do esgoto afluente, visando representar uma entrada dinâmica para as simulações. O resultado do método baseado na variação diária, medida pela razão do valor do parâmetro pela média amostral, é apresentado no Gráfico 3 em forma de variação diária da DQO afluente, também calculada como a razão entre o valor da DQO da amostra pela média diária. Na sequência, adicionou-se uma linha de tendência aos pontos coletados, obtendo-se a curva expressa no Gráfico 4.

Gráfico 3 – Variação da DQO afluyente para nas diferentes estações (sendo I – inverno; P – primavera; V – verão)

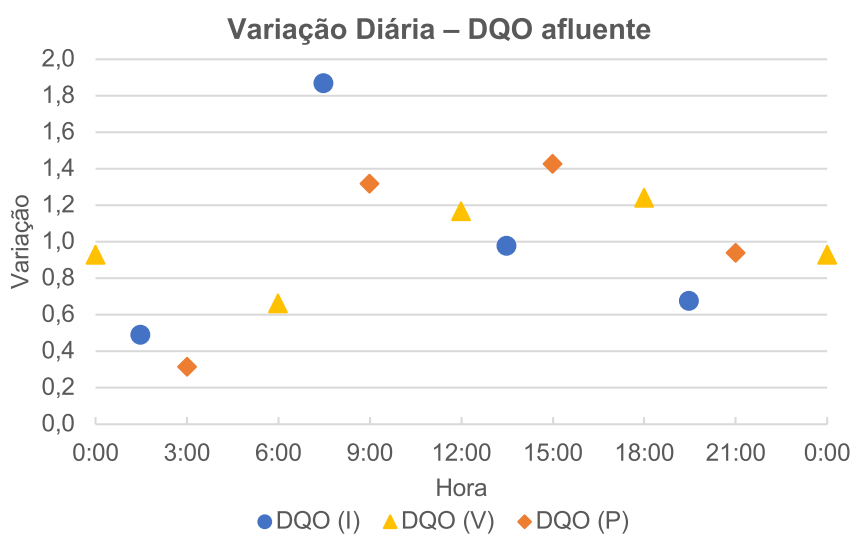
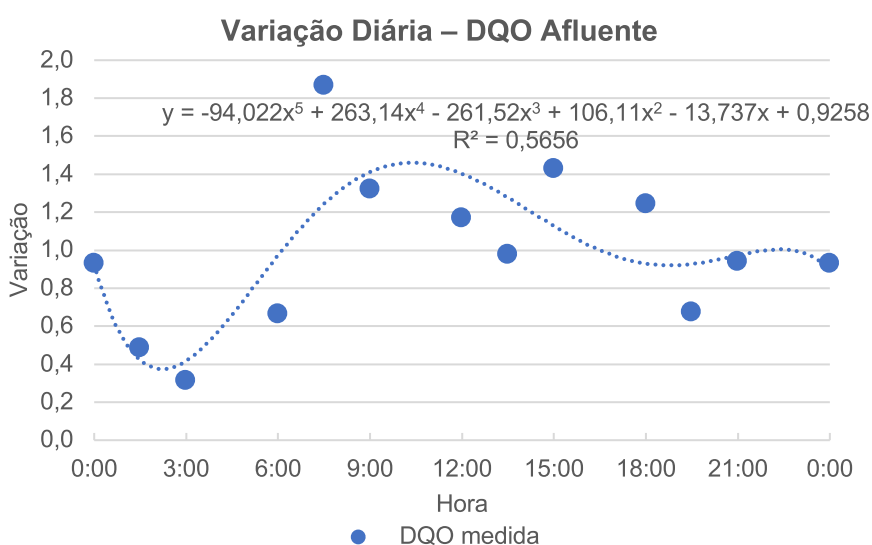


Gráfico 4 – Linha de tendência para a variação da DQO medida em todas as estações



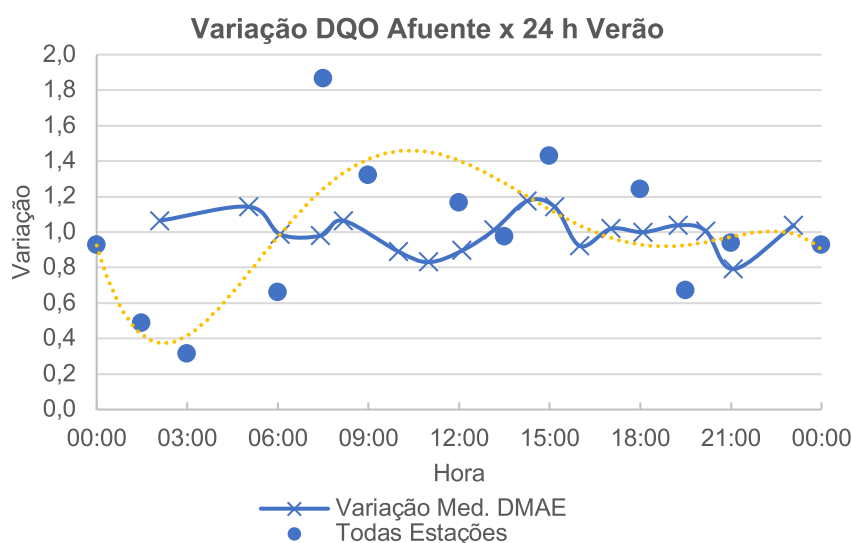
O objetivo da linha de tendência foi identificar um perfil de variação para a DQO afluyente válida para todas as estações. A linha de tendência polinomial de 5º grau resultou no coeficiente R^2 de 0,56, com elevação no período da manhã, estabilização a partir das 18h e ponto mínimo durante a madrugada. No entanto, ao analisar diretamente os pontos, observou-se um pico no início da manhã, elevação no turno da tarde e estabilização a partir das 22:30, não condizente com esta linha de tendência.

Outra análise realizada teve como base o levantamento de 24 h do afluente realizado pela equipe do DMAE no dia 29/12/2020, visando identificar a variação de DQO. A partir dos resultados da Tabela 18, comparou-se o perfil estimado no Gráfico 4 com o perfil real levantado durante 24 h. No Gráfico 5 é representada essa comparação, ao final da qual, concluiu-se que o perfil não representou a variação de parâmetros da maneira como a esperada.

Tabela 18 – Resultados de DQO afluente e efluente em 24 horas em dia de verão

Hora da coleta	DQO Afluente (mg/L)	DQO Efluente (mg/)	Variação DQO Afluente	Variação DQO Efluente
02:06	328	4	1,065	0,214
05:03	352	2	1,142	0,107
06:05	304	2	0,987	0,107
07:25	302	49	0,980	2,625
08:10	328	2	1,065	0,107
10:00	274	2	0,889	0,107
11:00	256	2	0,831	0,107
12:06	276	53	0,896	2,839
13:10	312	27	1,013	1,446
14:15	362	22	1,175	1,179
15:10	352	32	1,142	1,714
16:00	284	56	0,922	3,000
17:02	314	27	1,019	1,446
18:06	308	20	1,000	1,071
19:15	320	2	1,039	0,107
20:10	310	22	1,006	1,179
21:05	244	6	0,792	0,321
23:05	320	6	1,039	0,321
<i>Média</i>	<i>308,1</i>	<i>18,7</i>		
<i>DP</i>	<i>31,2</i>	<i>18,3</i>		
<i>CV</i>	<i>10%</i>	<i>98%</i>		

Gráfico 5 – Comparação do perfil de 24 h real em um dia de verão com a linha de tendência para a variação da DQO medida em todas as estações

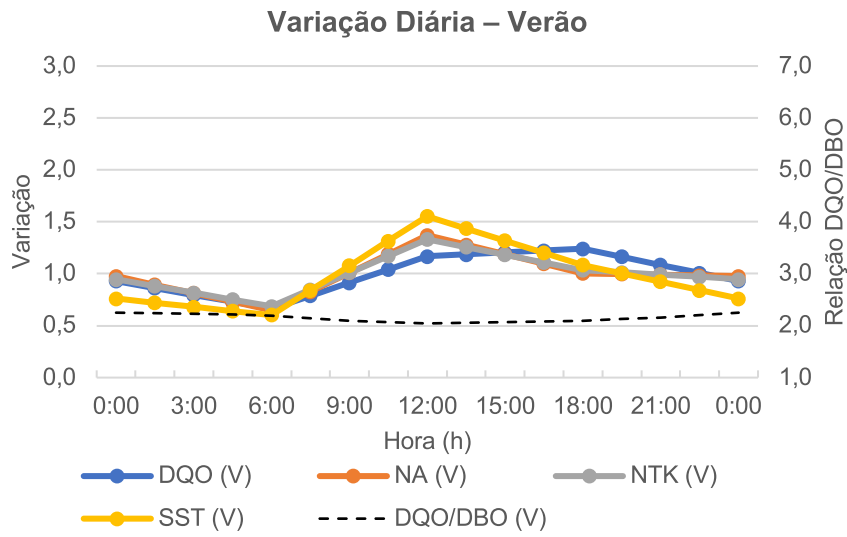
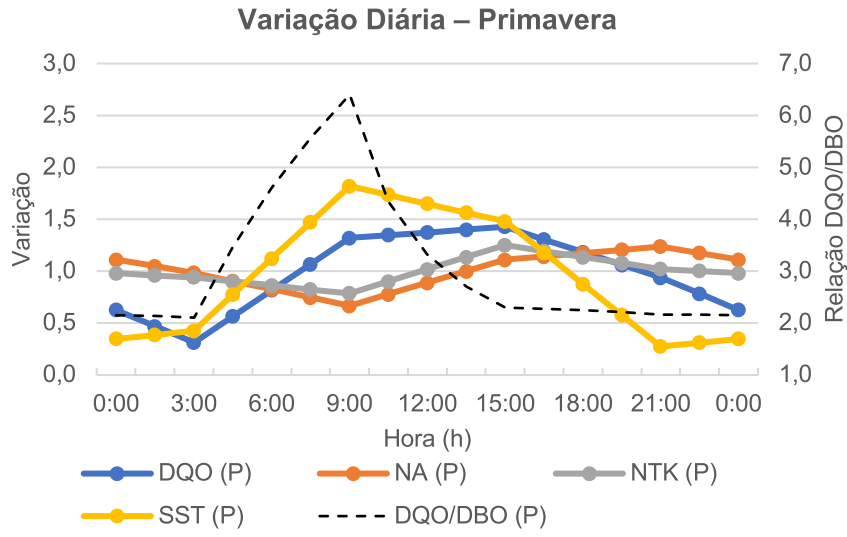
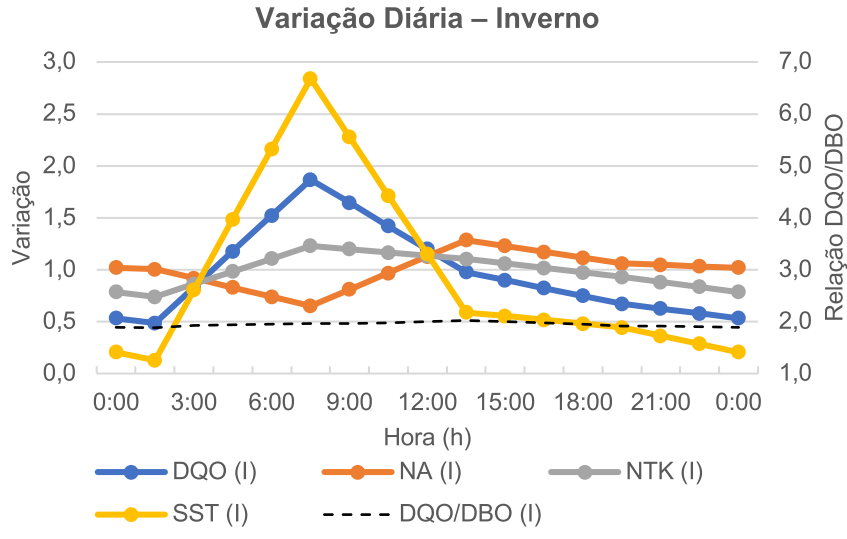


Pelo exposto, restou demonstrado que a estimativa realizada com o método da linha de tendência aplicada à variação da DQO durante as campanhas de coleta não corresponde à variação real da DQO afuente em um dia aleatório no verão. Conforme observado na vistoria à ETE, a estação trata lodo de fossas sépticas aportado por caminhões limpa-fossa, o que pode alterar o perfil da DQO sem um padrão diário. De modo geral, observou-se maior variação da DQO do afuente durante os dias das coletas de amostras para a pesquisa do que no dia do levantamento de 24 h realizado pelo DMAE.

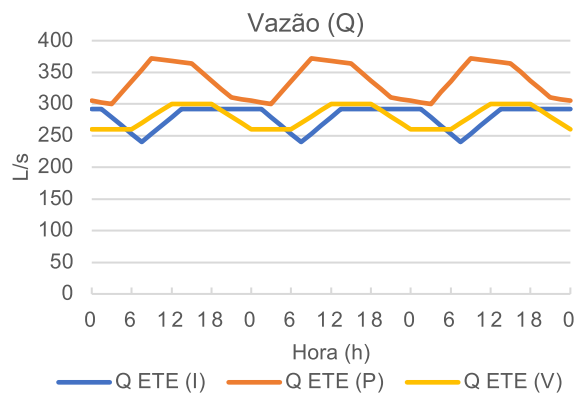
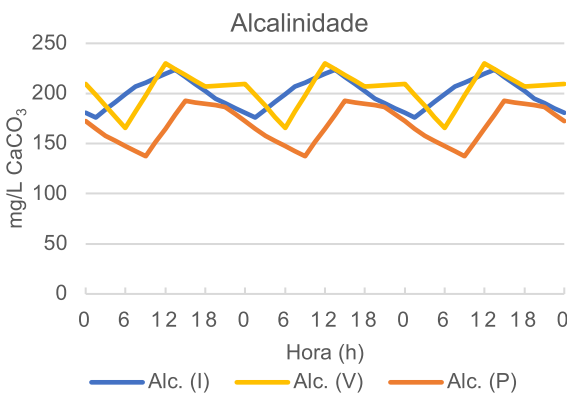
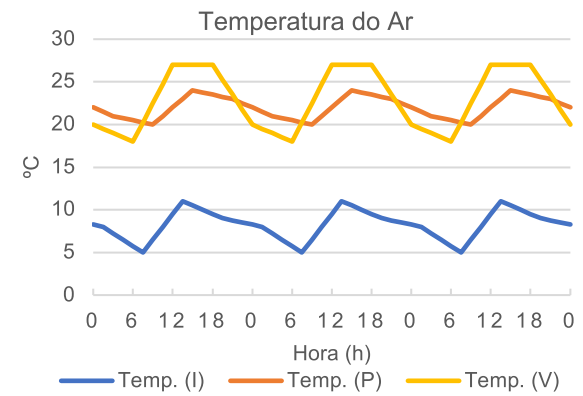
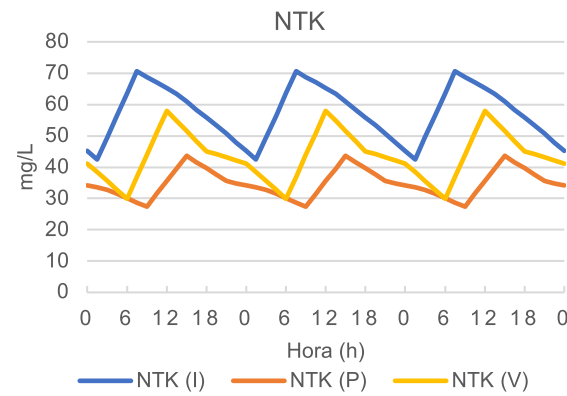
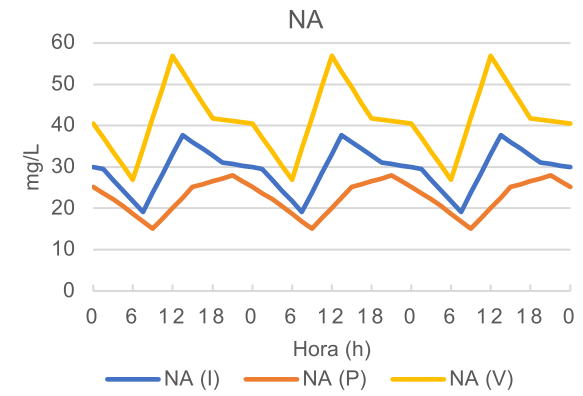
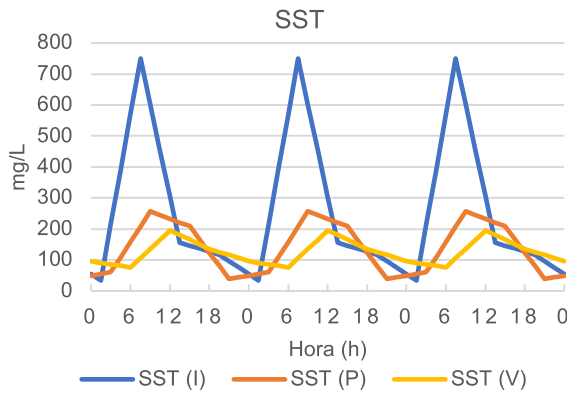
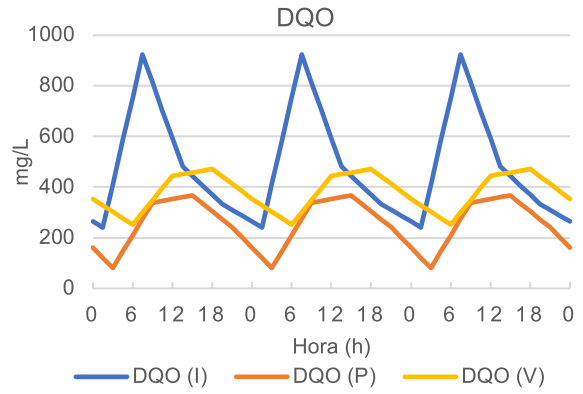
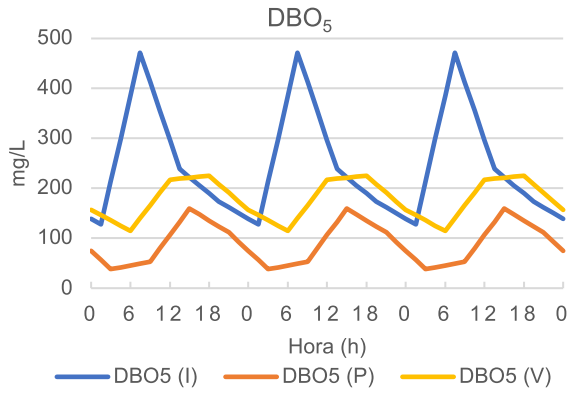
Adotando-se uma variação linear entre dois parâmetros, sendo esta a alternativa mais simples possível para a determinação de um perfil diário, obteve-se os gráficos 6 a 8, a seguir apresentados. A relação DQO/DBO foi ilustrada em linha tracejada, chamando atenção no resultado da primavera, sendo identificada grande variação no período da manhã.

Os perfis do afuente adotados para as simulações dinâmicas (uma para cada estação do ano) foram extrapolados para 10 dias através de simples repetição. As simulações dinâmicas foram realizadas, portanto, em um período de 240 h sendo desconsiderados os resultados das primeiras 48 h a título de estabilização do sistema. Os perfis do afuente utilizados no modelo estão expressos nos gráficos a seguir para 72 h, para os principais parâmetros (DBO5, DQO, NA, NTK, SST, temperatura do ar e vazão). Para os demais parâmetros também foi adotada uma variação linear entre duas amostras, inclusive os originados do fracionamento da DQO.

Gráficos 6, 7 e 8 – Variação dos principais parâmetros do afluente para dados de inverno, primavera e verão



Gráficos 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15 e 16 – Perfis de 72 h para afluente bruto



4.1.4 Resultados obtidos no fracionamento da DQO referente aos dados secundários e às amostras coletadas

A DQO obtida das amostras nos diferentes pontos de coleta na estação foi dividida nas frações representadas esquematicamente na Figura 18, a partir da metodologia exposta no item 3.2.4. Nas tabelas 19 a 30 são apresentados os resultados obtidos, que subsidiaram a entrada de dados necessários ao modelo.

Observa-se que o percentual da DQO solúvel considerado de 20% considerado para o afluente e efluente final é inferior ao normalmente obtido na literatura para esgotos domésticos, sendo indicados valores entre 40% e 60%. No entanto, conforme explicado no respectivo item da metodologia, valores muito superiores aos 20% implicava em erro nas equações básicas que regem as relações entre as frações da DQO.

Uma particularidade foi identificada nos resultados de laboratório quanto ao afluente: para a amostra da primavera, período da manhã (P1-Marrom-P-A), a DQO_{TOT} resultou 339,27 mg/L e a DBO_5 , 53,00 mg/L, numa relação $DQO/DBO_5 = 6,40$. Este resultado indica uma biodegradabilidade menor para este afluente, e o método descrito para as demais amostras resultou num percentual considerado alto para a DQO solúvel biodegradável (S_B). Um ajuste na estimativa da DQO solúvel foi procedido, para esta amostra, sendo adotado o valor de 10% DQO_{TOT} , com uma elevação da DQO particulada biodegradável (XC_B) e diminuição do percentual S_B , trazendo essas frações para proporções mais próximas do esperado na literatura.

Quanto à fração particulada biodegradável do afluente, $XC_{B,INF}$, observou-se uma variação entre 55 e 75% em relação à DQO_{TOT} , o que está dentro do observado na literatura (HENZE; COMEAU, 2008; MYSZOGRAJ; PŁUCIENNIK-KOROPCZUK; JAKUBASZEK, 2017; PŁUCIENNIK-KOROPCZUK; MYSZOGRAJ, 2019), exceto quanto ao citado ponto P1-Marrom-P-A, onde se observou 26,9%.

Quanto ao fracionamento dos dados secundários da ETE, consolidados em grupos conforme a Tabela 10, por médias, foi efetuado por metodologia similar à utilizada para as amostras coletadas nas campanhas, sendo necessário para a simulação da ETE em modo estacionário. Na Tabela 31 são apresentados os resultados obtidos para cada grupo.

Tabela 19 – Resultados para fracionamento da DQO – inverno, tarde

Data		Inverno – 21/08/2020									
Hora	13:30		13:30		13:30		16:00		19:30		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT,EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	482,60	100,0%	6.287,78	100,0%	2.088,26	100,0%	3.146,96	100,0%	24,55	100,0%	
X	386,08	80,0%	6.282,87	99,9%	2.083,35	99,8%	3.142,05	99,8%	19,64	80,0%	
S	96,52	20,0%	4,91	0,1%	4,91	0,2%	4,91	0,2%	4,91	20,0%	
X _{EFF}	19,64		19,64		19,64		19,64		19,64		
S _{EFF}	4,91		4,91		4,91		4,91		4,91		
S _U	3,51	0,7%	3,51	0,1%	3,51	0,2%	3,51	0,1%	3,51	14,3%	
S _B	93,01	19,3%	1,40	0,0%	1,40	0,1%	1,40	0,0%	1,40	5,7%	
DBO _{TOT}	349,16		3.524,92		1.244,78		1.757,70		14,21		
DQO _B	410,77		4.146,97		1.464,45		2.067,88		15,79		
X _{CB}	317,76	65,8%	1.999,83	31,8%	382,92	18,3%	885,80	28,1%	14,38	58,6%	
X _{BIO}	0,00		2.145,74		1.080,12		1.180,67		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	1.502,02	23,9%	756,09	36,2%	826,47	26,3%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	107,29	1,7%	54,01	2,6%	59,03	1,9%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	536,43	8,5%	270,03	12,9%	295,17	9,4%	0,00	0,0%	
DQO _U	71,83		2.140,81		623,81		1.079,08		8,76		
X _U	68,32	14,2%	2.137,30	34,0%	620,31	29,7%	1.075,58	34,2%	5,26	21,4%	
SSV _{DQO} *	5,11		1,55		1,08		1,40		20,98		
SSV _{nb}	13,36		1.382,83		572,44		768,16		0,25		
SSV _b	80,06		2.682,17		1.350,16		1.475,84		0,69		

(*): adimensional

Tabela 20 – Resultados para fracionamento da DQO – inverno, noite

Data		Inverno – 21/08/2020									
Hora	19:30		19:30		19:30		22:10		1:30 (+1)		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT,EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	332,34	100,0%	5.193,79	100,0%	3.252,83	100,0%	1.805,94	100,0%	55,30	100,0%	
X	265,87	80,0%	5.182,73	99,8%	3.241,77	99,7%	1.794,88	99,4%	44,24	80,0%	
S	66,47	20,0%	11,06	0,2%	11,06	0,3%	11,06	0,6%	11,06	20,0%	
X _{EFF}	44,24		44,24		44,24		44,24		44,24		
S _{EFF}	11,06		11,06		11,06		11,06		11,06		
S _U	8,88	2,7%	8,88	0,2%	8,88	0,3%	8,88	0,5%	8,88	16,1%	
S _B	57,58	17,3%	2,18	0,0%	2,18	0,1%	2,18	0,1%	2,18	3,9%	
DBO _{TOT}	253,45		2.915,21		1.932,90		1.082,27		29,78		
DQO _B	298,18		3.429,66		2.274,00		1.273,26		33,09		
X _{CB}	240,59	72,4%	557,32	10,7%	737,08	22,7%	137,44	7,6%	30,92	55,9%	
X _{BIO}	0,00		2.870,16		1.534,75		1.133,64		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	2.009,11	38,7%	1.074,32	33,0%	793,55	43,9%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	143,51	2,8%	76,74	2,4%	56,68	3,1%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	717,54	13,8%	383,69	11,8%	283,41	15,7%	0,00	0,0%	
DQO _U	34,16		1.764,13		978,83		532,68		22,21		
X _U	25,28	7,6%	1.755,25	33,8%	969,95	29,8%	523,79	29,0%	13,32	24,1%	
SSV _{DQO} *			0,96		1,18		0,90				
SSV _{nb}			1.837,30		819,07		583,94				
SSV _b			3.587,70		1.918,43		1.417,06				

(*): adimensional

Tabela 21 – Resultados para fracionamento da DQO – inverno, madrugada

Data		Inverno – 21/08/2020									
Hora	1:30		1:30		1:30		4:00		7:45		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT,EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	240,59	100,0%	5.193,79	100,0%	4.029,22	100,0%	1.594,20	100,0%	26,83	100,0%	
X	192,47	80,0%	5.188,42	99,9%	4.023,85	99,9%	1.588,83	99,7%	21,46	80,0%	
S	48,12	20,0%	5,37	0,1%	5,37	0,1%	5,37	0,3%	5,37	20,0%	
X _{EFF}	21,46		21,46		21,46		21,46		21,46		
S _{EFF}	5,37		5,37		5,37		5,37		5,37		
S _U	4,14	1,7%	4,14	0,1%	4,14	0,1%	4,14	0,3%	4,14	15,4%	
S _B	43,98	18,3%	1,23	0,0%	1,23	0,0%	1,23	0,1%	1,23	4,6%	
DBO _{TOT}	187,02		2.907,50		2.376,91		945,64		14,84		
DQO _B	220,02		3.420,59		2.796,37		1.112,51		16,49		
X _{CB}	176,04	73,2%	911,49	17,5%	1.523,94	37,8%	8,99	0,6%	15,26	56,9%	
X _{BIO}	0,00		2.507,87		1.271,19		1.102,30		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	1.755,51	33,8%	889,84	22,1%	771,61	48,4%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	125,39	2,4%	63,56	1,6%	55,11	3,5%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	626,97	12,1%	317,80	7,9%	275,57	17,3%	0,00	0,0%	
DQO _U	20,57		1.773,20		1.232,85		481,69		10,34		
X _U	16,43	6,8%	1.769,07	34,1%	1.228,72	30,5%	477,55	30,0%	6,21	23,1%	
SSV _{DQO} *			1,09		1,76		0,81				
SSV _{nb}			1.621,86		698,51		592,11				
SSV _b			3.134,84		1.588,99		1.377,87				

(*): adimensional

Tabela 22 – Resultados para fracionamento da DQO – inverno, manhã

Data		Inverno – 21/08/2020									
Hora	7:30		7:30		7:30		10:00		13:35		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT,EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	923,69	100,0%	3.782,18	100,0%	2.617,61	100,0%	4.170,38	100,0%	19,98	100,0%	
X	738,95	80,0%	3.778,18	99,9%	2.613,61	99,8%	4.166,38	99,9%	15,98	80,0%	
S	184,74	20,0%	4,00	0,1%	4,00	0,2%	4,00	0,1%	4,00	20,0%	
X _{EFF}	15,98		15,98		15,98		15,98		15,98		
S _{EFF}	4,00		4,00		4,00		4,00		4,00		
S _U	2,75	0,3%	2,75	0,1%	2,75	0,1%	2,75	0,1%	2,75	13,8%	
S _B	181,98	19,7%	1,24	0,0%	1,24	0,0%	1,24	0,0%	1,24	6,2%	
DBO _{TOT}	689,82		2.123,07		1.542,28		2.459,69		11,79		
DQO _B	811,56		2.497,73		1.814,44		2.893,76		13,10		
X _{CB}	629,57	68,2%	715,07	18,9%	114,90	4,4%	1.582,88	38,0%	11,85	59,3%	
X _{BIO}	0,00		1.781,42		1.698,30		1.309,63		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	1.246,99	33,0%	1.188,81	45,4%	916,74	22,0%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	89,07	2,4%	84,92	3,2%	65,48	1,6%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	445,35	11,8%	424,58	16,2%	327,41	7,9%	0,00	0,0%	
DQO _U	112,13		1.284,45		803,17		1.276,62		6,88		
X _U	109,38	11,8%	1.281,70	33,9%	800,41	30,6%	1.273,87	30,5%	4,13	20,7%	
SSV _{DQO} *			1,12		0,85		1,77				
SSV _{nb}			1.143,23		937,12		720,96				
SSV _b			2.226,77		2.122,88		1.637,04				

(*): adimensional

Tabela 23 – Resultados para fracionamento da DQO – primavera, manhã

Data		Primavera – 28/10/2020									
Hora	9:00		9:00		9:00		11:30		15:00		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT,EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	339,27	100,0%	9.019,39	100,0%	5.594,50	100,0%	5.383,40	100,0%	23,36	100,0%	
X	305,34	90,0%	9.014,72	99,9%	5.589,83	99,9%	5.378,73	99,9%	18,69	80,0%	
S	33,93	10,0%	4,67	0,1%	4,67	0,1%	4,67	0,1%	4,67	20,0%	
X _{EFF}	18,69		18,69		18,69		18,69		18,69		
S _{EFF}	4,67		4,67		4,67		4,67		4,67		
S _U	3,73	1,1%	3,73	0,0%	3,73	0,1%	3,73	0,1%	3,73	16,0%	
S _B	30,20	8,9%	0,94	0,0%	0,94	0,0%	0,94	0,0%	0,94	4,0%	
DBO _{TOT}	77,56		998,55		907,25		1.073,81		12,63		
DQO _B	91,24		1.174,76		1.067,35		1.263,30		14,03		
X _{CB}	91,24	26,9%	286,89	3,2%	373,25	6,7%	600,12	11,1%	13,09	56,0%	
X _{BIO}	0,00		886,93		693,16		662,25		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	620,85	6,9%	485,21	8,7%	463,57	8,6%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	44,35	0,5%	34,66	0,6%	33,11	0,6%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	221,73	2,5%	173,29	3,1%	165,56	3,1%	0,00	0,0%	
DQO _U	248,03		7.844,63		4.527,15		4.120,10		9,33		
X _U	244,29	72,0%	7.840,90	86,9%	4.523,42	80,9%	4.116,37	76,5%	5,60	24,0%	
SSV _{DQO} *			1,06		1,23		1,52				
SSV _{nb}			7.405,64		3.675,25		2.699,35				
SSV _b			1.108,66		866,45		827,81				

(*): adimensional

Tabela 24 – Resultados para fracionamento da DQO – primavera, tarde

Data		Primavera – 28/10/2020									
Hora	15:00		15:00		15:00		17:30		21:00		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT,EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	367,23	100,0%	8.253,28	100,0%	5.038,05	100,0%	4.478,88	100,0%	35,22	100,0%	
X	293,78	80,0%	8.246,24	99,9%	5.031,01	99,9%	4.471,84	99,8%	28,18	80,0%	
S	73,45	20,0%	7,04	0,1%	7,04	0,1%	7,04	0,2%	7,04	20,0%	
X _{EFF}	28,18		28,18		28,18		28,18		28,18		
S _{EFF}	7,04		7,04		7,04		7,04		7,04		
S _U	6,00	1,6%	6,00	0,1%	6,00	0,1%	6,00	0,1%	6,00	17,0%	
S _B	67,45	18,4%	1,05	0,0%	1,05	0,0%	1,05	0,0%	1,05	3,0%	
DBO _{TOT}	233,40		5.046,78		2.781,71		2.530,01		18,21		
DQO _B	274,59		5.937,38		3.272,60		2.976,48		20,23		
X _{CB}	207,14	56,4%	4.200,38	50,9%	1.309,58	26,0%	1.635,64	36,5%	19,18	54,5%	
X _{BIO}	0,00		1.735,96		1.961,96		1.339,79		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	1.215,17	14,7%	1.373,37	27,3%	937,86	20,9%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	86,80	1,1%	98,10	1,9%	66,99	1,5%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	433,99	5,3%	490,49	9,7%	334,95	7,5%	0,00	0,0%	
DQO _U	92,64		2.315,90		1.765,45		1.502,40		14,99		
X _U	86,64	23,6%	2.309,90	28,0%	1.759,46	34,9%	1.496,40	33,4%	8,99	25,5%	
SSV _{DQO} *			2,74		1,33		1,78				
SSV _{nb}			844,35		1.318,95		842,26				
SSV _b			2.169,95		2.452,45		1.674,74				

(*): adimensional

Tabela 25 – Resultados para fracionamento da DQO – primavera, noite

Data		Primavera – 28/10/2020									
Hora	21:00		21:00		21:00		23:30		3:00 (+1)		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT,EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	241,42	100,0%	9.371,63	100,0%	6.296,19	100,0%	5.317,64	100,0%	28,23	100,0%	
X	193,14	80,0%	9.365,98	99,9%	6.290,54	99,9%	5.311,99	99,9%	22,58	80,0%	
S	48,28	20,0%	5,65	0,1%	5,65	0,1%	5,65	0,1%	5,65	20,0%	
X _{EFF}	22,58		22,58		22,58		22,58		22,58		
S _{EFF}	5,65		5,65		5,65		5,65		5,65		
S _U	4,74	2,0%	4,74	0,1%	4,74	0,1%	4,74	0,1%	4,74	16,8%	
S _B	43,54	18,0%	0,90	0,0%	0,90	0,0%	0,90	0,0%	0,90	3,2%	
DBO _{TOT}	162,87		6.575,78		3.330,55		3.085,14		14,73		
DQO _B	191,61		7.736,21		3.918,29		3.629,58		16,37		
X _{CB}	148,07	61,3%	3.951,20	42,2%	1.729,47	27,5%	2.112,17	39,7%	15,47	54,8%	
X _{BIO}	0,00		3.784,12		2.187,92		1.516,50		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	2.648,88	28,3%	1.531,54	24,3%	1.061,55	20,0%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	189,21	2,0%	109,40	1,7%	75,83	1,4%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	946,03	10,1%	546,98	8,7%	379,13	7,1%	0,00	0,0%	
DQO _U	49,81		1.635,42		2.377,90		1.688,06		11,86		
X _U	45,06	18,7%	1.630,67	17,4%	2.373,16	37,7%	1.683,32	31,7%	7,12	25,2%	
SSV _{DQO} *			1,64		1,43		1,91				
SSV _{nb}			997,16		1.656,80		879,37				
SSV _b			4.730,14		2.734,90		1.895,63				

(*): adimensional

Tabela 26 – Resultados para fracionamento da DQO – primavera, madrugada

Data		Primavera – 29/10/2020									
Hora	3:00		3:00		3:00		5:30		9:00		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT,EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	80,66	100,0%	9.301,73	100,0%	5.806,91	100,0%	5.737,01	100,0%	1,61	100,0%	
X	64,53	80,0%	9.301,41	100,0%	5.806,59	100,0%	5.736,69	100,0%	1,29	80,0%	
S	16,13	20,0%	0,32	0,0%	0,32	0,0%	0,32	0,0%	0,32	20,0%	
X _{EFF}	1,29		1,29		1,29		1,29		1,29		
S _{EFF}	0,32		0,32		0,32		0,32		0,32		
S _U	0,29	0,4%	0,29	0,0%	0,29	0,0%	0,29	0,0%	0,29	18,2%	
S _B	15,84	19,6%	0,03	0,0%	0,03	0,0%	0,03	0,0%	0,03	1,8%	
DBO _{TOT}	56,05		5.442,65		2.696,51		3.255,41		0,79		
DQO _B	65,94		6.403,12		3.172,37		3.829,89		0,88		
X _{CB}	50,10	62,1%	2.305,73	24,8%	1.308,55	22,5%	1.712,22	29,8%	0,85	52,7%	
X _{BIO}	0,00		4.097,36		1.863,79		2.117,64		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	2.868,15	30,8%	1.304,65	22,5%	1.482,35	25,8%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	204,87	2,2%	93,19	1,6%	105,88	1,8%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	1.024,34	11,0%	465,95	8,0%	529,41	9,2%	0,00	0,0%	
DQO _U	14,72		2.898,61		2.634,54		1.907,12		0,73		
X _U	14,43	17,9%	2.898,32	31,2%	2.634,25	45,4%	1.906,83	33,2%	0,44	27,3%	
SSV _{DQO} *			1,25		1,36		1,45				
SSV _{nb}			2.318,30		1.934,56		1.317,93				
SSV _b			5.121,70		2.329,74		2.647,05				

(*): adimensional

Tabela 27 – Resultados para fracionamento da DQO – verão, tarde

Data		Verão – 21/12/2020									
Hora	12:00		12:00		12:00		14:30		18:00		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT, EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	444,12	100,0%	8.812,45	100,0%	5.349,83	100,0%	5.734,26	100,0%	13,30	100,0%	
X	355,30	80,0%	8.809,79	100,0%	5.347,17	100,0%	5.731,60	100,0%	10,64	80,0%	
S	88,82	20,0%	2,66	0,0%	2,66	0,0%	2,66	0,0%	2,66	20,0%	
X _{EFF}	10,64		10,64		10,64		10,64		10,64		
S _{EFF}	2,66		2,66		2,66		2,66		2,66		
S _U	2,37	0,5%	2,37	0,0%	2,37	0,0%	2,37	0,0%	2,37	17,8%	
S _B	86,45	19,5%	0,29	0,0%	0,29	0,0%	0,29	0,0%	0,29	2,2%	
DBO _{TOT}	318,13		4.833,78		2.994,72		3.136,88		6,63		
DQO _B	374,27		5.686,80		3.523,19		3.690,45		7,37		
X _{CB}	287,82	64,8%	32,14	0,4%	1.607,01	30,0%	2.426,20	42,3%	7,08	53,2%	
X _{BIO}	0,00		5.654,37		1.915,90		1.263,96		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	3.958,06	44,9%	1.341,13	25,1%	884,77	15,4%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	282,72	3,2%	95,79	1,8%	63,20	1,1%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	1.413,59	16,0%	478,97	9,0%	315,99	5,5%	0,00	0,0%	
DQO _U	69,85		3.125,65		1.826,64		2.043,81		5,93		
X _U	67,47	15,2%	3.123,28	35,4%	1.824,26	34,1%	2.041,44	35,6%	3,56	26,8%	
SSV _{DQO} *			0,75		1,47		2,34				
SSV _{nb}			4.140,84		1.240,13		874,05				
SSV _b			7.539,16		2.394,87		1.579,95				

(*): adimensional

Tabela 28 – Resultados para fracionamento da DQO – verão, noite

Data		Verão – 21/12/2020									
Hora	17:45		17:45		17:45		20:35		0:00 (+1)		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT, EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	472,08	100,0%	8.393,08	100,0%	4.720,76	100,0%	5.105,19	100,0%	12,80	100,0%	
X	377,66	80,0%	8.390,52	100,0%	4.718,20	99,9%	5.102,63	99,9%	10,24	80,0%	
S	94,42	20,0%	2,56	0,0%	2,56	0,1%	2,56	0,1%	2,56	20,0%	
X _{EFF}	10,24		10,24		10,24		10,24		10,24		
S _{EFF}	2,56		2,56		2,56		2,56		2,56		
S _U	2,31	0,5%	2,31	0,0%	2,31	0,0%	2,31	0,0%	2,31	18,1%	
S _B	92,10	19,5%	0,25	0,0%	0,25	0,0%	0,25	0,0%	0,25	1,9%	
DBO _{TOT}	329,40		4.530,07		2.646,19		2.800,93		6,31		
DQO _B	387,53		5.329,49		3.113,16		3.295,21		7,02		
X _{CB}	295,43	62,6%	2.646,37	31,5%	1.337,72	28,3%	1.918,77	37,6%	6,77	52,9%	
X _{BIO}	0,00		2.682,88		1.775,20		1.376,20		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	1.878,01	22,4%	1.242,64	26,3%	963,34	18,9%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	134,14	1,6%	88,76	1,9%	68,81	1,3%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	670,72	8,0%	443,80	9,4%	344,05	6,7%	0,00	0,0%	
DQO _U	84,55		3.063,59		1.607,60		1.809,98		5,78		
X _U	82,24	17,4%	3.061,28	36,5%	1.605,29	34,0%	1.807,66	35,4%	3,47	27,1%	
SSV _{DQO} *			1,59		1,40		1,92				
SSV _{nb}			1.926,41		1.144,30		943,75				
SSV _b			3.353,59		2.219,00		1.720,25				

(*): adimensional

Tabela 29 – Resultados para fracionamento da DQO – verão, madrugada

Data		Verão – 22/12/2020									
Hora	0:00		0:00		0:00		2:30		6:00		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT,EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	353,25	100,0%	8.253,28	100,0%	5.909,00	100,0%	5.769,21	100,0%	18,83	100,0%	
X	282,60	80,0%	8.249,51	100,0%	5.905,23	99,9%	5.765,44	99,9%	15,06	80,0%	
S	70,65	20,0%	3,77	0,0%	3,77	0,1%	3,77	0,1%	3,77	20,0%	
X _{EFF}	15,06		15,06		15,06		15,06		15,06		
S _{EFF}	3,77		3,77		3,77		3,77		3,77		
S _U	3,23	0,9%	3,23	0,0%	3,23	0,1%	3,23	0,1%	3,23	17,1%	
S _B	67,42	19,1%	0,54	0,0%	0,54	0,0%	0,54	0,0%	0,54	2,9%	
DBO _{TOT}	229,75		4.465,23		3.379,58		3.108,19		9,68		
DQO _B	270,29		5.253,21		3.975,98		3.656,69		10,76		
X _{CB}	202,87	57,4%	2.464,68	29,9%	2.126,38	36,0%	2.185,94	37,9%	10,22	54,3%	
X _{BIO}	0,00		2.787,99		1.849,05		1.470,21		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	1.951,59	23,6%	1.294,34	21,9%	1.029,15	17,8%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	139,40	1,7%	92,45	1,6%	73,51	1,3%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	697,00	8,4%	462,26	7,8%	367,55	6,4%	0,00	0,0%	
DQO _U	82,96		3.000,07		1.933,02		2.112,52		8,07		
X _U	79,73	22,6%	2.996,84	36,3%	1.929,80	32,7%	2.109,29	36,6%	4,84	25,7%	
SSV _{DQO} *			1,51		1,72		1,99				
SSV _{nb}			1.988,31		1.121,98		1.060,23				
SSV _b			3.484,99		2.311,32		1.837,77				

(*): adimensional

Tabela 30 – Resultados para fracionamento da DQO – verão, manhã

Data		Verão – 22/12/2020									
Hora	6:00		6:00		6:00		8:30		12:00		
Local	P1-Marrom (INF)		P5-Preto (RAS)		P2-Verde (AT)		P3-Laranja (AT,EFF)		P4-Azul (EFF)		
Unid.	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	mg/L	% DQO	
DQO _{TOT}	251,90	100,0%	7.344,63	100,0%	5.559,52	100,0%	5.909,00	100,0%	11,79	100,0%	
X	201,52	80,0%	7.342,27	100,0%	5.557,16	100,0%	5.906,64	100,0%	9,43	80,0%	
S	50,38	20,0%	2,36	0,0%	2,36	0,0%	2,36	0,0%	2,36	20,0%	
X _{EFF}	9,43		9,43		9,43		9,43		9,43		
S _{EFF}	2,36		2,36		2,36		2,36		2,36		
S _U	2,28	0,9%	2,28	0,0%	2,28	0,0%	2,28	0,0%	2,28	19,4%	
S _B	48,10	19,1%	0,07	0,0%	0,07	0,0%	0,07	0,0%	0,07	0,6%	
DBO _{TOT}	167,85		3.873,12		3.114,77		3.352,06		5,47		
DQO _B	197,47		4.556,62		3.664,44		3.943,60		6,08		
X _{CB}	149,37	59,3%	2.345,60	31,9%	1.914,75	34,4%	2.347,60	39,7%	6,01	50,9%	
X _{BIO}	0,00		2.210,94		1.749,61		1.595,93		0,00		
X _{OHO}	0,00	0,0%	1.547,66	21,1%	1.224,73	22,0%	1.117,15	18,9%	0,00	0,0%	
X _{ANO}	0,00	0,0%	110,55	1,5%	87,48	1,6%	79,80	1,4%	0,00	0,0%	
X _{Stor,OHO}	0,00	0,0%	552,73	7,5%	437,40	7,9%	398,98	6,8%	0,00	0,0%	
DQO _U	54,43		2.788,01		1.895,08		1.965,40		5,71		
X _U	52,15	20,7%	2.785,73	37,9%	1.892,80	34,0%	1.963,11	33,2%	3,43	29,1%	
SSV _{DQO} *			1,65		1,68		1,98				
SSV _{nb}			1.689,63		1.129,69		993,08				
SSV _b			2.763,67		2.187,01		1.994,92				

(*): adimensional

Tabela 31 – Resultados para fracionamento da DQO afluente e efluente para as médias do DMAE

Grupo	1,00				2,00				3,00				4,00				5,00			
Médias	Aflu. (mg/L)	% DQO	Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu. (mg/L)	% DQO	Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu. (mg/L)	% DQO	Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu. (mg/L)	% DQO	Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu. (mg/L)	% DQO	Eflu. (mg/L)	% DQO
DQO	1.344	100%	35,50	100%	779,70	100%	35,00	100%	492,30	100%	23,80	100%	279,80	100%	38,00	100%	138,00	100%	55,50	100%
DBO	186,50	13,9%	4,00	11,3%	261,50	33,5%	8,00	22,9%	322,40	65,5%	18,00	75,6%	194,60	69,5%	10,90	28,7%	110,00	79,7%	9,00	16,2%
SST	1.178		31,50		378,50		17,60		321,30		15,30		111,70		13,00		76,00		15,50	
Parâm.	Aflu. (mg/L)	% DQO	Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu. (mg/L)	% DQO	Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu. (mg/L)	% DQO	Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu. (mg/L)	% DQO	Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu. (mg/L)	% DQO	Eflu. (mg/L)	% DQO
DQO _{TOT}	1.344	100%	35,50	100%	779,70	100%	35,00	100%	492,30	100%	23,80	100%	279,80	100%	38,00	100%	138,00	100%	55,50	100%
X	1.210	90,0%	21,30	60,0%	623,76	80,0%	22,75	65,0%	393,84	80,0%	21,42	90,0%	223,84	80,0%	26,60	70,0%	110,40	80,0%	36,08	65,0%
S	134,45	10,0%	14,20	40,0%	155,94	20,0%	12,25	35,0%	98,46	20,0%	2,38	10,0%	55,96	20,0%	11,40	30,0%	27,60	20,0%	19,43	35,0%
X _{EFF}	21,30		21,30		22,75		22,75		21,42		21,42		26,60		26,60		36,08		36,08	
S _{EFF}	14,20		14,20		12,25		12,25		2,38		2,38		11,40		11,40		19,43		19,43	
S _U	12,33	0,9%	12,33	34,7%	10,26	1,3%	10,26	29,3%	1,10	0,2%	1,10	4,6%	10,10	3,6%	10,10	26,6%	9,00	6,5%	9,00	16,2%
S _B	122,12	9,1%	1,87	5,3%	145,68	18,7%	1,99	5,7%	97,36	19,8%	1,28	5,4%	45,86	16,4%	1,30	3,4%	18,60	13,5%	10,43	18,8%
DBO _{TOT}	272,91		4,21		382,67		8,42		339,29		18,94		204,80		11,47		115,76		9,47	
DQO _B	321,08	23,9%	4,68	13,2%	450,20	57,7%	9,35	26,7%	399,17	81,1%	21,05	88,4%	240,94	86,1%	12,75	33,5%	128,63	93,2%	10,52	19,0%
X _{C_B}	198,96	14,8%	2,81	7,9%	304,51	39,1%	7,36	21,0%	301,81	61,3%	19,77	83,1%	195,08	69,7%	11,45	30,1%	110,02	79,7%	0,09	0,2%
DQO _U	1.023		30,82		329,50		25,65		93,13		2,75		38,86		25,25		9,37		44,98	
X _U	1.011	75,2%	18,49	52,1%	319,25	40,9%	15,39	44,0%	92,03	18,7%	1,65	6,9%	28,76	10,3%	15,15	39,9%	0,38	0,3%	35,98	64,8%
Verif.			Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu.		Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu.		Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu.		Eflu. (mg/L)	% DQO	Aflu.		Eflu. (mg/L)	% DQO
S _B Máx			3,55	10,0%			3,50	10,0%			2,38	10,0%			3,80	10,0%			5,55	10,0%
S Máx			15,88	44,7%			13,76	39,3%			3,48	14,6%			13,90	36,6%			14,55	26,2%
S Mín			12,33	34,7%			10,26	29,3%			1,10	4,6%			10,10	26,6%			9,00	16,2%
Verif.	Aflu.		Eflu.		Aflu.		Eflu.		Aflu.		Eflu.		Aflu.		Eflu.		Aflu.		Eflu.	
DQO _B /DQO _{TOT}	0,24		0,13		0,58		0,27		0,81		0,88		0,86		0,34		0,93		0,19	
DQO/DBO _S	7,21		8,88		2,98		4,38		1,53		1,32		1,44		3,49		1,25		6,17	

Uma particularidade quanto ao método de fracionamento da DQO referente aos dados secundários foi a verificação da DQO_B resultante, em comparação com a DQO_{TOT} . A $DQO_{B,INF}$ foi calculada com $k_{DBO} = 0,23$ e $f_{DBO} = 0,15$. Como a relação DQO/DBO_5 apresentou grande variação entre os grupos, realizou-se uma verificação da DQO_B resultante, a qual não pode resultar maior do que a DQO_{TOT} . Para os grupos 3, 4 e 5, o valor $k_{DBO} = 0,23$ resultou $DQO_B > DQO_{TOT}$, sendo, portanto, ajustado o valor k_{DBO} para 0,6.

A proporção da DQO solúvel adotada foi a mesma utilizada para as amostras coletadas, 20% DQO_{TOT} , porém para o grupo 1 foi ajustada para 10% DQO_{TOT} , tal como realizado para a amostra P1-Marrom-P-A. Além deste, um último ajuste individual foi realizado para o efluente do grupo 5, cuja relação DQO/DBO_5 foi de 6,17, indicando baixa biodegradabilidade. A proporção S_U/DQO_U , para este caso, foi ajustada para 20%.

Por fim, ainda quanto a esse conjunto de dados, observou-se um percentual crescente de fração particulada não-biodegradável (X_U) para o afluente bruto proporcional ao aumento da DQO total. Dessa forma, o método empregado estima que, quanto maior a DQO afluente, maior seria a parcela X_U , o que parece ter lógica para esgotos domésticos.

4.1.5 Dados adicionais necessários à modelagem

A respeito das médias obtidas através dos dados do DMAE, faltou informações quanto à recirculação de lodo e alcalinidade. Para primeira, foi adotada a vazão média obtida durante a campanha de amostras: 650 L/s. Para a alcalinidade do afluente, adotou-se a média obtida para as amostras coletadas: 191 mg $CaCO_3/L$ (desvio padrão de 13,7%). O pH consta nos dados brutos do DMAE, com média de 7,1 (desvio padrão de 2%), sendo este o adotado para o afluente médio.

Quanto à aeração no reator aeróbio, não há medições disponíveis, sendo informado pela equipe do DMAE que a concentração de OD é, em média, de 1 mg/L. Os reatores são dotados de 2.880 difusores de fundo, sendo 1.440 difusores para cada unidade, divididos em três setores de aeração. Cada setor pode ser ligado ou desligado individualmente. Conforme catálogo técnico fornecido pelo DMAE, cada reator é dotado de um soprador de lóbulos rotativos com as seguintes características:

- Vazão na admissão: 136 m³/min;
- Pressão de sucção: 1,01 bar a;
- Pressão de descarga: 1,53 bar a;
- Pressão diferencial: 5,2 mca;
- Rotação do soprador: 1701 rpm;
- Potência consumida: 153 kW;
- Motor elétrico: WEG 250 CV – 4 polos – 3f/60 Hz

Cálculo do coeficiente K_{La} :

Utilizando a vazão de ar informada no catálogo do soprador, calculou-se a capacidade de fornecimento de OD para a massa líquida (expressa por N), sendo a massa específica do ar ρ_{ar} (20°C) = 1,20 kg/m³; e fração O₂ no ar = 21%:

$$Q_{ar} = 136 \text{ m}^3/\text{min de ar} = (136)(\text{m}^3/\text{min}) (60)(\text{min}/\text{h}) = 8160 \text{ m}^3/\text{h}$$

$$N = (8160 \text{ m}^3/\text{h})(1,20 \text{ kg}/\text{m}^3)(21\% \text{ O}_2) = 2056 \text{ kg O}_2/\text{h}$$

Considerando eficiência de 15% de transferência de oxigênio dos difusores, a carga de O₂ que o sistema pode fornecer é ajustada para $N' = 0,15(2056 \text{ kg O}_2/\text{h}) = 308 \text{ kg O}_2/\text{h}$. A seguir, corrigiu-se a concentração de saturação de O₂ no esgoto com a correção dada pela Equação 26, com $\beta = 0,9$:

$$C_{S,esg} = \beta (C_S)_{\text{água}} = (0,9)(9,2 \cdot 10^{-3} \text{ kg O}_2/\text{m}^3) = 8 \cdot 10^{-3} \text{ kg O}_2/\text{m}^3$$

A concentração de OD requerida para o tanque de aeração deve ser mantida numa faixa entre 1 e 2 mg O₂/L ($C_{L\text{mín}} = 1 \times 10^{-3} \text{ kg O}_2/\text{m}^3$; $C_{L\text{máx}} = 2 \times 10^{-3} \text{ kg O}_2/\text{m}^3$).

Utilizando-se a Equação 23, para 20°C, tem-se:

$$K_{La_{\max}} = \frac{N'}{V(C_{S, \text{esg}} - C_{L, \max})} = \frac{308 \text{ kg O}_2/\text{h}}{(4050 \text{ m}^3)(8.10^{-3} - 2.10^{-3})(\text{kg O}_2/\text{m}^3)}$$

$$K_{La_{\max}} = 12,7 \text{ h}^{-1}$$

$$K_{La_{\min}} = \frac{N'}{V(C_{S, \text{esg}} - C_{L, \min})} = \frac{308 \text{ kg O}_2/\text{h}}{(4050 \text{ m}^3)(8.10^{-3} - 1.10^{-3})(\text{kg O}_2/\text{m}^3)}$$

$$K_{La_{\min}} = 10,9 \text{ h}^{-1}$$

Determinação das condições iniciais dentro do tanque de aeração:

Um dos parâmetros necessários para o cálculo é a idade do lodo. O DMAE não informou esse parâmetro, porém relatou acionar a bomba de descarte durante oito horas por dia, a uma vazão de 22 m³/h (6,1 L/s) – igual a 2,03 L/s se fosse em operação contínua. A vazão média da ETE identificada nas campanhas de coleta foi de 298 L/s, enquanto a vazão média identificada nos dados históricos do DMAE é de 272 L/s. Pela confiabilidade maior, optou-se por considerar a vazão média de 298 L/s. Quanto à recirculação, observou-se a média de 651 L/s durante as campanhas de coleta. A concentração média de SSV no lodo, durante as coletas, resultou em 5.776 g SSV/m³, e no efluente, em 10 g SSV/m³. No reator, a média encontrada foi de 3.394 g SSV/m³. A idade do lodo calculada pela Equação 7 resultou em:

$$\theta_c = \frac{(8.100 \text{ m}^3)(3.394 \text{ g/m}^3)}{(0,00203 \text{ m}^3/\text{s})(5.776 \text{ g/m}^3) + (0,3 \text{ m}^3/\text{s})(10 \text{ g/m}^3)}$$

$$\theta_c = 1888655 \text{ s} = 21,9 \text{ d} \cong 22 \text{ d}$$

Através da Equação 8, com $Y = 0,6 \text{ g SSV/g DBO}$ e $b = 0,12 \text{ g SSV/g SSV.d}$ (conforme indicado na Tabela 1), obteve-se a concentração de biomassa em termos de SSV no reator para as médias obtidas na Tabela 10. O fracionamento desta foi calculado conforme o procedimento descrito no item 3.2.4. Os resultados para o reator foram resumidos na Tabela 32 e serviram, basicamente, para fornecer dados iniciais para a modelagem em estado estacionário.

Tabela 32 – Dados iniciais calculados para o reator aeróbio, referentes aos dados históricos fornecidos pelo DMAE, agrupados por médias

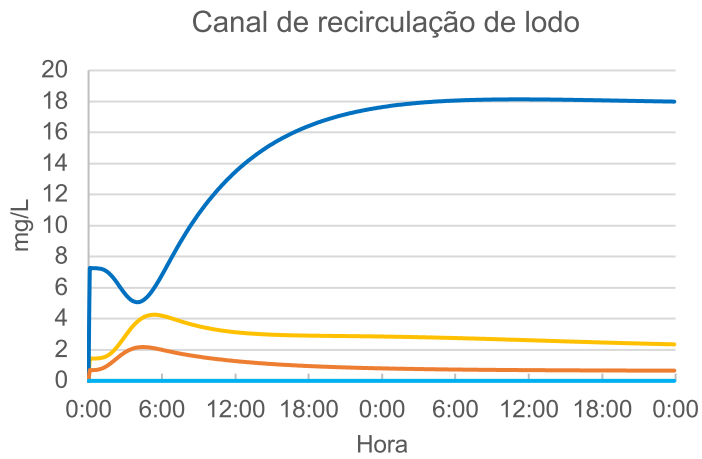
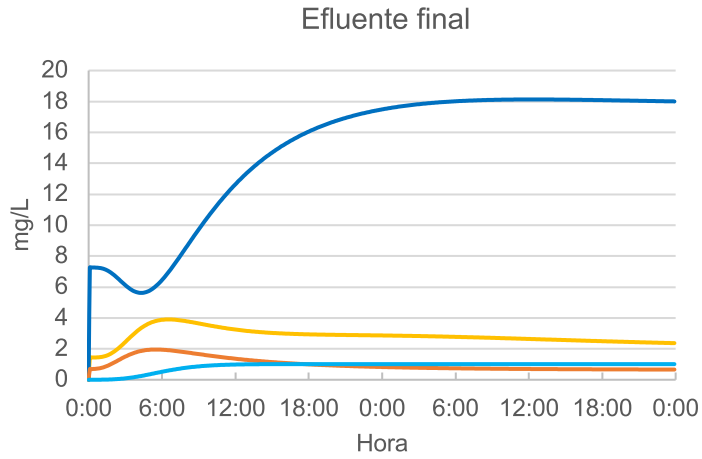
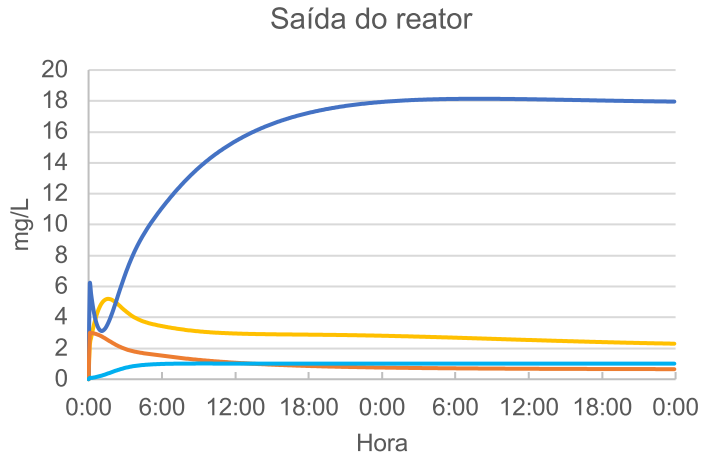
Parâmetros	Unid.	Grupos				
		1	2	3	4	5
Q	L/s	271,50	261,90	270,75	268,06	307,21
t	d	0,345	0,358	0,346	0,350	0,305
S_{INF}	mg/L	186,5	261,5	322,4	194,6	110,0
S_{EFF}	mg/L	4,0	8,0	18,0	10,9	9,0
X_B	mg SSV/L	1892	2535	3147	1880	1185
DQO_{TOT}	mg/L	2606	3491	4334	2590	1632
S_U	mg/L	12,33	10,26	1,10	10,10	9,00
S_B	mg/L	122,12	145,68	97,36	45,86	18,60
X_{OHO}	mg/L	1324	1774	2203	1316	829
X_{ANO}	mg/L	95	127	157	94	59
X_{STO}	mg/L	473	634	787	470	296

4.2 Resultados quanto aos testes de funcionalidade do modelo

Após a configuração inicial do modelo, os dados de entrada foram inseridos, conforme exposto no item 3.3 da metodologia, sendo utilizadas as médias por estações climáticas (inverno, primavera e verão) obtidas a partir dos ensaios de laboratório das amostras e fracionamento da DQO realizada. Em se tratando de dados médios, não foi considerada variação de parâmetros, neste momento.

Inicialmente, observou-se o comportamento das formas nitrogenadas ($\text{NH}_3\text{-N}$ e $\text{NO}_3\text{-N}$), da alcalinidade e do oxigênio dissolvido, para o período da primavera. Nos gráficos 17 a 19, são apresentados os resultados para estes parâmetros, nos três pontos selecionados.

Gráficos 17, 18 e 19 – Resultados para o efluente na saída do reator, recirculação de lodo e efluente final – simulação 01, médias de primavera



Ammonia (mg/l) Nitrate (mg/l)
Alkalinity (mg/l) Dissolved oxygen (mg/l)

Analisando-se os gráficos, observou-se que, nas simulações: 1) o nitrato é formado no reator e sai no efluente final; 2) concentração elevada de nitrato está retornando ao reator através da recirculação de lodo; 3) a alcalinidade é consumida no reator, resultando abaixo de 2 mol_{eq}/L, sendo mantida a esse patamar inclusive na recirculação de lodo.

Por outro lado, ao comparar esses resultados com as médias obtidas para esses pontos através de ensaios de laboratório, percebeu-se que não é isso o que acontece na realidade. As médias dos resultados obtidos em laboratório, calculadas com os dados das tabelas 23 a 26, são demonstrados na Tabela 33.

Tabela 33 – Resultados reais quanto a formas nitrogenadas e alcalinidade – médias de primavera, por ensaios de laboratório

Parâmetro	Afluente bruto	Saída reator	Efluente final	Canal lodo
NH ₃ -N (mg/L)	22,60	18,12	1,44	N.M.
NO ₃ -N (mg/L)	0,04	0,43	7,26	N.M.
Alcalinidade (mol _{eq} /L)	3,37	4,00	0,69	2,20

N.M.: parâmetro não medido.

Segundo os resultados dos ensaios, a nitrificação ocorreu apenas parcialmente no reator aeróbio. Houve nitrificação significativa e formação de nitrato após a saída do reator, com consumo de alcalinidade. No canal de lodo, observou-se elevação da alcalinidade, sendo retornada ao reator. Desta forma, preliminarmente, observa-se que a simulação não está em consonância com os resultados de laboratório para as formas nitrogenadas.

Na falta de conclusão acerca das causas para a ocorrência da nitrificação significativa após a saída do reator, buscou-se delinear hipóteses para a elevação da alcalinidade no retorno de lodo, fenômeno observado para a quase totalidade das amostras. A primeira hipótese seria a ocorrência de desnitrificação parcial dentro do decantador, com a consequente devolução de alcalinidade no processo através do lodo. A segunda, seria uma separação do efluente do reator na alimentação do decantador, onde uma parte é ascendente e vai à calha de coleta, supostamente com presença de OD disponível, e a outra é descendente e, indo ao fundo, adensando-se em lodo, com nitrificação inibida. Nesta segunda hipótese, uma parte da alcalinidade que sai do reator permaneceria no lodo enquanto a outra é consumida numa nitrificação durante o seu percurso até o efluente final.

Independentemente das causas, o fato de a alcalinidade no lodo ser maior do que a do efluente final seria um indício que o nitrato formado após o reator seria desnitrificado no decantador. Para comprovar essa tese, o DMAE realizou ensaios para determinar as concentrações de nitrato nos canais de retorno do lodo entre os decantadores 1 e 2 (RAS_DEC1,2) e 3 e 4 (RAS-DEC3,4), em posições distintas em relação à ponte de sucção de lodo (posição da ponte alta ou baixa). Os resultados estão descritos na Tabela 34.

Tabela 34 – Resultados para amostras de lodo coletadas pelo DMAE

Amostra	Data	Hora	Local	Posição ponte	NO ₃ (mg N/L)	SST (mg/L)	SSV (mg/L)
1461GATE	21/12/2020	00:00	RAS_DEC1,2	Baixo	N.D.	9680	6870
1455GATE	21/12/2020	00:00	RAS_DEC1,2	Alto	N.D.	10090	7110
1464GATE	21/12/2020	00:00	RAS_DEC3,4	Alto	N.D.	11720	8360
1462GATE	21/12/2020	00:00	RAS_DEC3,4	Baixo	N.D.	8610	6080

N.D.: não detectado.

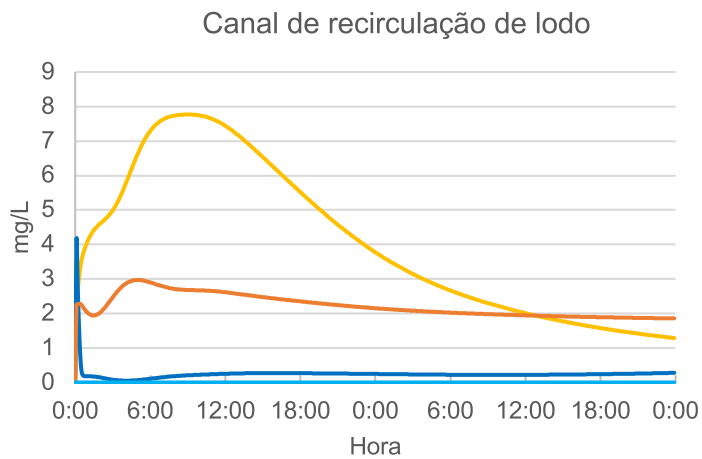
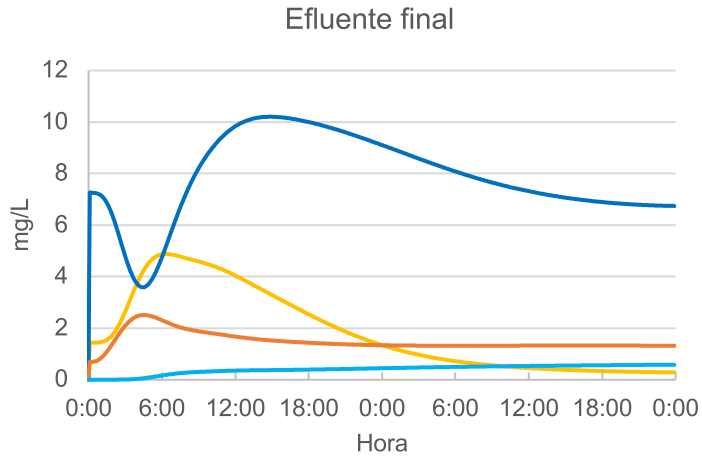
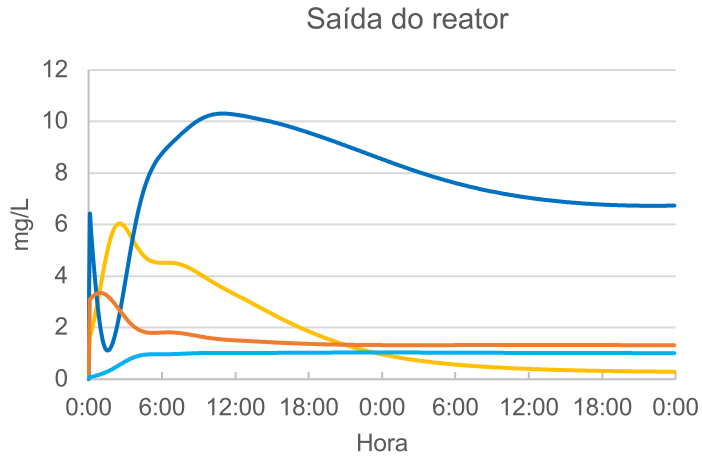
Fonte: Departamento Municipal de Água e Esgotos de Porto Alegre.

Conforme é observado na tabela, não foi detectada a presença de nitrato no lodo que retorna ao reator. Destaque merece ser feito ao fato de as coletas do DMAE terem sido feitas nos canais junto aos decantadores, junto às pontes de sucção de lodo e em posição longe destas, não sendo detectada a presença de NO₃-N em nenhuma delas. Desta forma, entendeu-se que havia a ocorrência de desnitrificação após o reator aeróbio.

A influência deste fato no processo foi fundamental para o ajuste da modelagem, pois o modelo de decantador não simula reações bioquímicas que nele ocorrem. Assim, o modelo erra ao simular o retorno de NO₃-N ao reator: na realidade, isto não estava acontecendo. Para corrigir essa falha, foi procedido um ajuste na configuração do modelo de forma a simular a desnitrificação que eventualmente estaria ocorrendo após o reator aeróbio. Além disso, considerando que houve nitrificação desde o reator-decantador até o efluente final, um ajuste na interligação dessas unidades foi realizado. O método é indicado no item 3.3.2 da metodologia.

As simulações com o novo modelo configurado foram realizadas em estado estacionário para um período de 48 h. Os resultados da simulação são apresentados novamente quanto às formas nitrogenadas e alcalinidade, para a saída do reator, saída do decantador (efluente final) e canal de recirculação de lodo.

Gráficos 20, 21 e 22 – Resultados para o efluente na saída do reator, recirculação de lodo e efluente final – simulação 02, médias de primavera



- Ammonia (mg/l)
- Alkalinity (mg/l)
- Nitrate (mg/l)
- Dissolved oxygen (mg/l)

Com a alteração da configuração, observou-se uma diminuição da concentração de nitrato no efluente do reator e do decantador, neste último em valor mais compatível com o encontrado para o efluente final (erro de 7% em relação à condição real, para 48h). O nitrogênio amoniacal da mesma forma resultou em valor bastante baixo, próximo de 1 mg/L, em conformidade com as médias reais. Quanto aos parâmetros do lodo, o modelo resultou em nitrato próximo de zero e alcalinidade com erro inferior a 16%, condizentes com os resultados reais. Nesse sentido, a nova configuração se ajustou melhor aos resultados da ETE real. Alguns testes foram realizados com as médias de inverno e verão, com resultados bem representativos.

4.3 Coeficientes cinéticos, estequiométricos e de temperatura modificados no procedimento de calibração

Para a maioria dos parâmetros, os valores atingidos foram próximos aos padrões do modelo, sendo adotado, nesses casos, o valor padrão para a versão final do conjunto de dados. Para alguns parâmetros, os resultados foram semelhantes quando não convergiram para o padrão do modelo. Os resultados da calibração automatizada encontram-se na Tabela 35, bem como os valores adotados para o modelo em sua verificação. Observa-se que somente cinco parâmetros foram modificados em relação aos seus valores padrão (valores em negrito).

Tabela 35 – Resultados da calibração do software e valores adotados para verificação (valores provisórios)

Parâmetro conforme software (unidade)	Primavera	Inverno	Verão	Padrão	Adotado
Heterotroph growth rate @ 15°C (1/h)	0,0505	0,0658	0,0508	0,0589	0,0589
Autotroph growth rate @ 15°C (1/h)	0,0266	0,0245	0,0231	0,0247	0,0247
Heterotroph aerobic endogenous respiration rate @ 15°C (1/h)	0,0051	0,0150	0,0051	0,0059	0,0100
Autotroph aerobic endogenous respiration rate @ 15°C (1/h)	0,0032	0,0033	0,0031	0,0036	0,0032
Autotroph anoxic endogenous respiration rate @ 15°C (1/h)	0,0013	0,0013	0,0013	0,0013	0,0013
COD half-saturation coefficient (mg COD/l)	3,1162	2,5043	3,1975	2,0000	2,8100
Saturation constant for stored COD (g COD/g COD)	1,1942	0,1092	1,1916	1,0000	1,0000
NH ₃ half-saturation coefficient, autotrophs (mg N/l)	0,8228	0,8615	0,8218	1,0000	0,8420
Hydrolysis rate @ 15°C (1/h)	0,1031	0,3983	0,1006	0,1021	0,2500

Conforme exposto no item 3.4.1 da metodologia, ao confrontar os resultados das simulações em regime estacionário com os resultados reais, utilizando-se os parâmetros modificados na calibração automática, observou-se má representatividade do modelo. Em resumo, a calibração automática do software não funcionou para se atingir a qualidade e os critérios de aceitação propostos.

O método de tentativa e erro foi adotado para a calibração final, conforme exposto no item 3.4.2, o que produziu melhores resultados quanto ao efluente final, efluente do reator aeróbio e lodo ativado, em comparação com os dados reais, embora alguns valores tenham fugido dos limites de aceitação determinados preliminarmente. Na Tabela 36 são apresentados os valores finais adotados para os coeficientes cinéticos modificados, num total de 11 parâmetros.

Tabela 36 – Resultados da calibração por tentativas e testes de verificação

Parâmetro conforme software (unidade)	Padrão	Adotado
Heterotroph growth rate @ 15°C (1/h)	0,059	0,125
Autotroph growth rate @ 15°C (1/h)	0,025	0,060
Autotroph temperature coefficient (1/°C)	0,105	0,069
Heterotroph aerobic endogenous respiration rate @ 15°C (1/h)	0,006	0,003
Aerobic respiration rate on stored COD @ 15°C (1/h)	0,006	0,013
Anoxic respiration rate on stored COD @ 15°C (1/h)	0,003	0,006
Autotroph temperature coefficient (1/°C)	0,110	0,069
Autotroph anoxic endogenous respiration rate @ 15°C (1/h)	0,001	0,004
Autotroph temperature coefficient (1/°C)	0,092	0,069
COD half-saturation coefficient (mg COD/l)	2,000	10,000
Saturation constant for stored COD (g COD/g COD)	1,000	0,100

No item 4.4, a seguir, são apresentadas as simulações que embasaram a adoção dos coeficientes de calibração constantes na Tabela 36. Conforme exposto no item 3.4.2 da metodologia, o procedimento de calibração consistiu em rodar simulações tantas quanto fossem necessárias até que se obtivesse um conjunto de coeficientes ajustados capazes de produzir resultados com o menor erro possível em relação aos dados efetivamente medidos na ETE. No item 4.5, são apresentadas as simulações em regime dinâmico (com variação das características do afluente ao longo do dia), com a finalidade de validação da calibração.

4.4 Simulações em regime estacionário com médias obtidas durante as campanhas de coleta

As simulações em regime estacionário foram realizadas a partir dos valores médios para os parâmetros do afluente, para cada campanha de coleta. Os resultados para 240 horas nesse regime são expressos na forma de gráficos nos itens seguintes. Durante o procedimento de calibração, um dos critérios almejados era que houvesse, na medida do possível, uma estabilidade do comportamento dos parâmetros do efluente após as 24 h iniciais, período julgado como o mínimo necessário para a aclimatação da simulação frente às condições iniciais estimadas em cálculos.

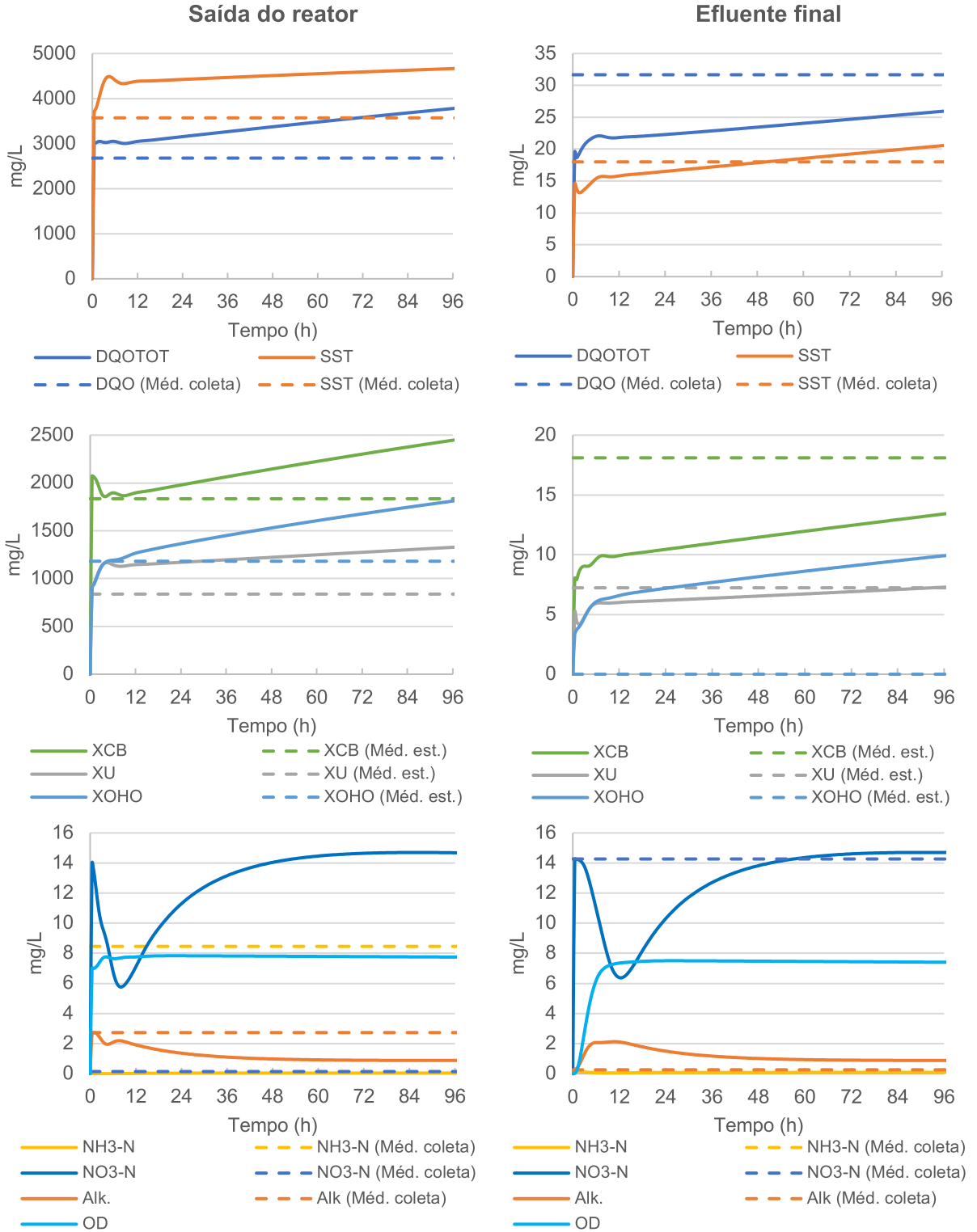
Ao se comparar os resultados da simulação com as médias calculadas a partir das amostras reais, não foi observada uma aderência geral a todas as estações do ano. Ao se tentar calibrar o modelo para uma determinada estação (por exemplo, para o verão), os resultados para outra estação climática (por exemplo, para o inverno) ficaram discrepantes. Uma calibração “universal” para todas as estações de coletas (inverno a verão) com as mesmas condições operacionais, não resultou boa aderência a nenhuma das campanhas de coleta.

Para contornar esse obstáculo, as simulações foram realizadas com a mesma calibração para todas as estações, porém com valores de K_L diferentes do calculado em 3.2.5, conforme demonstrado adiante.

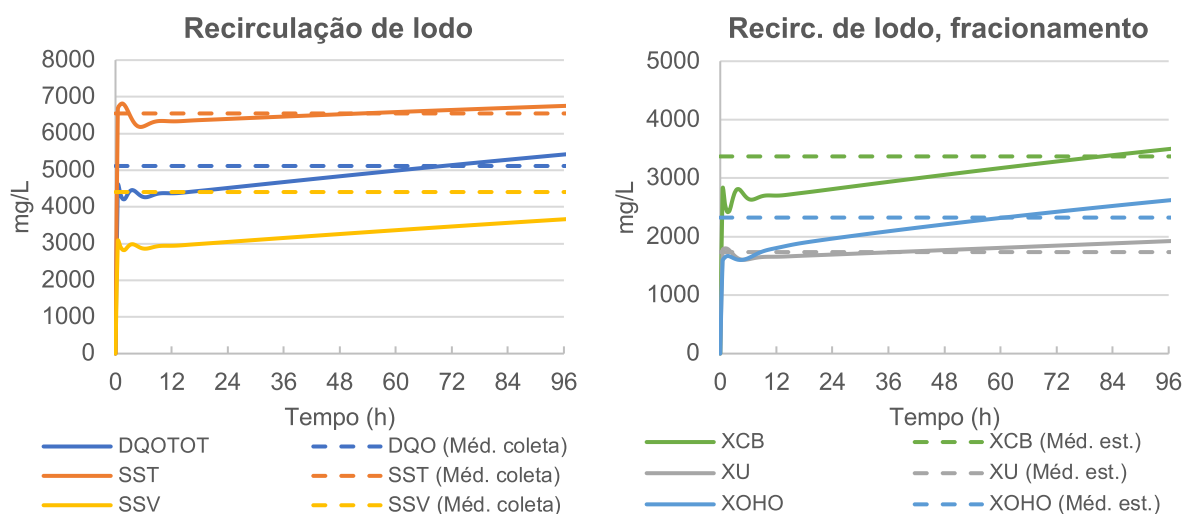
4.4.1 Resultados das simulações em regime estacionário com as médias de inverno

Os gráficos a seguir representam os resultados da simulação para as médias de inverno, obtidas a partir da campanha de coleta de 24 h realizada em ago/2020.

Gráficos 23, 24, 25, 26, 27 e 28 – Resultados da simulação para médias de inverno



Gráficos 29 e 30 – Resultados da simulação para médias de inverno (lodo)



Para o regime estacionário com as médias de inverno, observou-se estabilidade no efluente do reator, efluente tratado e lodo recirculado em poucas horas de simulação, exceto quanto a nitrogênio amoniacal e nitrato, havendo estabilidade somente após as 48 h iniciais. Esse período acabou sendo observado nas demais simulações e, por esta razão, as médias calculadas para os resultados levaram em consideração o período de 48 a 240 horas.

O fator K_{La} de 10 h^{-1} se demonstrou adequado para as médias de inverno, embora os resultados não tenham sido plenamente satisfatórios. Em que pese a DQO do efluente de reator ter resultado maior do que o observado, em média, para o efluente final resultou menor. Essa compensação entre os resultados (maior em um caso, menor em outro) foi considerada na etapa de calibração. Não pareceu ser possível se atingir uma calibração “universal” que gerasse resultados perfeitos para todos os efluentes, para todas as campanhas de coleta.

Especificamente quanto às coletas de inverno, os resultados indicam que o modelo apresenta grande sensibilidade quanto à temperatura, com frações da DQO crescentes durante o período de simulação. Além disso, enquanto o fator K_{La} de 10 h^{-1} demonstrou-se adequado para esta estação climática, para as outras estações se demonstrou elevado, razão pela qual se optou por ajustá-lo nas outras simulações.

Em suma, para todas as simulações, em todas as estações, a calibração de parâmetros do modelo foi a mesma (ajustando-se para comportar da melhor maneira possível os resultados para todas as amostras), embora o fator K_{La} tenha sido alterado. A Tabela 37 indica os resultados gerais para as médias de inverno.

Tabela 37 – Comparação entre médias reais e da simulação para 48-96 h, inverno

Parâmetro	Méd. real. (mg/L)	Méd. sim. 48-96h (mg/L)	Erro (mg/L)	Erro %	Tolerância	Acertou?
Efluente final						
DQO	31,67	24,67	-7,00	-22%	5 mg/L	Não
SST	18,00	24,88	6,88	38%	5 mg/L	Não
NH ₃ -N	0,17	0,09	-0,08	-48%	1 mg/L	Sim
NO ₃ -N	14,27	14,49	0,22	2%	1 mg/L	Sim
Alk.	0,26	0,91	0,65	252%	1 mg/L	Sim
XCB*	18,10	12,43	-5,67	-31%	5 mg/L	Sim
XU*	7,23	6,90	-0,33	-5%	5 mg/L	Sim
XOHO*	0,00	9,05	9,05	-	5 mg/L	Não
Saída do reator						
DQO	2679,00	3578,45	899,45	34%	10%	Não
SST	3572,00	4589,78	1017,78	28%	10%	Não
NH ₃ -N	8,46	0,04	-8,42	-100%	1 mg/L	Não
NO ₃ -N	0,14	14,55	14,41	10296%	1 mg/L	Não
Alk.	2,73	0,90	-1,83	-67%	1 mg/L	Não
XCB*	1835,00	2298,10	463,10	25%	10%	Não
XU*	837,70	1274,34	436,64	52%	10%	Não
XOHO*	1181,56	1673,07	491,51	42%	10%	Não
Lodo recirculado						
DQO	5114,00	5132,30	18,30	0%	10%	Sim
SST	6546,00	6638,47	92,47	1%	10%	Sim
SSV	4404,00	3461,30	-942,70	-21%	10%	Não
Alk.	4,13	1,47	-2,66	-64%	1 mg/L	Não
XCB*	3372,00	3280,09	-91,91	-3%	10%	Sim
XU*	1736,00	1845,74	109,74	6%	10%	Sim
XOHO*	2326,00	2419,44	93,44	4%	10%	Sim

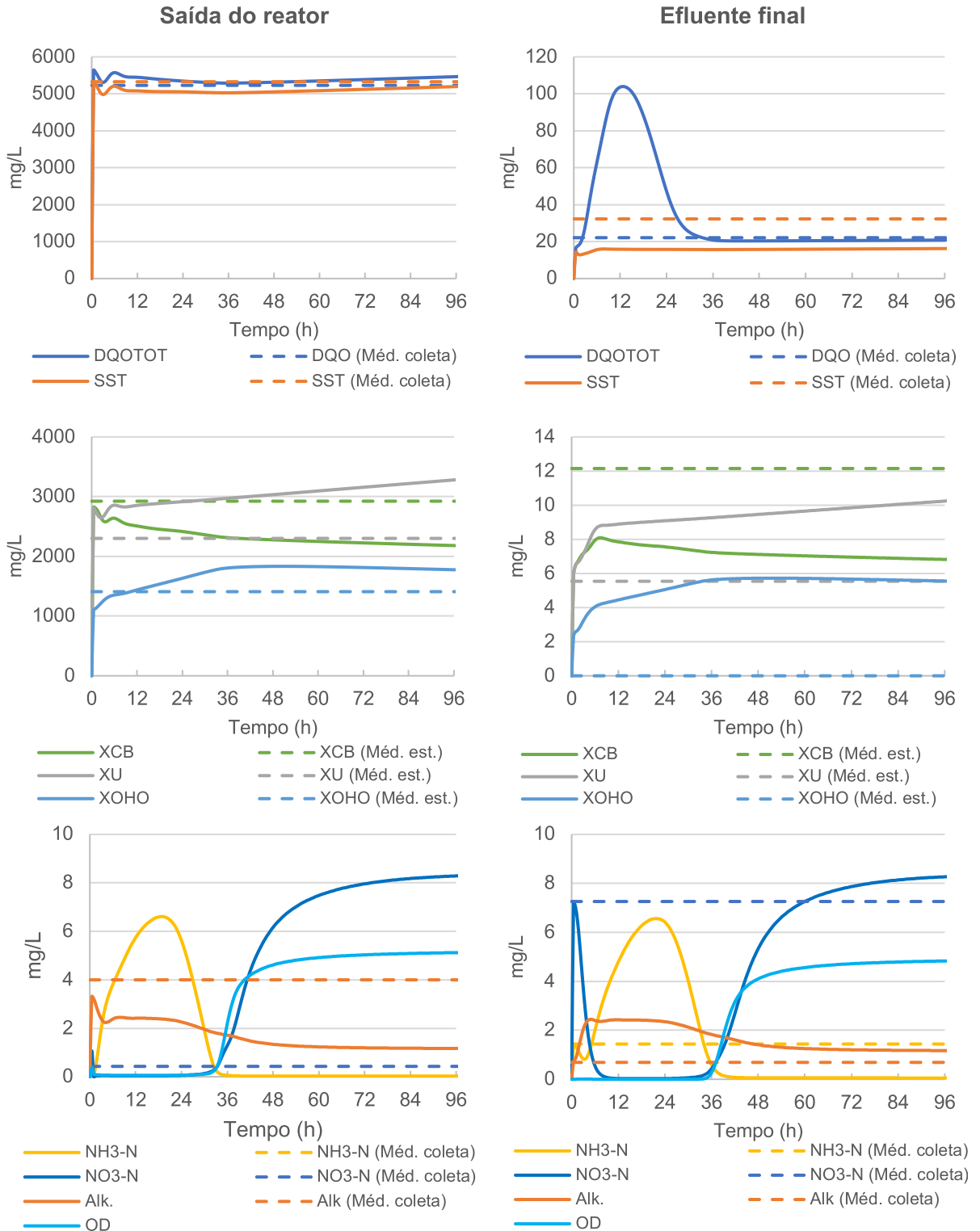
Embora não tenha sido observada uma aderência total entre o modelo e os parâmetros medidos, para esta estação, as formas nitrogenadas no efluente final resultaram satisfatórias, bem como os parâmetros previstos para o lodo recirculado. Os resultados para nitrogênio amoniacal e nitrato na saída do reator são discrepantes, fato observado em todas as outras simulações e que é tema de discussão adiante.

Ainda quanto aos resultados para a estação de inverno, observou-se boa aderência quanto ao fracionamento da DQO no efluente final e no lodo recirculado. Os gráficos e tabela informam quanto às frações particuladas da DQO, mas os resultados também indicaram que as frações solúveis foram adequadamente previstas. A saída do reator foi o ponto onde ocorreram as maiores discrepâncias, o que também é tema de discussão posterior.

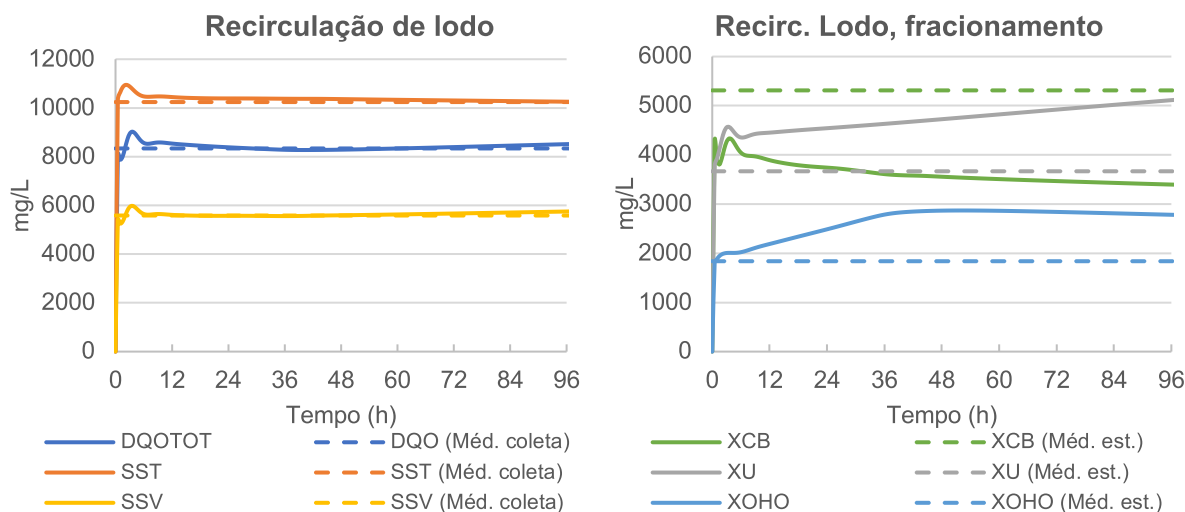
4.4.2 Resultados das simulações em regime estacionário com médias de primavera

Os gráficos a seguir representam os resultados da simulação para as médias de primavera, obtidas a partir da campanha de coleta de 24 h realizada em out/2020.

Gráficos 31, 32, 33, 34, 35 e 36 – Resultados para médias de primavera



Gráficos 37 e 38 – Resultados da simulação para médias de primavera (lodo)



A estabilidade das simulações foi atingida para quase todos os parâmetros após as 48 horas iniciais, sendo, portanto, adequado o cálculo das médias para o período entre 48 e 240 h. A maior sensibilidade inicial foi observada para nitrogênio amoniacal e nitrato. Em que pese a estabilidade ter sido alcançada somente após 48 h, considera-se que o método de fracionamento da DQO que levou ao cálculo das condições iniciais do reator e do decantador resultou adequada. Em contrapartida, algumas simulações foram efetuadas com os parâmetros iniciais padrão do software, levando a resultados absolutamente instáveis, mesmo após muitos dias de simulação, o que reforça a tese de que a metodologia empregada para o cálculo das condições iniciais foi compatível com os resultados observados.

Enquanto a calibração dos coeficientes do modelo foi a mesma para todas as simulações, o fator K_{La} de 10 h^{-1} calculado na metodologia demonstrou-se elevado para as condições observadas para estas médias de amostras. Os resultados aqui apresentados foram obtidos com o fator K_{La} de 5 h^{-1} . Mesmo com um valor tão reduzido quanto este, observou-se que a nitrificação ocorreu plenamente na nitrificação, gerando NO_3 ligeiramente superior ao observado nas médias coletadas.

Os resultados para a DQO, SST e SSV tiveram excelente aderência para os três pontos analisados, bem como a concentração de nitrato no efluente final. Nesse sentido a calibração de adequou bem a esta média de amostras. Quanto aos resultados para o fracionamento da DQO, não se observou aceitação tão boa quanto ao observado nas demais estações climáticas. A Tabela 38 indica os resultados gerais para as médias de primavera.

Tabela 38 – Comparação entre médias reais e da simulação para 48-96 h, primavera

Parâmetro	Méd. real. (mg/L)	Méd. sim. 48-96h (mg/L)	Erro (mg/L)	Erro %	Tolerância	Acertou?
Efluente final						
DQO	22,11	20,58	-1,53	-7%	5 mg/L	Sim
SST	32,28	20,60	-11,68	-36%	5 mg/L	Não
NH ₃ -N	1,44	0,06	-1,38	-96%	1 mg/L	Não
NO ₃ -N	7,26	7,57	0,31	4%	1 mg/L	Sim
Alk.	0,69	1,23	0,54	78%	1 mg/L	Sim
XCB*	12,15	6,96	-5,19	-43%	5 mg/L	Não
XU*	5,54	9,85	4,31	78%	5 mg/L	Sim
XOHO*	0,00	5,66	5,66	-	5 mg/L	Não
Saída do reator						
DQO	5229,00	5386,60	157,60	3%	10%	Sim
SST	5327,00	6594,31	1267,31	24%	10%	Não
NH ₃ -N	18,12	0,03	-18,09	-100%	1 mg/L	Não
NO ₃ -N	0,43	7,75	7,32	1701%	1 mg/L	Não
Alk.	4,00	1,21	-2,79	-70%	1 mg/L	Não
XCB*	2924,00	2227,00	-697,00	-24%	10%	Não
XU*	2301,00	3155,60	854,60	37%	10%	Não
XOHO*	1409,00	1811,00	402,00	29%	10%	Não
Lodo recirculado						
DQO	8338,00	8394,43	56,43	1%	10%	Sim
SST	10242,00	10308,68	66,68	1%	10%	Sim
SSV	5585,00	5668,00	83,00	1%	10%	Sim
Alk.	2,20	1,78	-0,42	-19%	1 mg/L	Sim
XCB*	5312,00	3471,26	-1840,74	-35%	10%	Não
XU*	3667,00	4918,69	1251,69	34%	10%	Não
XOHO*	1838,00	2836,54	998,54	54%	10%	Não

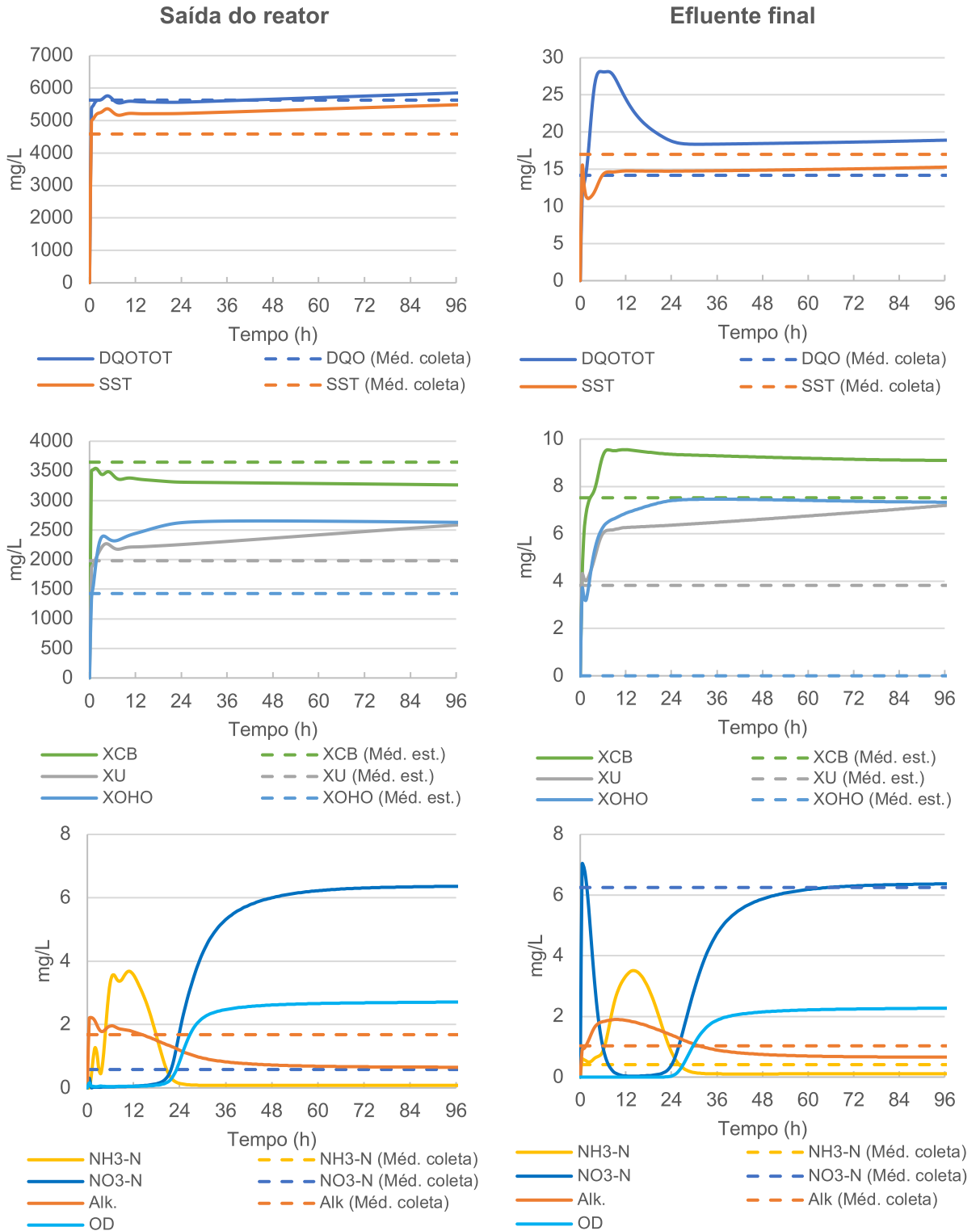
As médias obtidas com a simulação para os parâmetros do efluente final não resultaram completamente adequadas às médias obtidas com as amostras reais. Houve acerto quanto à DQO média, nitrato, alcalinidade, porém o modelo previu uma concentração de SST menor e uma nitrificação melhor do que as médias reais. Quanto ao lodo recirculado, novamente, o modelo apresentou boas previsões quanto aos parâmetros medidos.

Quanto ao efluente do reator aeróbio, a previsão quanto à DQO foi muito adequada, porém sem qualquer relação quanto às formas nitrogenadas, sendo este tópico abordado adiante. De modo geral, ainda que o fracionamento adotado para a DQO tenha levado a resultados adequados quanto aos parâmetros medidos na maioria das simulações, não se observou, nestas amostras, uma boa previsão no efluente do reator e no lodo recirculado.

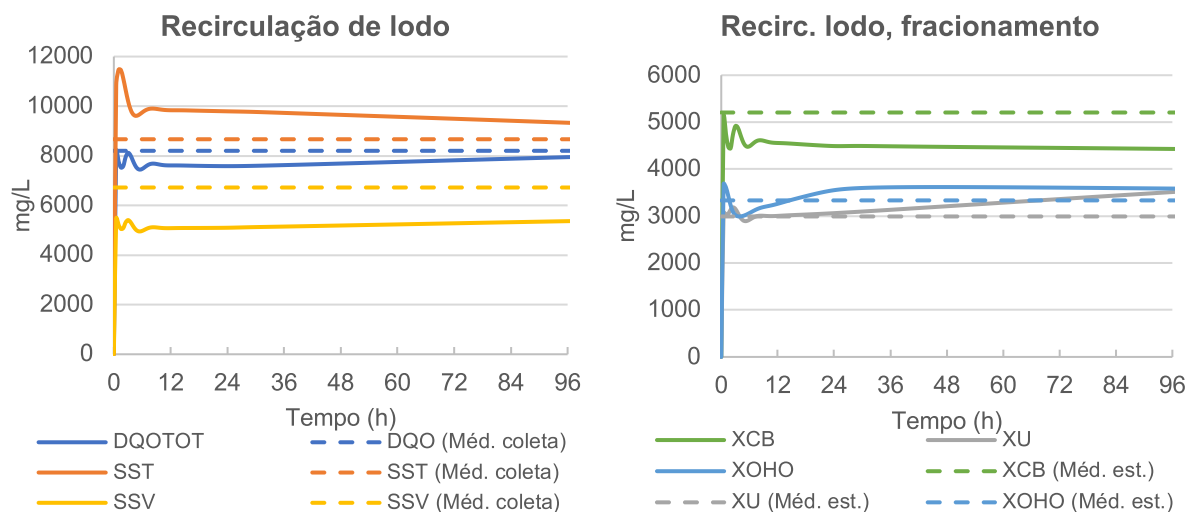
4.4.3 Resultados das simulações em regime estacionário com as médias de verão

Os gráficos a seguir representam os resultados da simulação para as médias de verão, obtidas a partir da campanha de coleta de 24 h realizada em dez/2020.

Gráficos 39, 40, 41, 42, 43 e 44 – Resultados da simulação para médias de verão



Gráficos 45 e 46 – Resultados da simulação para médias de verão (lodo)



As simulações para as médias de verão utilizaram os coeficientes do modelo obtidos na calibração única (para todas as amostras), porém também foi realizado um ajuste no fator K_{La} . O valor de 10 h^{-1} calculado na metodologia também se demonstrou elevado para este conjunto de amostras, sendo ajustado para $5,5 \text{ h}^{-1}$, apresentando os melhores resultados possíveis dentro da faixa de ajustes do modelo.

Com efeito, observou-se boa aderência entre os resultados para DQO em todos os pontos analisados, bem como para as formas nitrogenadas no efluente final. A comparação entre os parâmetros do fracionamento da DQO com a estimativa do modelo mostrou resultados compatíveis, embora não precisos. Este fato é tema de discussão adiante, inclusive quanto à falta de aderência entre as formas nitrogenadas na saída do reator aeróbio.

Os resultados para todas as médias mostram que o modelo prediz uma grande eficiência na nitrificação, com concentrações de $\text{NH}_3\text{-N}$ inferiores às que foram medidas no efluente final, porém dentro da faixa de aceitação de 1 mg/L . Ao diminuir ainda mais o fator K_{La} , de modo a inibir parcialmente a nitrificação para ajustar melhor o modelo aos resultados reais, passa a haver uma instabilidade na concentração tanto de NO_3 quanto de nitrogênio amoniacal no efluente final, levando à conclusão que o valor adotado de $5,5 \text{ h}^{-1}$ é o mais adequado, dentro do possível.

Alternativamente, a alteração dos coeficientes cinéticos das bactérias autotróficas seria uma opção para um melhor ajuste dos resultados da nitrificação, o que foi procedido, porém os valores adotados já representam a melhor alternativa. A Tabela 39 indica os resultados gerais para as médias de verão.

Tabela 39 – Comparação entre médias reais e da simulação para 48-96 h, verão

Parâmetro	Méd. real. (mg/L)	Méd. sim. 48-96h (mg/L)	Erro (mg/L)	Erro %	Tolerância	Acertou?
Efluente final						
DQO	14,18	18,66	4,48	32%	5 mg/L	Sim
SST	17,00	19,45	2,45	14%	5 mg/L	Sim
NH ₃ -N	0,41	0,11	-0,30	-73%	1 mg/L	Sim
NO ₃ -N	6,25	6,25	0,00	0%	1 mg/L	Sim
Alk.	1,03	0,68	-0,35	-34%	1 mg/L	Sim
XCB*	7,52	9,15	1,63	22%	5 mg/L	Sim
XU*	3,82	6,89	3,07	80%	5 mg/L	Sim
XOHO*	0,00	7,38	7,38	-	5 mg/L	Não
Saída do reator						
DQO	5629,00	5752,69	123,69	2%	10%	Sim
SST	4585,00	6961,21	2376,21	52%	10%	Não
NH ₃ -N	22,43	0,08	-22,35	-100%	1 mg/L	Não
NO ₃ -N	0,58	6,27	5,69	981%	1 mg/L	Não
Alk.	1,68	0,67	-1,01	-60%	1 mg/L	Sim
XCB*	3646,00	3277,50	-368,50	-10%	10%	Não
XU*	1980,00	2472,34	492,34	25%	10%	Não
XOHO*	1426,58	2642,67	1216,09	85%	10%	Não
Lodo recirculado						
DQO	8201,00	7815,92	-385,08	-5%	10%	Sim
SST	8667,00	9493,85	826,85	10%	10%	Sim
SSV	6722,00	5277,33	-1444,67	-21%	10%	Não
Alk.	2,21	1,17	-1,04	-47%	1 mg/L	Sim
XCB*	5206,00	4452,18	-753,82	-14%	10%	Não
XU*	2992,00	3360,14	368,14	12%	10%	Não
XOHO*	3334,00	3604,60	270,60	8%	10%	Sim

Conforme é observado na tabela, houve boa previsão quanto aos parâmetros do efluente final, quanto à DQO na saída do reator e quanto a DQO e SST na recirculação de lodo. A DQO na saída do reator apresentou grande estabilidade inicial, com leve tendência a encontrar o valor exato das médias obtidas nas amostras reais. Embora haja discrepância na concentração de SST na saída do reator, a previsão feita para o efluente final é de boa qualidade. Esses resultados, ainda que não sejam completamente exatos, são considerados adequados, exceto quanto a NH₃-N e NO₃-N na saída do reator, sendo motivo de análise particular.

Em que pesa alguma falta de exatidão quanto aos resultados para médias, entende-se que a calibração obteve os melhores resultados possíveis dentro de um conjunto tão heterogêneo e reduzido em um número de amostras. A mesma calibração foi utilizada para as médias históricas, conforme resultados a seguir.

4.5 Resultados da validação com simulações em regime dinâmico

As simulações em regime dinâmico foram realizadas utilizando-se as variações do afluente bruto observadas durante as campanhas de coletas, nas três estações climáticas amostradas. Conforme o item 3.2.3, os perfis foram elaborados através de interpolação linear entre duas amostras consecutivas para cada ponto de coleta, gerando os perfis ilustrados nos gráficos Gráficos 6 a **Erro! Fonte de referência não encontrada.** Não obstante, o fracionamento da DQO para cada valor interpolado foi necessário, sendo realizado de acordo com o item 3.2.4. Os gráficos 47 a 49 representam a variação dos parâmetros do afluente em frações da DQO que foram utilizadas como dados de entrada nesta etapa.

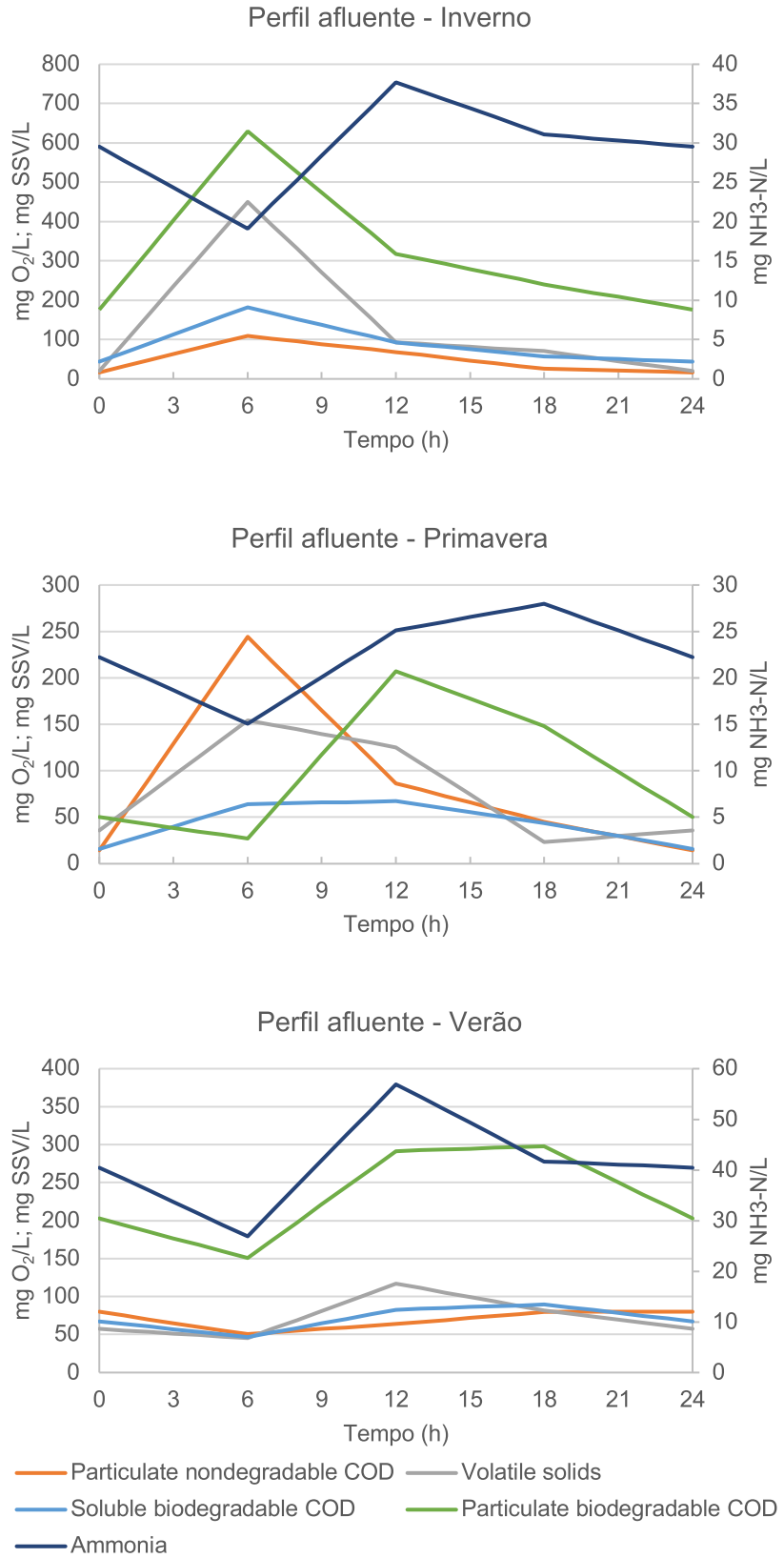
Os mesmos coeficientes cinéticos e estequiométricos obtidos na calibração foram utilizados nas simulações dinâmicas (calibração “universal”), porém manteve-se a diferença anteriormente mencionada quanto ao K_{La} adotado para cada estação climática de coletas de amostras. De modo geral, a aeração e a temperatura foram os fatores que mais influenciaram nos resultados dinâmicos, ou seja, uma pequena alteração nesses parâmetros levou a uma grande variação nos resultados, especialmente quanto às formas nitrogenadas.

O objetivo das simulações dinâmicas era a validação da calibração “universal”, porém sem o ajuste operacional (fator K_{La}), essa validação não foi possível. Além das diferenças quanto ao K_{La} adotadas para as médias, ajustes adicionais neste parâmetro teve de ser adotado para as simulações dinâmicas, sem os quais as discrepâncias para as formas nitrogenadas tornavam-se mais proeminentes.

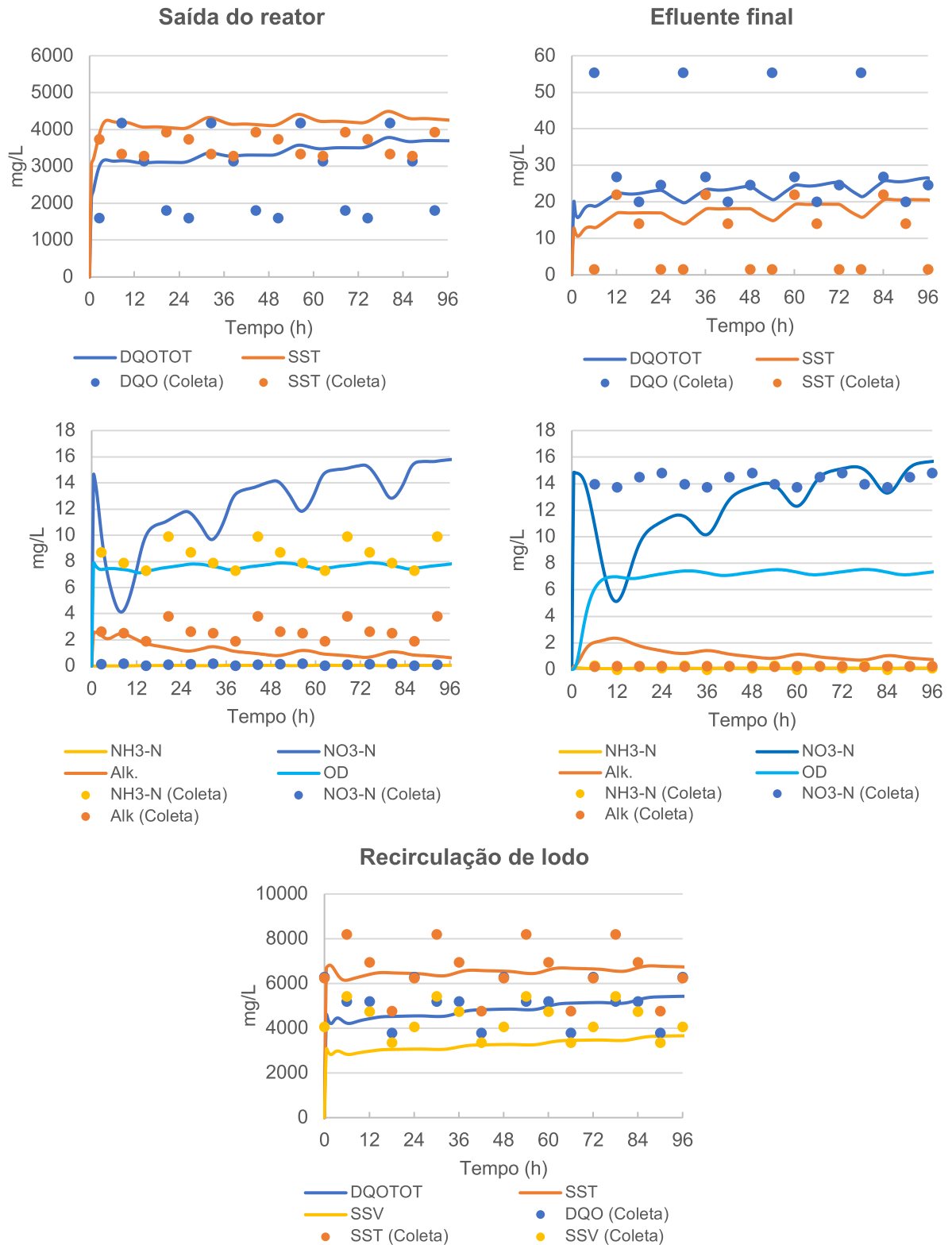
4.5.1 Resultados da simulação dinâmica com perfil afluente de inverno

Os gráficos a seguir representam os resultados da simulação para o perfil afluente de inverno, obtido a partir da campanha de coleta realizada em ago/2020. As linhas representam os resultados para a simulação, enquanto os pontos representam os resultados medidos em campo, igualmente repetidos no mesmo período de 10 dias como referência. Na realidade, não se sabe se o comportamento do perfil efluente (do reator aeróbio e do decantador) e do lodo no canal de recirculação tem esse padrão, devido à falta de mais coletas. No entanto, entende-se que é uma referência válida.

Gráficos 47, 48 e 49 – Variação das frações da DQO, SST e NH₃-N do afluente para validação da calibração



Gráficos 50, 51, 52, 53 e 54 – Resultados da simulação dinâmica para inverno



Sendo a simulação dinâmica, essencialmente, a mesma operação já realizada para o afluente estacionário, inclusive com os mesmos dados levantados, era esperado que o resultado para o efluente fosse similar ao obtido no procedimento

anterior. As flutuações do afluente são observadas tanto no efluente final quanto na saída do reator e acompanham o comportamento ondulado nas amostras coletadas, porém com oscilações de menor amplitude.

Os gráficos para saída do reator e efluente final, quanto a DQO e SST, demonstram grande amplitude desses parâmetros; a DQO do efluente varia de aproximadamente 20 a 55 mg/L, enquanto SST variam de “zero” a 22 mg/L; a DQO que sai do reator varia de aproximadamente 1600 a 4170 mg/L. As oscilações geradas nas simulações são muito menores, e essa variação é expressa em desvios padrão calculados em percentuais, constantes na Tabela 40, a qual apresenta os resultados gerais para os parâmetros observados.

De modo geral, para todas as simulações, a amplitude observada nas amostras coletadas quanto a DQO, SST e SSV não foi representada nas simulações. Durante as tentativas de configuração e calibração, não possível estabelecer uma combinação que produzisse tal variação de parâmetros. Por outro lado, em termos de médias, o modelo apresentou resultados compatíveis para diversos parâmetros, exceto quanto a $\text{NH}_3\text{-N}$ e NO_3 na saída do reator, como nos demais casos até o momento vistos. Merece destaque a curva para NO_3 do efluente final, a qual tende a se “encaixar” nos pontos referentes às amostras coletadas.

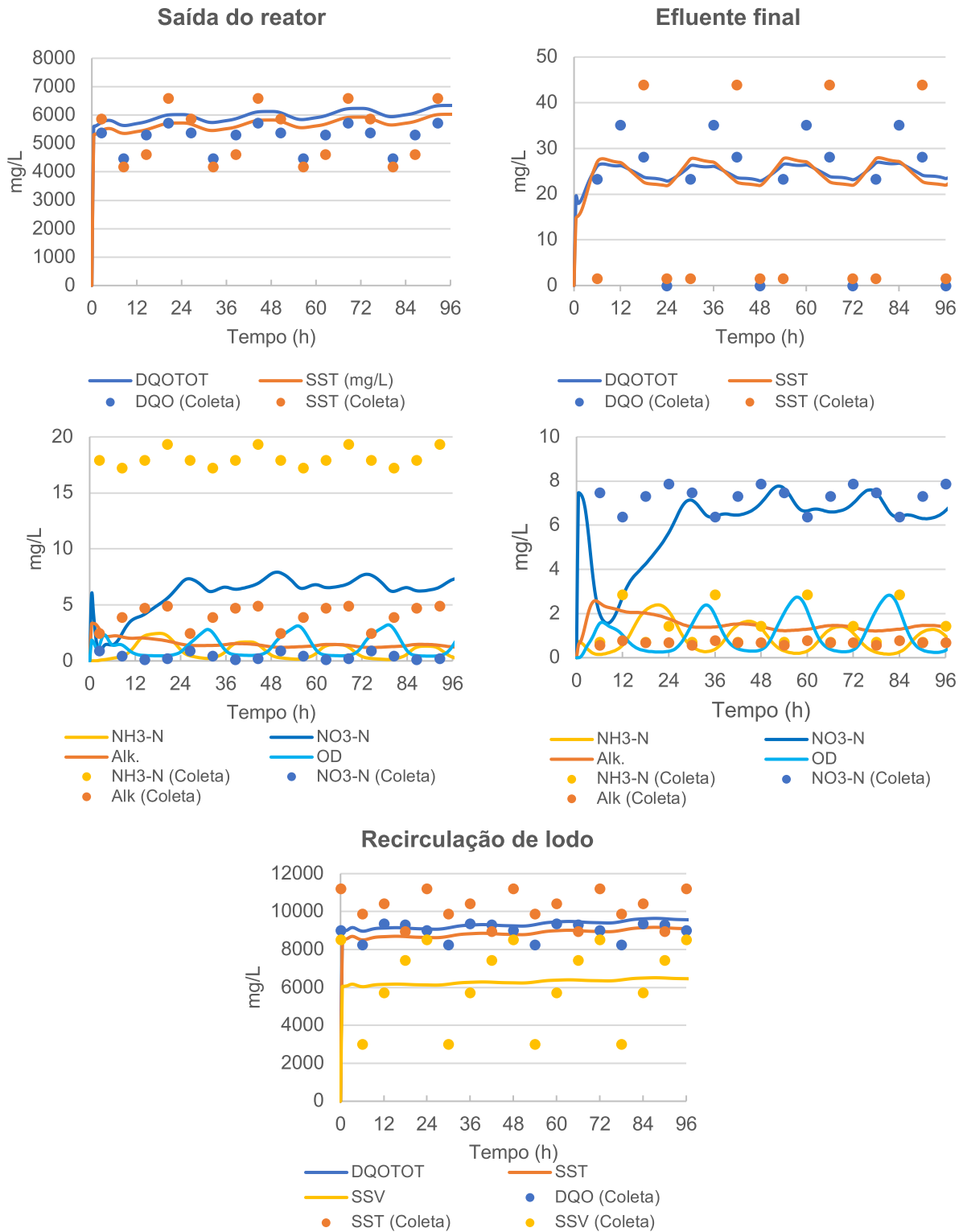
Tabela 40 – Comparação entre médias reais e da simulação dinâmica para 48-96 h, inverno

Parâmetro	Média real. (mg/L)	DP real %	Simul. 48-96h (mg/L)	DP simul. 48-96h %	Erro (mg/L)	Erro %	Tolerância	Acertou?
Efluente								
DQO	31,67	43,8%	24,08	6,6%	-7,59	-24%	5 mg/L	Não
SST	9,78	88,9%	18,56	9,8%	8,78	90%	5 mg/L	Não
$\text{NH}_3\text{-N}$	0,17	67,4%	0,09	8,5%	-0,07	-44%	1 mg/L	Sim
$\text{NO}_3\text{-N}$	14,27	3,0%	14,25	6,6%	-0,01	0%	1 mg/L	Sim
Alk.	0,26	10,7%	0,90	13,2%	0,64	244%	1 mg/L	Sim
Reator								
DQO	2679,37	39,1%	3575,50	3,5%	896,13	33%	10%	Não
SST	3572,08	7,6%	3544,53	2,6%	-27,54	-1%	10%	Sim
$\text{NH}_3\text{-N}$	8,46	11,5%	0,05	22,2%	-8,41	-99%	1 mg/L	Não
$\text{NO}_3\text{-N}$	0,14	46,9%	14,35	8,1%	14,20	9916%	1 mg/L	Não
Alk.	2,73	25,2%	0,88	16,9%	-1,85	-68%	1 mg/L	Não
Lodo								
DQO	6545,83	19,0%	5120,00	3,7%	-1425,83	-22%	10%	Não
SST	6545,83	11,7%	6630,79	1,5%	84,96	1%	10%	Sim
SSV	4404,18	17,4%	3453,07	3,8%	-951,10	-22%	10%	Não

4.5.2 Resultados da simulação dinâmica com perfil afluente de primavera

Os gráficos a seguir representam os resultados da simulação para o perfil afluente de primavera, obtido a partir da campanha de coleta realizada em out/2020.

Gráficos 55, 56, 57, 58 e 59 – Resultados da simulação dinâmica para primavera



Embora o procedimento adotado para a simulação de primavera tenha sido o mesmo para as demais simulações, os resultados dinâmicos ficaram melhor ajustados adotando-se o fator K_{LA} de 3 h^{-1} , em que pese ter sido utilizado o valor de 5 h^{-1} nas simulações em regime estacionário com as médias das mesmas amostras. Essa alteração operacional, a qual pode estar equivocada sob o ponto de vista prático (pela falta de critério prático que justifique esta alteração), contribuiu para uma melhor adesão entre os resultados do modelo e as medições reais.

Tal como identificado nas amostras de inverno, o modelo não produziu variações nos parâmetros do efluente com a mesma amplitude observada nas amostras coletadas. Apesar disso, as curvas para a maioria dos parâmetros se ajustaram na média dos pontos, como se observa, por exemplo, para SSV na recirculação de lodo. As diferenças de amplitude são expressas em desvios padrão em percentual, conforme Tabela 41. Em termos de médias, os valores que resultam da simulação são compatíveis com os observados nas coletas exceto, novamente, quanto a $\text{NH}_3\text{-N}$ e NO_3 da saída do reator. Por outro lado, um bom ajuste é observado para estes mesmos parâmetros no efluente final, em especial a curva para NO_3 a qual, como nas amostras de inverno, tende a se ajustar aos valores das amostras.

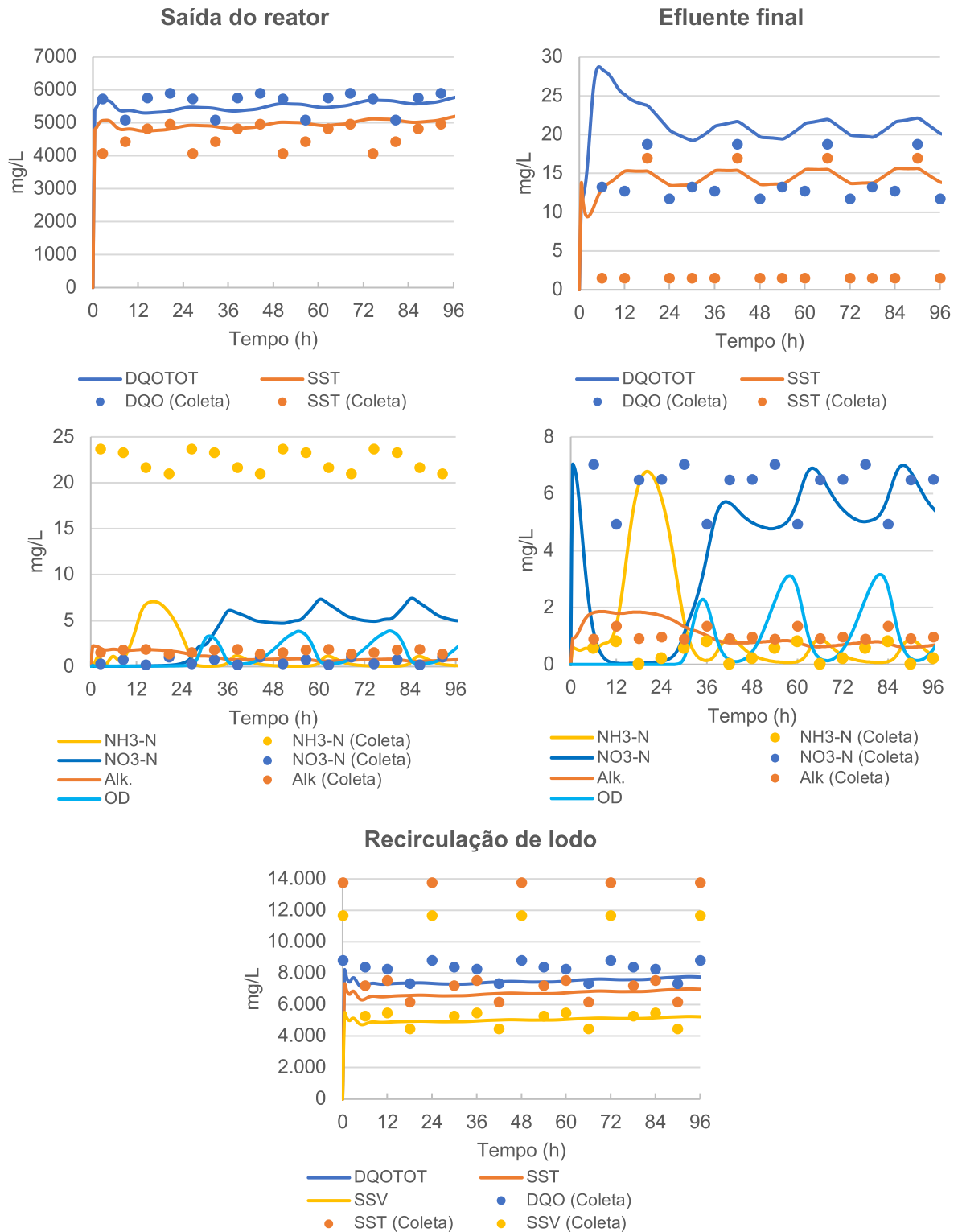
Tabela 41 – Comparação entre médias reais e da simulação dinâmica para 48-96 h, primavera

Parâmetro	Média real. (mg/L)	DP real %	Simul. 48-96h (mg/L)	DP simul. 48-96h %	Erro (mg/L)	Erro %	Tolerância	Acertou?
Efluente								
DQO	21,70	60,9%	25,06	5,1%	3,36	15%	5 mg/L	Sim
SST	32,28	103,9%	24,82	8,8%	-7,46	-23%	5 mg/L	Não
$\text{NH}_3\text{-N}$	1,44	61,1%	0,72	60,7%	-0,71	-50%	1 mg/L	Sim
$\text{NO}_3\text{-N}$	7,26	7,6%	6,87	6,6%	-0,39	-5%	1 mg/L	Sim
Alk.	0,69	10,7%	1,34	6,5%	0,65	95%	1 mg/L	Sim
Reator								
DQO	5229,23	8,8%	6082,75	2,4%	853,51	16%	10%	Sim
SST	5326,73	18,1%	5783,80	2,4%	457,07	9%	10%	Não
$\text{NH}_3\text{-N}$	18,12	4,3%	0,68	70,1%	-17,43	-96%	1 mg/L	Não
$\text{NO}_3\text{-N}$	0,43	73,7%	6,86	7,4%	6,43	1510%	1 mg/L	Não
Alk.	4,00	24,2%	1,33	7,2%	-2,67	-67%	1 mg/L	Não
Lodo								
DQO	8986,51	4,9%	9468,18	1,3%	481,67	5%	10%	Sim
SST	10112,50	8,1%	9004,73	0,9%	-1107,77	-11%	10%	Não
SSV	6173,98	33,6%	6393,36	1,3%	219,38	4%	10%	Sim

4.5.3 Resultados da simulação dinâmica com perfil afluente de verão

Os gráficos a seguir representam os resultados da simulação para o perfil afluente de verão, obtido a partir da campanha de coleta realizada em dez/2020.

Gráficos 60, 61, 62, 63 e 64 – Resultados da simulação dinâmica para verão



As simulações para as amostras de verão foram realizadas com o mesmo fator K_{La} de $5,5 \text{ h}^{-1}$ adotado para as simulações em regime estacionário. Embora os resultados para DQO do efluente final não tenham tido a mesma aderência comparativamente aos das demais estações climáticas, o conjunto apresentou resultados satisfatórios em termos de médias para os demais parâmetros, conforme se observa na Tabela 42. Para quase todos, exceto quanto às formas nitrogenadas na saída do reator, as médias obtidas atenderam aos critérios de aceitação elencados no referencial teórico.

Também se observa, partir dos gráficos, a menor amplitude da variação dos parâmetros que resultaram da simulação, comparativamente com as amostras reais, fato expresso em termos de desvios padrão calculados e constantes na Tabela 42. A amplitude maior foi obtida para NO_3 do efluente final, assim como obtido para os demais conjuntos de amostras, porém para a primavera e verão isso foi atingido com patamares menores de aeração no reator (através de fatores K_{La} de $5,5 \text{ h}^{-1}$ ou menor), o que causou oscilações observadas na nitrificação, com concentrações de OD no efluente próximo de “zero” coincidindo com valores máximos de $\text{NH}_3\text{-N}$.

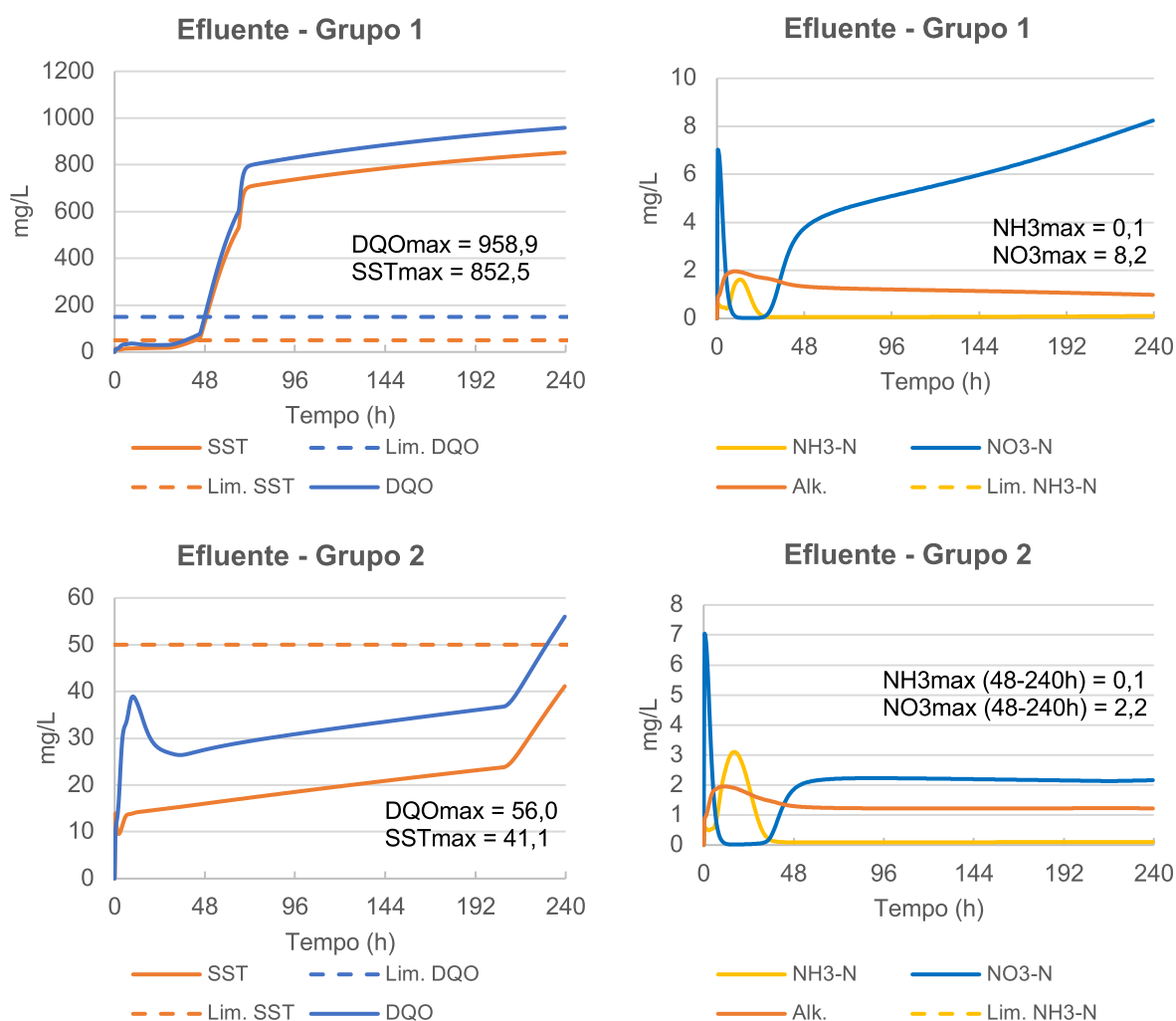
Tabela 42 – Comparação entre médias reais e da simulação dinâmica para 48-96 h, verão

Parâmetro	Média real. (mg/L)	DP real %	Simul. 48-96h (mg/L)	DP simul. 48-96h %	Erro (mg/L)	Erro %	Tolerância	Acertou?
Efluente								
DQO	14,18	19,3%	20,75	4,3%	6,57	46%	5 mg/L	Não
SST	17,00	39,3%	14,63	5,3%	-2,37	-14%	5 mg/L	Sim
$\text{NH}_3\text{-N}$	0,41	75,5%	0,34	80,7%	-0,07	-16%	1 mg/L	Sim
$\text{NO}_3\text{-N}$	6,25	12,7%	5,71	12,9%	-0,53	-9%	1 mg/L	Sim
Alk.	1,03	17,7%	0,72	10,9%	-0,31	-30%	1 mg/L	Sim
Reator								
DQO	5629,42	5,5%	5593,09	1,3%	-36,32	-1%	10%	Sim
SST	4585,00	7,6%	5033,54	2,3%	448,54	10%	10%	Sim
$\text{NH}_3\text{-N}$	22,43	5,0%	0,31	110,7%	-22,11	-99%	1 mg/L	Não
$\text{NO}_3\text{-N}$	0,58	58,3%	5,74	14,4%	5,15	886%	1 mg/L	Não
Alk.	1,68	12,8%	0,71	12,1%	-0,96	-57%	1 mg/L	Sim
Lodo								
DQO	8200,86	6,5%	7595,47	1,4%	-605,39	-7%	10%	Sim
SST	6966,13	42,9%	6835,59	1,4%	-130,55	-2%	10%	Sim
SSV	5068,87	57,0%	5126,69	1,4%	57,82	1%	10%	Sim

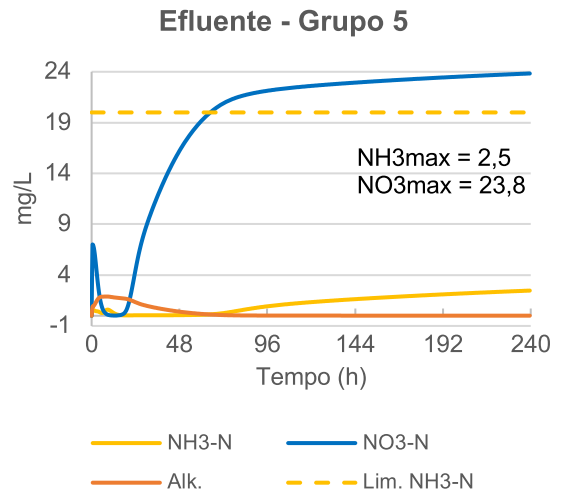
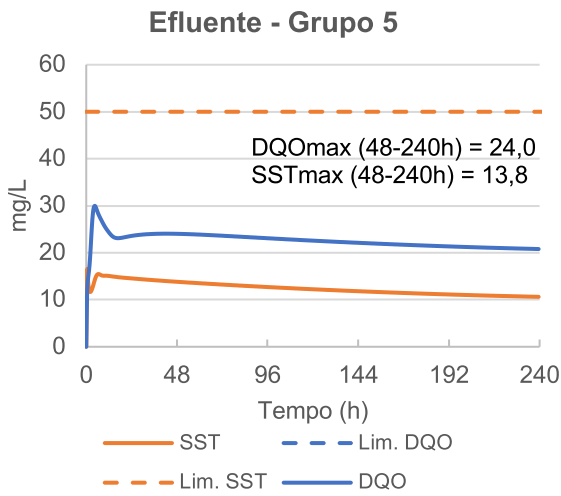
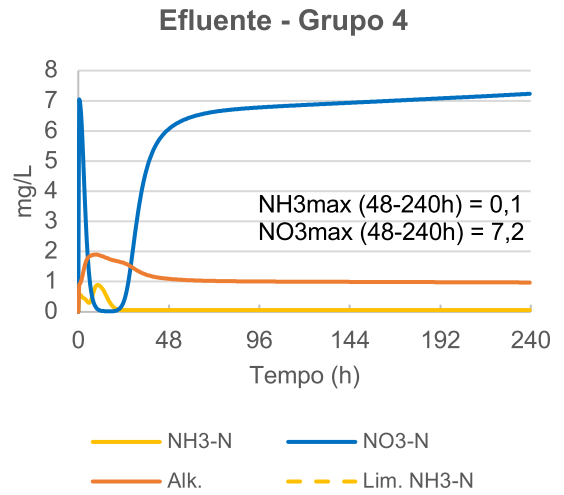
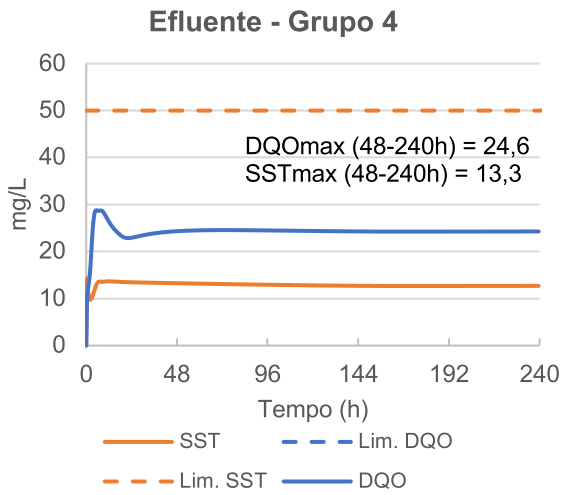
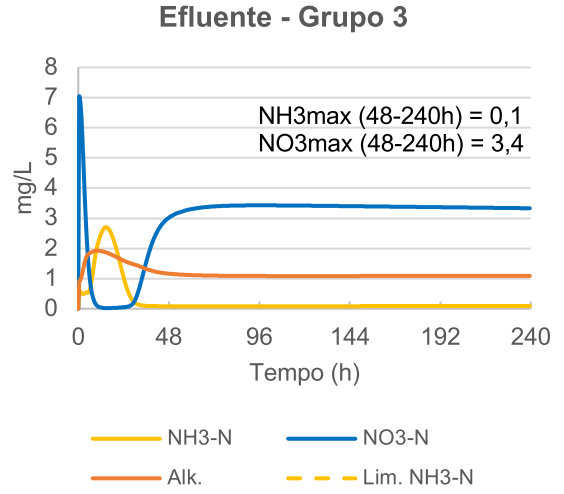
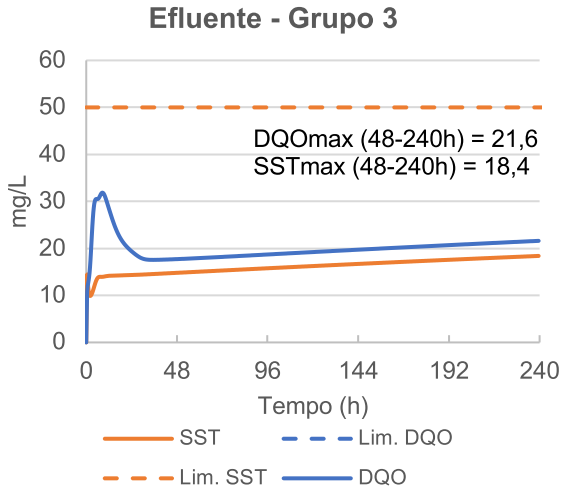
4.6 Resultados da validação com simulações em regime estacionário com dados secundários (médias históricas)

As simulações com dados médios calculados a partir dos dados secundários fornecidos pelo DMAE, conforme metodologia apresentada anteriormente, são apresentadas nos gráficos a seguir e objetivaram uma verificação adicional da calibração do modelo. Não havia informações quanto ao lodo ativado no interior do reator aeróbio, bem quanto ao decantador secundário, e por este motivo, foram adotadas as condições iniciais obtidas nos ensaios realizados para as coletas de verão (valores médios), visto que as temperaturas médias dos grupos superaram os 22 °C. O fator K_{La} adotado foi de $5,5 \text{ h}^{-1}$, pois este se demonstrou o mais adequado para as simulações dinâmicas do perfil de verão.

Gráficos 65, 66, 67 e 68 – Resultados da simulação para os grupos afluentes calculados por médias históricas



Gráficos 69, 70, 71, 72, 73 e 74 – Resultados da simulação para os grupos afluentes calculados por médias históricas (continuação)



Era esperado que os resultados não tivessem correspondência com as médias calculadas para o efluente final: era desconhecida a hora das coletas, havia lacunas nos dados secundários, não se havia dados quanto ao reator e a vazão de recirculação era desconhecida. Porém, os resultados ilustrados nos gráficos mostraram estabilidade do efluente logo nas primeiras horas de simulação (exceto no grupo 1, com DQO afluente > 1300 mg/L). Os resultados das simulações foram calculados considerado o período de 48 a 240 h, sendo informados na Tabela 43.

Tabela 43 – Resultados para grupos selecionados nos dados secundários fornecidos pelo DMAE, em médias do efluente tratado

Grupo	DQO (mg/L)			SST (mg/L)			NH ₃ -N (mg/L)			NO ₃ -N (mg/L)		
	Real	Simul.	Erro	Real	Simul.	Erro	Real	Simul.	Erro	Real	Simul.	Erro
1	35.5	839.4	803.9	31.5	745.0	713.5	1.5	0.1	-1.4	12.2	6.0	-6.2
2	35.0	34.8	-0.2	17.6	22.1	4.5	8.2	0.1	-8.1	2.1	2.2	0.1
3	28.3	19.7	-8.6	15.3	16.7	1.4	9.2	0.1	-9.1	3.3	3.4	0.1
4	31.3	24.4	-6.9	13.0	12.8	-0.2	6.8	0.1	-6.7	3.4	6.9	3.5
5	55.5	22.2	-33.3	15.5	12.0	-3.5	3.0	1.5	-1.5	2.1	22.4	20.3

Os resultados para os grupos 2, 3 e 4 foram surpreendentemente compatíveis com as médias calculadas (exceto quanto a NH₃-N), dadas as limitações anteriormente expostas. Quanto ao grupo 1, a DQO tão elevada quanto à adotada para o afluente bruto, em regime estacionário, levou a um desequilíbrio no decantador no tempo t = 70 h, com saída de material no efluente final. Quanto ao grupo 2, fenômeno semelhante é observado no tempo t = 210 h, já que a DQO imposta ao afluente estacionário é da faixa de 780 mg/L em média.

No grupo 3, em que a DQO afluente média foi de 492 mg/L, o modelo mostrou resultados bastante aderentes, tanto em termos de DQO quanto de SST. A simulação da nitrificação, sendo mais sensível quanto às condições do reator aeróbio, não se demonstrou satisfatória nesse tipo de estudo.

Embora haja imperfeições na calibração ou na configuração proposta para o modelo, observadas em regime estacionário para as médias calculadas para as amostras e para os dados secundários do DMAE, alguns resultados observados encontram-se dentro da faixa de aceitação da predição e, para a grande maioria, dentro de uma faixa compatível com a realidade. Sendo assim, a pesquisa avançou na simulação dinâmica com a utilização dos perfis afluentes obtidos nas campanhas de coletas, estando os resultados expostos no item a seguir.

4.7 Resultados das simulações em regime dinâmico utilizando diferentes cenários

Conforme exposto em 3.5, o DMAE propôs alguns cenários para a operação da ETE visando verificar os seus limites de operação. Resumidamente, os cenários envolvem a retirada de tanques de operação – o que pode ocorrer no caso de manutenção de equipamentos e obras de restauração –, a retirada de operação da bomba de descarte de lodo e a variação das características do afluente, estas ocorrendo por aumento de vazão e/ou de carga.

Os itens a seguir versam sobre os resultados para os cenários propostos. Como esgoto bruto afluente, selecionou-se o perfil obtido na campanha de verão, em modo dinâmico. A escolha do perfil de verão se deve à menor variação diária que este apresentou, comparativamente com os das outras estações. A escolha do modo dinâmico para simulação se deve à melhor representatividade deste comparativa ao método por médias, pois este que traz consigo algumas distorções adicionais.

O período de simulação escolhido foi de 60 dias de modo a se observar os efeitos a médio prazo no efluente final, embora os gráficos apresentados se limitem a 240 h. Os efeitos em 60 dias, quando relevantes, são oportunamente mencionados. Conforme o DMAE, os limites de lançamento para DQO, SST e NH₃-N vigentes são de 150 mg/L, 50 mg/L e 20 mg/L, respectivamente.

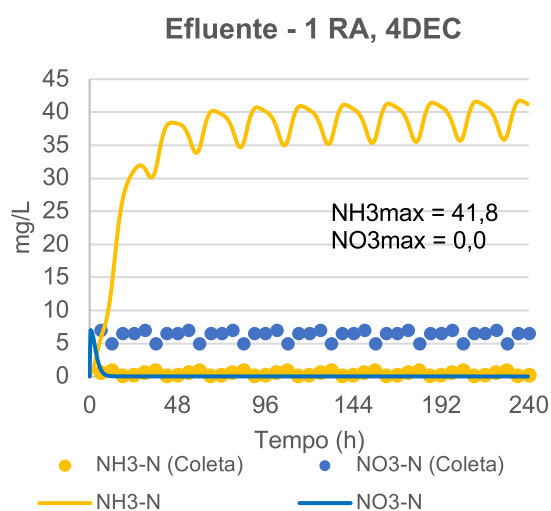
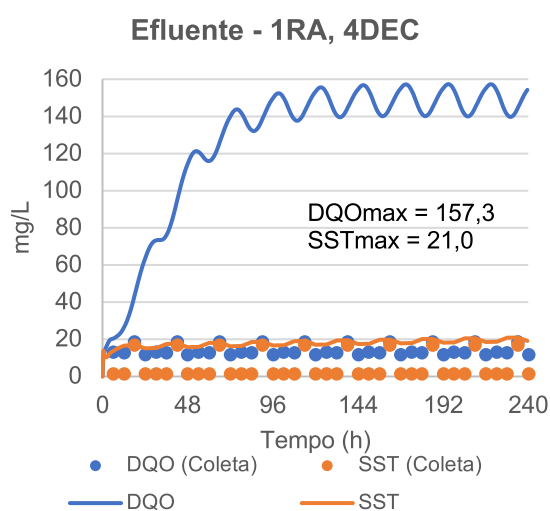
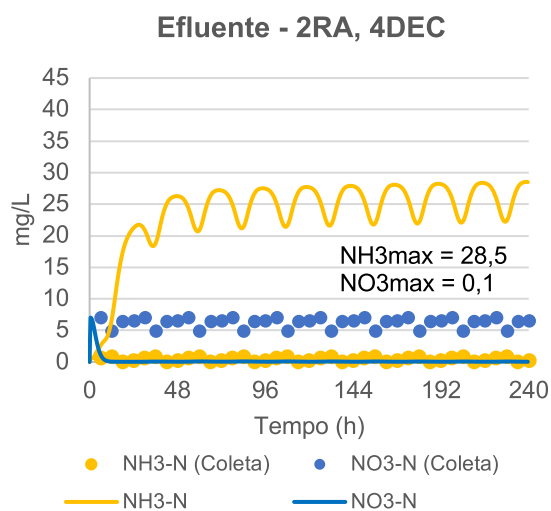
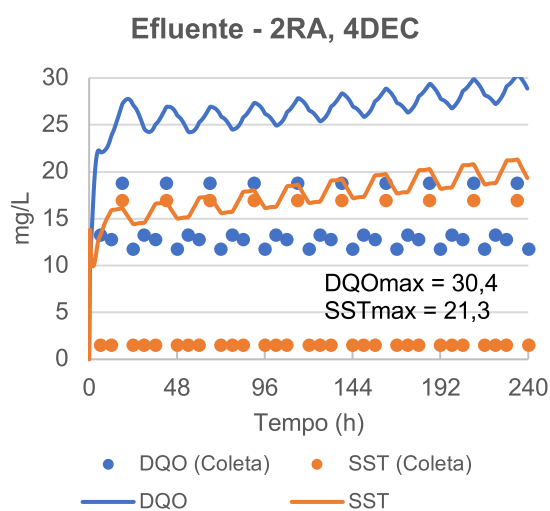
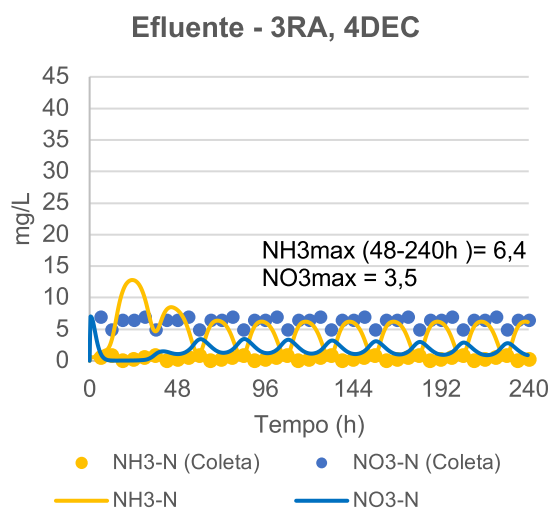
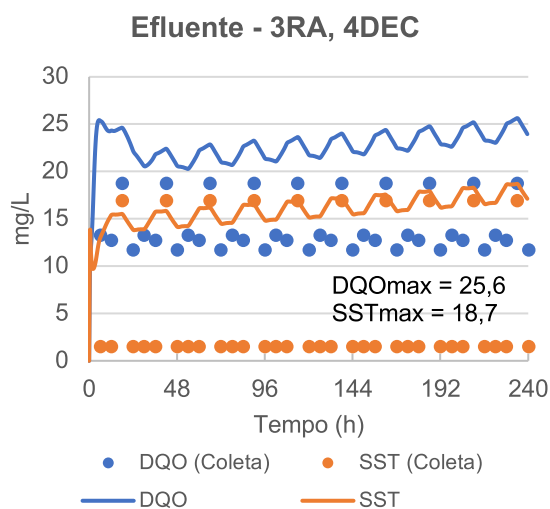
Uma dificuldade em analisar resultados decorre do fato de serem uma quantidade considerável de parâmetros em mais de um ponto de monitoramento. Inevitavelmente, os resultados acabam por ser expressos em uma quantidade expressiva de gráficos e em distintos períodos. O trabalho buscou sintetizar os resultados a quantidade mínima de gráficos, embora se tenha chegado nas centenas.

4.7.1 Simulação da retirada de tanques de operação

A simulação da retirada de tanques de operação foi dividida em a) retirada de reatores aeróbios e b) retirada de decantadores. Em quaisquer casos, a retirada de lodo do sistema se manteve constante dos padrões anteriores. Para a retirada de decantadores, a vazão de recirculação de lodo foi diminuída proporcionalmente à quantidade de unidades desativadas.

Os resultados para a retirada de reatores aeróbios são ilustrados nos gráficos a seguir. Por objetividade, as análises foram limitadas ao efluente final. Os valores medidos a partir das coletas foram mantidos nos gráficos a título de referência.

Gráficos 75, 76, 77, 78, 79 e 80 – Resultados da simulação para retirada de reatores

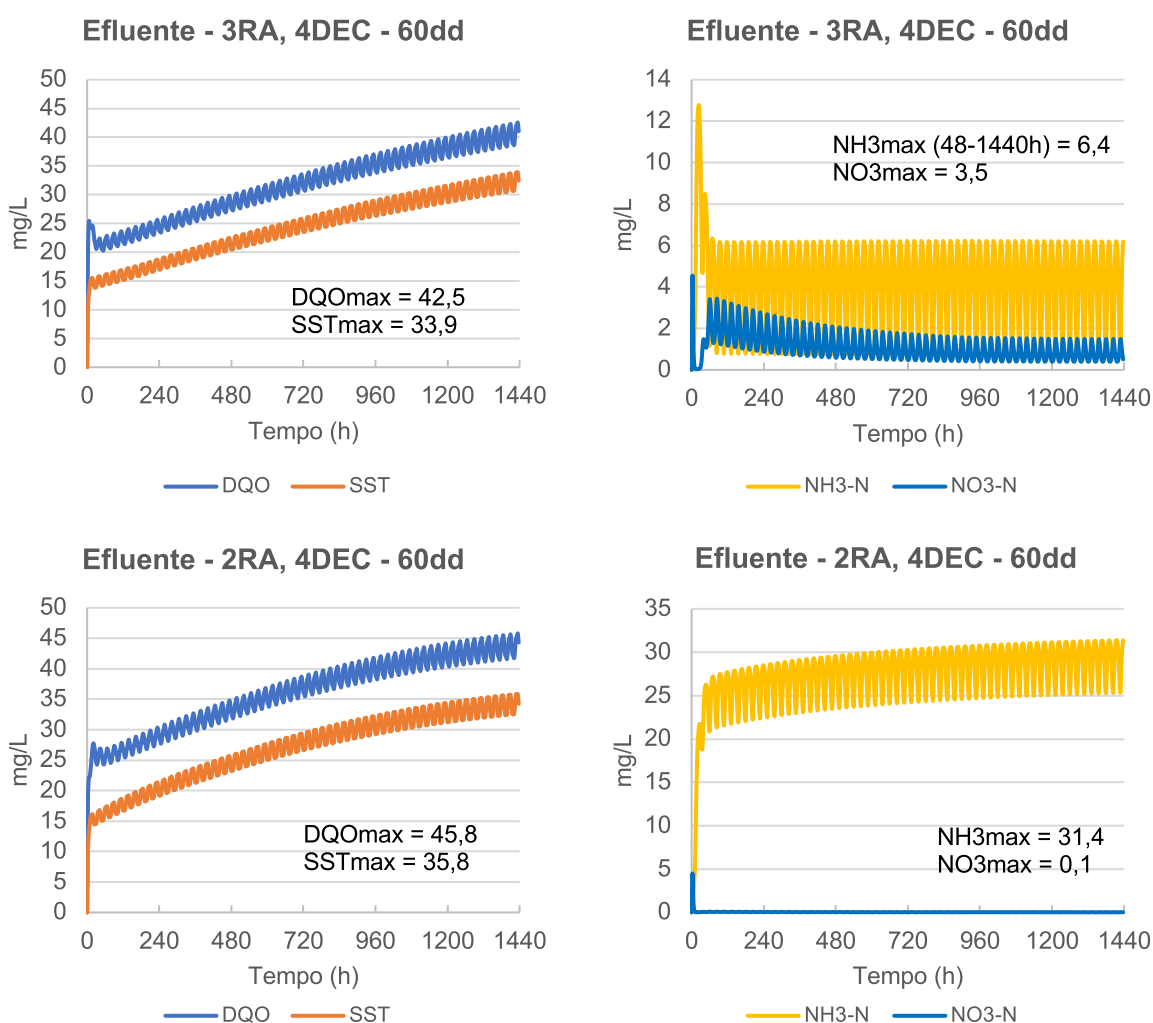


Conforme observa-se nos gráficos anteriores, a consequência para retirada de apenas um tanque de aeração não implicou necessariamente em um efluente fora dos padrões de lançamento, pelo menos com a utilização do perfil levantado na campanha de 24 h de verão. Nem mesmo após 60 dias os resultados para parâmetros de efluente tratado atingiram o limite legal vigente, conforme gráficos a seguir.

Para a retirada de dois tanques de aeração, os limites para DQO e SST também não são atingidos, nem mesmo para 60 dias, conforme gráficos a seguir, porém o limite para $\text{NH}_3\text{-N}$ é ultrapassado antes de 48 h de simulação. Para este caso, portanto, medidas adicionais teriam que ser propostas para que o efluente se enquadrasse dentro do padrão de lançamento.

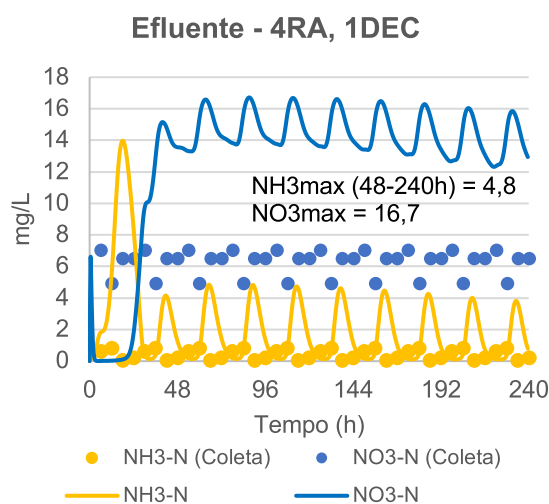
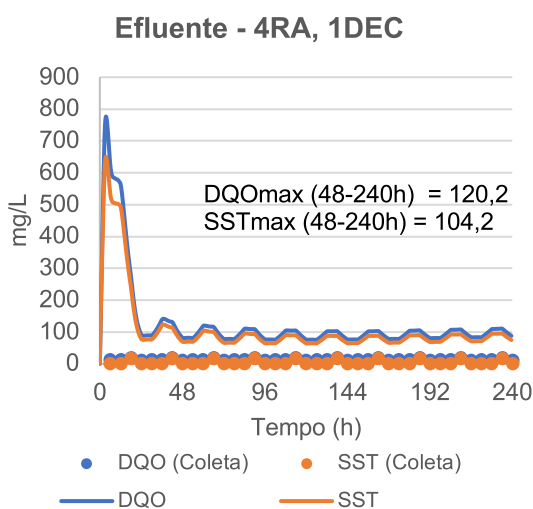
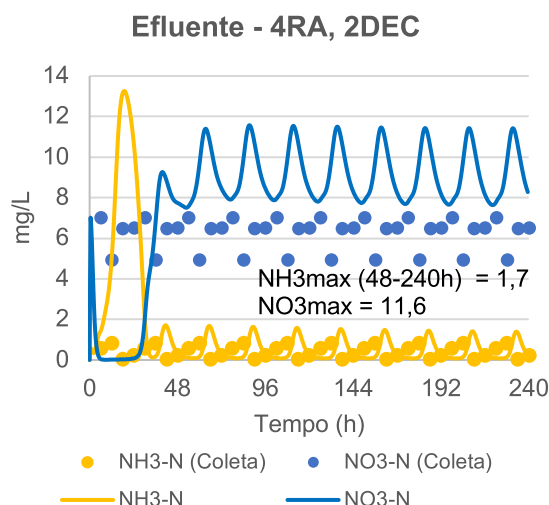
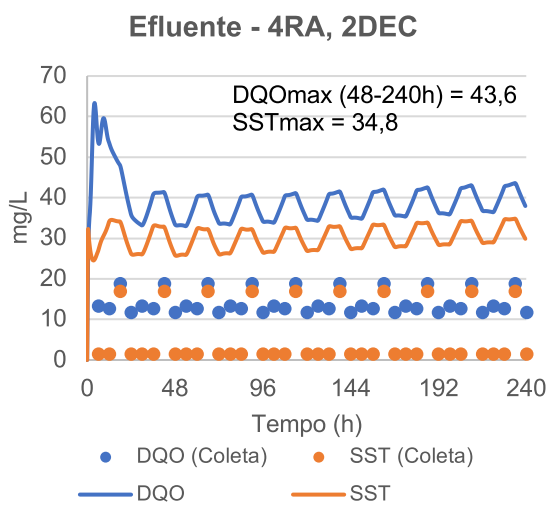
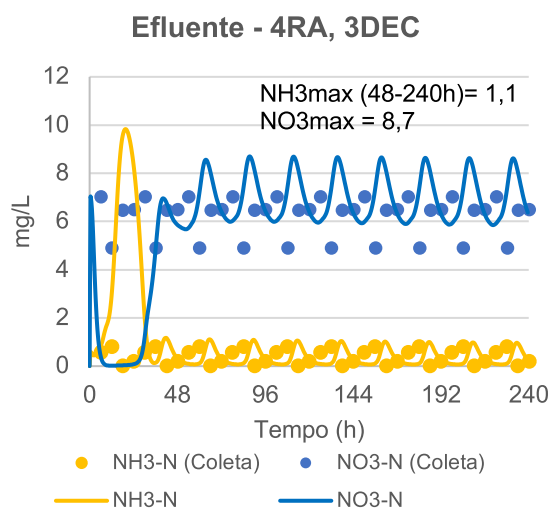
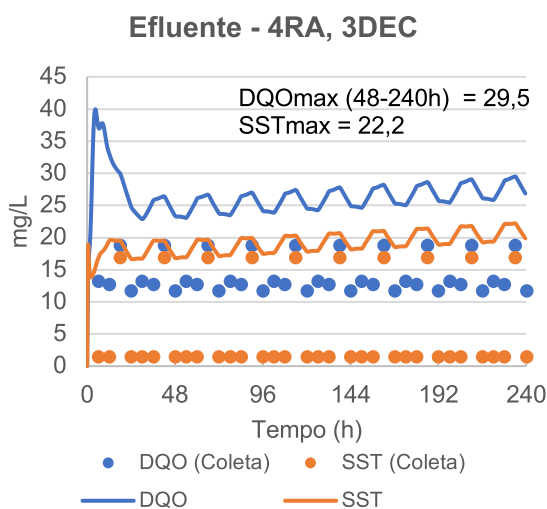
Quanto à retirada de três tanques de aeração, o efluente ultrapassaria os limites para DQO em três dias, e para $\text{NH}_3\text{-H}$ em menos de 24 horas.

Gráficos 81, 82, 83 e 84 – Resultados para retirada de reatores, 60 dias



Quanto à retirada de decantadores de operação, para o efluente de verão escolhido, não foi observado comprometimento no efluente final (quanto aos limites de lançamento) para um prazo de 10 dias, conforme gráficos a seguir.

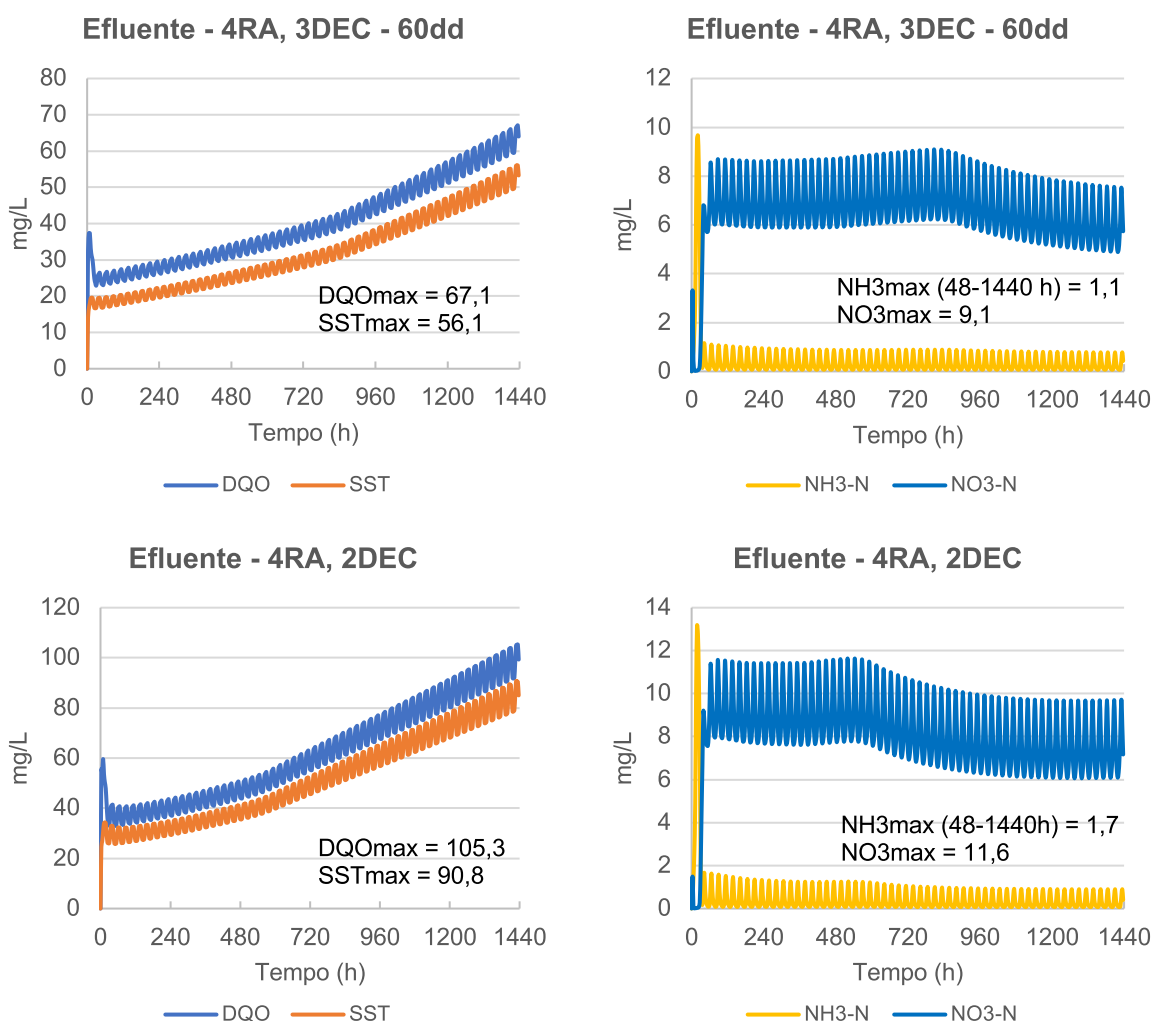
Gráficos 85, 86, 87, 88, 89 e 90 – Resultados para retirada de decantadores



Por outro lado, para um período menor de que 60 dias, o limite de 50 mg/L para SST é atingido, conforme se depreende dos gráficos a seguir (simulação para 60 dias). Quanto à retirada de duas unidades, observa-se, além do acúmulo de nitrato e DQO, que a concentração de SST atinge o limite legal em até 20 dias. Quanto à retirada de três decantadores, o sistema não se enquadra nos limites legais, ultrapassando para DQO e SST em menos de 24 horas.

É preciso contextualizar que tais resultados se referem ao efluente escolhido para a simulação, que teve menores flutuações comparativamente com os perfis de inverno e de verão. A respeito do perfil de inverno, a estação de tratamento apresentou menor eficiência geral, portanto os limites legais podem ser atingidos em um prazo inferior aos inferidos no presente estudo.

Gráficos 91, 92, 93 e 94 – Resultados para retirada de decantadores, 60 dias

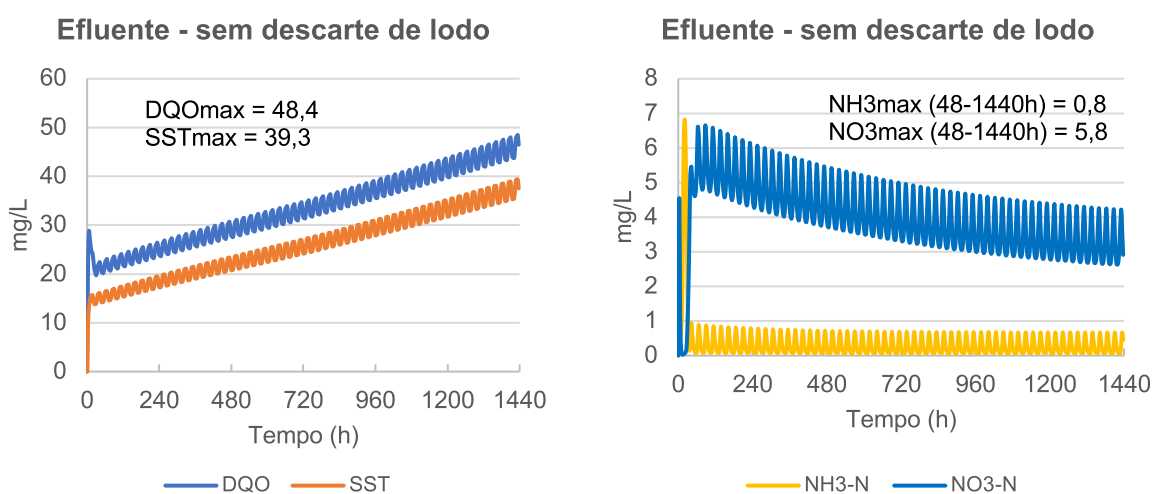


4.7.2 Simulação da interrupção do descarte de lodo

O descarte de lodo foi interrompido em simulações dinâmicas, sendo mantidos todos os demais parâmetros operacionais vigentes e os critérios de simulação adotados anteriormente. Inicialmente, o objetivo era verificar qual a idade do lodo limite para que o sistema continuasse a operar, no entanto os resultados para a interrupção do descarte demonstraram, no nível deste modelo em estudo, que não houve problemas operacionais que impedissem o funcionamento da ETE a curto prazo, pelo menos dentro dos critérios até aqui adotados.

A recirculação do lodo foi mantida na vazão original. Os resultados sem o descarte de lodo são expressos nos gráficos a seguir. Por objetividade, as análises foram limitadas ao efluente final, sendo apresentados diretamente para o período de 60 dias.

Gráficos 95 e 96 – Resultados para interrupção do descarte de lodo, 60 dias



A cessão da retirada de excesso de lodo pode não trazer consequência a curto prazo quanto à qualidade do efluente final, em termos do modelo, para o prazo de até 60 dias. No entanto, fica claro que a concentração de DQO e SST no efluente final é crescente ao longo do período, atingindo o limite de lançamento para SST em aproximadamente 90 dias.

Um estudo específico quanto ao aumento da idade do lodo e os benefícios disso em termos da biodegradabilidade do lodo podem ser investigados através do modelo calibrado. Pela objetividade do presente estudo, optou-se por não realizá-lo, embora seja um tema que possa ser de interesse pela equipe do DMAE.

4.7.3 Simulação da alteração das características do esgoto bruto afluente

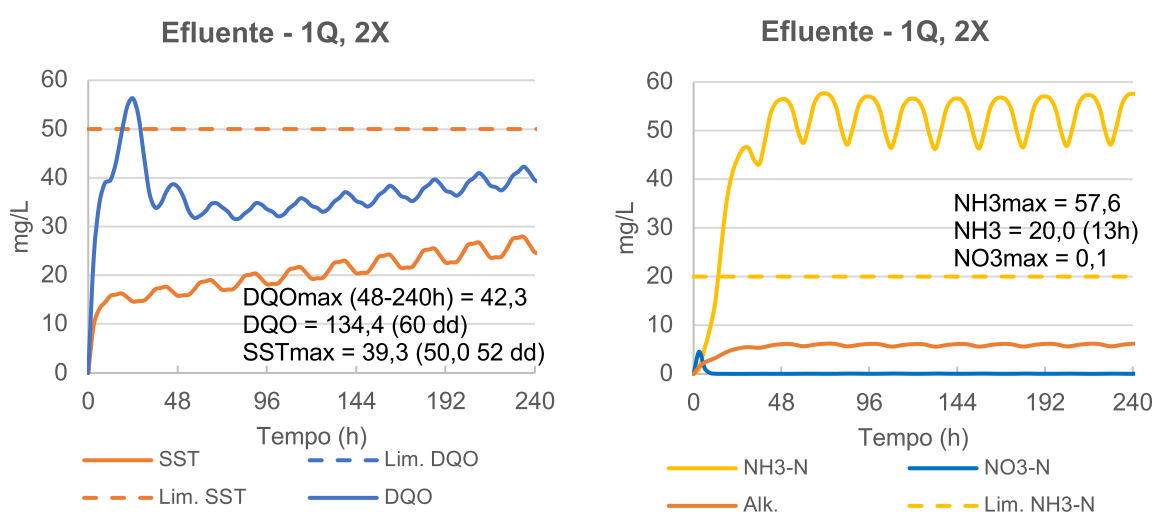
As alterações nas características do afluente consistiram em dobrar vazão (Q) e concentração de parâmetros (X) através das seguintes combinações:

- Vazão original e dobro da concentração de parâmetros: 1Q, 2X;
- Dobro de vazão e dobro da concentração de parâmetros: 2Q, 2X;
- Dobro de vazão e dobro e parâmetros originais: 2Q, 1X;
- Dobro de vazão e metade da concentração de parâmetros: 2Q, 0,5X.

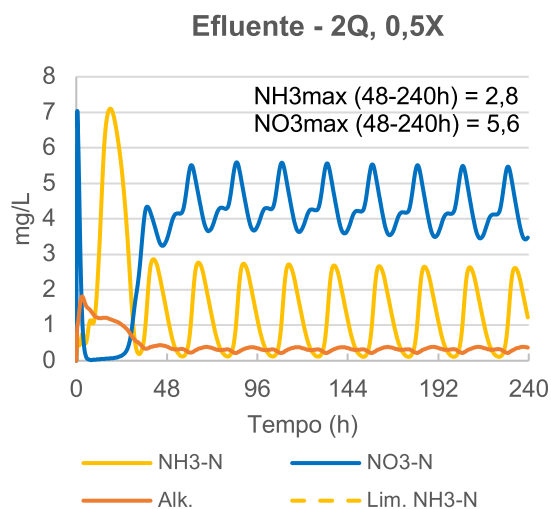
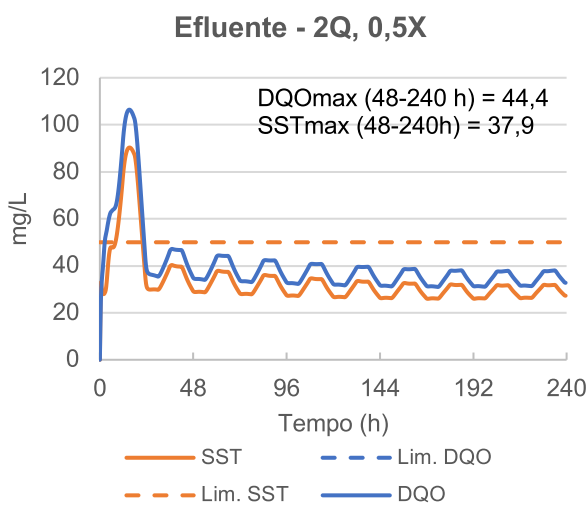
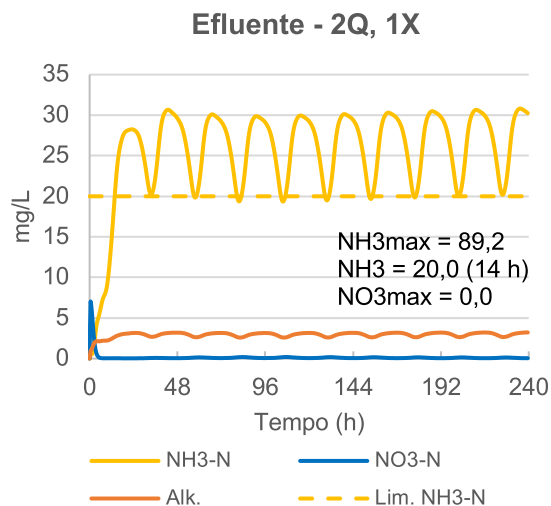
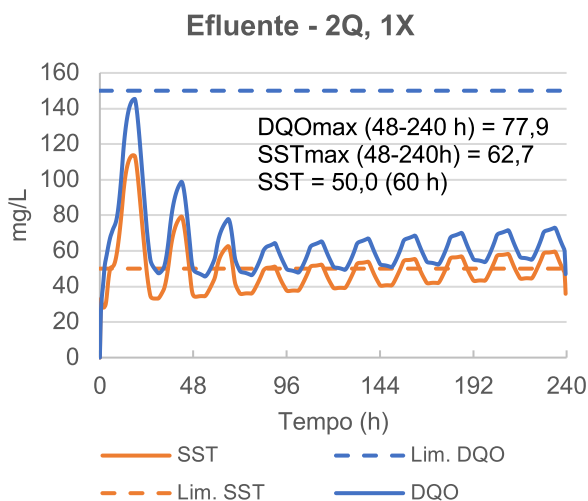
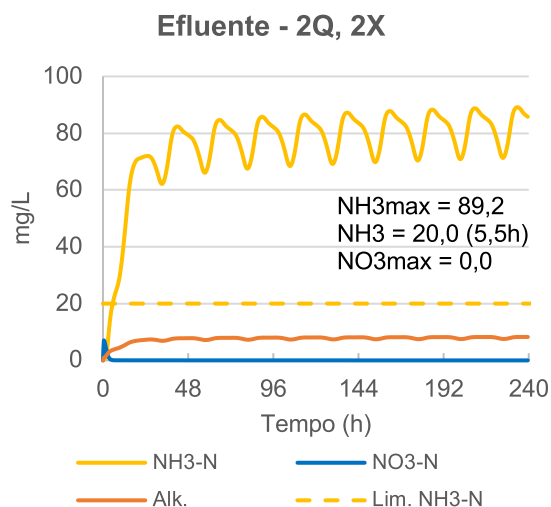
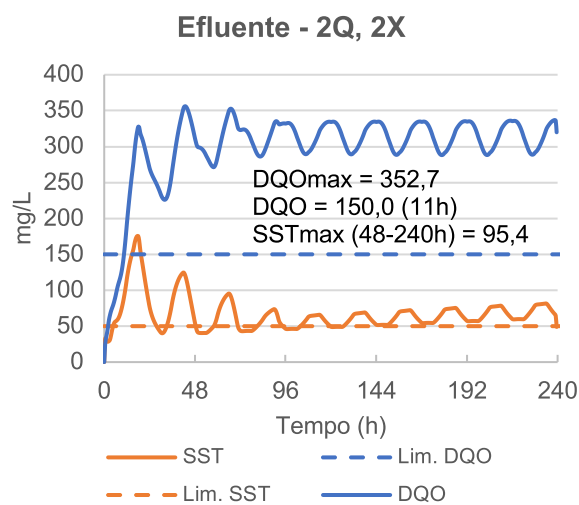
Em todos os casos, foi mantida a operação original da simulação dinâmica, para o perfil de verão, sendo mantidas as quantidades de reatores e decantadores, bem como o pH afluente. As vazões de recirculação e de descarte de lodo foram mantidas, independentemente da vazão afluente. As condições iniciais do reator foram mantidas iguais às que havia na simulação original.

Os resultados são expressos nos gráficos a seguir. Por objetividade, as análises foram limitadas ao efluente final, sendo apresentados diretamente para o período de 60 dias. Como referência, os valores limites de lançamento foram marcados em linha tracejada.

Gráficos 97 e 98 – Resultados da simulação para alteração do esgoto afluente quanto a vazão (Q) e concentração (X)



Gráficos 99 e 100, 101, 102, 103 e 104 – Resultados da simulação para alteração do esgoto afluente quanto a vazão (Q) e concentração (X) (continuação)



No primeiro caso, foi estudado aumento da concentração do afluente, mantendo-se inalterada a vazão. É o caso referente ao lançamento de esgotos concentrados (fossas sépticas, lançamentos industriais, etc.) na estação de tratamento. Conforme observa-se no respectivo gráfico, os limites de lançamento são atingidos em aproximadamente 52 dias para SST e em poucas horas para $\text{NH}_3\text{-N}$, este último atingindo valores de 57 mg/L, próximo à concentração do afluente lançado. Na realidade, para este afluente idealizado, a ETE não é capaz de atender os padrões de lançamento quanto a nitrogênio amoniacal.

O segundo caso foi estudado a título de sobrecarga máxima da estação, tanto em termos de vazão quanto de concentração. É o caso do adensamento de redes seguido por lançamentos industriais, uma hipótese rara, mas válida com propósito de verificação do modelo. Conforme era esperado, todos os limites de lançamento são ultrapassados em menos de 24 horas. As concentrações do efluente final se aproximam das do afluente bruto, pela falta de capacidade de tratamento da ETE.

Para o terceiro caso, foi estudado o dobro de vazão afluente, em concentrações iguais às atuais, que é o caso da extensão da rede coletora para atendimento de uma população maior. Esta hipótese não é rara e visa verificar se a estação necessitaria de ampliação. Conforme ilustrado nos gráficos, o limite de lançamento é atingido para SST e $\text{NH}_3\text{-N}$ em menos de 24 horas. Uma tese que poderia ser verificada seria o incremento do sistema de aeração, sem a necessidade de aumento do número de tanques, adiando uma necessidade futura de ampliação. Alternativamente, poderia ser verificado se a construção de uma unidade a mais de decantação, ou um reator aeróbio a mais, atenderia a esta condição do esgoto afluente.

Quanto ao quarto caso, foi estudado para o dobro de vazão e metade da concentração do afluente. Trata-se da infiltração de água de chuva na rede coletora, diminuindo a concentração do esgoto, seja o caso mais comum de aumento de vazão da ETE. De acordo com o modelo, a estação atenderia os padrões de lançamento, fato que deve ser analisado com ressalva pela falta de verificação *in loco*. Além disso, o modelo de decantação impõe simplificações importantes, não sendo verificada a condição de arraste de lodo do fundo do decantador por eventual excesso de vazão.

Os resultados expressos demonstram adesão do modelo aos dados do efluente coletado e a sua aplicabilidade como ferramenta de gestão da ETE. O item a seguir propõe uma discussão sobre as limitações e condicionantes impostas ao modelo e ao estudo e quanto os resultados alcançados no trabalho.

4.8 Considerações quanto às limitações do modelo empregado

Um modelo de lodos ativados é, por definição, uma simplificação das reações que ocorrem realmente numa estação de tratamento de esgotos. Por mais complexo que seja um dado modelo, mesmo os baseados em CFD, ou os que incorporam absorção de fosfato ou os que simulam precipitações químicas, este sempre será uma representação simplificada dos fenômenos que ocorrem na realidade.

Embora com limitações inerentes a qualquer modelo, o ASM3 impõe um desafio adicional aos usuários que é a necessidade de calibração de 47 parâmetros, fora as infindáveis combinações possíveis para reatores durante a etapa de configuração. Sendo assim, o ASM3 é ao mesmo tempo simples e complexo: simples por não envolver todos os fenômenos de uma ETE, complexo pela quantidade de reações incorporadas, que geram uma grande quantidade de parâmetros.

Além da calibração, outro desafio é a necessidade de fracionamento da DQO em diversos compostos (particulados, solúveis, rapidamente biodegradáveis, lentamente biodegradáveis, etc.). O fracionamento é por si só uma área de estudo específico em estações de tratamento, nem sempre com resultados satisfatórios. No entanto, a informação da DQO em frações em diversos pontos da estação de tratamento é condição *sine qua non* para o início de qualquer modelagem.

Além disso, elencando os principais tópicos quanto à modelagem, há as incertezas próprias dos ensaios de campo, começando pela própria determinação da DQO, cujas circunstâncias da coleta e dos ensaios podem levar a resultados imprecisos e incorretos. Desse modo, os itens a seguir versam, brevemente, sobre cada aspecto levantado quanto à modelagem, visando contextualizar o trabalho dentro de suas limitações.

Adicionalmente, foi dedicado um item ao fenômeno observado na saída do reator aeróbio quanto à nitrificação, o que levou a resultados incorretos no modelo em relação aos valores medidos nas amostras coletados.

4.8.1 Limitações em modelos matemáticos

O tratamento de esgotos é naturalmente complexo, envolvendo não apenas reações bioquímicas, mas também aspectos físicos particulares da estação (hidráulica de reatores, bombas, aeradores e vertedores, entre outros).

Nessa linha, o ASM3 é um modelo simples, embora complexo em seus 47 parâmetros para calibração, dezenas de parâmetros operacionais, configurações e dezenas de equações diferenciais envolvidas. O modelo de decantação é ainda mais simples. Não há, nos modelos, simulação hidráulica, decantação dentro do reator, formação de espuma, de filamentosas e de lodo volumoso, quebra de flocos, curtos-circuitos hidráulicos, escape de flocos em vertedores, gradientes de temperatura e reações anaeróbias. As figuras a seguir consistem em exemplos de alguns fenômenos comuns observados na ETE São João Navegantes em dias de coletas de amostras.

Eventuais limitações nos modelos não significam falta de qualidade, mas é preciso contextualizar os resultados por ele gerados. Modelos muito complexos também falham e trazem consigo dificuldades adicionais em modelagem, com necessidade de inserção de dados adicionais. Como exemplo disso, o próprio ASM1, sendo menos complexo do que o ASM3, acaba sendo o preferido dos modeladores mesmo diante de eventuais limitações.

Figuras 29 e 30 – Formação e acúmulo de espuma em um reator aeróbio, no verão



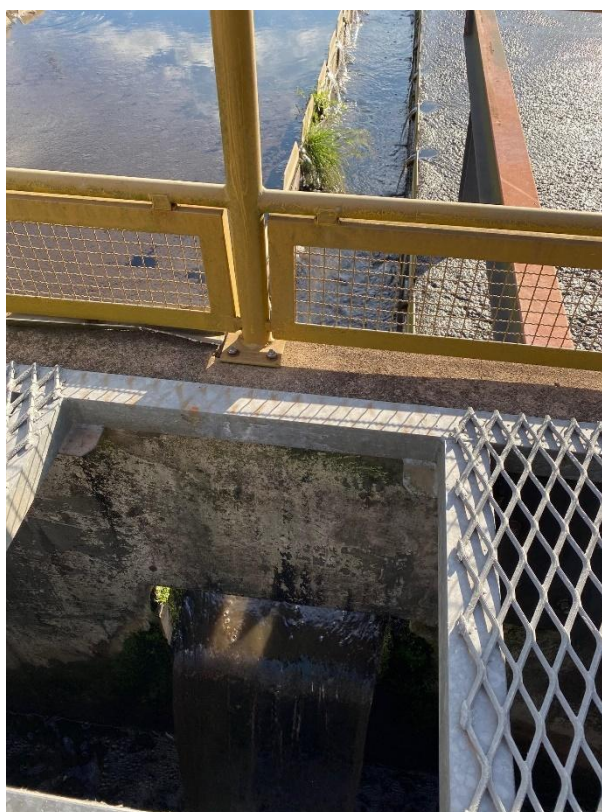
Fonte: registrado pelo autor.

Figuras 31 e 32 – Formação de fina camada de gelo, superficial, no canal de recirculação de lodo e espuma com cristais de gelo no reator aeróbio, no inverno



Fonte: registrado pelo autor.

Figura 33 – Acúmulo de espuma no decantador secundário e escape de lodo através das calhas de coleta (efluente final com presença de lodo)



Fonte: registrado pelo autor.

Resultados em modelos são gerados em um contexto específico. Bons usuários possuem ciência dos critérios adotados e das regras envolvidas, sabendo que modelos representam a realidade dentro de uma possibilidade restrita, com limitações e através de muitas simplificações. Estas últimas são as que viabilizam o uso corrente em diversas áreas da engenharia como, por exemplo, na área de estruturas. Predições nessa área são imprecisas, porém os modelos estruturais são de uso corrente no mercado, sem os quais não é mais possível a elaboração de projetos complexos.

4.8.2 Considerações quanto aos coeficientes para calibração

Não obstante as limitações de qualquer modelo de lodos ativados, o ASM3 possui um conjunto tão expressivo de parâmetros para calibração o que, por si só, leva o usuário a ponderações quanto aos resultados gerados. Os coeficientes cinéticos para microrganismos são particulares para cada lodo. Embora os valores adotados sejam os mesmos para uma dada estação de tratamento, na prática eles deveriam ser revisados periodicamente, uma vez que os próprios microrganismos mudam de acordo com a época do ano e de acordo com as condições operacionais.

Os coeficientes de meia saturação para DQO, OD, $\text{NH}_3\text{-N}$ e produtos armazenados têm amplas faixas de possibilidades na literatura. O coeficiente de meia vida para DQO padrão no ASM3 é de 2 mg/L, porém autores propuseram que seja adotado o padrão de 10 mg/L, que é cinco vezes o valor inicialmente referencial. A taxa de hidrólise é muito sensível para o modelo e, embora o referencial seja de 0,102 h^{-1} , autores propuseram o valor de 0,375 h^{-1} , mais de três vezes o valor inicial. Quanto aos coeficientes de temperatura, são nada menos do que 10 previstos no modelo. Não se encontrou referências na literatura quanto aos valores praticados por usuários, no entanto, neste trabalho, foi necessário diminuir os valores padrão para bactérias autotróficas visando uma melhor qualidade dos resultados.

Este fato serve para ilustrar o desafio que se tem ao optar-se pelo uso de um modelo medianamente complexo para lodos ativados. Sem uma ferramenta computacional pesada (geralmente restrita a softwares comerciais) e uma quantidade muito grande de dados coletados, a calibração correta desse tipo de modelo pode ser uma tarefa impossível. No presente trabalho, diante a quantidade limitada de amostras e valendo-se de iterações simples do software, contando também com método de

tentativa e análise de erros, entendeu-se que o procedimento adotado foi bem sucedido.

Dos 47 parâmetros a serem calibrados, o trabalho alterou 11: três coeficientes de temperatura, sete coeficientes cinéticos envolvendo microrganismos (taxa de crescimento, respiração endógena, respiração aeróbia e anóxica para heterotróficas e autotróficas) e dois coeficientes de meia saturação, sendo para estes adotados os novos valores padrão sugeridos na bibliografia. Os coeficientes referentes aos microrganismos foram obtidos por iterações no software; os de temperatura foram estimados por tentativa simples, e os últimos por testes com os valores sugeridos.

Embora aparentemente fácil, posto desta forma, é preciso informar que esta etapa consumiu quase a metade de todo o tempo da pesquisa, iniciando tão logo foram disponibilizados os primeiros resultados referentes às amostras coletadas. A calibração específica para um conjunto de amostras levava a resultados incorretos para o outro conjunto, e assim vice-versa. Como premissa, a calibração tinha de ser única para todos os conjuntos, então ela continuou inclusive após a disponibilização dos dados referentes à coleta de verão.

Após incontáveis sobreposições de gráficos, alteração de quase todos os coeficientes do modelo, comparação de resultados e centenas de versões salvas, pode-se afirmar, categoricamente, que não há, para a configuração adotada, calibração que atenda a todos os resultados obtidos através das campanhas de amostras. Também não há como reproduzir as variações dos parâmetros do efluente final com a amplitude que foi observada, neste modelo, tendo como base somente a calibração dos parâmetros.

Por outro lado, em se tratando de médias, embora com um número muito reduzido de amostras, os resultados obtidos com a calibração adotada ficaram dentro da média observada. Para as simulações dinâmicas, as flutuações do modelo acompanharam as oscilações no efluente final real, ainda que com menos intensidade, de modo que a concluir-se que os resultados obtidos foram plenamente satisfatórios dentro do contexto proposto.

4.8.3 Considerações quanto ao fracionamento da DQO

O presente trabalho valeu-se de um procedimento particular para o fracionamento da DQO, sem o uso de testes de bancadas, desconhecendo-se até

mesmo as frações solúveis. O método visou possibilitar que outros usuários interessados em utilizar modelos possam fazê-lo sem ter à disposição ensaios e testes adicionais para fracionar a DQO. Muitos usuários possuem somente dados secundários para modelagem, não havendo também informações quanto à solubilidade da DQO.

Os métodos indicados na literatura são normalmente indicados para o contexto acadêmico, com pouca aplicabilidade prática. As metodologias baseadas em cálculos indicam a necessidade de se conhecer as frações solúveis e particuladas da DQO, ou a concentração de SSV, desconhecidas para a maioria dos usuários. A tentativa simples de utilizar as equações indicadas na literatura não produziu resultados compatíveis no presente trabalho e, por esta razão, foram realizadas as adaptações e verificações dentro dos critérios estabelecidos no item 3.2.4.

O fator mais importante no fracionamento da DQO foi a determinação da DQO total biodegradável, sendo utilizada a equação proposta por Roeleveld e Van Loosdrecht (2002). Embora os coeficientes k_{DBO} e f sejam desconhecidos, a equação gera uma faixa “aceitável” da DQO biodegradável e que fornece subsídios para a determinação das demais frações. A determinação da biomassa ativa a partir de SSV_b também foi considerado um ponto chave para o fracionamento da DQO do lodo ativado, visto que a quantidade de bactérias heterotróficas e autotróficas viáveis afetam diretamente a qualidade dos resultados do modelo.

Partindo do princípio que, no início da modelagem, não se tinha nada além de DQO total e DBO₅ referente ao esgoto bruto, lodo recirculado, interior do reator, saída do reator e efluente final (ou seja, dos cinco pontos de coleta), e que, ao final do procedimento, tinha-se 15 frações para cada um desses pontos, entende-se que a metodologia produziu dados práticos aplicáveis ao modelo. Quanto à qualidade desses dados, uma comprovação pode ser obtida a partir dos resultados do modelo que, embora não sejam completamente exatos, ficaram dentro de uma faixa aceitável para a maioria dos parâmetros.

Ainda que o fracionamento se comprove bem sucedido, cabe lembrar que é mais uma origem de erros no modelo proposto, junto com os parâmetros a ser calibrados e junto com o próprio modelo em si. Soma-se a isso os erros que eventualmente podem ser produzidos na própria etapa de medição de amostras, conforme abordado no item a seguir.

4.8.4 Considerações quanto aos ensaios de laboratório

Outras limitações quanto a lodos ativados se referem não aos modelos, mas sim aos próprios ensaios de campo. Sem entrar no mérito que o próprio ensaio de DQO é uma medição indireta da quantidade de matéria orgânica, há erros em medições e em procedimentos adotados no próprio laboratório, bem como aqueles causados na coleta em si.

Para ilustrar a assertiva, é preciso lembrar que houve uma campanha de coleta no outono, realizada em jun/2020, com ensaios de laboratório tal como nas demais campanhas. Os resultados desses ensaios tiveram que ser completamente descartados por erros identificados numa análise preliminar básica, possivelmente por erro em ambientação, ou por troca de frascos com e sem conservantes, entre outros motivos. Outra possibilidade é a sedimentação preliminar em alguns frascos para análise de SST, o que explicaria inconsistências observadas na relação DQO/SST.

Outro motivo de erros em análises está no condicionamento das amostras entre o momento da coleta e da análise. Embora tenha sido utilizado refrigerador da estação para conserva das amostras, e que o transporte ao laboratório tenha sido efetuado em *coolers* com gelex, é sabido que o intervalo entre a coleta e a análise foi da ordem de horas para alguns casos. Além disso, houve amostras coletadas a 4°C e a 28°C, ambas sendo posteriormente condicionadas a uma mesma temperatura entre a coleta e a análise. Essas diferenças podem ou não reproduzir distorções na medição de parâmetros, portanto os próprios resultados das análises são suscetíveis a imprecisões.

Uma tese que é defendida por este autor é que, se uma amostra dupla de um ponto for coletada, sendo uma encaminhada ao laboratório externo e outra encaminhada ao laboratório da própria ETE, os resultados seriam distintos, mesmo para DQO. Durante as coletas, tentou-se realizar uma contraprova para DQO nesse sentido, porém a necessidade de solubilizar as amostras várias vezes pela equipe da ETE tornou o trabalho impraticável no presente contexto.

Dessa forma, além das limitações do modelo, da dificuldade de calibração, dos possíveis erros no fracionamento da DQO, tem-se ainda os erros possíveis durante as análises de laboratório, que podem trazer alguma distorção no processo de modelagem. Eis porque seria ideal a modelagem com médias obtidas a partir de uma grande quantidade de dados, que possibilitem inclusive o estabelecimento de um perfil

diário mais preciso e distinto para épocas do ano e dias da semana. Uma grande quantidade de dados minimiza eventuais erros em medições, os quais podem ser excluídos por cálculos estatísticos simples.

4.8.5 Outras considerações

Perfil do afluente

Diante da limitação de amostras, o perfil diário do afluente foi traçado por interpolação simples, que pode ou não trazer imprecisões nos resultados. Essa metodologia faz com que cada medição seja uma inflexão num perfil diário estimado (geralmente, um topo ou um vale de um perfil). O perfil diário real é, certamente, diferente do que foi inferido através desta metodologia. Em um certo ponto levantado, em um determinado horário, a variação de um parâmetro pode estar em elevação ou em diminuição, fato desconhecido em virtude do reduzido número de amostras.

Por outro lado, as quatro amostras diárias em cada ponto de coleta informam uma variação de parâmetros que, normalmente, são levantados numa periodicidade ainda menor, a exemplo dos dados secundários fornecidos (quando muito frequente, havia uma medição de DQO diária). Nesse sentido, no presente estudo foi possível, com poucas amostras, observar a variação do comportamento ao longo de 24 horas tanto do afluente bruto quanto do encaminhamento deste até o efluente final, ao longo da estação de tratamento.

Faixa de aceitação dos resultados

Quanto à faixa aceitável para acerto do modelo, foram adotados os valores da Tabela 4 (considerando para DQO a mesma margem para SST no efluente), que essencialmente valem para médias em regime estacionário para uma quantidade maior de dados amostrais. Como o referencial não informa a quantidade de dados mínimos para a média, as faixas para validade adotadas neste trabalho são as mesmas, embora considerada estreita dentro do presente contexto. Ainda assim, diversos parâmetros se enquadraram dentro da faixa de aceitação, especialmente os que foram diretamente medidos a partir de coletas (ou seja, excluindo-se as frações de DQO que foram observadas no efluente a partir do modelo).

De modo geral, os resultados informados pelo modelo encontraram-se compatíveis com as medições realizadas a partir das coletas, com menor ou maior grau de precisão. Exceto quanto às formas nitrogenadas na saída do reator aeróbio, sobre o que é discutido a seguir, a maioria dos resultados obtidos no modelo apresentaram estabilidade com poucas horas de simulação (geralmente após 24 ou 48 horas) e convergindo para a faixa de dos parâmetros medidos a partir de ensaios.

Questão da nitrificação na saída do reator aeróbio

Quando foram realizados os ensaios referentes ao efluente do reator aeróbio, era esperada uma concentração baixa de nitrogênio amoniacal e elevada em nitrato, pois a nitrificação teria que ocorrer completamente dentro de um ambiente de lodo ativado aerado e misturado por efeito da hidráulica. Nas simulações realizadas, para todas as amostras, foi exatamente isso o observado: os resultados para a saída do reator apresentaram baixa concentração de $\text{NH}_3\text{-N}$ e elevada concentração de NO_3 . Além disso, parte do nitrato formado e que sai do reator deveria retornar a este através da recirculação de lodo, ou seja, além do nitrato formado pela nitrificação dentro do reator, haveria um aporte de NO_3 pelo próprio lodo na recirculação.

Quando foram disponibilizados os primeiros resultados para nitrogênio amoniacal e nitrato referente ao efluente do reator, pensou-se que havia erro nos ensaios de laboratório: a concentração de $\text{NH}_3\text{-N}$ informada era elevada e de $\text{NO}_3\text{-N}$ quase “zero”. Quando os resultados para primavera foram informados, o mesmo fenômeno foi observado (em um dos casos, a concentração de $\text{NH}_3\text{-N}$ na saída do reator foi superior à do esgoto bruto afluente). Observando-se a alcalinidade, observou-se que permanecia elevada junto à saída do reator, como se não a nitrificação tivesse sido inibida dentro deste.

Após a saída do reator, a concentração desses compostos no efluente final passou a valores dentro do esperado: nitrogênio amoniacal em valores muito baixos, e formação de nitrato em concentrações compatíveis com uma nitrificação completa. A alcalinidade, por sua vez, diminuiu a patamares compatíveis com a nitrificação completa. Nesse sentido, presumiu-se que ocorreu nitrificação fora do reator aeróbio, embora não fizesse qualquer sentido prático.

Na configuração inicial do modelo, os resultados ficaram dentro do esperado pelo “senso comum”: o nitrato era formado dentro do reator aeróbio, e a concentração

dentro deste se elevava à medida que $\text{NO}_3\text{-N}$ retornava pela recirculação de lodo. Para verificar este retorno de nitrato pelo lodo, o DMAE realizou ensaios simples junto ao canal de recirculação, encontrando concentrações “zero” de $\text{NO}_3\text{-N}$. Para o caso de ocorrer desnitrificação dentro do decantador secundário, foi inserido no modelo um reator anóxico de pequeno volume na recirculação de lodo, o que funcionou para o modelo: as concentrações de nitrato que retornava ao reator ficaram próximas de zero.

Quanto à possibilidade de nitrificação após o reator, foi inserido no modelo um canal de 100 m^3 para representar uma espécie de “reator” adicional, em fluxo de pistão e sem aeração, utilizando o OD residual que sai do reator aeróbio. O efeito deste canal foi nulo para o modelo, talvez pelo tempo de detenção hidráulica muito reduzido frente às demais unidades do sistema.

Diversas hipóteses foram levantadas para explicar o motivo de se observar elevada concentração de $\text{NH}_3\text{-N}$ e baixa de $\text{NO}_3\text{-N}$ na saída do reator e, após, uma inversão disso no efluente final. Não apenas as concentrações de nitrogênio ficaram fora do esperado na saída do reator, como também a alcalinidade. Algumas hipóteses parecem fazer sentido e para explicar o fenômeno, porém não trazem benefício prático ao trabalho e, ademais, não puderam ser comprovadas.

Em termos práticos, as concentrações de $\text{NH}_3\text{-N}$, $\text{NO}_3\text{-N}$ e alcalinidade no efluente final ficaram compatíveis com os valores obtidos através dos ensaios de laboratório. A proposta de inserir o reator anóxico para consumir o nitrato na linha de recirculação de lodo funcionou, gerando valores para formas nitrogenadas no efluente final plenamente em acordo com a realidade medida.

Por tudo exposto, decidiu-se ignorar as concentrações de $\text{NH}_3\text{-N}$ e $\text{NO}_3\text{-N}$ na saída do reator aeróbio para fins de comparação com os resultados do modelo. Em tempo: testou-se diversas configurações no modelo que pudessem simular o fenômeno observado, porém sem sucesso. Quanto às concentrações no efluente final, o fator que mais influenciou o acerto foi a aeração colocada no reator aeróbio, sobre a qual se tinha poucas informações, conforme abordado a seguir.

Aeração

Uma das maiores lacunas do presente trabalho compete à aeração do reator aeróbio. Não havia medições de OD no reator, somente a detecção de presença de

OD no efluente final, conforme dados secundários fornecidos pelo DMAE. O catálogo dos sopradores foi fornecido pelo DMAE, a partir do qual foi estimado o fator K_{La} informado no modelo. Para as amostras de inverno, o valor calculado foi compatível, porém para as amostras de primavera e verão, pareceu exagerado por causa da nitrificação.

Valores elevados do fator K_{La} não importam em grande alteração quanto à remoção da DQO carbonácea, porém influencia mais a nitrificação. Com valores de 10 h^{-1} , para os climas mais quentes, a nitrificação ocorreu a uma taxa elevadíssima, com formação de nitrato maior no efluente do que o realmente observado e consumo total de $\text{NH}_3\text{-N}$. Para o efeito prático do modelo, ajustou-se o valor para uma faixa de compatibilidade da formação de nitrato no efluente final, o que pareceu funcionar para os demais parâmetros. Em trabalhos futuros, uma investigação melhor do sistema de aeração, com medição do OD dentro do reator possibilitando o desenho de um perfil diário, pode trazer melhores resultados ao modelo.

4.9 Aceitação dos resultados

A simulação de uma grande quantidade de processos bioquímicos e intrinsecamente interligados entre si, através de um modelo matemático, é uma tarefa naturalmente desafiadora. Como exemplo disso, tem-se uma razoável quantidade de modelos desenvolvidos por diversas iniciativas em nível mundial durante quatro décadas e incontáveis estudos que visaram aplicá-los na prática em estações de tratamento em escala real. Não obstante os desafios inerentes ao propósito original, soma-se a eles a dificuldade em obtenção de dados em quantidade e frequência suficientes para uma calibração, com o suporte de laboratório capaz de fornecer os subsídios necessários quanto à caracterização do esgoto para o modelo.

Em escala global, os modelos incorporaram o dia a dia em algumas grandes estações de tratamento de esgotos, adequadamente aparamentadas em termos de sensores e suporte técnico. No mesmo contexto, a indústria também é um alvo importante de investigação, onde há aprimoramentos de toda a ordem. Os benefícios de ser ter um modelo calibrado a uma instalação em operação são evidentes, vide os esforços realizados em termos de pesquisas visando aprimorá-los para a simulação de novas tecnologias, dentre as quais se destaca a recuperação de recursos em estações de tratamento de efluentes.

O tratamento de esgotos em países com o Brasil não deveria ficar à margem dessas tendências, especialmente onde os investimentos são mais custosos. Os modelos oferecem uma alternativa à otimização de estruturas existentes. O padrão de lançamento de efluentes nos nossos corpos receptores tem limites amplos (150 mg/L para DQO, sem limite para nitrato, na ETE estudada), e ainda assim é comum se observar sobrecargas em estruturas existentes. A eventual exigência do cumprimento de metas mais rígidas poderia inviabilizar operações as quais não possuem quaisquer ferramentas para a gestão e otimização de instalações existentes.

Por tudo exposto, considerando que as limitações foram contornadas pela metodologia empregada no trabalho, entende-se que o modelo proposto atendeu à finalidade específica do trabalho. Embora alguns resultados sejam inexatos, a maioria dos parâmetros ficou dentro da faixa de aceitação do modelo recomendada, que é estreita dentro do dado contexto.

Observando os resultados para a simulação dinâmica, a qual foi considerada como validação do modelo, com exceção das formas nitrogenadas junto à saída do reator aeróbio (conforme abordado anteriormente), os parâmetros ficaram em conformidade com os dados reais medidos. Quanto aos parâmetros que fugiram da faixa de aceitação, observa-se que a DQO e SST do efluente para o período de inverno apresentaram diferenças de 7,59 mg/L e 8,78 mg/L, respectivamente, quando a faixa de aceitação é 5 mg/L, portanto aceitável sob o ponto de vista prático. Para o efluente da primavera, a concentração de SST apresentou diferença de 7,46 mg/L, que também é considerada compatível para uma faixa de aceitação de 5 mg/L. Para o efluente do verão, a DQO encontrada ficou diferente em 6,57 mg/L, também próxima da faixa de aceitação. Nesse sentido, é necessário lembrar que os limites de emissão para DQO e SST, para esta estação de tratamento, são de 150 e 50 mg/L respectivamente.

Quanto aos cenários propostos pelo DMAE para simulação, o modelo apresentou resultados que informam na prática os efeitos no efluente final, na saída do reator e no canal de recirculação de lodo. Foram propostos cenários simples, com retirada de tanques, aumento de vazão e de concentração, mas também poderiam ter sido simulados os efeitos da retirada de uma linha de aeração, ou do ingresso de uma carga industrial específica, dentre diversas possibilidades.

Não há garantia que as características do efluente simulado sejam de fato observadas na prática, mas a oportunidade para estudos futuros é válida e possível.

Ensaio adicionais podem melhorar o modelo continuamente de modo a tornar a ferramenta aplicável na prática, de modo a auxiliar na gestão da operação da estação de tratamento de esgotos.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A aplicação de modelos é inicialmente trabalhosa e, para algumas instalações, inviável pela falta de suporte técnico de laboratório e pessoal. Por outro lado, o presente trabalho buscou aplicar um modelo simples (limitado a matéria orgânica carbonácea e nitrogenada) a uma ETE em escala real, contando com ensaios comuns e em quantidade adequada a um orçamento reduzido. Os resultados atenderam ao objetivo inicial, ficando adequados dentro de uma faixa de erro aceitável e compatível com o contexto da estação. Estes resultados podem ser melhorados continuamente a partir de novos ensaios realizados durante a operação, planejados para o curto prazo, valendo-se da metodologia apresentada, a qual também pode ser melhorada em face de novas informações que vierem a ser coletadas (por exemplo, quanto ao perfil de aeração no reator aeróbio).

Quanto aos objetivos do trabalho, estes foram atendidos no ensejo das simulações dinâmicas que foram aplicadas à ETE em escala real, com o suporte de ensaios comuns de monitoramento de efluentes aplicados às coletas realizadas nas três campanhas. A metodologia adaptada para a caracterização da DQO mostrou-se suficientemente adequada ao propósito do trabalho, originando um modelo calibrado que foi capaz de simular a operação da ETE com boa assertividade. Nesse sentido, a limitação de dados não impediu que se utilizasse o modelo ASM3 o qual, devidamente ajustado, foi capaz de testar cenários alternativos em termos de sobrecarga às instalações existentes, sendo observados os efeitos práticos no efluente final quanto ao atendimento aos padrões de lançamento vigentes.

REFERÊNCIAS

- ABNT. **NBR 12209: Projeto de estações de tratamento de esgoto sanitário**. Rio de Janeiro: ABNT, 2011.
- ABYAR, H. *et al.* Modeling the kinetics and cost performance index of high rate up-flow anaerobic, anoxic, oxic bioreactor for meat wastewater treatment. **Water and Environment Journal**, [s. l.], v. 32, n. 4, p. 637–649, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1111/wej.12362>
- ANDERSON, J. S. *et al.* Control of an alternating aerobic-anoxic activated sludge system – Part 1: Development of a linearization-based modeling approach. **Control Engineering Practice**, [s. l.], v. 8, n. 3, p. 271–278, 2000. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0967-0661\(99\)00174-4](https://doi.org/10.1016/S0967-0661(99)00174-4)
- ANDRAKA, D. *et al.* Calibration of activated sludge model with scarce data sets. **Journal of Ecological Engineering**, [s. l.], v. 19, n. 6, p. 182–190, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.12911/22998993/93793>
- ANDREOLI, C. V.; VON SPERLING, M.; FERNANDES, F. **Sludge Treatment and Disposal**. London, UK: IWA Publishing, 2007. ISSN 07351917.v. 1 Disponível em: <https://doi.org/10.2166/9781780402130>
- ARAROMI, D. O. *et al.* Modeling of an activated sludge process for effluent prediction—a comparative study using ANFIS and GLM regression. **Environmental Monitoring and Assessment**, [s. l.], v. 190, n. 9, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10661-018-6878-x>
- AYESA ITURRATE, E.; LARREA URCOLA, M. A. Optimización del diseño, operación y control de las EDAR utilizando modelos matemáticos y herramientas de simulación. **Tecnología del Agua**, [s. l.], v. 25, n. 266, p. 74–79, 2005.
- BAGHERI, M. *et al.* Modeling and optimization of activated sludge bulking for a real wastewater treatment plant using hybrid artificial neural networks-genetic algorithm approach. **Process Safety and Environmental Protection**, [s. l.], v. 95, p. 12–25, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.psep.2015.02.008>
- BAKIRI, Z.; CHEBLI, D.; NACEF, S. Dynamic modelling of the secondary settler of a wastewater treatment via activated sludge to low-load. **Energy Procedia**, [s. l.], v. 18, p. 1–9, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2012.05.012>
- BAQUERO-RODRÍGUEZ, G. A.; LARA-BORRERO, J. A.; MARTELO, J. A simplified method for estimating chemical oxygen demand (COD) fractions. **Water Practice and Technology**, [s. l.], v. 11, n. 4, p. 838–848, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wpt.2016.089>
- BARKER, P. S.; DOLD, P. L. General model for biological nutrient removal activated-sludge systems: model presentation. **Water Environment Research**, [s. l.], v. 69, n. 5, p. 969–984, 1997. Disponível em: <https://doi.org/10.2175/106143097x125669>

BATSTONE, D. J. *et al.* Towards a generalized physicochemical framework. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 66, n. 6, p. 1147–1161, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2012.300>

BOX, A. G. E. P.; WILSON, K. B. On the Experimental Attainment of Optimum Conditions. **Journal of the Royal Statistical Society**, [s. l.], v. 13, n. 1, p. 1–45, 1951.

BRANNOCK, M. W. D. **Computational fluid dynamics tools for the design of mixed anoxic wastewater treatment vessels**. 134 f. 2003. – University of Queensland, [s. l.], 2003.

BRANNOCK, M.; WANG, Y.; LESLIE, G. Mixing characterisation of full-scale membrane bioreactors: CFD modelling with experimental validation. **Water Research**, [s. l.], v. 44, n. 10, p. 3181–3191, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2010.02.029>

BRAULT, J. M. *et al.* Prediction of activated sludge filamentous bulking using ATP data and neural networks. **Canadian Journal of Chemical Engineering**, [s. l.], v. 89, n. 4, p. 901–913, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/cjce.20442>

BRDJANOVIC, D. *et al.* **Applications of Activated Sludge Models**. [S. l.: s. n.], 2015. ISSN 1476-1777. v. 14 Disponível em: <https://doi.org/10.2166/9781780404660>

BÜRGER, R.; KARLSEN, K. H.; TOWERS, J. D. A model of continuous sedimentation of flocculated suspensions in clarifier-thickener units. **SIAM Journal on Applied Mathematics**, [s. l.], v. 65, n. 3, p. 882–940, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1137/04060620X>

CARMINATI, H. B. *et al.* Modeling and dynamic simulation of a two-stage pre-denitrification MBBR system under increasing organic loading rates. **Bioprocess and Biosystems Engineering**, [s. l.], v. 41, n. 11, p. 1573–1587, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s00449-018-1984-2>

CLIMENT, J. *et al.* Biological reactor retrofitting using CFD-ASM modelling. **Chemical Engineering Journal**, [s. l.], v. 348, n. June 2017, p. 1–14, 2018a. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.04.058>

CLIMENT, J. *et al.* Biological reactor retrofitting using CFD-ASM modelling. **Chemical Engineering Journal**, [s. l.], v. 348, n. April, p. 1–14, 2018b. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.04.058>

COKGOR, E. U. *et al.* Respirometric evaluation of a mixture of organic chemicals with different biodegradation kinetics. **Journal of Hazardous Materials**, [s. l.], v. 161, n. 1, p. 35–41, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2008.03.051>

ÇOKGÖR, E. U. *et al.* Respirometric analysis of activated sludge behaviour – I. Assessment of the readily biodegradable substrate. **Water Research**, [s. l.], v. 32, n. 2, p. 461–475, 1998. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(97\)00209-1](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(97)00209-1)

COROMINAS, L. *et al.* New framework for standardized notation in wastewater treatment modelling. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 61, n. 4, p. 841–857, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2010.912>

CÔTÉ, M. *et al.* Dynamic modelling of the activated sludge process: Improving prediction using neural networks. **Water Research**, [s. l.], v. 29, n. 4, p. 995–1004, 1995. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0043-1354\(95\)93250-W](https://doi.org/10.1016/0043-1354(95)93250-W)

DAI, H. *et al.* Efficient model calibration method based on phase experiments for anaerobic–anoxic/nitrifying (A2N) two-sludge process. **Environmental Science and Pollution Research**, [s. l.], v. 24, n. 23, p. 19211–19222, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11356-017-9437-z>

DAIGGER, G. T.; REDMOND, E.; DOWNING, L. Enhanced settling in activated sludge: Design and operation considerations. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 78, n. 2, p. 247–258, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2018.287>

DE CLERCQ, J. *et al.* Extending and calibrating a mechanistic hindered and compression settling model for activated sludge using in-depth batch experiments. **Water Research**, [s. l.], v. 42, n. 3, p. 781–791, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2007.08.040>

DEPARTAMENTO MUNICIPAL DE ÁGUA E ESGOTO. **Plano Municipal de Saneamento Básico – Esgotamento sanitário**. Porto Alegre: [s. n.], 2013.

DEUTSCHE VEREINIGUNG FÜR WASSERWIRTSCHAFT ABWASSER UND ABFALL. **ATV-A. 131—The dimensioning of single-stage sewage treatment plants with activated sludge**. Heneff: [s. n.], 2000.

DHI. **The Expert in Water Environments**. Disponível em: https://www.dhigroup.com/-/media/shared_content/dhi/flyers_and_pdf/dhi_company_profile_flyer.pdf

DHI GROUP. **Get the freedom to do more with our new subscription packages**. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <https://www.mikepoweredbydhi.com/pricing#cities>. Acesso em: 7 jan. 2020.

DHI GROUP. **WEST -Modelling and simulation of wastewater treatment plants** 2019. Disponível em: https://www.mikepoweredbydhi.com/-/media/shared_content/mike_by_dhi/flyers_and_pdf/software_flyers/cities/west-mikepoweredbydhi-productflyer-uk.pdf

DO-QUANG, Z. *et al.* Computational fluid dynamics applied to water and wastewater treatment facility modeling. **Environmental Engineering and Policy**, [s. l.], v. 1, n. 3, p. 137–147, 1998. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s100220050015>

DREWNOWSKI, J. *et al.* Comparative study of balancing SRT by using modified ASM2d in control and operation strategy at full-scale WWTP. **Water (Switzerland)**, [s. l.], v. 11, n. 3, 2019a. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/w11030485>

DREWNOWSKI, J. *et al.* The evaluation of COD fractionation and modeling as a key factor for appropriate optimization and monitoring of modern cost-effective activated

sludge systems. **Journal of Environmental Science and Health – Part A Toxic/Hazardous Substances and Environmental Engineering**, [s. l.], v. 54, n. 8, p. 736–744, 2019b. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/10934529.2019.1592531>

DYNAMITA. **Why choose Sumo?** Nyons, França: 2019. Catálogo. Disponível em: <http://www.dynamita.com/downloads/>. Acesso em: 6 jan. 2020.

EAWAG. **ASIM Activated Sludge Simulation Program**. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <https://www.eawag.ch/en/department/eng/software/>. Acesso em: 6 jan. 2020.

EKAMA, G. A.; DOLD, P. L.; MARAIS V., G. R. Procedures for determining influent COD fractions and the maximum specific growth rate of heterotrophs in activated sludge systems. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 18, n. 6, p. 91–114, 1986. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.1986.0062>

ENVIROSIM ASSOCIATES LTD. **A Brief History of Activated Sludge Process Models and Simulators**. [S. l.: s. n.], 2017.

ENVROSIM ASSOCIATES. **What's New in BioWin 6.0**. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <https://envirosim.com/products>. Acesso em: 6 jan. 2020.

GERNAEY, K. V. *et al.* Activated sludge wastewater treatment plant modelling and simulation: State of the art. **Environmental Modelling and Software**, [s. l.], v. 19, n. 9, p. 763–783, 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2003.03.005>

GLOVER, G. C. *et al.* Modelling of wastewater treatment plants – How far shall we go with sophisticated modelling tools? **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 53, n. 3, p. 79–89, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2006.078>

GORI, R. *et al.* Effects of soluble and particulate substrate on the carbon and energy footprint of wastewater treatment processes. **Water Research**, [s. l.], v. 45, n. 18, p. 5858–5872, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2011.08.036>

GÜÇLÜ, D.; DURSUN, S. Amelioration of carbon removal prediction for an activated sludge process using an artificial neural network (ANN). **Clean – Soil, Air, Water**, [s. l.], v. 36, n. 9, p. 781–787, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/clen.200700155>

GUJER, W. *et al.* Activated Sludge Model No. 3. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 39, n. 1, p. 183–193, 1999. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0273-1223\(98\)00785-9](https://doi.org/10.1016/S0273-1223(98)00785-9)

GUJER, W. Activated sludge modelling: Past, present and future. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 53, n. 3, p. 111–119, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2006.082>

GUJER, W. **Systems analysis for water technology**. Berlin-Heidelberg: Springer, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-540-77287-1>

GUJER, W. *et al.* The Activated Sludge Model No. 2: Biological phosphorus removal. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 31, n. 2, p. 1–11, 1995. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0273-1223\(95\)00175-M](https://doi.org/10.1016/0273-1223(95)00175-M)

GUJER, W.; LARSEN, T. A. The implementation of biokinetics and conservation principles in ASIM. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 31, n. 2, p. 257–266, 1995. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0273-1223\(95\)00198-V](https://doi.org/10.1016/0273-1223(95)00198-V)

HAUDUC, H. *et al.* Activated sludge modelling: Development and potential use of a practical applications database. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 63, n. 10, p. 2164–2182, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2011.368>

HAUDUC, H. *et al.* Activated sludge modelling in practice: An international survey. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 60, n. 8, p. 1943–1951, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2009.223>

HAUDUC, H. *et al.* Critical review of activated sludge modeling: State of process knowledge, modeling concepts, and limitations. **Biotechnology and Bioengineering**, [s. l.], v. 110, n. 1, p. 24–46, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/bit.24624>

HAUHUC, H. **Modèles Biocinétiques De Boues Activées De Type Asm : Analyse Théorique Et Fonctionnelle**. 222 p. 2010. – Université Laval (Québec), [s. l.], 2010.

HENZE, M. *et al.* A general model for single-sludge wastewater treatment systems. **Water Research**, [s. l.], v. 21, n. 5, p. 505–515, 1987. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0043-1354\(87\)90058-3](https://doi.org/10.1016/0043-1354(87)90058-3)

HENZE, M. *et al.* Activated sludge model No.2D, ASM2D. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 39, n. 1, p. 165–182, 1999. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0273-1223\(98\)00829-4](https://doi.org/10.1016/S0273-1223(98)00829-4). Acesso em: 3 jan. 2020.

HENZE, M. *et al.* **Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3. IWA Scientific and Technical Report n. 9**. London, UK: WA Publishing, 2000.

HENZE, M. *et al.* **Biological wastewater treatment: principles, modelling and design**. London, UK: IWA Publishing, 2008. ISSN 00092460.

HENZE, M.; COMEAU, Y. Wastewater Characterization. *In*: HENZE, M. *et al.* (org.). **Biological Wastewater Treatment: Principles Modelling and Design**. London, UK: IWA Publishing, 2008. p. 33–52. Disponível em: <https://doi.org/10.1093/jts/os-XXX.October.54>

HOLMES, D. E.; DANG, Y.; SMITH, J. A. **Nitrogen cycling during wastewater treatment**. 1. ed. [S. l.]: Elsevier Inc., 2019. ISSN 00652164.v. 106 Disponível em: <https://doi.org/10.1016/bs.aams.2018.10.003>

HU, Z. R.; WENTZEL, M. C.; EKAMA, G. A. A general kinetic model for biological nutrient removal activated sludge systems: Model development. **Biotechnology and Bioengineering**, [s. l.], v. 98, n. 6, p. 1242–1258, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/bit.21508>

HU, Z. R.; WENTZEL, M. C.; EKAMA, G. A. Modelling biological nutrient removal activated sludge systems – A review. **Water Research**, [s. l.], v. 37, n. 14, p. 3430–3444, 2003. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(03\)00168-4](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(03)00168-4)

HULSBEEK, J. J. W. *et al.* A practical protocol for dynamic modelling of activated sludge systems. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 45, n. 6, p. 127–136, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2002.0100>

HYDROMANTIS. **GPS-X Models**. [S. l.], 2020. Disponível em: <https://www.hydomantis.com/GPSX-models.html>. Acesso em: 6 jan. 2020.

IFAK. **SIMBA# WATER**. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <https://www.ifak.eu/en/products/simba-water>. Acesso em: 7 jan. 2020.

INSEL, G.; ORHON, D.; VANROLLEGHEM, P. A. Identification and modelling of aerobic hydrolysis – Application of optimal experimental design. **Journal of Chemical Technology and Biotechnology**, [s. l.], v. 78, n. 4, p. 437–445, 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/jctb.807>

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA. **Pesquisa Nacional de Saneamento Básico 2008**. [S. l.], 2010. Disponível em: <https://sidra.ibge.gov.br/pesquisa/pnsb/tabelas>. Acesso em: 12 dez. 2019.

INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION. **Global Trends & Challenges in Water Science, Research and Management** (H. Li, Org.) **Global Trends & Challenges in Water Science**. London, UK: International Water Association (IWA), 2016.

IWA. **Plano Estratégico 2019-2024**. London, UK: [s. n.], 2019.

IWA CONNECT. **Task Group on Design and Operations Uncertainty**. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <https://iwa-connect.org/group/task-group-on-design-and-operations-uncertainty-dout/about>. Acesso em: 10 jan. 2020.

KAELIN, D. *et al.* Extension of ASM3 for two-step nitrification and denitrification and its calibration and validation with batch tests and pilot scale data. **Water Research**, [s. l.], v. 43, n. 6, p. 1680–1692, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2008.12.039>

KAPPELER, J.; GUJER, W. Estimation of kinetic parameters of heterotrophic biomass under aerobic conditions and characterization of wastewater for activated sludge modelling. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 25, n. 6, p. 125–139, 1992. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.2166/wst.1992.0118>

KARTAL, B.; KUENEN, J. G.; VAN LOOSDRECHT, M. C. M. Sewage treatment with anammox. **Science**, [s. l.], v. 328, n. 5979, p. 702–703, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1126/science.1185941>

KAZADI MBAMBA, C. *et al.* A generalised chemical precipitation modelling approach in wastewater treatment applied to calcite. **Water Research**, [s. l.], v. 68, p. 342–353, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2014.10.011>

KESKITALO, J.; LEIVISKÄ, K. Artificial Neural Network Ensembles in Hybrid Modelling of Activated Sludge Plant. **Advances in Intelligent Systems and Computing**, [s. l.], v. 322, p. 683–, 2015a. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-11313-5>

- KESKITALO, J.; LEIVISKÄ, K. Artificial Neural Network Ensembles in Hybrid Modelling of Activated Sludge Plant. **Advances in Intelligent Systems and Computing**, [s. l.], v. 322, p. 683–694, 2015b. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-11313-5>
- KIM, Y. *et al.* Analysis of causal relationships for nutrient removal of activated sludge process based on structural equation modeling approaches. **Applied Sciences (Switzerland)**, [s. l.], v. 9, n. 7, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/app9071398>
- KOCH, G. *et al.* Calibration and validation of activated sludge model no. 3 for Swiss municipal wastewater. **Water Research**, [s. l.], v. 34, n. 14, p. 3580–3590, 2000.
- KOVÁROVÁ-KOVAR, K.; EGLI, T. Growth kinetics of suspended microbial cells: from single-substrate-controlled growth to mixed-substrate kinetics. **Microbiology and molecular biology reviews : MMBR**, [s. l.], v. 62, n. 3, p. 646–666, 1998. Disponível em: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/9729604><http://www.pubmedcentral.nih.gov/articlerender.fcgi?artid=PMC98929>
- KREBS, P. Success and shortcomings of clarifier modelling. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 31, n. 2, p. 181–191, 1995. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0273-1223\(95\)00191-O](https://doi.org/10.1016/0273-1223(95)00191-O)
- LABELLE, M.-A. *et al.* Activated Sludge Production Parameters and Nutrient Content of Organic Sludge Components. **Water Environment Research**, [s. l.], v. 89, n. 1, p. 51–61, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.2175/106143016x14733681696202>
- LANGERGRABER, G. *et al.* A guideline for simulation studies of wastewater treatment plants. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 50, n. 7, p. 131–138, 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2004.0436>
- LAVALLÉE, B.; LESSARD, P.; VANROLLEGHEM, P. A. Review of procaryote metabolism in view of modeling microbial adaptation from fast growth to starvation conditions. **Journal of Environmental Engineering and Science**, [s. l.], v. 4, n. 6, p. 517–532, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1139/s04-074>
- LE MOULLEC, Y. *et al.* Activated sludge pilot plant: Comparison between experimental and predicted concentration profiles using three different modelling approaches. **Water Research**, [s. l.], v. 45, n. 10, p. 3085–3097, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2011.03.019>
- LEE, D. S. *et al.* Hybrid neural network modeling of a full-scale industrial wastewater treatment process. **Biotechnology and Bioengineering**, [s. l.], v. 78, n. 6, p. 670–682, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/bit.10247>
- LESQUEF, A. *et al.* Optimizing Nitrogen Removal Reactor Configurations By On-Site Calibration of the IAWPRC Activated Sludge Model. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 25, n. 6, p. 105–123, 1992. Disponível em: <https://doi.org/1992.0117>

LEU, S.-Y. *et al.* Real-Time Aeration Efficiency Monitoring in the Activated Sludge Process and Methods to Reduce Energy Consumption and Operating Costs. **Water Environment Research**, [s. l.], v. 81, n. 12, p. 2471–2481, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.2175/106143009x425906>

LIWARSKA-BIZUKOJC, E.; BIERNACKI, R. Identification of the most sensitive parameters in the activated sludge model implemented in BioWin software. **Bioresource Technology**, [s. l.], v. 101, n. 19, p. 7278–7285, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2010.04.065>

LIZARRALDE, I. *et al.* From WWTP to WRRF: A new modelling framework. **6th IWA/WEF Water Resource Recovery Modelling Seminar (WRRmod2018)**, [s. l.], p. 149–157, 2018.

MAKINIA, J.; ROSENWINKEL, K. H.; PHAN, L. C. Modification of ASM3 for the determination of biomass adsorption/storage capacity in bulking sludge control. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 53, n. 3, p. 91–99, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2006.079>

MAMASIS, D.; JENKINS, D.; PITT, P. A rapid physical-chemical method for the determination of readily biodegradable soluble COD in municipal wastewater. **Water Research**, [s. l.], v. 27, n. 1, p. 195–197, 1993. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0043-1354\(93\)90211-Y](https://doi.org/10.1016/0043-1354(93)90211-Y)

MARASIS, G. v. R.; EKAMA, G. A. Activated Sludge Process – 1. Steady State Behaviour. **Water SA**, [s. l.], v. 2, n. 4, p. 164–200, 1976.

MATHEWORKS. **Simulation and Model-Based Design**. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <https://www.mathworks.com/products/simulink.html>. Acesso em: 7 jan. 2020.

MEIJER, S. **Theoretical and practical aspects of modelling activated sludge processes**. 204 f. 2004. – Technical University of Delft, [s. l.], 2004. Disponível em: http://repository.tudelft.nl/assets/uuid:e0d5af2b-7bf6-4cd8-9a22-aac3f8d112fe/as_meijer20040427.pdf

MELCER, H. *et al.* **Methods for Wastewater Characterization in Activated Sludge Modeling**. Alexandria, USA: Water Environment Research Foundation (WERF), 2003. *E-book*.

METCALF & EDDY. **Tratamento de efluentes e recuperação de recursos**. 5. ed. Porto Alegre: AMGH, 2016.

METCALF & EDDY. **Wastewater engineering, treatment and reuse**. 4. ed. New York, USA: McGraw-Hill, 2003. ISSN 9780070418783.

MORAL, H.; AKSOY, A.; GOKCAY, C. F. Modeling of the activated sludge process by using artificial neural networks with automated architecture screening. **Computers and Chemical Engineering**, [s. l.], v. 32, n. 10, p. 2471–2478, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2008.01.008>

MP ASSOCIATES. **EFOR Modeling of wastewater treatment plants**. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <http://www.mpassociates.gr/software/environment/efor.html>. Acesso em: 7 jan. 2020.

MULLER, A. *et al.* Heterotroph anoxic yield in anoxic aerobic activated sludge systems treating municipal wastewater. **Water Research**, [s. l.], v. 37, n. 10, p. 2435–2441, 2003. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(03\)00015-0](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(03)00015-0)

MUOIO, R. *et al.* Optimization of a large industrial wastewater treatment plant using a modeling approach: A case study. **Journal of Environmental Management**, [s. l.], v. 249, n. May, p. 109436, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2019.109436>

MYSZOGRAJ, S.; PŁUCIENNIK-KOROPCZUK, E.; JAKUBASZEK, A. Cod Fractions – Methods of Measurement and Use in Wastewater Treatment Technology. **Civil And Environmental Engineering Reports**, [s. l.], v. 24, n. 1, p. 195–206, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1515/ceer-2017-0014>

NAIDOO, V.; URBAIN, V.; BUCKLEY, C. A. Characterization of wastewater and activated sludge from European municipal wastewater treatment plants using the NUR test. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 38, n. 1 pt 1, p. 303–305, 1998. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0273-1223\(98\)00415-6](https://doi.org/10.1016/S0273-1223(98)00415-6)

NASR, M. S. *et al.* Modelling and simulation of German BIOGEST/EL-AGAMY wastewater treatment plants – Egypt using GPS-X simulator. **Alexandria Engineering Journal**, [s. l.], v. 50, n. 4, p. 351–357, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.aej.2011.05.003>

NI, B. J.; YU, H. Q.; SUN, Y. J. Modeling simultaneous autotrophic and heterotrophic growth in aerobic granules. **Water Research**, [s. l.], v. 42, n. 6–7, p. 1583–1594, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2007.11.010>

NOPENS, I. *et al.* Maximising the benefits of activated sludge modelling. **Water21**, London, UK, p. 31–33, 2014.

OLSSON, G. *et al.* Instrumentation, control and automation in wastewater – From London 1973 to Narbonne 2013. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 69, n. 7, p. 1373–1385, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2014.057>

ONTARIO WATER CONSORTIUM. **Hydromantis Boosts Capabilities of its Dynamic Simulator for Process and Energy Optimization in Wastewater Utilities**. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <https://ontariowater.ca/hydromantis-boosts-capabilities-of-its-dynamic-simulator-for-process-and-energy-optimization-in-wastewater-utilities/>. Acesso em: 7 jan. 2020.

ORHON, D. *et al.* Characterization and COD fractionation of domestic wastewaters. **Environmental Pollution**, [s. l.], v. 95, n. 2, p. 191–204, 1997. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0269-7491\(96\)00111-X](https://doi.org/10.1016/S0269-7491(96)00111-X)

ORHON, D. *et al.* Validity of Monod kinetics at different sludge ages – Peptone biodegradation under aerobic conditions. **Bioresource Technology**, [s. l.], v. 100, n.

23, p. 5678–5686, 2009. Disponível em:
<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2009.06.046>

PANG, J. *et al.* Intelligent control/operational strategies in WWTPs through an integrated Q-learning algorithm with ASM2d-guided reward. **Water (Switzerland)**, [s. l.], v. 11, n. 5, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/w11050927>

PARK, H. W.; YOON, W. B. Computational fluid dynamics (CFD) modelling and application for sterilization of foods: A review. **Processes**, [s. l.], v. 6, n. 6, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/pr6060062>

PASZTOR, I.; THURY, P.; PULAI, J. Chemical oxygen demand fractions of municipal wastewater. **International Journal of Environmental Science Technology**, [s. l.], v. 6, n. 1, p. 51–56, 2009.

PETERSEN, B. *et al.* Evaluation of an ASM1 model calibration procedure on a municipal-industrial wastewater treatment plant. **Journal of Hydroinformatics**, [s. l.], v. 4, n. 1, p. 15–38, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/hydro.2002.0003>

PLÓSZ, B. G. *et al.* One-dimensional modelling of the secondary clarifier-factors affecting simulation in the clarification zone and the assessment of the thickening flow dependence. **Water Research**, [s. l.], v. 41, n. 15, p. 3359–3371, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2007.03.007>

PLÓSZ, B. G. *et al.* Shall we upgrade one-dimensional secondary settler models used in WWTP simulators? – An assessment of model structure uncertainty and its propagation. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 63, n. 8, p. 1726–1738, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2011.412>

PŁUCIENNIK-KOROPCZUK, E.; MYSZOGRAJ, S. New approach in COD fractionation methods. **Water (Switzerland)**, [s. l.], v. 11, n. 7, p. 1–12, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/w11071484>

RAMDANI, A. *et al.* Biodegradation of the endogenous residue of activated sludge. **Water Research**, [s. l.], v. 44, n. 7, p. 2179–2188, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2009.12.037>

RIEGER, L. *et al.* **Guidelines for Using Activated Sludge Models – IWA Task Group on Good Modelling Practice**. London, UK: IWA Publishing, 2013. ISSN 1476-1777. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/9781780401164>

RIEGER, L. *et al.* The EAWAG Bio-P module for activated sludge model No. 3. **Water Research**, [s. l.], v. 35, n. 16, p. 3887–3903, 2001. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(01\)00110-5](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(01)00110-5)

ROELEVELD, P. J.; VAN LOOSDRECHT, M. C. M. Experience with guidelines for wastewater characterisation in The Netherlands. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 45, n. 6, p. 77–87, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2002.0095>

RUIZ, L. M.; PÉREZ, J. I.; GÓMEZ, M. Á. Comparison of five wastewater COD fractionation methods for dynamic simulation of MBR systems. **Journal of**

Environmental Science and Health – Part A Toxic/Hazardous Substances and Environmental Engineering, [s. l.], v. 49, n. 13, p. 1553–1563, 2014. Disponible em: <https://doi.org/10.1080/10934529.2014.938533>

SÁNCHEZ RAMÍREZ, J. E.; MEJÍA FAJARDO, A.; AMOROCHO CRUZ, C. M. Software de ingeniería especializado en el diseño y simulación de plantas de tratamiento de agua residual: revisión. **Ingeniería y Región**, [s. l.], v. 13, n. 1, p. 57, 2015. Disponible em: <https://doi.org/10.25054/22161325.709>

SCHMIDT, M.; LIPSON, H. Distilling Natural Laws. **Science**, [s. l.], v. 324, n. April, p. 81–85, 2009. Disponible em: <https://doi.org/10.1126/science.1165893>

SCHÜTZE, M.; BUTLER, D.; BECK, B. M. **Modelling, Simulation and Control of Urban Wastewater Systems**. London, UK: Springer Science & Business Media, 2011. Disponible em: <https://doi.org/10.1007/978-1-4471-0157-4>

SIN, G. *et al.* An efficient approach to automate the manual trial and error calibration of activated sludge models. **Biotechnology and Bioengineering**, [s. l.], v. 100, n. 3, p. 516–528, 2008. Disponible em: <https://doi.org/10.1002/bit.21769>

SOCHACKI, A. *et al.* Modelling and simulation of a municipal WWTP with limited operational data. **Proceedings of a Polish-Swedish-Ukrainian Seminar**, [s. l.], p. 23–25, 2009.

SOLON, K. *et al.* Effects of ionic strength and ion pairing on (plant-wide) modelling of anaerobic digestion. **Water Research**, [s. l.], v. 70, p. 235–245, 2015. Disponible em: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2014.11.035>

SPÉRANDIO, M. *et al.* Application of COD fractionation by a new combined technique: Comparison of various wastewaters and sources of variability. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 43, n. 1, p. 181–190, 2001. Disponible em: <https://doi.org/10.2166/wst.2001.0044>

SPÉRANDIO, M.; ETIENNE, P. Estimation of wastewater biodegradable COD fractions by combining respirometric experiments in various So/Xo ratios. **Water Research**, [s. l.], v. 34, n. 9, p. 1233–1246, 2000. Disponible em: [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(99\)00241-9](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(99)00241-9)

STRICKER, A.-E. *et al.* Observed and simulated effect of rain events on the behaviour of an activated sludge plant removing nitrogen. **Journal of Environmental Engineering and Science**, [s. l.], v. 2, n. 6, p. 429–440, 2003. Disponible em: <https://doi.org/10.1139/s03-045>

TAKÁCS, I. **Experiments in Activated Sludge Modelling**. 267 f. 2008. – Ghent University, Belgium, [s. l.], 2008.

TAKÁCS, I.; PATRY, G. G.; NOLASCO, D. A dynamic model of the clarification-thickening process. **Water Research**, [s. l.], v. 25, n. 10, p. 1263–1271, 1991. Disponible em: [https://doi.org/10.1016/0043-1354\(91\)90066-Y](https://doi.org/10.1016/0043-1354(91)90066-Y)

TOMIDA, S. *et al.* Construction of COD simulation model for activated sludge process by recursive fuzzy neural network. **Journal of Chemical Engineering of**

Japan, [s. l.], v. 34, n. 3, p. 369–375, 2001. Disponível em: <https://doi.org/10.1252/jcej.34.369>

US ARMY CORPS OF ENGINEERS. **HEC-RAS**. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <https://www.hec.usace.army.mil/software/hec-ras/>. Acesso em: 10 jan. 2020.

VAN HAANDEL, A. C.; EKAMA, G. A.; MARAIS, G. v. R. The activated sludge process-3 single sludge denitrification. **Water Research**, [s. l.], v. 15, n. 10, p. 1135–1152, 1981. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0043-1354\(81\)90089-0](https://doi.org/10.1016/0043-1354(81)90089-0)

VAN LOOSDRECHT, M. C. M. *et al.* Twenty-five years of ASM1: Past, present and future of wastewater treatment modelling. **Journal of Hydroinformatics**, [s. l.], v. 17, n. 5, p. 697–718, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/hydro.2015.006>

VANDERHASSELT, A.; VANROLLEGHEM, P. A. Estimation of sludge sedimentation parameters from single batch settling curves. **Water Research**, [s. l.], v. 34, n. 2, p. 395–406, 2000. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(99\)00158-X](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(99)00158-X)

VANHOOREN, H. *et al.* WEST: Modelling biological wastewater treatment. **Journal of Hydroinformatics**, [s. l.], v. 5, n. 1, p. 27–50, 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/hydro.2003.0003>

VANROLLEGHEM, P. A. *et al.* A Comprehensive Model Calibration Procedure for Activated Sludge Models. **Proceedings of the Water Environment Federation**, [s. l.], v. 2003, n. 9, p. 210–237, 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.2175/193864703784639615>

VOJINOVIC, Z.; ABBOTT, M. B. Twenty-five years of hydroinformatics. **Water (Switzerland)**, [s. l.], v. 9, n. 1, p. 1–11, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/w9010059>

VON SPERLING, M. **Princípios do tratamento biológico de águas residuárias – Lodos ativados**. 4. ed. Belo Horizonte: UFMG, 2016. v. 4

WENTZEL, M. C.; MBEWE, A.; EKAMA, G. A. Batch test for measurement of readily biodegradable COD and active organism concentrations in municipal waste waters. **Water SA**, [s. l.], v. 21, n. 2, p. 117–124, 1995.

WRC. **WRc Stoat installation and user guide**. Swindon, UK: [s. n.], 2012a.

WRC. **WRc STOAT Process Model Descriptions**. Swindon, UK: [s. n.], 2012b.

WRC PLC. **STOAT – Dynamic Modelling of Wastewater Treatment Plants**. 2012. Disponível em: <http://www.wrcplc.co.uk/ps-stoat>

XIAO, Y. *et al.* Nitrogen recovery from wastewater using microbial fuel cells. **Frontiers of Environmental Science and Engineering**, [s. l.], v. 10, n. 1, p. 185–191, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11783-014-0730-5>

XU, X. *et al.* Sulfate-reduction, sulfide-oxidation and elemental sulfur bioreduction process: Modeling and experimental validation. **Bioresource Technology**, [s. l.], v. 147, p. 202–211, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2013.07.113>

YANG, T. *et al.* Fuzzy model-based predictive control of dissolved oxygen in activated sludge processes. **Neurocomputing**, [s. l.], v. 136, p. 88–95, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2014.01.025>

YUAN, Z.; OEHMEN, A.; INGILDSEN, P. Control of nitrate recirculation flow in predenitrification systems. **Water Science and Technology**, [s. l.], v. 45, n. 4–5, p. 29–36, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2002.0544>

ZAGHLOUL, M. S. *et al.* Performance prediction of an aerobic granular SBR using modular multilayer artificial neural networks. **Science of the Total Environment**, [s. l.], v. 645, p. 449–459, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.07.140>

ZHANG, Y. *et al.* Simple model of sludge thickening process in secondary settlers. **Frontiers of Environmental Science and Engineering**, [s. l.], v. 10, n. 2, p. 319–326, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11783-014-0758-6>

APÊNDICE A – VALORES PADRÃO PARA PARÂMETROS DO ASM3

Na Tabela 44 são apresentados os valores referenciais para parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM3 conforme a publicação original do modelo de Gujer *et al.* (1999) e conforme Koch *et al.* (2000), para a temperatura de 20°C. Também são apresentadas as notações dos parâmetros originais e modificadas pelo trabalho de Corominas *et al.* (2010), sintetizados por Hauduc *et al.* (2011).

Tabela 44 – Valores padrão para parâmetros do ASM3

Parâmetros	Notação modificada Corominas <i>et al.</i> (2010)	Unidade	Notação original Gujer <i>et al.</i> (1999)	Valor padrão original Gujer <i>et al.</i> (1999)	Novo valor proposto Koch <i>et al.</i> (2000)
Parâmetros estequiométricos					
Produção de X_{OHO} por $X_{OHO,STOR}$ (aeróbio)	$Y_{STOR_OHO,OX}$	g X_{OHO} / g X_{STOR}	$Y_{H,O2}$	0,85	0,8
Produção de X_{OHO} por $X_{OHO,STOR}$ (anóxico)	$Y_{STOR_OHO,AX}$	g $X_{OHO}/g X_{STOR}$	$Y_{H,NOX}$	0,8	0,7
Produção de $X_{OHO,STOR}$ por S_B (aeróbio)	$Y_{SB_STOR,OX}$	g $X_{STOR}/g S_B$	$Y_{STO,O2}$	0,63	0,8
Produção de $X_{OHO,STOR}$ por S_B (anóxico)	$Y_{SB_STOR,AX}$	g $X_{STOR}/g S_B$	$Y_{STO,NOX}$	0,54	0,65
Coefficientes de conversão					
Concentração de N por X_U	$i_{N,XU}$	g N/g XU	$i_{N,XI}$	0,02	0,04
Concentração de N por X_{CB}	$i_{N,XCB}$	g N/g XCB	$i_{N,XCB}$	0,04	0,03
Parâmetros cinéticos					
Taxa máxima específica de hidrólise	$q_{XCB_SB,hyd}$	g XCB/ g $X_{OHO}.d$	k_H	3	9
Organismos heterotróficos comuns					
Constante para armazenamento de $X_{OHO,STOR}$	q_{SB_STOR}	g XCB/ g $X_{OHO}.d$	k_{STO}	0,1	
Taxa máxima de crescimento de X_{OHO}	$\mu_{OHO,Max}$	d^{-1}	μ_H	2	3
Fator de redução para crescimento anóxico de X_{OHO}	$\eta_{\mu_{OHO,AX}}$	-	η_{NO}	0,6	
Coefficiente de meia saturação para S_B	$K_{SB,OHO}$	g S_B/m^3	K_S	2	10
Coefficiente de meia saturação para $X_{OHO,STOR}/X_{OHO}$	K_{STOR_OHO}	g $X_{STOR}/$ g X_{OHO}	K_{STO}	1	0,1
Taxa de respiração endógena para X_{OHO} (aeróbia)	$m_{OHO,OX}$	d^{-1}	$b_{H,O2}$	0,2	0,3
Taxa de respiração endógena para X_{OHO} (anóxica)	$m_{OHO,AX}$	d^{-1}	$b_{H,NOX}$	0,1	0,15

(Continuação)

Parâmetros	Notação modificada Corominas <i>et al.</i> (2010)	Unidade	Notação original Gujer <i>et al.</i> (1999)	Valor padrão original Gujer <i>et al.</i> (1999)	Novo valor proposto Koch <i>et al.</i> (2000)
Taxa de respiração endógena para X_{STO} (aeróbia)	$m_{STO,OX}$	d^{-1}	$b_{STO,O2}$	0,2	0,3
Taxa de respiração endógena para X_{STO} (anóxica)	$m_{STO,AX}$	d^{-1}	$b_{STO,NOX}$	0,1	0,15
Coeficiente de meia-saturação para S_{O2}	$K_{O2,OHO}$	$g\ S_{O2}/m^3$	K_O	0,2	
Organismos autotróficos nitrificantes					
Taxa máxima de crescimento de X_{ANO}	$\mu_{ANO,Max}$	d^{-1}	μ_A	1	1,3
Taxa de respiração endógena para X_{ANO} (aeróbia)	$m_{ANO,OX}$	d^{-1}	$b_{A,O2}$	0,15	0,2
Taxa de respiração endógena para X_{ANO} (anóxica)	$m_{ANO,AX}$	d^{-1}	$b_{A,NOX}$	0,05	0,1
Coeficiente de meia-saturação para S_{NHX}	$K_{NHX,ANO}$	$g\ S_{NHX}/m^3$	$K_{A,NH4}$	1	1,4

Fonte: Adaptado de Corominas *et al.* (2010), Gujer *et al.* (1999) e Hauduc *et al.* (2011)