

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E
AMBIENTAL

UTILIZAÇÃO DO MODELO ADM1 PARA PREVER A
PRODUÇÃO DE BIOGÁS DERIVADO DA DIGESTÃO
ANAERÓBIA DE LODOS DE ESGOTO

DANDARA JUCÁ KOKAY MARIANO

ORIENTADOR: ARIUSKA KARLA BARBOSA AMORIM

MONOGRAFIA DE PROJETO FINAL EM
MODELAGEM/SANEAMENTO

BRASÍLIA / DF: DEZEMBRO / 2016

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL**

**PROPOSTA DE UTILIZAÇÃO DO MODELO ADM1 PARA
PREVER A PRODUÇÃO DE BIOGÁS DERIVADO DA
DIGESTÃO ANAERÓBIA DE LODOS DE ESGOTO**

DANDARA JUCÁ KOKAY MARIANO

**MONOGRAFIA DE PROJETO FINAL SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
CIVIL E AMBIENTAL DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE BACHAREL EM ENGENHARIA CIVIL.**

APROVADA POR:

**Prof^a Ariuska Karla Barbosa Amorim, Dr. (ENC-UnB)
(ORIENTADORA)**

**Prof^o Dirceu Silveira Reis Júnior, PhD. (ENC-UnB)
(CO-ORIENTADOR)**

**Prof^a Yovanka Pérez Ginoris, Dr. (ENC-UnB)
(EXAMINADORA INTERNO)**

**Prof^a Martha de Almeida Prado Montenegro, Dr. (IFB)
(EXAMINADORA EXTERNO)**

BRASÍLIA-DF, 08 DE DEZEMBRO DE 2016.

FICHA CATALOGRÁFICA

MARIANO, DANDARA JUCÁ KOKAY

Utilização do Modelo ADM1 para a Previsão da Produção e Composição do Biogás Derivado da Digestão Anaeróbia de Lodos de Esgoto [Distrito Federal] 2016.

xii, 52 p., 297 mm (ENC/FT/UnB, Bacharel, Engenharia Ambiental, 2016)

Monografia de Projeto Final - Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Civil e Ambiental.

- | | |
|-------------------|-----------------------|
| 1. ADM1 | 2. Digestão Anaeróbia |
| 3. Lodo de Esgoto | 4. Energia |
| I. ENC/FT/UnB | II. Título (série) |

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

KOKAY, J. M. (2016). *Estudo da Utilização do Modelo ADM1 para Prever a Produção de Biogás Derivado da Digestão Anaeróbia de Lodos de Esgoto*. Monografia de Projeto Final, Publicação, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 46 p.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Dandara Jucá Kokay Mariano

TÍTULO: Estudo da Utilização do Modelo ADM1 para Prever a Produção de Biogás Derivado da Digestão Anaeróbia de Lodos de Esgoto.

GRAU / ANO: Bacharel em Engenharia Ambiental / 2016

É concedida à Universidade de Brasília a permissão para reproduzir cópias desta monografia de Projeto Final e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta monografia de Projeto Final pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

Dandara Jucá Kokay Mariano

Brasília-DF, Brasil

DEDICATÓRIA

Mônika e Eduardo.
Pais, obrigada por tudo,
Sem vocês não seria nada

Luiz Eduardo,
Irmão mais amado.

Felipe,
Amor meu.

AGRADECIMENTOS

Uma nova etapa está sendo concluída e agradecimento é a palavra que expressa meus sentimentos no momento. Primeiramente, fico honrada em poder agradecer as pessoas mais importantes da minha vida, dentre elas, meus pais, meu irmão caçula e meu namorado. Pessoas que, devido ao empenho voltado a conclusão deste curso, não tive a oportunidade de usufruir integralmente de suas companhias. Gostaria de agradecer a paciência e o suporte, que me permitiram concluir esta etapa tão importante.

De forma especial, quero agradecer minha mãe, Mônica, por todo o carinho e atenção. Além do seu exemplo de força e sabedoria, que me orientam e me guiam na luta diária em busca dos meus sonhos e da minha independência.

Agradeço também meu pai, Eduardo, por sempre me auxiliar numa perspectiva social justa e equitativa.

Ao meu irmão, Luiz Eduardo, que demonstra seu carinho e afeto mesmo em momentos onde minha presença não se faz constante.

Felipe, meu amado, sempre prestativo e disposto a ajudar, que ao meu lado desde o início, me deu suporte e carinho para chegar onde estou.

Às minhas colegas de curso e profissão, Ana Carolina, Ana Paula, Clarice, Eliza, Marina, Tamara e Thainy, pelas noites em claro, pelos trabalhos realizados e pelo apoio nos momentos mais difíceis, sempre estando ao meu lado e me apoiando.

Quero agradecer à professora Ariuska pelo carinho e dedicação voltados a este trabalho, além do desafio enfrentado perante a escolha do tema. Não poderia deixar passar em branco a fundamental participação do professor Dirceu como co-orientador, sua proatividade e dedicação fizeram toda a diferença.

Também gostaria de agradecer ao Carlos Eduardo da Silva, que, gentilmente, contribuiu de forma significativa para a realização deste trabalho ao disponibilizar a implementação do modelo no MatLab.

RESUMO

UTILIZAÇÃO DO MODELO ADM1 PARA PREVER A PRODUÇÃO DO BIOGÁS DERIVADO DA DIGESTÃO ANAERÓBIA DE LODOS DE ESGOTO

O lodo de esgoto, resíduo crítico gerado durante o processo de tratamento das águas residuárias, tem como principais componentes matéria orgânica, micro-organismos patogênicos, nutrientes e metais pesados. O tratamento de lodos de esgoto, de forma geral, pode prescindir a capacidade de estabilização da matéria orgânica, transformando-a em substâncias inertes, bem como reduzir o teor de patógenos. A digestão anaeróbia definida como uma das técnicas mais antigas e mais utilizadas, tanto na estabilização do lodo como no tratamento de esgoto, apresenta alta eficiência e custos reduzidos, além da produção de metano, fonte alternativa de energia. Uma das formas de prever a produção de metano é por meio da modelagem matemática. O modelo *Anaerobic Digestion Model 1* - ADM1 (termo em inglês para Modelo de Digestão Anaeróbia), desenvolvido para abranger as diversas utilizações da digestão anaeróbia, pode ser empregado de forma eficiente na simulação da composição e produção do biogás. Vários estudos demonstram o bom funcionamento do modelo e de seus resultados, proporcionando a confiabilidade e segurança das simulações. O principal objetivo do modelo consiste em ampliar o conhecimento, aplicação, operação e otimização do processo de digestão anaeróbia e englobar quase todos os processos metabólicos envolvidos nos diversos fenômenos da mesma. A utilização do modelo ADM1, neste trabalho, visou quantificar o fluxo do biogás gerado por meio da digestão anaeróbia de lodo de esgoto produzido na Estação de Tratamento de Esgoto Brasília Sul (ETEB Sul) e avaliar a sensibilidade do modelo de acordo com as modificações de valores de alguns parâmetros cinéticos. Concluiu-se que o ADM1 apresentou coerência entre os resultados esperados e obtidos. Além disso, inferiu-se que a constante cinética de primeira ordem da hidrólise da proteína é a mais sensível, ou seja, essa etapa metabólica afeta de forma significativa a produção de biogás.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	OBJETIVOS	3
2.1	OBJETIVO GERAL	3
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	3
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
3.1	LODOS DE ESGOTO	4
3.2	DIGESTÃO ANAERÓBIA	5
3.2.1	Hidrólise	6
3.2.2	Acidogênese	7
3.2.3	Acetogênese	8
3.2.4	Metanogênese	8
3.2.5	Temperatura	9
3.2.6	pH, alcalinidade e ácidos voláteis	11
3.2.7	Presença de substâncias inibidoras ou tóxicas	11
3.2.8	Tempos de retenção de sólidos e tempo de detenção hidráulico	12
3.3	CINÉTICA MICROBIANA	13
3.3.1	Modelo cinético de Monod	14
3.4	MODELAGEM MATEMÁTICA DA DIGESTÃO ANAERÓBIA (ADM1)	17
3.4.1	Nomenclatura e descrição dos parâmetros e variáveis do ADM1	18
3.4.2	Processos bioquímicos no ADM1	20
3.4.3	Processos físico-químico no ADM1	24
3.4.4	Implementação do ADM1	26
3.4.4.1	Modelagem da fase líquida	26
3.4.4.2	Modelagem da fase gasosa	27
3.4.4.3	Estimativa do pH	28
3.4.5	Métodos para caracterização do afluente	29
3.4.5.1	Análise físico-química	30
3.4.5.2	Análise elementar	31
3.4.5.3	Teste de biodegradabilidade anaeróbia	31
3.4.6	Simplificações do ADM1	31
4	METODOLOGIA	33
4.1	DADOS DE ENTRADA	33
4.1.1	Panorama Geral	33
4.1.2	Parâmetros e variáveis de entrada do lodo de esgoto	36
4.1.2.1	Dados experimentais	36
4.1.2.2	Caracterização dos dados de entrada: fracionamento da DQO e parâmetros	36

4.2	MODELO	37
4.2.1	Implementação do ADM1 em Matlab/Simulink.....	37
4.2.2	Análise de sensibilidade e estimação de parâmetros	38
5	APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DOS RESULTADOS	39
5.1	MUDANÇAS NAS VAZÕES E CONCENTRAÇÕES DE ENTRADA DO LODO.....	39
5.2	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS PARÂMETROS CINÉTICOS.....	43
6	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	47
	REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA	48

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Parâmetros e variáveis existentes no ADM1.....	19
Tabela 3.2 – Processos intracelulares considerados pelo modelo ADM1	21
Tabela 3.3 – Matriz de Peterson para as expressões da taxa biológica cinética e dos coeficientes cinéticos das substâncias solúveis	22
Tabela 3.4 – Matriz de Peterson para as expressões da taxa biológica cinética e dos coeficientes cinéticos das substâncias particuladas	23
Tabela 3.5 – Variáveis dinâmicas de estado presentes no modelo ADM1.....	30
Tabela 3.6 – Comparação da complexidade entre o ADM1 e o modelo simplificado.....	32
Tabela 4.1 – Tipos de lodos gerados nas ETEs do Distrito Federal.....	34
Tabela 4.2 – Parâmetro e Indicadores de geração de lodo (afluente ao desaguamento) dados médios entre os anos de 2013 e 2014	35
Tabela 4.3 – Tipos de tratamento de lodo nas ETEs do Distrito Federal	36
Tabela 4.4 – Dados de entrada usados nas simulações do modelo ADM1	37
Tabela 5.1 – Valores de concentrações iniciais presentes nos componentes S_{su} , S_{aa} , S_{fa} , S_i , X_c e X_i dos lodos primário, biológico e químico.....	42

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 – Esquematização das etapas do processo de digestão anaeróbia.....	7
Figura 3.2 – Representação esquemática da influência da temperatura sobre as taxas relativas de crescimento de arqueas metanogênicas.....	10
Figura 3.3 – Fluxograma da cinética microbiana.	13
Figura 3.4 - Representação gráfica do modelo cinético de Monod.	16
Figura 3.5 – Conversão dos processos em digestão anaeróbia usados no ADM1.....	25
Figura 3.6 – Esquema de um típico digestor de tanque simples utilizado como base no modelo ADM1	26
Figura 4.1 – Faixas de variação das concentrações dos componentes presentes nos lodos....	38
Figura 5.1 – Fluxo de biogás em função das vazões iniciais de lodo primário e das diferentes concentrações dos componentes dos dados de entrada.....	40
Figura 5.2 – Fluxo de biogás em função das vazões iniciais de lodo biológico e das diferentes concentrações dos componentes dos dados de entrada.....	40
Figura 5.3 – Fluxo de biogás em função das vazões iniciais de lodo químico e das diferentes concentrações dos componentes dos dados de entrada.....	41
Figura 5.4 – Fluxo de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de desintegração do composto particulado, hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo primário.....	43
Figura 5.5 – Fluxo de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de desintegração do composto particulado, hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo biológico.....	44
Figura 5.6 – Fluxo de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de desintegração do composto particulado, hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo químico.....	44
Figura 5.7 – Fluxo de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo primário.....	45
Figura 5.8 – Fluxo de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo biológico.....	45

Figura 5.9 – Fluxo de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo químico.....46

LISTA DE SÍMBOLOS, NOMENCLATURA E ABREVIACÕES

AA – Aminoácido	LCFA – Ácido graxo de longa cadeia
Ac – Acetato	MS – Monossacarídeo
ADM1 - Anaerobic Digestion Model nº1	NH ₃ – Amônia
Bu – Butirato	NO ₃ ⁻ – Nitrato
CAESB – Companhia de Saneamento Ambientado do Distrito Federal	O ₂ – Oxigênio
CO ₂ – Dióxido de Carbono	Pr – Propianato
DA – Digestão anaeróbia	SO ₄ ⁻ - Sulfato
DQO – Demanda química de oxigênio	S _{su} – Concentração de monossacarídeos na forma solúvel
ETE – Estação de Tratamento de Esgoto	S _{aa} – Concentração de aminoácidos na forma solúvel
ETEB Sul – Estação de Tratamento de Esgoto Brasília Sul	S _{fa} – Concentração de ácidos graxos na forma solúvel
Fe ³⁺ - Ferro	S _i – Concentração de Inertes
Hac – Ácido acético	TKN – Nitrogênio total Kjeldahl
H ₂ – Hidrogênio	Va – Valerato
Hbu – Ácido butírico	X _c – Concentração de material particulado na forma solúvel
HPr – Ácido propílico	X _i – Concentração de inertes na forma particulada
Hva – Ácido valérico	
H ₂ S – Ácido sulfídrico	
<i>k_{dis}</i> – Constante cinéticos de 1ª ordem para processos de desintegração dos compostos particulados	
<i>k_{hid,ch}</i> - Constante cinéticos de 1ª ordem para processos de hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos	
<i>k_{hid,pr}</i> - Constante cinéticos de 1ª ordem para processos de hidrólise de proteínas	
<i>k_{hid,li}</i> - Constante cinéticos de 1ª ordem para processos de hidrólise de lipídeos	

1 INTRODUÇÃO

A preocupação ambiental se tornou algo notório na segunda metade do século XX, grandes movimentos em prol da preservação do meio ambiente emergiram diante dos diversos problemas enfrentados por países de diferentes regiões do mundo. Com o aumento da percepção ambiental, temas relacionados aos impactos negativos, à qualidade do meio e a energia geraram enormes estímulos no desenvolvimento de tecnologias mais sustentáveis. Com o objetivo de assegurar a qualidade dos ecossistemas aquáticos e minimizar os passivos ambientais gerados pelas comunidades antropizadas, o tratamento de esgoto deve ser universalizado. Apesar dos grandes benefícios do esgoto tratado, as estações de tratamento, de acordo com as tecnologias empregadas, também causam impactos ambientais diretos e indiretos. Entre os principais impactos, estão o elevado consumo de energia elétrica e a grande produção de resíduos com alto potencial poluidor.

O lodo de esgoto, resíduo mais crítico gerado durante o processo de tratamento das águas residuárias, é composto na sua maioria por matéria orgânica. Além da possível presença de micro-organismos patogênicos, sua composição pode conter teores elevados de nutrientes e metais pesados, que colocam ou apresentam riscos ao ambiente e à saúde pública. Devido às características complexas e peculiares, o lodo necessita primordialmente de um tratamento eficiente, com o intuito de viabilizar sua disposição final adequada. O tratamento de lodos de esgoto, de forma geral, pode prescindir a capacidade de estabilização da matéria orgânica, transformando-a em substâncias inertes, bem como reduzir o teor de patógenos.

A degradação da matéria orgânica presente no lodo de esgoto possui um caráter complexo e de difícil compreensão. Vários métodos e técnicas tem sido desenvolvidos ao longo dos anos, dentre eles, a digestão anaeróbia processada em sistemas designados de biorreatores. Definida como uma das técnicas mais antigas e mais utilizadas, tanto na estabilização do lodo como no tratamento de esgoto, apresenta alta eficiência e custos reduzidos em relação a degradação da matéria orgânica. Por se tratar de um processo biológico, vários fatores internos e externos podem influenciar na qualidade do produto final. Visando a análise de desempenho do biorreator e respectiva degradabilidade do lodo, vários modelos matemáticos foram desenvolvidos para modelar as diversas etapas da digestão anaeróbia.

O aumento do conhecimento sobre a digestão anaeróbia possibilitou um maior entendimento sobre os fatores que influenciam na obtenção do principal produto final da degradação, o biogás. Composto por uma mistura de gases (metano, dióxido de carbono e hidrogênio), o biogás acabou se tornando outro problema ambiental. Tanto o metano como o dióxido de carbono possuem grandes influências sobre as mudanças climáticas sendo os principais elementos do aumento da temperatura média na terra. Com isso, uma das formas de aproveitamento deste passivo ambiental seria sua utilização como uma fonte alternativa de energia.

Entre os enfoques das discussões globais, a preocupação com a energia se torna cada vez mais presente. O incentivo para o desenvolvimento de novas tecnologias tem como objetivo a substituição das matrizes energéticas derivadas dos combustíveis fósseis por fontes mais limpas. Para promover a sustentabilidade das estações de tratamento de esgoto no âmbito energético, a utilização do biogás é uma alternativa atrativa, porém sua viabilidade está diretamente relacionada com a parcela de metano presente no biogás. O metano apresenta grande potencial energético, como consequência é considerado o principal produto final mais almejado na digestão anaeróbia.

A forma mais viável de prever a produção de metano é por meio da modelagem matemática. O modelo ADM1, desenvolvido para abranger as diversas utilizações da digestão anaeróbia, pode ser empregado de forma eficiente na simulação da composição e produção do biogás. Vários estudos demonstram o bom funcionamento do modelo e de seus resultados, proporcionando a confiabilidade e segurança das simulações.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Utilizar o modelo ADM1 para prever, mediante simulações, a produção do biogás derivado da digestão anaeróbia de lodos de esgoto produzidos na Estação de Tratamento de Esgoto Brasília Sul.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Avaliação da sensibilidade de parâmetros cinéticos do modelo em relação às vazões de biogás simuladas.
- Avaliar o comportamento do modelo ADM1 por meio de vazões de biogás simuladas utilizando dados reais e da literatura para diferentes cenários gerados a partir da variação dos valores de dados de entrada do modelo e das vazões iniciais de lodo.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 LODOS DE ESGOTO

Um dos principais segmentos do saneamento básico é o tratamento de esgoto. Com o objetivo de eliminar a matéria orgânica dos efluentes domésticos ou industriais, seu papel vem se mostrando primordial para a preservação dos ecossistemas aquáticos. A matéria orgânica, derivada do esgoto, lançada diretamente nos corpos hídricos pode gerar graves impactos ao meio ambiente e à saúde da comunidade mais próxima, afetando as características físicas, químicas e biológicas das águas. Apesar dos benefícios, o tratamento de esgoto gera um subproduto potencialmente poluidor, o lodo de esgoto. Este resíduo pode apresentá-se na forma sólida, semissólida ou líquida, além de ser rico em matéria orgânica e nutrientes e metais pesados. Entre os resíduos do processo de tratamento de esgoto, o lodo adquire posição de destaque, merecendo especialmente atenção não só pelos grandes volumes gerados e por seu potencial de poluição, mas também pela complexidade de seu tratamento e pelos custos advindos de seu manejo adequado (Jordão e Pessoa, 2005).

A quantidade e as características dos lodos produzidos em estações de tratamento de esgoto são definidas, entre outros fatores, pela qualidade dos esgotos afluentes, pela alternativa de tratamento adotada, assim como pela eficiência operacional do sistema, visto que esta pode resultar em menor produção de lodo. O tratamento de esgoto pode variar de acordo com as tecnologias empregadas e as etapas intermediárias dos processos gerando em cada etapa diferentes tipos de lodo. Além disso, a alternativa de estabilização e o condicionamento do lodo também definem suas características. Entre os diversos tipos de lodo existe o lodo primário, constituído de sólidos sedimentáveis, originado em estações onde o esgoto bruto é recebido nos decantadores primários e o lodo secundário gerado na etapa biológica. A junção desses dois tipos de lodo acrescenta mais uma classificação, os lodos mistos. Já o lodo químico é produzido em estações de tratamento em que o processo físico-químico faz parte de uma das etapas de tratamento da fase líquida (Batista, 2015).

O conhecimento das características dos diferentes tipos de lodos existentes é de suma importância para a definição dos tratamentos mais adequados para cada tipo de lodo. Deve-se levar em consideração para cada tratamento as características desejáveis para o lodo, os

requisitos de qualidade exigidos, visando à alternativa de destinação determinada, e a redução de volume, objetivo almejado em todas as etapas de manejo do lodo. Na maior parte das etapas do seu manuseio, o lodo é constituído de mais de 95% de água, com uma concentração de sólidos, da ordem de 0,25 a 12% do lodo, em peso (Metcalf & Eddy, 2016; Batista, 2015).

Nos sistemas de tratamento de esgoto, o lodo produzido concentra os nutrientes, a matéria orgânica, os metais pesados, os organismos patogênicos e outros elementos que podem oferecer risco à saúde e ao meio ambiente, caso não sejam controlados e monitorados adequadamente (Batista, 2015). Os potenciais riscos ambientais e epidemiológicos decorrente da disposição do lodo proporciona o desenvolvimento de técnicas de tratamento. Para minimizar os possíveis impactos decorrentes do manejo inadequado, a fração orgânica do lodo deve ser transformada em substâncias inertes e a concentração de organismos patogênicos reduzida.

Os tratamentos baseados em processos biológicos têm se firmado com grande veemência no processo de estabilização do lodo. Essa preferência reside no fato de que processos biológicos são amplamente estudados, cuja essência é a reprodução de fenômenos e processos que ocorrem no ambiente, para que, e em condições controladas, seus efeitos sejam maximizados, acelerando a decomposição dos resíduos, com resultados satisfatórios e a um menor custo.

3.2 DIGESTÃO ANAERÓBIA

A digestão anaeróbia tem sido muito utilizada no processo de tratamento de lodos de esgoto devido a sua grande capacidade de estabilização. Definida como um processo biológico de transformação da matéria orgânica em biogás, ela ajuda a minimizar os impactos negativos ambientais e possibilita a reutilização do lodo. Quando gerado em ETE, o lodo é composto por uma grande parcela de água, matéria orgânica, nutrientes, organismos vivos e algumas matérias particuladas não-biodegradáveis (Silva, 2015). Com isso, carboidratos, proteínas e lipídios são transformados em substâncias mais simples, e ao fim, originam o biogás que apresenta em sua composição, além de outros gases, o metano e o dióxido de carbono. Todos os processos da digestão anaeróbia são realizados na ausência de oxigênio molecular.

Altas taxas de carga orgânica e baixa produção de lodo são dois benefícios do processo anaeróbio (Batstone, 2002b). Além disso, esse sistema apresenta uma produção líquida de energia positiva, o que permite a substituição de fontes de combustíveis fósseis, tendo efeito sobre a redução dos gases do efeito estufa. Nesse sentido, o biogás utilizado como uma forma alternativa de energia renovável pode reduzir os custos do tratamento de esgoto e promover a autossuficiência em termos energéticos da ETE.

No processo de digestão anaeróbia, três grupos de micro-organismos distintos operam em sinergia nos processos metabólicos de fermentação e metanogênese, etapa de formação do metano: bactérias fermentativas hidrolíticas ou acidogênicas, bactérias sintróficas acetogênicas e as *Archaeas* metanogênicas. Quatro etapas podem representar as reações químicas e bioquímicas que ocorrem na digestão anaeróbia (Figura 3.1.).

3.2.1 Hidrólise

A primeira fase da digestão anaeróbia é denominada de hidrólise. Este nome é derivado da capacidade hidrolítica das bactérias fermentativas de converter os materiais particulados complexos (polímero), em materiais dissolvidos mais simples (moléculas menores), os quais podem atravessar as paredes celulares das bactérias fermentativas.

As simplificações dos materiais particulados complexos ocorrem devido à excreção de exoenzimas, possibilitando a transformação de proteínas em aminoácidos, carboidratos em açúcares solúveis (mono e dissacarídeos) e os lipídios em ácidos graxos de longas cadeias de carbono e glicerina. Em muitos casos, na prática, a velocidade de hidrólise é considerada o fator limitante no processo de digestão anaeróbia de lodo de ETEs, ou seja, a velocidade de conversão do material orgânico complexo para biogás é limitada pela velocidade de hidrólise (PROSAB, 1999).

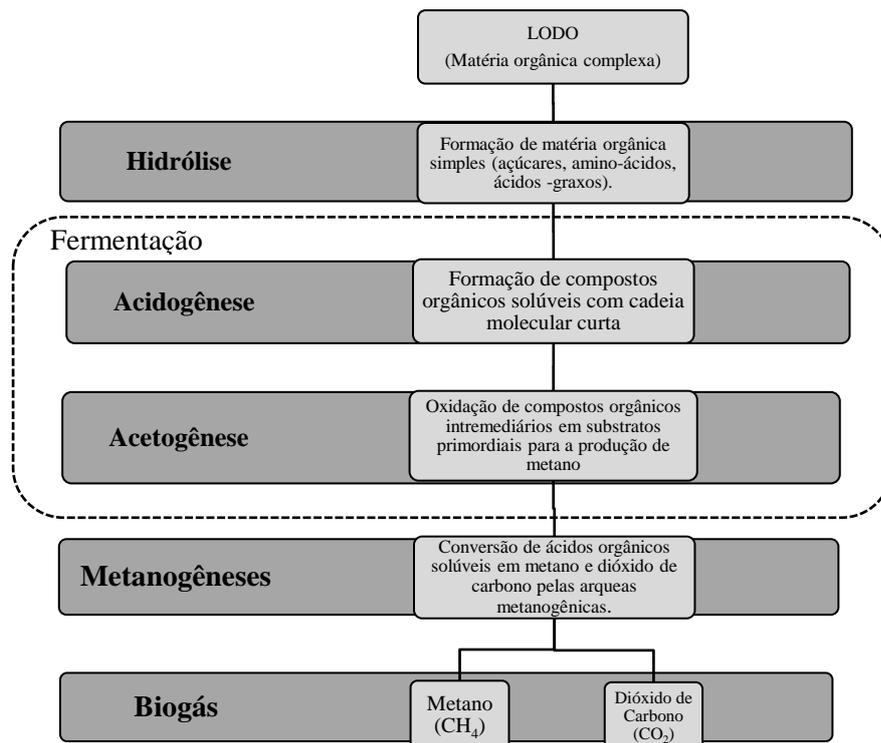


Figura 3-1. Esquematização das etapas do processo de digestão anaeróbia

3.2.2 Acidogênese

Os produtos solúveis, oriundos da fase de hidrólise, são absorvidos e metabolizados nas células bacterianas através do metabolismo fermentativo. A maioria dos micro-organismos nesta fase fermentam açúcares, aminoácidos e ácidos graxos transformando-os em substâncias orgânicas simples, tais como, ácidos graxos voláteis de cadeia curta, ácidos orgânicos (principalmente acético, propiônico e butírico), álcoois (etanol), cetonas (acetona), ácidos lácticos e compostos minerais (CO_2 , H_2 , NH_3 , H_2S), além de novas células bacterianas. Entretanto, os ácidos orgânicos são o principal produto.

A etapa acidogênica só será um fator limitante no processo se o material a ser degradado não for facilmente hidrolisável. A fermentação acidogênica é realizada por um grupo diversificado de bactérias, das quais a maioria é anaeróbia obrigatória. Não obstante, algumas espécies são facultativas e podem metabolizar materiais orgânicos por vias oxidativas. Isso é importante nos sistemas de digestão anaeróbia, porque o oxigênio dissolvido, eventualmente presente, poderia ser tóxico para os micro-organismos

metanogênicos se não fosse removido pelas bactérias acidogênicas facultativas. Os produtos metabólicos são importantes substratos para as bactérias acetogênicas e para as arqueas metanogênicas (Chernicharo, 1997; PROSAB, 1999).

3.2.3 Acetogênese

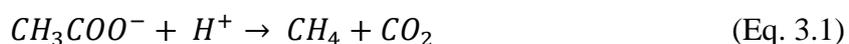
A acetogênese é responsável pela oxidação de compostos orgânicos intermediários, produzidos na acidogênese, em substratos primordiais para a produção de metano (acetato, hidrogênio e dióxido de carbono). As reações acetogênicas ocorrem somente se o hidrogênio e o acetato forem mantidos em baixas concentrações, para tal fim, os micro-organismos consumidores de acetato e hidrogênio devem estar em sinergia no processo.

A grande importância dos organismos acetogênicos, na digestão anaeróbia, decorre do fato de que cerca de 60 a 70% dos elétrons do substrato original são canalizados para a produção de acetato (McCarty, 1964). Aproximadamente 70% da DQO digerida é convertida em ácido acético, enquanto o restante da DQO é concentrada no hidrogênio formado (PROSAB, 1999).

3.2.4 Metanogênese

A etapa final do processo global de conversão anaeróbia de compostos orgânicos em metano e dióxido de carbono é efetuada pelos micro-organismos metanogênicos, atualmente classificados dentro do domínio *Archae*. As arqueas metanogênicas são micro-organismos anaeróbios estritos e geralmente são encontrados em ambientes onde os aceptores de elétrons, como O_2 , NO_3^- , Fe^{3+} e SO_4^{2-} são ausentes ou existem em baixas concentrações. Os substratos utilizados por elas são limitados, compreendendo somente o ácido acético, hidrogênio/dióxido de carbono, ácido fórmico, metanol, metilaminas e monóxido de carbono (Chernicharo, 1997). Existem dois tipos de arqueas metanogênicas:

Metanogênicas acetoclásticas, que usam acetato como fonte de carbono e energia, produzindo gás carbônico e metano. Pode-se representar esta reação catabólica por meio da Equação 3.1.



Metanogênicas hidrogenotróficas, que utilizam o gás carbônico, como fonte de carbono e acceptor final de elétrons, e o hidrogênio, como fonte de energia. A Equação 3.2 representa esta reação catabólica:



Nos sistemas de tratamento anaeróbio, um dos principais objetivos é o favorecimento das condições ideais de operação do biorreator para promover uma maior eficiência do processo de digestão. Essas condições se referem tanto ao próprio projeto do sistema como às condições operacionais nele existentes. A digestão anaeróbia de lodos gerados em ETE pode ser altamente afetada por diversos fatores, como características específicas dos sólidos alimentados, parâmetros operacionais como o tempo de detenção hidráulica e as taxas de recarga orgânica e por alguns fatores ambientais (pH, presença de substâncias inibidores ou tóxicas, temperatura e configurações do reator). Além desses, destacam-se o tempo de retenção de sólidos, a alcalinidade e a disponibilidade de nutrientes e micronutrientes, como aspectos fortemente relevantes no processo. Para monitorar graduais mudanças no tratamento do lodo, os ácidos graxos voláteis, a composição do gás e o pH são comumente usados como indicadores. (PROSAB, 1991; Wang et al., 1997; Metcalf & Eddy, 2016).

3.2.5 Temperatura

Um dos principais estímulos a atividade metabólica advém de fatores ligados à temperatura. Além de influenciar a atividade metabólica da população de micro-organismos, na digestão anaeróbia, a temperatura é relevante para o aumento da taxa de digestão, especialmente, nas taxas de hidrólise e formação de metano (Metcalf & Eddy, 2016). A Figura 3.2 representa a influência da temperatura sobre as taxas relativas de crescimento de arqueas metanogênicas. Esta importância significativa da temperatura é uma consequência dos micro-organismos não possuírem meios de determinar a temperatura ambiente externa (Chernicharo, 1997).

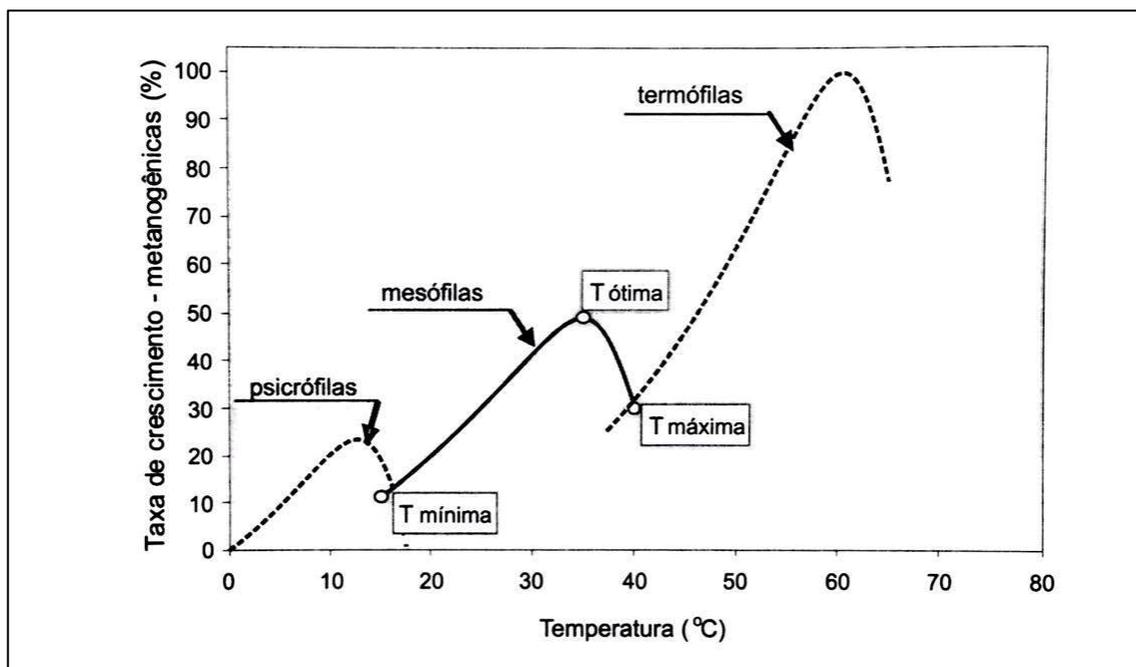


Figura 3.2 – Representação esquemática da influência da temperatura sobre as taxas relativas de crescimento de arqueas metanogênicas. (Fonte: adaptado Batstone, 2002a)

Três faixas de temperatura podem ser associadas ao crescimento microbiano, elas são: psicrófila (entre 4 e 15 °C), mesófila (entre 20 e 40 °C) e a termófila (entre 45 e 70 °C). Os diversos níveis ótimos de temperatura associados ao crescimento microbiano estão presentes na Figura 3.2 e ocorrem na fase de metanogênese. Contudo, a visualização de grandes mudanças na taxa de crescimento derivadas das variações de temperatura é notória. Normalmente, as faixas de temperaturas mais utilizadas em processos de digestão anaeróbia são a mesófila e a termófila. Algumas vantagens operacionais na escolha entre as duas faixas de temperatura podem ser questionáveis se comparadas as desvantagens (Chernicharo, 1997).

A taxa de crescimento específica máxima da população microbiana cresce com o aumento da temperatura. Embora elevadas temperaturas sejam desejadas, talvez seja mais importante a manutenção de uma temperatura uniforme dentro do reator, uma vez que o processo anaeróbio é considerado muito sensível a mudanças bruscas de temperatura (Chernicharo, 1997). Segundo Metcalf & Eddy (2016), geralmente, variações de temperatura superiores a 1°C/d afetam o desempenho do processo de digestão anaeróbia como um todo, especialmente na fase metanogênese.

3.2.6 pH, alcalinidade e ácidos voláteis

Os valores do pH e da alcalinidade, assim como os teores de ácidos voláteis, estão intrinsecamente ligados e possuem igual importância no controle e operação dos processos anaeróbios. O efeito do pH sobre o processo se manifesta através de duas formas principais (Lettinga *et al.*, 1996):

Direta, afetando, por exemplo, a atividade de enzimas, como é o caso da alteração de estruturas proteicas devido às mudanças no pH;

Indireta, afetando a toxicidade de alguns compostos.

O pH ótimo depende dos tipos de micro-organismos envolvidos e do tipo de substratos. Segundo Chernicharo (1997), os micro-organismos produtores de metano tem um crescimento ótimo na faixa de pH entre 6,6 e 7,4, entretanto, as bactérias acidogênicas podem se mostrar bastante ativas em valores muito baixos, inferiores a 4,5. O fato das bactérias produtoras de ácido serem muito menos sensíveis ao pH, um controle maior sobre esse fator deve objetivar principalmente a eliminação do risco de inibição dos micro-organismos metanogênicos. Reatores anaeróbios operados com valores de pH constantemente abaixo de 6,5 ou acima de 8,0, pode ocasionar uma diminuição significativa da taxa de produção de metano.

A ação microbiana pode alterar o pH do meio, por exemplo, compostos, como CO₂ e ácidos graxos voláteis de cadeia curta, tendem a reduzir o pH, enquanto cátions geradores de alcalinidade, como íons de nitrogênio amoniacal provenientes da degradação de proteínas, aumentam a alcalinidade. Um dos parâmetros para monitorar as condições do processo de digestão é a relação entre as concentrações de ácidos voláteis e a alcalinidade (Metcalf & Eddy, 2016).

3.2.7 Presença de substâncias inibidoras ou tóxicas

Um sistema de digestão anaeróbio apresenta satisfatória operação quando se mantém um ambiente que favorece a atividade dos micro-organismos. A toxicidade de uma substância deve ser medida a partir de níveis de concentração máximos suportados pelos micro-organismos, pois eles usualmente possuem uma determinada capacidade de adaptação às concentrações inibidoras, desde que os níveis da substância não ultrapassem o tolerável.

Uma das principais razões para a não utilização dos processos de digestão anaeróbia está relacionada com a toxicidade, uma vez que existe a percepção, muitas vezes equivocada, de que este fator ambiental não é capaz de ser tolerado pelo sistema (Chernicharo, 1997).

Do ponto de vista de engenharia, a inibição afeta a taxa de crescimento e o decaimento celular por substâncias que entram ou se formam no próprio reator, ou que passam para o interior das células interferindo nos processos metabólicos (Silva, 2015). Alguns micro-organismos são mais propícios às inibições, tais como, os metanogênicos e acetogênicos, isto é uma consequência da pequena fração de substrato convertido em células e do elevado tempo de geração destes organismos. Alguns artifícios de projeto podem minimizar os impactos da toxicidade, tais como, tempo de residência das toxinas e das células, além da idade do lodo. Quanto maior o tempo de retenção celular, maior é a capacidade de assimilar cargas tóxicas. O outro padrão desejável é um menor tempo possível de residência das toxinas (Chernicharo, 1997; PROSAB, 1999).

3.2.8 Tempos de retenção de sólidos e tempo de detenção hidráulico

O tempo de retenção de sólidos pode ser definido, segundo Metcalf & Eddy (2016), como o tempo médio de permanência de sólidos no reator, já o tempo de detenção hidráulico como o tempo médio de permanência do líquido. Esses dois conceitos podem ser facilmente confundidos ao analisar a eficiência da digestão anaeróbia, suas interpretações contribuem para o entendimento da manutenção do processo digestivo, ainda mais ao se tratar da toxicidade.

O tempo de retenção de sólidos e de detenção hidráulico estão diretamente relacionados com as etapas mostradas na Figura 3.1. Como consequência, um aumento ou uma redução em seus valores resulta em um aumento ou uma redução da duração de cada reação. Existem tempos mínimos estimados para cada reação, caso eles não sejam atendidos, as bactérias não poderão crescer na taxa necessária para a manutenção do processo digestivo (WEF, 2008). A estimativa de obtenção da taxa de crescimento dos micro-organismos tem como base os conceitos teóricos e práticos da cinética microbiana.

3.3 CINÉTICA MICROBIANA

O entendimento sobre o processo de formação do metano é também derivado da compreensão sobre as reações químicas complexas que ocorrem no interior das células. As reações químicas catabólicas organizadas produzem e utilizam energia, enquanto consomem nutrientes essenciais dos substratos, promovendo a formação de novas células (Figura 3.3). A cinética das reações bioquímicas tem o propósito de estudar as velocidades de crescimento dos micro-organismos, as velocidades de consumo de substratos e de formação de produtos. Uma analogia ao presente estudo considera a velocidade de consumo dos compostos complexos presentes no lodo e a formação da fração de metano do biogás.

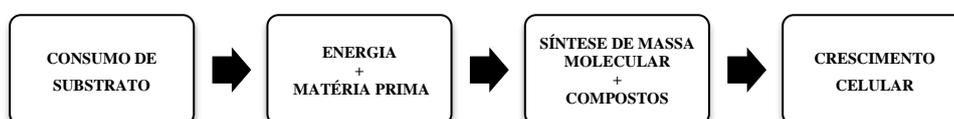


Figura.3.3 – Fluxograma da cinética microbiana.

O tratamento anaeróbico, do ponto de vista cinético, pode ser descrito como um processo de três estágios: hidrólise de compostos orgânicos complexos, produção de ácidos e produção de metano. Por se tratar de um processo complexo e de múltiplos estágios, a cinética da etapa mais lenta governará a cinética geral da conversão. A hidrólise dos compostos orgânicos complexos constitui a etapa limitante do processo de digestão anaeróbia de lodos de ETEs, devido à alta complexidade do substrato (Chernicharo, 1997).

Assim como a digestão anaeróbia, a cinética do crescimento microbiano também pode ser afetado por diversos fatores. Entre eles, a composição do afluente, pH, reologia e temperatura do meio, controle interno, adaptabilidade e heterogeneidade dos principais grupos microbianos (PROSAB,1999). Uma análise fundamental na determinação da viabilidade de uma reação catabólica dentro de um conjunto de condições operacionais de um determinado reator está intrinsecamente ligada aos aspectos termodinâmicos. Entretanto, a termodinâmica não fornece subsídios sobre a velocidade, parâmetro fundamental para o conhecimento da cinética com que um determinado processo se desenvolverá (PROSAB, 1999).

Um dos aspectos que influênciam a cinética das reações microbianas são as interações entre massa celular e o ambiente (transferência de nutrientes, produtos e calor). Não é possível formular um modelo cinético que inclua todos os aspectos e detalhes envolvidos nessas relações, simplificações devem ser assumidas para garantir a aplicabilidade do modelo. Considera-se um crescimento balanceado e uma “célula média”, tais modelos são denominados de não estruturados, não segregados e representam uma visão macroscópica do crescimento microbiano (PROSAB,1999).

3.3.1 Modelo cinético de Monod

Os modelos cinéticos que consideram o crescimento biológico relacionam velocidades de crescimento celular com a concentração de substrato. Nestes modelos a produção de células é caracterizada somente por massa celular ou concentração. Os substratos presentes no lodo são, geralmente, a principal fonte de carbono e/ou energia. Em meios complexos, o substrato que deve ser considerado é aquele que limita a velocidade de crescimento celular. Segundo PROSAB (1999), outra forma de expressar a concentração de substrato é em termos de demanda química de oxigênio (DQO) ou carbono orgânico total (COT) no caso de tais substratos complexos.

O metabolismo bacteriano recebeu grande atenção durante vários anos por parte de pesquisadores. O principal objetivo era derivar as expressões cinéticas para descrever o metabolismo das bactérias. Muitas dessas expressões se baseiam no trabalho original de Monod (1950), que pesquisou a fermentação alcoólica de açúcares em sistemas alimentados continuamente. O modelo cinético de Monod é similar a modelos desenvolvidos *a priori*, tais como, as isotermas de adsorção de Langmuir (1918) e como o modelo cinético de Michaelis-Menten (1913) desenvolvido para reações enzimáticas com um único substrato (PROSAB, 1999).

Em referência aos artigos de Monod (1949, 1950), os resultados podem ser resumidos em três equações básicas:

I. A velocidade do crescimento dos micro-organismos é proporcional à velocidade de utilização do substrato. Esse comportamento pode ser representado pela Equação 3.6 (Monod, 1949).

$$\frac{G}{C} = K = \frac{\text{Quantidade de massa bacteriana formada}}{\text{Quantidade de nutriente limitante consumido}} \quad (\text{Eq. 3.6})$$

Sendo: G o crescimento total, C a concentração inicial de nutrientes e K o fator simples e direto de crescimento.

Se G é expresso como a concentração padrão de células, 1/K representa a quantidade de nutriente limitante usada na formação das células. Assim, quando determinada condição é imprópria, G se torna uma constante com uma fundamental importância, ela mede a eficiência do processo de assimilação (Monod, 1949). Outra forma de representação desta equação e de forma mais detalhada é através da Equação 3.7 (PROSAB, 1999).

$$\left(\frac{dC_X}{dt} \right)_c = Y_{X/S} \left(\frac{dC_S}{dt} \right)_u \quad (\text{Eq. 3.7})$$

Nessa expressão, C_X é a concentração de micro-organismos, C_S é a concentração de substrato, t é o tempo e $Y_{X/S}$ é o fator de crescimento ou a produção bruta de bactérias por unidade de massa de substrato. O índice c representa o crescimento das bactérias e o índice u, a utilização do material orgânico (PROSAB, 1999).

II. A velocidade de crescimento dos micro-organismos é proporcional à concentração dos mesmos e depende da concentração de substrato como mostra a Equação 3.8:

$$r_X = \left(\frac{dC_X}{dt} \right)_c = C_X \cdot \mu = \mu_{\max} \frac{C_S \cdot C_X}{K_S + C_S} \quad (\text{Eq. 3.8})$$

Na Equação 3.8, expressão cinética de Monod, r_X é a velocidade de crescimento celular, μ é a velocidade específica de crescimento celular e μ_{\max} e K_S são constantes cinéticas. μ_{\max} é a velocidade máxima de crescimento celular e K_S é a constante de saturação do substrato e tem o valor da concentração de substrato na qual μ atinge metade do seu valor máximo. A representação gráfica da expressão cinética de Monod é apresentada na Figura 3.4.

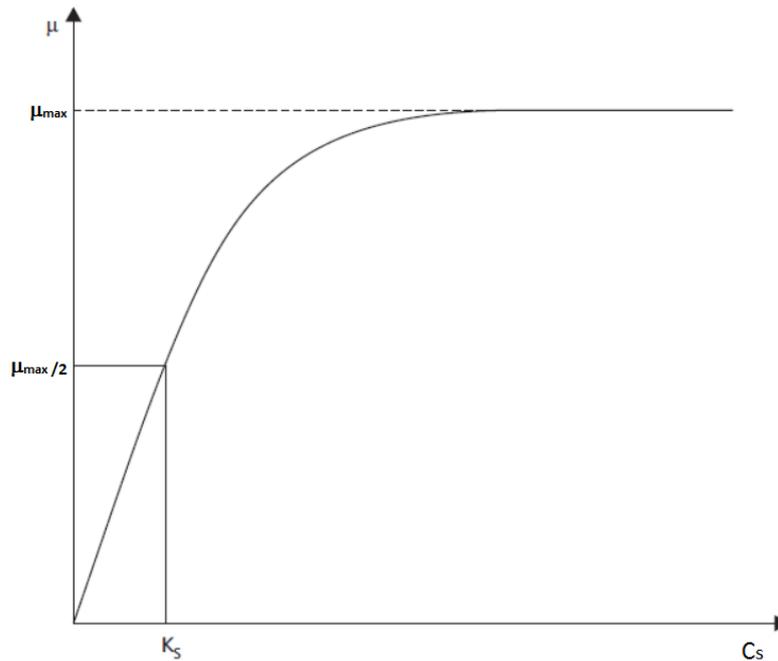


Figura 3.4: Representação gráfica do modelo cinético de Monod (Fonte: PROSAB, 1999).

De acordo com a Equação 3.8 é possível observar que para concentrações elevadas de substrato, a razão $C_s/(C_s+K_s)$ se aproxima de uma unidade e que, portanto, a velocidade de crescimento se torna independente da concentração de substrato, isto é, o crescimento apresenta uma cinética de ordem zero. Por outro lado, se a concentração de substrato for muito baixa, isto é, se $C_s \ll K_s$, a velocidade de crescimento se torna proporcional à concentração de substrato, o que caracteriza cinética de primeira ordem.

III. Paralelo ao crescimento dos micro-organismos ocorre o decaimento dos mesmos devido à morte de algumas células. A velocidade de decaimento pode ser formulada, como mostra a Equação 3.9, por meio de um processo de primeira ordem:

$$\left(\frac{dC_x}{dt} \right)_d = -C_x \cdot K_d \quad (\text{Eq. 3.9})$$

Nessa expressão, K_d é a constante da velocidade de decaimento ou constante de lise celular. O índice d representa o decaimento da massa bacteriana.

Os conhecimentos sobre o metabolismo anaeróbio, os parâmetros e os fatores que interferem na digestão anaeróbia são de suma importância para o entendimento da produção de biogás

e subsequente utilização como fonte alternativa de energia. O mecanismo do processo é muito complexo devido à quantidade de grupos microbianos, às complicadas reações e cadeias de produtos. Conseqüentemente, é difícil explicar os mecanismos de reação somente com dados experimentais (Batstone *et al.*, 2002a), necessitando, assim, de ferramentas auxiliares. Uma delas são os modelos matemáticos.

3.4 MODELAGEM MATEMÁTICA DA DIGESTÃO ANAERÓBIA (ADM1)

Sistemas contendo mecanismos biológicos possuem grande variabilidade de desempenho, fatores internos e externos podem afetar de forma direta e indireta o bom funcionamento de biorreatores. Para tentar descrever e reproduzir a produção de metano, a modelagem matemática exerce um papel fundamental. Devido à complexidade dos modelos e dos processos bioquímicos e físico-químicos que ele representa, vários passos devem ser seguidos para garantir o bom desempenho e a confiabilidade dos resultados. Os passos no processo de modelagem incluem: definição do objetivo e conceituação do modelo, formulação matemática, calibração, análise de sensibilidade, verificação e validação (Jorgensen, 2011; Orlob, 1983).

No início da década de 1970, os primeiros modelos desenvolvidos para descrever a digestão anaeróbia foram baseados considerando a metanogênese, como a etapa limitante do processo (Andrews, 1969). Porém, com a evolução dos estudos sobre a microbiologia do processo anaeróbio, foram propostos outros modelos que consideravam a conversão de ácido graxos em biogás ou a hidrólise de sólidos como etapas limitantes (Eastman e Ferguson, 1981). Tais modelos, apesar de serem simples e fáceis de aplicar, não foram capazes de descrever bem o processo de digestão anaeróbia (Silva, 2015). Contudo, nos últimos anos, um progresso significativo na modelagem de processos de digestão anaeróbia foi obtido através do modelo matemático genérico, desenvolvido em 1998 por um grupo de trabalho da International Water Association (IWA), o *Anaerobic Digestion Model – ADM1* (Silva, 2015; Batstone *et al.*, 2002a).

A principal responsabilidade do grupo de trabalho do ADM1 era propor um modelo genérico de digestão anaeróbia que englobasse os diversos estudos anteriores, ou seja, que servisse como base para simulações dinâmicas do processo e uniformizasse os parâmetros e as

variáveis dos modelos de digestão anaeróbia propostos *a priori*. Com isso, o objetivo do modelo contemplava ampliar o conhecimento, aplicação, operação e otimização do processo de digestão anaeróbia e englobar quase todos os processos presentes nos diversos fenômenos da digestão anaeróbia (Silva, 2015).

Vários benefícios são esperados na aplicação do modelo genérico ADM1, tais como:

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

O desenvolvimento do ADM1 possibilita a utilização generalizada do largo campo do conhecimento sobre o processo anaeróbio, facilitando os estudos de pesquisa e a experiência operacional. A filosofia do processo e da inclusão de componentes no modelo ADM1 é de maximizar a aplicação e manter a razoável simplicidade da estrutura do modelo (Batstone, 2002b). Além disso, o ADM1 pode ser executado no software Matlab que é de fácil acesso e possui uma padrão de linguagem universal. O ADM1 inclui: 19 taxas de processos bioquímicos e de transferência da fase gasosa para líquida, 105 parâmetros cinéticos e estequiométricos e 6 processos cinéticos adicionais do equilíbrio ácido-base (Silva, 2015).

3.4.1 Nomenclatura e descrição dos parâmetros e variáveis do ADM1

No ADM1 existem quatro principais grupos de parâmetros e variáveis: coeficientes estequiométricos, constantes de equilíbrio, parâmetros cinéticos, variáveis dinâmicas ou algébricas e seus indicadores. A Tabela 3.1 detalha cada tipo de parâmetro e variável, além de seus símbolos e unidades (Batstone *et al.*, 2002a).

Tabela 3.1 - Parâmetros e variáveis existentes no ADM1 (Batstone *et al.*, 2002a).

VARIÁVEL OU PARÂMETRO	SÍMBOLOS	DESCRIÇÃO	UNIDADES
Coeficiente estequiométrico	C_i	Teor de carbono do componente i	kg-mol C.kg DQO ⁻¹
	N_i	Teor de nitrogênio do componente i	kg-mol N.kg DQO ⁻¹
	$v_{i,j}$	Coeficiente de taxa para o componente i no processo j	kg DQO.m ⁻³
	$f_{\text{produto, substrato}}$	Produção (somente catabolismo) de produto a partir do substrato	kg DQO.kg DQO ⁻¹
Constante de equilíbrio	H_{gas}	Constante da lei dos gases (igual a K_H^{-1})	bar.M ⁻¹
	$K_{a,\text{acid}}$	Constante de equilíbrio ácido-base	M(kg-mole.m ⁻³)
	K_H	Coeficiente da Lei de Henry	M.bar ⁻¹
	pK_a	$-\log_{10} [K_a]$	
	R	Constante da lei dos gases (8,314e-2)	bar. M ⁻¹ . K ⁻¹
	ΔG	Energia livre	J.mol ⁻¹
Constantes Cinéticas e Taxas Calculáveis	$K_{A/Bi}$	Constante cinética ácido-base (M.d ⁻¹ ou kg DQO.m ⁻³ .d ⁻¹)	d ⁻¹
	k_{dec}	Taxa de decaimento de primeira ordem	d ⁻¹
	$I_{\text{inibidor, processo}}$	Função inibidora	-
	k_{processo}	Constante de primeira ordem (normalmente para hidrólise)	d ⁻¹
	k_{La}	Coeficiente de transferência gas-líquido	d ⁻¹
	$K_{I, \text{inibido, processo}}$	50% concentração inibitória	kg DQO. m ⁻³
	$k_{m, \text{processo}}$	Taxa de absorção específica máxima (μ_{max}/Y)	kg DQO_S.kg DQO_X ⁻¹ .d ⁻¹
	$K_{S, \text{processo}}$	Constante de meia saturação	kg DQO_S.m ⁻³
	ρ_j	Taxa generalizada do processo j	
	$Y_{\text{substrato}}$	Produção de biomassa no substrato	kg DQO_X.kg DQO_S ⁻¹
Variáveis Dinâmicas e Algebricas	μ_{max}	Taxa de crescimento específica máxima	d ⁻¹
	pH	$-\log_{10} [H^+]$	
	$p_{\text{gas},i}$	Pressão do gás i	bar
	P_{gas}	Pressão total	bar
	S_i	Componente solúvel i	kg DQO.m ⁻³
	$t_{\text{res, X}}$	Retenção dos sólidos estendida	d
	T	Temperatura	K
	V	Volume	m ³
	X_i	Componente particulado i	kg DQO.m ⁻³

Com esses parâmetros e variáveis, o modelo ADM1 descreve bem o processo de digestão anaeróbia em um reator de mistura completa com fluxo contínuo. Entretanto, como qualquer outro modelo, o ADM1 apresenta algumas limitações. Durante a sua elaboração, alguns processos foram excluídos, na maioria dos casos, devido à escassez de informação disponível na literatura da época (Batstone *et al.*, 2002a). Pode-se destacar alguns processos, tais como, degradação alternativa de produtos de glicose (lactato e etanol), inibição por ácido graxos de cadeias longas, oxidação do acetato em duas vias distintas, onde o acetato é oxidado a CO₂ e H₂ por um micro-organismo, consumo competitivo de CO₂ e de H₂ entre as *Archaeas* metanogênicas hidrogenotróficas e os micro-organismos homoacetogênicos e precipitação de sólidos devido à alcalinidade elevada ou a outras reações de precipitação químicas (Silva, 2015). Os processos representados pelo ADM1 variam de bioquímicos a físico-químicos.

3.4.2 Processos bioquímicos no ADM1

Os processos bioquímicos são aqueles considerados irreversíveis. Segundo Silva (2015), o modelo ADM1 abrange as etapas de solubilização extra e intracelular. A desintegração e a hidrólise são processos extracelulares, já a acidogênese, acetogênese e metanogênese, são processos intracelulares. A primeira etapa do processo extracelular é a desintegração, sua inclusão no ADM1 foi inovadora, porque permite diversificar a aplicação do modelo para diversos fins, tais como, representar a quebra de moléculas complexas presentes no lodo biológico (Silva, 2015).

Na segunda etapa, sete processos intracelulares, mostrados na Tabela 3.2, foram considerados pelo modelo ADM1. O modelo cinético de inibição não-competitiva pela presença de hidrogênio foi adotado na acetogênese para reduzir a complexidade do ADM1. O modelo cinético de primeira ordem foi adotado para as etapas extracelulares de desintegração e hidrólise enzimática (Batstone *et al.*, 2002a), além das etapas de respiração endógena ou decaimento de micro-organismos. Para os processos intracelulares o modelo cinético é baseado na cinética de Monod, possibilitando a separação dos termos de crescimento e consumo do substrato (Silva, 2015).

Tabela 3.2 – Processos intracelulares considerados pelo modelo ADM1.

FASES DA DA	SUBSTRATOS	MOTIVOS DA CONSIDERAÇÃO
Acidogênese	Açúcares	A fermentação excreta substâncias mais simples e gera novas células sem a presença de acceptor final de elétrons
	Aminoácidos	
Acetogênese	Ácidos Graxos de Cadeia Longa	A degradação que ocorre é uma reação de oxidação com aceptores externos de elétrons e feita por micro-organismos específicos. Além disso, esta fase foi considerada devido às dificuldades de transporte e as características físico-químicas da macromolécula presente.
	Propionato	
Metanogênese	Butirato e Valerato	Degradação em vias diferentes no processo de digestão anaeróbia e medição simultânea por cromatografia gasosa (acetato também apresenta esta característica).
	Acetoclastica	
	Hidrogenotrófica	Consideram-se estes dois grupos em função da magnitude na produção de metano e de sua afinidade por substrato.

As expressões da taxa biológica cinética e dos coeficientes são mostradas na matriz de Petersen (Tabela 3.3 e 3.4). O valor da DQO balanceada é implícito nestas equações. Em vários casos, carbono inorgânico (exemplo, família do CO₂) é a fonte de carbono para um produto do catabolismo (absorção de açúcares, aminoácido, propionato, acetato e hidrogênio; $j = 5, 6, 10, 11, 12$), e nesse caso, a taxa do coeficiente de carbono inorgânico ($v_{10,5,6,10,11,12}$) pode ser expresso como um balanço de carbono, ilustrado na Tabela 3.3 e 3.4.

Tabela 3.3 - Matriz estequiométrica para compostos particulados ($i = 13-26, j = 1-19$) (Silva, 2015) * kg DQO.m⁻³ ** kmol.m⁻³

Componentes → i	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26
j Processos ↓	X_c	X_{ch}	X_{pr}	X_{li}	X_{su}	X_{aa}	X_{fa}	X_{c4}	X_{pro}	X_{ac}	X_{h2}	X_i	S_{cat}	S_{an}
1 Desintegração	-1	$f_{ch,xc}$	$f_{pr,xc}$	$f_{li,xc}$								$f_{xi,xc}$		
2 Hidrólise de carboidrato		-1												
3 Hidrólise de proteína			-1											
4 Hidrólise de lipídeo				-1										
5 Consumo de S_{su}					Y_{su}									
6 Consumo de S_{aa}						Y_{aa}								
7 Consumo de S_{fa}							Y_{aa}							
8 Consumo de S_{va}								Y_{c4}						
9 Consumo de S_{bu}								Y_{c4}						
10 Consumo de S_{pro}									Y_{pro}					
11 Consumo de S_{ac}										Y_{ac}				
12 Consumo de S_{h2}											Y_{h2}			
13 Decaimento de X_{su}	1				-1									
14 Decaimento de X_{aa}	1					-1								
15 Decaimento de X_{fa}	1						-1							
16 Decaimento de X_{c4}	1							-1						
17 Decaimento de X_{pro}	1								-1					
18 Decaimento de X_{ac}	1									-1				
19 Decaimento de X_{h2}	1										-1			

* Compostos
 * Carboidrato
 * Proteína
 * Lipídeos
 * Degradadores de monossacarídeo
 * Degradadores de aminoácidos
 * Degradadores de AGCL
 * Degradadores de valerato e butirato
 * Degradadores de propionato
 * Degradadores de acetato
 * Degradadores de hidrogênio
 * Particulados inerte
 ** Cation
 ** Anion

Tabela 3.4 - Matriz estequiométrica para compostos solúveis ($i=1-12, j=1-19$) (Silva, 2015) * kg DQO.m⁻³** kmolC m⁻³*** kmolN m⁻³

Componentes → i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
j Processos ↓	S _{su}	S _{aa}	S _{fa}	S _{va}	S _{bu}	S _{pro}	S _{ac}	S _{h2}	S _{ch4}	S _{ic}	S _{in}	S _i
1 Desintegração												$f_{si,xc}$
2 Hidrólise de carboidrato	1											
3 Hidrólise de proteína		1										
4 Hidrólise de lipídeo	$1-f_{fa,li}$		$f_{fa,li}$									
5 Consumo de S _{su}	-1				$(1-Y_{su})f_{bu,su}$	$(1-Y_{su})f_{pro,su}$	$(1-Y_{su})f_{ac,su}$	$(1-Y_{su})f_{h2,su}$		$\sum_{i=9,11-24} C_i \nu_{i,5}$	$-(Y_{su}) N_{bac}$	
6 Consumo de S _{aa}		-1		$(1-Y_{aa}) f_{va,aa}$	$(1-Y_{aa}) f_{bu,aa}$	$(1-Y_{aa}) f_{pro,aa}$	$(1-Y_{aa}) f_{ac,aa}$	$(1-Y_{aa}) f_{h2,aa}$		$\sum_{i=9,11-24} C_i \nu_{i,6}$	$N_{aa} - (Y_{aa}) N_{bac}$	
7 Consumo de S _{fa}			-1				$(1-Y_{fa}) 0,7$	$(1-Y_{fa}) 0,3$			$-(Y_{fa}) N_{bac}$	
8 Consumo de S _{va}				-1		$(1-Y_{c4}) 0,54$	$(1-Y_{c4}) 0,31$	$(1-Y_{c4}) 0,15$			$-(Y_{c4}) N_{bac}$	
9 Consumo de S _{bu}					-1		$(1-Y_{c4}) 0,8$	$(1-Y_{c4}) 0,2$			$-(Y_{c4}) N_{bac}$	
10 Consumo de S _{pro}						-1	$(1-Y_{pro}) 0,57$	$(1-Y_{pro}) 0,43$		$\sum_{i=9,11-24} C_i \nu_{i,10}$	$-(Y_{pro}) N_{bac}$	
11 Consumo de S _{ac}							-1		$(1-Y_{ac})$	$\sum_{i=9,11-24} C_i \nu_{i,11}$	$-(Y_{ac}) N_{bac}$	
12 Consumo de S _{h2}								-1	$(1-Y_{h2})$	$\sum_{i=9,11-24} C_i \nu_{i,12}$	$-(Y_{h2}) N_{bac}$	
13 Decaimento de X _{su}												
14 Decaimento de X _{aa}												
15 Decaimento de X _{fa}												
16 Decaimento de X _{c4}												
17 Decaimento de X _{pro}												
18 Decaimento de X _{ac}												
19 Decaimento de X _{h2}												

* Monossacarídeo

* Aminoácidos

* Ácidos graxos

* Valerato

* Butirato

* Propionato

* Acetato

* Hidrogênio

* Metano

** Carbono inorgânico

*** Nitrogênio inorgânico

* Solúvel inerte

Dentro do processo bioquímico também estão presentes os modelos cinéticos de inibição e toxicidade. A forte influência na velocidade de crescimento e decaimento celular causada por substâncias inibidoras ou tóxicas que entram ou se formam no próprio reator, o ADM1, segundo Carlos (2015), considera os modelos de inibição:

- reversíveis com o uso extensivo do modelo de inibição não-competitiva;
- que apresentam impacto direto do inibidor no crescimento e decaimento de biomassa;
- duas formulas empíricas usadas para inibição pelo valor de pH do meio;
- consumo competitivo, considerado como complemento apesar de não ser modelo de inibição; e
- modelo cinético de Monod para substratos secundário, necessário para descrever a diminuição do crescimento celular pela limitada concentração de nitrogênio (incluído como complemento do modelo e não como modelo de inibição).

3.4.3 Processos físico-químico no ADM1

De acordo com Silva (2015), somente dois dos três processos não biológicos, que ocorrem nos reatores anaeróbios, são representados no modelo ADM1. O processo líquido-líquido, associação e dissociação iônica, pode ser referido como processos de equilíbrio, incluindo por exemplo o equilíbrio ácido-base. A representação é feita por meio de equações algébricas com o objetivo de calcular as diversas concentrações de íons de hidrogênio, ácidos graxos voláteis e dióxido de carbono. No processo físico-químico os principais componentes são os que representam o biogás. A modelagem do balanço de carga é expressa como a diferença entre as somatórias das concentrações de cátions ($[C^+]$) e ânions ($[A^-]$), como mostra a Equação 3.10. A concentração equivalente de cada íon é a sua valência multiplicada pela concentração molar.

$$\Sigma[C^+] - \Sigma[A^-] \quad (\text{Eq.3.10})$$

O segundo processo, líquido-gás, pode ser definido como a transferência da fase gasosa para a fase líquida. Baseada na Lei de Henry, utilizada na modelagem dos estados gasosos para descrever a relação de equilíbrio entre as concentrações nas fases líquida e gasosa e deu origem às equações que traduzem o fluxo de gás entre o volume livre do reator e o líquido (Equação 3.11).

$$K_H \cdot p_{gas,i,ss} - C_{liq,i,ss} = 0 \quad (\text{Eq. 3.11})$$

$C_{(liq,i,ss)}$ é a concentração do componente i (Massa molar – M) na fase líquida no estado estacionário, $p_{gas,i,ss}$ é a pressão parcial do componente i na fase gasosa (bar) e K_H é a constante da lei de Henry ($M \cdot \text{bar}^{-1}$). O processo sólido-líquido, precipitação e solubilização, não foi incluído no ADM1 devido à complexidade da representação (Silva, 2015). Para descrever os processos bioquímicos e físico-químicos no modelo, sistemas de equações diferenciais ordinárias deverão ser implementadas. A Figura 3.5 ilustra a conversão dos processos em digestão anaeróbia usada no modelo ADM1 (Batstone, 2002b), as abreviaturas são definidas como: MS – monossacarídeo, AA – aminoácido, LCFA – ácido graxo de longa cadeia, HVa – ácido valérico, Va – valerato, Hbu – ácido butírico, Bu – butirato, HPr – ácido propílico, Pr – propionato, Hac – ácido acético e Ac – acetato.

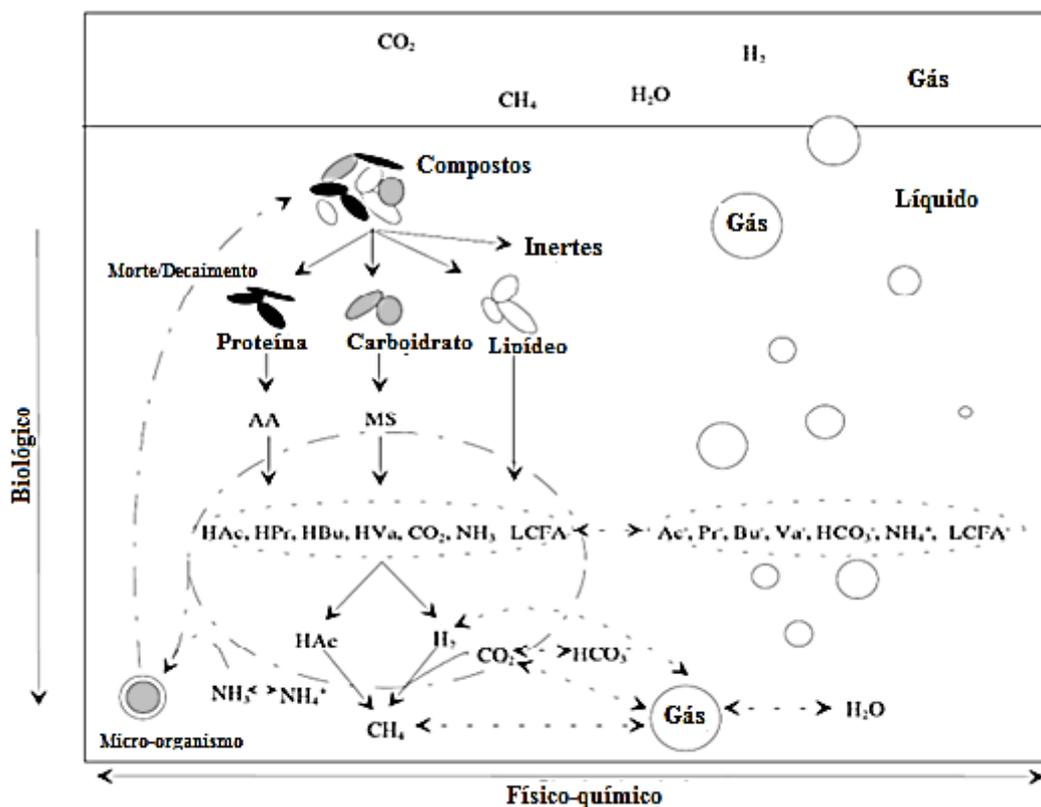


Figura 3.5 – Processos de conversão na digestão anaeróbia usada no ADM1 (Fonte: Batstone, 2002b, modificado).

3.4.4 Implementação do ADM1

O sistema de digestão anaeróbio normalmente, consiste de um reator com volume líquido e um espaço superior contendo gás confinado a pressão atmosférica, onde ocorre a remoção do gás para utilização a jusante. O sistema a ser considerado no modelo ADM1 é um reator de mistura completa com *input* simples, *output* contínuos e volume do líquido constante ($q_{out} = q_{in}$, Figura 3.6).

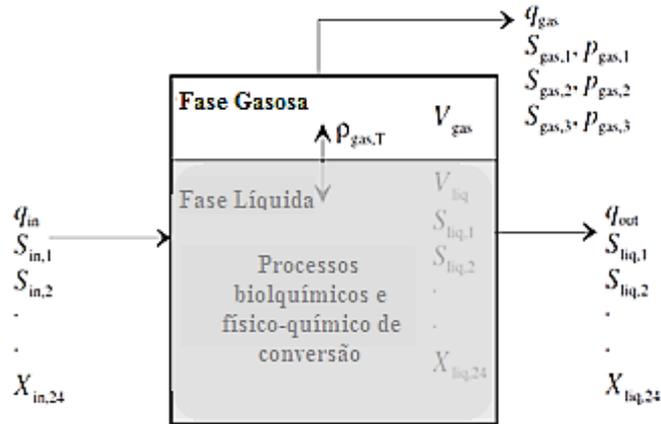


Figura 3.6 – Esquema de um típico digestor de tanque simples utilizado como base no modelo ADM1 (Fonte: Batstone, 2002b).

Na Figura 3.6, q é vazão volumétrica em $m^3 \cdot d^{-1}$, V é o volume em m^3 , $S_{stream, i}$ é a concentração do componente solúvel, $X_{stream, i}$ a concentração do componente particulado, sendo esses últimos parâmetros em $kg \text{ DQO} \cdot m^{-3}$ e i é o índice do componente. A implementação depende se o processo da fase físico-química líquida é desenvolvido por meio de equações algébricas ou equações de taxas cinéticas (Batstone, 2002b).

3.4.4.1 Modelagem da fase líquida

Considerando um reator de mistura completa com fluxo contínuo, na fase líquida, as equações de estados para cada componente são balanços de massas e contém termos cinéticos que caracterizam as velocidades específicas de conversão. As Equações 3.12 e 3.13 representam, respectivamente, o cálculo das variáveis em estados solúvel e particulado (Silva, 2015).

$$\frac{d S_{liq, i}}{dt} = \frac{q}{V_{liq}} (S_{in, i} - S_{liq, i}) + \sum_{j=1}^{19} \rho_j \cdot v_{i, j} \quad i = 1, \dots, 19 \quad j = 25 - 26 \quad (\text{Eq.3.12})$$

$$\frac{d X_{liq,i}}{dt} = \frac{q}{V_{liq}} (X_{in,i} - X_{liq,i}) + \sum_{j=1}^{19} \rho_j \cdot v_{i,j} \quad i = 1, \dots, 24 \quad (\text{Eq.3.13})$$

Onde, $S_{liq,i}$ é a concentração do material solúvel na fase líquida, $X_{liq,i}$ é a concentração do material particulado e biomassa na fase líquida, V_{liq} corresponde ao volume da fase líquida do reator, q corresponde a vazão afluyente e efluente do reator, $S_{in,i}$ é a concentração afluyente do material solúvel, $X_{in,i}$ é a concentração afluyente do material particulado e biomassa. Cada ρ_j corresponde a taxa específica cinética para o processo j , multiplicado pelo coeficiente estequiométrico $v_{i,j}$.

3.4.4.2 Modelagem da fase gasosa

Em reatores de mistura completa com fluxo contínuo, a equação dinâmica para cada um dos subprodutos gasosos considerados no ADM1, é representada pela Equação 3.14 (Silva, 2015).

$$\frac{d S_{gas,i}}{dt} = \frac{S_{gas,i} \cdot q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{T,i} \frac{V_{liq}}{V_{gas}} \quad i = CH_4, CO_2 \text{ e } H_2 \quad (\text{Eq. 3.14})$$

Onde q_{gas} é a vazão de gás ($m^3 \cdot d^{-1}$), V_{gas} é o volume de gás no reator, $S_{gas,i}$ ($mol \cdot L^{-1}$) é a concentração de gás na fase gasosa do componente i e $\rho_{T,i}$ é a taxa de transferência de massa do gás i , dada pela Equação 3.15.

$$\rho_{T,i} = k_L \cdot a (S_{gas,i} - K_H \cdot p_{gas,i}) \quad i = CH_4, CO_2 \text{ e } H_2 \quad (\text{Eq. 3.15})$$

Onde $k_L \cdot a$ é o coeficiente de transferência de massa global multiplicado pela área de transferência específica. A pressão parcial dos gases ($p_{gas,i}$) é obtida pelas Equações 3.16, 3.17 e 3.18. As Equações 3.16 e 3.17 estão sujeitas a correções de K_H do hidrogênio e metano pelos fatores 16 e 64, respectivamente, com a finalidade de contabilizar os resultados em termos de DQO (Silva, 2015).

$$p_{gas, H_2} = S_{gas, H_2} \frac{RT}{16} \quad (\text{Eq. 3.16})$$

$$p_{gas, CH_4} = S_{gas, CH_4} \frac{RT}{64} \quad (\text{Eq. 3.17})$$

$$p_{gas, CO_2} = S_{gas, CO_2} RT \quad (\text{Eq. 3.18})$$

Substituindo a pressão de vapor a 298K por 0,0313 bar e ΔH° vap por 43800 J.mol⁻¹, obtêm-se a correção através da Equação 3.19:

$$p_{gas, H_2O} = 0,00313 \exp \left[5290 \left(\frac{1}{298} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (\text{Eq. 3.19})$$

A pressão parcial total dos gases é estimada pela Equação 3.20.

$$P_{gas} = p_{gas, H_2} + p_{gas, CH_4} + p_{gas, CO_2} + p_{gas, H_2O} \quad (\text{Eq. 3.20})$$

A vazão de biogás é dada pela transferência total para a fase gasosa, corrigida pelo vapor de água, como mostra a Equação 3.21.

$$q_{gas} = \frac{RT}{P_{gas} - p_{gas, H_2O}} V_{liq} \left(\frac{\rho_{T, H_2}}{16} + \frac{\rho_{T, CH_4}}{64} + \rho_{T, CO_2} \right) \quad (\text{Eq. 3.21})$$

3.4.4.3 Estimativa do pH

O valor do pH é estimado a partir da Equação 3.22.

$$pH = -\log_{10}[S_{H^+}] \quad (\text{Eq. 3.22})$$

Onde S_{H^+} é a concentração de íons de hidrogênio obtida a partir de θ , balanço de carga iônica, representado pela Equação 3.23.

$$\theta = S_{cat^+} + S_{NH_4^+} - S_{HCO_3^-} - \frac{S_{Ac^-}}{64} - \frac{S_{Pr^-}}{112} - \frac{S_{Bu^-}}{160} - \frac{S_{Va^-}}{208} - S_{An^-} \quad (\text{Eq. 3.23})$$

A Equação 3.24 mostra o cálculo da concentração de íons de hidrogênio (S_{H^+}) dependente de θ .

$$S_{H^+} = \frac{\theta^2 + \sqrt{\theta^2 + 4K_w}}{2} \quad (\text{Eq. 3.24})$$

3.4.5 Métodos para caracterização do afluente

Para caracterizar o afluente de acordo com o exigido pelo ADM1, várias concentrações de componentes específicos são requeridas. Segundo Silva (2015), no ADM1, a DQO afluente é dividida em 13 variáveis de estado, sendo onze frações biodegradáveis e duas frações inertes, explicitadas no Tabela 3.5.

A distinção entre compostos degradáveis disponíveis (substrato) e DQO afluente total é de suma importância. A definição das concentrações das frações que compõem o substrato requer técnicas analíticas específicas e, em muitos casos, somente medições de demanda bioquímica de oxigênio (DBO), DQO, carbono orgânico total, nitrogênio orgânico e amônia estão disponíveis. Contudo, o ADM1 acaba tendo limitações relacionadas à obtenção dos dados de entrada. Com a finalidade de resolver este problema, alguns métodos para simplificar a caracterização do afluente têm sido desenvolvidos (Silva, 2015).

Tabela 3.5 – Variáveis dinâmicas de estado presentes no modelo ADM1.

ORIGEM	TIPO DE FRAÇÕES	VARIÁVEIS DE ESTADO	SUBDIVISÃO DAS VARIÁVEIS	
Divisão da DQO afluente	Frações Biodegradáveis	Compostos (X_c) (Polímeros)	Carboidratos (X_{ch}) Proteínas (X_{pr}) Lipídeos (X_{li})	
		Monômero	Monossacarídeo (S_{su}) Aminoácidos (S_{aa}) Ácidos graxos de cadeia longa (S_{fa})	
		Ácidos Graxos Voláteis	Butirato (S_{bu}) Valerato (S_{va}) Propionato (S_{pro}) Acetato (S_{ac})	
	Frações Inertes	Solúvel (S_i)	-	
		Particulado (X_i)	-	
Outras	-	Degradadores de	Açúcares (X_{su}) Aminoácidos (X_{aa}) Ácidos graxos de cadeia longa (X_{fa}) Butirato e valerato (X_{c4}) Propionato (X_{pro}) Acetato (X_{ac}) Hidrogênio (X_{h2})	
			Gases	Hidrogênio (S_{h2}) Metano (S_{ch4})
			Inorgânicos	Carbono (S_{IC}) Nitrogênio (S_{IN})

3.4.5.1 Análise físico-química

A caracterização do afluente nesse método é feita através do fracionamento bioquímico (análise de proteínas, carboidratos e lipídeos) e da análise de ácidos graxos voláteis e extração de fibras, que são usados para dividir a DQO total em cada variável de entrada do modelo. Apesar de utilizar conceitos bastante simples, a conversão das frações analíticas em unidades de DQO é complexa. Além disso, testes adicionais e ajuste do modelo aos dados experimentais são necessários para estimar frações inertes e a cinética da hidrólise (Silva, 2015; Wichern *et al.*, 2009).

3.4.5.2 Análise elementar

A partir de um número limitado de medidas disponível (DQO, carbono orgânico total (COT), nitrogênio orgânico e alcalinidade) se caracteriza e fraciona o afluente. A composição elementar dos substratos (C, H, O, N e P) é usada para obter o fracionamento bioquímico do substrato de acordo com as exigências do ADM1. Além da caracterização do afluente, o método permitiu a estimativa do pH a partir da degradação do substrato pelas *Archaeas* metanogênicas (Silva, 2015; Kleerebezem, 2006).

3.4.5.3 Teste de biodegradabilidade anaeróbia

Os testes de biodegradabilidade anaeróbia consistem em identificar as frações de DQO e parâmetros cinéticos associados à sua degradação por meio da interpretação da curva da taxa de produção de metano. Essa curva é obtida durante a degradação anaeróbia do substrato, geralmente em experimentos conduzidos em batelada. Os testes permitem definir simultaneamente as variáveis de estado de entrada e parâmetros cinéticos (Silva, 2015).

Esse método foi aplicado por Yasui *et al.* (2008) para investigar a degradação de substratos específicos (lodo primário). Com base nesse método, Girault *et al.* (2012) desenvolveram um procedimento de teste de degradação através da respirometria anaeróbia e de interpretação numérica dos resultados obtidos por meio da otimização das variáveis de entrada do ADM1.

De acordo com Girault *et al.* (2012), a capacidade de identificação das frações de DQO e parâmetros cinéticos compatíveis com o ADM1 é possível através dos testes de degradabilidade anaeróbia. Além disso, eles representam o melhor método para pesquisa, projeto, operação e otimização de processos anaeróbios e é aplicável a uma ampla quantidade de sustratos.

3.4.6 Simplificações do ADM1

Na tentativa de elucidar aspectos mais complexos da digestão anaeróbia, o ADM1 é considerado um modelo simples e de alcance limitado. Isso pode ser superado pela adição de extensões, que abordam os requisitos para diferentes aplicações. Por outro lado, a aplicação e utilização prática do ADM1 é considerada complexa. Nesse sentido, métodos para simplificação e caracterização detalhada do afluente do ADM1 têm sido reportados na literatura (Silva, 2015).

Uma das principais limitações na aplicação do ADM1 é a necessidade da determinação experimental de uma gama de parâmetros cinéticos e variáveis de estado (Silva, 2015). Com o objetivo de avaliar o número mínimo de reações que deveriam ser consideradas na estrutura da extensão do modelo ADM1, García-Diéguez *et al.* (2013) aplicaram a técnica de análise de componentes principais (ACP) para reduzir o número de reações do modelo ADM1. Na Tabela 3.6 são apresentados o número de parâmetros, as variáveis de estado, os tipos de micro-organismos, as reações e saídas do modelo ADM1 em relação ao modelo reduzido.

Tabela 3.6 – Comparação da complexidade entre o ADM1 e o modelo simplificado
(Fonte: García-Diéguez *et al.*, 2013).

	ADM1	Modelo Reduzido
Parâmetros	89	13
Variáveis de estado	28	7
Tipos de micro-organismos	8	2
Número de reações	21	2
Saídas	32	8
Razão da complexidade	$7/89 = 0,08$	$7/13 = 0,54$

A razão da complexidade é definida como a razão entre o número de medições disponíveis e o número de parâmetros. Uma alta razão de complexidade indica melhor simplificação do modelo. García-Diéguez *et al.* (2013) constatou através dos resultados que apenas dois grupos de micro-organismos (acidogênicos e metanogênicos) explicam 90% da variância total dos dados.

O modelo ADM1, apesar de sua complexidade, apresenta grande versatilidade em relação a sua utilização. A modelagem do lodo de esgoto, resíduo bastante complexo, já obteve resultados positivos quanto ao emprego do modelo em tela, tais resultados foram obtidos por Silva (2015) e por Siegrist *et al.* (2002). Os estudos desenvolvidos por estes autores demonstraram que o modelo ADM1 representou de forma coerente o comportamento dos sistemas anaeróbios estudados. Entretanto, a precisão dos valores não pode ser assegurada, já que trabalhos anteriores, como o de Silva (2015) e Chen *et al.* (2016), apontaram que a concordância entre os dados experimentais e simulados ocorreu somente após a otimização dos parâmetros.

4 METODOLOGIA

A metodologia foi baseada no trabalho desenvolvido por Silva (2015), simulação de digestão anaeróbia mesofílica de lodos de esgoto através do ADM1. A utilização do ADM1, neste trabalho, visou avaliar a resposta do modelo a diferentes cenários de produção do biogás gerados a partir da variação dos dados de entrada. O biogás simulado advém do lodo de esgoto presente no biorreator de digestão anaeróbia da Estação de Tratamento de Esgoto Brasília Sul. Na segunda etapa, avaliou-se a sensibilidade do modelo a partir de uma modificação sistemática de determinados parâmetros cinéticos.

4.1 DADOS DE ENTRADA

4.1.1 Panorama Geral

Os sistemas de coleta e tratamento de esgoto no Distrito Federal apresentam ampla área de abrangência e boas taxas de desempenho. Os índices de atendimento à população revelam que 88,9% das residências urbanas possuem saneamento adequado e 10,9% semi-adequado (CENSO, 2010). Segundo a Sinopse do sistema de esgotamento sanitário do Distrito Federal (SIESG, 2014), para coletar e tratar os esgotos sanitários do Distrito Federal, são operados, atualmente, 5.169 km de redes e 16 estações de tratamento de esgoto. O controle operacional e o monitoramento da eficiência das estações de tratamento são realizados pela Companhia de Saneamento Ambiental do Distrito Federal (CAESB) com o apoio de laboratórios, que executam análises físico-químicas e microbiológicas.

Em cada etapa do tratamento ocorre a geração de lodo (Tabela 4.1), que, de acordo com o SIESG (2014), corresponde a aproximadamente 340 toneladas por dia. O tratamento do lodo é realizado por digestores que tem a função de estabilizar a matéria orgânica e favorecer a etapa posterior de desidratação ou desaguamento. Após a etapa de desidratação ou desaguamento, o produto final é chamado de lodo de esgotos, o qual deve ser encaminhado para destinação final (SIESG, 2014).

Os processos de estabilização de lodo empregados nas ETEs do Distrito Federal são predominantemente anaeróbios. De um total de 16 estações de tratamento de esgoto, 15

estações tratam, se não a totalidade, a maior parcela do lodo produzido pela via anaeróbia, seja nos reatores UASB ou nos digestores (Batista, 2015).

Uma das estações de tratamento de esgoto mais importantes do Distrito Federal é denominada de ETE Brasília Sul, possuindo uma vazão média de projeto de 1500 L/s. Esta estação abrange grande parte do Distrito Federal e, conseqüentemente, grandes quantidades de lodo são geradas, tornando-a a maior produtora de lodo da região, como mostra a Tabela 4.2. O diagnóstico da gestão de lodo mostrou que uma grande variedade do mesmo é produzida ao longo de todas as etapas de tratamento. Monitoramentos constantes destes lodos ocorre nas diversas ETEs do DF, dentre elas, está a ETE Brasília Sul (Batista, 2015).

Tabela 4.1 – Tipos de lodos gerados nas ETEs do Distrito Federal (Fonte: Batista, 2015).

Estações de Tratamento de Esgotos do DF	Lodo Primário	Lodo digerido	Lodo aeróbio não estabilizado	Lodo aeróbio estabilizado	Lodo anaeróbio estabilizado	Lodo misto	Lodo químico
ETE Sobradinho	X	X	X				X
ETE Brazlândia					X		
ETE Brasília Sul	X	X	X				X
ETE Brasília Norte	X	X	X			X	X
ETE Torto					X		
ETE Samambaia					X		X
ETE Paranoá					X		
ETE Riacho Fundo		X	X				
ETE Alagado					X		X
ETE Planaltina					X		
ETE Recanto das Emas			X		X		
ETE São Sebastião					X		
ETE Vale do Amanhecer					X		
ETE Santa Maria					X		
ETE Gama				X			X
ETE Melchior				X			X

Tabela 4.2 – Parâmetro e Indicadores de geração de lodo (afluente ao desaguamento) dados médios entre os anos de 2013 e 2014 (Fonte: adaptado Batista, 2015).

Parâmetros	ETEB SUL	ETEB NORTE	ETE MELCHIOR	ETE GAMA	ETE RIACHO FUNDO	ETE PARANOÁ ⁽¹⁾
Volume de esgoto afluente	91.569	41.181	74.305	17.873	4.147	7.558
Volume de lodo afluente ao desaguamento (m ³ /d)	2.159	467	476	150	102	15
Volume de lodo desaguado (torta) (m ³ /d)	162	73	50	23	6	-

(1) Dado de 2014.

Com o objetivo de avaliar a interferência da variabilidade das características do lodo na produção de metano e na sua degradabilidade, este trabalho contemplou três tipos de diferentes de lodo produzidos na Estação de Tratamento de Esgoto Brasília Sul. Na estação, o lodo passa por diversas etapas para ser tratado, tais como, gravidade, flotação, digestão anaeróbia, entre outras (Tabela 4.3) e produz quatro tipos de lodo (Tabela 4.1).

O tratamento da fase sólida na ETEB Sul engloba as diversas unidades que recebem os lodos produzidos nas etapas de tratamento de esgoto e compreende as fases de adensamento, digestão, condicionamento e desaguamento. Os sólidos separados no decantador primário, denominado lodo primário ou lodo bruto, são bombeados para os adensadores por gravidade e destes para os digestores anaeróbios. Aqueles lodos descartados nos reatores biológicos, lodo secundário, são adensados por flotação e, juntamente com os sólidos recolhidos pelos raspadores de superfície no polimento final, são também bombeados para os digestores anaeróbios. Depois da digestão, o lodo segue para o condicionamento químico e desidratação (Batista, 2015). As simulações foram realizadas para os lodos: primário ou bruto, biológico e químico, gerados na ETEB Sul.

Tabela 4.3 – Tipos de tratamentos de lodo nas ETEs do Distrito Federal (Fonte: Batista, 2015).

Estações de Tratamento de Esgotos do DF	Tratamento empregado							
	Adensamento		Estabilização		Condicionament o químico	Desaguamento		
	Gravidade	Flotação	Digestão aeróbia	Digestão anaeróbia		Prensa	Centrífuga	Leito de secagem
ETE Sobradinho				X	X		X	X
ETE Brazlândia								
ETE Brasília Sul	X	X	X	X	X		X	X
ETE Brasília Norte	X	X		X	X	X		X
ETE Torto								X
ETE Samambaia								
ETE Paranoá								X
ETE Riacho Fundo			X		X		X	
ETE Alagado					X		X	
ETE Planaltina								
ETE Recanto das Emas					X		X	
ETE São Sebastião								X
ETE Vale do Amanhecer								
ETE Santa Maria								
ETE Gama		X			X		X	
ETE Melchior		X			X		X	

4.1.2 Parâmetros e variáveis de entrada do lodo de esgoto

4.1.2.1 Dados experimentais

A tipologia dos dados experimentais foi baseada nos ensaios desenvolvidos por Siegrist *et al.* (2002). A caracterização dos lodos gerados na ETEB Sul foi baseada nas análises laboratoriais da DQO total realizadas por Vieira (2016) e por meio de valores presentes no trabalho desenvolvido por Silva (2015)..

4.1.2.2 Caracterização dos dados de entrada: fracionamento da DQO e parâmetros

O fracionamento do material orgânico medido em DQO total do lodo de esgoto gerado na ETEB Sul foi dividido de acordo com as seguintes porcentagens:

- Partículas de DQO inertes (40%),

- Partículas de DQO degradáveis (30%) e
- Produtos da hidrólise (30%).

Os produtos da hidrólise foram divididos em aminoácido (9%), açúcares (6%), ácido graxo de cadeia longa (13,5%) e DQO solúvel inerte (1,5%), constituindo, assim, alguns dos dados de entrada empregados na simulação do modelo ADM1 (Siegrist *et al.*, 2002). A Tabela 4.5 aponta todos os dados de entrada utilizados. Entretanto, somente os dados supracitados (S_{su} , S_{aa} , S_{fa} , S_i , X_c e X_i) foram quantificados a partir do lodo derivado da ETEB Sul. Os demais foram baseados nos valores fornecidos por Silva (2015).

Tabela 4.4 – Dados de entrada usados nas simulações do modelo ADM1.

Variáveis	Componente	Unidades
S_{su}	Monossacarídeo	kg DQO. m^{-3}
S_{aa}	Aminoácidos	kg DQO. m^{-3}
S_{fa}	Ácidos graxos de cadeia longa	kg DQO. m^{-3}
S_i	Solúveis inertes	kmol DQO. m^{-3}
S_{ic}	Carbono inorgânico	kmol C. m^{-3}
S_{in}	Nitrogênio inorgânico	kmol N. m^{-3}
S_{cat}	Cátions	kgmol. m^{-3}
S_{an}	Ânion	kgmol. m^{-3}
X_c	Composito	kg DQO. m^{-3}
X_i	Partículas inertes	kg DQO. m^{-3}

4.2 MODELO

4.2.1 Implementação do ADM1 em Matlab/Simulink

O conjunto de equações diferenciais ordinárias do ADM1 foi cedido por Silva (2015), que implementou o modelo através do software Matlab/Simulink® e integrou o ODE15s solver para resolver os rigorosos sistemas de EDO. O ADM1 é um modelo altamente complexo e sua implementação requer simultaneamente a resolução de 32 equações diferenciais na fase líquida e 3 equações diferenciais na fase gasosa. Existem 24 equações baseadas em processos bioquímicos na fase líquida, duas para os estados dos cátions e ânions e 6 para o par ácido-base.

O Matlab/Simulink foi escolhido por Silva (2015) devido a sua flexibilidade para futuras modificações estruturais (extensões complementares ao ADM1) habilitando a integração do

modelo com outros blocos que monitoram a evolução de cada variável em curso da simulação em tempo real. Além disso, quando a simulação é completa, os dados de saída podem ser exportados para uma planilha.

4.2.2 Análise de sensibilidade e estimação de parâmetros

Uma análise de sensibilidade simplificada foi realizada para identificar alguns dos parâmetros mais sensíveis que interferem na produção de biogás. Os parâmetros avaliados foram: as constantes de hidrólise para a desintegração dos compostos, carboidratos, proteínas e lipídeos (k_{dis} , $k_{hid,ch}$, $k_{hid,pr}$ e $k_{hid,li}$, respectivamente). As faixas testadas foram definidas como aquelas sugeridas por Batstone *et al.* (2002a), variando entre 30, 100, 300% em relação aos valores dos parâmetros (Figura 4.1).



Figura 4.1 – Faixas de variação das concentrações dos componentes presentes nos lodos.

Todos os valores utilizados nas simulações estão presentes no Apêndice.

5 APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DOS RESULTADOS

- As simulações foram feitas para três tipologias de lodo, lodo primário, biológico e químico, derivados da Estação de Tratamento de Esgoto Brasília Sul. Os resultados gerados para avaliar a sensibilidade do modelo em relação a modificações nos valores dos parâmetros cinéticos foram expressos na forma de gráficos. O eixo das ordenadas representa o fluxo de biogás em metros cúbico por dia, já no eixo das abscissas, as vazões iniciais de lodo. Para as simulações foram utilizados dados reais, da literatura e valores otimizados por Silva (2015). Na avaliação da sensibilidade do modelo em relação a modificações nos valores dos parâmetros cinéticos, os dados foram sintetizados na forma de gráficos, sendo no eixo y o valor da vazão de biogás em função das porcentagens dos valores dos parâmetros selecionados.

5.1 MUDANÇAS NAS VAZÕES E CONCENTRAÇÕES DE ENTRADA DO LODO

Os resultados obtidos variaram de acordo com os diferentes tipos de lodo, primário, biológico e químico, como apresentado nos gráficos das Figuras 5.1, 5.2 e 5.3, respectivamente. Além da variação decorrente do tipo de lodo, cada simulação foi realizada com alterações nos valores da vazão afluyente da ordem de 300 a 1000 m³/dia com intervalos na faixa de 100 m³/dia. Isto possibilitou verificar a diferença na vazão de biogás decorrente do acréscimo de lodo no reator. Conforme os gráficos das Figuras 5.1, 5.2 e 5.3 demonstram, um aumento da vazão do lodo proporcionou um aumento na produção de biogás. Essa resposta proporcional ocorre devido a maiores quantidades de substrato presentes nos reatores, as quais, concomitantemente, aceleram a atividade metabólica dos microorganismos.

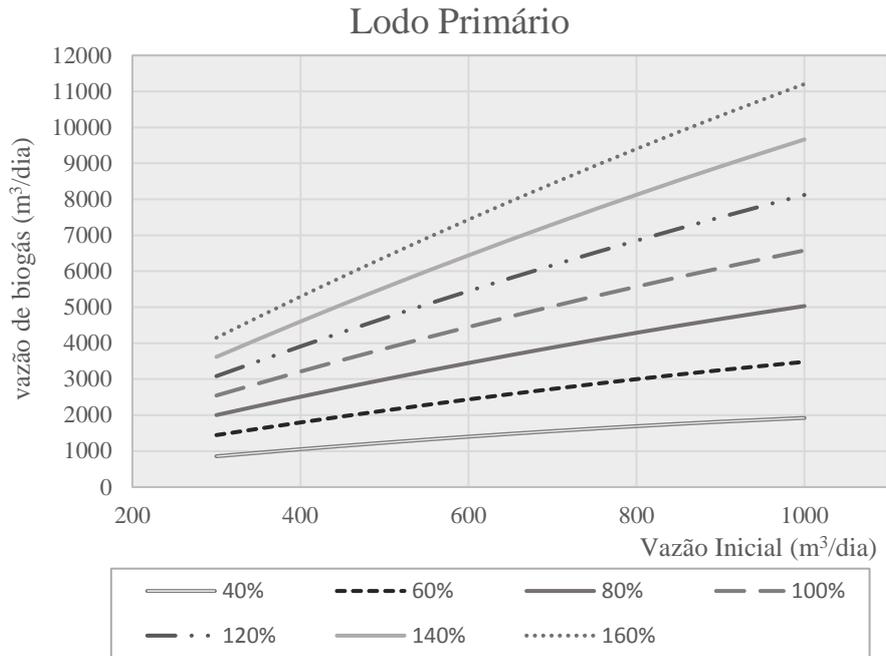


Figura 5.1 – Vazão de biogás em função das vazões iniciais de lodo primário e das diferentes concentrações dos componentes dos dados de entrada.

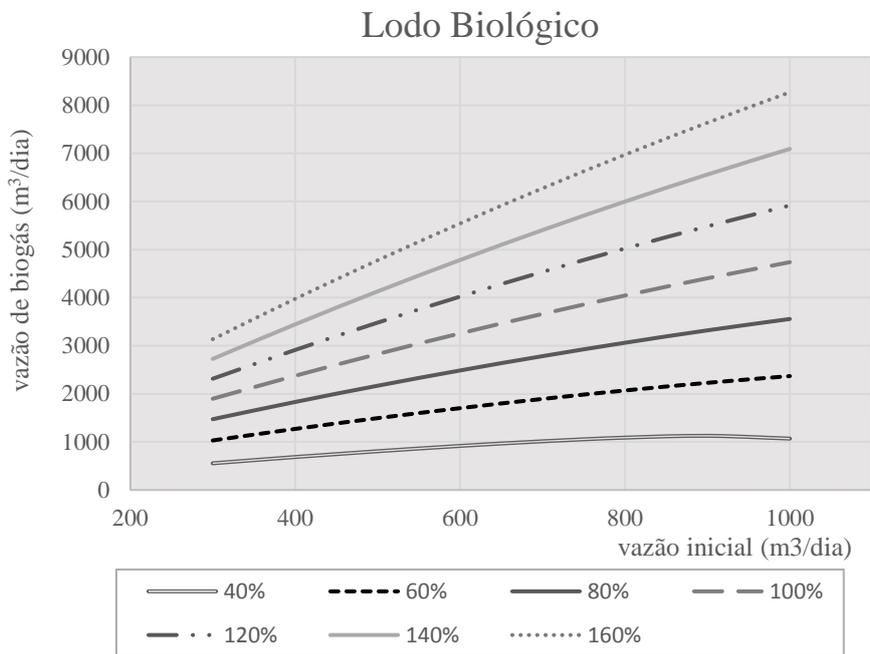


Figura 5.2 – Vazão de biogás em função das vazões iniciais de lodo biológico e das diferentes concentrações dos componentes dos dados de entrada.

Lodo Químico

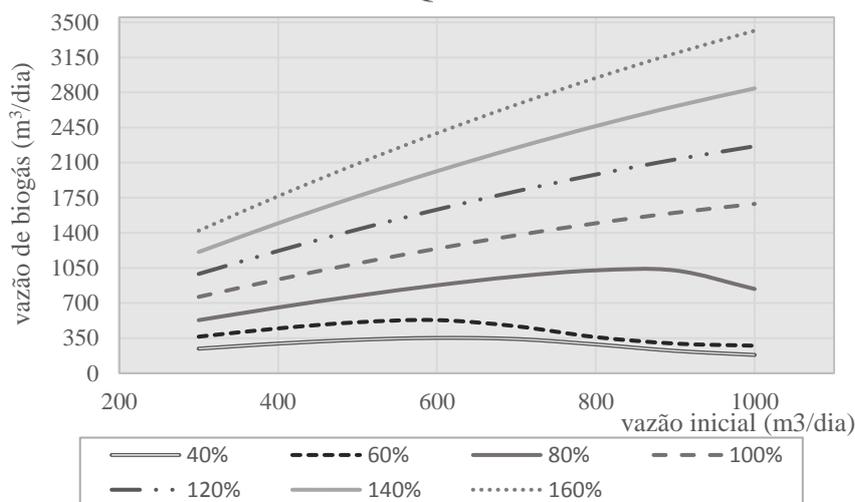


Figura 5.3 – Vazão de biogás em função das vazões iniciais de lodo químico e das diferentes concentrações dos componentes dos dados de entrada.

Variações das concentrações de alguns dados de entrada (S_{su} , S_{aa} , S_{fa} , S_i , X_c e X_i) também foram realizadas, objetivando avaliar as diferentes respostas do fluxo de biogás produzido. Somente essas variáveis foram selecionadas em decorrência da disponibilidade de dados de análises relativos ao lodo de esgoto gerado na ETEB Sul. As porcentagens das concentrações simuladas foram de 40, 60, 80, 100, 120, 140 e 160%, como apresentado nos gráficos das Figuras 5.1, 5.2 e 5.3 e suas respectivas legendas. Pode-se inferir das simulações que o aumento percentual dos componentes, principalmente orgânicos, presentes no lodo de esgoto elevou a produção de biogás de forma proporcional, em outras palavras, quanto maior as concentrações dos componentes, maior será a produção de biogás. Esse resultado já era esperado, pois, acréscimos na concentração de substrato proporcionam favorecem a atividade metabólica, caso semelhante ao supracitado.

As maiores produções de biogás foram reportadas nas simulações do lodo primário, sendo o maior valor de vazão de biogás produzido igual a 11205 m³/dia. Em contrapartida, as vazões de biogás geradas pelas simulações do lodo químico foram as menores, o maior valor, 3415,9 m³/dia, três vezes menor se comparado à maior vazão de biogás simulada para o lodo primário. Os valores obtidos para o lodo biológico ficaram em escalas intermediárias em relação aos outros lodos. Essa diferença entre as vazões de biogás produzido tem como justificativa a caracterização dos lodos realizada por meio da DQO. Os lodos que apresentam

maior produção de fluxo do biogás, apresentam maiores concentrações iniciais de S_{su} , S_{aa} , S_{fa} , S_i , X_c e X_i , expressas em kg de DQO por metro cúbico, conforme apresentado na Tabela 5.1. Com isso, acredita-se que a maior produção de biogás está relacionada proporcionalmente às quantidades iniciais de componentes presentes no lodo de esgoto. Como exemplo, tem-se o lodo primário, que apresentou as maiores concentrações de componentes a partir da caracterização de sua DQO e, conseqüentemente, gerou o maior fluxo de biogás dentre os três lodos simulados.

Tabela 5.1 – Valores de concentrações iniciais em kgDQO/m³ presentes nos componentes S_{su} , S_{aa} , S_{fa} , S_i , X_c e X_i dos lodos primário, biológico e químico.

	LODO PRIMÁRIO	LODO BIOLÓGICO	LODO QUÍMICO
Ssu	0,964	0,734	0,356
Saa	1,446	1,102	0,535
Sfa	2,169	1,652	0,802
SI	0,050	0,024	0,028
Xc	16,065	12,240	5,940
XI	21,420	16,320	7,920

De acordo com as alterações realizadas nos diversos cenários simulados neste trabalho, em sua maior parte, o modelo respondeu de forma coerente com o esperado. Entretanto, as variações para as menores concentrações (40, 60 e 80%) dos componentes modificados no lodo químico não responderam de forma satisfatória. Para este caso, os valores do fluxo de biogás produzido não seguiram o mesmo comportamento em termos de proporcionalidade. Em outras palavras, a partir de um determinado aumento de vazão, os valores da produção de biogás começam a decair ao invés de se estabilizarem como os demais lodos.

Várias hipóteses podem ser levantadas em relação ao comportamento observado. A primeira diz respeito ao próprio modelo, pois cada simulação possui um tempo de resposta, ou seja, no primeiro momento, são obtidos valores oscilantes e a partir de um determinado tempo os valores se tornam constantes. Os modelos em geral precisam de um período para se familiarizarem com os dados ali presentes. Em baixas concentrações, esse tempo de resposta seria muito maior em comparação ao simulado. A segunda hipótese está relacionada ao processo biológico que ocorre no biorreator. Baixas concentrações de substrato levariam ao rápido consumo das fontes energéticas por parte dos micro-organismos e,

consequentemente, ocorreria o decaimento celular. Menores quantidades de micro-organismos leva à redução da produção de biogás.

5.2 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS PARÂMETROS CINÉTICOS

As variações dos parâmetros cinéticos também interferem na produção de biogás, alguns mais do que os outros. Para conhecer melhor a magnitude da interferência de alguns valores cinéticos no processo de digestão anaeróbia do lodo de esgoto da ETEB Sul, foram realizadas análises de sensibilidade para os seguintes parâmetros cinéticos de primeira ordem para processos de desintegração dos compostos particulados e hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos (k_{dis} , $k_{hid,ch}$, $k_{hid,pr}$ e $k_{hid,li}$, respectivamente), que representam a rapidez com que estas reações ocorrem, a uma vazão mediana de 650 m³/dia. Os resultados obtidos estão representados para cada tipo de lodo nos gráficos das Figuras 5.4, 5.5, 5.6.

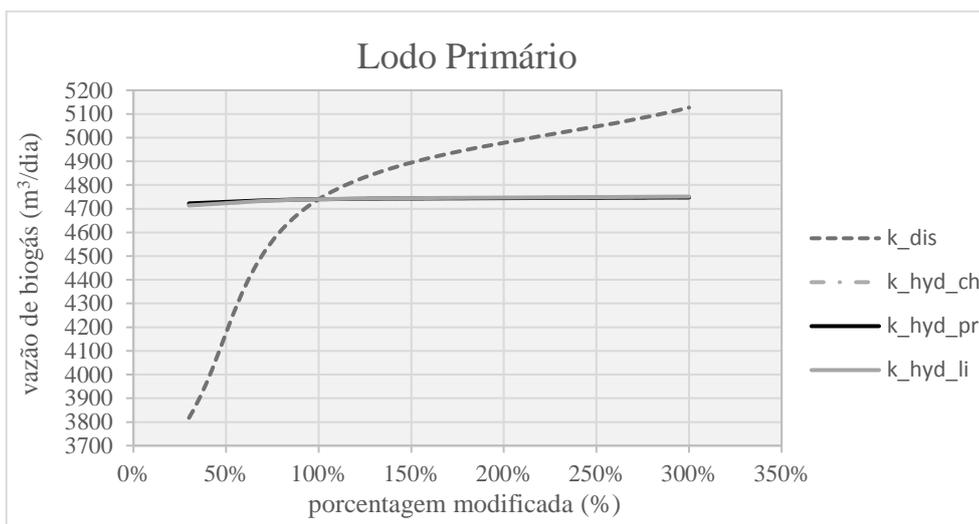


Figura 5.4 – Vazão de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de desintegração do composto particulado, hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo primário.

Os gráficos das Figuras 5.4, 5.5, 5.6, demonstram a elevada magnitude da variação provocada pela constante cinética de desintegração. Assim como o observado por Silva (2015), a constante cinética de desintegração (k_{dis}) apresenta grande sensibilidade em relação às variações de produção de biogás dentro do biorreator anaeróbio. Em outras palavras, os valores de fluxo da produção de biogás aumentam ou diminuem de forma expressiva ao variar, respectivamente, 30% e 300% do seu valor original destes parâmetros.

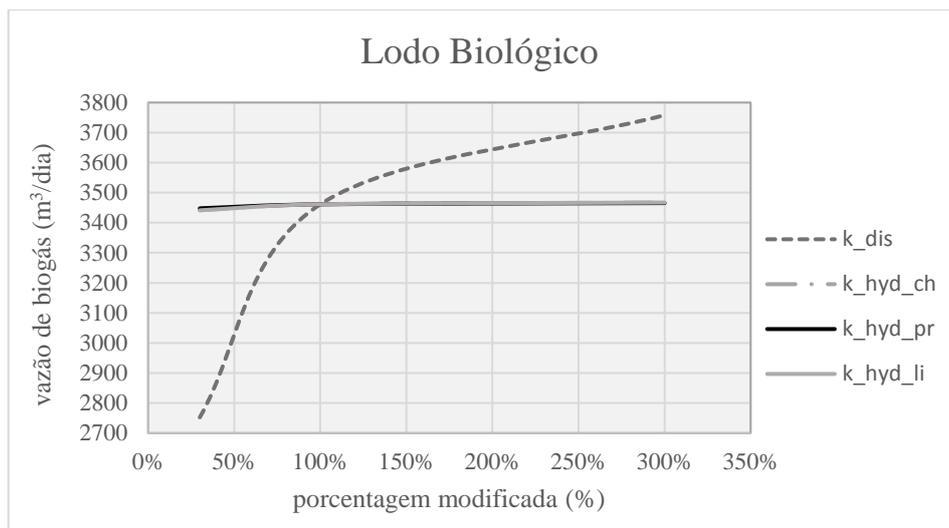


Figura 5.5 – Vazão de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de desintegração do composto particulado, hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo biológico.

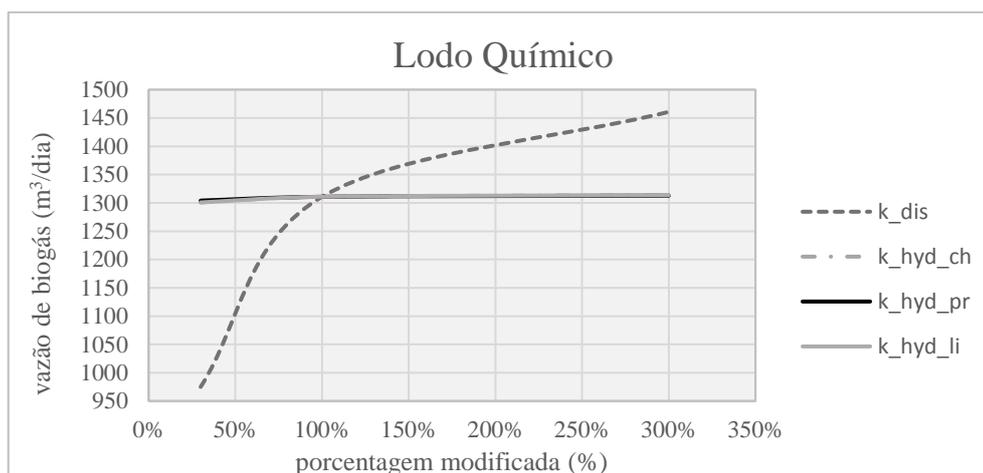


Figura 5.6 – Vazão de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de desintegração do composto particulado, hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo químico.

Nas demais constantes cinéticas ($k_{hid,ch}$, $k_{hid,pr}$ e $k_{hid,li}$), a variação não gerou uma mudança acentuada, permanecendo, em alguns casos, os valores quase que constantes em escalas maiores. Este resultado reforça a afirmação de que fatores ligados à constante cinética de 1ª ordem para processo de desintegração do composto particulado apresentam considerável importância para a produção de biogás nos birreatores da ETEB Sul. Para aumentar a eficiência da digestão anaeróbia, k_{dis} tendem a ser preferencialmente otimizados em detrimento dos demais parâmetros analisados.

Em escalas maiores, os valores das constantes cinética $k_{hid,ch}$, $k_{hid,pr}$ e $k_{hid,li}$ podem ser considerados quase que iguais e constantes, porém em escalas menores é perceptível um diferença entre estes parâmetros, como demonstrado nos gráficos das Figuras 5.7, 5.8 e 5.9.

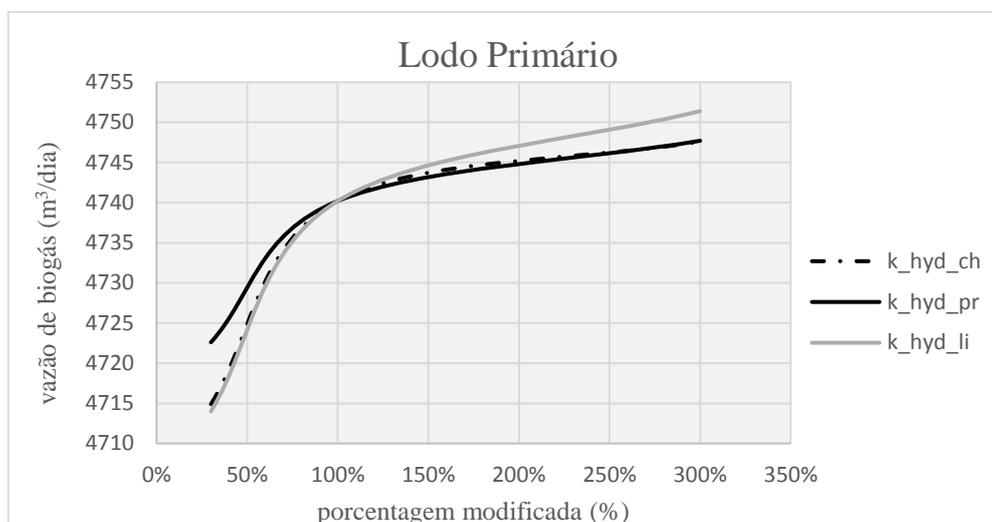


Figura 5.7 – Vazão de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo primário.

Nos três tipos de lodo, as constantes cinéticas $k_{hid,ch}$, $k_{hid,pr}$ e $k_{hid,li}$ apresentaram comportamentos semelhantes. Entretanto, nos lodos biológico e químico, como apresentado nas Figuras 5.8 e 5.9, a tendência das curvas das constantes cinéticas é igual, em outras palavras, $k_{hid,ch}$ e $k_{hid,li}$ possuem um comportamento semelhante, enquanto que no lodo primário, já se observa uma diferença de comportamento de $k_{hid,ch}$, em relação aos demais lodos.

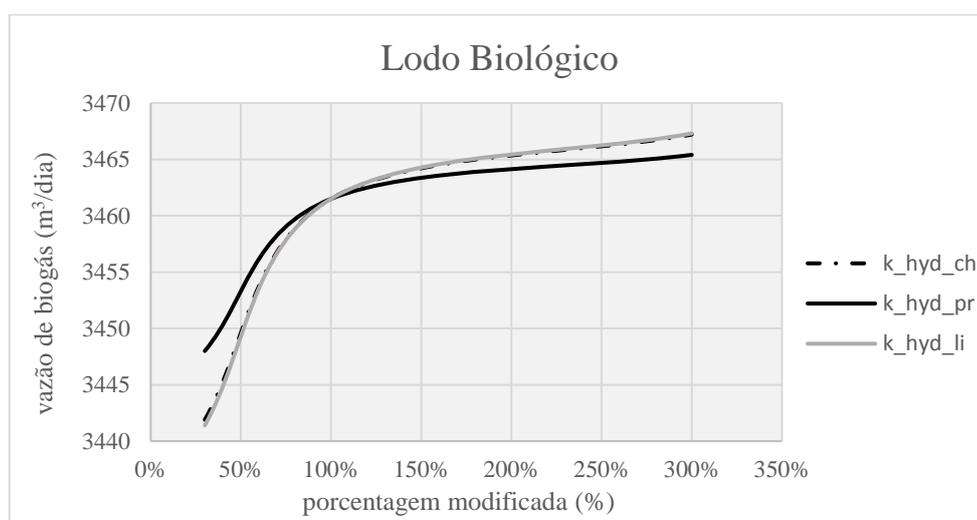


Figura 5.8 – Vazão de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo biológico.

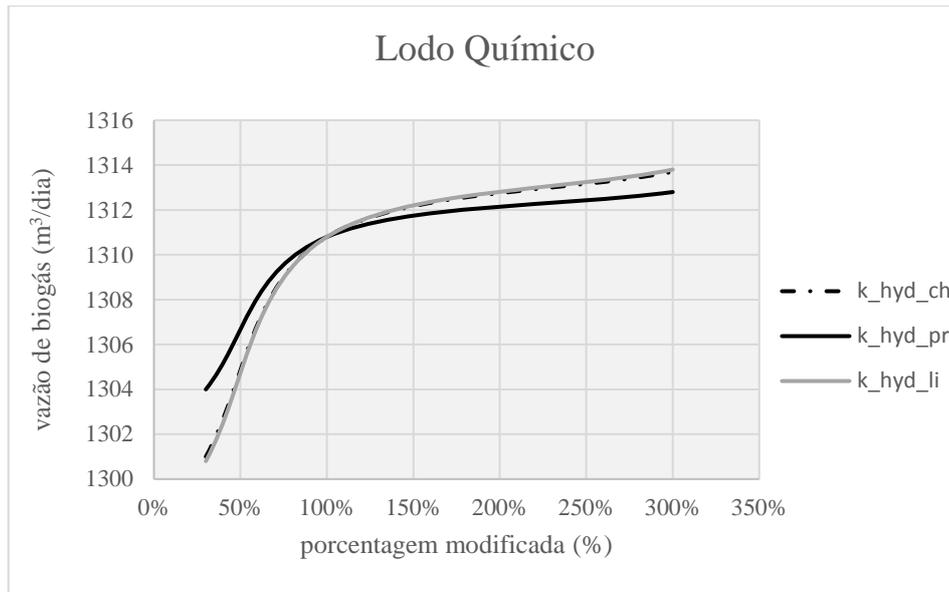


Figura 5.9 – Vazão de biogás em função da modificação dos valores das constantes cinéticas de 1ª ordem para processos de hidrólise de carboidratos, proteínas e lipídeos do lodo químico.

A partir dos resultados da simulação apresentados nas Figuras 5.7, 5.8 e 5.9, pode-se verificar que a constante cinética de primeira ordem da hidrólise da proteína ($k_{hid,pr}$) não alterou de forma significativa a produção de biogás. Esse comportamento pode estar relacionado ao elevado peso molecular das proteínas, que mesmo no processo de aumentar ou diminuir o valor da constante, a variação no fluxo de biogás não será tão expressiva. O comportamento diferenciado da constante cinética de primeira ordem da hidrólise do carboidrato ($k_{hid,ch}$) no lodo primário pode ser um reflexo dos diferentes tamanhos assumidos por este tipo de molécula.

6 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Os resultados obtidos pela utilização do modelo ADM1 para prever, através de simulações, a produção do biogás derivado da digestão anaeróbia de lodos de esgoto gerado na Estação de Tratamento de Esgoto Brasília Sul apresentou coerência em relação ao esperado. Uma vez que a produção de biogás está relacionada proporcionalmente a quantidades de componentes presentes no lodo de esgoto, as simulações de lodos com elevadas concentrações iniciais de compostos apresentaram maiores valores de biogás produzido, confirmando, assim, a coerência entre os resultados esperados e os simulados.

Em adição, a avaliação do comportamento do ADM1 para diferentes cenários gerados a partir da variação dos valores de vazões do modelo também obteve respostas satisfatórias e mostrou que modelo representa de forma coerente a produção de biogás a partir da variação da vazão de entrada do lodo, ou seja, quanto maior a vazão, maior a produção de biogás.

Dentre as simulações realizadas com suas respectivas alterações, o lodo primário obteve a maior quantidade de fluxo de biogás, seguido pelo lodo biológico e químico.

Pode-se inferir também que dos parâmetros cinéticos testados, a constante cinética de primeira ordem para processos de desintegração é a mais sensível. Em outras palavras, esta constante afeta de forma significativa e proporcional, se alterada, a produção do biogás. Com isso, pode-se concluir, que este parâmetro necessita de atenção especial na manutenção da operação do biorreator.

Recomenda-se, para trabalhos futuros, que um ajuste do modelo ADM1 a um conjunto de dados experimentais deve ser realizado e a análise de sensibilidade ser feita para os diversos valores iniciais e parâmetros do modelo. Em seguida, os parâmetros selecionados deverão ser modificados na análise de sensibilidade até o melhor valor ser encontrado. Pois a precisão dos valores da produção de biogás com os valores reais será assegurada, segundo trabalhos da literatura desenvolvidos por Silva (2015) e Chen *et al.* (2016), a partir de uma otimização dos parâmetros do modelo.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

APHA, AWWA, WEF (2005). *Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater*. 21ª ed. Washington, D.C., USA.

Andrews, J. F. (1969). “Dynamic Model of the Anaerobic Digestion Process”. *Journal of the Sanitary Engineering Division*, **21**(1), 95-116.

Batista, L.F. (2015). *Lodos gerados nas estações de tratamento de esgotos no Distrito Federal: um estudo de sua aptidão para o condicionamento, utilização e disposição*. Dissertação de Mestrado, Universidade de Brasília, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Brasília, DF, 197p.

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

Batstone, D. J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhny, S. V., Pavlostathis, S. G., Rozzi, A., Sanders, W. T. M., Siegrist, H., Vavilin, V. A. (2002b). “The IWA Anaerobic digestion model nº 1 (ADM1)”. *Water Science & Technology*, **45**(10), 65-73.

Campos, J. R. (1999). *Tratamento de esgoto sanitários por processo anaeróbio e disposição controlada no solo*. Projeto PROSAB – ABES. Rio de Janeiro, 464p.

CENSO Demográfico 2010 (2011). *Características da população e dos domicílios: resultados do universo*. IBGE, Rio de Janeiro, Brasil.

Chen, X., Chen, Z., Wang, X., Huo, C., Hu, C., Xiao, B., Hu, M. (2016). “Application of ADM1 for modeling of biogas production from anaerobic digestion of *Hydrilla verticillata*.” *Bioresource Technology*. **211**, 101-107.

Chernicharo, Carlos Augusto de Lemos (1997). *Reatores anaeróbios*. Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental – UFMG, Belo Horizonte, Brasil, 380p.

- Eastman, J., Ferguson, J. (1981). “Solubilization of Particulate Organic-Carbon During the Acid Phase of Anaerobic-Digestion”. *Journal Water Pollution Control Federation*, **53**(3), 352-366.
- García-Diéguez, C., Bernard, O., Roca, E. (2013). “Reducing the Anaerobic Digestion Model No. 1 for its application to an industrial wastewater treatment plant treating winery effluent wastewater. *Bioresource technology*, **132**, 244-253.
- Girault, R., Bridoux, G., Nauleau, F., Poullain, C., Buffet, J., Steyer J., Sadowski, A. G., Béline, F. (2012). “A waste characterisation procedure for ADM1 implementation based on degradation kinetics”. *Water Research*, **46**(13), 4099-4110.
- Jeong, H. S., Suh, C. W., Lim, J. L., Lee, S. H., Shin, H. S. (2005). “Analysis and application of ADM1 for anaerobic methane production”. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, **27**(2), 81-89.
- Jordão, E.P. e Pessoa, C.A. (2005). *Tratamento de Esgoto Doméstico*, 4° ed, Rio de Janeiro: SERAC.
- Jorgensen, S. E., Fath, B. D. (2011). *Fundamentals of Ecological Modelling: applications in environmental management and research*. Elsevier, Oxford, UK, 385p.
- Lettinga, G., Hulshof Pol, L.W., Zeeman, G. (1996). *Biological Wastewater Treatment. Part I: Anaerobic wastewater treatment*. Lecture Notes. Wageningen Agricultural University, ed. January.
- Khandan, N. N. (2001). *Modeling tools for environmental engineers and scientists*. CRC Press, U.S.A., 301p.
- Kleerebezem, R. e van Loosdrecht, M.C.M. (2006). “Critical analysis of some concepts proposed in ADM1.” *Water Science & Technology*, **54**(4), 51 – 57.

- Levenspiel, Octave (2000). *Engenharia das reações químicas*. Editora Edgard Blücher, São Paulo, Brasil, 587p.
- McCarty, Perry (1964). “Anaerobic Waste Treatment Fundamentals”. *Public Works*, **95**(11), 95-99.
- Metcalf & Eddy (2016). *Tratamento de efluentes e recuperação de recursos*. 5ª ed. McGraw Hill Brasil, 2008p.
- Monod, J. (1949). “The Growth of Bacterial Cultures”. *Annual Review of Microbiology*, **3**, 371-394.
- Orlob, G. T. (1983). *Mathematical modeling of water quality: streams, lakes, and reservoirs*. John Wiley & Sons, California, U.S.A., 551p.
- Siegrist, H., Vogt, D., Garcia-Heras, J., Gujer, W., (2002). “Mathematical model for meso and thermophilic anaerobic sewage sludge digestion”. *Environmental Science and Technology*, **36**(5), 1113-1123.
- Silva, C. E. P. M. (2015). *Modelagem matemática e simulação da remoção simultânea de carbono e nitrogênio em reator anaeróbio-anóxico: uma aplicação do ADMI*. Dissertação de Doutorado, Universidade Federal da Bahia, Escola Politécnica, Salvador, BA, 139p.
- Vieira, G. C. (2016). “Otimização da digestão anaeróbia de lodos gerados na Estação de Tratamento de Esgoto Brasília Sul: estudo em escala de bancada”. Seminário 2, Universidade de Brasília, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Brasília, DF, 39p.
- Wainwright, John e Mulligan, Mark (2004). *Environmental Modelling: finding simplicity in complexity*. John Miley & Sons, West Sussex, Inglaterra, 397p.
- Wichern, W., Gehring, T., Fischer, K., Andrade, D., Lübken, M., Koch, K., Gronauer, A., Horn, H. (2009). “Monofermentatio of grass silage under mesophilic conditions:

measurements and mathematical modeling with ADM1.” *Bioresource Technology*, **100**(4), 1675 - 1681.

Wang, Q., Noguchi, C., Kuninobu, M., Hara, Y., Kakimoto, K., Ogawa, H., Kato, Y., (1997). “Influence of hydraulic retention time on anaerobic digestion of pretreated Sludge”. *Bioresource Technology*, **11**(2), 105–108.

Water Environment Federation (2008). *Operation of municipal wastewater treatment plants: manual of practice n°11*. Volume I, Mc Graw Hill, Nova York, U.S.A.

Yasui H., Goel R., Li Y. Y., Noike T. (2008). “Modified ADM1 structure for modelling municipal primary sludge hydrolysis”. *Water Research*, **42**(1-2), 249 - 259.

APÊNDICE

Parâmetros	Valores
f_sI_xc	0,1
f_xI_xc	0,2
f_ch_xc	0,2
f_pr_xc	0,2
f_li_xc	0,3
N_xc	0,002685 71
N_I	0,004285 71
N_aa	0,007
C_xc	0,0279
C_sI	0,03
C_ch	0,0313
C_pr	0,03
C_li	0,022
C_xI	0,03
C_su	0,03125
C_aa	0,03
C_fa	0,0217
C_bu	0,025
C_pro	0,026785 71
C_ac	0,03125
C_bac	0,0313
C_va	0,024038 46
C_ch4	0,015625
f_fa_li	0,95
f_h2_su	0,19055
f_bu_su	0,1328
f_pro_su	0,2691
f_ac_su	0,40755
f_h2_aa	0,06
f_va_aa	0,23
f_bu_aa	0,26
f_pro_aa	0,05
f_ac_aa	0,4
N_bac	0,005714 29
pH_UL_h2	6

Parâmetros	Valores
pH_LL_h2	5
pH_UL_ac	7
pH_LL_ac	6
pH_UL_aa	5,5
pH_LL_aa	4
Y_su	0,1
Y_aa	0,08
Y_fa	0,06
Y_c4	0,06
Y_pro	0,04
Y_ac	0,05
Y_h2	0,06
K_S_IN	0,0001
K_S_su	0,5
K_S_aa	0,3
K_S_fa	0,4
K_Ih2_fa	5,00E-06
K_S_c4	0,2
K_Ih2_c4	1,00E-05
K_S_pro	0,1
K_Ih2_pro	3,50E-06
K_S_ac	0,15
K_I_nh3	0,0018
K_S_h2	7,00E-06
K_H_h2o_base	0,0313
K_H_co2_base	0,035
K_H_ch4_base	0,0014
K_H_h2_base	0,00078
k_dis	0,5
k_hyd_ch	10
k_hyd_pr	10
k_hyd_li	10
k_m_su	30
k_m_aa	50
k_A_Bva	1E+10
k_A_Bbu	1E+10

Parâmetros	Valores
k_A_Bpro	1E+10
k_A_Bac	1E+10
k_A_Bco2	1E+10
k_A_BIN	1E+10
k_m_fa	6
k_m_c4	20
k_m_pro	13
k_m_ac	8
k_m_h2	35
k_P	50000
k_dec_Xsu	0,02
k_dec_Xaa	0,02
k_dec_Xfa	0,02
k_dec_Xc4	0,02
k_dec_Xpro	0,02
k_dec_Xac	0,02
k_dec_Xh2	0,02
R	0,083145
T_base	298,15
Top	308,15
pKa_h2o	14
pK_w_base	14
p_va_base	4,86
pK_a_bu_base	4,84
pK_a_pro_base	4,88
pK_a_ac_base	4,76
pK_a_co2_base	6,35
pK_a_IN_base	9,25
K_a_va	1,38E-05
K_a_bu	1,44E-05
K_a_pro	1,32E-05
K_a_ac	1,74E-05
K_a_co2	4,94E-07
P_atm	1,013
kLa	200