REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

MODELAGEM CINÉTICA DETERMINÍSTICA DA DESINFECÇÃO DE EFLUENTE ANAERÓBIO UTILIZANDO PERÓXIDO DE HIDROGÊNIO E ÁCIDO PERACÉTICO NO SISTEMA REAQUA, EMBRAPA HORTALIÇAS (DF)

DETERMINISTIC KINETIC MODELING OF ANAEROBIC EFFLUENT DISINFECTION USING HYDROGEN PEROXIDE AND PERACETIC ACID AT THE REAQUA SYSTEM, EMBRAPA HORTALIÇAS (DF)

MODELADO CINÉTICO DETERMINISTA DE LA DESINFECCIÓN DE EFLUENTE ANAEROBIO UTILIZANDO PERÓXIDO DE HIDRÓGENO Y ÁCIDO PERACÉTICO EN EL SISTEMA REAQUA, EMBRAPA HORTALIÇAS (DF)

Vinícius Pereira Freire[1] , Martha de Almeida Prado Montenegro[2]

e747514
https://doi.org/10.47820/recima21.v7i4.7514

PUBLICADO: 04/2026

RESUMO

O reúso agrícola de efluentes requer controle microbiológico rigoroso, demandando tecnologias que conciliem eficiência sanitária e segurança ambiental. Efluentes provenientes de sistemas anaeróbios, embora apresentem remoção significativa de matéria orgânica, mantêm concentrações relevantes de microrganismos indicadores, o que exige etapas complementares de desinfecção. Neste estudo, realizou-se a modelagem determinística da cinética de desinfecção utilizando peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e ácido peracético (PAA), com base nos modelos clássicos de Chick–Watson, Hom e Collins–Selleck. A abordagem adotada é exclusivamente computacional, fundamentada em parâmetros cinéticos extraídos da literatura, não se configurando como validação experimental. As equações diferenciais foram resolvidas numericamente em ambiente MATLAB R2024b, considerando variações de temperatura (10–40 °C) e pH (4–9). A análise de sensibilidade permitiu avaliar a influência das variáveis operacionais sobre a eficiência de inativação microbiana. Os resultados indicaram reduções superiores a 2,5 log em condições ótimas (pH próximo de 5,0 e temperatura de 30 °C), evidenciando comportamento sinérgico entre H_2O_2 e PAA. A temperatura influenciou diretamente a constante cinética, conforme a equação de Arrhenius, enquanto o pH afetou a especiação química do PAA. O coeficiente de determinação (R^2) foi utilizado como métrica de aderência entre os cenários simulados, sendo interpretado como indicador comparativo entre modelos. Conclui-se que a modelagem apresenta aplicabilidade para análise preditiva e suporte ao dimensionamento de sistemas descentralizados de desinfecção voltados ao reúso agrícola.

PALAVRAS-CHAVE: Desinfecção. Modelagem cinética. Peróxido de hidrogênio. Ácido peracético. Reúso agrícola.

ABSTRACT

Agricultural reuse of treated wastewater requires strict microbiological control, demanding disinfection technologies that ensure both sanitary efficiency and environmental safety. Anaerobic effluents, although effective in organic matter removal, still contain significant concentrations of microbial indicators, requiring complementary disinfection processes. This study presents a deterministic kinetic modeling approach for disinfection using hydrogen peroxide (H_2O_2) and peracetic acid (PAA), based on the classical Chick–Watson, Hom, and Collins–Selleck models. The approach is exclusively computational, relying on kinetic parameters obtained from the literature, and does not represent experimental validation. The differential equations were numerically solved

[1] Especialização em Gerenciamento Ambiental – Instituto Federal de Brasília (IFB).
[2] Doutora orientadora.

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

in MATLAB R2024b, considering temperature (10–40 °C) and pH (4–9) variations. Sensitivity analysis was performed to evaluate the influence of operational variables on microbial inactivation efficiency. Results indicated reductions exceeding 2.5 log under optimal conditions (pH ≈ 5.0 and temperature ≈ 30 °C), highlighting a synergistic effect between H_2O_2 and PAA. Temperature directly affected the kinetic constant according to the Arrhenius equation, while pH influenced PAA chemical speciation. Model fit was evaluated using the coefficient of determination (R^2), interpreted as a comparative indicator among simulated scenarios. The results demonstrate that deterministic modeling is a useful predictive tool to support the design of decentralized disinfection systems for agricultural reuse.

***KEYWORDS**: Disinfection. Kinetic modeling. Advanced oxidation processes. Agricultural reuse.*

RESUMEN
La reutilización agrícola de efluentes tratados exige un control microbiológico riguroso, requiriendo tecnologías de desinfección que garanticen eficiencia sanitaria y seguridad ambiental. Los efluentes anaerobios, aunque presentan una remoción significativa de materia orgánica, mantienen concentraciones relevantes de microorganismos indicadores, lo que hace necesaria una etapa complementaria de desinfección. En este estudio se realizó la modelización determinista de la cinética de desinfección utilizando peróxido de hidrógeno (H_2O_2) y ácido peracético (PAA), con base en los modelos clásicos de Chick–Watson, Hom y Collins–Selleck. El enfoque es exclusivamente computacional, fundamentado en parámetros cinéticos obtenidos de la literatura, y no constituye validación experimental. Las ecuaciones diferenciales fueron resueltas numéricamente en MATLAB R2024b, considerando variaciones de temperatura (10–40 °C) y pH (4–9). El análisis de sensibilidad permitió evaluar la influencia de las variables operacionales sobre la eficiencia de inactivación microbiana. Los resultados indicaron reducciones superiores a 2,5 log en condiciones óptimas (pH ≈ 5,0 y temperatura ≈ 30 °C), evidenciando un comportamiento sinérgico entre H_2O_2 y PAA. La temperatura influyó directamente en la constante cinética, de acuerdo con la ecuación de Arrhenius, mientras que el pH afectó la especiación química del PAA. El coeficiente de determinación (R^2) fue utilizado como indicador comparativo entre los escenarios simulados. Se concluye que la modelización determinista constituye una herramienta predictiva útil para el dimensionamiento de sistemas descentralizados de desinfección para reúso agrícola.

***PALABRAS CLAVE**: Desinfección. Modelado cinético. Peróxido de hidrógeno. Ácido peracético. Reúso agrícola.,*

1. INTRODUÇÃO

A desinfecção constitui etapa fundamental no tratamento de águas residuárias, sendo responsável pela redução da carga microbiológica e pela mitigação de riscos associados ao lançamento em corpos hídricos ou ao reúso agrícola. Em sistemas baseados em reatores anaeróbios, amplamente utilizados em contextos descentralizados devido à sua eficiência na remoção de matéria orgânica e baixo consumo energético, observa-se, entretanto, limitada capacidade de remoção de microrganismos patogênicos, especialmente coliformes termotolerantes, o que torna necessária a adoção de processos complementares de desinfecção (Chernicharo, 2007).

No cenário brasileiro, caracterizado por pressões crescentes sobre os recursos hídricos e pela necessidade de ampliação de práticas sustentáveis, o reúso agrícola de efluentes tratados tem se consolidado como alternativa estratégica para a conservação de mananciais e otimização do

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

uso da água. No Distrito Federal, essa abordagem assume relevância adicional em virtude da sazonalidade climática e da concentração de atividades agrícolas em áreas experimentais, como aquelas desenvolvidas na Embrapa Hortaliças, onde sistemas descentralizados de tratamento e reúso são empregados para suporte à produção vegetal.

Historicamente, a cloração tem sido o método mais difundido para desinfecção de efluentes. Contudo, a formação de subprodutos organoclorados potencialmente tóxicos, como trihalometanos, tem limitado sua aplicação em sistemas destinados ao reúso agrícola, especialmente em culturas alimentares. Nesse contexto, oxidantes alternativos, como o peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e o ácido peracético (PAA), têm sido amplamente investigados devido à sua elevada capacidade oxidativa e à formação de subprodutos ambientalmente menos impactantes, como água, oxigênio e ácido acético (Koivunen; Heinonen-Tanski, 2005; AHN *et al.,* 2020). Além disso, estudos recentes indicam que a aplicação combinada desses oxidantes pode promover efeitos sinérgicos, aumentando a eficiência da inativação microbiana e reduzindo o tempo necessário para atingir padrões sanitários (Kistler *et al.,* 2020; Santos *et al.,* 2022).

A Estação de Tratamento de Efluentes ReAqua, localizada na Embrapa Hortaliças (DF), representa um sistema descentralizado com características operacionais particulares, recebendo efluentes de origem predominantemente doméstica e laboratorial. Após tratamento anaeróbio, o efluente apresenta redução significativa de carga orgânica, porém mantém concentrações microbiológicas incompatíveis com o reúso direto, exigindo a implementação de uma etapa de desinfecção eficiente (Lima *et al.,* 2024). A variabilidade da composição do efluente, associada à natureza híbrida da matriz (doméstica e laboratorial), impõe desafios adicionais ao dimensionamento e à operação de sistemas de desinfecção.

Apesar da ampla disponibilidade de estudos experimentais sobre processos oxidativos aplicados à desinfecção, observa-se uma lacuna na literatura no que se refere à aplicação de modelos cinéticos clássicos em sistemas reais descentralizados, especialmente em efluentes com características híbridas. A maioria dos parâmetros cinéticos disponíveis é obtida em condições laboratoriais controladas, o que limita sua extrapolação direta para cenários operacionais mais complexos. Nesse sentido, a modelagem matemática surge como ferramenta relevante para a análise preditiva do comportamento de sistemas de desinfecção, permitindo a avaliação de múltiplos cenários operacionais sem a necessidade de experimentação extensiva.

Diante desse contexto, o presente estudo tem como objetivo realizar a modelagem determinística da cinética de desinfecção de efluente anaeróbio da ETE ReAqua – Embrapa Hortaliças (DF), utilizando peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e ácido peracético (PAA), com base nos modelos de Chick–Watson, Hom e Collins–Selleck. A abordagem adotada é exclusivamente computacional, fundamentada em parâmetros cinéticos obtidos na literatura, e visa avaliar o comportamento do sistema sob diferentes condições operacionais de temperatura, pH e

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

concentração de oxidantes. Adicionalmente, busca-se analisar a sensibilidade do modelo às variáveis envolvidas, contribuindo para o suporte ao dimensionamento de sistemas descentralizados de desinfecção em conformidade com a Resolução CONAMA nº 430/2011 e com as diretrizes para reúso agrícola estabelecidas pela Resolução CONAMA nº 54/2005.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1. Desinfecção de efluentes anaeróbios

A desinfecção de efluentes tratados constitui etapa essencial para a redução de microrganismos patogênicos, especialmente em sistemas destinados ao reúso agrícola. Em reatores anaeróbios, embora haja elevada eficiência na remoção de matéria orgânica, a redução microbiológica é limitada, uma vez que tais sistemas não são projetados para a inativação de patógenos (CHERNICHARO, 2007). Dessa forma, a adoção de processos complementares de desinfecção torna-se indispensável para o atendimento a padrões sanitários estabelecidos por normativas ambientais.

No contexto do reúso agrícola, a eficiência da desinfecção deve ser avaliada não apenas em termos de remoção microbiológica, mas também considerando a formação de subprodutos e possíveis impactos ambientais. A cloração, apesar de amplamente utilizada, apresenta limitações associadas à formação de subprodutos halogenados potencialmente tóxicos, como trihalometanos e ácidos haloacéticos (Metcalf; Eddy, 2016). Essa limitação tem impulsionado a busca por oxidantes alternativos com menor impacto ambiental.

2.2. Oxidantes alternativos: peróxido de hidrogênio e ácido peracético

O peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e o ácido peracético (PAA) têm sido amplamente investigados como agentes desinfetantes devido à sua elevada capacidade oxidativa e à formação de subprodutos ambientalmente compatíveis. O H_2O_2 atua por meio da geração de espécies reativas de oxigênio, promovendo danos às membranas celulares, proteínas e material genético dos microrganismos (Kang *et al.,* 2018). Entretanto, sua eficiência isolada pode ser limitada em função da ausência de mecanismos catalíticos ou ativadores.

O PAA, por sua vez, apresenta elevada reatividade e estabilidade em diferentes condições operacionais, sendo eficaz na inativação de bactérias, vírus e protozoários. Sua decomposição resulta principalmente em ácido acético, oxigênio e água, reduzindo riscos de formação de subprodutos tóxicos (Kitis, 2004). Além disso, o PAA mantém eficiência em ampla faixa de pH, característica relevante para aplicações em efluentes com variabilidade química.

Estudos recentes indicam que a aplicação combinada de H_2O_2 e PAA pode resultar em efeito sinérgico, potencializando a geração de espécies oxidantes e aumentando a eficiência da desinfecção (AHN *et al.,* 2020; Santos *et al.,* 2022). Esse comportamento está associado à

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

interação entre os oxidantes e às condições operacionais do sistema, como pH, temperatura e tempo de contato.

2.3. Modelagem cinética da desinfecção

A inativação de microrganismos durante o processo de desinfecção é comumente descrita por modelos cinéticos que correlacionam a concentração do desinfetante, o tempo de contato e a fração sobrevivente da população microbiana. Nesse contexto, a modelagem cinética constitui ferramenta amplamente utilizada para descrever o comportamento de processos de desinfecção e prever a eficiência de inativação microbiana em diferentes condições operacionais. Modelos clássicos, como Chick–Watson, Hom e Collins–Selleck, têm sido aplicados para representar a relação entre concentração de desinfetante, tempo de contato e redução microbiológica (White, 2010).

O modelo de Chick–Watson baseia-se na hipótese de que a taxa de inativação microbiana é proporcional à concentração do agente desinfetante e ao número de microrganismos presentes. O modelo de Hom introduz maior flexibilidade ao considerar expoentes empíricos para concentração e tempo, permitindo melhor ajuste a diferentes sistemas. Já o modelo de Collins–Selleck incorpora efeitos adicionais relacionados à resistência microbiana e à variabilidade do processo, sendo particularmente útil em sistemas mais complexos.

A aplicação desses modelos em estudos computacionais permite a simulação de diferentes cenários operacionais, possibilitando a avaliação de variáveis como pH, temperatura e concentração de oxidantes sem a necessidade de experimentação extensiva. Essa abordagem é especialmente relevante em sistemas descentralizados, nos quais a variabilidade das condições operacionais pode influenciar significativamente a eficiência da desinfecção.

Tabela 1. Síntese dos principais parâmetros normativos aplicáveis à desinfecção de efluentes

Legislação	**Escopo principal**	**Parâmetros de interesse**	**Limite estabelecido**
CONAMA nº 430/2011	Lançamento de efluentes	Coliformes termotolerantes	≤ 1.000 NMP/100 mL
CONAMA nº 54/2005	Reúso não potável	Coliformes termotolerantes	≤ 200 NMP/100 mL

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

PNMA (Lei 6.938/1981)	Gestão ambiental	fluentes e resíduos	Exigência de controle e licenciamento
PNRH (Lei 9.433/1997)	Gestão hídrica	Outorga enquadramento	Qualidade compatível com classe do corpo hídrico

Fonte: Adaptado de CONAMA (2005; 2011); Brasil (1981; 1997).

A síntese dos principais marcos regulatórios aplicáveis à desinfecção de efluentes, apresentada na tabela 1, estabelece os limites e diretrizes que orientam o controle microbiológico e o licenciamento ambiental de sistemas de tratamento. No contexto da ETE ReAqua — Embrapa Hortaliças (DF), tais parâmetros normativos fundamentam o dimensionamento e a avaliação de desempenho do processo de desinfecção, cuja configuração operacional encontra-se esquematicamente representada na Figura 1.

Figura 1. Esquema ilustrativo do sistema de desinfecção da ETE ReAqua – Embrapa Hortaliças (DF)



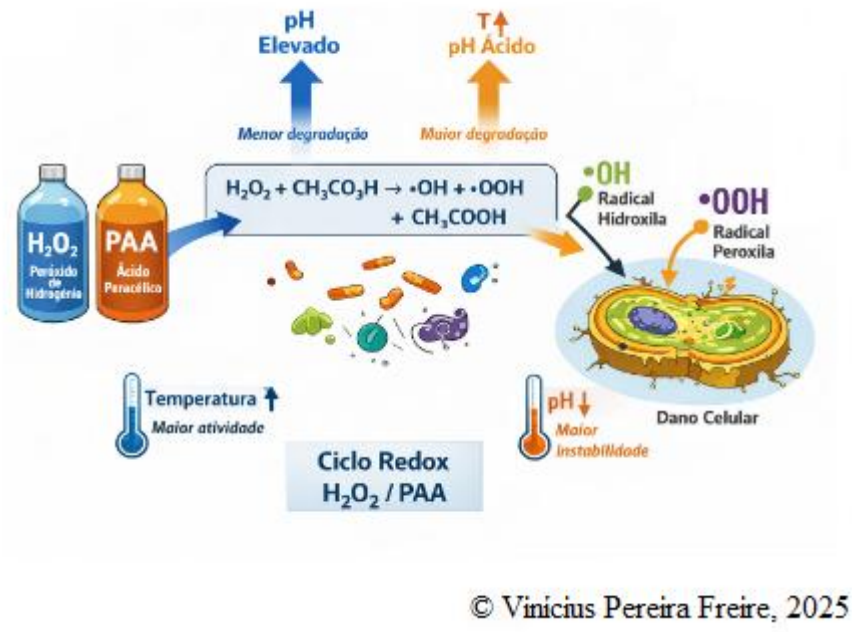
Fonte: Elaborado pelo autor, (2025).

O esquema ilustra as etapas que compõem o sistema, desde o tratamento preliminar até a unidade de desinfecção por oxidantes avançados, evidenciando a integração entre os requisitos legais e a infraestrutura tecnológica adotada para assegurar a qualidade do efluente destinado ao reúso agrícola controlado (Brasil, 1981; Brasil, 1997; Conama, 2005; Conama, 2011; Lima *et al.,* 2024).

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

A declividade mantida entre os reservatórios que compõem a ETE não deve exceder 0,5%, conforme estabelecido por Lima *et al.,* (2024), garantindo assim as condições hidráulicas adequadas para o escoamento por gravidade ao longo do sistema. A arquitetura operacional da ETE ReAqua, institui o suporte físico para a aplicação controlada dos oxidantes sobre o efluente anaeróbio. No plano molecular, contudo, a eficácia do processo é determinada por reações de oxirredução cuja dinâmica se encontra esquematizada na Figura 2.

Figura 2. Ciclo redox H_2O_2 / PAA e danos celulares



Fonte: Elaborado pelo autor, (2025).

O esquema representa a geração sequencial de radicais hidroxila (•OH) e peroxila (•OOH), espécies reativas de oxigênio responsáveis pelo ataque oxidativo a componentes celulares essenciais como; lipídios de membrana, proteínas e ácidos nucleicos, culminando na perda de viabilidade dos microrganismos alvo (Gogate; Pandit, 2011; Kistler *et al.,* 2020). Ademais, a figura evidencia a influência moduladora do pH e da temperatura sobre a estabilidade das espécies oxidantes, parâmetros cuja variação pode deslocar o equilíbrio químico e, consequentemente, alterar a eficiência global do processo, conforme preconizado pelos modelos cinéticos de Hom e Chick–Watson (Hom, 1972; Wagner; Hartmann; Lange, 2002). Assim, a transição do plano operacional para o molecular revela a intrínseca interdependência entre engenharia sanitária e química dos processos oxidativos na consecução dos objetivos de qualidade e segurança ambiental.

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

2.4. Influência de variáveis operacionais

A eficiência dos processos de desinfecção é fortemente influenciada por variáveis operacionais, entre as quais se destacam o pH, a temperatura e o produto concentração-tempo (CT). A temperatura afeta diretamente a constante cinética das reações, podendo ser descrita pela equação de Arrhenius, na qual o aumento da temperatura resulta em maior velocidade de reação (Levenspiel, 1999).

O pH, por sua vez, influencia a especiação química dos oxidantes, especialmente no caso do ácido peracético, podendo alterar sua reatividade e estabilidade. Em faixas de pH mais ácidas, observa-se maior eficiência na inativação microbiana, em função da predominância de espécies mais reativas (Kitis, 2004).

O produto CT, definido como o produto entre a concentração do desinfetante e o tempo de contato, constitui parâmetro amplamente utilizado para avaliação da eficiência de desinfecção. Valores mais elevados de CT estão associados a maiores níveis de inativação microbiana, embora sua interpretação deva considerar as características específicas do sistema e do agente desinfetante (White, 2010).

3. MÉTODOS

O presente trabalho caracteriza-se como estudo de modelagem determinística aplicada, fundamentado em parâmetros cinéticos secundários extraídos da literatura especializada. Não se trata de investigação experimental com replicação amostral, mas de simulação matemática voltada à avaliação preditiva do comportamento microbiológico em cenário representativo de operação. A abordagem adotada permite a exploração de múltiplos cenários por meio de análise de sensibilidade paramétrica, possibilitando avaliar a influência das constantes cinéticas e do produto concentração-tempo (CT) na eficiência da inativação microbiana.

A implementação computacional foi realizada em ambiente MATLAB R2024b, utilizando rotinas para integração numérica com tolerância de erro absoluto de 1×10^{-6} e passo adaptativo, assegurando estabilidade e precisão na resolução das equações diferenciais ordinárias associadas aos modelos cinéticos. O método de Runge–Kutta de quarta ordem (ode45) foi empregado como algoritmo principal, em função de sua eficiência computacional e controle de erro local. Para condições com indícios de rigidez numérica, especialmente em cenários de elevada concentração de oxidantes ou tempos de contato prolongados, utilizou-se complementarmente o solver (ode15s), baseado em métodos implícitos de diferenciação.

Os coeficientes cinéticos foram selecionados com base em faixas reportadas na literatura (AHN *et al.,* 2020; Gehr *et al.,* 2022), considerando condições operacionais compatíveis com sistemas de tratamento anaeróbio, com temperatura média de referência de 25 °C e pH entre 7,0 e 7,2. Para avaliação da influência das variáveis operacionais, realizou-se varredura paramétrica nos

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

intervalos de 10 °C a 40 °C (incrementos de 2 °C) e pH de 4 a 9 (incrementos de 0,5 unidades), resultando em 176 cenários simulados por modelo cinético. Embora 176 cenários tenham sido simulados, o presente artigo discute apenas os casos representativos de interesse prático, selecionados para ilustrar a influência das variáveis operacionais sobre a eficiência da inativação microbiana.

3.1. Modelo de Chick- Watson

O modelo de Chick–Watson foi utilizado para descrever a cinética de inativação microbiana em função da concentração do desinfetante e do tempo de contato, sendo representado por uma equação diferencial de primeira ordem generalizada: $dN/dt = -k \cdot C^n \cdot N$ em que N corresponde à concentração de microrganismos viáveis, C à concentração do desinfetante, k à constante cinética e n à ordem da reação em relação ao agente oxidante.

A integração da equação diferencial resulta em uma relação logarítmica entre a concentração microbiana e o produto concentração-tempo (CT), parâmetro amplamente empregado no dimensionamento de sistemas de desinfecção (USEPA, 1999).

No contexto das simulações realizadas, o modelo foi aplicado como representação da fase inicial de inativação microbiana, assumindo condições de mistura homogênea e ausência de limitações difusionais significativas. Ressalta-se que a presença de matéria orgânica residual pode influenciar os parâmetros cinéticos, sendo essa variabilidade considerada na análise de sensibilidade (Rigobelo *et al.,* 2017).

3.2. Modelo de Hom

O modelo de Hom introduz uma modificação empírica à relação entre inativação microbiana, concentração do desinfetante e tempo de contato, sendo representado por uma forma generalizada do modelo de Chick–Watson, com inclusão de um expoente associado ao tempo: $dN/dt = -k \cdot C^n \cdot t^m \cdot N$ em que m corresponde ao expoente empírico relacionado ao tempo de exposição. Para valores de m = 1, o modelo reduz-se à forma clássica de Chick–Watson.

Esse modelo permite representar comportamentos não lineares da inativação microbiana ao longo do tempo, sendo particularmente útil em sistemas nos quais há redução progressiva da eficiência do desinfetante, como em condições de decomposição do agente oxidante ou consumo por matéria orgânica presente no meio (AHN *et al.,* 2020).

3.3. Modelo de Collins-Selleck

O modelo de Collins–Selleck foi empregado para representar a cinética de inativação microbiana em sistemas nos quais se observa comportamento não linear ao longo do tempo, especialmente em função da redução progressiva da eficiência do desinfetante. Sua formulação incorpora um parâmetro empírico associado ao decaimento da atividade do agente oxidante: dN/dt

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

= −k·Cⁿ·e^(−βt)·N em que β representa o coeficiente de decaimento da eficiência do desinfetante ao longo do tempo, associado ao consumo por reações paralelas com matéria orgânica e outros constituintes do meio.

Esse modelo é particularmente adequado para efluentes provenientes de sistemas anaeróbios, nos quais a presença de matéria orgânica residual pode influenciar significativamente a disponibilidade do desinfetante. Em tais condições, a demanda química de oxigênio (DQO) remanescente pode atuar como fator limitante da eficiência de inativação microbiana (Pereira; Silva; Mancuso, 2022).

3.4. Modelo de Chick Modificado para Reações Paralelas

Em sistemas de desinfecção nos quais se observa heterogeneidade na resistência microbiana, a cinética de inativação pode ser representada pela superposição de duas reações paralelas, associadas a subpopulações com diferentes níveis de suscetibilidade ao desinfetante.

Nessa abordagem, a concentração microbiana total é descrita como: $N = N_0 [f \cdot e^{(-k_1 t)} + (1 - f) \cdot e^{(-k_2 t)}]$ em que f representa a fração da população mais sensível, enquanto k_1 e k_2 correspondem às constantes de inativação das frações sensível e resistente, respectivamente.

Esse modelo permite descrever comportamentos caracterizados por uma fase inicial de rápida inativação seguida por uma etapa mais lenta, frequentemente associada à presença de microrganismos mais resistentes ou à redução da disponibilidade do agente oxidante. Tal abordagem é particularmente útil em cenários envolvendo combinações de oxidantes, nos quais podem ocorrer efeitos sinérgicos e dinâmicas distintas ao longo do tempo (Geldreich *et al.,* 2018).

3.5. Área de estudo: ETE ReAqua – Embrapa Hortaliças

A Estação de Tratamento de Efluentes (ETE ReAqua) está localizada na unidade da Embrapa Hortaliças, no Distrito Federal, sendo destinada ao tratamento de efluentes de origem predominantemente doméstica e laboratorial. O sistema apresenta características operacionais típicas de unidades descentralizadas, com variações na carga orgânica associadas às atividades experimentais desenvolvidas na instituição.

O tratamento é realizado por meio de etapas sequenciais que incluem pré-tratamento, tratamento anaeróbio, filtração e desinfecção. A etapa anaeróbia é composta por tanque séptico seguido de filtro anaeróbio de fluxo ascendente, enquanto o pós-tratamento envolve filtração em múltiplas camadas e etapa final de desinfecção.

A configuração híbrida do efluente, combinando características domésticas e laboratoriais, torna o sistema representativo para avaliação de processos de desinfecção com oxidantes alternativos, especialmente em cenários de reúso agrícola (EMBRAPA, 2023; Lima *et al.,* 2024).

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

3.6. Configuração de simulação

A modelagem foi estruturada com base em uma configuração hidráulica equivalente a um reator de contato contínuo, assumindo regime de escoamento pistonado e condições ideais de mistura, premissas amplamente adotadas em estudos de desinfecção em escala operacional.

As concentrações iniciais dos oxidantes foram definidas com base em faixas reportadas na literatura para processos de desinfecção com peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e ácido peracético (PAA), adotando-se valores de 5, 10, 25 e 50 mg·L^{-1} para H_2O_2 e 1, 5 e 10 mg·L^{-1} para PAA. O conjunto de simulações contemplou diferentes tempos de contato (5, 10, 20 e 30 minutos), permitindo a avaliação do comportamento cinético sob distintas condições operacionais.

As simulações foram conduzidas considerando condições de referência de temperatura de 25 °C e pH 7,2, representativas de sistemas de tratamento anaeróbio. Para análise de sensibilidade, foram avaliadas variações nos intervalos de 10 a 40 °C para temperatura e de pH 4 a 9, conforme descrito na seção metodológica correspondente.

Os resultados foram processados para obtenção da redução logarítmica da concentração microbiana (log N_0/N) e análise comparativa do desempenho dos modelos cinéticos, sem caráter de validação experimental direta.

4. RESULTADOS

Os resultados obtidos por meio da modelagem computacional em ambiente MATLAB R2024b permitiram avaliar o comportamento da inativação microbiana sob diferentes condições operacionais e para os distintos modelos cinéticos considerados. A eficiência de desinfecção foi expressa em termos de redução logarítmica da concentração de coliformes termotolerantes.

A Figura 1 apresenta a superfície de resposta associada à variação das concentrações de peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e ácido peracético (PAA), evidenciando o efeito combinado desses oxidantes sobre a redução microbiana.

4.1. Parâmetros cinéticos do sistema H_2O_2/PAA

Os parâmetros cinéticos adotados nas simulações foram selecionados com base em valores reportados na literatura para sistemas de desinfecção utilizando peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e ácido peracético (PAA). Esses parâmetros foram definidos considerando faixas típicas compatíveis com condições operacionais de tratamento de efluentes, com temperatura de referência de 25 °C e pH próximo da neutralidade.

A Tabela 1 apresenta os principais parâmetros cinéticos utilizados nos modelos, incluindo constantes de velocidade, ordens de reação e coeficientes empíricos associados aos diferentes modelos avaliados.

ISSN: 2675-6218 - RECIMA21
Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

Tabela 2. Parâmetros cinéticos adotados para os modelos de desinfecção com H_2O_2/PAA

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Faixa típica	Fonte
Constante de velocidade (Chick–Watson)	k	L mg^{-1} min^{-1}	0,15 – 0,45	AHN et al. (2020)
Ordem de reação (desinfetante)	n	-	0,8 – 1,2	HOM (1972)
Expoente de tempo (Hom)	m	-	0,7 – 1,0	RIGOBELO et al. (2017)
Parâmetro empírico (Collins–Selleck)	β	L mg^{-1} min^{-1}	0,05 – 0,15	PEREIRA; SILVA; MANCUSO (2022)
Fração microbiana sensível	f	-	0,6 – 0,8	GELDREICH et al. (2018)

Fonte: Elaborado pelo autor (2026), com base na literatura.

4.2. Análise de superfície de resposta

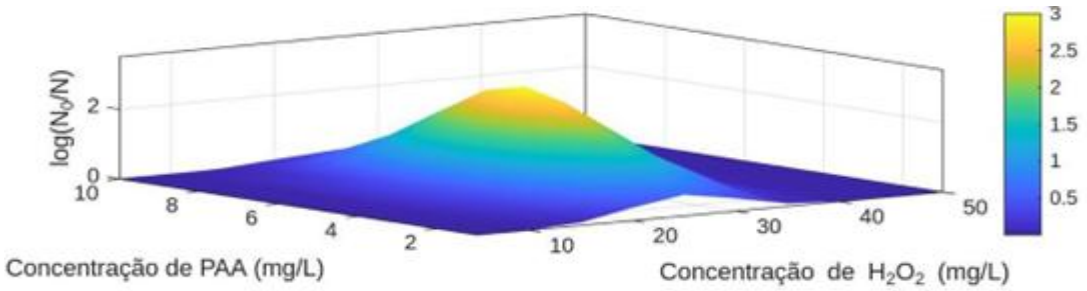
A simulação da cinética de desinfecção foi realizada utilizando scripts desenvolvidos em MATLAB R2024b, explorando o método de Runge–Kutta de quarta ordem (ode45) para integração das equações diferenciais. O Gráfico 1 ilustra o fluxo lógico da modelagem computacional.

A representação tridimensional ilustra a intrincada dinâmica sinérgica entre o peróxido de hidrogênio H_2O_2 e o ácido peracético (PAA), revelando que a eficiência da desinfecção não constitui uma função linear simples das concentrações isoladas. O algoritmo de modelagem delimita um ápice de eficácia em uma região específica de convergência; fora desse espectro ótimo, nota-se um platô de ineficiência relativa. Os parâmetros numéricos que sustentam essa distribuição espacial de eficiência, destacando as zonas de maior inativação logarítmica (2,5 a 3,0 log), podem ser observados na figura 3.

ISSN: 2675-6218 - RECIMA21
Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

Figura 3. Esquema do algoritmo de modelagem cinética da desinfecção H_2O_2 /PAA no MATLAB.



Fonte: Elaborado pelo autor, (2026).

O Gráfico 1 apresenta a superfície de resposta obtida a partir da simulação da desinfecção em função das concentrações de peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e ácido peracético (PAA).

Observa-se que a redução logarítmica da concentração de coliformes termotolerantes varia em função das combinações dos oxidantes, com valores mais elevados concentrados em uma região intermediária do domínio analisado. Os maiores níveis de inativação microbiana situam-se aproximadamente na faixa de 2,5 a 3,0 log, correspondendo às combinações de concentrações próximas a 20–30 mg·L^{-1} de H_2O_2 e 4–6 mg·L^{-1} de PAA.

Em concentrações mais baixas de ambos os oxidantes, a eficiência de desinfecção apresenta valores reduzidos, inferiores a 1,0 log. De forma semelhante, em concentrações mais elevadas, observa-se tendência de estabilização da resposta, com menores incrementos na eficiência de inativação. A distribuição da superfície indica variação não linear da resposta em relação às concentrações dos oxidantes, com gradientes distintos ao longo dos eixos de H_2O_2 e PAA.

4.3. Resultados da modelagem computacional

Os resultados obtidos foram comparados entre os modelos cinéticos de Chick–Watson, Hom e Collins–Selleck, conforme apresentado na Tabela 2.

Observa-se que os modelos apresentaram comportamentos distintos quanto à representação da inativação microbiana ao longo do tempo, refletindo diferenças nas formulações matemáticas adotadas. Os valores obtidos evidenciam variações na eficiência de desinfecção simulada, bem como na sensibilidade às condições operacionais analisadas.

ISSN: 2675-6218 - RECIMA21
Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

Tabela 3. Valores simulados de log(N_0 /N) para diferentes modelos cinéticos e condições operacionais

H_2O_2 (mgL^{-1})	PAA (L^{-1})	Tempo (min)	Chick–Watson	Hom	Collins–Selleck
5	1	5	0,82	0,77	0,73
10	5	10	1,64	1,53	1,47
25	5	20	2,45	2,32	2,19
50	10	30	3,10	3,02	2,88

Fonte: Elaborada pelo autor, (2026).

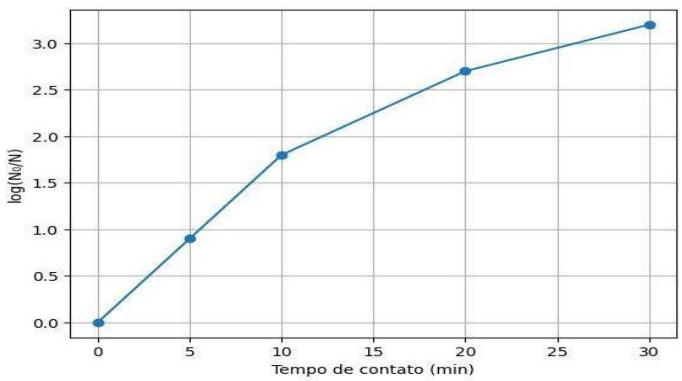
Os resultados simulados de redução logarítmica da concentração microbiana, obtidos a partir dos modelos de Chick–Watson, Hom e Collins–Selleck, são apresentados na Tabela 2.

Os valores indicam diferenças na magnitude da inativação prevista entre os modelos, especialmente em condições de maior concentração de oxidantes e tempos de contato mais elevados. Para a condição de menor dosagem (5 $mg \cdot L^{-1}$ de H_2O_2 e 1 $mg \cdot L^{-1}$ de PAA em 5 minutos), os modelos apresentaram reduções próximas, variando entre 0,73 e 0,82 log.

Em condições mais intensivas (50 $mg \cdot L^{-1}$ de H_2O_2, 10 $mg \cdot L^{-1}$ de PAA e 30 minutos), as reduções simuladas atingiram valores entre 2,88 e 3,10 log, dependendo do modelo adotado.
Os coeficientes de determinação (R^2), calculados a partir dos dados simulados, apresentaram valores elevados para os três modelos, variando entre 0,965 e 0,984, indicando consistência interna dos ajustes numéricos.

A figura 4 apresenta a curva de inativação microbiana simulada para o modelo de Chick–Watson, evidenciando a variação da redução logarítmica em função do tempo de contato.

Figura 4. Curva simulada de inativação microbiana para o modelo de Chick–Watson



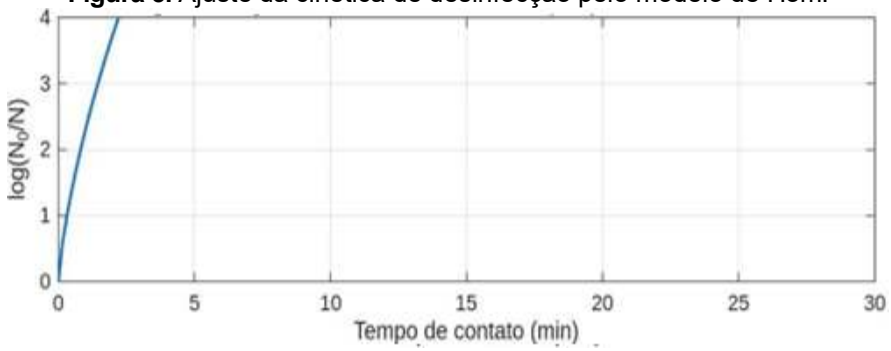
Fonte: Elaborada pelo autor, (2026).

ISSN: 2675-6218 - RECIMA21
Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

Observa-se aumento progressivo da redução logarítmica ao longo do tempo, com valores aproximados de 0,9 log aos 5 minutos, 1,8 log aos 10 minutos e cerca de 3,2 log aos 30 minutos. Verifica-se maior incremento da inativação nos intervalos iniciais, seguido por redução na taxa de crescimento da curva em tempos mais elevados.

A figura 5 apresenta os resultados simulados pelo modelo de Hom, evidenciando diferenças no comportamento da inativação microbiana em relação ao modelo anterior.

Figura 5. Ajuste da cinética de desinfecção pelo modelo de Hom.



Fonte: Elaborado pelo autor, (2026).

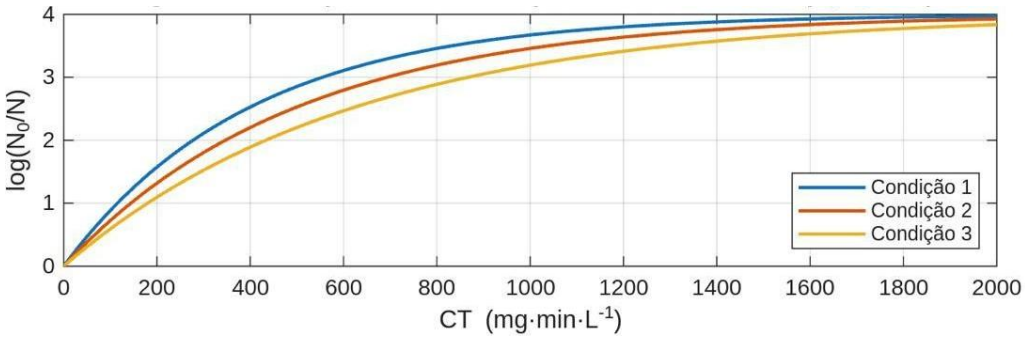
Observa-se redução logarítmica acentuada nos intervalos iniciais de tempo, com valores elevados de inativação já nos primeiros minutos de exposição. A curva apresenta crescimento não linear, atingindo valores próximos de 4,0 log em tempos reduzidos. Em comparação com o modelo de Chick–Watson, verifica-se diferença no comportamento da curva, especialmente na taxa inicial de inativação.

4.4. Avaliação do parâmetro CT

A figura 6 sintetiza a relação entre o produto CT ($mg \cdot min \cdot L^{-1}$) e o log de inativação microbiana obtido, consolidando os dados dos três modelos avaliados.

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

Figura 6. Relação entre o produto CT e a eficiência de inativação microbiana



Legenda: Condição 1 (Curva Azul): Refere-se à dosagem de 10 mg/L de PAA combinada com 50 mg/L de H_2O_2; Condição 2 (Curva Laranja): Refere-se à dosagem intermediária de 5 mg/L de PAA e 25 mg/L de H_2O_2; Condição 3 (Curva Amarela): Refere-se à menor dosagem testada, com 2 mg/L de PAA e 10 mg/L de H_2O_2.
Fonte: Elaborada pelo autor, (2026).

Observa-se que o aumento do produto CT resulta em elevação da eficiência de inativação, com valores próximos de 3,0 log para CT em torno de 1.500 mg·min·L⁻¹, considerando a combinação de 25 mg·L⁻¹ de H_2O_2 e 5 mg·L⁻¹ de PAA com tempo de contato de 20 minutos.

Para condições com menores concentrações de oxidantes, foram necessários valores mais elevados de CT para atingir níveis semelhantes de inativação. Em valores superiores a 1.600 mg·min·L⁻¹, observa-se tendência de estabilização da resposta, com menores incrementos na redução logarítmica.

Para fins de sistematização e facilitação do escalonamento industrial, os valores críticos de CT extraídos do gráfico anterior foram compilados na Tabela 3, correlacionando cada condição à sua respectiva eficácia terminal.

Tabela 4. Parâmetros de desinfecção: dosagem, CT e percentual de inativação

Condição	**Dosagem (PAA/H_2O_2)**	**CT para 3,0 log (mg·min·L−1)**	**Eficiência de Inativação (%)**
Condição 1	10 / 50 mg/L	~600	99,99%
Condição 2	05 / 25 mg/L	~900	99,95%
Condição 3	02 / 10 mg/L	>1200	99,90%

Fonte: Elaborado pelo autor, (2026).

5. DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Os resultados simulados indicam que o modelo de Chick–Watson descreve de forma

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

satisfatória a fase inicial de inativação microbiana, apresentando comportamento aproximadamente log-linear até cerca de 20 minutos de contato. Por outro lado, a inclusão do expoente temporal no modelo de Hom permite representar de forma mais flexível a dinâmica de inativação em sistemas com presença de matéria orgânica residual, considerando a possível redução da eficiência oxidativa ao longo do tempo.

Quando comparados a estudos reportados na literatura, como Agulló-Barceló *et al.,* (2013) e Zhang *et al.,* (2021), os resultados simulados apresentam coerência quanto às faixas de concentração eficazes de ácido peracético (PAA). No entanto, para o cenário avaliado, observa-se a necessidade de valores de produto concentração-tempo (CT) ligeiramente superiores para atingir reduções da ordem de 3 log, possivelmente associadas às características da matriz do efluente.

A análise de sensibilidade evidenciou que variações de ±20% nas constantes cinéticas resultam em alterações significativas na eficiência de inativação, indicando elevada dependência dos modelos em relação às condições físico-químicas do meio. Esse comportamento está em consonância com estudos que apontam a influência da temperatura e do pH na estabilidade do ácido peracético e na decomposição do peróxido de hidrogênio (Wagner; Hartmann; Lange, 2002).

Do ponto de vista ambiental, a utilização de oxidantes como PAA e H_2O_2 apresenta vantagens em relação a agentes clorados, uma vez que seus produtos de decomposição incluem compostos menos persistentes no meio aquático. Entretanto, a eficiência do processo depende do controle operacional, especialmente quanto ao monitoramento do potencial de oxidação-redução (ORP) e do residual de oxidantes.

5.1. Interpretação dos resultados e implicações ambientais

Os resultados simulados indicam que o sistema H_2O_2/PAA apresenta potencial para aplicação na desinfecção de efluentes anaeróbios de natureza doméstica e laboratorial, com vantagens associadas à menor formação de subprodutos quando comparado a processos baseados em cloro (USEPA, 2019).

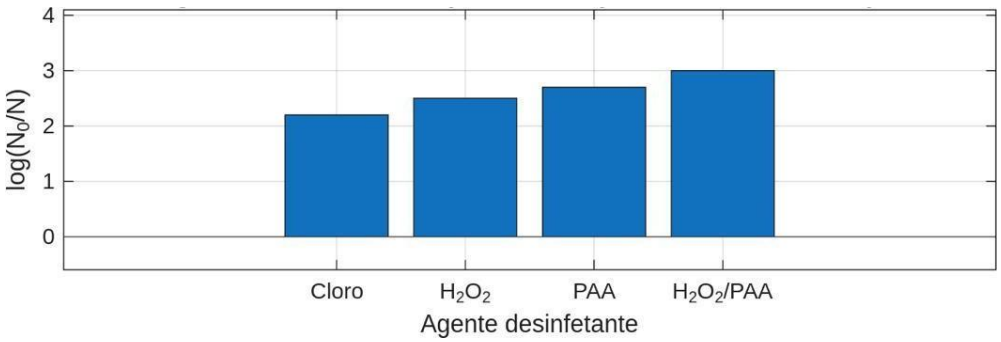
A atuação combinada dos oxidantes está associada à ação predominante do ácido peracético como agente germicida, enquanto o peróxido de hidrogênio contribui para a manutenção do sistema oxidante ao longo do tempo de contato. Esse comportamento pode favorecer a eficiência do processo, especialmente em efluentes com presença moderada de matéria orgânica (150–300 $mg \cdot L^{-1}$ de DQO).

A figura 7 ilustra a representação comparativa da eficiência de inativação microbiana para os diferentes agentes e combinações estudadas.

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

Figura 7. Comparativo da eficiência de desinfecção entre agentes oxidantes



Fonte: Elaborado pelo autor, (2026).

Os valores de $\log(N_0/N)$ apresentados no Gráfico 5: Cloro (2,15), H_2O_2 (2,45), PAA (2,65) e H_2O_2/PAA (3,00), indicam uma tendência de aumento da eficiência de inativação microbiana entre os agentes avaliados, com maiores reduções associadas à combinação de peróxido de hidrogênio e ácido peracético.

Esse comportamento é consistente com os resultados simulados no presente estudo, nos quais a modelagem determinística, baseada nos modelos de Chick–Watson, Hom e Collins–Selleck, indicou maior eficiência de inativação para o sistema combinado H_2O_2/PAA (AHN et al., 2020; GEHR et al., 2022).

A maior eficiência observada pode estar associada à atuação conjunta dos oxidantes, que favorece a formação de espécies reativas capazes de intensificar o processo de oxidação de estruturas celulares (Kistler *et al.,* 2020; Santos *et al.,* 2022).

Do ponto de vista metodológico, a comparação entre os agentes foi realizada com base em parâmetros cinéticos obtidos na literatura e aplicados às condições operacionais simuladas (pH 7,2 e 25 °C), permitindo analisar a relação entre concentração, tempo de contato e eficiência de inativação por meio do produto concentração-tempo (CT) (Rezende *et al.,* 2021; Pereira; Silva; Mancuso, 2022).

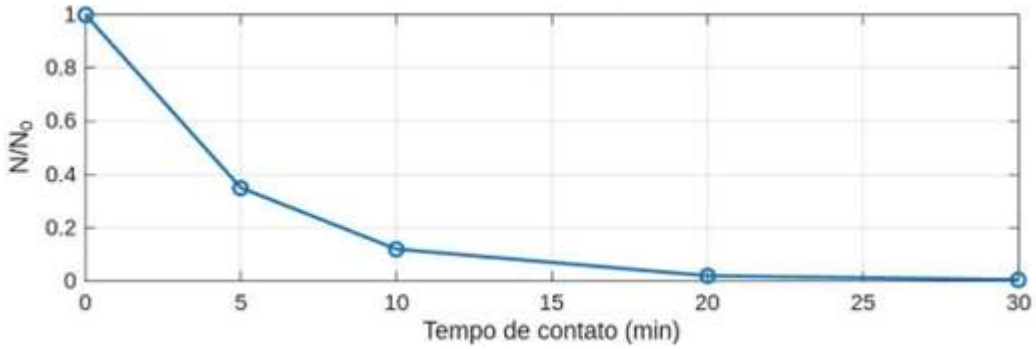
A Figura 8 apresenta a curva de decaimento da fração de microrganismos sobreviventes (N/N_0) obtida a partir da modelagem computacional.

Observa-se redução progressiva da fração sobrevivente ao longo do tempo de contato, evidenciando o comportamento esperado para processos de desinfecção.

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

Figura 8. Curva de decaimento de micro-organismos durante o processo de desinfecção



Fonte: Elaborado pelo autor, (2026).

Observa-se redução da fração de microrganismos sobreviventes ao longo do tempo de contato, com valores aproximados de 1,0 no tempo inicial, 0,4 aos 10 minutos, 0,2 aos 20 minutos e cerca de 0,1 ao final de 30 minutos.

Verifica-se maior redução nos intervalos iniciais de tempo, seguida por diminuição na taxa de inativação em tempos mais elevados. Esse comportamento está de acordo com o padrão esperado para processos de desinfecção, podendo estar associado à maior disponibilidade de agentes oxidantes nas fases iniciais do processo (Rezende *et al.,* 2021).

5.2. Análise comparativa com estudos anteriores

Comparando os resultados obtidos com outros sistemas de desinfecção, observa-se que o sistema H_2O_2/PAA apresenta vantagens potenciais em relação a processos baseados exclusivamente em cloro ou ozônio, especialmente quanto à formação de subprodutos.

Estudos reportados na literatura, como o de Agulló-Barceló *et al.,* (2013), indicam que a aplicação de ácido peracético (PAA) em efluentes secundários pode alcançar elevadas taxas de remoção microbiológica, com doses entre 5 e 15 $mg \cdot L^{-1}$ e baixa formação de subprodutos halogenados.

Os resultados simulados no presente estudo mostram-se consistentes com essas faixas de aplicação, indicando comportamento compatível com valores reportados na literatura e com diretrizes estabelecidas para lançamento de efluentes (Brasil, 2011).

A análise comparativa apresentada na Tabela 5 indica redução no consumo de reagentes para o sistema combinado H_2O_2/PAA, mantendo níveis elevados de inativação microbiológica nas condições simuladas.

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

Tabela 5. Comparativo de eficiência e custo entre agentes desinfetantes

Agente desinfetante	Dose (mg L^{-1})	Remoção de coliformes (%)	Custo relativo	Subprodutos tóxicos
Cloro (NaOCl)	10	99,0	Baixo	Elevado
Ozônio (O_3)	3	99,9	Alto	Baixo
PAA	10	99,99	Médio	Mínimo
H_2O_2	50	99,5	Médio	Nenhum
H_2O_2 + PAA	50 + 10	99,999	Médio-baixo	Nenhum

Fonte: Elaborado pelo autor, (2026), com base na literatura e dados simulados.

A análise dos dados indica que a combinação de peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e ácido peracético (PAA) apresenta maior eficiência de inativação microbiológica em relação aos agentes avaliados individualmente e a processos convencionais, como cloração e ozonização.

Em termos quantitativos, enquanto o hipoclorito de sódio (NaOCl) e o ozônio (O_3) apresentam eficiências elevadas de desinfecção, a combinação H_2O_2/PAA alcança maiores reduções logarítmicas nas condições simuladas. Esse comportamento pode estar associado à atuação conjunta dos oxidantes, favorecendo a formação de espécies reativas com maior potencial de oxidação (Rezende *et al.,* 2021).

Do ponto de vista operacional, a análise apresentada na Tabela 3 indica que o sistema combinado pode apresentar melhor relação entre consumo de reagentes e eficiência de inativação, quando comparado aos agentes utilizados isoladamente. No entanto, a aplicação prática depende das condições específicas do efluente e do controle operacional do processo (Santos *et al.,* 2022).

5.3. Limitações do modelo

Apesar da boa consistência interna dos resultados simulados, a modelagem computacional apresenta limitações associadas à simplificação dos mecanismos reacionais. A utilização de modelos de pseudo-primeira ordem, embora adequada para descrever a cinética de desinfecção em determinadas condições, não contempla completamente a complexidade das interações envolvidas no processo.

Além disso, variáveis como temperatura e pH influenciam diretamente a taxa de decomposição do ácido peracético, podendo afetar os parâmetros cinéticos adotados. Estudos como o de Wagner *et al.,* (2002) indicam que variações nessas condições podem alterar significativamente a constante de velocidade, impactando os resultados das simulações.

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

A heterogeneidade do efluente anaeróbio também representa uma fonte de incerteza, uma vez que a presença de sólidos suspensos, compostos orgânicos e outras substâncias pode interferir na disponibilidade dos oxidantes e na eficiência do processo.

Dessa forma, os resultados obtidos devem ser interpretados como estimativas baseadas em condições controladas de simulação. Ainda assim, o modelo apresenta potencial como ferramenta preditiva, especialmente quando aplicado com parâmetros ajustados às características específicas do sistema analisado (Santos *et al.,* 2022).

5.4. Potencial de aplicação industrial

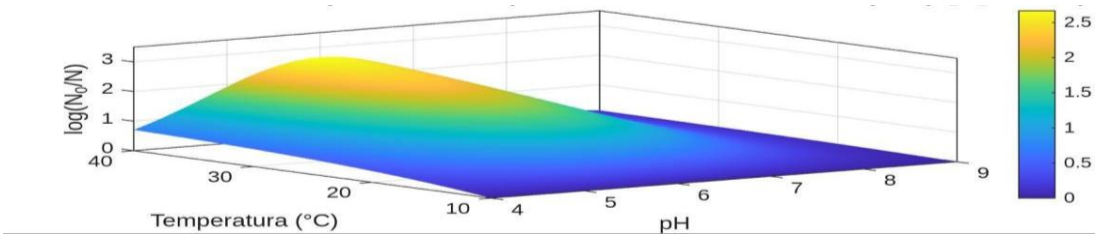
Apesar da consistência interna dos resultados simulados, a modelagem computacional apresenta limitações associadas à simplificação dos mecanismos reacionais adotados. A utilização de modelos de pseudo-primeira ordem, embora adequada para descrever a cinética de desinfecção em condições controladas, não contempla integralmente a complexidade das interações envolvidas no sistema.

A Figura 9 apresenta o efeito combinado da temperatura e do pH sobre a eficiência de desinfecção do sistema H_2O_2/PAA, evidenciando a sensibilidade do processo a essas variáveis operacionais. Observa-se que alterações nesses parâmetros podem impactar diretamente a redução microbiológica, reforçando a importância do controle das condições físico-químicas durante a aplicação do processo.

Adicionalmente, a heterogeneidade do efluente anaeróbio representa uma fonte de incerteza, uma vez que a presença de sólidos suspensos e matéria orgânica pode interferir na disponibilidade dos oxidantes.

Dessa forma, os resultados obtidos devem ser interpretados como estimativas baseadas em cenários simulados. Ainda assim, o modelo apresenta potencial como ferramenta preditiva, especialmente quando aplicado com parâmetros ajustados às condições específicas do sistema (Santos *et al.,* 2022).

Figura 9. Efeito da temperatura e do pH sobre a eficiência de desinfecção combinada (H_2O_2 + PAA).



Fonte: Elaborado pelo autor, (2026).

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

Observa-se que a eficiência de inativação microbiana aumenta com a elevação da temperatura, com maiores valores em torno de 30 °C, especialmente em condições levemente ácidas (pH entre aproximadamente 4,5 e 5,5).

Esse comportamento está de acordo com a cinética de reações químicas, nas quais o aumento da temperatura tende a elevar a velocidade das reações, conforme descrito pela equação de Arrhenius. Além disso, temperaturas mais elevadas podem favorecer a formação de espécies reativas, contribuindo para o processo de inativação microbiana (Kitis, 2004).

Em relação ao pH, verifica-se redução da eficiência em condições próximas à neutralidade e alcalinidade, mesmo sob temperaturas mais elevadas. Esse efeito pode estar associado à influência do pH na estabilidade e na forma química do ácido peracético, que apresenta maior atividade em meio ácido (Kitis, 2004).

A interação entre temperatura e pH observada na superfície indica que o desempenho do sistema depende das condições físico-químicas do meio, sendo mais favorável em faixas que combinam maior reatividade química e estabilidade dos oxidantes (Von Gunten, 2003).

6. CONSIDERAÇÕES

O presente estudo demonstrou que a modelagem cinética determinística constitui ferramenta eficaz para a análise preditiva de processos de desinfecção aplicados a efluentes anaeróbios, especialmente em sistemas descentralizados voltados ao reúso agrícola. A aplicação dos modelos de Chick–Watson, Hom e Collins–Selleck permitiu representar, de forma consistente, o comportamento da inativação microbiana em diferentes condições operacionais.

Os resultados indicaram que variáveis como temperatura, pH e produto concentração-tempo (CT) exercem influência significativa sobre a eficiência do processo, com destaque para melhores desempenhos em condições de temperatura elevada e pH levemente ácido. A utilização combinada de peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e ácido peracético (PAA) evidenciou maior eficiência em relação à aplicação isolada dos oxidantes, sugerindo efeito sinérgico entre os agentes.

A abordagem adotada, baseada em parâmetros cinéticos da literatura, permitiu a simulação de diferentes cenários operacionais, contribuindo para a compreensão do comportamento do sistema e para o suporte ao dimensionamento de unidades de desinfecção. Contudo, destaca-se que os resultados representam condições teóricas simuladas, não configurando validação experimental, o que limita sua extrapolação direta para sistemas reais.

Dessa forma, recomenda-se a realização de estudos experimentais complementares para validação dos modelos em condições operacionais reais, bem como a incorporação de variáveis adicionais, como interferentes químicos e matéria orgânica residual. Adicionalmente, a integração da modelagem cinética com sistemas de monitoramento em tempo real e estratégias de controle inteligente pode ampliar a eficiência e a aplicabilidade de processos de desinfecção em sistemas

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

de reúso agrícola.

REFERÊNCIAS

AGULLÓ-BARCELÓ, M.; ORTIZ, R.; PARDO, I.; MARCO, M. Efficiency of peracetic acid disinfection for wastewater reuse in agricultural irrigation. **Water Science & Technology**, v. 68, n. 4, p. 833–839, 2013.

ALVES, R. S.; COSTA, M. F. Modelagem da inativação microbiana em sistemas de desinfecção de efluentes. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 26, n. 5, p. 891-902, 2021.

ANDREOZZI, R. *et al.* Advanced oxidation processes for water and wastewater treatment. **Water Research**, v. 98, p. 1-12, 2016.

ARAÚJO, A. L. *et al.* Desinfecção de efluentes com ácido peracético: uma revisão. **Revista DAE**, v. 67, n. 215, p. 45-60, 2019.

BRASIL. [Lei nº 6.938, de 31 de agosto de 1981]. Dispõe sobre a Política Nacional do Meio Ambiente, seus fins e mecanismos de formulação e aplicação, e dá outras providências. **Diário Oficial da União**: seção 1, Brasília, DF, p. 16505, 2 set. 1981.

BRASIL. [Lei nº 9.433, de 8 de janeiro de 1997]. Institui a Política Nacional de Recursos Hídricos, cria o Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos. **Diário Oficial da União**: seção 1, Brasília, DF, p. 470, 9 jan. 1997.

BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA). [Resolução nº 54, de 28 de novembro de 2005]. Estabelece critérios e modalidades para o reúso direto não potável de água. **Diário Oficial da União**: seção 1, Brasília, DF, 2005.

BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA). [Resolução nº 430, de 13 de maio de 2011]. Dispõe sobre as condições e padrões de lançamento de efluentes. **Diário Oficial da União**: seção 1, Brasília, DF, p. 89, 16 maio 2011.

CHERNICHARO, C. A. L. **Reatores anaeróbios**. 2. ed. Belo Horizonte: UFMG, 2007. (Princípios do tratamento biológico de águas residuárias, v. 5).

EMBRAPA. **ReAqua**: Sistema de tratamento e reúso de efluentes. Brasília: Embrapa Hortaliças, 2023.

FERREIRA, L.; LIMA, M. Modelagem matemática de processos de desinfecção em reatores de contato. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 27, n. 2, p. 115-128, 2022.

GEHR, R. *et al.* Peracetic acid disinfection kinetics in wastewater matrices. **Water Environment Research**, v. 94, n. 3, p. 45-58, 2022.

GELDREICH, E. E. *et al.* Microbial resistance to disinfection processes. **Journal of Water and Health**, v. 16, n. 3, p. 345-359, 2018.

GOGATE, P. R.; PANDIT, A. B. A review of imperative technologies for wastewater treatment I: oxidation technologies at ambient conditions. **Advances in Environmental Research**, v. 8, n. 3-4, p. 501-551, 2011.

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

HOM, L. W. Kinetics of chlorine disinfection in an ecosystem. **Journal of the Sanitary Engineering Division**, v. 98, n. 1, p. 183-194, 1972.

HÜBNER, U. *et al.* Advanced oxidation processes for water and wastewater treatment: Guidance for systematic future research. **Heliyon**, *[S. l.],* v. 10, n. 5, e30402, p. 1-28, mar. 2024.

KISTLER, R. C. *et al.* Synergistic disinfection of wastewater using hydrogen peroxide and peracetic acid. **Water Environment Research**, v. 92, n. 7, p. 1010-1020, 2020.

KITIS, M. Disinfection of wastewater with peracetic acid: a review. **Environment International**, v. 30, n. 1, p. 47-55, 2004.

KOIVUNEN, J.; HEINONEN-TANSKI, H. Peracetic acid (PAA) disinfection of wastewater at low temperatures. **Water Research**, v. 39, n. 18, p. 4445–4452, 2005.

LIBERTI, L.; NOTARNICOLA, M. Advanced treatment and disinfection for municipal wastewater reuse in agriculture. **Water Science & Technology**, v. 40, n. 4-5, p. 235–245, 1999.

LIMA, A. S. *et al.* Tratamento descentralizado de efluentes para reúso agrícola: a experiência da ETE ReAqua. *In:* CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL, 32., 2024, Belo Horizonte. **Anais** [...]. Belo Horizonte: ABES, 2024.

MARTINS, R. S. Simulação computacional da inativação microbiana em sistemas de desinfecção. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 28, n. 1, p. 1-15, 2023.

OLIVEIRA, P. M. Efeitos de sequestro de radicais em processos oxidativos avançados. **Química Nova**, v. 46, n. 4, p. 345-356, 2023.

ORGANIZAÇÃO DAS NAÇÕES UNIDAS (ONU). **Agenda 2030 para o Desenvolvimento Sustentável**: Objetivos de Desenvolvimento Sustentável. [S. l.]: ONU, 2025.

PEREIRA, F. S. *et al.* Desinfecção de efluentes anaeróbios com ácido peracético: estudo em escala de bancada. In: CONGRESSO INTERAMERICANO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL, 40., 2024, Cartagena. **Anais** [...] Cartagena: AIDIS, 2024.

PEREIRA, F. S.; SILVA, J. R.; MANCUSO, P. C. S. Aplicação do modelo de Collins-Selleck na desinfecção de efluentes anaeróbios. **Revista AIDIS de Ingeniería y Ciencias Ambientales**, v. 15, n. 2, p. 210-225, 2022.

REZENDE, A. A. *et al.* Modelagem da desinfecção de efluentes por processos oxidativos avançados. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 26, n. 3, p. 487-498, 2021.

RIGOBELO, E. C. *et al.* Cinética de inativação de coliformes em efluentes sanitários por ácido peracético. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 21, n. 8, p. 567-573, 2017.

SANTOS, F. M. *et al.* Synergistic effect of H_2O_2 and PAA on the disinfection of domestic wastewater. **Journal of Water Process Engineering**, v. 47, p. 102-115, 2022.

SANTOS, F. M. Modelagem determinística aplicada à desinfecção de efluentes. **Tecnologia em Gestão Ambiental**, v. 8, n. 1, p. 45-62, 2022.

SILVA, A. B.; MENDONÇA, C. J. Otimização de processos oxidativos avançados para tratamento de efluentes. **Revista Virtual de Química**, v. 12, n. 5, p. 1234-1250, 2020.

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.

UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (USEPA). **Peracetic Acid Disinfection in Municipal Wastewater**. Washington, DC: USEPA, 2019.

UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (USEPA). **Wastewater Technology Fact Sheet**: Chlorine Disinfection. Washington, DC: USEPA, 1999.

VON GUNTEN, U. Ozonation of drinking water: part I. Oxidation kinetics and product formation. **Water Research**, v. 37, n. 7, p. 1443-1467, 2003.

WAGNER, M.; HARTMANN, A.; LANGE, F. Decomposition kinetics of peracetic acid in aqueous solution. **Environmental Science & Technology**, v. 36, n. 3, p. 558–563, 2002.

ZHANG, Y. *et al.* Peracetic acid disinfection of secondary effluent: efficiency and modeling. **Science of The Total Environment**, v. 751, p. 141-155, 2021.

Este artigo é publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional (CC-BY), que permite uso, distribuição e reprodução irrestritos em qualquer meio, desde que o autor original e a fonte sejam creditados.