MONIQUE TOLEDO SALGADO

**MODELO MATEMÁTICO PARA AVALIAÇÃO
HIDRODINÂMICA EM REATORES TUBULARES
OPERANDO EM REGIME NÃO-PERMANENTE**

Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da
Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para
obtenção do título de Doutor em Engenharia Hidráulica e
Saneamento.

ORIENTADOR: Prof. Titular EDUARDO CLETO PIRES

São Carlos

-2008-

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento

da Informação do Serviço de Biblioteca – EESC/USP

S164m Salgado, Monique Toledo
Modelo matemático para avaliação hidrodinâmica em reatores tubulares operando em regime não-permanente / Monique Toledo Salgado ; orientador Eduardo Cleto Pires. -- São Carlos, 2008.

Tese (Doutorado-Programa de Pós-Graduação e Área de Concentração em Hidráulica e Saneamento) -- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2008.

1. Ensaio estímulo - resposta (pulso e degrau).
2. Variação cíclica da vazão. 3. Carga hidráulica.
4. Modelação matemática. 5. UASB. I. Título.

Dedico este trabalho:

A Deus.

Aos meus amados pais : José Sérgio Salgado e Maria Marta Toledo Salgado por sempre me apoiarem com muito amor, carinho e compreensão.

Ao meu querido irmão Sérgio Ricardo Toledo Salgado por todo amor e carinho.

AGRADECIMENTOS

À Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo toda sua infraestrutura, o que permitiu não só obter o título, mas a aprender muito.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa de doutorado que proporcionou a realização deste trabalho.

Ao meu orientador Professor Titular Eduardo Cleto Pires pela oportunidade de desenvolver este trabalho e crescer profissionalmente. Muito obrigada pela orientação, confiança, incentivo e amizade – sem os quais este trabalho não teria sido desenvolvido.

Ao Professor Doutor Marcelo Zaiat pelo apoio, atenção e conhecimento compartilhado ao longo do mestrado e doutorado.

A Professora Titular Luísa Fernanda Ribeiro Reis pela confiança e pelo espaço cedido no Laboratório de Simulação do Departamento de Hidráulica e Saneamento.

Aos Professores e Amigos Dr. Luiz Romariz Duarte (in memorian) e Dra. Ruth de Gouvêa Duarte pelo apoio constante, carinho e dedicação.

Aos professores do Departamento de Hidráulica e Saneamento (EESC-USP) pela atenção e ensinamentos.

Aos funcionários do Departamento de Hidráulica e Saneamento em especial: Sá, Pavi, Rose, Márcia Campos, André Garcia e Paulo Fragiácomo.

Aos amigos Andréa Paula Buzzini, Bruna Soares Fernandes, Cláudia Regina Megda, Fernando Hermes Passig, Karina Querne de Carvalho, Lara Steil, Luana Maria Marelli, Luciana Silva Peixoto e Thiago José Momenti pela amizade e excelente convívio. Obrigada pelo apoio.

Aos meus pais: José Sérgio Salgado e Maria Marta Toledo Salgado e meu irmão Sérgio Ricardo Toledo Salgado pelo suporte, amor e muita paciência.

Muito obrigada: Serginho, Karina e Bruna pelo apoio, ótima convivência no dia a dia e altas discussões madrugadas a fora.

Aos amigos do Laboratório de Simulação Numérica: Alexandre Kepler Soares, Fausto de Assis Moraes, Fernando Colombo, Katia Sakihama Ventura e Sergio Luis Siebra Moreira pelo apoio e boa convivência.

A todos aqueles que de forma direta ou indireta colaboraram com a realização deste trabalho.
Muito obrigada!

**“Embora ninguém possa voltar atrás e fazer um novo começo, qualquer
um pode começar agora e fazer um novo fim”.**

(Chico Xavier – 1910 a 2002)

RESUMO

SALGADO, M. T. (2008). Modelo matemático para *avaliação hidrodinâmica em reatores tubulares operando em regime não-permanente*. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2008.

No meio científico são bastante utilizados os modelos matemáticos para avaliar as características hidrodinâmicas de reatores, porém a literatura é pobre em informações relativas à aplicação do equacionamento matemático em regime não-permanente. Neste trabalho foi aplicado um modelo matemático simulando a hidrodinâmica de reatores tubulares com dispersão para avaliar o efeito da variação de vazão afluyente sobre os parâmetros hidrodinâmicos. As simulações foram efetuadas considerando vazão e volume constantes, vazão e volume variáveis e vazão variável e volume constante. Foi investigada a influência de dois tipos de ensaios estímulo-resposta, pulso e degrau, para aplicação de modelos matemáticos e determinação das curvas de distribuição do tempo de residência (DTR) experimentais. Teoricamente ambos devem fornecer os mesmos resultados embora o ensaio em pulso costume apresentar maior sensibilidade experimental. Conforme esperado, ambos os ensaios apresentaram os mesmos resultados finais. Também foram avaliados os traçadores empregados nos dois tipos de ensaios estímulo-resposta, pulso e degrau. Foram empregados três traçadores diferentes – verde de bromocresol, azul de bromofenol e eosina Y – que proporcionaram curvas com diferentes características. Como ferramenta auxiliar da modelação foram estudadas a determinação das curvas DTR experimentais com auxílio de duas técnicas distintas. Para calibrar o modelo matemático proposto foram utilizados dados de reatores em escala de bancada com diferentes configurações submetidas a variações de vazões afluentes. Os dados de um reator UASB em escala piloto – submetido a variações cíclicas de vazão afluyente de 40 e 60% – foram empregados para calibrar e verificar o modelo matemático proposto. Os resultados encontrados com o modelo matemático proposto nesta pesquisa demonstraram que a variação de vazão afluyente não deve ser negligenciada. O modelo utilizado representou adequadamente o reator UASB. Seus resultados, quando comparados aos modelos matemáticos que não consideram a variação de vazão, mostraram que para flutuações de vazão elevadas, vazões com valores até 60% maiores do que a vazão média, os valores dos coeficientes de difusão diferem significativamente em função das hipóteses empregadas no desenvolvimento do modelo matemático.

Palavras Chave: distribuição tempo de residência (DTR), ensaios estímulo-resposta (pulso e degrau), variação cíclica da vazão afluyente, carga hidráulica, modelação matemática, UASB.

ABSTRACT

SALGADO, M. T. *Mathematical model for hydrodynamic evaluation of pipe reactors with diffusion operated in non-steady flow*. Ph.D. Thesis – Escola de Engenharia de São Carlos – Universidade de São Paulo, São Carlos, 2006.

Mathematical models for hydrodynamic characteristics evaluation of reactors are commonly used however there is a lack of information in the literature concerning the application of mathematical modeling for non-steady state flow. In this thesis, it is presented a non-steady mathematical model to simulate the hydrodynamic behavior of pipe flow reactors with diffusion in order to evaluate the effect of the variation of the influent flowrate in the hydrodynamic parameters. The simulations were performed considering constant flowrate and volume, variable flowrate and volume and, variable flowrate and constant volume. It was investigated the influence of two types of stimulus-response assays, pulse and step function, on the application of mathematical models and the determination of the experimental retention time distribution curves. Theoretically, both tests should provide the same results although the pulse stimulus assay usually presents higher experimental sensitivity. As it was expected, both tests presented the same final results. The tested tracers were also evaluated in relation to the pulse and step stimulus-response tests. Three tracers were tested (bromocresol green, bromophenol blue and eosin Y) and it was shown that they provided different curves. It was studied the construction of the experimental retention time distribution curves using two procedures as an auxiliary tool for modeling. The proposed mathematical model was calibrated with data of bench scale reactors submitted to different cyclical variations of flowrates. Moreover, data of UASB reactor in pilot scale - submitted to 40 and 60% of cyclical variations of flowrates – were utilized to calibrate and verify the obtained mathematical model. The results found with the mathematical model proposed in this research showed that the variations in influent flow rate can not be neglected. The model adequately represented a pilot scale UASB reactor. The results showed that the diffusion coefficients differ significantly for high flowrate fluctuations, when compared to other mathematical models that do not incorporate variable flowrate, depending upon the hypothesis used to derive the model.

Key-words: residence time distribution (RTD), stimulus-response assays (pulse and step), cyclical variation of influent flowrate, hydraulic load, mathematical model, UASB reactor.

LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 1. Exemplos dos modelos adotados no algoritmo desenvolvido por Claudel et al. (2003).</i>	<i>8</i>
<i>Figura 2. Resultados para o reator de lodo ativado com – $\bar{Q} = 1\text{l.min}^{-1}$ – (a) período: 10 min; (b) período: 20 min. Resultados para o leito fixo – $\bar{Q} = 3\text{l.min}^{-1}$ – (c) período 10 s e (d) período: 40 min.</i>	<i>15</i>
<i>Figura 3. Variação da vazão durante o ensaio de traçador.</i>	<i>18</i>
<i>Figura 4. Esquema do balanço de massa.....</i>	<i>26</i>
<i>Figura 5. Resultado da simulação das condições de contorno adotadas (equações 4.4 a 4.6) em um ensaio para a concentração C_{in} e tempo t</i>	<i>28</i>
<i>Figura 6. Algoritmo do modelo matemático proposto</i>	<i>33</i>
<i>Figura 7. Dimensão do reservatório e seus compartimentos.....</i>	<i>35</i>
<i>Figura 8. Hidrograma de vazão dos reservatórios (a) E1V; (b) E2V; (c) E2DV e (d) E3V....</i>	<i>35</i>
<i>Figura 9. Desenho esquemático de um reator UASB.....</i>	<i>36</i>
<i>Figura 10. Hidrograma de vazão na operação do reator UASB: (a) ensaio 1 – com 40% de variação da vazão média, (b) ensaio 2 – com 40% de variação da vazão média e (c) ensaio 3 – com 40% de variação da vazão média.</i>	<i>38</i>
<i>Figura 11. Sistema de lagoas de estabilização e as estações de coleta. (TP: tratamento preliminar; LA: lagoa anaeróbia; LF1: lagoa facultativa 1; LF2: lagoa facultativa 2).....</i>	<i>38</i>
<i>Figura 12. Aparato experimental.....</i>	<i>50</i>
<i>Figura 13. Curvas DTR obtidas dos ensaios hidrodinâmicos realizados nos reatores: (a) reator E1V e (b) reator E2V,.....</i>	<i>52</i>
<i>Figura 14. Curvas DTR obtidas dos ensaios hidrodinâmicos realizados nos reatores: (a) reator E3V e (b) reator E2DV.</i>	<i>53</i>
<i>Figura 15. Curvas DTR para o reator UASB: (a) com 40% de variação cíclica da vazão média afluyente – ensaio 1, (b) com 40% de variação cíclica da vazão média afluyente – ensaio 2 e (c) com 60% de variação cíclica da vazão média afluyente</i>	<i>54</i>

Figura 16. Curva DTR experimental obtida com os ensaios no reator E1V e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta e (b) P_1	60
Figura 17. Curva experimental obtida com os ensaios no reator E1C e curvas teóricas obtidas das simulações dos modelos utilizados: N-CSTR, PD e GD-ta.....	61
Figura 18. Curva DTR experimental obtida com os ensaios no reator E2V e curvas obtidas das simulações dos modelos empregados: (a) CSTR, PD e GD-ta e (b) P_2	63
Figura 19. Curva experimental obtida com os ensaios no reator E2C e curvas obtidas das simulações dos modelos: N-CSTR, PD e GD-ta.....	64
Figura 20. Curva DTR experimental obtida com os ensaios no reator E3V e curvas obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta e (b) P_3	66
Figura 21. Curva DTR experimental obtida com os ensaios no reator E2DV e curvas DTR das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) P_{2DV}	68
Figura 22. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E1V: (a)N-CSTR, (b) GD-ta, (c) PD e (d) P_1	70
Figura 23. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E1C: (a)N-CSTR, (b) GD-ta e (c) PD.....	71
Figura 24. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E2V: (a)N-CSTR, (b) GD-ta, (c) PD e (d) P_2	72
Figura 25. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E2C: (a)N-CSTR, (b) PD e (c) GD-ta.....	72
Figura 26. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E3V: (a)N-CSTR, (b)PD, (c) GD-ta e (d) P_3	73
Figura 27. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E2dV: (a)N-CSTR, (b)PD, (c) GD-ta e (d) N_{2dv}	74
Figura 28. Curva da concentração de eosina Y ao longo do tempo de experimento no reator UASB: (a) ensaio sem variação de vazão, (b) ensaio com variação cíclica de vazão afluyente de 40% e (c) ensaio com variação cíclica de vazão afluyente de 60%.	78
Figura 29. Curva DTR experimental obtida no ensaio 1 sem variação da vazão afluyente do reator UASB e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) sem variação de vazão ($D/u.L=0,133; 0,117$ e $0,100$).....	80
Figura 30. Curva DTR experimental obtida no ensaio 2 do reator UASB e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) sem variação de vazão ($D/u.L=0,133; 0,117$ e $0,100$).....	81

<i>Figura 31. Curva DTR experimental obtida do ensaio 1 do reator UASB com 40% e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) N_N.</i>	82
<i>Figura 32. Curva DTR experimental obtida do ensaio 1 do reator UASB com 40% e os resultados dos modelos ajustados: (a) Vazão variável ($D/u.L=0,150$; $0,167$ e $0,133$) e (b) vazão e volume variável ($D/u.L=0,100$; $0,108$ e $0,117$).</i>	83
<i>Figura 33. Curva DTR experimental obtida do ensaio 2 do reator UASB com 40% e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) N_N.</i>	85
<i>Figura 34. Curva DTR experimental obtida do ensaio 2 do reator UASB com 40% e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) Vazão variável ($D/u.L=0,117$; $0,133$ e $0,150$) e (b) vazão e volume variável ($D/u.L=0,108$; $0,125$ e $0,100$).</i>	86
<i>Figura 35. Curva DTR experimental obtida do ensaio com reator UASB com 60% e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta e (b) N_N.</i>	89
<i>Figura 36. Curva DTR experimental obtida do ensaio com reator UASB com 60% e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) Vazão variável ($D/u.L=0,133$; $0,150$ e $0,160$) e (b) vazão e volume variável ($D/u.L=0,067$; $0,083$ e $0,100$).</i>	90
<i>Figura 37. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com vazão média – ensaio 1: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD-ta, (d) vazão constante ($D/u.L = 0,132$), (e) vazão constante ($D/u.L = 0,116$) e (f) vazão constante ($D/u.L = 0,099$).</i>	91
<i>Figura 38. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com vazão média – ensaio 2: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD-ta, (d) vazão constante ($D/u.L = 0,099$), (e) vazão constante ($D/u.L = 0,116$) e (f) vazão constante ($D/u.L = 0,132$).</i>	92
<i>Figura 39. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 40% da vazão média – ensaio 1: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD-ta, (d) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,132$), (e) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,165$) e (f) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,149$).</i>	93
<i>Figura 40. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 40% da vazão média – ensaio 1: (a) P_N, (b) volume e vazão variável ($D/u.L = 0,107$), (c) volume e vazão variável ($D/u.L = 0,099$), (d) volume e vazão variável ($D/u.L = 0,116$).</i>	94
<i>Figura 41. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 40% da vazão média – ensaio 2: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD-ta, (d) P_N, (e) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,116$) e (f) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,132$).</i>	95

<i>Figura 42. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 40% da vazão média – ensaio 2: (a) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,149$) (b) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,123$), (c) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,107$) e (d) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,116$).</i>	<i>96</i>
<i>Figura 43. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 60% da vazão média: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD-ta, (d) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,132$), (e) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,165$) e (f) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,149$).</i>	<i>97</i>
<i>Figura 44. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 60% da vazão média: (a) P_N, (b) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,116$), (c) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,099$), (d) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,083$).</i>	<i>98</i>
<i>Figura 45. Variação das vazões afluentes adotadas para utilizar no modelo matemático proposto.</i>	<i>99</i>
<i>Figura 46. Curva da concentração de rodamina WT ao longo do tempo de experimento. ..</i>	<i>100</i>
<i>Figura 47. Curva DTR experimental e os modelos ajustados: (a) N-CSTR, PD e GD-ta e (b) modelo matemático proposto ($D/u.L = 0,286$; $0,204$ e $0,238$)</i>	<i>101</i>
<i>Figura 48. Gráfico de resíduos dos modelos: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD, (d) modelo matemático com $D/u.L = 0,286$, (e) $D/u.L = 0,204$ e (f) $D/u.L = 0,238$.</i>	<i>103</i>
<i>Figura 49. Curva DTR experimental para o tratamento de dados com variação de vazão – Q_{v2} – e os modelos ajustados; (a) modelo matemático proposto com volume e vazão variável – θ_{hexp} ($D/u.L = 0,286$; $0,272$ e $0,258$) e (b) P_N</i>	<i>104</i>
<i>Figura 50. Curva DTR experimental para o tratamento de dados com variação de vazão – Q_{v2} – e os modelos ajustados; (a) N-CSTR, PD e GD-ta; (b) modelo matemático proposto com vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,340$ e $0,082$), (c) modelo matemático proposto com volume e vazão variável – θ_{hteo} ($D/u.L = 0,680$; $0,136$ e $0,204$)</i>	<i>105</i>
<i>Figura 51. Distribuição dos resíduos para os modelos: (a) P_N, (b) $D/u.L = 0,340$, (c) $D/u.L = 0,082$, (d) N-CSTR, (e) PD e (f) GD-ta</i>	<i>107</i>
<i>Figura 52. Distribuição dos resíduos para os modelos: (a) $D/u.L = 0,689$; (b) $D/u.L = 0,204$, (c) $D/u.L = 0,136$, (d) $D/u.L = 0,272$, (e) $D/u.L = 0,286$ e (f) $D/u.L = 0,259$.</i>	<i>108</i>
<i>Figura 53. Modelos teóricos ajustados à curva DTR adimensional normalizada de acordo com Niemi (1977); (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) P_N e (c) modelo matemático proposto com volume constante e vazão variável: (a) $D/u.L = 0,068$; $0,061$ e $0,054$.</i>	<i>109</i>

<i>Figura 54. Distribuição de resíduos dos modelos matemáticos teóricos ajustados à curva DTR experimental para a vazão simulada Q_{v1}.</i>	111
<i>Figura 55. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator CSTR para os ensaios de estímulo-resposta pulso – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	113
<i>Figura 56. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator CSTR para os ensaios de estímulo-resposta degrau – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	114
<i>Figura 57. Curvas DTR adimensionais para os ensaios de estímulo-resposta pulso e degrau realizados no reator CSTR – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	115
<i>Figura 58. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator RH para os ensaios de estímulo-resposta pulso – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	117
<i>Figura 59. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator RH para os ensaios de estímulo-resposta degrau – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	118
<i>Figura 60. Curvas DTR adimensionais para os ensaios de estímulo-resposta pulso e degrau realizados no reator RH – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	119
<i>Figura 61. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator RHLF para os ensaios de estímulo-resposta pulso – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	121
<i>Figura 62. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator RHLF para os ensaios de estímulo-resposta degrau – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	121
<i>Figura 63. Curvas DTR adimensionais para os ensaios de estímulo-resposta pulso e degrau realizados no reator RHLF para os ensaios de estímulo-resposta degrau – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	122
<i>Figura 64. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio degrau) para o reator CSTR com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	125

<i>Figura 65. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio pulso) para o reator CSTR com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	<i>126</i>
<i>Figura 66. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio pulso) para o reator RH com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol....</i>	<i>129</i>
<i>Figura 67. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio degrau) para o reator RH com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	<i>130</i>
<i>Figura 68. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio pulso) para o reator RHLF com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.</i>	<i>132</i>
<i>Figura 69. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio degrau) para o reator RHLF com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol</i>	<i>133</i>

LISTA DE TABELAS

<i>Tabela 1. Dados de entrada da lagoa simulada.....</i>	<i>19</i>
<i>Tabela 2. Dados das lagoas de estabilização utilizadas no ensaio hidrodinâmico.....</i>	<i>20</i>
<i>Tabela 3. Dados de dispersão obtidos experimentalmente e por simulação</i>	<i>22</i>
<i>Tabela 4. Valores do número de dispersão d obtidos experimentalmente e por simulação relativos à lagoa de estabilização situada em em Nsukka, Nigéria.</i>	<i>22</i>
<i>Tabela 5. Dados dos reservatórios do experimento de Sasaki (2005) utilizados no modelo .</i>	<i>34</i>
<i>Tabela 6. Características dos ensaios de estímulo-resposta realizados no reator UASB (Carvalho, 2006).</i>	<i>37</i>
<i>Tabela 7. Características da lagoa facultativa secundária</i>	<i>39</i>
<i>Tabela 8. Características dos traçadores</i>	<i>49</i>
<i>Tabela 9. Informações dos reatores</i>	<i>49</i>
<i>Tabela 10. Resultados estatísticos para as curvas DTR de reatores operados com variação de vazão afluente</i>	<i>55</i>
<i>Tabela 11. Parâmetros obtidos para os ensaios hidrodinâmicos realizados</i>	<i>56</i>
<i>Tabela 12. Parâmetros obtidos com o ajuste dos dados experimentais.....</i>	<i>58</i>
<i>Tabela 13. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos (E1V).....</i>	<i>61</i>
<i>Tabela 14. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos (E1C)</i>	<i>62</i>
<i>Tabela 15. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos (E2V).....</i>	<i>64</i>
<i>Tabela 16. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos (E2C)</i>	<i>65</i>
<i>Tabela 17. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos resultados das simulações dos modelos teóricos (E3V).....</i>	<i>67</i>
<i>Tabela 18. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos (reator E2DV).....</i>	<i>69</i>

<i>Tabela 19. Parâmetros obtidos com as simulações para os dados do reator UASB</i>	<i>77</i>
<i>Tabela 20. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelo modelo teórico para o ensaio hidrodinâmico sem variação cíclica de vazão.</i>	<i>79</i>
<i>Tabela 21. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelo modelo teórico para o ensaio hidrodinâmico com variação cíclica de vazão de 40%</i>	<i>84</i>
<i>Tabela 22. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelo modelo teórico para o ensaio hidrodinâmico com variação cíclica de vazão de 60%</i>	<i>88</i>
<i>Tabela 23. Valores da função objetivo para a simulação do modelo matemático com vazão e volume constante.....</i>	<i>100</i>
<i>Tabela 24. Valores das correlações entre os modelos e a curva experimental.....</i>	<i>102</i>
<i>Tabela 25. Valores da função objetivo para o modelo matemático proposto usando a variação afluenta de vazão Q_{v2}.....</i>	<i>103</i>
<i>Tabela 26. Dados dos coeficientes do ajuste dos modelos teóricos para o tratamento de dados utilizando a vazão variável Q_{v2}.....</i>	<i>106</i>
<i>Tabela 27. Valores dos parâmetros obtidos do modelo e da função objetivo.....</i>	<i>108</i>
<i>Tabela 28. Correlação, coeficiente de determinação e erro padrão dos modelos aplicados a curva DTR experimental para vazão afluenta Q_{v1}.....</i>	<i>110</i>
<i>Tabela 29. Correlação entre as curvas DTR adimensionais obtidas dos ensaios hidrodinâmicos realizado no reator CSTR.....</i>	<i>115</i>
<i>Tabela 30. Resultados dos parâmetros obtidos com o ensaio no reator CSTR.....</i>	<i>116</i>
<i>Tabela 31. Correlação entre as curvas DTR adimensionais obtidas dos ensaios hidrodinâmicos realizado no reator RH.....</i>	<i>119</i>
<i>Tabela 32. Resultados dos parâmetros obtidos dos ensaios hidrodinâmicos no reator RH.</i>	<i>120</i>
<i>Tabela 33. Correlação entre as curvas DTR adimensionais obtidas dos ensaios hidrodinâmicos realizado no reator RHLF</i>	<i>122</i>
<i>Tabela 34. Resultados dos parâmetros obtidos dos ensaios hidrodinâmicos no reator RHLF</i>	<i>123</i>
<i>Tabela 35. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos para o reator CSTR.....</i>	<i>127</i>
<i>Tabela 36. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos para o reator RH.....</i>	<i>128</i>

<i>Tabela 37. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos para o reator RHLF.....</i>	<i>131</i>
---	------------

LISTA DE SÍMBOLOS

D_L	Coeficiente de dispersão longitudinal
$\bar{u}$	Velocidade média de escoamento $[L \cdot T^{-1}]$
e	
$R(t')$	fração do material que entra no reator em um tempo t
$S(t')$	fração do material que sai no reator em um tempo t
Q	Vazão $[L^3 \cdot T^{-1}]$
Θ^*	Tempo adimensional
E_θ^*	Distribuição de tempo de residência adimensional
a e b	Parâmetros obtidos da otimização (Fernandez-Sempere et al., 1995)
θ'	tempo adimensional
$Q_s(t)$	Vazão na saída do sistema em função do tempo $[L^3 \cdot T^{-1}]$
$E(t)$	Curva de distribuição de tempo de residência $[T^{-1}]$
E_θ	Distribuição de tempo de residência adimensional
N	Número de tanques de mistura perfeita.
z	Variável de integração, proposta por Niemi (1977)
ξ	Variável tempo em que ocorreu a injeção na entrada do sistema, proposta por Niemi (1977) – $[T]$
Q_{out}	Vazão de saída $[L \cdot T^{-1}]$
Q_{in}	Vazão afluyente $[L \cdot T^{-1}]$
V	Volume $[L^3]$
t	Tempo t
τ	Tempo médio de residência $[T]$
d	Número de dispersão – [adimensional]
D	coeficiente de dispersão $[L^2 \cdot T^{-1}]$
u	velocidade de escoamento – $[L \cdot T^{-1}]$
C_t	concentração de traçador $[M \cdot V^{-1}]$
x	comprimento do reator $[L]$
A_r	área da seção transversal do reator $[L^2]$

r	velocidade de reação de consumo ou geração de produtos $[M \cdot V^{-2}]$
C_{in}	concentração de traçador na corrente de entrada $[M \cdot V^{-1}]$
$\bar{Q}$	vazão média $[L^3 \cdot T^{-1}]$
α	amplitude decimal relativa da vazão [adimensional]
ω	freqüência da variação da vazão $[T^{-1}]$
θ_h	tempo de detenção hidráulico teórico $[T]$;
A, w e X_c	parâmetros da função gaussiana obtidos pelo <i>Origin</i> – $[T]$.
$\bar{\theta}_h$	tempo de detenção hidráulica médio $[T]$
$E\Theta_t$	Distribuição tempo de residência adimensional – obtida do modelo matemático proposto
$E\Theta_{exp}$	Distribuição tempo de residência adimensional – experimental
σ_θ	Variância da curva $E(t)$ [adimensional]
$\frac{D}{u.L}$	Número de dispersão – [adimensional]
E	função distribuição tempo de residência – $[T^{-1}]$
C	concentração de traçador que sai na corrente efluente – $[M \cdot V^{-1}]$
M_o	Massa de traçador $[M]$
E_θ	Distribuição tempo de residência [adimensional]
$\bar{\theta}_h$	tempo médio de detenção hidráulica $[T]$
w	tempo de entrada do fluido no sistema $[T]$
$p(t,w)$	função distribuição de tempos de residência (DTR) em função dos tempos de saída do material que entrou no sistema $[T^{-1}]$
$p'(t,w)$	função distribuição de tempos de residência (DTR) em função dos tempos de entrada de material no sistema $[T^{-1}]$
$E\Theta_{sv}$	Distribuição tempo de residência – sem variação de vazão [adimensional]
$E\Theta_{cv}$	Distribuição tempo de residência – com variação de vazão [adimensional]
η	Tempo $[T]$
$p(z)$	Distribuição de tempo de residência em função da nova variável – z [adimensional]

SUMÁRIO

RESUMO	I
ABSTRACT	II
LISTA DE FIGURAS	III
LISTA DE TABELAS.....	IX
LISTA DE SÍMBOLOS	XII
SUMÁRIO.....	1
1. INTRODUÇÃO	1
2. PROPOSIÇÃO E OBJETIVOS.....	4
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
3.1 APLICAÇÃO DOS ESTUDOS HIDRODINÂMICOS A REATORES EM REGIME PERMANENTE.....	5
3.2 ESTUDO HIDRODINÂMICO DE REATORES EM ESTADO NÃO ESTACIONÁRIO	10
3.3 ESTUDOS HIDRODINÂMICOS DE LAGOAS DE ESTABILIZAÇÃO	18
4. MATERIAL E MÉTODOS	25
4.1 MODELO PROPOSTO	25
4.2 CALIBRAÇÃO E VERIFICAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO PROPOSTO.....	32
4.2.1 Determinação das curvas de distribuição de tempo de residência para os experimentos	40
4.2.1.1 Curvas de distribuição de tempo de residência para experimentos sem variação de vazão	41
4.2.1.2 Curvas de distribuição de tempo de residência para experimentos com variação de vazão.....	43
4.3 AVALIAÇÃO DAS TÉCNICAS DE ENSAIO ESTÍMULO-RESPOSTA (PULSO E DEGRAU) NOS AJUSTES DAS CURVAS EXPERIMENTAIS.....	48
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	51
5.1 CARACTERIZAÇÃO DAS CURVAS DE DISTRIBUIÇÃO DE TEMPO DE RESIDÊNCIA (DTR)	51
5.2 CALIBRAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO PROPOSTO COM EXPERIMENTOS EM ESCALA DE BANCADA	59
5.3 CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DO MODELO PARA REATORES EM ESCALA PILOTO	76
5.4 CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DO MODELO PARA REATORES EM ESCALA REAL	99
5.5 INFLUÊNCIA DAS TÉCNICAS DE ENSAIO ESTÍMULO-RESPOSTA (PULSO E DEGRAU) NA DETERMINAÇÃO DAS CURVAS DE DISTRIBUIÇÃO DE RESIDÊNCIA	112
5.6 INFLUÊNCIA DAS TÉCNICAS DE ENSAIO ESTÍMULO-RESPOSTA (PULSO E DEGRAU) NOS AJUSTES DOS MODELOS MATEMÁTICOS UNIPARAMÉTRICOS.....	124
6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES	135
7. REFERÊNCIAS	140

1. INTRODUÇÃO

O estudo do comportamento hidrodinâmico de reatores contribui para o aumento da eficiência desses sistemas. Conhecer o comportamento hidrodinâmico de reatores permite obter equações de desempenho e modelos mais satisfatórios.

A caracterização do escoamento de reatores é determinada pela distribuição dos tempos de residência (DTR) do fluido que escoa através do vaso. A DTR é obtida por meio de uma técnica experimental, denominada técnica de estímulo-resposta, com injeção de traçadores. A utilização do método de resposta por meio do uso de traçadores dinâmicos é comum na engenharia química para avaliar quantitativamente os parâmetros cinéticos e o transporte em reatores químicos, bem como em outros tipos de reatores de fluxo. Com o amplo uso e evolução da técnica de estímulo-resposta, ultimamente ela tem sido utilizada por indústrias de petróleo e petroquímica, produção mineral e setores de cristalização.

O conceito de distribuição de tempo de residência, desenvolvido por Danckwerts em 1953, é utilizado até hoje na obtenção de modelos matemáticos que auxiliam o entendimento e otimização dos processos. Ademais, as curvas DTR podem ajudar na quantificação das anomalias do escoamento como zonas mortas, caminhos preferenciais e curto-circuito que ocorrem em reatores, em unidades em escalas de laboratório, piloto e real.

De forma geral, para a caracterização hidrodinâmica de reatores consideram-se dois tipos de escoamentos ideais na modelação: escoamento pistonado e escoamento de mistura completa pois, para a maioria dos casos os dois citados escoamentos resultam em desempenhos diferentes. Ainda, um dos dois escoamentos, na maioria das vezes, adapta-se ao processo escolhido e ambos são simples de tratar (LEVENSPIEL, 1999).

Porém, os reatores reais sempre se desviam dos escoamentos ideais; e particularmente os sistemas de estação de tratamento de esgotos freqüentemente são afetados pela grande variabilidade nas vazões de entrada.

As estações de tratamento de esgoto doméstico recebem volumes de efluentes que variam em função da demanda de água consumida – demanda continuamente variável ao longo do dia; com vazão que atinge valores máximos em torno do meio dia (em alguns casos

podem ocorrer dois picos de valores máximos) e valores mínimos durante a madrugada. Os reatores sofrem, também, influência de fenômenos como a evaporação, a estratificação térmica e efeitos do vento, pois muitos são abertos para a atmosfera.

Nas pesquisas para determinação de modelos hidrodinâmicos, via de regra, entre as hipóteses consideradas está a operação em regime permanente. No entanto, trabalhos como o realizado por Fan e Nassar em 1979, já apontavam a necessidade de, nos modelos matemáticos, considerar o escoamento não permanente como forma de se obter melhores simulações do comportamento real dos reatores estudados.

Uma das publicações pioneiras – em relação ao uso de estado transiente nos estudos hidrodinâmicos – foi realizada por Nauman (1969), cujo conceito foi aprimorado por Niemi em 1977.

A partir da década de 90 surgiram novas pesquisas em relação ao uso de estado não estacionário nos estudos hidrodinâmicos. Fernandez-Sempere et al. (1995), Zenger (2003), Claudel et al. (2000), Rawatlal e Starzak (2003) – entre outros – desenvolveram trabalhos em relação à variação de vazão na entrada de sistemas de fluxo. Porém, foi observado que não existe consenso entre as pesquisas. Por exemplo, a de Fernandez-Sempere et al. (1995) foi contestada por Ylinen e Niemi (1997). De acordo com Ylinen e Niemi. (1997), as formulações de Fernandez-Sempere et al. (1995) foram as mesmas obtidas no trabalho de Niemi (1977).

Em relação às pesquisas referidas acima, outro problema observado está relacionado à escassez de trabalhos que verifiquem a confiabilidade dos modelos matemáticos teóricos desenvolvidos. As formulações propostas por Niemi (1977), em trabalho publicado há três décadas, foram aplicadas em 2005 em experimentos realizados por Sasaki (2005).

Nas pesquisas abordadas, além desses conflitos relatados acima foram também notadas escassez de resultados relativos aos modelos com escoamento pistonado em regime não permanente e aplicação dos modelos em reatores com escalas superiores a escala de bancada.

Neste contexto, observa-se que a problemática do modelo a ser usado para o estudo das curvas de distribuição do tempo de residência obtidas por meio de ensaios de traçadores foi e continua a ser tópico de estudo de vários pesquisadores. Assim, nesta tese foi proposto um modelo matemático simplificado para estudar a hidrodinâmica de reatores, em especial para o reator UASB (Upflow Anaerobic Sludge Blanket).

O reator UASB é bastante utilizado no Brasil para tratamento de efluentes de águas residuárias e industriais. O uso de um modelo matemático adequado pode auxiliar na

compreensão dos efeitos da variação da vazão nas características hidráulicas e cinéticas desse sistema. Embora o uso do reator UASB seja amplamente difundido, os estudos do comportamento hidráulico do reator submetido a variações de vazão afluyente são poucos.

No Departamento de Hidráulica e Saneamento da Escola de Engenharia de São Carlos existem pesquisas com objetivo de estudar o comportamento dinâmico do reator UASB submetido a variações cíclicas diárias, com destaques para os trabalhos de Carvalho (2006) – Resposta dinâmica de reator UASB em escala piloto submetido a cargas orgânicas e hidráulicas cíclicas: resultados experimentais e modelos matemáticos; Carvalho (2002) – Resposta dinâmica dos reatores UASB (Upflow Anaerobic Sludge Blanket) submetidos a cargas orgânicas e hidráulicas cíclicas – modelação matemática. Dessa maneira, esse trabalho visa a contribuir nessa linha de pesquisa.

A utilização de um modelo matemático completo demanda a determinação de muitos parâmetros, tornando sua resolução bastante complexa. A simplificação do modelo, em primeira aproximação, não interfere significativamente na análise dos efeitos da variação da vazão sobre as curvas de resposta de concentração do traçador, e evita a complexidade de se determinar os parâmetros necessários para um modelo matemático completo. O modelo matemático proposto nesta pesquisa limita-se apenas ao comportamento hidrodinâmico. No modelo foi contemplado o circuito hidráulico do reator, composto de uma câmara tubular.

No modelo matemático proposto foi considerado regime de escoamento pistonado em estado não estacionário e levando-se em conta a dispersão. Com a utilização do modelo foi possível examinar a influência da variação de vazão afluyente na determinação dos parâmetros hidrodinâmicos como o número de dispersão, além de outras características hidrodinâmicas do escoamento que ocorre em reatores.

O desenvolvimento desse modelo permite avaliar a interferência da variação da vazão nos resultados da caracterização hidrodinâmica de reatores submetidos à variação de vazão afluyente quando o estudo considera as formulações usuais desenvolvidas para regime permanente

Como dados de entrada do modelo proposto, além dos dados do reator UASB, foram aplicados dados de um reator em escala real (lagoa de estabilização) e reatores em escalas de laboratório. Os resultados das simulações foram avaliados por meio de técnicas estatísticas para averiguar a confiabilidade do modelo, nesses casos particulares.

2. PROPOSIÇÃO E OBJETIVOS

A proposta desta tese foi testar a hipótese de que a variação real de vazão afluyente em sistemas de tratamento de águas residuárias afeta significativamente a caracterização hidrodinâmica dos referidos sistemas quando são usadas as formulações usualmente desenvolvidas para regime permanente.

O objetivo desta pesquisa foi avaliar os efeitos da variação de vazão na determinação das curvas de distribuição de tempo de residência e quantificar os parâmetros obtidos com essa variação.

Para atender esta proposta foi desenvolvido um modelo matemático para simular o comportamento dos reatores submetidos à variação de vazão.

Com base neste objetivo, esta tese contemplou outras finalidades:

- Verificar o modelo matemático por meio de resultados experimentais obtidos da literatura (SASSAKI, 2005; CARVALHO, 2006; MOREIRA, 2006).
- Comparar os resultados da calibração com os dados experimentais do modelo matemático proposto aos resultados dos modelos matemáticos desenvolvidos por Levenspiel (1999) e Niemi (1977);
- Comparar os resultados das simulações de modelos matemáticos com dados obtidos da utilização das técnicas de estímulo-resposta – pulso e degrau,
- Comparar o uso de diferentes traçadores colorimétricos nos ensaios estímulo-resposta – pulso e degrau.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na revisão de literatura foram abordadas informações sobre diversos aspectos correlacionados ao estudo hidrodinâmico e sua aplicação em reatores.

Também foram levantados dados de pesquisas sobre o estudo hidrodinâmico para sistemas em estado não permanente que fornecessem subsídios para este trabalho.

3.1 APLICAÇÃO DOS ESTUDOS HIDRODINÂMICOS A REATORES EM REGIME PERMANENTE

Danckwerts (1953) realizou as primeiras pesquisas para obtenção das funções de distribuição de tempos de residência relacionadas a sistemas alimentados com vazão constante. Desde então, a análise DTR é aplicada para investigar vários processos em: indústrias químicas e petroquímicas, processamento mineral e metalúrgico, tratamento de águas residuárias, proteção ambiental e engenharia civil (LECLERC et al., 2000).

A partir das pesquisas de Danckwerts (1953), as metodologias para obter as curvas de DTR têm sido aprimoradas e, a cada vez, mais utilizadas.

Thackston et al. (1967) utilizaram o estudo hidrodinâmico para estimar o coeficiente de mistura longitudinal (coeficiente de dispersão) do modelo de dispersão (equação 3.1). Os autores testaram três metodologias:

- Método desenvolvido por Levenspiel e Smith (1957);
- Método desenvolvido por Harris (1963) e
- Método dos mínimos quadrados.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.1)$$

Os pesquisadores realizaram testes com traçadores – injeção tipo pulso – para obter os valores de D_L e $\bar{u}$ pelas metodologias citadas acima. Segundo os autores, espera-se sempre que utilizando o método dos mínimos quadrados nos resultados da simulação encontre-se o melhor ajuste, se o melhor ajuste for definido como o menor erro padrão. De acordo com Thackston et al. (1967), as metodologias definidas por Levenspiel e Smith (1957) e por Harris (1963) podem ser consideradas eficientes para determinar os valores dos parâmetros D_L e $\bar{u}$.

Thackston et al. (1967) ressaltaram que grande parte de resultados incertos e poucos confiáveis em relação ao parâmetro D_L é devido ao fato de muitas pesquisas utilizarem métodos de estimação incertos.

Levenspiel e Turner (1970) ressaltaram a importância e o cuidado na escolha dos métodos de injeção de traçadores. Quando o perfil de velocidade for uniforme no reator, no qual será realizada a injeção de traçador para obter a hidrodinâmica, a curva distribuição tempo de residência (DTR) será obtida diretamente. Porém, se no ponto de aplicação do traçador, a velocidade não for uniforme será preciso considerar o perfil da velocidade nos cálculos das curvas DTR. Levenspiel et al. (1970) descreveram as diferentes curvas que podem ser obtidas – por meio da técnica estímulo resposta – em escoamentos com difusão desprezível.

Heertjes e Van der Meer (1978), em ensaios de estímulo resposta, utilizaram lítio como traçador para descrever o escoamento de um reator de fluxo ascendente. Os pesquisadores fizeram o experimento, em escala piloto, com as seguintes dimensões: volume 30 m^3 , altura 6 m e diâmetro 2,6 m; em reator de fluxo ascendente utilizado para o tratamento de água residuária.

Para analisar os dados, Heertjes e Van der Meer (1978) propuseram um modelo no qual a combinação de duas regiões de mistura perfeita descreve o leito do lodo, enquanto que o escoamento do líquido foi descrito como pistonado.

Com as conclusões obtidas a partir do estudo no reator em escala piloto, Heertjes e Van der Meer (1978) sugeriram um projeto de reator de fluxo ascendente em escala real com volume de 200 m^3 . Para esse volume, os autores recomendaram aumentar o diâmetro do reator e manter a mesma altura do reator em escala piloto.

A partir do estudo de Heertjes e Van der Meer (1978), Heertjes e Kuijvenhoven (1982) construíram o reator em escala real e estudaram a distribuição de tempo de residência para os dois reatores de fluxo ascendente: reator em escala piloto e reator proposto em escala real. O traçador utilizado nos ensaios hidrodinâmicos foi o cloreto de lítio.

Os resultados dos modelos aplicados, indicaram que o reator em escala piloto obteve melhor ajuste com o modelo de três tanques de mistura perfeita e que o reator em escala real apresentou melhor ajuste com modelo de dois tanques de mistura perfeita. Uma das justificativas para as diferenças encontradas nos ajustes dos modelos apontadas pelos autores, foi a proporção da altura do leito de lodo nos reatores, em torno de 2 – 3 m – para o reator em escala piloto – e de 0.4 m para o reator em escala real. Heertjes e Kuijvenhoven (1982) também referiram a grande quantidade de lodo gerado no reator em escala real como causadora da diferença de números de tanques de mistura perfeita no ajuste dos modelos. Segundo os autores, o excesso de lodo possivelmente teria ocasionado uma região de espaço no reator em escala real que interferiu no ajuste do modelo.

Os resultados obtidos nas pesquisas de Heertjes e Van der Meer (1978) e Heertjes e Kuijvenhoven (1982) demonstraram que com o conhecimento da hidrodinâmica do reator é possível aumentar a escala sem perder a eficiência. Além disso, foi possível observar que parâmetros tais como: quantidade de lodo, altura do leito de lodo, diâmetro do reator entre outros podem interferir no ajuste do modelo

Ao longo dos anos apareceram outras propostas de modelos matemáticos para auxiliar nos estudos hidrodinâmicos de reatores.

Briens e Margaritis (1995) desenvolveram modelo estocástico simples – com três parâmetros – para descrever os efeitos de vários fenômenos sobre a distribuição do tempo de residência, tais como: recirculação e dispersão da velocidade longitudinal.

Burkhardt et al. (2002) estudaram a influência da direção do escoamento – ascendente e descendente – sobre a dispersão axial na fase líquida em reatores de escala de bancada. Eles realizaram ensaio estímulo – resposta com traçador radioativo para medir a dispersão axial no leito catalítico do reator e desconsideraram as extremidades do reator.

Burkhardt et al. (2002) ajustaram o modelo de escoamento pistonado com dispersão aos dados experimentais para determinar valores de parâmetros de dispersão para fluxo ascendente e descendente no reator estudado. Nos ensaios foram representadas condições de operação e escoamento para processos de dessulfurização.

Os estudos demonstraram boa concordância no ajuste dos dados experimentais e do modelo escolhido. Os autores concluíram que para o caso da dessulfurização o reator em questão apresenta melhor desempenho quando operado em fluxo ascendente e recomendaram que, para ser utilizado na construção de reatores em escala real, sejam efetuados estudos experimentais em escala piloto para serem obtidos valores de fator de escala mais precisos

O uso de modelos compartimentados – interconexão de modelos elementares: pistonado e mistura perfeita – é bastante empregado para simular e interpretar distribuição tempo de residência.

Baseado nesse fato, Claudel et al. (2000) desenvolveram um software “Computer Fluid Dynamics – CFD” para auxiliar a determinação de valores de parâmetros de sistemas com escoamento. Os autores referem que esse software permite a criação de redes complexas de reatores básicos interconectados e pode otimizar os valores dos parâmetros para os sistemas estudados.

Posteriormente, Claudel et al. (2003) desenvolveram novo algoritmo para geração automática de modelos compartimentados baseados tanto em dados obtidos das curvas DTR (cauda, número de picos etc.) como na descrição física dos processos estudados (presença de agitadores, zona morta etc.). O algoritmo desenvolvido pelos autores leva em consideração 40 modelos compartimentados obtidos da literatura. A Figura 1 apresenta alguns exemplos dos modelos utilizados pelos autores.

Segundo Claudel et al. (2003), os 40 modelos adotados no programa representam a maior parte dos processos industriais.

Figura 1. Exemplos dos modelos adotados no algoritmo desenvolvido por Claudel et al. (2003).

Fonte: Claudel et al. (2003)

Para a solução do algoritmo, Claudel et al. (2003) adotaram: sistema especializado em rede neural, lógica fuzzy e lógica da possibilidade. Com a entrada dos dados do reator a ser analisado, o algoritmo gera lista de modelos com indicação do mais provável e fisicamente

representativo ao menos provável. Na lista de dados de entrada do modelo não existe informações sobre o escoamento ser ou não permanente. Em pesquisa anterior a essa, Claudel et al. (2000) estudaram a influência do escoamento não permanente na determinação de curvas DTR.

Além disso, Claudel et al. (2003) nesse projeto têm como objetivo incluir a validação quantitativa do método pela otimização dos parâmetros contidos nas formulações.

O estudo hidrodinâmico pode auxiliar na análise da interferência de fenômenos como: dispersão, transferência sólido-líquido, gás-líquido entre outros – no desempenho de reatores.

A influência da dispersão axial em um reator de leito anaeróbio de fluxo ascendente (UASB) foi estudada por Zeng et al. (2005) com uso de ensaios hidrodinâmicos. Os autores utilizaram modelo compartimentado para avaliar a dispersão no reator UASB.

O modelo foi dividido em dois compartimentos: um compartimento para descrever o leito de lodo e o outro a zona líquida. A solução numérica do modelo contou com auxílio do algoritmo de colocação ortogonal. Os valores dos parâmetros do modelo foram estimados por meio do ensaio estímulo-resposta com uso do traçador rodamina. Os autores determinaram valores de coeficiente de dispersão similares para zona de leito do lodo e zona líquida. Ademais, o estudo realçou a importância de considerar dispersão axial nos estudos de reatores UASB.

Harris et al. (2003) utilizaram a distribuição do tempo de residência com o intuito de avaliar a influência da geometria de saída de um reator de leito fluidificado nas condições operacionais do reator. Para determinar as curvas DTR os autores utilizaram a técnica estímulo-resposta com adaptação para reatores de leito fluidificado.

Os estudos desenvolvidos por Harris et al. (2003) demonstraram a influência da geometria da saída sobre as condições operacionais, como por exemplo: na velocidade superficial do gás e no fluxo de sólidos.

Iliuta et al. (1999) avaliaram a influência da difusão intra-partículas no coeficiente de dispersão axial em reator trifásico contendo partículas porosas. Os autores utilizaram modelo de escoamento pistonado com dispersão para estudar o tempo de residência, a transferência de massa e coeficiente de retorno e mistura do líquido nos reatores. O balanço de massa do ensaio de traçador utilizado para a zona líquida dinâmica, zona líquida estática e para a partícula sólida foi avaliado.

Por meio do ensaio e do modelo utilizado, Iliuta et al. (1999) demonstraram influência da difusão intra-partículas no parâmetro de dispersão axial e dificuldades para estimar

transferência de massa entre partícula e fase líquida estática, assim como transferência de massa entre fase líquida estática e dinâmica.

3.2 ESTUDO HIDRODINÂMICO DE REATORES EM ESTADO NÃO ESTACIONÁRIO

Nauman (1969) avaliou a teoria de distribuição de tempo de residência para reatores com escoamento de mistura em regime não estacionário e formulou tratamento de dados para ensaios estímulo-resposta pulso. O autor determinou funções para distribuições de tempo de residência dos materiais que entram e saem do vaso. A relação entre as duas funções mostrou que a variação da vazão influencia no escoamento.

Nauman (1969) impôs três condições para a operação:

- $V(\theta) \Rightarrow$ é limitado por θ ; $0 \leq V(\theta) \leq V_{\max}$;
- Se $Q_{out} = 0$ para todo $\theta > t$, então $V=0$ para $\theta < t$. Ou seja, $\int_t^{\infty} \frac{Q_{out}}{V} d\theta$ deve convergir e,
- Se $Q_{in} = 0$ para todo $\theta < t$ então $V=0$ para todo $\theta < t$.

Q_{in} , Q_{out} e V são vazão de entrada, vazão de saída e volume, respectivamente. Em qualquer tempo, Q_{in} , Q_{out} e V são relacionados por:

$$\frac{dV}{d\theta} = Q_{in} - Q_{out} \quad (3.2)$$

Duas funções básicas de distribuição de tempo de residência podem ser definidas para o reator em estado não estacionário (Nauman, 1969). As funções são:

- $R(t, t')$ – fração do material que entra no reator em um tempo t , o qual permanecerá no reator por um tempo maior do que $t + t'$.
- $S(t, t')$ – fração do material que sai do reator no tempo t , o qual permaneceu no reator por uma duração maior do que t' . Ou seja, fração do material deixando o reator no tempo t o qual entrou antes do tempo $t - t'$. O símbolo t representa o tempo real (ou absoluto) enquanto t' representa tempo de residência.

Para o estado estacionário $R(t')$ e $S(t')$ são as mesmas funções. A equação (3.3) define as funções.

$$R(t') = S(t') = e^{-Q t' / V} = e^{-t' / \bar{t}} \quad (3.3)$$

$Q = Q_{in} = Q_{out}$ = vazão, vazão de entrada e vazão de saída respectivamente – $[L^3 \cdot T^{-1}]$
 $\bar{t}$ é o tempo de residência médio – $[T]$.

Para o estado não estacionário, o autor determinou a distribuição do tempo de residência para o material que, por meio da manipulação das vazões de entrada e saída, deve sair do reator quando o estado do escoamento é não estacionário

Em 1977, Niemi ampliou o estudo de Nauman (1969) definindo novas variáveis para estudos hidrodinâmicos em sistemas com vazão afluyente variável. O autor considerou um sistema constituído com apenas vazão de alimentação variável, mantendo-se constante todos os outros parâmetros independentes. A formulação foi baseada na conservação da quantidade de traçador.

Baseado nessas considerações, Niemi (1977) desenvolveu formulações para a distribuição tempo de residência na entrada e na saída do reservatório.

Essas formulações são definidas como p e p' , em que p é a função distribuição tempo de residência na saída do reservatório e p' é a função na entrada. O desenvolvimento das formulações p e p' , que foram utilizadas nesta pesquisa, está descrito no capítulo Material e Métodos.

Sasaki (2005) avaliou os modelos desenvolvidos por Niemi (1977). A autora avaliou macro-mistura da fase líquida em tanques de aeração alimentados com vazão constante e variável.

A técnica utilizada para determinar a distribuição de tempo de residência (DTR) foi estímulo-resposta. Foram determinadas as DTR para as unidades com vazão constante; posteriormente, os sistemas foram operados com vazão variável e foram determinadas as curvas DTR para essa condição.

A autora concluiu que as curvas DTR – determinadas pela metodologia de Niemi (1977), para os sistemas alimentados com vazão variável – apresentaram resultados compatíveis aos obtidos nos ensaios com vazão constante.

Iodarche e Corbu (1986) desenvolveram modelo de mistura para determinação do tempo de residência. Os resultados obtidos no modelo, permitiram que os autores concluíssem que flutuações aleatórias no escoamento podem afetar o comportamento do reator.

Fernandez-Sempere et al. (1995) desenvolveram formulações para escoamento não estacionário e realizaram estudos hidrodinâmicos para validar os modelos desenvolvidos. Os autores estudaram o efeito do descarte de águas residuárias descartados pela Alicante University Science Faculty no sistema municipal de tratamento de águas residuárias.

Os autores, que utilizaram a técnica de estímulo-resposta pulso e cloreto de sódio como traçador, concluíram que a função distribuição tempo de residência obtidas nas duas formas – com vazão variável e vazão constante – não apresentaram significativas diferenças.

Na pesquisa, Fernandez-Sempere et al. (1995) determinaram uma nova variável adimensional denominada Θ^* (equação 3.4), baseada nessa variável os autores determinaram as curvas dos modelos para um tanque de mistura perfeita – equação (3.5), N tanques de mistura-perfeita em série, equação (3.6).

$$\Theta^* = \int_0^t \left(\frac{Q_{out}}{V} \right) dt \quad (3.4)$$

$$E_{\theta}^* = \exp(-\Theta^*) \quad (3.5)$$

$$E_{\theta}^* = \left[N \frac{(N\Theta^*)^{N-1}}{(N-1)!} \right] \cdot \exp(-N\Theta^*) \quad (3.6)$$

Os autores consideraram a variação de volume de acordo com a equação (3.7).

$$V = aQ_{out}^b \quad (3.7)$$

Em que:

- Θ^* - tempo adimensional;
- Q_{out} – vazão na saída do sistema $[L^3 \cdot T^{-1}]$;
- V – volume do sistema $[L^3]$;
- E_{θ}^* - distribuição de tempo de residência adimensional;

- N – número de tanques de mistura perfeita.
- a e b são parâmetros obtidos da otimização – por meio do método simplex otimizado – com objetivo de obter o tempo de residência médio adimensional mais próximo para cada simulação testada.

Porém, os resultados encontrados por Fernandez-Sempere et al. (1995) foram contestados por Ylinen e Niemi (1997) porque, de acordo com Ylinen e Niemi (1997), os modelos obtidos para vazão variável e volume constante os casos foram os mesmos obtidos por Niemi (1977).

Ademais, Ylinen e Niemi (1997) também contestaram os resultados dos modelos – com volume e vazão variáveis, por considerarem que os resultados obtidos por Fernandez-Sempere et al. (1995) foram baseados em hipóteses duvidosas. Fernandez-Sempere et al. (1997) responderam as críticas de Ylinen e Niemi (1997), os autores alegaram desconhecer os trabalhos citados e agradeceram as sugestões fornecidas.

Claudel et al. (2000) estudaram o conceito de distribuição de tempo de residência para reatores em regime não permanente. Os autores submeteram dois reatores a vazões de entrada com diferentes amplitudes e frequência. Foi utilizado um reator de lodo ativado de tratamento de água residuária em escala piloto com comprimento de 0,500 m; 0,300 m de largura e 0,205 m de altura. O reator era dividido em vários compartimentos. O segundo reator testado era uma coluna de leito fixo com recirculação e o leito do reator composto de esferas de vidro de diâmetro de 2 mm e porosidade de 0,38. O reator possuía altura: 1,100 m e diâmetro: 0,050.

Nos ensaios, Claudel et al. (2000) utilizaram uma solução de sal e injeção pulso. Durante os testes os volumes foram mantidos constantes.

As formulações dos autores para o estado não estacionário (vazão variável e volume constante) estão descritas nas equações(3.8) a (3.12). Sendo os modelos de mistura perfeita, N- tanques de mistura perfeita em série e pistonado representados pelas equações (3.9) a (3.12), respectivamente.

$$\theta' = \frac{1}{V} \int_0^t Q_s(t) dt \quad (3.8)$$

$$E_{\theta'} = \frac{E(t)V}{Q_s(t)} \quad (3.9)$$

$$E_{\theta'} = \exp[-\theta'] \quad (3.10)$$

$$E_{\theta'} = \frac{N[N\theta']^{N-1}}{(N-1)!} \exp[-N\theta'] \quad (3.11)$$

$$E_{\theta'} = \partial[1 - \theta'] \quad (3.12)$$

Em que:

- θ' - tempo adimensional;
- $Q_s(t)$ – vazão na saída do sistema em função do tempo $[L^3 \cdot T^{-1}]$;
- V – volume do sistema $[L^3]$;
- $E(t)$ – curva de distribuição de tempo de residência $[T^{-1}]$
- $E_{\theta'}$ – distribuição de tempo de residência adimensional;
- N – número de tanques de mistura perfeita.

De acordo com Claudel et al. (2000), os resultados demonstram que os modelos dependem da vazão, porém, em regime não permanente a teoria da DTR pode ser aplicada utilizando os modelos determinados a partir da vazão média no estado estacionário. Os autores encontram resultados similares para os modelos aplicados em ambos regimes: não-permanente e permanente.

A Figura 2 mostra alguns dos resultados encontrados por Claudel et al. (2000).

Zenger (2003) desenvolveu uma teoria sistemática para análise e controle de projetos de sistemas de transporte de material com escoamento em estado não estacionário. As condições impostas nos estudos foram:

- O perfil de velocidade das partículas através do sistema não se altera apesar das variações de vazão.
- Se a função da escala tempo for modificada para escala volumétrica (escala Z) a DTR de entrada e saída tornam-se iguais.
- O sistema teórico proposto considera modelo de mistura perfeita, séries de mistura perfeita e possível curto-circuito, vazão de recirculação

Figura 2. Resultados para o reator de lodo ativado com $\bar{Q} = 1 \text{ l.min}^{-1}$ – (a) período: 10 min; (b) período: 20 min. Resultados para o leito fixo – $\bar{Q} = 3 \text{ l.min}^{-1}$ – (c) período 10 s e (d) período: 40 min.

Fonte: adaptado de Claudel et al. (2000).

Para desenvolver os estudos o autor utilizou um reator em escala de laboratório. Zenger (2003) avaliou as curvas DTR sob condições de estado não estacionário usando traçadores radioativos e químicos. O autor baseou suas formulações na pesquisa de Niemi (1977). As formulações de Niemi (1977) estão descritas no capítulo Material e Métodos deste trabalho.

Zenger (2003) considerou a variação do volume do sistema estudado na nova variável de tempo. A equação (3.13) mostra a variável z em função da vazão e volume variáveis e a equação (3.14) mostra a curva de distribuição de tempo de residência para essa condição (volume e vazão variáveis).

$$z = \int_{t_0}^t \frac{Q_{in}(v)}{V(v)} dv \quad (3.13)$$

$$p(z, \xi) = \frac{Q_{out}(t) V(t)}{Q_{in}(t) V(\tau)} e^{-(z-\xi)} \quad (3.14)$$

Em que:

- z – variável de integração;
- ξ – Variável tempo em que ocorreu a injeção na entrada do sistema, proposta por Niemi (1977) – $[T]$;
- Q_{in} e Q_{out} – vazão de entrada e saída, respectivamente – $[L \cdot T^{-1}]$;
- V – volume $[L^3]$ e
- t e τ – tempo e tempo médio de residência, respectivamente – $[T]$.

No primeiro teste, no qual foi utilizado hidróxido de sódio – NaOH como traçador químico, Zenger (2003) manteve constantes o volume e a vazão afluyente. Foram testadas três vazões constantes ($Q = 550 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$, $760 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ e $900 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$) com volume constante de 1200 mL. Depois o autor executou outro teste tipo pulso com o traçador químico NaOH, porém sob condições não estacionárias. A variação foi tipicamente senoidal com vazão média de $750 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ e amplitude de $225 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$.

Zenger (2003) submeteu o mesmo reator a teste com traçadores radioisótopos. Primeiramente o autor realizou teste considerando estado estacionário. Ele fixou o volume para três diferentes valores de vazões constantes ($Q = 550 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$, $760 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ e $900 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$) com volume constante de 1200 mL para todos os casos. Depois repetiu o teste com o traçador radioisótopo para vazão afluyente e volume variando senoidalmente ($Q = 650 + 200 \sin(2\pi t/T) \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ e $V = 980 + 150 \sin((2\pi t/T))$, para $T = 50 \text{ min}$, 25 min e 15 min).

O autor concluiu que as curvas DTR – obtidas para o reator testado como mistura perfeita – ficaram bem próximas tanto para a operação com vazão e volume constantes, como para volume e vazão variáveis. Posteriormente, aos testes com traçadores químicos e radioisótopos em reatores com escoamento de mistura perfeita, Zenger (2003) aplicou os testes em um reator escala piloto com escoamento próximo ao pistonado. Os resultados obtidos foram similares aos resultados determinados para os ensaios em reatores de mistura perfeita; ficaram bastante próximas as curvas DTR – com vazão e volume constantes ou volume e vazão variáveis.

Em relação aos tipos de traçadores utilizados na pesquisa, Zenger (2003) concluiu que o traçador radioisótopo foi bem ajustado aos testes de laboratório para determinação da DTR. Porém, o autor advertiu que esse tipo de traçador é menos sensível em relação aos distúrbios do escoamento e praticamente limitado ao uso do teste tipo pulso. O traçador químico utilizado na pesquisa (NaOH) é aplicável à medição instantânea; o autor ressalva, porém, que pode conduzir a resultados inexatos no teste tipo pulso.

Rawatlal e Starzak (2003) desenvolveram metodologia para ser aplicada em modelos baseados nas curvas DTR de reatores químicos operados em estado não-estacionário. Os autores utilizaram técnicas de balanços populacionais para desenvolver o estudo e assumiram que o escoamento do vaso em estudo era mistura perfeita. A primeira etapa do estudo considerou um reator de mistura perfeita, depois os autores estenderam a modelação desenvolvida para N reatores em série de mistura perfeita.

Para avaliar o efeito da vazão variando com o tempo sobre a curva DTR do vaso, Rawatlal e Starzak (2003) realizaram simulações numéricas considerando três hipóteses:

- Vazão de entrada e saída constante;
- Mudanças nas etapas de alimentação – sistemas descontínuos, por exemplo: aumento na vazão de entrada do sistema e decréscimo na vazão de saída,
- Vazões de entrada e saída variando senoidalmente.

Com os resultados obtidos das simulações, Rawatlal e Starzak (2003) concluíram que o modelo proposto pode determinar a DTR quer para escoamentos contínuos quer para descontínuos. Eles também ressaltaram o potencial do modelo desenvolvido para ser utilizado em trabalhos com reações de polímeros.

Furman et al. (2005) estudaram características hidrodinâmicas de um reator de leito empacotado – escala piloto – sob escoamento não estacionário. Os autores utilizaram traçador colorimétrico. Foram instalados detectores na entrada e saída do reator para medirem a concentração de traçador nesses pontos. Os autores fizeram experimentos sob estado estacionário com vazão de 16,7; 33,3 e 50, 0 cm^3/s .

Após a caracterização hidrodinâmica do reator sob estado estacionário, Furman et al. (2005) desenvolveram ensaios com vazão variando ao longo do tempo. A Figura 3 mostra a variação da vazão adotada para o ensaio.

Figura 3. Variação da vazão durante o ensaio de traçador.
Fonte: Furman et al. (2005).

No trabalho realizado por Furman et al. (2005), foram similares os resultados obtidos para a determinação dos tempos de residência experimentais – sob estado estacionário e não estacionário. Contudo, os autores ressaltaram a importância de considerar variação de vazão para determinar valores de parâmetros relevantes para aplicações em escala real.

3.3 ESTUDOS HIDRODINÂMICOS DE LAGOAS DE ESTABILIZAÇÃO

Na maioria dos trabalhos pesquisados para a revisão foi observado que grande parte dos estudos hidrodinâmicos de lagoas de estabilização não considera a variação de vazão afluente nas formulações dos modelos.

Zuber (1986) desenvolveu uma formulação geral por meio das curvas obtidas por ensaio estímulo-resposta pulso em aquíferos. No trabalho foram abordadas formulações com vazão constante e vazão variável. Ademais, nas formulações do estudo hidrodinâmico, o autor considerou zonas mortas, por meio, da consideração do volume ativo e inativo. Nas formulações também foram abordadas as variações de vazão e volume.

Zuber (1986) concluiu que as formulações empregadas e suas considerações são usualmente empregadas nas investigações de bacias hidrográficas de pequenos volumes e de geleiras. O autor ressalta a necessidade de possuir os dados de concentração e vazão de

entrada – além dos dados de concentração e vazão de saída – para usar as formulações desenvolvidas.

Juanico (1991) avaliou o efeito do padrão de escoamento nos projetos de lagoas de estabilização por meio de modelação matemática. O autor usou como critério de avaliação a influência do escoamento em relação à:

- dois parâmetros com constantes de remoção diferentes (coliformes e DBO),
- carregamento hidráulico constante e
- mudanças no carregamento hidráulico devido ao final de semana.

A Tabela 1 apresenta as características da lagoa simulada.

Tabela 1. Dados de entrada da lagoa simulada

Dados da simulação	
volume	15.000 m ³
Vazão média afluente	1000 m ³ .d ⁻¹
Tempo de residência médio	15 d
Concentração de coliformes no afluente	1*10 ⁶ /100cc
Concentração de DBO no afluente	100 mg.L ⁻¹
Constante de remoção de bactérias	6 d ⁻¹
Constante de remoção de DBO	0,03 d ⁻¹
Variações no carregamento hidráulico	
Estacionário	1000 m ³ .d ⁻¹
Mudança 1	875 m ³ .d ⁻¹ (5 dias na semana)
	1313 m ³ .d ⁻¹ (2 dias na semana)
Mudança 2	778 m ³ .d ⁻¹ (5 dias na semana)
	1555 m ³ .d ⁻¹ (2 dias na semana)

Fonte: adaptado de Juanico (1991).

Com as simulações obtidas, o pesquisador concluiu que as lagoas projetadas com escoamento pistonado possuem desempenho melhor do que as lagoas com escoamento de mistura perfeita em relação a remoção de coliformes. Em relação às mudanças no regime de carregamento hidráulico – no caso estudado devido às sobrecargas hidráulicas existentes no final de semana – não interferiram na qualidade do efluente das lagoas com escoamento pistonado, tanto para remoção de DBO quanto para coliformes. Com relação às lagoas de

mistura perfeita, a qualidade do efluente apresentou variabilidade no caso de remoção de coliformes.

Com base nessas simulações, Juanico (1991) recomendou que os projetos para lagoas de polimento – remoção de coliformes – considerem escoamento pistonado. No caso de lagoas facultativas – para remoção de DBO – pode ser projetada tanto para escoamento de mistura perfeita, mistura parcial ou pistonado.

Moreno (1990) estudou o comportamento hidráulico de lagoas de estabilização facultativas utilizadas para tratamento de águas residuárias em diferentes regiões da Espanha. Foram avaliados cinco sistemas de lagoas de estabilização durante o período de verão. A Tabela 2 apresenta as características das lagoas do estudo.

Tabela 2. Dados das lagoas de estabilização utilizadas no ensaio hidrodinâmico

	L.A. (1)	L.A. (2)	L.A. (3)	L.F.	L.O.
Área (m ²)	484	2600	2600	33000	11000
Profundidade (m)	3	3	3	2	1.5
Volume (m ³)	950	5478	5478	58900	41300

L.A. – lagoa anaeóbia, L.F. – lagoa facultativa, L.O. – lagoa de oxidação

Fonte: adaptado de Moreno (1990).

No estudo hidrodinâmico, no qual utilizada técnica de estímulo-resposta –pulso, foi empregado traçador radioativo fornecido pela Nuclear Ibérica, S. A. (Madri). A pesquisa mostrou que o tempo de detenção hidráulica experimental das lagoas analisadas foi inferior ao tempo de residência teórico, indicativo que havia caminhos preferenciais no escoamento das lagoas estudadas. Os resultados de volume morto determinados variaram de 10% a 42%.

Moreno (1990), que também estudou a estratificação térmica dessas lagoas, reporta medidas de perfil de temperatura realizadas indicaram que o curto-circuito existente não pode ser atribuído a esse fenômeno.

A autora ajustou os dados experimentais ao modelo de mistura perfeita. De acordo com o tratamento estatístico utilizado na pesquisa o modelo de mistura perfeita representou o experimento com 99% de confiabilidade.

O comportamento hidrodinâmico da lagoa de estabilização estudada por Torres et al. (1997) também foi similar ao modelo de mistura perfeita. Os autores avaliaram a

hidrodinâmica da lagoa de estabilização de tratamento de águas residuárias localizada no Campus Espinardo da Universidade de Murcia, Espanha, com volume de 15000 m³, 84X40 m de medidas e profundidade máxima de 8 m.

Eles executaram o estudo experimental com ensaios estímulo-resposta pulso em dois períodos de clima diferentes – inverno e verão – com objetivo de avaliar o efeito da temperatura sobre a hidrodinâmica da lagoa estudada. A vazão média durante o período experimental foi de 320 m³.d⁻¹ e 219 m³.d⁻¹ para o inverno e verão, respectivamente. Nos dois períodos estudados, os autores concluíram que o escoamento da lagoa foi similar ao escoamento de mistura perfeita.

Os ensaios hidrodinâmicos indicaram existência de espaço morto ou curto circuito; o tempo de residência teórico foi superior aos tempos de residências obtidos experimentalmente nas duas estações – inverno e verão.

Os autores observaram volume ativo para a lagoa no período de inverno de 70%, enquanto que no período de verão o volume ativo da lagoa era de 22%; segundo eles a alta porcentagem de volume encontrado no período de verão ocorreu devido à pronunciada estratificação térmica que estudos anteriores determinaram haver na lagoa nesse período (Llorens et al. 1992).

Além do modelo de mistura perfeita, Torres et al. (1997) ajustaram o modelo de dispersão para os ensaios hidrodinâmicos realizados. O coeficiente de dispersão adimensional – determinado nos ensaios – ratificou o comportamento de mistura perfeita.

Angunwaba et al. (1992) resolveram a equação diferencial parcial de segunda ordem em estado estacionário para prever o número de dispersão. Os dados de dispersão obtidos pelo modelo foram comparados aos dados de dispersão obtidos experimentalmente de lagoas de estabilização de águas residuárias em Nsukka, Nigéria e do trabalho de Marecos do Monte e Mara ¹.

A Tabela 3 apresenta os valores do número de dispersão obtidos experimentalmente e na simulação para os experimentos de Marecos do Monte e Mara (1987)¹. Para a lagoa de estabilização situada em Nsukka, Nigéria os dados estão apresentados na Tabela 4.

¹ Marecos do Monte e Mara (1987). The hydraulic performance of waste stabilization ponds in Portugal. Water science technology. v. 19, n.12, p219 -.2.

Tabela 3. Dados de dispersão obtidos experimentalmente e por simulação

Lagoas ¹	d experimental	d simulação	
		Equação polprasert	Equação Angunwaba et al. (1992)
Vidigueira			
Verão	0,523	2,129	0,116
Inverno	0,574	1,042	0,212
Portimao			
Verão	0,371	0,332	0,409
Inverno	0,595	0,358	0,384

¹ – Lagoas do trabalho de Marecos do Monte e Mara (1987)¹.

Fonte: adaptado de Angunwaba et al. (1992)

Tabela 4. Valores do número de dispersão d obtidos experimentalmente e por simulação relativos à lagoa de estabilização situada em em Nsukka, Nigéria.

Experimento	d medido	d simulado	
		Polprasert Bhattarai	e Angunwaba et al. (1992)
1	0,150	0,389	0,162
2	0,138	0,413	0,153
3	0,137	0,331	0,157
4	0,110	0,331	0,153
5	0,167	0,360	0,173
6	0,158	0,382	0,164
7	0,152	0,323	0,164
8	0,177	0,360	0,173
9	0,165	0,378	0,166
10	0,167	0,378	0,166
11	0,213	0,322	0,189
12	0,150	0,407	0,156

Fonte: adaptado de Angunwaba et al. (1992)

Dorego e Leduc (1996) estudaram a característica hidrodinâmica de um sistema de lagoas. O sistema de lagoas era composto de três lagoas facultativas aeradas e uma lagoa de maturação operando em série. As lagoas possuíam, respectivamente, volumes de 43.500 m^3 , 25.000 m^3 , 27.000 m^3 e 2.700 m^3 .

Nos ensaios os autores utilizaram técnica de estímulo-resposta pulso e como traçador a rodamina WT. O experimento foi realizado durante o inverno.

O sistema – avaliado por Dorego e Leduc (1996) – apresentou curto-circuito, redução do volume efetivo, zonas mortas. Eles determinaram valores de (D/u.L) de 0,392; 0,452; e 0,283 para as lagoas facultativas aeradas; e valor de 0,487 para a lagoa de maturação. Os autores ressaltaram a necessidade do desenvolvimento de um modelo ou uma técnica para avaliar o parâmetro D/u.L em sistemas com múltiplas entradas e/ou saídas para poder determinar valores mais próximo da realidade e poder utilizá-los em projetos e avaliação de lagoas.

Torres et al. (1999) estudaram o desempenho hidrodinâmico de três lagoas facultativas empregadas para o tratamento de águas residuárias: duas delas com capacidade de volume máximo de 16500 m^3 e 32000 m^3 ambas com nível máximo de profundidade de 1,6m; e uma terceira lagoa com capacidade máxima de 27000 m^3 e profundidade máxima de 1,8.

No ensaio hidrodinâmico foi empregado o traçador colorimétrico sulforodamina B. Os autores observaram semelhança no comportamento hidrodinâmico das três lagoas avaliadas com os reatores de escoamento de mistura perfeita, pois os estudos hidrodinâmicos realizados nas três lagoas não indicaram haver grandes anomalias no escoamento.

Kilani e Ogunrombi (1984) estudaram o desempenho de três lagoas de estabilização facultativas com chicanas. Para avaliar o desempenho, os autores operaram uma lagoa controle – sem chicanas e aplicaram corante de tinta azul como traçador; a avaliação da parte hidrodinâmica dessas lagoas foi realizada por meio do ensaio estímulo-resposta pulso.

As lagoas foram alimentadas com água residuária proveniente do campus da Universidade Ahmadu Bello. Esse afluente era suplementado para alcançar níveis maiores de DBO para atender os outros objetivos da pesquisa de Kilani e Ogunrombi (1984).

Com relação à hidrodinâmica das referidas lagoas, os autores concluíram que a modelação do sistema aproximou-se ao escoamento pistonado com aumento do número de chicanas. Isso pode ser concluído pela determinação dos valores de D/u.L obtidos. Kilani e Ogunrombi (1984) observaram valores menores de D/u.L para as lagoas com maior número de chicanas. A lagoa sem chicanas apresentou coeficiente $D/u.L = 0,161$, lagoa com 3 –

chicanas – $D/u.L = 0,126$; lagoa com 6 – chicanas – $D/u.L = 0,112$ e lagoa com 9 chicanas – $D/u.L = 0,096$.

No Brasil são muito utilizadas lagoas de estabilização para tratamento de águas residuárias. A disponibilidade de local para instalação e o clima favorável contribuem pra essa escolha.

Polisel (2005), em estudos realizados com lagoa piloto construída no mesmo local do sistema de tratamento da cidade de Novo Horizonte, SP verificou que, indiferente ao tipo de configuração utilizada – sem chicaneamento, com chicaneamento longitudinal ou com chicaneamento transversal ou longitudinal – ocorria elevado grau de estratificação na lagoa. Das possibilidades estudadas, o uso do chicaneamento longitudinal foi o que apresentou melhor desempenho hidrodinâmico, evidenciado pelo maior volume ativo (55%), comparados aos valores com chicaneamento longitudinal (38%) e transversal (34%).

Moreira (2006) estudou o sistema de lagoa de Novo Horizonte SP. O autor verificou haver maior volume ativo das lagoas estudadas, próximo a 80% do volume total no verão, quando comparados aos volumes calculados durante o período de temperaturas menos elevadas, com maior tendência à mistura completa da massa líquida.

Em ambas as pesquisas, de Polisel (2005) e de Moreira (2006) no estudo hidrodinâmico das referidas lagoas não foram consideradas variação de vazão afluente.

Na prática observa-se que grande parte das lagoas de estabilização tendem ao escoamento de mistura perfeita.

4. MATERIAL E MÉTODOS

Neste capítulo estão descritos os procedimentos adotados para o desenvolvimento desta pesquisa. A metodologia foi dividida em duas etapas: desenvolvimento do modelo matemático adotado e experimental. A parte experimental compreendeu os ensaios estímulo-resposta (pulso e degrau) em três configurações distintas de reatores. A etapa teórica consta do desenvolvimento do modelo matemático clássico para situações particulares e dos procedimentos de calibração, verificação e dados adotados para o modelo. Ademais, estão descritas as técnicas de determinação de distribuição de tempo de residência (DTR) adotadas para aplicação nos dados experimentais.

4.1 MODELO PROPOSTO

Para atender a proposta e os objetivos desta pesquisa foi desenvolvido um modelo matemático simplificado para analisar a influência da variação da vazão no comportamento hidrodinâmico de reatores operando em regime não permanente. O modelo considerou que o reator possui escoamento pistonado com dispersão, sem zonas mortas, caminhos preferenciais ou outras zonas de perturbação.

No desenvolvimento do modelo foram consideradas as hipóteses:

- escoamento pistonado com dispersão unidimensional;
- velocidade uniforme na seção transversal do reator;
- regime não estacionário.

Com essas hipóteses o balanço de massa resultante, aqui reproduzido em detalhes, é amplamente conhecido e facilmente encontrado na literatura especializada, por exemplo

Fogler (1999) ou Levenspiel (1999). A Figura 4 apresenta o esquema do balanço de massa em um reator.

Figura 4. Esquema do balanço de massa

Balanço de massa:

$$(\text{entra}) - (\text{sai}) \pm (\text{reage}) = (\text{acumula})$$

$$\dot{m}_{in} - \dot{m}_{out} + rV = \frac{dm}{dt} \quad (4.1)$$

A equação geral do balanço de massa é representada pela equação (4.1). Com o desenvolvimento do balanço de massa encontra-se a equação (4.2). O desenvolvimento do balanço de massa pode ser encontrado em Levenspiel (1999) A equação (4.2) representa o modelo para as hipóteses descritas no início deste capítulo.

$$D \frac{d^2 C_t}{dx^2} - u \frac{dC_t}{dx} + r = \frac{dC_t}{dt} \quad (4.2)$$

Em que:

- $D \Rightarrow$ coeficiente de dispersão $[L^2 \cdot T^{-1}]$
- $u \Rightarrow$ velocidade de escoamento $[L \cdot T^{-1}]$
- $C_t \Rightarrow$ concentração de traçador $[M \cdot V^{-1}]$
- $x \Rightarrow$ variável de comprimento, $0 \leq x \leq L$.
- $L \Rightarrow$ comprimento do reator $[L]$
- $Ar \Rightarrow$ área da seção transversal do reator $[L^2]$
- $r \Rightarrow$ velocidade de reação de consumo ou geração de produtos $[M \cdot V^{-2}]$

Para determinar a curva de distribuição de tempo de residência (DTR), os ensaios hidrodinâmicos geralmente são feitos com traçadores não reativos, portanto o termo r da equação (4.2) é considerado nulo para o caso estudado. A equação (4.2) torna-se:

$$D \frac{d^2 C_t}{dx^2} - u \frac{dC_t}{dx} = \frac{dC_t}{dt} \quad (4.3)$$

As equações (4.4), (4.5) e (4.6) descrevem, respectivamente, as condições – inicial e de contorno – adotadas para complementar o modelo (4.3).

$$C(x, 0) = 0, \quad 0 < x < L \quad (4.4)$$

$$C(0, t) = C_{in} + \frac{D}{u} \frac{\partial C}{\partial t}, \quad t > 0 \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial C(L, t)}{\partial t} = 0, \quad t > TDH_{real} \text{ ou } t \rightarrow \infty \quad (4.6)$$

Em que:

$C_{in} \Rightarrow$ concentração de traçador na corrente de entrada $[M \cdot V^{-1}]$

As condições de contorno adotadas foram baseadas no trabalho de Caldwell e Ng (2004). Os autores utilizaram as condições de contorno (equações 4.4 a 4.6) para resolver o balanço de massa de um reator com dependência do tempo.

As condições de contorno adotadas (equações 4.5 e 4.6) simulam um ensaio degrau. A equação (4.5) indica que para todo o tempo maior que zero na entrada do reator é introduzido um traçador com uma concentração constante, por efeito do movimento advectivo (C_{in}) e por efeito do movimento difusivo, $\frac{D}{u} \frac{\partial C(0,t)}{\partial t}$. Decorrido o tempo de detenção hidráulica ou, o que é mais comum, para um tempo elevado, geralmente da ordem de duas a três vezes o tempo de detenção hidráulica teórico a concentração na saída permanece constante – equação (4.6).

A Figura 5 apresenta o resultado obtido utilizando simulação hipotética com concentração inicial = C_{in} em $x=L$ com o uso das condições de contorno adotadas (equações 4.4 a 4.6).

Figura 5. Resultado da simulação das condições de contorno adotadas (equações 4.4 a 4.6) em um ensaio para a concentração C_{in} e tempo t

Para auxiliar na resolução numérica da equação diferencial parcial (4.3) em conjunto com as condições – iniciais e de contorno – adotadas foi utilizado o software Matlab.

O Matlab possui um algoritmo para solução de equações diferenciais parciais em um espaço variável x e tempo t , o qual foi utilizado nesta pesquisa, denominado *pdepe*. O algoritmo *pdepe* converte as equações diferenciais parciais para equações diferenciais ordinárias usando uma discretização espacial de segunda ordem.

Como o objetivo principal desta pesquisa foi verificar os efeitos da variação temporal da vazão afluente na hidrodinâmica de sistemas tratando águas residuárias; na resolução do modelo foram testadas três suposições:

- Vazão e volume constantes;
- Vazão com variação temporal e volume constante;
- Vazão e volume com variação temporal.

Como foram utilizadas condições de contorno para ensaio estímulo-resposta degrau, a concentração de entrada foi considerada constante em todos os casos avaliados.

Para simular a variação temporal da vazão afluente considerou-se que essa variável possui comportamento senoidal, com período de 24 h (Equação 4.7) e nos casos em que foi considerada a variação temporal do volume, ele foi considerado dependente da variação da vazão e determinado de acordo com a equação (4.8).

A equação (4.8) é uma hipótese para simular a variação temporal do volume em função do tempo. Pois, normalmente variação do volume é função do tempo, porém comandada por uma equação de vertedor.

$$Q_{in} = \bar{Q} \cdot (1 + \alpha \cdot \text{sen}(\omega \cdot t)) \quad (4.7)$$

$$V = [\bar{Q} \cdot (1 + \alpha \cdot \text{sen}(\omega \cdot t))] \cdot \theta_h \quad (4.8)$$

- $Q_{in} \Rightarrow$ vazão afluente $[L^3 \cdot T^{-1}]$;
- $\bar{Q} \Rightarrow$ vazão média $[L^3 \cdot T^{-1}]$;
- $\alpha \Rightarrow$ amplitude decimal relativa da vazão [adimensional];
- $\omega \Rightarrow$ frequência da variação da vazão $[T^{-1}]$;
- $\theta_h \Rightarrow$ tempo de detenção hidráulico teórico $[T]$;
- $V \Rightarrow$ volume do reator $[L^3]$.

Em alguns casos analisados equação (4.7) não obteve boa simulação com os dados experimentais utilizados. Então – com objetivo de reproduzir no modelo a variação de vazão utilizada no experimento – foram ajustados os dados experimentais de vazão com auxílio do software *Origin*, o que resultou em equações do tipo gaussianas (equação 4.9).

$$Q = \bar{Q} + \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}} e^{-2\frac{(t-x_c)^2}{w^2}} \quad (4.9)$$

A, w e Xc são parâmetros da função gaussiana obtidos pelo *Origin* para cada caso específico – [T].

A hipótese da concentração de entrada (C_{in}) constante fornece resultados para ensaios hidrodinâmicos realizados com a técnica degrau. Esta consideração foi adotada por facilitar a simulação do modelo, pois neste caso a concentração de entrada não é afetada pelo tipo de alimentação do sistema estudado.

As curvas respostas obtidas com o modelo foram normalizadas – curva F. Porém, a curva F não pode ser manipulada diretamente para obtenção de dados hidrodinâmicos de reatores. Desta forma, transformou-se a curva F na curva DTR (curva E), gerando uma resposta idêntica à obtida quando a injeção se dá na forma de pulso. Essas transformações foram realizadas com base nos trabalhos desenvolvidos por Levenspiel (1999) e Niemi (1977) como descritas abaixo.

A transformação da curva F em curva E pode ser obtida por meio da integral de convolução. O uso da integral de convolução relaciona a concentração de saída no tanque (C) com a concentração na corrente de entrada (C_{in}) (LEVENSPIEL, 1999):

$$C(t) = \int_0^t C_{in}(t-t').E(t')dt' \quad (4.10)$$

Em que: t' é o instante de entrada do fluido no sistema [T].

Como a concentração inicial é constante (ensaio degrau) pode-se reescrever a equação (4.10):

$$C(t) = C_{in} \int_0^t E(t')dt' \quad (4.11)$$

Dividindo os dois lados da equação por C_{in}, obtém-se:

$$\frac{C(t)}{C_{in}} = \int_0^t E(t')dt' \quad (4.12)$$

Como $F = \frac{C(t)}{C_{in}}$, então a relação entre as curvas F e E resulta:

$$F = \int_0^t E \cdot dt \quad \text{ou} \quad E = \frac{dF}{dt} \quad (4.13)$$

Em casos de sistemas com vazões variáveis a curva F pode ser determinada de acordo com a equação (4.14) baseado no trabalho de Niemi (1977).

$$C(t) = \int_{-\infty}^t \frac{Q_{in}}{Q(t)} \cdot C_{in} \cdot p(t, w) \cdot dw \quad (4.14)$$

De maneira análoga à anterior, C_{in} não é afetada pela variação de vazão; então pode se reescrever a equação (4.14):

$$\frac{C(t)}{C_{in}} = \int_{-\infty}^t \frac{Q_{in}}{Q(t)} \cdot p(t, w) \cdot dw \quad (4.15)$$

$$F = \int_{-\infty}^t \frac{Q_{in}}{Q(t)} \cdot p(t, w) \cdot dw \quad (4.16)$$

- $p(t, w) \cdot dw$ é a notação da distribuição do tempo de residência na notação de Niemi (1977) correspondente ao usual $E(t) \cdot dt$.
- w – instante de entrada do fluido no sistema $[T]$;
- t – tempo de saída $[T]$;

A determinação da distribuição do tempo de residência – $p(t, w)$ - está descrita no item 4.2.1.2.

Dessa forma, a curva F obtida pelo modelo desenvolvido nesta pesquisa foi transformada em curva E_t baseada na relação existente entre as duas curvas, demonstrada na

equação (4.16) para situações em que a vazão afluyente é variável. Após a obtenção da curva E foi obtida a curva DTR adimensional do modelo matemático proposto: $E\Theta_t$.

$$E\Theta_t = E_t \cdot \bar{\theta}_h \quad (4.17)$$

- $E_t \Rightarrow$ curva de distribuição de tempo de residência obtida pelo modelo matemático proposto $[T^{-1}]$;
- $E\Theta_t \Rightarrow$ curva de distribuição de tempo de residência adimensional obtida do modelo matemático proposto.
- $\bar{\theta}_h \Rightarrow$ tempo de detenção hidráulica médio $[T]$.

4.2 CALIBRAÇÃO E VERIFICAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO PROPOSTO

O coeficiente de dispersão (D) foi adotado como parâmetro de calibração do modelo matemático pelo fato de esse parâmetro estar relacionado à velocidade de escoamento, portanto relacionado à vazão de alimentação do reator. Seu valor foi ajustado, para que a simulação matemática ficasse próxima dos resultados experimentais obtidos, por meio de uma função objetivo (F.O.). A função objetivo adotada considera a minimização da soma do quadrado da diferença dos valores de $E\Theta$ obtidos experimentalmente – equações (4.32) e (4.54) – com os valores observados nas simulações ($E\Theta_t$) do modelo matemático (equação 4.17).

$$FO = \text{Min} \sum (E\Theta_{\text{exp}} - E\Theta_t)^2 \quad (4.18)$$

A Figura 6 mostra o algoritmo do modelo.

Para calibrar e verificar o modelo foram utilizados dados, obtidos da literatura, de três sistemas diferentes: em escalas de laboratório, escala piloto e escala real.

Os dados da pesquisa de Sasaki (2005) foram utilizados para a calibração do modelo com ensaios hidrodinâmicos realizados com reatores em escala de laboratório. A autora utilizou a técnica estímulo-resposta da forma pulso nos ensaios hidrodinâmicos. O traçador

utilizado na pesquisa foi o cloreto de sódio (NaCl) de grau analítico (fabricante Vetec) e o sistema foi alimentado com água da rede de distribuição.

Sassaki (2005) verificou que a proposta de Niemi (1977) conduziu a resultados consistentes com os obtidos nos experimentos com vazão constante.

Figura 6. Algoritmo do modelo matemático proposto

A autora empregou um reservatório retangular com dimensões internas iguais a: 120mm de largura, 600mm de comprimento e 160mm de altura, composto por duas chicanas removíveis. As chicanas foram usadas com o objetivo de criar variações desse reservatório por meio da remoção ou instalação das chicanas como mostra a Figura 7.

Os reservatórios utilizados foram dispostos da seguinte forma:

- Um único reservatório: 1 ;
- Dois reservatórios, em série, de volumes diferentes: 1 e 2 + 3;
- Dois reservatórios, em série, de volumes iguais: 1 e 2;
- Três reservatórios, em série, de volumes iguais: 1, 2 e 3.

Como dados de entrada do modelo foram usados os experimentos dos reservatórios E1C, E2C, E1V, E2V, E2DV e E3V:

- E-1C – Um único reservatório alimentado com vazão constante;
- E-1V – Um único reservatório alimentado com vazão variável;
- E-2C – Dois reservatórios em série, de volumes iguais, alimentados com vazão constante;
- E-2V – Dois reservatórios em série, de volumes iguais, alimentados com vazão variável;
- E-2DV – Dois reservatórios em série, de volumes diferentes, alimentados com vazão variável;
- E-3V – Três reservatórios em série, de volumes iguais, alimentados com vazão variável.

A Tabela 5 apresenta os dados dos reservatórios estudados. Os hidrogramas de vazão dos reservatórios com vazão variável encontram-se na Figura 8. Sasaki (2005) não citou qual foi a formulação adotada na variação de vazão. A dificuldade encontrada no ajuste da equação da vazão variável (4.17) nos dados do trabalho de Sasaki (2005), possivelmente, foi devida à formulação adotada pela autora. Nesses casos, as vazões utilizadas foram simuladas pela equação (4.9).

Tabela 5. Dados dos reservatórios do experimento de Sasaki (2005) utilizados no modelo

Reservatório	Volume V(L)	Vazão média $Q(mL.min^{-1})$	$\bar{\theta}_h$ (h)	Massa de traçador (g)
E1C	2,9	19,23	2,51	2,9
E1V	2,9	18,52	2,61	2,9
E2C	5,8	39,35	2,46	5,8
E2V	5,8	38,77	2,49	5,8
E2DV	9,02	60,1	2,56	9,2
E3V	8,93	58,77	2,53	8,88

Figura 7. Dimensão do reservatório e seus compartimentos.

Fonte: adaptado de Sassaki, 2005.

Figura 8. Hidrograma de vazão dos reservatórios (a) E1V; (b) E2V; (c) E2DV e (d) E3V.

Fonte: adaptado de Sassaki (2005).

O modelo matemático proposto nesta pesquisa também foi ajustado aos dados do reator UASB operado por Carvalho (2006), que possuía escala piloto. A autora avaliou a influência das variações senoidais cíclicas de 40% e de 60% da vazão afluyente no comportamento do reator UASB. A Figura 9 apresenta o desenho esquemático de um reator UASB.

O reator UASB com capacidade de 160 L era constituído de uma coluna cilíndrica em PVC com diâmetro de 0,30 m, altura de 1,86 m e de um separador trifásico (gás-sólido-líquido) em PVC, com 0,60 m de altura e 0,30m de diâmetro.

Figura 9. Desenho esquemático de um reator UASB.
Fonte: adaptado de Chernicharo et al. (2000)

O sistema foi alimentado com esgoto bruto proveniente de um bairro de classe média e zona comercial da cidade de São Carlos, suplementado com esgoto sintético. A DQO afluyente variava na faixa de 450mg.L^{-1} a 700mg.L^{-1} . O reator foi alimentado continuamente em todas as etapas dos ensaios de estímulo-resposta e mantido à temperatura ambiente.

Carvalho (2006) utilizou o corante eosina Y como traçador, em todos os ensaios, após o reator UASB ter alcançado estado de equilíbrio dinâmico aparente. Os procedimentos

adotados para realizar os ensaios de estímulo-resposta tipo pulso foram divididas em três etapas. Na primeira etapa foram feitos dois perfis hidrodinâmicos tipo pulso com aplicação de vazão média afluyente constante e igual $16,0 \text{ L.h}^{-1}$ e tempo médio de detenção hidráulica constante e igual a 10h. Na segunda etapa os dois perfis hidrodinâmicos foram realizados com variação cíclica senoidal de 40% da vazão média afluyente. O ensaio hidrodinâmico da terceira etapa foi realizado com variação cíclica senoidal de 60% da vazão média afluyente. A Tabela 6 mostra a características dos ensaios de estímulo resposta realizados no reator UASB.

Tabela 6. Características dos ensaios de estímulo-resposta realizados no reator UASB (Carvalho, 2006).

Etapas	Ensaio	θh (h)	Vazão afluyente (L.h^{-1})	Massa aplicada (mg)	Massa Molecular (g.g-mol^{-1})	C traçador (mg.20mL^{-1})
1	1	10	16,0	800		40,0
	2	10	16,0	442		22,1
2	3	var. ¹	*40%.Q	706	692,0	35,3
	4	var.	*40%.Q	436		21,8
3	5	var.	**60%.Q	458		22,9

* Vazão senoidal cíclica com valores superiores e inferiores a 40% da vazão média afluyente

** Vazão senoidal cíclica com valores superiores e inferiores a 60% da vazão média afluyente

¹ var. Valor variável

A Figura 10 apresenta os hidrogramas das vazões utilizadas nos ensaios hidrodinâmicos com variações cíclicas.

Para simulação em escala real foram usados os dados de lagoas de estabilização para tratamento de águas residuárias. A caracterização hidrodinâmica foi realizada por Moreira (2006). O sistema de lagoas de estabilização estudado está localizado na cidade de Novo Horizonte, estado de São Paulo.

Figura 10. Hidrograma de vazão na operação do reator UASB: (a) ensaio 1 – com 40% de variação da vazão média, (b) ensaio 2 – com 40% de variação da vazão média e (c) ensaio 3 – com 40% de variação da vazão média.

Fonte: adaptado de Carvalho (2006).

Esse sistema de lagoas de estabilização é composto de tratamento preliminar (gradeamento e caixa de areia) seguido por uma lagoa anaeróbia e duas lagoas facultativas, todas em série, projetadas para atender uma população equivalente a 40000 habitantes. A Figura 11 apresenta o sistema de lagoas de estabilização da cidade de Novo Horizonte.

Figura 11. Sistema de lagoas de estabilização e as estações de coleta. (TP: tratamento preliminar; LA: lagoa anaeróbia; LF1: lagoa facultativa 1; LF2: lagoa facultativa 2).

Fonte: Moreira, 2006.

A pesquisa de Moreira (2006) constou de quatro ensaios hidrodinâmicos realizados nas lagoas facultativas primária e secundária. O objetivo do autor foi verificar a influência dos períodos mais quente (verão) e mais frio (inverno) no comportamento hidrodinâmico dos reatores. Para esses ensaios foi utilizada a técnica de injeção pulso do traçador Rodamina-B.

O conjunto de dados relativos ao primeiro ensaio da lagoa facultativa secundária (LF2) foi utilizado na calibração do modelo matemático simplificado. A Tabela 7 apresenta as características da lagoa facultativa secundária. O autor fez coleta do efluente do reservatório em intervalos de 6 horas, durante 20 dias.

Os resultados da calibração do modelo matemático simplificado para os reatores utilizados foram comparados aos resultados dos ajustes dos dados experimentais desses reatores aos modelos teóricos uniparamétricos de uso corrente na literatura para avaliação hidrodinâmica de reatores: pequena dispersão (PD), grande dispersão (tanque aberto) (GD-Ta) e de tanques em série (N-CSTR) – equações (4.19) a (4.24).

As curvas experimentais também foram ajustadas aos modelos hidrodinâmicos propostos por Niemi (1977) equações (4.52) e (4.53) descritas no item 4.2.1.2 e analisadas em relação aos demais modelos.

Tabela 7. Características da lagoa facultativa secundária

Dados	Unidade	LF2
Área média	ha	1,8287
Profundidade	m	1,8
TDH	Dias	8
Volume útil	m ³	32.916
Vazão média	m ³ .d-1	180,78
Taxa de aplicação orgânica	kgDBO.m-3.d-1	
Taxa de aplicação superficial	kgDBO.ha-1.d-1	142
DBO afluente/efluente	mg.L-1	67/2

Fonte: adaptado de Moreira (2006).

As equações (4.19) e (4.20) representam o parâmetro e equação do modelo de pequena dispersão (PD), respectivamente. A equação (4.21) representa o parâmetro do modelo de

grande dispersão tanque aberto (GD-ta), enquanto que a equação (4.22) representa a equação do modelo. Para o modelo N tanques de mistura perfeita em série (N-CSTR) as equações do parâmetro e do modelo são as (4.23) e (4.24), respectivamente.

$$\sigma^2_{\theta} = 2\left(\frac{D}{u.L}\right) \quad (4.19)$$

$$E_{\theta} = \frac{1}{2\sqrt{\pi(D/u.L)}} \exp\left[-\frac{(1-\theta)^2}{4(D/u.L)}\right] \quad (4.20)$$

$$\sigma^2_{\theta,ta} = 2\left(\frac{D}{u.L}\right) + 8\left(\frac{D}{u.L}\right)^2 \quad (4.21)$$

$$E_{\theta,ta} = \frac{1}{2\sqrt{\pi(D/u.L)}} \exp\left[-\frac{(1-\theta)^2}{4\theta(D/u.L)}\right] \quad (4.22)$$

$$N = \frac{1}{\sigma^2_{\theta}} = \frac{\bar{\theta}^2_h}{\sigma^2} \quad (4.23)$$

$$E_{\theta} = \frac{N(N.\theta)^{N-1}}{(N-1)!} e^{-N.\theta} \quad (4.24)$$

4.2.1 Determinação das curvas de distribuição de tempo de residência para os experimentos

Neste item estão descritas as metodologias para a determinação das curvas de distribuição de tempo de residência para os dados experimentais.

A determinação das curvas DTR para aqueles experimentos – nos quais não houve variação da vazão de alimentação – a normalização dos dados experimentais seguiu a metodologia descrita por Levenspiel (1999) e Fogler (1999). Nos experimentos em que houve variação na vazão afluyente, a normalização dos referidos dados seguiu os procedimentos do trabalho de Niemi (1977).

4.2.1.1 Curvas de distribuição de tempo de residência para experimentos sem variação de vazão

A determinação da curva de distribuição de tempo de residência descrita neste item foi desenvolvida por Levenspiel (1999).

A curva E para um ensaio tipo pulso é definida pela equação (4.25).

$$E(t) = \frac{C(t)}{M_o/Q(t)} = \frac{C(t) \cdot Q(t)}{M_o} \quad (4.25)$$

- E – função distribuição tempo de residência – $[T^{-1}]$;
- C – concentração de traçador que sai na corrente efluente – $[M \cdot V^{-1}]$;
- M_o – massa de traçador – $[M]$;
- Q – vazão – $[V \cdot T^{-1}]$;
- t – tempo $[T]$;

M_o é o valor de todo o material injetado no reator na forma pulso.

Considerando-se um intervalo de tempo (Δt) suficientemente pequeno de tal forma que a concentração de traçador (C) na saída do reator seja constante, pode-se determinar a quantidade de traçador (Δm) que sai do reator entre o instante t e t + Δt (equação 4.26)

$$\Delta m = C(t) \cdot Q(t) \cdot \Delta t \quad (4.26)$$

Dividindo a equação (4.26) pela a quantidade de traçador utilizado obtém-se:

$$\frac{\Delta m}{M_o} = \frac{C(t) \cdot Q(t) \cdot \Delta t}{M_o} \quad (4.27)$$

A equação (4.27) representa a fração do material ($\frac{\Delta M}{M_o}$) que atravessa o reator com tempo de residência entre t e $t + dt$.

Para obter o valor total do material injetado no reator (M_o) soma-se a quantidade do material entre instante igual a zero e infinito. Desta forma, escrevendo a equação (4.26) na forma diferencial, chega-se a:

$$dm = C(t) \cdot Q(t) \cdot \Delta t \quad (4.28)$$

Integrando a equação (4.28) de zero a infinito determina-se M_o :

$$M_o = \int_0^{\infty} C(t) \cdot Q(t) \cdot \Delta t \quad (4.29)$$

Substituindo o valor de M_o na equação (4.25), tem-se:

$$E(t) = \frac{C(t) \cdot Q(t)}{\int_0^{\infty} C(t) \cdot Q(t) \cdot \Delta t} \quad (4.30)$$

Como se considera a vazão constante, a equação (4.30) pode ser reescrita como:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) \cdot \Delta t} \quad (4.31)$$

A curva DTR adimensional é determinada pela equação (4.32).

$$E\Theta_{sv} = \bar{\theta}_h \cdot E \quad (4.32)$$

- Θ – tempo adimensional;
- E_{Θ} – curva E adimensional.
- $\bar{\theta}_h$ – tempo médio de detenção hidráulica $[T]$;

Nesta pesquisa utilizou-se a notação $E\Theta_{sv}$ para a curva de distribuição de tempo de residência adimensional obtida pelo método tradicional para diferenciá-la da curva DTR adimensional obtida pela metodologia proposta por Niemi (1977). O índice sv significa sem variação de vazão.

O tempo médio de detenção hidráulica (equação 4.33) é obtido da curva E (equação 4.31). A variável adimensional Θ é definida pela equação (4.34).

$$\bar{\theta}_h = \frac{\int_0^{\infty} t.E(t).dt}{\int_0^{\infty} E(t).dt} = \int_0^{\infty} t.E(t).dt \quad (4.33)$$

$$\Theta = \frac{t}{\bar{\theta}_h} \quad (4.34)$$

4.2.1.2 Curvas de distribuição de tempo de residência para experimentos com variação de vazão

A metodologia para determinação de funções de distribuição de tempo de residência para sistemas alimentados com vazões variáveis proposto por Niemi (1977) está descrita neste item. O autor considerou um sistema no qual somente a vazão de alimentação era variável; os demais parâmetros independentes foram mantidos constantes.

Injetando uma quantidade elementar de massa $dM(\omega)$ na entrada de um sistema em um curto intervalo de tempo $d\omega$ no tempo ω , com uma vazão de entrada $Q(w)$ no tempo w , tem-se:

$$dM(w) = Q(w)dw \quad (4.35)$$

O material injetado é removido ao longo do tempo. Se o volume do elemento injetado $dM(t)$ deixa o reservatório no instante t , após um curto intervalo de tempo da injeção, a fração do material que entrou no tempo inicial w contida nesse volume de saída é $d[dM(t)]$. Desta forma:

$$dM(t) = Q(t)dt \quad (4.36)$$

$$d[dM(t)] = dM(w) \cdot p(t, w) \cdot dt = Q(w) \cdot dw \cdot p(t, w) \cdot dt \quad (4.37)$$

- $t > w$
- w – instante de entrada do fluido no sistema $[T]$;
- t – tempo de saída $[T]$;
- $p(t, w)$ – representa a função distribuição de tempos de residência (DTR) em função dos tempos de saída do material injetado no sistema $[T^{-1}]$;

A quantidade total do elemento $dM(t)$ que deixa o reservatório consiste de frações do material que entraram nos diversos instantes w . Conseqüentemente, o material que sai no tempo t é relacionado em função dos tempos de entrada do material no reservatório.

$$d[dM(t)] = dM(w) \cdot p'(t, w) \cdot dw = Q(w) \cdot dw \cdot p'(t, w) \quad (4.38)$$

$p'(t, w)$ – representa a função distribuição de tempos de residência (DTR) em função dos tempos de entrada de material no sistema $[T^{-1}]$;

As distribuições $p(t, w)$ e $p'(t, w)$ estão relacionadas pelas equações (4.37) e (4.38). Desta forma:

$$p'(t, w) = \frac{Q(w)}{Q(t)} \cdot p(t, w) \quad (4.39)$$

Com base nas considerações acima, pode-se afirmar que todo material contido no elemento $dM(w)$ deve deixar o sistema e que o material contido no elemento $dM(t)$ é

totalmente composto por frações do material que havia entrado anteriormente. A integração do balanço do material de entrada e saída resulta nas equações (4.40) e (4.41). Essas equações correspondem à natureza probabilística das funções p e p' . Por razões físicas essas funções são iguais a zero se $t < w$.

$$\int_0^{\infty} p(t, w) \cdot dt = 1 \quad (4.40)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} p'(t, w) \cdot dt = 1 \quad (4.41)$$

Conclusões similares podem ser obtidas em relação a um componente fixo no processo – por exemplo, o cálculo da massa do traçador. O volume parcial ou massa do traçador M_{tr} no elemento do fluido na entrada ou na saída do reservatório está relacionado à sua concentração na entrada C_{in} ou na saída C , conforme as equações (4.42) e (4.43).

$$Q(w) \cdot C_{in} \cdot (w) \cdot dw = C_{in}(w) \cdot dM(w) = dM_{tr}(w) \quad (4.42)$$

$$dM_{tr}(t) = Q(t) \cdot C(t) \cdot dt \quad (4.43)$$

O traçador injetado na alimentação do sistema no tempo inicial ω contribuiu com a fração $d[dM_{tr}(t)]$ no elemento que sai no tempo t . Dessa forma:

$$d[dM_{tr}(t)] = C_{in}(w) \cdot dM(w) \cdot p(t, w) \cdot dt = Q(w) \cdot C_{in} \cdot (w) \cdot d(w) \cdot p(t, w) \cdot dt \quad (4.44)$$

Para obter a quantidade total do componente $dM_{tr}(t)$ no volume de saída do tempo t considera-se as contribuições de todos os elementos que entraram no sistema anteriormente, ou seja, integra-se em relação à variável w . Igualando-se o resultado à equação (4.43) e depois relacionando-o com a equação (4.39) resulta:

$$C(t) = \int_{-\infty}^t \frac{Q(w)}{Q(t)} \cdot C_{in}(w) \cdot p(t, w) \cdot dw = \int_{-\infty}^t C_{in}(w) \cdot p'(t, w) \cdot dw \quad (4.45)$$

Quanto à alimentação com concentração constante de material, a concentração de saída mantém seu valor constante mesmo com variações de vazão, conforme pode ser visto nas equações (4.41) e (4.45). Ademais, a equação (4.45) mostra que a função p' é a função de densidade de concentração no sistema. Se o sistema for alimentado com vazão variável, a função p' difere da função p . No caso de sistemas alimentados com vazões constantes a função p' é igual à função p .

Niemi (1977) sugere apresentar as distribuições p e p' em termos do volume total de material que passa através do sistema após um tempo. Desta maneira, o autor define a variável residência adimensional $z(\zeta)$ e a utiliza no lugar do tempo $t(w)$.

$$z = z(t) = \frac{1}{V} \int_{\eta}^t Q(v) \cdot dv \quad (4.46)$$

$$z(w) = \zeta = \frac{1}{V} \int_{\eta}^{\omega} Q(v) \cdot dv \quad (4.47)$$

Se o instante η for ajustado para zero, a origem da nova escala coincide com a origem do tempo escalar. z e ζ podem ser usados no lugar de t e ω porque as relações (4.46) e (4.47) são precisas para qualquer função de escoamento fornecida. Resulta então:

$$p(t, w) \cdot dt = p(z, \zeta) \cdot dz = p(z, \zeta) \cdot \frac{Q(t)}{V} \cdot dt \quad (4.48)$$

$$p'(t, w) \cdot dw = p'(z, \zeta) \cdot d\zeta = p'(z, \zeta) \cdot \frac{Q(w)}{V} \cdot dw \quad (4.49)$$

$$\int_{\zeta}^{\infty} p(z, \zeta) \cdot dz = \int_{-\infty}^z p'(z, \zeta) \cdot d\zeta = 1 \quad (4.50)$$

$$p(z, \zeta) = p'(z, \zeta) \quad (4.51)$$

Portanto, as funções p e p' são iguais se elas forem expressas em função da nova variável $z(\zeta)$. A partir dessa nova variável de integração, Niemi (1977) propôs novas

formulações para a modelagem hidrodinâmica de sistemas alimentados com vazão variável similares aos modelos para sistema com alimentação constante: N tanques em série de volumes iguais (P_N) e dois tanques em série de volumes diferentes (P_{2DV}), respectivamente, equações (4.52) e (4.53).

$$p(z) = \frac{N^N \cdot z^{(N-1)}}{(N-1)!} e^{-N \cdot z} \quad (4.52)$$

$$p(z) = \frac{V}{V_1 - V_2} \left[\exp\left(-\frac{V}{V_1} z\right) - \exp\left(-\frac{V}{V_2} z\right) \right] \quad (4.53)$$

$V = V_1 + V_2$ para a equação (4.63).

Niemi (1977) determinou as curvas de distribuição tempo de residência adimensional em função da nova variável Z (equação 4.46). Neste trabalho, a autora optou por transformar a distribuição de tempo de residência p em relação à Θ (equação 4.34). A equação (4.54) representa a curva de distribuição tempo de residência adimensional para sistemas alimentados com variação de vazão.

$$E\Theta_{cv} = p(t, w) \cdot \bar{\theta}_h \quad (4.54)$$

O sub-índice cv significa com variação de vazão.

Os procedimentos descritos nesse item e no item 4.2.1.1 foram utilizados neste trabalho para obter as curvas DTR experimentais. As curvas obtidas dos modelos, propostos nesta pesquisa e demais modelos utilizados, foram comparadas aos dados experimentais normalizados de acordo com esses procedimentos.

Foi avaliada também a influência das duas metodologias na determinação do escoamento do reator e seus respectivos parâmetros. Os resultados obtidos foram avaliados pela ferramenta estatística de análise de variância (ANOVA).

Os dados experimentais – dos sistemas que foram alimentados com vazão variável – utilizados na calibração e validação do modelo matemático proposto foram normalizados em

função da metodologia tradicional (Levenspiel, 1999 e Fogler, 1999) e em função da metodologia de Niemi estabelecida em (1977).

Nos próximos itens estão descritos os ensaios estímulo-resposta executados nesta pesquisa para verificar a influência das técnicas empregadas (pulso e degrau) e dos traçadores utilizados na caracterização hidrodinâmica de reatores.

4.3 AVALIAÇÃO DAS TÉCNICAS DE ENSAIO ESTÍMULO-RESPOSTA (PULSO E DEGRAU) NOS AJUSTES DAS CURVAS EXPERIMENTAIS.

As técnicas de ensaio estímulo resposta – pulso e degrau – estão relacionadas entre si, como demonstrado por Levenspiel (1999). Essa relação foi apresentada no item 4.1 deste capítulo. As equações de (4.10) a (4.13) mostram essa relação.

O escopo desta parte da pesquisa foi corroborar com a relação apresentada na equação (4.13) para a caracterização hidrodinâmica de reatores. Além disso, foi verificada a influência do tipo de traçador no uso da equação. Três tipos de traçadores colorimétricos foram analisados (Tabela 8) e todos os ensaios foram feitos em duplicatas. As pesquisas realizadas por Jimenez et al (1988) e Nardi et al (1999) serviram como referência na escolha dos traçadores utilizados.

Nardi et al (1999) executaram ensaios estímulo resposta pulso em reator horizontal de leito fixo – escala de bancada. Os autores utilizaram como traçadores: azul de bromofenol, dextrano azul, eosina Y e verde de bromocresol. Eles obtiveram melhores resultados nos ensaios com uso do dextrano azul, assim como nos resultados dos ensaios realizados por Jimenez et al (1988). Porém, o traçador dextrano azul foi testado pela autora e por Carvalho (2006) em ensaios hidrodinâmicos realizados no reator UASB e não foi possível concluir os ensaios hidrodinâmicos, pois o traçador tornou-se incolor. Foram realizados outros ensaios em meio biótico com dextrano azul e em todos foram observadas reações similares. Portanto, devido a esses resultados, o dextrano azul não foi utilizado nesta pesquisa.

Tabela 8. Características dos traçadores

Traçador	Peso molecular $[g \cdot g^{-1} mol^{-1}]$	λ [nm]
Eosina Y	691,9	516
Verde de bromocresol	698,05	616
Azul de bromofenol	669,97	310

O ensaio hidrodinâmico foi realizado em três reatores com configurações diferentes: reator horizontal com leito fixo (RHLF), reator horizontal (RH) e reator com mistura (CSTR). A Tabela 9 apresenta as informações dos reatores.

Nos ensaios, a alimentação dos reatores foi feita com água do sistema de abastecimento. A vazão foi mantida constante para todos os experimentos.

A Figura 12 apresenta o aparato experimental.

Tabela 9. Informações dos reatores

Reator	Volume [mL]	$Q_{\text{média}}$ [mL.min ⁻¹]
“RH” L/D =20	2000	110
“RHLF” L/D =20	1480	110
“CSTR”	2000	110

L/D – razão comprimento diâmetro

Figura 12. Aparato experimental

As curvas experimentais de concentração de traçador ao longo do tempo, $C(t)$, foram normalizadas de acordo com Levenspiel (1999). Os resultados experimentais obtidos foram comparados aos modelos matemáticos uniparamétricos: pequena dispersão (PD), grande dispersão (tanque aberto) (GD) e tanques em série (N-CSTR) (Levenspiel, 1999) – equações (4.19) a (4.24).

As curvas de distribuição adimensionais obtidas – com injeção tipo degrau e pulso – foram submetidas ao teste estatístico ANOVA com precisão de 95% para comparar os resultados obtidos com o uso das técnicas de estímulo-resposta (pulso e degrau) e, também, para avaliar a interferência do uso dessas técnicas no estudo hidrodinâmico dos reatores. Além disso, foi verificada a influência dos traçadores colorimétricos utilizados na avaliação hidrodinâmica dos reatores com as duas técnicas de injeção utilizadas.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo estão descritos os resultados encontrados com o desenvolvimento e aplicação do modelo matemático – calibração e verificação do modelo matemático utilizado. Também estão apresentados os resultados obtidos experimentalmente.

5.1 CARACTERIZAÇÃO DAS CURVAS DE DISTRIBUIÇÃO DE TEMPO DE RESIDÊNCIA (DTR)

A obtenção das curvas de distribuição de tempo de residência adimensionais por meio das duas metodologias (Niemi, 1977 e Levenspiel, 1999) permitiu avaliar os efeitos da vazão afluente nas suas caracterizações e comparar os resultados obtidos pelas duas metodologias. A metodologia para determinação da curva DTR comumente utilizada foi proposta por Levenspiel (1999) com base no trabalho de Danckwerts (1953)

Os ensaios hidrodinâmicos dos reatores em escalas de laboratório e piloto com vazão afluente variável foram normalizados em função das equações (4.32) e (4.54).

As Figuras 13 e 14 apresentam a comparação das curvas experimentais DTR adimensionais obtidas de acordo com as equações utilizadas para os experimentos em escala de laboratório (reatores: E1V, E2V, E2DV, E3V). Para os ensaios realizados em escala piloto (UASB operado com 40% e 60% de variação cíclica da vazão média) as curvas DTR estão apresentadas nas Figuras 15 (a), 15 (b) e 15 (c).

(a)

(b)

Figura 13. Curvas DTR obtidas dos ensaios hidrodinâmicos realizados nos reatores: (a) reator E1V e (b) reator E2V,

A análise das Figuras 13 e 14 revela haver variações bem pequenas entre os valores das curvas DTR adimensionais – obtidas com o uso das duas metodologias – para os dados experimentais dos ensaios em escala de laboratório. O mesmo foi observado para os ensaios em escala piloto, conforme apresentado na Figura 15.

(a)

(b)

Figura 14. Curvas DTR obtidas dos ensaios hidrodinâmicos realizados nos reatores: (a) reator E3V e (b) reator E2DV.

Figura 15. Curvas DTR para o reator UASB: (a) com 40% de variação cíclica da vazão média afluyente – ensaio 1, (b) com 40% de variação cíclica da vazão média afluyente – ensaio 2 e (c) com 60% de variação cíclica da vazão média afluyente

As curvas obtidas foram submetidas ao método estatístico ANOVA (análise de variância). Assim, foi avaliada a variabilidade entre as duas metodologias. A metodologia desenvolvida por Levenspiel (1999) é a mais comumente utilizada nas análises hidrodinâmicas.

Para o nível de confiabilidade de 95%, os resultados entre as curvas experimentais normalizadas de acordo com Levenspiel (1999) e Niemi (1977) não demonstraram variância significativa. A Tabela 10 apresenta os resultados obtidos da análise estatística realizada.

Tabela 10. Resultados estatísticos para as curvas DTR de reatores operados com variação de vazão afluyente

Reator		Média	Variância	N	F	P
E1V	$E\Theta_{cv}$	0,34452	0,07901	48	0,26633	0,60702
	$E\Theta_{sv}$	0,3161	0,06652	48		
E2V	$E\Theta_{cv}$	0,31373	0,06249	50	0,00484	0,94466
	$E\Theta_{sv}$	0,31027	0,06112	50		
E3V	$E\Theta_{cv}$	0,29968	0,06673	49	0,02443	0,87613
	$E\Theta_{sv}$	0,30795	0,07046	49		
E2DV	$E\Theta_{cv}$	0,45886	0,26791	49	0,08042	0,77733
	$E\Theta_{sv}$	0,43012	0,2354	49		
UASB 40% $\overline{Q}$	$E\Theta_{cv}$	0,47549	0,11069	62	0,01989	0,88809
Ensaio 1	$E\Theta_{sv}$	0,46714	0,10684	62		
UASB 40% $\overline{Q}$	$E\Theta_{cv}$	0,45301	0,11651	65	0,02151	0,88362
Ensaio 2	$E\Theta_{sv}$	0,44432	0,11208	65		
UASB 60% $\overline{Q}$	$E\Theta_{cv}$	0,53286	0,18764	58	0,02945	0,86404
	$E\Theta_{sv}$	0,51923	0,17816	58		

N – tamanho amostral total

$P = MQ_R / MQ_r - MQ_R$ e MQ_r - média quadrática devido a regressão e resíduos, respectivamente(ANOVA)

F – distribuição F

A partir das curvas DTR foi possível obter os parâmetros hidrodinâmicos dos reatores estudados. A Tabela 11 apresenta os resultados dos parâmetros obtidos para os ensaios hidrodinâmicos.

Os parâmetros foram obtidos das curvas geradas pela equação (4.54) para os reatores operados com alimentação variável. Para os reatores operados com vazão constante, foram determinados os parâmetros das curvas DTR geradas da equação (4.32).

Tabela 11. Parâmetros obtidos para os ensaios hidrodinâmicos realizados

Reator	θ_h (h)	N	D/u.L (PD)	D/u.L (GD-ta)
E1V	2,18	1,38	0,362	0,191
E1C	2,08	1,57	0,318	0,183
E2V	2,19	1,67	0,299	0,172
E2C	2,35	1,65	0,303	0,217
E3V	2,44	2,72	0,184	0,123
E2DV	3,35	2,87	0,174	0,182
UASB SV-E1	16	5	0,113	0,084
UASB SV-E2	14	4	0,122	0,085
UASB	15	6	0,081	0,064
40% · $\bar{Q}$ -E1				
UASB	14	6	0,086	0,068
40% · $\bar{Q}$ -E2				
UASB	15	7	0,071	0,056
60% · $\bar{Q}$				

θ_h – tempo de detenção hidráulica [T]

N – número de reatores de mistura completa em série

D/u.L – número de dispersão [adimensional]

Para os ensaios do reator UASB, com vazão senoidal cíclica de 40% e 60%, os resultados do tempo de detenção hidráulica real foram superiores ao TDH teórico. Para os ensaios realizados com variação cíclica da vazão, os valores experimentais do TDH obtidos apresentaram diferenças significativas entre 40% e 50% em relação ao tempo de detenção

hidráulica teórico de aproximadamente 10 h. Os reatores UASB operados com vazão constante apresentaram resultados similares em relação à determinação do TDH.

Os valores dos TDH determinados com uso da equação (4.54) foram similares aos determinados por Carvalho (2006), que determinou os parâmetros dos ensaios hidrodinâmicos do reator UASB – nas condições testadas – por meio da equação (4.32).

Valores diferentes para os parâmetros de dispersão ($D/u.L$) e número de reatores de mistura perfeita em série (N) foram obtidos segundo as duas metodologias de tratamento dos dados dos ensaios hidrodinâmicos do reator UASB. A maior diferença encontrada foi para os ensaios de variação senoidal cíclica de 60%. Para esse ensaio, Carvalho (2006) determinou 11 reatores em série (N) e o parâmetro ($D/u.L$) para pequena dispersão de 0,045; enquanto que, na pesquisa desta tese, para esse ensaio foram determinados 7 reatores em série e o parâmetro ($D/u.L$) para pequena dispersão 0,071. Para os ensaios com variação cíclica de 40% da vazão média, os valores obtidos para o grau de mistura do reator também foram inferiores aos obtidos por Carvalho (2006), porém, foi encontrada pequena diferença observada comparada àquela encontrada na análise dos reatores com vazão senoidal cíclica de 60%. Carvalho (2006) determinou 7 a 8 reatores em série para os reatores com vazão senoidal cíclica de 40%. Neste trabalho foi determinado valor bem próximo – 6 reatores de mistura perfeita em série.

As grandes diferenças encontradas entre os resultados produzidos segundo as metodologias de Niemi (1977) e Levenspiel (1999) para os valores dos parâmetros – ensaios hidrodinâmicos do reator UASB – são coerentes, uma vez que as hipóteses empregadas por Levenspiel (1999) na determinação das curvas de distribuição de tempo de residência são de vazão constante. Os resultados encontrados mostram que para valores de vazões em faixas de amplitudes maiores, há maior desvio da hipótese de vazão constante.

A análise hidrodinâmica dos reatores em escala de bancada apresentou diferenças entre os valores obtidos para ambas as metodologias empregadas. Porém, as diferenças não foram tão significativas quanto as observadas para os dados do reator UASB.

Para os reatores em escala de laboratório, os parâmetros obtidos com a normalização dos dados experimentais, de acordo com Levenspiel (1999), encontram-se na Tabela 12.

A análise estatística dos resultados obtidos a partir das metodologias empregadas – Niemi (1977) e Levenspiel (1999) – não demonstrou diferença significativa entre os resultados. Porém, na determinação dos parâmetros foram notadas diferenças entre os valores determinados a partir das duas curvas. Nos casos em que há maior amplitude de variação de vazão afluente é possível observar aumento significativo nas diferenças entre os valores dos parâmetros obtidos pelas duas metodologias.

Tabela 12. Parâmetros obtidos com o ajuste dos dados experimentais

Reator	θ_h (h)	N	D/u.L (PD)	D/u.L (GD-ta)
E1V	2,18	1,51	0,332	0,191
E2V	2,19	1,69	0,296	0,172
E3V	2,44	2,64	0,189	0,123
E2DV	3,35	3,06	0,163	0,182

O resultado observado demonstrou diferenças nos parâmetros determinados pela metodologia de Niemi (1977) e Levenspiel (1999) para as maiores amplitudes na variação de vazão afluyente. Além disso, foram observadas diferenças de valores consideráveis na determinação dos parâmetros pela mesma metodologia, porém submetidos a diferentes condições de vazão afluyente. Essa diferença indica que possivelmente as variações de vazão afluyente modificam a característica hidrodinâmica do reator submetido a essas variações.

Por exemplo, a determinação do número de reatores em série com a metodologia de Levenspiel (1999); Carvalho (2006) determinou 11 reatores em série (N) quando o reator UASB foi submetido a variação cíclica de vazão afluyente de 60%, enquanto que encontrou 7 – 8 reatores em série para variação cíclica de vazão afluyente de 40%. Nessa pesquisa, Carvalho (2006) na etapa sem variação de vazão encontrou valores iguais a 5 e 4 reatores em série. Esses resultados indicam a influência da variação da vazão sobre o comportamento hidrodinâmico de reatores se essas características são determinadas de acordo com o modelo fundamental apresentado por Levenspiel (1999). Eventualmente, um modelo mais realista poderá resultar em outro comportamento.

Especificamente no caso do reator UASB, foi observado que para maiores variações de vazão o comportamento do reator tendeu ao pistonado. Esses resultados realçam a importância de não desconsiderar a variação de vazão afluyente na determinação das curvas de distribuição de tempo de residência dos dados experimentais. Além da necessidade de serem usados modelos matemáticos adequados, ou seja, que considerem em suas formulações as variações de vazões afluyentes.

Os valores dos parâmetros determinados a partir do uso da metodologia de Niemi (1977), também indicam a tendência do escoamento do reator UASB ao pistonado.

Esse resultado demonstra a necessidade de considerar a variação da vazão afluyente na determinação das curvas experimentais de distribuição de tempo de residência. Ademais, reforça a necessidade do desenvolvimento de um modelo matemático, no qual seja abordado o

escoamento não permanente, para a representação adequada de reatores submetidos a variação de vazão afluyente.

Embora a análise estatística indicasse não ocorrer grande diferença entre os valores das curvas determinadas pelas duas metodologias (Niemi, 1977 e Levenspiel, 1999) essas metodologias são conceitualmente distintas. Esses conceitos não devem ser menosprezados na análise dos dados experimentais. Desta forma, nesta pesquisa optou-se pelo uso da metodologia de Niemi (1977) para analisar as curvas DTR experimentais de reatores operados com variação de vazão afluyente.

5.2 CALIBRAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO PROPOSTO COM EXPERIMENTOS EM ESCALA DE BANCADA

Os dados experimentais obtidos do trabalho de Sasaki (2005) foram analisados e aplicados como dados de entrada para o modelo matemático proposto. As equações diferenciais parciais (EDP) foram resolvidas numericamente pela função *solver* PDEPE da ferramenta computacional *Matlab/Simulink*.

Os reatores operados com vazão variável E1V e E2V também foram operados com vazão constante, denominados E1C e E2C. Para o reator E1V foi testado o modelo proposto (equação 4.3) com duas hipóteses: vazão afluyente variável (equação 4.7 e 4.9) com volume constante; e vazão e volume variáveis (equação 4.7 a 4.9). Os resultados das simulações demonstraram que o modelo proposto não é adequado para a configuração desses reatores (E1V e E1C). Nas simulações do modelo matemático proposto, realizadas para o reator E1V e E1C, foram obtidos valores do parâmetro $D/u.L$ superiores à 1, o que torna inviável o uso desse modelo para simular esses reatores.

Os resultados obtidos com as simulações dos modelos de pequena dispersão (PD) e de grande dispersão (GD) não apresentaram bons ajustes aos dados experimentais de reatores em escala de bancada. Os coeficientes de correlação obtidos para esses modelos foram $R = 0,583$ e $0,116$; respectivamente.

Provavelmente essa falta de ajuste se deva ao fato de os parâmetros obtidos dos ensaios não respeitarem suas premissas: $D/u.L < 0,01$ para o modelo de PD e condição de

contorno de vaso aberto para o modelo de GD. Os valores dos parâmetros para os modelos de PD e GD-ta encontram-se na Tabela 11. As correlações e os coeficientes de determinação, dos resultados das simulações ajustados aos dados experimentais para o reator E1V, encontram-se na Tabela 13.

Para o reator E1V, o modelo que apresentou melhor correlação entre o resultado da simulação e os dados experimentais foi o modelo uniparamétrico N-CSTR. A Figura 16 apresenta os resultados das simulações ajustados aos dados experimentais do reator E1V.

(a)

(b)

Figura 16. Curva DTR experimental obtida com os ensaios no reator E1V e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta e (b) P_1

A porcentagem de variação explicada pelo modelo de mistura perfeita é 91%. O modelo de mistura perfeita com variação de vazão proposto por Niemi (1977) teve pior ajuste comparado ao mistura perfeita – 79% de variação explicada pelo modelo.

Tabela 13. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos (E1V)

Modelo	R – coeficiente de correlação	R^2 – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	0,955	0,91	0,067
$E\Theta_{PD}$	0,583	0,33	0,132
$E\Theta_{GD-Ta}$	0,116	0	0,231
$E\Theta_{N1}$	0,889	0,79	0,128

As curvas experimentais de distribuição do tempo de residência (DTR) obtidas para o reator E1C e as curvas teóricas de DTR obtidas com a simulação dos modelos matemáticos são apresentadas na Figura 17.

Figura 17. Curva experimental obtida com os ensaios no reator E1C e curvas teóricas obtidas das simulações dos modelos utilizados: N-CSTR, PD e GD-ta

Para o reator E1C operado com vazão constante, o modelo N-CSTR apresentou melhor ajuste com cerca de 90% de variação explicada pela regressão e 10% para os resíduos. As correlações e os coeficientes de determinação dos resultados das simulações, ajustados aos dados experimentais para o reator E1C, encontram-se na Tabela 14.

Tabela 14. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos (E1C)

Modelo	R – coeficiente de correlação	R^2 – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	0,949	0,90	0,069
$E\Theta_{PD}$	0,687	0,46	0,135
$E\Theta_{GD-Ta}$	0,395	0,14	0,215

Assim como nos reatores E1V e E1C, as simulações do modelo matemático proposto para os reatores E2V e E2C resultaram valores do parâmetro $D/u.L$ superiores à 1. Dessa forma, o modelo proposto também demonstrou ser inadequado para representar essas duas configurações de reatores.

A Figura 18 apresenta os dados experimentais e os resultados das simulações dos modelos utilizados para o reator E2V e a Figura 19 apresenta os dados experimentais do reator E2C com os respectivos resultados das simulações dos modelos empregados.

(a)

(b)

Figura 18. Curva DTR experimental obtida com os ensaios no reator E2V e curvas obtidas das simulações dos modelos empregados: (a) CSTR, PD e GD-ta e (b) P_2

O melhor ajuste para o reator E2V foi também o modelo N-tanques em série (N-CSTR), com 97% da variação relativa ao modelo. O modelo proposto por Niemi (equação 4.52) considerando dois tanques em série não apresentou bom ajuste; apenas 58% da variação é explicada pelo referido modelo. Os valores das correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos modelos teóricos para os dados experimentais do reator E2V podem ser vistos na Tabela 15.

Tabela 15. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos (E2V)

Modelo	R – coeficiente de correlação	R^2 – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	0,983	0,97	0,041
$E\Theta_{PD}$	0,684	0,46	0,131
$E\Theta_{GD-Ta}$	0,306	0,07	0,231
$E\Theta_{P2}$	0,767	0,58	0,138

A Tabela 16 apresenta os dados de correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos modelos teóricos para os dados experimentais do reator E2C.

Figura 19. Curva experimental obtida com os ensaios no reator E2C e curvas obtidas das simulações dos modelos: N-CSTR, PD e GD-ta

A melhor correlação obtida entre os dados experimentais do reator E2C e os resultados das simulações efetuadas foi para a simulação do modelo de mistura perfeita com correlação de 0,992.

Tabela 16. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos (E2C)

Modelo	Coeficiente de Correlação – R	R^2 – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	0,992	0,98	0,029
$E\Theta_{PD}$	0,708	0,49	0,125
$E\Theta_{GD-Ta}$	0,386	0,133	0,197

As simulações do modelo matemático proposto para o reator E3V resultaram valores de $D/u.L$ inferiores comparados aos valores resultantes das simulações realizadas para os demais reatores em escala de bancada. Porém, os valores de $D/u.L$ determinados ainda foram bem superiores à 1, o que também torna inadequada a representação da configuração desse reator pelo modelo proposto. A hipótese testada para a simulação foi de variação da vazão afluente e volume constante.

A Figura 20 mostra a curva experimental DTR para o reator E3V e os resultados obtidos com as simulações dos modelos utilizados. Também foi observado que o melhor ajuste foi para o modelo N-CSTR, com 98% da variação explicada pelo modelo e 2% para o erro.

(a)

(b)

Figura 20. Curva DTR experimental obtida com os ensaios no reator E3V e curvas obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta e (b) P_3

A Tabela 17 apresenta os coeficientes de correlação entre os resultados das simulações dos modelos matemáticos teóricos e os dados experimentais do reator E3V.

Tabela 17. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos resultados das simulações dos modelos teóricos (E3V)

Modelo	R – coeficiente de correlação	R^2 – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	0,991	0,98	0,056
$E\Theta_{PD}$	0,833	0,69	0,128
$E\Theta_{GD-Ta}$	0,721	0,51	0,200
$E\Theta_{N3}$	0,852	0,72	0,139

Para o reator denominado E2DV testou-se o modelo matemático proposto com duas hipóteses: (a) variação da vazão afluyente e volume constante e (b) variação do volume e da vazão afluyente. Assim como nos demais reatores de escala de bancada, os valores de parâmetro $D/u.L$ obtidos foram superiores a 1, tornando inadequado o uso do modelo proposto para essa configuração.

A Figura 21 apresenta a curva DTR obtida experimentalmente do reator E2DV e as curvas DTR obtidas das simulações dos modelos matemáticos utilizados.

(a)

(b)

Figura 21. Curva DTR experimental obtida com os ensaios no reator E2DV e curvas DTR das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b))P_{2DV}

Todos os resultados das simulações dos modelos matemáticos para o reator E2DV apresentaram péssimas correlações com os resultados experimentais, como pode ser visto na Tabela 18. A análise dos dados experimentais do reator E2DV mostra, claramente, que ocorreu expulsão do traçador devido a alguma ocorrência espúria. Provavelmente, essa expulsão teria interferido na avaliação e nos ajustes dos modelos utilizados.

Os pontos que são claramente anomalias experimentais foram mantidos no ajuste do modelo, apesar de interferirem nas simulações. Assim a comparação entre os resultados obtidos com o modelo matemático proposto nesta pesquisa e os ajustes dos modelos utilizados por Sasaki (2005) partem exatamente do mesmo conjunto de dados.

Na pesquisa realizada por Sasaki (2005), observou-se haver retromistura nas proximidades das chicanas utilizadas para compartimentar os reatores. De acordo com a autora, o fenômeno pode ser explicado pelas baixas vazões utilizadas nos ensaios, as quais teriam provocado mudança de direção do escoamento no interior dos tanques em função da intensa aeração.

A retromistura existente no reator E2DV pode ter causado a fuga do traçador, observada na análise dos dados experimentais. Esse desvio dos padrões usuais do escoamento não é representado por um modelo de distribuição de tempo de residência, pois não reporta especificamente esse fenômeno em consideração. Em seu trabalho, Sasaki (2005) correlacionou o modelo teórico (equação 4.53) com ajustes em relação à retromistura – proposto por Niemi (1977) – aos dados experimentais do reator E2DV.

Tabela 18. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos (reator E2DV).

Modelo	R – coeficiente de correlação	R^2 – coeficiente de determinação
$E\Theta_{N-CSTR}$	0,157	0,38
$E\Theta_{PD}$	0,162	0,13
$E\Theta_{GD-Ta}$	0,026	0,17
$E\Theta_{P2DV}$	0,216	0,25

Além das correlações obtidas entre os resultados das simulações do modelo e os dados experimentais, foi realizada uma análise qualitativa da distribuição dos resíduos gerados pelos modelos matemáticos aplicados.

A avaliação de modelos pela aparência dos gráficos de resíduos é um procedimento subjetivo, porém, não deve ser menosprezado. De acordo com Barros Neto et al. (2007), um exame cuidadoso dos gráficos dos resíduos deve ser considerado obrigatório em qualquer situação. Por exemplo, se o gráfico de resíduo aparenta uma forma de distribuição aleatória é um indicativo de que o modelo simula adequadamente o objeto simulado.

Para o reator E1V, as distribuições dos resíduos dos modelos matemáticos ajustados estão apresentadas na Figura 22.

Os gráficos de resíduos para os modelos N-CSTR, PD, GD-ta indicam tendência na distribuição dos resíduos, com maiores concentrações para valores positivos. O modelo proposto por Niemi (1977) – equação (4.52) – ajustado para $N=1$ apresenta distribuição de resíduo aleatória.

Figura 22. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E1V: (a)N-CSTR, (b) GD-ta, (c) PD e (d) P_1

A análise da distribuição dos resíduos do ajuste de modelos matemáticos para o reator E1C encontra-se na Figura 23. No caso do reator E1C observa-se pequena tendência positiva no trecho $(0 < \Theta < 0,5)$ para o modelo de mistura perfeita (N-CSTR).

Os modelos de grande dispersão (Gd-ta) e pequena dispersão (PD) apresentaram valores de resíduos maiores comparados aos demais modelos empregados.

Figura 23. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E1C: (a)N-CSTR, (b) GD-ta e (c) PD

Para o reator E2V o modelo N-CSTR apresentou tendência a resíduos positivos e, para o modelo proposto por Niemi (1977) – equação (4.52) com $N = 2$, P_2 – apresentou a distribuição de resíduos de forma mais aleatória, comparado ao N-CSTR. O modelo de PD apresentou distribuição de resíduos similar ao modelo de Niemi (1977), assim como o de GD-ta; porém este último com maiores valores de resíduos. A Figura 24 apresenta os resíduos, ao longo do tempo adimensional (Θ), dos modelos aplicados ao reator E2V.

A Figura 25 apresenta a distribuição de resíduos dos modelos matemáticos aplicados ao reator E2C. Apesar da concentração de valores positivos dos resíduos no trecho inicial ($0 < \Theta < 0,5$) o modelo de mistura perfeita teve valores de resíduos bem próximos a zero.

Figura 24. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E2V: (a)N-CSTR, (b) GD-ta, (c) PD e (d) P₂

Figura 25. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E2C: (a)N-CSTR, (b) PD e (c) GD-ta

Os resíduos gerados pelo modelo N-CSTR aplicado para os dados do reator E3V não aparecem de forma aleatória. Os demais modelos aplicados aos dados experimentais do reator E3V apresentaram distribuição de resíduos aleatória. A Figura 26 apresenta a distribuição de resíduos dos modelos aplicados ao reator E3V.

Figura 26. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E3V: (a)N-CSTR, (b)PD, (c) GD-ta e (d) P_3

A Figura 27 apresenta a distribuição de resíduos para o reator E2DV. Em todos os modelos foram notados elevados valores de resíduos, principalmente para o trecho onde foi observada a expulsão do traçador $\Theta = 1,5$.

Figura 27. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator E2dV: (a)N-CSTR, (b)PD, (c) GD-Ta e (d) N_{2dv}

Não foi possível verificar qualquer dos modelos matemáticos teóricos – utilizados nesta pesquisa – para os ensaios hidrodinâmicos do reator E2DV. O fato de não ter considerado o fenômeno de retromistura, relatado na pesquisa de Sasaki (2005), parece ter contribuído para essa falta de ajuste. A análise dos resíduos gerados pelos modelos confirma a falta de ajuste. Isso acontece pelo fato de o fenômeno de retromistura gerar uma zona morta no reator, situação não contemplada pelo modelo matemático proposto e demais modelos utilizados nesta pesquisa.

O coeficiente de determinação do ajuste do modelo de mistura perfeita N-CSTR aos dados experimentais dos reatores com vazão afluyente variável apresentou melhores resultados em relação aos demais modelos. Porém, a distribuição de resíduos indicou tendência desse modelo em concentrar resíduos positivos e/ou negativos para os dados ajustados.

De maneira geral, ao analisar o uso dos modelos teóricos para os reatores em escala de laboratório, a simulação do modelo de mistura perfeita P_N (equação 4.52) proposto por Niemi (1977) obteve correlações inferiores às da simulação do modelo N-CSTR (equação 4.24), mas apresentou a distribuição de resíduos aleatória. Pode-se considerar o modelo satisfatório. Esse resultado indica que a variação de vazão na entrada do reator não deve ser menosprezada.

O uso do modelo matemático proposto é questionável para os reatores estudados. Os altos valores de $D/u.L$ determinados pelo modelo indicam que o escoamento desvia bastante

do pistonado. De acordo com Levenspiel (1999), se $D/u.L > 1$ o modelo torna-se questionável e há chances do reator não obedecer suposição do modelo de que o escoamento do reator tende ao pistonado.

Os reatores em escala de bancada foram construídos por Sasaki (2005) com finalidade de representar escoamento de mistura perfeita, portanto é condizente encontrarem-se altos valores para o parâmetro $D/u.L$. Se o escoamento dos reatores em escala bancada tendessem ao pistonado deveriam ser encontrados valores para o parâmetro $D/u.L$ abaixo de 1, o que confirma uma das hipóteses básicas do modelo matemático proposto que é o de escoamento pistonado. Esse resultado não contradiz o modelo matemático proposto, significa que ele não representa fisicamente os reatores estudados.

Contudo, as simulações do modelo matemático proposto para o reator E3V apresentaram menores valores de $D/u.L$ que os demais reatores em escala de laboratório analisados. Esses resultados indicam a tendência do escoamento desse reator a aproximar-se do escoamento pistonado, por ser um reator dividido em três tanques de mistura perfeita em série e de comprimento maior que os demais reatores estudados.

Nas simulações do modelo matemático proposto com condição de volume e vazão variáveis também foram encontradas valores de $D/u.L$ superiores a 1, portanto não é possível obter informações relevantes a respeito da condição aplicada, pois, como citado anteriormente, se $D/u.L > 1$ provavelmente o reator estudado não obedecerá à condição do modelo.

De maneira geral – embora os reatores em escala de laboratório não possam ser representados pelo modelo matemático proposto neste trabalho – foi possível notar, com auxílio das simulações dos demais modelos que a variação de vazão afluente interfere na análise hidrodinâmica dos reatores. Os resultados obtidos com os modelos matemáticos proposto por Niemi (1977) – equações (4.52) e (4.53) ratificam a hipótese testada que a variação de vazão afluente interfere na análise hidrodinâmica de reatores.

5.3 CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DO MODELO PARA REATORES EM ESCALA PILOTO

Os resultados do modelo teórico aplicado aos dados de operação do reator UASB estão descritos neste item. Os dados utilizados foram retirados da pesquisa realizada por Carvalho (2006), conforme previamente descrito no capítulo Material e Métodos.

Carvalho (2006) realizou ensaios hidrodinâmicos no reator UASB quando operado com vazão média afluyente constante e igual a $16,0 \text{ L.h}^{-1}$ e quando submetido à variações senoidais cíclicas da vazão média afluyente em 40% e 60%.

Para os ensaios hidrodinâmicos realizados com vazão constante, o modelo teórico foi aplicado com a mesma condição, ou seja, vazão constante. Durante os ensaios hidrodinâmicos, o reator UASB foi submetido à variações senoidais cíclicas da vazão média afluyente em 40% e 60%, foi analisado o modelo com duas hipóteses. A primeira com vazão variando com 40% e 60% da vazão média afluyente e o volume do reator constante. A segunda hipótese testada foi o volume do reator variando segundo a vazão (equação 4.8).

Para representar a variação cíclica da vazão no modelo utilizou-se a equação (4.7).

A Tabela 19 apresenta os valores do parâmetro $D/u.L$ obtidos nas simulações do modelo matemático para o reator UASB.

Nos ensaios em que o coeficiente de dispersão ($D - [m^2 \cdot s^{-1}]$) é igual a zero significa que, após a injeção inexistente o espalhamento do traçador ao longo do reator. Dessa maneira, considera-se o escoamento pistonado ideal. Para todas as simulações do modelo aplicadas ao reator UASB testou-se o valor de dispersão zero. Os valores das funções objetivos encontrados para esse valor indicam que não houve dispersão nula para o escoamento do reator estudado. Significa também que, provavelmente, existe espalhamento da curva de traçador, portanto o escoamento do reator UASB estudado não pode ser considerado escoamento pistonado ideal. Essas observações também podem ser notadas por meio da análise das curvas dos ensaios hidrodinâmicos. A Figura 28 apresenta as curvas obtidas nos ensaios hidrodinâmicos do reator UASB.

Tabela 19. Parâmetros obtidos com as simulações para os dados do reator UASB

		D/u.L (-)	F.O.
SV	Ensaio 1	0	93,63
		0,132	3,08
		0,116	0,08
		0,099	0,40
	Ensaio 2	0	22,76
		0,132	0,66
		0,116	0,46
		0,099	0,46
40%.Q	Ensaio 1	Simulação com variação de vazão	0 0,165 0,149 0,132
			91,82 1,89 1,70 2,12
		Simulação com variação de vazão e volume	0,116 0,107 0,099
			0,90 0,93 1,21
	Ensaio 2	Simulação com variação de vazão	0 0,165 0,132 0,149
			93,96 2,57 3,08 2,50
		Simulação com variação de vazão e volume	0,116 0,123 0,107
			2,07 2,13 2,21
	Simulação com variação de vazão	0 0,132 0,149 0,165	96,77 5,49 5,34 5,77
		0,116	3,35
	Simulação com variação de vazão e volume	0,099 0,116	3,33 3,35

SV – sem variação cíclica da vazão afluyente

40%.Q – variação cíclica da vazão afluyente de 40% da vazão média

60%.Q – variação cíclica da vazão afluyente de 40% da vazão média

Figura 28. Curva da concentração de eosina Y ao longo do tempo de experimento no reator UASB: (a) ensaio sem variação de vazão, (b) ensaio com variação cíclica de vazão afluyente de 40% e (c) ensaio com variação cíclica de vazão afluyente de 60%.

Os valores dos parâmetros $D/u.L$ para os modelos de pequena e grande dispersão obtidos para todos os ensaios experimentais do reator UASB não respeitaram suas condições para ajuste ($D/u.L < 0,01$ para o modelo de PD e condição de contorno de vaso aberto para o modelo de GD) assim como ocorreu na análise dos reatores em escala de laboratório. Os valores dos parâmetros $D/u.L$ obtidos dos ensaios hidrodinâmicos do reator UASB estão na Tabela 11.

Os ajustes dos modelos de PD e GD-ta apresentaram coeficientes de correlação – R inferiores aos demais modelos utilizados para os ensaios hidrodinâmicos do reator UASB sem variação cíclica de vazão.

Os valores dos coeficientes de correlações obtidos com o ajuste dos modelos para os dois ensaios sem variação cíclica da vazão encontram-se na Tabela 20.

O modelo de N-tanques de mistura perfeita em série (N-CSTR) e o modelo matemático proposto sem variação de vazão afluyente e volume constante (para os valores de $D/u.L$ de 0,099; 0,116 e 0,132) apresentaram melhores coeficientes de correlações entre os resultados das simulações e os dados experimentais dos dois ensaios hidrodinâmicos realizados no reator UASB sem variação da vazão afluyente.

O resultado encontrado na simulação do modelo matemático proposto com vazão e volume constantes demonstrou que o reator UASB analisado apresentou tendência de escoamento pistonado. Esse resultado confirma os valores dos parâmetros obtidos da curva DTR experimental (Tabela 10).

Tabela 20. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelo modelo teórico para o ensaio hidrodinâmico sem variação cíclica de vazão.

	Modelo	R – coeficiente de correlação	R^2 – coeficiente de determinação	Erro padrão
Ensaio 1	$E\Theta_{N-CSTR}$	0,976	0,95	0,126
	$E\Theta_{PD}$	0,860	0,73	0,150
	$E\Theta_{GD-Ta}$	0,786	0,61	0,216
	$E\Theta_{\tau_{eoD}=0,133}$	0,993	0,99	0,031
	$E\Theta_{\tau_{eoD}=0,117}$	0,990	0,98	0,041
	$E\Theta_{\tau_{eoD}=0,100}$	0,975	0,95	0,085
Ensaio 2	$E\Theta_{N-CSTR}$	0,950	0,90	0,113
	$E\Theta_{PD}$	0,788	0,61	0,165
	$E\Theta_{GD-Ta}$	0,691	0,4	0,252
	$E\Theta_{\tau_{eoD}=0,133}$	0,901	0,81	0,090
	$E\Theta_{\tau_{eoD}=0,117}$	0,922	0,85	0,100
	$E\Theta_{\tau_{eoD}=0,100}$	0,919	0,84	0,124

Para o ensaio 1, realizado com vazão média afluyente constante, o modelo matemático sem variação de vazão e volume constante com $D/u.L = 0,132$ reproduz 99% da variação total. O mesmo não acontece para o ensaio 2 realizado com vazão média afluyente constante, nesse caso o ajuste do modelo com variação de vazão e volume constate com $D/u.L = 0,132$ reproduz 81% da variação total. Para o ensaio 2, o modelo N-CSTR reproduz 90% da variação total contra 81%, 85% e 84% do modelo matemático com $D/u.L = 0,132$; 0,116 e 0,099, respectivamente. A Figura 29 mostra as curvas de distribuição do tempo de residência e os modelos matemáticos ajustados para o ensaio 1 sem variação de vazão e a Figura 30 para o ensaio 2.

(a)

(b)

Figura 29. Curva DTR experimental obtida no ensaio 1 sem variação da vazão afluyente do reator UASB e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) sem variação de vazão ($D/u.L=0,133$; $0,117$ e $0,100$)

(a)

(b)

Figura 30. Curva DTR experimental obtida no ensaio 2 do reator UASB e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) sem variação de vazão ($D/u.L=0,133$; $0,117$ e $0,100$)

As curvas experimentais de distribuição do tempo de residência (DTR) do ensaio realizado com variação senoidal cíclica de 40% da vazão média obtidas com o ajuste de modelos matemáticos são apresentadas na Figura 31 e na Figura 32 (ensaio 1).

(a)

(b)

Figura 31. Curva DTR experimental obtida do ensaio 1 do reator UASB com 40% e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) N_N .

(a)

(b)

Figura 32. Curva DTR experimental obtida do ensaio 1 do reator UASB com 40% e os resultados dos modelos ajustados: (a) Vazão variável ($D/u.L=0,150$; $0,167$ e $0,133$) e (b) vazão e volume variável ($D/u.L=0,100$; $0,108$ e $0,117$).

Para a simulação das duas hipóteses testadas no modelo matemático – no experimento 1 com vazão senoidal cíclica da vazão afluyente de 40% – foram obtidos valores um pouco mais elevados de $D/u.L$ para a condição de volume constante e vazão variável comparados à hipótese de volume e vazão variáveis.

Também é possível, no ajuste do modelo com volume e vazão variáveis, notar melhores correlações com os dados experimentais comparado aos resultados do modelo com vazão variável e volume constante.

As correlações entre as curvas DTR obtidas das simulações dos modelos e as curvas de distribuição de tempo de residência dos dois experimentos com vazão senoidal cíclica da vazão afluente de 40% estão apresentadas na Tabela 21.

Tabela 21. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelo modelo teórico para o ensaio hidrodinâmico com variação cíclica de vazão de 40%

Modelo		R – coeficiente de correlação	R ² – coeficiente de determinação	Erro Padrão	
Ensaio 1	EΘ _{N-CSTR}	0,949	0,90	0,162	
	EΘ _{PD}	0,924	0,85	0,130	
	EΘ _{GD-Ta}	0,846	0,71	0,213	
	EΘ _{PN}	0,381	0,13	0,839	
	Simulação com variação de vazão	EΘ _{teoD=0,167}	0,886	0,78	0,109
		EΘ _{teoD=0,150}	0,872	0,76	0,137
		EΘ _{teoD=0,133}	0,846	0,71	0,181
	Simulação com variação de vazão e volume	EΘ _{teoD=0,117}	0,941	0,88	0,100
		EΘ _{teoD=0,108}	0,933	0,87	0,117
		EΘ _{teoD=0,100}	0,922	0,85	0,141
Ensaio 2	EΘ _{N-CSTR}	0,866	0,75	0,645	
	EΘ _{PD}	0,862	0,74	0,169	
	EΘ _{GD-Ta}	0,770	0,59	0,247	
	EΘ _{PN}	0,392	0,14	2,09	
	Simulação com variação de vazão	EΘ _{teoD=0,167}	0,833	0,69	0,132
		EΘ _{teoD=0,133}	0,793	0,63	0,208
		EΘ _{teoD=0,150}	0,819	0,67	0,163
	Simulação com variação de vazão e volume	EΘ _{teoD=0,117}	0,855	0,73	0,154
		EΘ _{teoD=0,125}	0,858	0,73	0,137
		EΘ _{teoD=0,108}	0,847	0,71	0,174

Não houve diferença significativa no ajuste do modelo matemático no segundo experimento comparado ao primeiro com vazão senoidal cíclica da vazão aflúente de 40%.

As Figuras 33 e 34 mostram o ajuste dos modelos matemáticos teóricos à curva de distribuição de residência experimental para o segundo experimento com vazão senoidal cíclica da vazão aflúente de 40%.

(a)

(b)

Figura 33. Curva DTR experimental obtida do ensaio 2 do reator UASB com 40% e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) N_N .

(a)

(b)

Figura 34. Curva DTR experimental obtida do ensaio 2 do reator UASB com 40% e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) Vazão variável ($D/u.L=0,117$; $0,133$ e $0,150$) e (b) vazão e volume variável ($D/u.L=0,108$; $0,125$ e $0,100$).

Tal como no primeiro experimento com vazão senoidal cíclica da vazão afluyente de 40%, no segundo experimento foram obtidas melhores correlações para a simulação com variação da vazão e do volume.

Nos experimentos realizados para o reator UASB operado com vazão senoidal cíclica da vazão afluyente de 60%, também foi observado melhor ajuste do modelo matemático proposto em relação à curva de distribuição de tempo de residência experimental quando a simulação foi feita com variação da vazão e do volume. As correlações determinadas para os ajustes dos modelos aos dados experimentais do reator UASB operado com vazão senoidal cíclica da vazão afluyente de 60% encontra-se na Tabela 22.

O ajuste dos resultados das simulações do modelo matemático de mistura perfeita (N-CSTR) aos dados experimentais no regime não permanente, com vazão senoidal cíclica da vazão média afluente de 60%, obteve correlação inferior quando comparado aos ajustes para os dados experimentais com vazão média constante e com vazão senoidal cíclica da vazão média afluente de 40%. Provavelmente, a falta de ajuste observada ocorreu devido às maiores turbulências que ocorreram no escoamento para a vazão de maior amplitude e possivelmente estaria relacionada ao fato de a hipótese do modelo N-CSTR ser para regime permanente, então, quanto maior a variação senoidal da vazão afluente mais o regime do reator desviar-se-á dessa hipótese.

Carvalho (2006) também encontrou piores coeficientes de correlação para o modelo N-CSTR na análise feita no regime permanente do reator UASB. A autora encontrou valores de R inferiores aos determinados nesta pesquisa. Os valores encontrados por Carvalho (2006) foram $R = 0,742$ e $0,714$ para os ensaios hidrodinâmicos do reator UASB operado com variação de vazão de 40% da vazão média afluente e $R = 0,705$ para os ensaios no reator operado com variação de vazão de 60% da vazão média afluente. Os valores dos coeficientes de correlação do modelo N-CSTR encontrados nesta pesquisa – para o reator UASB quando submetido à variação de vazão – podem ser vistos nas Tabelas 20 a 22.

A diferença encontrada nos ajustes do modelo N-CSTR entre as pesquisas é justificável, uma vez que o tratamento de regime permanente dos dados experimentais torna-se cada vez mais distante da condição real do escoamento quando a variação da vazão aumenta.

Os resultados encontrados com o modelo matemático proposto nesta pesquisa com simulações de vazão afluente e volume variáveis corroboram a afirmação acima.

As Figuras 35 e 36 apresentam o ajuste dos modelos matemáticos teóricos aplicados aos dados experimentais obtidos do reator UASB operado com vazão senoidal cíclica da vazão afluente de 60%.

Tabela 22. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelo modelo teórico para o ensaio hidrodinâmico com variação cíclica de vazão de 60%

Modelo	R	R^2	coeficiente de determinação	Erro Padrão
	coeficiente de correlação			
$E\Theta_{N-CSTR}$	0,860	0,73		0,218
$E\Theta_{PD}$	0,780	0,60		0,225
$E\Theta_{GD-Ta}$	0,730	0,52		0,294
$E\Theta_{PN}$	0,250	0,046		0,773
Simulação com variação de vazão	$E\Theta_{teoD=0,133}$	0,705	0,49	0,244
	$E\Theta_{teoD=0,150}$	0,721	0,51	0,196
	$E\Theta_{teoD=0,167}$	0,728	0,52	0,162
Simulação com variação de vazão e volume	$E\Theta_{teoD=0,100}$	0,834	0,69	0,214
	$E\Theta_{teoD=0,083}$	0,808	0,65	0,283
	$E\Theta_{teoD=0,117}$	0,771	0,70	0,166

Os modelos matemáticos teóricos aplicados ao reator UASB com as diferentes condições experimentais também foram avaliados em relação à aparência do gráfico dos resíduos.

Os gráficos dos resíduos dos modelos aplicados aos dados experimentais para o primeiro ensaio hidrodinâmico realizado no reator UASB operado com vazão constante podem ser vistos na Figura 37.

(a)

(b)

Figura 35. Curva DTR experimental obtida do ensaio com reator UASB com 60% e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) N-CSTR, PD e GD-ta e (b) N_N

(a)

(b)

Figura 36. Curva DTR experimental obtida do ensaio com reator UASB com 60% e curvas DTR obtidas das simulações dos modelos: (a) Vazão variável ($D/u.L=0,133$; $0,150$ e $0,160$) e (b) vazão e volume variável ($D/u.L=0,067$; $0,083$ e $0,100$)

A distribuição dos resíduos ao longo do tempo adimensional (Θ) para o modelo N-CSTR indica um padrão geométrico (parábola), com concentrações de resíduos negativos, assim como o modelo PD. O modelo GD-ta apresenta uma função aleatória, porém com altos valores de resíduos – quer para valores positivos quer para valores negativos. Para o modelo matemático proposto, os resíduos foram pequenos, aquele que parece apresentar a forma mais aleatória é para o parâmetro $D/u.L=0,116$ (Figura 37 – e).

Figura 37. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com vazão média – ensaio 1: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD-ta, (d) vazão constante ($D/u.L = 0,132$), (e) vazão constante ($D/u.L = 0,116$) e (f) vazão constante ($D/u.L = 0,099$).

A análise de distribuição de resíduos para o segundo experimento hidrodinâmico do reator UASB com vazão constante também apresentou – para o modelo N-CSTR – uma tendência para resíduos negativos. O modelo de GD-ta apresentou resíduos com altos valores positivos e negativos. O modelo matemático proposto com valor de $D/u.L = 0,132$ apresentou uma concentração de resultados positivos no primeiro trecho do experimento ($0 < \Theta < 1$), porém, após esse trecho apresentaram valores quase nulos. Os demais modelos aparentam ter distribuição aleatória de resíduos. A Figura 38 apresenta a distribuição dos resíduos dos

modelos aplicados ao segundo experimento hidrodinâmico do reator UASB operado com vazão afluente constante.

Figura 38. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com vazão média – ensaio 2: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD-ta, (d) vazão constante ($D/u.L = 0,099$), (e) vazão constante ($D/u.L = 0,116$) e (f) vazão constante ($D/u.L = 0,132$).

O modelo N-CSTR apresentou tendência de resíduos negativos no ajuste aos dados dos dois ensaios hidrodinâmicos do reator UASB operado com vazão senoidal cíclica de 40%. A tendência do modelo N-CSTR, neste caso, foi similar à análise de distribuição dos resíduos do modelo para o reator UASB com vazão afluente constante. As Figuras 43 e 44 apresentam

os gráficos de resíduos para o primeiro ensaio hidrodinâmico realizado no reator UASB operado com vazão senoidal cíclica de 40%.

Figura 39. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 40% da vazão média – ensaio 1: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD-ta, (d) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,132$), (e) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,165$) e (f) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,149$)

Figura 40. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 40% da vazão média – ensaio 1: (a) P_N , (b) volume e vazão variável ($D/u.L = 0,107$), (c) volume e vazão variável ($D/u.L = 0,099$), (d) volume e vazão variável ($D/u.L = 0,116$)

A distribuição dos resíduos dos modelos ajustados às curvas de distribuição do tempo de residência do segundo experimento do reator UASB operado com vazão senoidal cíclica de 40% ao longo do tempo adimensional (Θ) encontram-se nas Figuras 45 e 46.

Nos dois experimentos hidrodinâmicos com o reator UASB operado com vazão senoidal cíclica de 40%, os modelos PD, GD-ta e o modelo matemático proposto – nas duas hipóteses testadas – apresentaram aleatória distribuição de resíduos. O modelo de mistura perfeita proposto por Niemi – equação 4.52 – apresentou distribuição de resíduos com altos valores de resíduos negativos e positivos no primeiro experimento e com tendência a valores negativos no segundo experimento.

A análise de distribuição de resíduos do segundo experimento com o reator UASB operado com vazão senoidal cíclica de 40% apresenta uma perturbação em torno de $\Theta = 1,5$ para todos os modelos analisados.

Figura 41. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 40% da vazão média – ensaio 2: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD-ta, (d) P_N , (e) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,116$) e (f) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,132$).

Figura 42. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 40% da vazão média – ensaio 2: (a) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,149$) (b) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,123$), (c) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,107$) e (d) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,116$).

Os gráficos dos resíduos dos modelos ajustados ao reator UASB operado com vazão senoidal cíclica de 60% encontram-se nas Figuras 47 e 48.

O modelo de mistura perfeita proposto por Niemi (1977) apresentou altos valores de resíduos positivos e negativos. Os demais modelos ajustados apresentaram aleatória distribuição.

Figura 43. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 60% da vazão média: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD-ta, (d) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,132$), (e) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,165$) e (f) vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,149$).

Figura 44. Distribuição dos resíduos para os modelos ajustados ao reator UASB operado com variação cíclica de 60% da vazão média: (a) P_N , (b) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,116$), (c) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,099$), (d) vazão e volume variável ($D/u.L = 0,083$).

A análise dos perfis hidrodinâmicos por meio das curvas de distribuição de tempo de residência considerando a variação de vazão mostrou melhora no ajuste do modelo de pequena dispersão para o reator UASB operado com variações senoidais cíclicas da vazão afluyente de 40% e 60%. O mesmo foi observado por Carvalho (2006).

Os resultados indicam haver influência da variação da vazão afluyente nos valores de dispersão e no ajuste do modelo matemático proposto. Com o aumento da amplitude da vazão ocorreu o aumento do número de tanques em série (N) enquanto eram observados menores valores para o parâmetro $D/u.L$. Esse fato mostra haver tendência do escoamento do reator UASB para escoamento pistonado. Essa tendência também é observada nos valores de correlação dos ajustes do modelo. Observou-se que, com o aumento da amplitude da vazão afluyente na operação do reator UASB houve queda na correlação entre a curva DTR obtida da simulação do modelo N-CSTR e a curva DTR experimental.

O modelo N-CSTR não apresentou distribuição aleatória dos resíduos; demonstrou grande tendência em concentrar resíduos negativos para todos os ensaios hidrodinâmicos do reator UASB. Essa anormalidade na distribuição dos resíduos pode comprometer o uso do

modelo N-CSTR para estudar o comportamento hidrodinâmico do reator UASB, apesar das boas correlações determinadas.

O modelo de mistura perfeita P_N – que considera a variação de vazão afluyente – não mostrou boas correlações, porém apresentou altos valores de resíduos.

Os valores de $D/u.L$, determinados pelo modelo matemático proposto nesta pesquisa, confirmaram a tendência do escoamento pistonado para o reator UASB. Além disso, os resultados deste modelo demonstraram que a variação de vazão afluyente não deve ser menosprezada.

5.4 CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DO MODELO PARA REATORES EM ESCALA REAL

Para avaliar a influência da variação da vazão na hidrodinâmica de reatores em escala real foram utilizados os dados do ensaio hidrodinâmico realizado em uma lagoa facultativa, conforme descrito no capítulo anterior.

Os dados do ensaio hidrodinâmico executado por Moreira (2006) foram normalizados de acordo com as metodologias de Niemi (1977) e Levenspiel (1999). Como os dados da vazão afluyente horária não estavam disponíveis, foi simulada a variação de vazão afluyente para ser utilizada na metodologia e nos modelos com variação de vazão. Duas vazões diferentes (Q_{v1} e Q_{v2}) foram simuladas. A Figura 45 mostra as variações da vazão ao longo do tempo em relação à vazão média da lagoa.

Figura 45. Variação das vazões afluentes adotadas para utilizar no modelo matemático proposto.

O modelo matemático proposto, os modelos teóricos uniparamétricos – equações 4.19 a 4.24 (LEVENSPIEL, 1999) e o modelo desenvolvido por Niemi (1977) – equação 4.52 foram ajustados às curvas DTR experimentais.

A Figura 46 apresenta a curva da concentração do traçador (rodamina wt) ao longo do tempo para o ensaio realizado por Moreira (2006) na lagoa facultativa. A aparência da curva de concentração indica que o comportamento hidrodinâmico da lagoa tende ao escoamento de mistura.

Figura 46. Curva da concentração de rodamina WT ao longo do tempo de experimento.

O modelo matemático proposto foi simulado com a hipótese de vazão e volume constantes para análise dos dados hidrodinâmicos sem considerar vazão variável.

Os resultados da função objetivo indicam que o modelo não ajustou bem para este caso. A Tabela 23 apresenta os resultados da função objetivo para a simulação com vazão e volume constantes e os valores dos parâmetros D/u.L obtidos.

Tabela 23. Valores da função objetivo para a simulação do modelo matemático com vazão e volume constante

D/u.L	F.O.
0,286	31,19
0,209	31,09
0,238	31,14

A curva DTR experimental normalizada de acordo com Levenspiel (1999) e os modelos ajustados encontram-se na Figura 47.

(a)

(b)

Figura 47. Curva DTR experimental e os modelos ajustados: (a) N-CSTR, PD e GD-ta e (b) modelo matemático proposto ($D/u.L = 0,286$; $0,204$ e $0,238$)

A análise visual do ajuste do modelo matemático proposto mostra problemas nos ajustes dos dados. Provavelmente, uma das causas da falta de ajuste está relacionada à tendência do comportamento hidrodinâmico de mistura observada na Figura 46. Os modelos de PD e GD-ta também demonstram falta de ajuste. O modelo N-CSTR acompanha a tendência da curva experimental.

As correlações entre os resultados das simulações dos modelos e a curva experimental encontram-se na Tabela 24.

Tabela 24. Valores das correlações entre os modelos e a curva experimental

Modelo	R – coeficiente de correlação	R ² – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	0,800	0,64	0,223
$E\Theta_{PD}$	0,588	0,35	0,301
$E\Theta_{GD-Ta}$	0,214	0,04	0,247
$E\Theta_{teoD=0,286}$	0,736	0,54	0,252
$E\Theta_{teoD=0,204}$	0,733	0,54	0,253
$E\Theta_{teoD=0,238}$	0,736	0,54	0,252

As melhores correlações foram obtidas com o uso dos modelos – N-CSTR e modelo matemático proposto com vazão e volume constantes ($D/u.L = 0,204$; $0,286$ e $0,238$).

Porém, a análise do gráfico de resíduos mostrou que o modelo matemático proposto não obteve bons ajustes aos dados experimentais. Os gráficos dos resíduos dos modelos analisados podem ser vistos na Figura 48. A análise da distribuição dos resíduos para os modelos que consideram o escoamento pistonado (PD, GD e o modelo matemático proposto) confirma a falta de ajuste desses modelos aos dados experimentais no trecho $0 < \Theta < 2$.

O modelo N-CSTR apresenta pequena concentração de resíduo no trecho $0 < \Theta < 0,5$.

Para as simulações do modelo matemático proposto com variação afluyente da vazão – $Qv2$ – foram testadas duas hipóteses

- Volume constante e vazão variável;
- Vazão e volume variáveis.

Na equação utilizada para simular o volume variável (equação 4.7) foi utilizado o tempo de detenção hidráulica teórico. Porém, como a diferença de valores entre os TDH experimental e TDH teórico foi elevada, foram avaliadas as simulações da segunda hipótese – vazão e volume variáveis – calculando o volume variável com os dois valores de TDH.

O modelo matemático não representou adequadamente o comportamento hidrodinâmico da lagoa estudada para as duas hipóteses testadas, conforme pode ser visto pelos valores encontrados na função objetivo. A Tabela 25 apresenta os valores dos parâmetros determinados pelo modelo e da função objetivo.

Figura 48. Gráfico de resíduos dos modelos: (a) N-CSTR, (b) PD, (c) GD, (d) modelo matemático com $D/u.L = 0,286$, (e) $D/u.L = 0,204$ e (f) $D/u.L = 0,238$.

Tabela 25. Valores da função objetivo para o modelo matemático proposto usando a variação afluyente de vazão Q_{v2}

	D/u.L	F.O.
Volume constante e vazão variando	0,082	30,67
	0,340	28,20
Volume e vazão variando θ_h teórico	0,136	28,31
	0,204	28,24
	0,680	28,43
Volume e vazão variando θ_h experimental	0,286	27,00
	0,272	27,27
	0,258	27,27

Neste caso, em que se considerou a variação afluyente da vazão – $Qv2$ – a curva DTR experimental foi obtida pela metodologia de Niemi (1977). Os ajustes dos modelos teóricos à curva experimental estão apresentados na Figura 49 e na Figura 50.

(a)

(b)

Figura 49. Curva DTR experimental para o tratamento de dados com variação de vazão – $Qv2$ – e os modelos ajustados; (a) modelo matemático proposto com volume e vazão variável – θ_{hexp} ($D/u.L=0,286$; $0,272$ e $0,258$) e (b) P_N

(a)

(b)

(c)

Figura 50. Curva DTR experimental para o tratamento de dados com variação de vazão – $Qv2$ – e os modelos ajustados; (a) N-CSTR, PD e GD-ta; (b) modelo matemático proposto com vazão variável e volume constante ($D/u.L = 0,340$ e $0,082$), (c) modelo matemático proposto com volume e vazão variável – $\theta_{h\text{teo}}$ ($D/u.L=0,680$; $0,136$ e $0,204$)

Os modelos de mistura perfeita, proposto por Levenspiel (1999) – N-CSTR – e o proposto por Niemi (1977) – P_N – demonstram seguir a tendência da curva DTR experimental.

As correlações obtidas, coeficiente de determinação e o erro padrão confirmam essa tendência. Os melhores valores de ajuste foram determinados para os modelos N-CSTR e P_N . A Tabela 26 apresenta esses valores.

Tabela 26. Dados dos coeficientes do ajuste dos modelos teóricos para o tratamento de dados utilizando a vazão variável Q_{v2} .

Modelo	R – coeficiente de correlação	R ² – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	0,822	0,68	0,201
$E\Theta_{PD}$	0,586	0,34	0,287
$E\Theta_{GD-Ta}$	0,208	0,04	0,347
$E\Theta_{teoD/u.L=0,340}$	0,597	0,36	0,284
$E\Theta_{teoD/u.L=0,082}$	0,589	0,35	0,286
$E\Theta_{PN}$	0,724	0,52	0,244
$E\Theta_{teoD/u.L=0,136}$	0,603	0,36	0,283
$E\Theta_{teoD/u.L=0,204}$	0,616	0,38	0,279
$E\Theta_{teoD/u.L=0,680}$	0,528	0,28	0,301
$E\Theta_{teoD/u.L=0,286}$	0,479	0,23	0,311
$E\Theta_{teoD/u.L=0,272}$	0,468	0,22	0,313
$E\Theta_{teoD/u.L=0,258}$	0,456	0,21	0,315

A distribuição dos resíduos ao longo do tempo adimensional Θ para os modelos ajustados aos dados experimentais considerando vazão variável (Q_{v2}) está apresentada nas Figuras 51 e 52.

A distribuição dos resíduos confirma a falta de ajuste entre os modelos que consideram escoamento pistonado e os dados experimentais. Os modelos P_N e N-CSTR apresentam acúmulo de resíduos positivos no primeiro trecho do gráfico (Θ entre 0 e 1).

Para a simulação do modelo matemático proposto, utilizando a vazão afluyente variável Q_{v1} , foi testada apenas a hipótese da vazão afluyente variável e volume constante, uma vez

que na simulação com Qv2 as outras hipóteses testadas não apontaram expressivas diferenças no ajuste do modelo.

Figura 51. Distribuição dos resíduos para os modelos: (a) P_N , (b) $D/u.L = 0,340$, (c) $D/u.L = 0,082$, (d) N-CSTR, (e) PD e (f) GD-ta

A diferença entre as vazões variáveis Qv1 e Qv2 é a amplitude da variação. Apesar da vazão variável Qv1 possuir menor amplitude de variação comparada à vazão Qv2, o modelo matemático proposto não apresentou melhoras significativas em relação ao ajuste com os dados experimentais. Porém, foi observado que a amplitude menor determinou valores de $D/u.L$ menores em relação à vazão variável com maior amplitude. Os valores dos parâmetros $D/u.L$ obtidos encontram-se na Tabela 27.

Figura 52. Distribuição dos resíduos para os modelos: (a) $D/u.L=0,689$; (b) $D/u.L=0,204$, (c) $D/u.L=0,136$, (d) $D/u.L=0,272$, (e) $D/u.L=0,286$ e (f) $D/u.L=0,259$.

Tabela 27. Valores dos parâmetros obtidos do modelo e da função objetivo.

D/u.L	F.O.
0,068	32,39
0,061	32,93
0,054	33,72

A Figura 53 apresenta os modelos matemáticos ajustados à curva DTR experimental, normalizada de acordo com Niemi (1977) considerando a variação de vazão afluente Q_{v1} .

(a)

(b)

(c)

Figura 53. Modelos teóricos ajustados à curva DTR adimensional normalizada de acordo com Niemi (1977); (a) N-CSTR, PD e GD-ta, (b) P_N e (c) modelo matemático proposto com volume constante e vazão variável: (a) $D/u.L = 0,068$; $0,061$ e $0,054$.

Assim como observado para maior amplitude de vazão Q_{v2} , as curvas do modelo matemático proposto não acompanham a tendência da curva DTR experimental, considerando a variação de vazão afluyente Q_{v1} .

Os coeficientes de ajuste dos modelos matemáticos teóricos ajustados à curva DTR experimental encontram-se na Tabela 28.

Tabela 28. Correlação, coeficiente de determinação e erro padrão dos modelos aplicados a curva DTR experimental para vazão afluyente Q_{v1} .

Modelo	R – coeficiente de correlação	R ² – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	0,805	0,65	0,219
$E\Theta_{PD}$	0,587	0,34	0,298
$E\Theta_{GD-Ta}$	0,214	0,04	0,360
$E\Theta_{PN}$	0,743	0,55	0,247
$E\Theta_{\tau_{eoD}=0,068}$	0,680	0,46	0,270
$E\Theta_{\tau_{eoD}=0,061}$	0,662	0,44	0,276
$E\Theta_{\tau_{eoD}=0,054}$	0,657	0,43	0,278

As análises da distribuição dos resíduos dos modelos comprovam a falta de ajuste do modelo matemático proposto. Os demais modelos também não apresentaram aleatória distribuição de resíduos. Os modelos que apresentam distribuição razoável de resíduo são os modelos N-CSTR e P_N ; eles possuem acúmulos de resíduos positivos em um trecho do gráfico e, após esse trecho, apresentam resíduos próximos de zero. A Figura 54 apresenta os gráficos de resíduos dos modelos matemáticos teóricos utilizados no ajuste da curva DTR experimental para a vazão afluyente variável Q_{v1} .

Figura 54. Distribuição de resíduos dos modelos matemáticos teóricos ajustados à curva DTR experimental para a vazão simulada Q_{v1} .

Os resultados obtidos com a aplicação dos modelos aos dados experimentais da lagoa facultativa secundária vêm a corroborar os trabalhos desenvolvidos para estudos do comportamento hidrodinâmico de lagoas de estabilização. A lagoa facultativa secundária estudada apresentou escoamento próximo ao de mistura perfeita.

Os resultados dos ajustes dos modelos de pequena e grande dispersão (Levenspiel, 1999) e do modelo matemático proposto para todas as condições, confirmam essa tendência do escoamento de mistura. Porém, a análise de resíduos mostrou que embora o modelo N-CSTR apresente boas correlações com os dados experimentais, ele apresenta certas falhas.

Ademais, o ajuste do modelo P_N aos dados experimentais – com simulação hipotética da vazão variável – demonstra que a variação de vazão não poder ser negligenciada.

O estudo da hidrodinâmica da lagoa com vazões variáveis hipotéticas demonstrou que com menores amplitudes de variação há tendência do escoamento para o pistonado. Essa tendência é demonstrada pelos baixos valores de $D/u.L$ obtidos no modelo.

Os valores encontrados para o parâmetro $D/u.L$ nas simulações do modelo matemático proposto com as hipóteses: vazão e volume constantes e vazão e volume variáveis ($Qv2$) ficaram próximos aos determinados experimentalmente por Angunwaba et al. (1992) – Tabela 3 e Tabela 4. Dorego e Ledugo (1996), em estudo hidrodinâmico por eles realizados, também obtiveram valores próximos a esse.

Os valores dos parâmetros $D/u.L$ determinados para a vazão $Qv1$ ficaram próximos aos determinados por Kilani e Ogunrombi (1984) quando as lagoas estudadas possuíam maior número de chicanas; vale dizer em ambos os casos estudados as lagoas tenderam ao escoamento pistonado.

5.5 INFLUÊNCIA DAS TÉCNICAS DE ENSAIO ESTÍMULO-RESPOSTA (PULSO E DEGRAU) NA DETERMINAÇÃO DAS CURVAS DE DISTRIBUIÇÃO DE RESIDÊNCIA

Nesta etapa do trabalho, foi avaliada a influência das técnicas de ensaio estímulo-resposta – nas formas pulso e degrau – em relação à determinação do comportamento hidrodinâmico dos reatores.

As duas técnicas foram utilizadas em ensaios de reatores com três configurações de escoamento – mistura perfeita, pistonado e pistonado com leito fixo – conforme descrito na metodologia.

As curvas de variação das concentrações dos traçadores – ao longo do tempo para o ensaio estímulo-resposta pulso, nas amostras do efluente do reator com escoamento de

mistura perfeita (CSTR) – estão apresentadas na Figura 55. A Figura 56 apresenta as curvas do ensaio estímulo-resposta degrau para o reator CSTR.

Figura 55. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator CSTR para os ensaios de estímulo-resposta pulso – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

A aparência das curvas condiz com o escoamento de mistura perfeita do reator CSTR. O lento decaimento observado nas concentrações de verde de bromocresol e azul de bromofenol ao longo do tempo, provavelmente teria sido ocasionado pelo fenômeno de “cauda”.

De acordo com Levenspiel (1999), o efeito da cauda pode ocorrer devido aos fenômenos de difusão em zonas mortas do reator, adsorção do traçador na biomassa do reator ou curto circuito hidráulico.

Figura 56. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator CSTR para os ensaios de estímulo-resposta degrau – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

A relação entre os ensaios de estímulo resposta, pulso e degrau, apresentou resultados compatíveis. A Figura 57 apresenta as curvas DTR adimensionais obtidas para as duas formas de ensaios e os respectivos traçadores utilizados.

O coeficiente de correlação entre as curvas DTR adimensionais obtidas das técnicas estímulo resposta – degrau e pulso – encontram-se na Tabela 29. Os dois ensaios apresentaram resultados compatíveis entre si. O traçador verde de bromocresol apresentou pior coeficiente de correlação entre as duas técnicas comparadas aos demais traçadores.

Essa diferença também pode ser notada nos valores dos parâmetros determinados nos ensaios hidrodinâmicos. A Tabela 30 apresenta os valores dos parâmetros obtidos nos ensaios estímulo-resposta – pulso e degrau – para os traçadores utilizados nos experimentos hidrodinâmicos realizados no reator CSTR.

Figura 57. Curvas DTR adimensionais para os ensaios de estímulo-resposta pulso e degrau realizados no reator CSTR – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

Tabela 29. Correlação entre as curvas DTR adimensionais obtidas dos ensaios hidrodinâmicos realizado no reator CSTR

Traçador	R – coeficiente de correlação	Erro padrão
Verde de bromocresol	0,840	0,138
Eosina Y	0,940	0,074
Azul de bromofenol	0,923	0,089

Os ensaios estímulo resposta – pulso e degrau – com utilização do traçador eosina Y obtiveram valores de parâmetros próximos. O valor obtido do TDH no ensaio estímulo-resposta pulso – traçador bromocresol verde – resultou quase o dobro do valor determinado para o ensaio estímulo resposta degrau. O TDH obtido no ensaio pulso para o traçador azul de bromofenol também foi superior ao ensaio degrau.

Tabela 30. Resultados dos parâmetros obtidos com o ensaio no reator CSTR

	$\bar{\theta}_h$ (min)	$\bar{t}$ (min)	N	D/u.L – PD
Pulso E	7,5	7,7	1,5	0,33
Degrau E	6	7,7	1	0,47
Pulso VB	9,5	7,7	1,5	0,34
Degrau VB	5	7,7	1	0,39
Pulso AB	9	7,7	1,5	0,31
Degrau AB	6	7,7	2	0,31

E – eosina Y; VB – verde de bromocresol e AB – azul de bromofenol.

$\bar{\theta}_h$ – tempo de detenção hidráulica média determinada no ensaio hidrodinâmico [T]

$\bar{t}$ – tempo teórico de detenção hidráulica [T]

N – número de tanque de mistura perfeita em série

No reator horizontal (RH) a aparência das curvas de concentração dos traçadores, ao longo do tempo, indica que o comportamento hidrodinâmico do reator aproxima-se do escoamento pistonado. A Figura 58 apresenta as curvas de variação das concentrações dos traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator RH (ensaio estímulo-resposta pulso). As curvas de variação de concentração ao longo do tempo para o ensaio estímulo-resposta degrau no reator RH estão apresentadas na Figura 59.

(a)

(b)

(c)

Figura 58. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator RH para os ensaios de estímulo-resposta pulso – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

Tal como observado nos ensaios estímulo-resposta pulso do reator CSTR, observou-se o efeito “cauda” nas curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo do efluente do reator RH.

Provavelmente, esse efeito foi causado pela difusão dos traçadores em zonas mortas e/ou curtos circuitos existentes no reator.

Figura 59. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator RH para os ensaios de estímulo-resposta degrau – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

A Figura 60 apresenta as curvas DTR adimensionais obtidas dos ensaios estímulo resposta – pulso e degrau – do reator RH para os traçadores utilizados.

As curvas DTR adimensionais obtidas dos ensaios pulso e degrau no reator RH obtiveram bons coeficientes de correlações entre elas para os traçadores utilizados com exceção do traçador bromocresol verde. A

Tabela 31 apresenta os coeficientes de correlações para as curvas DTR adimensionais obtidas dos ensaios estímulo resposta pulso e degrau para cada traçador.

Na determinação dos parâmetros dos ensaios hidrodinâmicos houve diferença entre os dois tipos de ensaios para os traçadores bromocresol verde e azul de bromofenol. A Tabela 32 apresenta os parâmetros determinados para o reator RH.

Figura 60. Curvas DTR adimensionais para os ensaios de estímulo-resposta pulso e degrau realizados no reator RH – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

Tabela 31. Correlação entre as curvas DTR adimensionais obtidas dos ensaios hidrodinâmicos realizado no reator RH

Traçador	R – coeficiente de correlação	Erro padrão
Verde de bromocresol	0,432	0,511
Eosina Y	0,975	0,123
Azul de bromofenol	0,892	0,273

A Figura 61 apresenta as curvas de concentração dos traçadores ao longo do tempo dos ensaios hidrodinâmicos tipo pulso realizados no reator horizontal com leito fixo (RHLF). O aspecto das curvas de concentração indica que o RHLF possui escoamento pistonado. A Figura 62 apresenta as curvas de concentração de traçadores para os ensaios estímulo-resposta degrau realizados no reator RHLF.

Tabela 32. Resultados dos parâmetros obtidos dos ensaios hidrodinâmicos no reator RH

	$\bar{\theta}_h$ (min)	$\bar{t}$ (min)	N	D/u.L - PD
Pulso E	15	15	7	0,07
Degrau E	14	15	14	0,05
Pulso VB	15	15	6	0,09
Degrau VB	11	15	6	0,08
Pulso AB	18	15	7	0,07
Degrau AB	14	15	12	0,04

E – eosina Y; VB – verde de bromocresol e AB – azul de bromofenol.

$\bar{\theta}_h$ – tempo de detenção hidráulica média determinada no ensaio hidrodinâmico [T]

$\bar{t}$ – tempo teórico de detenção hidráulica [T]

N- número de tanque de mistura perfeita em série

Assim como observado nos ensaios hidrodinâmicos dos reatores anteriores (CSTR e RH), as curvas de concentrações para todos os traçadores utilizados nos ensaios apresentaram o fenômeno de cauda.

Neste caso, possivelmente, esse fenômeno teria sido causado pelo o fato de o traçador ficar retido nos interstícios do material utilizado no leito do reator. Poderia, também, ter sido causado por difusão em zonas mortas e curto-circuito existentes no escoamento do RHLF.

As curvas DTR adimensionais obtidas para os ensaios estímulo resposta – pulso e degraú – estão apresentadas na Figura 63. Os traçadores utilizados nos ensaios apresentaram bons coeficientes de correlações para os dois tipos de ensaios estímulo-resposta testados.

Figura 61. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator RHLF para os ensaios de estímulo-resposta pulso – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

Figura 62. Curvas de variação da concentração de traçadores ao longo do tempo nas amostras do efluente do reator RHLF para os ensaios de estímulo-resposta degrau – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

Os coeficientes de correlações entre as curvas DTR adimensionais obtidas para os ensaios hidrodinâmicos do reator RHLF estão apresentadas na Tabela 33. Todos os traçadores utilizados apresentaram boas correlações. Os valores dos parâmetros obtidos dos ensaios hidrodinâmicos demonstraram pequenas diferenças de valores no tempo de detenção teórico para os ensaios estímulo-resposta pulso em relação aos obtidos dos ensaios estímulo-resposta degrau.

A Tabela 34 apresenta os valores dos parâmetros obtidos para os ensaios hidrodinâmicos no reator RHLF.

Figura 63. Curvas DTR adimensionais para os ensaios de estímulo-resposta pulso e degrau realizados no reator RHLF para os ensaios de estímulo-resposta degrau – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

Tabela 33. Correlação entre as curvas DTR adimensionais obtidas dos ensaios hidrodinâmicos realizado no reator RHLF

Traçador	R – coeficiente de correlação	Erro padrão
Verde de bromocresol	0,917	0,174
Eosina Y	0,904	0,159
Azul de bromofenol	0,967	0,106

Na determinação dos parâmetros do reator RHLF foram observadas maiores diferenças entre os ensaios degrau e pulso na obtenção dos parâmetros N e D/u.L quando utilizados os traçadores bromocresol verde e azul de bromofenol.

Tabela 34. Resultados dos parâmetros obtidos dos ensaios hidrodinâmicos no reator RHLF

	$\bar{\theta}_h$ (min)	$\bar{t}$ (min)	N	D/u.L - PD
Pulso E	15	11	3,5	0,14
Degrau E	11	11	4	0,11
Pulso VB	15	11	4	0,13
Degrau VB	12	11	7,5	0,06
Pulso AB	16	11	4	0,12
Degrau AB	13	11	8,5	0,06

E – eosina Y; VB – verde de bromocresol e AB – azul de bromofenol.

$\bar{\theta}_h$ – tempo de detenção hidráulica médio determinado no ensaio hidrodinâmico [T]

$\bar{t}$ – tempo de detenção hidráulica teórico [T]

N- número de tanque de mistura perfeita em série

Todos os traçadores colorimétricos utilizados apresentaram o fenômeno “cauda” para os três tipos de reatores estudados. Jiménez et al. (1988) observaram o fenômeno de cauda devido à difusão da eosina Y, bromocresol verde e azul de bromofenol, entre outros traçadores. Esse efeito também foi observado por De Nardi et al. (1999). Os autores determinaram o comportamento hidrodinâmico do reator anaeróbio horizontal de leito fixo (RAHLF) com lodo imobilizado em meio suporte de cerâmica. Os ensaios de estímulo-resposta tipo pulso foram realizados em meio abiótico e o efeito de cauda observado deve ter ocorrido devido ao fenômeno de difusão do traçador no meio suporte utilizado.

Os ensaios hidrodinâmicos realizados com os traçadores colorimétricos representaram satisfatoriamente a equação 4.13 ($F = \int_0^t E \cdot dt$), conforme esperado. Com exceção apenas para os ensaios hidrodinâmicos – pulso e degrau – com traçador bromocresol verde realizado no reator horizontal, o qual não apresentou coeficiente de correlação adequado entre os dos ensaios (

Tabela 31). Nos demais reatores o traçador bromocresol verde apresentou correlações adequadas.

5.6 INFLUÊNCIA DAS TÉCNICAS DE ENSAIO ESTÍMULO-RESPOSTA (PULSO E DEGRAU) NOS AJUSTES DOS MODELOS MATEMÁTICOS UNIPARAMÉTRICOS

Nesta fase da pesquisa, foi analisada a influência das técnicas de ensaio estímulo resposta – nas formas pulso e degrau – no ajuste dos modelos matemático uniparamétricos (equações 4.19 a 4.24).

A Figura 64 mostra os resultados dos modelos matemáticos uniparamétricos utilizados no reator CSTR e a curva DTR experimental para o ensaio estímulo resposta degrau e a Figura 65 apresenta os resultados dos modelos matemáticos uniparamétricos para o ensaio estímulo resposta pulso.

(a)

(b)

(c)

Figura 64. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio degrau) para o reator CSTR com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

(a)

(b)

(c)

Figura 65. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio pulso) para o reator CSTR com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

O modelo N-CSTR (equação 4.24) apresentou o melhor ajuste para o reator CSTR para as duas formas de ensaio realizadas – pulso e degrau – com os três traçadores utilizados. Esse resultado confirma a tendência do escoamento – reator CSTR – à mistura perfeita.

A Tabela 35 apresenta as correlações e coeficientes obtidos com o ajuste dos modelos matemáticos para os ensaios hidrodinâmicos realizados com injeção pulso e degrau e os três traçadores empregados.

Tabela 35. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos para o reator CSTR

Modelo	Traçador	Ensaio	R – coeficiente de correlação	R2 – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	E	Pulso	0,978	0,956	0,047
$E\Theta_{PD}$	E	Pulso	0,830	0,690	0,097
$E\Theta_{GD-Ta}$	E	Pulso	0,617	0,381	0,168
$E\Theta_{N-CSTR}$	E	Degrau	0,939	0,880	0,071
$E\Theta_{PD}$	E	Degrau	0,788	0,621	0,097
$E\Theta_{GD-Ta}$	E	Degrau	0,747	0,558	0,130
$E\Theta_{N-CSTR}$	VB	Pulso	0,948	0,898	0,061
$E\Theta_{PD}$	VB	Pulso	0,708	0,501	0,128
$E\Theta_{GD-Ta}$	VB	Pulso	0,374	0,140	0,214
$E\Theta_{N-CSTR}$	VB	Degrau	0,977	0,954	0,048
$E\Theta_{PD}$	VB	Degrau	0,765	0,585	0,107
$E\Theta_{GD-Ta}$	VB	Degrau	0,711	0,506	0,142
$E\Theta_{N-CSTR}$	AB	Pulso	0,974	0,949	0,049
$E\Theta_{PD}$	AB	Pulso	0,815	0,665	0,098
$E\Theta_{GD-Ta}$	AB	Pulso	0,493	0,243	0,203
$E\Theta_{N-CSTR}$	AB	Degrau	0,959	0,920	0,055
$E\Theta_{PD}$	AB	Degrau	0,756	0,572	0,124
$E\Theta_{GD-Ta}$	AB	Degrau	0,694	0,481	0,142

Os coeficientes de correlações obtidos para os modelos matemáticos de pequena dispersão e de grande dispersão tanque aberto para todos os ensaios utilizados foram similares. Com exceção para o ajuste do modelo de grande dispersão tanque aberto nos ensaios estímulo-resposta pulso com os traçadores azul de bromofenol e verde de bromocresol que obtiveram coeficientes de correlações inferiores aos demais ensaios.

O ajuste dos modelos teóricos para o reator RH é apresentado nas Figuras 66 e 67. As correlações obtidas para o modelo N-CSTR no ensaio degrau e pulso com traçador eosina Y foram similares. Os demais traçadores apresentaram diferenças entre os ensaios pulso e degrau. Contudo, as correlações dos modelos ajustados ao reator RH seguiram a mesma

tendência em todos os ensaios, com melhores ajustes para o modelo N-CSTR e depois para o modelo PD e GD-ta, respectivamente. A Tabela 36 apresenta as correlações obtidas nos ajustes dos modelos aos dados experimentais dos ensaios hidrodinâmicos realizados no reator RH.

Tabela 36. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos para o reator RH

Modelo	Traçador	Ensaio	R – coeficiente de correlação	R ² – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	E	Pulso	0,953	0,908	0,267
$E\Theta_{PD}$	E	Pulso	0,951	0,904	0,432
$E\Theta_{GD-Ta}$	E	Pulso	0,894	0,800	0,186
$E\Theta_{N-CSTR}$	E	Degrau	0,951	0,904	0,432
$E\Theta_{PD}$	E	Degrau	0,902	0,814	0,205
$E\Theta_{GD-Ta}$	E	Degrau	0,906	0,821	0,209
$E\Theta_{N-CSTR}$	VB	Pulso	0,955	0,911	0,234
$E\Theta_{PD}$	VB	Pulso	0,869	0,755	0,173
$E\Theta_{GD-Ta}$	VB	Pulso	0,879	0,773	0,185
$E\Theta_{N-CSTR}$	VB	Degrau	0,763	0,582	0,243
$E\Theta_{PD}$	VB	Degrau	0,675	0,456	0,129
$E\Theta_{GD-Ta}$	VB	Degrau	0,742	0,551	0,149
$E\Theta_{N-CSTR}$	AB	Pulso	0,907	0,823	0,603
$E\Theta_{PD}$	AB	Pulso	0,804	0,646	0,228
$E\Theta_{GD-Ta}$	AB	Pulso	0,834	0,695	0,235
$E\Theta_{N-CSTR}$	AB	Degrau	0,763	0,582	0,243
$E\Theta_{PD}$	AB	Degrau	0,675	0,456	0,129
$E\Theta_{GD-Ta}$	AB	Degrau	0,787	0,620	0,313

(a)

(b)

(c)

Figura 66. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio pulso) para o reator RH com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

(a)

(b)

(c)

Figura 67. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio degrau) para o reator RH com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

A Figura 68 e a Figura 69 apresentam os modelos ajustados ao reator RHLF. Analogamente aos demais reatores, os melhores ajustes obtidos foram para o modelo N-CSTR. Porém, neste reator foram observadas correlações melhores em relação aos modelos PD e GD-ta quando comparados aos ajustes desses modelos aos demais reatores (CSTR e RH).

Provavelmente, os resultados dos ensaios hidrodinâmicos dos reatores não apresentaram bons ajustes com os modelos PD e GD-ta pelo fato de os ensaios não respeitarem a condição de contorno vaso aberto para o modelo Gd-ta e os parâmetros obtidos serem $D/u.L > 0,01$ o que inviabiliza o uso do modelo de pequena dispersão.

O reator RHLF apresentou menores valores de $D/u.L$, valores próximos a 0,01; o que pode ter propiciado melhores ajuste dos resultados dos ensaios desse reator ao modelo de pequena dispersão.

As correlações obtidas com o ajuste dos modelos matemáticos teóricos aos dados experimentais do reator RHLF estão apresentadas na Tabela 37.

Tabela 37. Correlações e coeficientes de determinação obtidos com o ajuste dos resultados experimentais pelos modelos teóricos para o reator RHLF

Modelo	Traçador	Ensaio	R – coeficiente de correlação	R2 – coeficiente de determinação	Erro padrão
$E\Theta_{N-CSTR}$	E	Pulso	0,972	0,946	0,107
$E\Theta_{PD}$	E	Pulso	0,833	0,694	0,141
$E\Theta_{GD-Ta}$	E	Pulso	0,774	0,599	0,196
$E\Theta_{N-CSTR}$	E	Degrau	0,730	0,533	3,316
$E\Theta_{PD}$	E	Degrau	0,843	0,710	0,137
$E\Theta_{GD-Ta}$	E	Degrau	0,812	0,659	0,127
$E\Theta_{N-CSTR}$	VB	Pulso	0,975	0,951	0,131
$E\Theta_{PD}$	VB	Pulso	0,838	0,702	0,147
$E\Theta_{GD-Ta}$	VB	Pulso	0,771	0,595	0,204
$E\Theta_{N-CSTR}$	VB	Degrau	0,981	0,963	0,261
$E\Theta_{PD}$	VB	Degrau	0,937	0,878	0,133
$E\Theta_{GD-Ta}$	VB	Degrau	0,939	0,882	0,141
$E\Theta_{N-CSTR}$	AB	Pulso	0,970	0,941	0,110
$E\Theta_{PD}$	AB	Pulso	0,839	0,704	0,159
$E\Theta_{GD-Ta}$	AB	Pulso	0,835	0,698	0,161
$E\Theta_{N-CSTR}$	AB	Degrau	0,975	0,950	0,226
$E\Theta_{PD}$	AB	Degrau	0,943	0,890	0,133
$E\Theta_{GD-Ta}$	AB	Degrau	0,927	0,860	0,160

(a)

(b)

(c)

Figura 68. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio pulso) para o reator RHLF com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol.

(a)

(b)

(c)

Figura 69. Modelos ajustados aos dados experimentais (ensaio degrau) para o reator RHLF com o uso dos traçadores – (a) verde de bromocresol; (b) eosina Y e (c) azul de bromofenol

Os resultados encontrados nos ajustes dos modelos para os ensaios hidrodinâmicos nos reatores CSTR, RH e RHLF demonstraram que a escolha da técnica estímulo-resposta não interferiu nos ajustes.

Alguns ensaios não mostraram boa reprodutibilidade; porém, a análise dos resultados mostra que possivelmente essa falta de adequação foi ocasionada pela escolha do traçador, uma vez que, em grande parte dos ensaios, os ajustes dos modelos não demonstraram diferenças significativas em relação aos ajustes experimentais obtidos dos ensaios estímulo-resposta pulso ou degrau.

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Os resultados obtidos neste trabalho permitem concluir que a variação de vazão afluyente em sistemas de tratamento de águas residuárias afeta o comportamento hidrodinâmico dos referidos sistemas, confirmando a hipótese testada que a variação de vazão afluyente em sistemas de tratamento de águas residuárias afeta significativamente a caracterização hidrodinâmica dos referidos sistemas quando usadas as formulações usuais desenvolvidas para regime permanente.

Em relação às pesquisas de determinação de tempo de residência experimental, as metodologias de Levenspiel (1999) e Niemi (1977) demonstraram o efeito da variação da vazão na quantificação dos parâmetros hidrodinâmicos obtidos das curvas de distribuição de tempo de residência. A análise estatística indicou valores bem próximos, para os parâmetros determinados pelas duas metodologias. Porém, conceitualmente, as metodologias são diferentes. Desta forma, a determinação da distribuição tempo de residência de reatores operados com vazão afluyente variável é mais adequada na forma proposta por Niemi (1977).

Com base nos resultados obtidos nas simulações dos modelos utilizados nesta pesquisa para os reatores em escala de laboratório foi possível concluir que:

- O modelo matemático utilizado nesta pesquisa não pôde ser verificado para esses reatores. Os valores do parâmetro $D/u.L$ encontrados demonstram que o uso deste modelo é questionável para esses reatores.
- Apesar do uso questionável, os altos valores encontrados para $D/u.L$ sinalizam que o modelo matemático desenvolvido neste trabalho atende a uma de suas hipóteses básicas – escoamento pistonado – pois esses valores indicam que o escoamento dos reatores em escala de bancada tendem para o de mistura

perfeita – conforme esses reatores foram projetados e não como escoamento pistonado.

- Na análise global das respostas dos modelos aplicados aos reatores em escala piloto foi percebido que os modelos de escoamento de mistura perfeita com vazão variável proposto por Niemi (1977) demonstraram ser mais adequados para análise dos dados desses reatores. Essa análise indica que a variação de vazão afluyente não pode ser desprezada

A partir das simulações do modelo matemático utilizado nesta pesquisa para o reator em escala piloto – reator UASB submetido à variação de vazão foi possível concluir que:

- A análise dos resultados obtidos para o ajuste dos dados do modelo matemático para o reator UASB, com e sem variação de vazão afluyente cíclica senoidal, indicou que o escoamento desse reator aproxima-se do escoamento pistonado.
- Os resultados das simulações do modelo matemático proposto, com condições de volume e vazão variáveis, apresentaram melhores resultados ao ajuste dos dados experimentais do reator UASB com variação cíclica de vazão afluyente. Porém, não foi possível verificar o referido modelo matemático para essa condição, por não terem sido realizadas medidas do volume variando com o tempo. Esse resultado reafirma a necessidade de considerar o regime não permanente no tratamento de dados de reatores submetidos a essa condição.
- O modelo matemático com condições de volume constante e vazão variável foi verificado com os dados experimentais realizados por Carvalho (2006). Os coeficientes de correlação – obtidos da relação entre os resultados das simulações do modelo matemático proposto e resultados experimentais – e a distribuição dos resíduos deste modelo nestas condições mostraram que as simulações obtidas representaram adequadamente o reator UASB para as condições estabelecidas. Foram obtidos coeficientes de correlação de cerca de 0,880 para o modelo matemático proposto em relação a curva experimental dos ensaios de 40% de variação cíclica da vazão média afluyente e de 0,730 para os ensaios de 60% de variação cíclica da vazão média afluyente.

- Os ensaios com 60% de variação cíclica da vazão média afluyente foram os que apresentaram ajustes menos precisos nos modelos utilizados comparado aos demais ensaios no reator UASB. Esse resultado pode ter sido ocasionado pelo arraste de sólidos que ocorreu quando foi aumentada a variação cíclica da vazão afluyente do reator. Esse comportamento foi relatado por Carvalho (2006). Leitão (2004) também observou arraste de sólidos quando o reator estudado por ele foi submetido a choques hidráulicos e orgânicos.
- O modelo matemático proposto com condição de volume constante e vazão variável pode ser utilizado para pesquisas de otimização do desempenho de reatores UASB, conforme os resultados obtidos.
- A análise das correlações obtidas entre os resultados dos ensaios realizados e resultados obtidos das simulações com os modelos matemáticos teóricos utilizados neste trabalho mais a análise da distribuição dos resíduos gerados pelos modelos indicam que o modelo matemático proposto pode ser utilizado para representar o reator UASB com variação cíclica de vazão afluyente, confirmando a conclusão acima.

O uso do modelo matemático desenvolvido nesta pesquisa para simular a lagoa de estabilização estudada nesta pesquisa permitiu concluir:

- O modelo matemático utilizado não é adequado para representar os dados da lagoa estudada.
- A análise das simulações dos modelos matemáticos teóricos aplicados à lagoa de estabilização indicou que nenhum dos modelos representou bem o sistema. Esses resultados indicam a necessidade de aprimoramento de modelos matemáticos para uso em lagoas de tratamento de águas residuárias.
- O modelo matemático desenvolvido determinou valores para o parâmetro $D/u.L$ próximos aos encontrados na literatura para lagoas. Esse resultado mostra haver possibilidade de o modelo ser aprimorado. O refinamento do modelo poderá ser de grande auxílio em estudos hidrodinâmicos de lagoas.

A avaliação do estudo hidrodinâmico da lagoa levada a efeito nesta pesquisa demonstrou haver necessidade de maiores aprimoramentos dos modelos matemáticos para lagoas de

estabilização. Os resultados obtidos com o ajuste do modelo matemático proposto e o modelo de mistura perfeita proposto por Niemi (1977) indicam que a variação de vazão afluyente não deve ser negligenciada na aplicação dos modelos matemáticos. Ademais, é necessário considerar nos modelos simulando lagoas a estratificação térmica que ocorre no referido sistema. A lagoa analisada por Moreira (2006) teve forte estratificação térmica, a qual não foi considerada no modelo utilizado. Provavelmente, esse fator auxiliou nos resultados baixos de coeficiente de determinação (em torno de 0,5) obtidos para as simulações do modelo empregado.

A análise, dos estudos hidrodinâmicos dos reatores utilizados nesta pesquisa, demonstra que a variação de vazão afluyente pode influenciar na determinação dos parâmetros. Os resultados dos ajustes dos modelos aplicados nos reatores com escala de laboratório confirmaram a influência da variação da vazão afluyente; assim como os resultados encontrados nos ensaios do reator UASB e da lagoa de estabilização.

As simulações do modelo matemático desenvolvido nesta tese para os reatores em escala de laboratório, piloto e real mostraram que esse modelo pode representar, adequadamente, reatores com escoamento pistonado, em especial o reator UASB.

Os ensaios para analisar e comparar as respostas obtidas por meio do uso das técnicas estímulo-resposta – pulso e degrau – com os três traçadores testados demonstraram:

- Boas correlações entre os ensaios hidrodinâmicos – pulso e degrau, como esperado, nos traçadores utilizados.
- Melhor concordância no uso do traçador eosina Y, por meio dos ensaios hidrodinâmicos com injeção pulso e degrau, para a determinação das curvas de distribuição de tempo de residência. Foram determinados coeficientes de correlação entre os ensaios hidrodinâmicos com injeção pulso e degrau de 0,940 realizados no reator CSTR; 0,975 no reator RH e 0,904 no reator RHLF.
- O uso da técnica – pulso ou degrau – não interferiu nos ajustes dos resultados dos ensaios hidrodinâmicos dos reatores CSTR, RH e RHLF aos modelos matemáticos uniparamétricos.

- Os ensaios hidrodinâmicos – pulso e degrau – dos três traçadores testados apresentaram coeficientes de correlações similares na análise dos resultados dos modelos matemáticos uniparamétricos utilizados para as configurações de reatores testadas.

Com base nos resultados e conclusões obtidos neste trabalho, sugere-se para os próximos trabalhos:

- Realizar estudos hidrodinâmicos para lagoas de tratamento de águas residuárias com variação de vazão cíclica afluyente;
- Aprimorar o modelo de mistura perfeita proposto por Niemi (1977) para o uso em lagoas de tratamento de águas residuárias.
- Realizar estudos hidrodinâmicos para reatores com variação de vazão afluyente com medição da variação de volume com o tempo para a validação de modelos matemáticos contemplados com essa hipótese.
- Promover a construção de modelo matemático para avaliar os processos de conversão do substrato em biomassa ativa e a remoção da matéria orgânica do reator UASB considerando o modelo hidrodinâmico proposto neste trabalho.

7. REFERÊNCIAS

- AGUNWABA, J. C.; EGBUNIWE, N.; ADEMILUYI, J. O. (1992). Prediction of the dispersion number in waste stabilization ponds. *Water Research*. v. 26, n.1, p. 85 – 89.
- ARCE, P. E.; ALFANO, O. M., ARRI, L. E. (1982). Heterogeneous model of a moving-bed reactor. *Latin Am. J. Heat Mass. Transf.* v. 6, p. 99 – 112.
- BARROS NETO, B.; SCARMINO, S. I.; BRUNS, R. E. (2007). Como fazer experimentos. 3^a ed. Campinas, SP. Editora da Unicamp.
- BRIENS, C. L.; MARGARITIS, A. (1995). A new stochastic model and measurerent errors in residence time distribution of multiphase reactor. *Chemical Engineering Science*. v. 50, n.2, p. 279 – 287.
- BURKHARDT, T.; VERSTRAETE, J.; GALTIER, P.; KRAUME, M. (2002). Residence time distributions with a radiotracer in a hydrotreating pilot plant: upflow versus downflow operation. *Chemical Engineering Science*. v. 57, p. 1859 – 1866.
- CALDWELL, J. and NG, D. K. S. (2004). Mass balance of a reactor with time dependency. In: *Mathematical Modelling: case studies and projects*. Ed. Kluwer Academic Publishers. Ah Dordrecht, The Netherlands. v. 28, cap. B5, p. 137 – 146.
- CARVALHO, K. Q. (2002). Resposta dinâmica dos reatores UASB (Upflow Anaerobic Sludge Blanket) submetidos a cargas orgânicas e hidráulicas cíclicas – modelação matemática. São Carlos. 104p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

CARVALHO, K.Q. (2006). Resposta dinâmica de reator UASB (Upflow Anaerobic Sludge Blanket) em escala piloto submetido a cargas orgânicas e hidráulicas cíclica: modelos matemáticos e resultados experimentais. São Carlos. 192p. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

CLAUDEL, S.; LECLERC, J. P.; TÉTAR, L.; LINTZ, H. G.; BERNARD, A. (2000). Recent extensions of the residence time distribution concept: unsteady state conditions and hydrodynamic model developments. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*. v. 17, n. 4 – 7, p. 947 – 954.

CLAUDEL, S.; FONTEIX, C.; LECLERC, J. P.; LINTZ, H. G. (2003). Application of the possibility theory to the compartment modelling of flow pattern in industrial processes. *Chemical Engineering Science*. v. 58, p. 4005 – 4016.

DANCKWERTS, P.V. (1953). Continuous Flow Systems. *Chemical Engineering Science*. v. 2, n. 1, p.1-13.

DE NARDI, IR; ZAIAT, M; FORESTI, E. (1999). Influence of the tracer characteristics on hydrodynamic models of packed-bed bioreactors. *Bioprocess Engineering*, v. 21, n.5, p. 469-476, novembro.

DOREGO, N. C. e LEDUC, R. (1996). Characterization of hydraulic flow patterns in facultative aerated lagoons. *Water Science Technology*. v.34, n. 11, p. 99 – 106.

FAN, L. S. e NASSAR, F. (1979). A stochastic model of the unsteady state age distribution in a flow system. *Chemical engineering science*. v.34, n.9, p. 1172 – 1174.

FERNANDEZ-SEMPERE, J.; FONT-MONTESINOS, R.; ESPEJO-ALCARAZ, O. (1995). Residence time distribution for unsteady-state system. *Chemical engineering science*. v.50, n.2, p.223 – 230.

- FERNANDEZ-SEMPERE, J.; FONT-MONTESINOS, R.; ESPEJO-ALCARAZ, O. (1997). Author's reply to the comments of R. Ylinen and A. J. Niemi. *Chemical engineering science*. v.52, n.6, p.1069 – 1071.
- FOGLER, H. S. (1999). Elements of Chemical Reaction Engineering. 3rd ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall.
- FURMAN, L.; LECLERC, J. P.; STEGOWSKI, Z. (2005). Tracer investigation of a packed column under variable flow. *Chemical engineering science*. v. 60, p. 3043 – 3048.
- HARRIS, E. K. (1963). A new statistical approach to the one-dimensional diffusion model. *International Journal of Air and Water Pollution*. v. 7, p. 799.
- HARRIS, A. T.; DAVIDSON, J. F.; THORPE, R.B. (2003). The influence of the riser exit on the particle residence time distribution in a circulating fluidized bed riser. *Chemical Engineering Science*. v. 58, p. 3669 – 3680.
- HEERTJES, P. M.; KUIJVENHOVEN, L. J. (1982). Fluid flow pattern in upflow reactors for anaerobic treatment of beet sugar factory wastewater. *Biotechnology and Bioengineering*. v. 24, p. 443 – 459.
- HEERTJES, P. M.; VAN DER MEER, R. R. (1978). Dynamics of liquid flow in an up-flow reactor used for anaerobic treatment of wastewater. *Biotechnology and Bioengineering*. v. 20, p. 1577 – 1594.
- ILIUTA, I.; LARACHI, F.; GRANDJEAN, B. P. A. (1999). Residence time, mass transfer and back-mixing of the liquid in trickle flow reactors containing porous particles. *Chemical Engineering Science*. v. 54, p. 4099 – 4109.
- IODARCHE, O. e CORBU, S. (1986). Random residence time distribution. *Chemical Engineering Science*. v. 41, n. 5, p. 2099 – 2102.

- JIMÉNEZ, B; NOYOLA, A; CAPDEVILLE, B; ROUSTAN, M; FAUP, G. (1988). Dextran blue colorant as a reliable tracer in submerged filters. *Water Research*, v.23, n. 10, p. 1253-1257, outubro.
- JUANICO, M. (1991). Should waste stabilization ponds be designed for perfect-mixing or plug flow? *Water Science Technology*. v.23, p. 1495 – 1502.
- KILANI, J. S. e OGUNROMBI, J., A. (1984). Effects of baffles on the performance of model waste stabilization ponds. *Water Research*. v. 18, n. 8, p. 941 – 944.
- LEITÃO, R.C. (2004). Robustness of UASB reactors treating sewage under tropical conditions. (2004) PhD Thesis, Wageningen University, Wageningen, Netherlands.
- LECLERC, J.P.; GAUTHIER, T.; HOUZELOT, J.L.; JOVAN, T. (2000). Residence time distribution methodology as applied to industrial processes: an obsolete concept or an underemployed tool? XIII – Congresso brasileiro de Engenharia Química – COBEQ – Águas de São Pedro, S. P. – Brasil.
- LEVENSPIEL, O. e SMITH, K. W. (1957). Notes on the diffusion type model for the longitudinal mixing of fluids in flow. *Chemical Engineering Science*. v. 6, n., p. 227.
- LEVENSPIEL, O. e TURNER, C. R. (1970). The interpretation of residence – time experiments. *Chemical Engineering Science*. v. 25, n., p. 1605 – 1609.
- LEVENSPIEL, O., LAI, B. W. e CHATLYNNE, C. Y. (1970). Tracers curves and residence time distribution. *Chemical Engineering Science*. v. 25, n., p. 1611 – 1613.
- LEVENSPIEL, O. (1999) *Chemical Reaction Engineering*. 3rd edition. New York: John Wiley and Sons.
- LLORENS, M.; SAEZ, J.; SOLER, A. (1992). Influence of thermal stratification on the behaviour of a deep wastewater stabilization pond. *Water Research*, v. 25, p. 569 – 577.
- MOREIRA, J. F. V. (2006). Subsídios para estudos hidrodinâmicos em sistemas de lagoas de estabilização sob influência de estratificação térmica: estudo de caso do noroeste paulista. São

Carlos. 146p. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

MORENO, M. D. (1990). A tracer study of the hydraulics of facultative stabilization ponds. *Water Research*, v. 24, n. 8, p. 1025 – 1030.

NARDI, I. R.; ZAIAT, M.; FORESTI, E. (1999). Influence of tracer characteristics on hydrodynamic models of packed-bed bioreactors. *Bioprocess Engineering*, v.21, p. 469 – 476.

NAUMAN, E. B. (1969). Residence time distribution theory for unsteady stirred tank reactors. *Chemical engineering science*. v.24, n. , p.1461 – 1470.

NIEMI, A. J. (1977). Residence time distributions of variable flow processes. *International Journal of Applied Radiation and Isotops*. v. 28, n.10, p. 855 – 860.

NIEMI, A.J. (1988). Variable Parameter Model of the Continuous Flow Vessel. Proc. 6th International Conference on Mathematical Modeling. vol.11, pp.32-37, Britain, 1988.

POLISEL, K. C. (2005). Desempenho de lagoas de maturação utilizando macrófitas aquáticas e chicaneamento. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

RAWATLAL, R. and STARZAK, M. (2003). Unsteady-state residence-time distribution in perfectly mixed vessels. *AIChE Journal*, v. 49, n. 2, p. 471 – 484. fevereiro.

SASSAKI, R. A. (2005). Distribuição de tempos de residência em sistemas alimentados com vazão variável. Rio de Janeiro. 89p. Dissertação (Mestrado), Universidade Federal do Rio de Janeiro.

THACKSTON, E. L.; HAYS, J. R.; KRENKEL, P. A. (1967). Least squares estimation of mixing coefficients. *Journal of the Sanitary Engineering*. v. 93, n. 3, p. 47 – 58.

TORRES, J. J.; SOLER, A.; SÁEZ, J.; ORTUNO, J. F. (1997). Hydraulic performance of a deep wastewater stabilization pond. *Water Research*, v. 31, n. 4, p. 679 – 688.

TORRES, J. J.; SOLER, A.; SÁEZ, J.; LEAL, M.; AGUILAR, M. I. (1999). Study of the internal hydrodynamics in three facultative ponds of two municipal WSPS in Spain. *Water Research*. v. 33, n. 5, p. 1133 – 1140.

YLINEN, R. e NIEMI, A. T. (1997). Some comments on “residence time distribution for unsteady-state systems”by Fernández-Sempere et al. *Chemical engineering science*. v. 52, n. 6, p. 1065 – 1067. março.

ZENG, Y.; MU, S. J.; LOU, S. J.; TARTAKOVSKY,B.; GUIOT, S.R; WU, P. (2005). Hydraulic modeling and axial dispersion analysis of UASB reactor. *Biochemical engineering journal*. v. 25, p. 113 – 123.

ZENGER, K. (2003). Modelling, analysis and controller design of time-variable flow processes. Espoo, Finland.118 p. Thesis (Doctoral). Helsinki University of Technology.

ZUBER, A. (1986). On the interpretation of tracer data in variable flow systems. *Journal of Hydrology*. v. 86, p. 45 – 57.