

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA HIDRÁULICA E SANEAMENTO

VINÍCIUS CARVALHO ROCHA

Modelagem hidro-bioquímica de reatores anaeróbios:
Aplicação da dinâmica de fluidos computacional e da dinâmica de sistemas

VERSÃO CORRIGIDA

São Carlos - SP

2017

VINÍCIUS CARVALHO ROCHA

Modelagem hidro-bioquímica de reatores aneróbios:

Aplicação da dinâmica de fluidos computacional e da dinâmica de sistemas

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 Ciências: Engenharia Hidráulica e Saneamento

Orientador: Prof. Tit. Eduardo Cleto Pires

São Carlos - SP

2017

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

C672m Carvalho Rocha, Vinícius
Modelagem hidro-bioquímica de reatores anaeróbios:
Aplicação da dinâmica de fluidos computacional e da
dinâmica de sistemas / Vinícius Carvalho Rocha;
orientador Eduardo Cleto Pires. São Carlos, 2017.

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Hidráulica e Saneamento e Área de
Concentração em Hidráulica e Saneamento -- Escola de
Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo,
2017.

1. CFX. 2. Vensim PLE. 3. Simulação e validação. 4.
Modelo integrado de processamento anaeróbio. 5.
Modelagem de alcalinidade. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Engenheiro **VINÍCIUS CARVALHO ROCHA**.

Título da tese: "Modelagem hidro-bioquímica do processamento anaeróbio em reatores UASB: uma abordagem da dinâmica de fluidos computacional e da dinâmica de sistemas".

Data da defesa: 26/01/2017.

Comissão Julgadora:

Resultado:

Profa. Dra. **Márcia Helena Rissato Zamariolli Damianovic**
(Orientadora Designada)
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Aprovado

Prof. Titular **Marcelo Zaiat**
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Aprovado

Dra. **Valéria Del Nery**
(Pós-Doutoranda/CNPq)

Aprovado

Profa. Dra. **Karina Querne de Carvalho**
(Universidade Tecnológica Federal do Paraná/UFTPR)

aprovado

Prof. Dr. **Erich Kellner**
(Universidade Federal de São Carlos/UFSCar)

APROVADO

Coordenadora do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Hidráulica e Saneamento:

Profa. Associada **Maria Bernadete A. Varesche Silva**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:
Prof. Associado **Luis Fernando Costa Alberto**

Dedico este trabalho a todos que fazem da ciência um instrumento de inovação e um incentivo de seguir em frente no desenvolvimento tecnológico brasileiro, mesmo o caminho se provando mais e mais tortuoso

AGRADECIMENTOS

Por esta tese agradeço:

minha família, fonte de inspiração e orgulho;

minha eterna companheira Aline, sempre;

meu orientador Prof. Eduardo Cleto Pires, fonte de sabedoria, paciência e amizade nos momentos oportunos;

meus amigos da USP/EESC/SHS, em especial aqueles que tornaram os dias mais claros na primeira etapa deste doutorado e que levo sempre em meus pensamentos;

meus amigos da UFTM que tornaram Uberaba em um lar mais confortável;

em especial aos professores Julio Cesar e Daniel Costa pelos conselhos, discussões e contribuições imensuráveis para com esta tese;

à UFV pela criação de uma sólida base técnica/científica/humana na minha formação. Aos meus amigos de Viçosa que hoje imperam Brasil e Mundo afora. De vocês e da UFV levo orgulho e saudade.

à FAPESP pelo financiamento do Projeto Temático no qual esta tese fez parte;

à CAPES pela bolsa concedida durante o primeiro ano do doutorado;

à USP pela infraestrutura cedida para a realização deste trabalho;

à UFTM pelo acolhimento.

RESUMO

ROCHA, V. C. **Modelagem hidro-bioquímica de reatores anaeróbios: Aplicação da dinâmica de fluidos computacional e da dinâmica de sistemas.** 196p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.

Modelos matemáticos são representações ou interpretações simplificadas da realidade ou uma representação de um fragmento de um sistema. As simulações destes fenômenos auxiliam na tomada de decisão da parte interessada, ou seja, aqueles que trabalham em uma área. A modelagem de um sistema de processos anaeróbios, como o tratamento de um efluente em reatores UASB (*Upflow Anaerobic Sludge Blanket*), auxilia os gestores destes sistemas na operação e no controle de estabilidade. O modelo ADM1 (*Anaerobic Digestion Model N° 1*), criado pela IWA em 2002, simula o comportamento da digestão anaeróbia. Entretanto, este modelo não considera a hidrodinâmica do sistema como fator relevante no desempenho do processo. O estudo do comportamento do escoamento de efluente no interior de um reator é possível através de ensaios de hidrodinâmica. Estes são conduzidos, majoritariamente, por meio de experimentos laboratoriais que se utilizam de traçadores que, por sua vez, podem resultar em custos elevados. A Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC) é uma área na mecânica dos fluidos que utiliza análises numéricas e algoritmos para solucionar e analisar problemas relacionados com escoamento de fluidos. Os *software* de DFC que resolvem estes algoritmos podem ser utilizados na simulação dos ensaios de hidrodinâmica. Foi utilizado nesta tese o pacote de DFC *Ansys*[®], em que o *software CFX*[™] foi o escolhido para realizar as simulações de escoamento. Um dos objetivos desta tese foi a validação desta simulação por meio de ensaios de laboratório e ensaios virtuais em um reator UASB em escala de bancada (1,5 L). Resultou-se, dessa comparação, em dados estatisticamente similares (teste U de Mann-Whitney), proporcionando validação do método. Após esta validação, simulou-se o mesmo tipo de ensaio para um reator UASB em formato de “Y” (escala piloto; 119,3 L). Foram simuladas três condições operacionais, em que se variou a vazão de alimentação, sendo esta função da carga orgânica volumétrica aplicada ao lodo (COV). As COV foram 7,5, 12,5 e 17,5 kgDQO m⁻³d⁻¹. Obteve-se N-CSTR (número de reatores de mistura completa em série) igual a 11, 10 e 10 unidades para cada condição, respectivamente. A ferramenta de Dinâmica de Sistemas utiliza-se de uma abordagem de entendimento de modelos complexos e, por meio de ciclos de retroalimentação (*feedback*) e estoques e fluxos (*stocks and flows*), demonstra que modelos aparentemente simples podem ser muito complexos. Existem vários *software* de Dinâmica de Sistemas e neles podem ser implementados os mais variados modelos. Utilizando o *software Vensim PLE*[®], modelou-se a digestão anaeróbia do ácido acético por meio de equações baseadas no modelo de cinética enzimática de Monod e no modelo de digestão anaeróbia ADM1. Considerou-se as taxas de consumo de substrato e crescimento de biomassa bacteriana, a inibição causada pelo pH e a quantidade de alcalinizante necessária para atingir o pH desejado deste meio. De forma complementar, integrou-se um modelo de cálculo de alcalinidade do meio e, desta forma, foi possível determinar as concentrações de cada espécie que confere alcalinidade ao meio, considerando o equilíbrio do carbonato. Denominou-se esta modelação (DFC e dinâmica de sistemas) de Modelo Hidro-bioquímico do processamento anaeróbio. Os resultados obtidos por Del Nery et al. (2016) corroboraram com os obtidos nesta tese.

Palavras-chave: DFC. *CFX*[™]. *Vensim PLE*[®]. Simulação e validação. Modelo integrado de processamento anaeróbio. Modelagem de alcalinidade.

ABSTRACT

ROCHA, V. C. **Hydro-biochemical modeling of anaerobic reactors: Application of computational fluid dynamics and systems dynamic.** 196p Thesis (PhD) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.

Mathematical models are representations and simplified interpretations of reality or a representation of a system fragment. The modeling of anaerobic processes, such as wastewater treatment in UASB (Upflow Anaerobic Sludge Blanket) reactors, helps managers in the operation of these systems and stability control. The Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1), created by IWA in 2002, simulates the behavior of anaerobic digestion. However, this model does not consider the system hydrodynamics as a relevant factor in the performance of the process. The effluent flow behavior studies on the reactor inside is possible by hydrodynamic tests. These are conducted through laboratory experiments that uses tracers and this can result in high costs in the conduct of the tests. The Computational Fluid Dynamics (CFD) is an area in fluid mechanics that uses numerical analysis and algorithms to solve and analyze problems related to fluid flow. *CFD software* can be used to simulate the hydrodynamics assays. It was used in this thesis Ansys® workbench, wherein the CFX™ *software* was chosen to perform CFD flow simulations. One objective of this thesis was to validate the CFD simulation through laboratory and virtual testing in a UASB bench scale (1.5 liters). In this comparison, it resulted in similar data statistically (Mann-Whitney U test).

After validation of the hydrodynamic test, was simulated the same type of assay for an UASB reactor “Y” shaped (pilot scale; = 82.27 liters working volume). The test result was N-CSTR (number of complete mixing reactors in series) equal to 4 units, considering a 103.9 liters per day of feed flow (hydraulic retention time of 19 hours). The system dynamics tool makes use of understanding approach of complex models and, through feedback loops and stocks and flows, shows that seemingly simple models can be very complex. There are several system dynamics *software* and most varied models can be implemented. Using Vensim PLE® *software*, it was developed an acetate anaerobic digestion model (in this case acetic acid) via equations based on the Monod and ADM1 model. It was considered for the hydro-biochemical modeling, substrate consumption and growth of bacterial biomass rates, the pH inhibition and the amount of alkalizing necessary to achieve the desired pH of the medium. Complementarily, integrated into a calculation alkalinity model of the medium and thus it was possible to determine the concentrations of each species imparts environment alkalinity, considering the carbonate balance.

Keywords: CFD. CFX™. Vensim PLE®. Simulation and validation. Integrated model of anaerobic processing. Alkalinity modeling.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Etapas da produção de metano por meio da digestão anaeróbia.....	39
Figura 2 – Exemplo de representação das relações entre população, nascimentos e morte.....	56
Figura 3 – Exemplo simplificado de estoque e caixa para a variável 'substrato'.....	57
Figura 4 – Reator UASB em escala de bancada. A) Desenho esquemático (hachura = material suporte); B) Fotografia do reator. Obs: cotas em centímetros.....	62
Figura 5 – Reator UASB de bancada digital (3D) (R1)	63
Figura 6 – Defletor posicionado na parte inferior do reator (acima da entrada). Obs: cotas em centímetros	64
Figura 7 – Desenho esquemático do reator UASB em escala piloto e modelo tridimensional (R2). A) entrada de efluente; B) manta de lodo; C) zona de sedimentação e separador trifásico; D) saída de efluente. Obs: cotas em metros.	66
Figura 8 – Gráfico do pulso gerado no ensaio de estímulo-resposta.....	82
Figura 9 – Diagrama de causalidade do modelo proposto contendo todos os loops.....	94
Figura 10 – Curvas de DTR do R1 para M1 e M2 (condição 2)	99
Figura 11 – Gráfico de dispersão dos dados da curva DTR entre as simulações utilizando malha padrão e malha refinada (condição 2).....	99
Figura 12 – Malhas testadas no teste de independência do R1	100
Figura 13 – Vetores velocidade em R1 (condição 1). a) topo do reator (saída); b) base do reator (entrada)	101
Figura 14 – Curvas DTR do ensaio simulado de traçador para condição 1	102
Figura 15 – Curvas de DTR do ensaio experimental de traçador para condição 1	103
Figura 16 – Curvas E_{θ} dos ensaios de injeção de pulso: simulado e experimental (condição 1)	103
Figura 17 – Vetores velocidade em R1 (condição 2). a) topo do reator (saída); b) base do reator (entrada)	105
Figura 18 – Curvas E_{θ} do ensaio simulado de traçador e do modelo N-CSTR para condição 2	106
Figura 19 – Curvas E_{θ} do ensaio experimental de traçador e do modelo N-CSTR para condição 2.....	107
Figura 20 – Curvas E_{θ} dos ensaios de injeção de pulso: simulado e experimental (condição 2)	107
Figura 21 – Malhas geradas no R2 para o teste de independência de malha (MP, MPR e MCR).....	110
Figura 22 – Curva E_{θ} para o R2 considerando os dados simulados e o modelo N-CSTR – COV-7,5	113
Figura 23 – Vetores velocidade para COV-7,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator.....	115
Figura 24 – Linhas de fluxo para COV-7,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator.....	115
Figura 25 – Perfil de velocidade no R2 ao longo do eixo Z.....	117
Figura 26 – Curva E_{θ} para o R2 considerando os dados simulados e o modelo N-CSTR – COV-12,5	118

Figura 27 – Vetores velocidade para COV-12,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator	120
Figura 28 – Linhas de fluxo para COV-12,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator	120
Figura 29 – Curva E_{θ} para o R2 considerando os dados simulados e o modelo N-CSTR – COV-17,5	121
Figura 30 – Vetores velocidade para COV-17,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator	122
Figura 30 – Linhas de fluxo para COV-17,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator	122
Figura 32 – Reator R2 modificado ($R2_{mod}$) – vista em corte longitudinal (esquerda) e vista tridimensional (direita). Obs: a) base; b) manta de lodo; c) zona de sedimentação e braço de saída do efluente.....	123
Figura 33 – Curva E_{θ} para $R2_{mod}$ na condição COV-12,5 (simulado e modelo N-CSTR)....	124
Figura 34 – Curvas E_{θ} gerada para os reatores R2 e $R2_{mod}$	125
Figura 35 – Vetores velocidade para COV-12,5 $_{mod}$	127
Figura 36 – Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa implementado no Vensim PLE® para N = 1	129
Figura 37 – Conexões entres os blocos de equações N = 1 e N = 2. As setas vermelhas indicam as conexões do substrato e da biomassa.....	130
Figura 38 – Perfil de ácido acético ao longo da altura (H) do reator em escala piloto (R2) – condição COV-7,5	132
Figura 39 – Perfil de ácido acético ao longo da altura (H) do reator em escala piloto (R2) – condição COV-12,5	133
Figura 40 – Perfil de ácido acético ao longo da altura (H) do reator em escala piloto (R2) – condição COV-17,5	133
Figura 41 – Perfil de ácido acético para R2 ao longo da manta de lodo e separado pelo número N obtido por meio de ensaio de traçador – condição COV-7,5	134
Figura 42 – Fator de inibição por pH implementado no modelo hidro-bioquímico	136
Figura 43 – Integração entre os modelos de pH e de alcalinidade implementados no modelo hidro-bioquímico.....	137
Figura 44 – Modelo de cálculo de alcalinidade implementado no modelo hidro-bioquímico	138
Figura 45 – Modelo de cálculo das concentrações das formas de alcalinidade implementado no modelo hidro-bioquímico.....	139
Figura 46 – Perfil de ácido acético ao longo da manta de lodo – simulado e real na condição COV 7,5	142
Figura 47 – Perfil de ácido acético ao longo da manta de lodo – simulado e real na condição COV 7,5	148
Figura 48 – Perfil de ácido acético ao longo da manta de lodo – simulado e real na condição COV 17,5	153
Figura 49 – Diagrama de causalidade. Variável: concentração de biomassa	172
Figura 50 – Diagrama de causalidade. Variável: taxa de decaimento de biomassa.....	173

Figura 51 – Diagrama de causalidade. Variável: concentração de substrato	174
Figura 52 – Diagrama de causalidade. Variável: pH gerado pelo substrato	175
Figura 53 – Diagrama de causalidade. Variável: dosagem de alcalinizante	176
Figura 54 – Diagrama de causalidade. Variável: incremento total de pH pelo alcalinizante	177
Figura 55 – Diagrama de causalidade. Variável: pH da solução de alcalinizante	178
Figura 56 – Diagrama de causalidade. Variável: pH do sistema	179
Figura 57 – Diagrama de causalidade. Variável: inibição por pH	180
Figura 58 – Diagrama de causalidade. Variável: taxa de crescimento de biomassa	181
Figura 59 – Diagrama de causalidade. Variável: taxa de consumo de substrato	182
Figura 60 – Diagrama de causalidade. Variável: taxa de respiração endógena	183
Figura 61 - Diagrama de causalidade. Variável: taxa de saída de substrato	183
Figura 62 – Tela de monitoramento do parâmetro Imbalance no CFX-Solver™: Malha padrão, Reator R1	184
Figura 63 – Tela de monitoramento do parâmetro Imbalance no CFX-Solver™: Malha refinada, Reator R1	185
Figura 64 – Tela de monitoramento do parâmetro User Points (Traçador) no CFX-Solver™: Malha padrão, Reator R1	186
Figura 65 – Tela de monitoramento do parâmetro User Points (Traçador) no CFX-Solver™: Malha refinada, Reator R1	187
Figura 66 – Tela de monitoramento do parâmetro Imbalance no CFX-Solver™: Malha padrão (MP), Reator R2	188
Figura 67 – Tela de monitoramento do parâmetro Imbalance no CFX-Solver™: Malha completamente refinada (MCR), Reator R2	189
Figura 68 – Tela de monitoramento do parâmetro Imbalance no CFX-Solver™: Malha parcialmente refinada (MPR), Reator R2	190
Figura 69 – Linha de amostragem ao longo do eixo Z	191
Figura 70 – Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa implementado no Vensim PLE® (N = 1) para a condição COV-7,5	192
Figura 71 – Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa implementado no Vensim PLE® (N = 2 e N = 3) para a condição COV-7,5	193
Figura 72 – Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa implementado no Vensim PLE® (N = 4 e N = 5) para a condição COV-7,5	194
Figura 73 – Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa implementado no Vensim PLE® (N = 6) para a condição COV-7,5	195
Figura 74 – Fotografia do reator UASB (R2) piloto operado por Del Nery et al. (2016). Obs. Pontos de amostragem na manta de lodo indicado em vermelho	196

LISTA DE QUADROS E TABELAS

Quadro 1 – Programas utilizados no desenvolvimento desta tese.....	60
Quadro 2 – Matriz de conectividade das variáveis do modelo proposto.....	93
Quadro 3 – Dados de entrada do modelo hidro-bioquímico – condição COV-7,5	140
Quadro 4 – Dados de entrada do modelo hidro-bioquímico – condição COV-12,5	146
Quadro 5 – Dados de entrada do modelo hidro-bioquímico – condição COV-17,5	150
Tabela 1 – Parâmetros de projeto do reator UASB em escala de bancada.....	64
Tabela 2 – Parâmetros de projeto do reator em escala piloto (R2).....	65
Tabela 3 – Parâmetros operacionais do reator UASB em escala piloto (R2).....	67
Tabela 4 – Parâmetros utilizados no cálculo de porosidade do leito do reator UASB R2	69
Tabela 5 – Parâmetros de cinética biológica e para a inibição por pH.....	85
Tabela 6 – Valores dos parâmetros A , B (a 25°C e 1 bar), das cargas dos íons (z_i) e do diâmetro efetivo (\hat{a}_i).....	90
Tabela 7 – Coeficientes empíricos para o cálculo de k_1 , k_2 e k_w	91
Tabela 8 – Dados de entrada para simulações em DFC para o reator R1	96
Tabela 9 – Dados de entrada para simulações em DFC para o reator R2	96
Tabela 10 – Análise hidrodinâmica do R1 (simulado e experimental) em duas diferentes condições	97
Tabela 11 – Teste de independência de malha para R1	98
Tabela 12 – Informações das malhas testadas para R1	99
Tabela 13 – Estatística descritiva dos dados obtidos na simulação e no experimento para a condição 1.....	104
Tabela 14 – Estatística descritiva dos dados obtidos na simulação e no experimento para a condição 2.....	108
Tabela 15 – Dados das malhas de R1 (MP, MPR e MCR)	109
Tabela 16 – Teste de independência de malha para R2.....	109
Tabela 17 – Análise hidrodinâmica de R2 - modelo N-CSTR (simulado).....	111
Tabela 18 – Comparação entre os resultados obtidos na simulação da condição COV-12,5 para o reator R2 _{mod} e R2	125
Tabela 19 – Perfis de ácido acético no reator UASB tratando vinhaça em diferentes cargas orgânicas volumétricas aplicada ao lodo.	132
Tabela 20 – Resultados da simulação para o modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa – COV-7,5.....	141
Tabela 21 – Resultados da simulação e do monitoramento de R2 para COV-7,5	142
Tabela 22 – Resultados da simulação para o modelo de pH – COV-7,5	143
Tabela 23 – Resultados da simulação para o modelo de alcalinidade – COV-7,5	144
Tabela 24 – Alcalinidade efluente e alcalinizante necessário na suplementação afluente, real e simulado – COV-7,5.....	145
Tabela 25 – Resultados da simulação para o modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa – COV-12,5.....	147
Tabela 26 – Resultados da simulação e do monitoramento de R2 para COV-7,5	147
Tabela 27 – Resultados da simulação para o modelo de pH – COV-12,5	149

Tabela 28 – Resultados da simulação para o modelo de alcalinidade – COV-12,5	149
Tabela 29 – Alcalinidade efluente e alcalinizante necessário na suplementação afluente, real e simulado – COV-12,5	150
Tabela 30 – Resultados da simulação para o modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa – COV-17,5	151
Tabela 31 – Resultados da simulação e do monitoramento de R2 para COV-17,5	152
Tabela 32 – Resultados da simulação para o modelo de pH – COV-17,5	154
Tabela 33 – Resultados da simulação para o modelo de alcalinidade – COV-17,5	154
Tabela 34 – Alcalinidade efluente e alcalinizante necessário na suplementação afluente, real e simulado – COV-17,5	155
Tabela 35 – Carga de alcalinizante calculada através dos dados obtidos nas simulações do modelo hidro-bioquímicos para diferentes cargas orgânicas volumétricas	156

LISTA DE SÍMBOLOS

ρ_p	densidade dos grânulos	$[M L^{-3}]$
$\frac{SSV}{SST}$	porcentagem de sólidos suspensos voláteis	[%]
d	diâmetro médio dos grânulos do reator UASB	[L]
ρ	massa específica do fluido	$[M L^{-3}]$
ρ_{pe}	densidade da partícula esférica	$[M L^{-3}]$
u_{up}	velocidade ascensional do líquido	$[L T^{-1}]$
μ	viscosidade dinâmica do fluido	$[ML^{-1}T^{-1}]$
g	constante de aceleração da gravidade	$[L T^{-2}]$
Re	número de Reynolds	[-]
Ar	número de Arquimedes	[-]
ε	porosidade	[-]
v_x	componente x (u) do vetor velocidade U	$[L T^{-1}]$
v_y	componente y (v) do vetor velocidade U	$[L T^{-1}]$
v_z	componente z (w) do vetor velocidade U	$[L T^{-1}]$
t	tempo	[T]
p	pressão	$[ML^{-1}T^{-2}]$

S	termo fonte	-
Γ	coeficiente difusivo	$[ML^{-1}T^{-1}]$
ϕ	variável genérica	-
k	energia cinética turbulenta	$[L^2T^{-2}]$
μ_t	viscosidade turbulenta	$[ML^{-1}T^{-1}]$
u_j	componente j da velocidade	$[LT^{-1}]$
P_k	produção de turbulência	$[ML^{-1}T^{-3}]$
ω	taxa de dissipação de turbulência específica	$[ML^2T^{-3}]$
C	concentração	$[ML^{-3}]$
\bar{t}	tempo médio	T
C_{pulso}	concentração de traçador no pulso	$[ML^{-3}]$
$E(t)$	curva E	$[T^{-1}]$
σ^2	variância da curva C	$[T^2]$
E_{θ}	curva E adimensional	[-]
θ	tempo adimensional	[-]
σ_{θ}^2	variância adimensional	[-]
M_o	massa de traçador injetada	[M]

M	massa de traçador em um determinado tempo t	[M]
α	tempo de injeção do traçador	[T]
β	carga de traçador injetado	[M T ⁻¹]
t	passo da simulação	[T]
M _{traçador}	massa de traçador requerida na simulação	[M]
R _{M/V}	relação massa de traçador por volume	[M L ⁻³]
V _{reator} :	volume do reator	[L ³]
Y	coeficiente de produção de lodo	[-]
K _s	constante de Monod	[M L ⁻³]
K _{m,ac}	máxima taxa de crescimento	[T ⁻¹]
K _d	taxa de decaimento bacteriano	[T ⁻¹]
K _r	taxa de respiração endógena	[T ⁻¹]
I _{pH}	fator de inibição por pH	[-]
pH _{UL}	limite superior de inibição por pH	[-]
pH _{LL}	limite inferior de inibição por pH	[-]
S _M	concentração de substrato	[MOL L ⁻³]

S	concentração de substrato	[MOL L ⁻³]
PM	peso molecular	[M MOL ⁻¹]
pH _{Acetato}	pH da solução de acetato	[-]
ΔpH	incremento de pH necessário para elevar o pH a um nível desejado	[-]
Inc. pH _{NaHCO₃}	incremento de pH em função da concentração de alcalinizante	[pH [M L ⁻³] ⁻¹]
A _{total}	alcalinidade total	[M L ⁻³]
Inc. alcalinidade	incremento de alcalinidade pela adição de alcalinizante	[-]
A' _{total}	alcalinidade total	[MOL L ⁻³]
M _{CaCO₃}	massa molar do carbonato de cálcio	[M MOL ⁻¹]
r _{CaCO₃}	razão entre o número de mol e o número de equivalente do carbonato de cálcio	[MOL EQ ⁻¹]
[HCO ₃ ⁻]	concentração do íon bicarbonato	[MOL L ⁻³]
[CO ₃ ²⁻]	concentração do íon carbonato	[MOL L ⁻³]
[OH ⁻]	concentração do íon hidroxila	[MOL L ⁻³]
[H ⁺]	concentração do íon hidrogênio	[MOL L ⁻³]
k' ₁	1ª constante combinada de ionização do ácido carbônico	[MOL L ⁻³]
k' ₂	2ª constante combinada de ionização do ácido carbônico	[MOL L ⁻³]
k' _w	constante combinada de ionização da água	[MOL ² L ⁻²]

$\gamma_{\text{H}_2\text{CO}_3}$	coeficiente de atividade da espécie	[-]
$\gamma_{\text{HCO}_3^-}$	coeficiente de atividade da espécie	[-]
$\gamma_{\text{CO}_3^{2-}}$	coeficiente de atividade da espécie	[-]
γ_{OH^-}	coeficiente de atividade da espécie	[-]
γ_i	coeficiente de atividade do íon	[-]
z_i	carga do íon	[-]
I	força iônica	[MOL ^{1/2} M ^{-1/2}]
\tilde{a}_i	diâmetro iônico efetivo	[L]
A	constante característica do solvente	[M ^{1/2} MOL ^{-1/2}]
B	constante característica do solvente	[M ^{1/2} L ⁻¹ MOL ^{-1/2}]
CE	condutividade elétrica	[$\mu\text{S cm}^{-1}$]
k	constante de equilíbrio químico	[MOL L ⁻³]
a_1, a_2, a_3, a_4, a_5	coeficientes empíricos	[-]
T	temperatura	[K]
$A_{\text{HCO}_3^-}$	concentração do íon bicarbonato em termos de alcalinidade	[M L ⁻³]
$A_{\text{CO}_3^{2-}}$	concentração do íon carbonato em termos de alcalinidade	[M L ⁻³]

A_{OH^-}

concentração do íon hidroxila em termos de
alcalinidade

$[M L^{-3}]$

LISTA DE SIGLAS

ADM1	<i>Anaerobic Digestion Model N° 1</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamic</i>
COV	Carga Orgânica Volumétrica
DBO	Demanda Bioquímica de Oxigênio
DFC	Dinâmica de Fluidos Computacional
DQO	Demanda Química de Oxigênio
DTR	Distribuição do Tempo de Residência
FRB	Fator de Retenção de Biomassa
MCR	Malha Completamente Refinada
MP	Malha Padrão
MPR	Malha Parcialmente Refinada
N-CSTR	Número de Reatores de Mistura completa em Série
R1	Reator em escala de bancada (Reator 1)
R2	Reator em escala piloto (Reator 2)
STV	Sólidos Totais Voláteis
TDH	Tempo de Detenção Hidráulica
TDH _t	Tempo de Detenção Hidráulica considerando volume total do reator
TDH _u	Tempo de Detenção Hidráulica considerando volume útil do reator
UASB	<i>Upflow Anaerobic Sludge Blanket</i>

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	31
2. OBJETIVOS	35
2.1. Objetivos específicos	35
3. REVISÃO DE LITERATURA	37
3.1. A digestão anaeróbia	37
3.1.1. A digestão anaeróbia de substratos de alta concentração	38
3.1.2. Hidrodinâmica de reatores	42
3.1.3. Dinâmica de fluidos computacional	47
3.1.4. Aplicações de DFC em reatores anaeróbios	49
3.1.5. Modelagem matemática do processamento anaeróbio	52
3.1.6. A Dinâmica de Sistemas como ferramenta de modelagem de processos ambientais	56
4. METODOLOGIA	60
4.1. Programas computacionais	60
4.2. Análise hidrodinâmica de reatores	61
4.2.1. Reatores UASB	61
4.2.1.1. Reator em escala de bancada (R1)	62
4.2.1.2. Reator UASB em escala piloto com formato em Y (R2)	64
4.2.1.2.1. Cálculo da porosidade da manta de lodo em reatores UASB	67
4.2.2. Uso de DFC na simulação do escoamento	70
4.2.2.1. O modelo de turbulência SST ($k-\omega$)	72
4.2.2.2. Teste de independência de malha	75
4.2.3. Análise do escoamento não ideal em reatores	76
4.2.3.1. Injeção pulso	77
4.2.3.1.1. Simulação de injeção de pulso em DFC	81
4.2.4. Validação das curvas DTR simuladas em DFC	82
4.3. Modelagem do processamento anaeróbio	83
4.3.1. Modelo de consumo do substrato e crescimento da biomassa	83
4.3.2. Modelo de pH a partir do substrato	85
4.3.3. Modelo de determinação de alcalinidade de água	87
4.4. Desenvolvimento do modelo hidro-bioquímico do processamento anaeróbio	92
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	95
5.1. Análise hidrodinâmica de reatores UASB em escala de bancada e piloto	95

5.1.1. Reator de bancada (R1)	97
5.1.1.1. Validação da simulação do ensaio de traçador em DFC - Condição 1	100
5.1.1.2. Validação da simulação do ensaio de traçador em DFC - Condição 2	104
5.1.2. Reator em escala piloto (R2)	108
5.1.2.1. Teste de independência de malha	108
5.1.2.2. Simulação do ensaio de traçador no R2	111
5.1.2.2.1. Análise hidrodinâmica: condição COV-7,5	112
5.1.2.2.2. Análise hidrodinâmica: condição COV-12,5	117
5.1.2.2.3. Análise hidrodinâmica: condição COV-17,5	119
5.1.2.2.4. Análise hidrodinâmica: reator sem a zona estagnada (COV-12,5)	121
5.1.3. Modelo hidro-bioquímico do processamento anaeróbio	127
5.1.3.1. Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa	128
5.1.3.2. Fator de inibição por pH	135
5.1.3.3. Modelo de aplicação de alcalinizante	136
5.1.3.4. Resultados obtidos na simulação do modelo hidro-bioquímico	139
5.1.3.4.1. COV-7,5 – simulação no Vensim PLE®	140
5.1.3.4.2. COV-12,5 – simulação no Vensim PLE®	145
5.1.3.4.3. COV-17,5 – simulação no Vensim PLE®	150
5.1.3.5. Influência da carga orgânica nas simulações	155
6. CONCLUSÕES	157
7. COMENTÁRIOS FINAIS	159
REFERÊNCIAS	161
APÊNDICE A	171
APÊNDICE B	184
APÊNDICE C	191
APÊNDICE D	192
ANEXO A	196

1. INTRODUÇÃO

A digestão anaeróbia, processo que estabiliza substratos orgânicos complexos em um ambiente com ausência de oxigênio, é um fenômeno tão antigo quanto o aparecimento dos seres microscópios terrestres. Atualmente este processo é amplamente empregado na gestão dos resíduos antrópicos e na produção de bioenergia. De fato, ocorre uma conversão dos resíduos complexos em outros de estrutura mais simplificada e, simultaneamente, há produção de biogás, composto de alto valor energético.

A complexidade do processamento anaeróbio de efluentes requer que estudos fundamentais sejam realizados. Reatores anaeróbios, em diversas escalas e configurações, são utilizados em estações de tratamento de efluentes em variados segmentos, de origem doméstica ou industrial. O processo anaeróbio possui a vantagem de ser, de maneira geral, energeticamente mais viável do que o aeróbio, isto por conta, principalmente, da não necessidade de se inserir oxigênio na massa líquida. Mesmo o metabolismo aeróbio sendo mais eficiente, é possível atingir elevadas eficiências de remoção de matéria orgânica no processo anaeróbio. Para isto é necessário que o dimensionamento, projeto e operação de um sistema de tratamento anaeróbio sejam otimizados, seja por meio de pesquisas direcionadas à operação de reatores anaeróbios ou à elaboração de modelos que auxiliem no entendimento do processo e sua respectiva tomada de decisão.

Entretanto, devido às lacunas de projeto e às dificuldades de manutenção do processamento anaeróbio de efluente de alta carga, existem muitas etapas a serem investigadas cientificamente para possibilitar melhor compreensão do processo e da operação destes sistemas. Preenchendo estas lacunas, obter-se-á um aumento do potencial de tratamento destes efluentes mais complexos e maior será a probabilidade de obter resultados mais satisfatórios em termos de eficiência do processo.

Diferente de outros campos da engenharia em que os modelos computacionais se tornaram um dos principais componentes na etapa de projeto, modelos de digestão permanecem em desuso pela indústria. De forma oposta, muito se utiliza das informações empíricas obtidas na observação do comportamento do tratamento de efluentes de interesse, deixando de lado a oportunidade de se prever o comportamento do processo através de modelos matemáticos e computacionais.

Entretanto, a falta de uso destes modelos se deve mais à complexidade na modelagem bioquímica dos processos anaeróbios do que a simples falta de interesse por parte dos projetistas.

A digestão anaeróbia é um processo trifásico auto-regulado que envolve dezenas de reações bioquímicas inter-relacionadas, impulsionadas por centenas de espécies de microrganismos cujas populações são dinâmicas e seu equilíbrio depende de muitos parâmetros. Os modelos de digestão anaeróbia têm tido algum sucesso quando validado em reatores de escala de bancada, entretanto, a validação em escalas maiores ainda encontra empecilhos. Esta dificuldade pode ser atribuída ao aumento de escala, pois reatores em pequenas escalas comportam-se de forma diferente quando comparados aos reatores em escalas maiores, como mostraram Batstone, Hernandez e Schmidt (2005).

Parte fundamental de qualquer sistema de tratamento biológico, a biomassa é um dos elementos chave para um tratamento de sucesso. Em processos anaeróbios, especificamente em reatores UASB (*Upflow Anaerobic Sludge Blanket*), a manta de lodo possui a função de degradar a matéria orgânica e, conseqüentemente, de gerar biogás. Esta manta, também chamada de biomassa, é um conjunto de microrganismos variados e cada um com suas funções específicas. Estes seres vivos estão sujeitos às variações das características dos líquidos afluentes ao reator e, de forma mais ou menos intensa, possuem sensibilidade variada. Pode-se citar, por exemplo, a sensibilidade ao carregamento orgânico excessivo aplicado ao lodo, a temperaturas fora da faixa de trabalho dos microrganismos (psicrofílicos, mesofílicos ou termofílicos), aos compostos tóxicos e efluentes com características muito ácidas ou básicas. Deve-se, portanto, ao desenvolver projetos de reatores, atentar-se às limitações dos microrganismos envolvidos no processamento anaeróbio.

O uso da modelagem no desenvolvimento de projetos de reatores tem-se provado uma importante ferramenta de auxílio à tomada de decisão. A modelagem da digestão baseia-se, normalmente, no comportamento da massa do sistema e, desta forma, são assumidas condições homogêneas em todo o reator sem considerar os efeitos da hidrodinâmica. Além disso, esta modelagem é feita na perspectiva bioquímica e o componente hidrodinâmico é ignorado. Estas condições são válidas para ambiente bem controlados, como pequenos reatores de bancada, mas os modelos geralmente não conseguem reproduzir os efeitos de aumento de escala. Estes modelos em escala real possuem, na maioria das vezes, volume útil de milhares de litros, presença de anomalias de escoamento, por exemplo, zonas mortas, curtos-circuitos, zonas de recirculação interna, dentre outras anomalias. Os modelos convencionais do processamento anaeróbio não possuem capacidade de prever estes fenômenos. Entretanto, um modelo que

integre a bioquímica dos processos e o comportamento hidrodinâmico aproximaria ainda mais da realidade na previsão do tratamento anaeróbio.

Para tanto, este trabalho objetivou a criação de um modelo integrado de processamento anaeróbio, considerando a bioquímica e hidrodinâmica em um reator anaeróbio, denominado modelo hidro-bioquímico.

2. OBJETIVOS

O objetivo principal desta tese é a proposição de um modelo hidro-bioquímico baseado na dinâmica de sistemas aplicada ao processamento anaeróbio de efluentes.

2.1. Objetivos específicos

Durante o processo de elaboração o modelo proposto, dividiu-se a execução desta tese em duas etapas distintas e complementares. A primeira etapa consistiu na avaliação hidrodinâmica dos reatores estudados, com foco no uso da ferramenta de Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC). A segunda etapa centrou-se na implementação do modelo hidro-bioquímico em Dinâmica de Sistemas.

Abaixo encontram-se os detalhamentos das duas etapas:

Etapa 1: Análise hidrodinâmica de reatores anaeróbios: aplicação da DFC:

- Elaborar um modelo digital tridimensional de dois reatores anaeróbios, sendo um em escala de laboratório e outro em escala piloto¹;
- Definir a melhor configuração de malha para os reatores tridimensionais com base em testes de independência de malha;
- Simular o método de injeção de pulso na avaliação hidrodinâmica dos dois reatores estudados; e validar este método com dados experimentais no reator de bancada;
- Determinar o número de reatores de mistura completa em série (N-CSTR) para o reator em escala piloto e utilizar este número na modelagem descrita na Etapa 2.

Etapa 2: Modelagem de um sistema dinâmico aplicado ao processamento anaeróbio:

- Realizar levantamento bibliográfico sobre os coeficientes (cinéticos, pH e alcalinidade) para a implementação do modelo dinâmico;

¹ Referentes aos trabalhos de Rocha (2012) e Del Nery et al. (2016).

- Aplicar os resultados da Etapa 1 no modelo dinâmico e analisar os efeitos do número N-CSTR no comportamento do sistema para três diferentes cargas orgânicas volumétricas (COV) utilizadas por Del Nery et al. (2016);
- Ajustar e analisar os resultados gerados no modelo hidro-bioquímico de acordo com os dados obtidos por Del Nery et al. (2016) sob a ótica do controle operacional de alcalinidade, de pH em reatores anaeróbios e do consumo de substrato (acetato).

3. REVISÃO DE LITERATURA

Nesta seção serão expostas as principais obras que deram base bibliográfica à esta tese e, de forma resumida, serão citados livros, artigos e outras fontes de informação. Os resultados encontrados na literatura que serviram de fonte de dados secundários e que, de alguma forma, contribuíram para a formulação dos modelos propostos serão discutidos mais detalhadamente no capítulo 4. Os demais serão apenas citados, principalmente no que concerne ao desenvolvimento teórico dos fatos já consolidados pela literatura. Por exemplo, a explanação do funcionamento da digestão anaeróbia e as tecnologias relacionadas, citada por inúmeros autores, será propositalmente ignorada, uma vez que os livros aqui citados possuem esta função. Desta forma, recomendar-se-á as principais obras que auxiliaram no desenvolvimento deste trabalho.

3.1. A digestão anaeróbia

A digestão anaeróbia de compostos orgânicos, também denominado processamento anaeróbio, é uma alternativa tecnológica dentro do tratamento de efluentes. Dentre os vários efluentes gerados no Brasil, domésticos ou industriais, cabe citar os mais comuns, como os esgotos domésticos, e os mais potencialmente poluentes, como a vinhaça de cana-de-açúcar. O processamento anaeróbio de vinhaça, segundo Wilkie, Riedesel e Owens (2000), é uma alternativa de interesse, pois é economicamente viável, uma vez que o principal subproduto gerado na digestão deste efluente é o biogás, composto principalmente de gás metano (CH_4). Este composto possui elevado poder calorífico e, como combustível, pode ser prontamente aproveitado pela indústria de beneficiamento da cana-de-açúcar, como a produção de álcool e/ou açúcar.

O processamento anaeróbio da vinhaça tem se mostrado muito promissor e isto tem atraído um número elevado de pesquisadores interessados em compreender o processo de digestão anaeróbia deste efluente e otimizar os métodos de desenvolvimento de projetos de reatores e a operação e gestão dos sistemas de tratamento.

Dado este elevado interesse no tratamento de efluentes industriais, particularmente a vinhaça, destacou-se algumas referências importantes que auxiliaram na compreensão e no desenvolvimento desta tese, e estas obras são citadas a seguir:

- **Anaerobic Biotechnology for Industrial Wastewaters** (livro). Editora Archae Press. Autor: Richard E. Speece (1996). Esta obra é fundamental no entendimento da digestão anaeróbia de efluentes indústrias, onde são apresentados os fundamentos do tratamento anaeróbio, vários exemplos de aplicação na indústria e um completo desenvolvimento dos cálculos relacionados ao dimensionamento dos sistemas de tratamento anaeróbio.
- **Reatores Anaeróbios** (livro). Editora UFMG. Autor: Carlos A. L. Chernicharo (2008). Esta obra explicita os fundamentos da digestão anaeróbia, há um enfoque na biomassa, sua importância e suas aplicações, apresenta os principais sistemas de tratamento, principalmente para países de clima tropical e, didaticamente, demonstra projetos de reatores anaeróbios, controle operacional e de sistemas de controle operacional.
- **Tratamento de Esgotos Sanitários por Processo Anaeróbio e Disposição Controlada no Solo** (livro) – Editora RiMa. José R. Campos (Coord) (1999). Nesta publicação, fruto do Programa de Pesquisas em Saneamento Básico – PROSAB, são descritos os fundamentos do tratamento anaeróbio e demonstrados uma coletânea de trabalhos técnicos financiados pelo Programa. Esta e outras publicações do PROSAB podem ser adquiridas gratuitamente pelo endereço na web:
 - <http://www.finep.gov.br/apoio-e-financiamento-externa/historico-de-programa/prosab/produtos>

Além destas obras supracitadas, podem ser encontrados em bibliotecas e na internet outros trabalhos relevantes no âmbito do processamento anaeróbio, como outros livros, artigos científicos em periódicos, dissertações e teses.

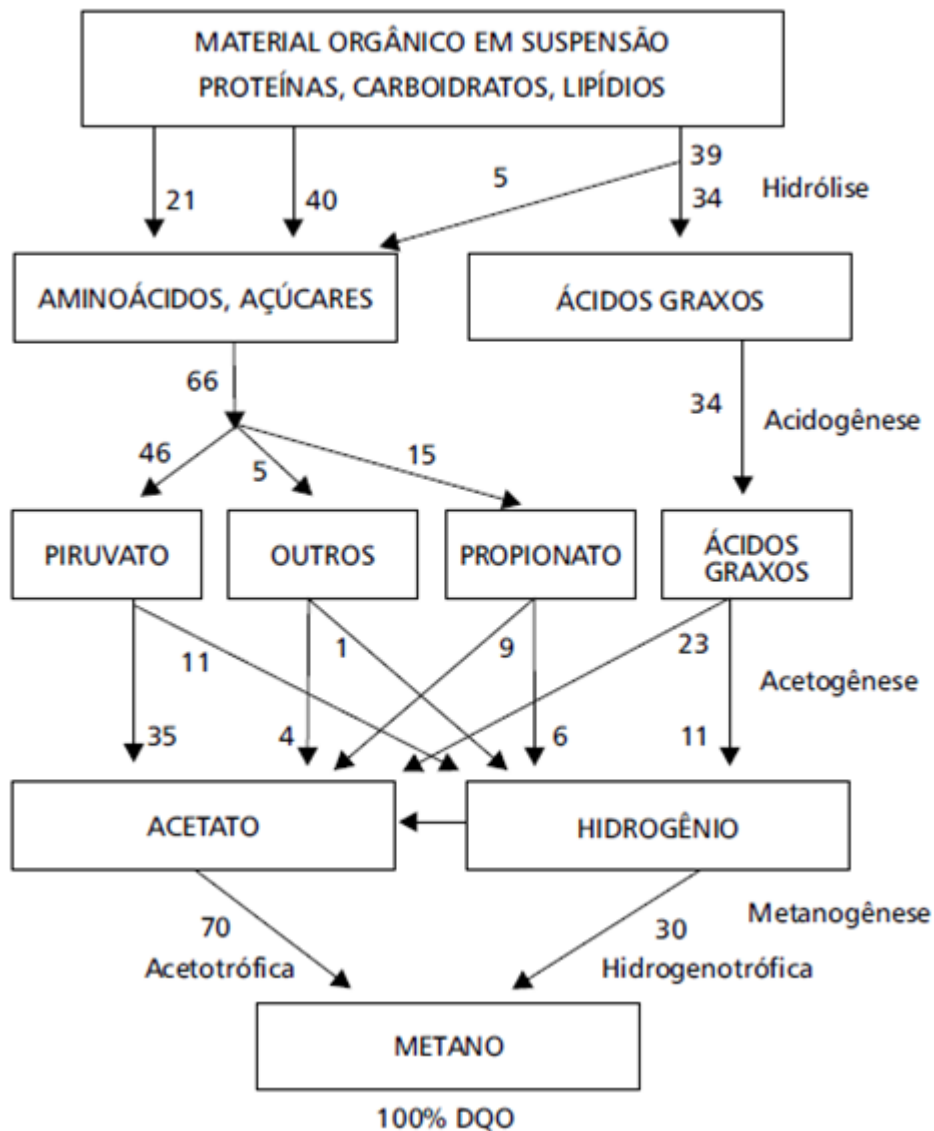
3.1.1. A digestão anaeróbia de substratos de alta concentração

O processamento anaeróbio pode ser considerado um ecossistema onde uma grande variedade de grupos de microrganismos se interagem durante a conversão de matéria orgânica complexa nos produtos finais mais simples (CHERNICHARO, 2008).

Chernicharo (2008) explica que, embora a digestão anaeróbia geralmente ser considerada como um processo de duas fases, ela pode ser subdividida em várias vias metabólicas, com a participação de diversos grupos de microrganismos.

Estes possuem características e funções específicas que, e seu comportamento fisiológico pode ser observado na Figura 1.

Figura 1 – Etapas da produção de metano por meio da digestão anaeróbia



Fonte: adaptado de Speece (1996)

Destaca-se uma das etapas mais significativas desta rota metabólica apresentada: a acetogênese. A produção de acetato, principal precursor da formação do biogás, principalmente metano, é considerada um passo limitante do processamento anaeróbio, em que cerca de 70% dos orgânicos complexos são convertidos em metano através da via acetogênica. Esta tese utilizou-se de dados referentes à conversão de acetato em metano para a elaboração do modelo hidro-bioquímico.

Nesta seção são apresentados os trabalhos científicos que contribuem com o estado da arte do processamento anaeróbio da vinhaça de cana-de-açúcar.

Pinto (1999) apresentou a tendência brasileira sobre o tratamento biológico da vinhaça, principalmente a utilização dos processos anaeróbios. Além desta constatação o autor avaliou a potencial utilização do metano contido no biogás como combustível, uma vez que este é um combustível proveniente de fonte renovável.

Este autor apresentou dados de experiência que alcançaram sucesso no tratamento anaeróbio em escala piloto, com eficiências de remoção de até 95% de matéria orgânica, em termos de demanda química de oxigênio (DQO). Já reatores em escala real, implantados em refinarias de cana-de-açúcar, a eficiência de remoção de DQO alcançada pelo autor foi de até 85% e biogás com proporção de 70% de metano. Uma importante constatação neste processo investigativo do tratamento da vinhaça foi a melhoria da qualidade da vinhaça como fertilizante lançado na lavoura. O autor concluiu de que a vinhaça previamente processada de forma anaeróbia possuía potencial fertilizante mais do que a vinhaça *in natura*. Isto se deve à presença de nitrogênio em maior disponibilidade, pH de lançamento na faixa de 6,5 a 7,0² e redução da matéria orgânica (PINTO, 1999).

Um exemplo de tratamento em escala real é o reator UASB na Usina São Martinho, localizada em Pradópolis-SP, em que a tecnologia utilizada é um exemplo de aplicação em escala industrial, visto que ainda são escassas as usinas que promovem tratamento biológico de vinhaça.

O reator UASB da Usina São Marinho é operado em condições termofílicas (55 a 75 °C), possui volume de 5200 m³, com dimensões de 34 m de diâmetro e 6 m de altura. Este reator anaeróbio foi projetado para operar com carga orgânica volumétrica (COV) de 21 kg DQO m⁻³ dia⁻¹, com uma vazão de 170 m³ h⁻¹.

² A vinhaça *in natura* possui característica ácida e, segundo Rocha (2012), o pH deste efluente possui valor médio de 4,6. Outros autores reportaram valores tão baixos quanto 3,5 (WILKIE; RIEDESEL; OWENS, 2000)

Na literatura científica são encontrados trabalhos relacionados ao processamento anaeróbio da vinhaça em diferentes configurações e tipos de reatores em escala de laboratório e piloto.

Algumas destas pesquisas podem ser citadas, como:

- Gonzalez et al. (1998) alcançaram uma remoção de 78% de DQO no processamento de vinhaça em reator UASB em escala de laboratório;
- Nandy, Shastry e Kaul (2002) obtiveram eficiências de remoção de até 70% de DQO em reator anaeróbio de filme fixo em escala real (4500 m³). A proporção de metano no biogás foi de 62% e o tempo de detenção hidráulica (TDH) de 9 dias.
- Viana (2006) investigou o desempenho de um reator UASB no tratamento anaeróbio de vinhaça submetido a um progressivo aumento de carga orgânica em condições termofílicas. Foram obtidos 83% de eficiência na remoção de DQO operado com COV de 3,50 kg DQO m⁻³ dia⁻¹;
- Fernandez et al. (2008) alcançaram eficiências superiores a 80% na remoção de DQO com COV de 5 kg DQO m⁻³ dia⁻¹;
- Siqueira (2008) avaliou a degradação de vinhaça em um reator anaeróbio de leito fluidizado (RALF) e obteve eficiência de remoção de 80% de DQO aplicando COV de 19,87 kg DQO m⁻³ dia⁻¹;
- Cabello, Scognamiglio e Terán (2009) operaram um RALF em escala piloto e alcançaram eficiência de 57,1 % em termos de remoção de DQO, para COV de 19,5 kg DQO m⁻³ dia⁻¹ e o TDH de 1 dia;
- Döll e Foresti (2010) analisaram o efeito da aplicação do bicarbonato de sódio no desempenho de um reator anaeróbio operado em batelada sequencial com biomassa imobilizada processando vinhaça. A eficiência de remoção da DQO variou de 43 a 78% a 55 °C e de 75 a 85% a 35 °C. A suplementação de bicarbonato mostrou-se essencial para a estabilidade do processo;
- Brown et al. (2011) obtiveram remoções entre 86 e 96% em termos de DQO no processamento da vinhaça em reator UASB de 20 litros (escala piloto);
- Rocha (2012) analisou o efeito do ré-tratamento da vinhaça com polímero à base de cálcio no processamento da vinhaça em reator UASB de 1,5 litros (laboratório). O autor analisou também o processamento sem pré-tratamento. A

COV aplicada em ambas configurações (com e sem pré-tratamento) foi de 5,0 kg DQO m⁻³ dia⁻¹ e o TDH médio foi de 36 h. Para o reator sem pré-tratamento alcançou-se eficiências médias de remoção de DQO de 77,5 até 82,9% e para o reator com pré-tratamento observaram-se eficiências de 77 a 79%, sendo que o reator apresentou falha ao final do experimento e a eficiência reduziu para 33,7%. Tal fato foi vinculado ao efeito inibidor do cálcio nos grânulos do lodo reator UASB.

É possível encontrar na literatura outros trabalhos relacionados ao processamento anaeróbio de vinhaça de cana-de-açúcar. Além destes trabalhos, outros relacionados ao tratamento biológico de outros tipos de vinhaça também podem ser encontrados. Estas vinhaças podem ser, por exemplo, de milho, beterraba, uva e agave.

Vale ressaltar o trabalho de Moraes et al. (2014), em que foi analisado o processamento anaeróbio da vinhaça de cana-de-açúcar no Brasil sob a perspectiva energética, ambiental e econômica. Os autores salientaram o potencial energético da queima do metano para geração de energia elétrica, em que, uma única usina é capaz de suprir energeticamente uma cidade de 130 mil habitantes. Os autores ressaltaram que toda a economia gerada no uso do biogás cobriria os custos de operação de uma planta de tratamento anaeróbio.

3.1.2. Hidrodinâmica de reatores

Os reatores UASB comumente são utilizados no tratamento de efluentes domésticos e industriais, principalmente em países de clima tropical, e cada vez mais esta tecnologia é adotada no tratamento de efluentes. Devido a este aumento tornou-se necessário melhor entendimento do comportamento hidrodinâmico e bioquímico destes reatores.

Esta necessidade de compreensão dos fenômenos inerentes ao processamento anaeróbio, a abordagem atual do problema, na maioria das vezes, foca-se no ponto de vista da eficiência de remoção de matéria orgânica, sólidos e outros parâmetros de interesse. Desta forma a hidrodinâmica de um reator UASB é enxergada como uma “caixa preta” e sabe-se que um fluxo com o mínimo possível de anomalias, como curtos-circuitos, recirculação interna e caminhos preferenciais, contribui para o melhor desempenho no tratamento anaeróbio.

Uma ferramenta útil para caracterização da hidrodinâmica de reatores é a determinação da curva de distribuição do tempo de residência (DTR). A DTR pode ser utilizada para descrever o comportamento real de um reator, indicando a ocorrência de anomalias e até quantificando-as. Estas ocorrem com frequência em reatores em escala real e este entendimento pode levar o projetista a tomar decisões que venham a minimizar estas anomalias (LEVENSPIEL, 1999). Estas curvas permitem as anomalias do escoamento como zonas mortas, caminhos preferenciais e curtos-circuitos. Portanto, um benefício desta ferramenta é a quantificação de anomalias do sistema, que podem levar ao diagnóstico do comportamento hidrodinâmico e, conseqüentemente, ao prognóstico para uma eventual resolução do problema. Desta forma, testes hidrodinâmicos em escalas menores auxiliam ao projetista na identificação e resolução do problema, uma vez que unidades em escala plena que apresentem problemas demandam elevado custo de um eventual reparo.

As curvas DTR indicam qual o tempo de permanência de moléculas individuais de um fluido que transcorre um recipiente (reator). Estas curvas são comumente obtidas em ensaios de estímulo-resposta, nos quais uma perturbação é gerada na corrente afluenta ao reator e a resposta desta perturbação é medida no efluente. Desta forma, uma resposta temporal é obtida e, após análise, pode servir como objeto de caracterização hidrodinâmica do reator.

A perturbação a ser ocasionada no reator é feita pela injeção de um traçador e este deve possuir as seguintes características (LEVENSPIEL, 1999):

- ser inerte (não-reativo);
- possuir fácil detecção;
- ter propriedades físicas similares ao fluido que alimenta o reator; e
- não ser adsorvido em superfícies.

Os fundamentos da análise hidrodinâmica que serviram de base na condução deste trabalho podem ser encontrados na obra “**Engenharia das Reações Químicas**” de O. Levenspiel, publicado pela Ed. Blucher (1999). Nesta obra o autor contempla os fundamentos da engenharia das reações químicas, e aborda temas como a caracterização das reações e hidrodinâmica de reatores ideais e não-ideais. Também são abordados temas relacionados ao assunto, como as reações catalíticas e não catalíticas e sistemas de reações bioquímicas.

Dois métodos de injeção são classicamente utilizados: pulso e degrau. Neste trabalho foi utilizado o método de injeção por pulso, tanto para os experimentos laboratoriais quanto nas simulações em dinâmica de fluido computacional (DFC).

A utilização da DFC para a previsão do comportamento hidrodinâmico é largamente utilizada em muitas áreas da engenharia, como aeronáutica, química, mecânica, dentre outras. Entretanto, o uso desta ferramenta na modelagem aplicada ao escoamento ainda é incipiente no Brasil.

Em uma pesquisa nos repositórios nacionais foram encontrados alguns (poucos) trabalhos que se utilizam desta técnica, seja na área de tratamento de efluentes, seja em outras áreas da engenharia:

- Daoud (2006) em sua dissertação simulou curvas DTR em um estudo sobre o escoamento e o comportamento de inclusões não-metálicas em distribuidores de lingotamento contínuo de aço. Adicionalmente o autor propôs um novo modelo de obtenção da curva DTR utilizando DFC. O autor concluiu que o novo modelo fornece resultados tão bons quanto os do modelo padrão;
- Coltre et al. (2011) utilizaram a ferramenta DFC para simular os processos de mistura em um reservatório predial e, desta forma, definir o tipo de escoamento e o grau de mistura. Para isso os autores fizeram simulações e as curvas DTR foram utilizadas para analisar o comportamento hidrodinâmico. Os autores concluíram que o reservatório possui comportamento próximo ao de mistura completa. Adicionalmente, os autores analisaram diferentes tipos de malhas para o reservatório digital e concluíram que malhas refinadas não apresentaram resultados melhores do que malhas com menos refinamento;
- Passos (2012) avaliou a hidrodinâmica de duas lagoas de estabilização situadas no aeroporto de Confins-MG, comparando os resultados experimentais do uso de traçadores nas lagoas com os das simulações realizadas em DFC. Destas simulações, o autor comparou o comportamento dos traçadores reais com os padrões de escoamento obtidos nas simulações, assim como a produção de curvas DTR, obtidas tanto em escala real quanto em simulações em DFC. O autor identificou significativa similaridade entre os resultados experimentais e simulados, além de disponibilizar a equação de pulso utilizada em DFC;

- Cruz et al. (2016) estudaram a influência de quatro diferentes configurações de na entrada de um reator UASB (uma entrada na base; duas entradas na base; duas entradas opostas na parede lateral; e três entradas em uma face da parede do reator) por meio de estudos com dinâmica de fluidos computacional. Foram realizadas simulações bi (2D) e tridimensionais (3D), e estas diferenciam-se na apresentação de linhas de corrente na forma espacial (3D) e na possibilidade de quantificar o volume das regiões de zonas mortas (3D). Os autores calcularam a porcentagem de zonas mortas para cada um dos quatro tipos e concluíram que a melhor configuração dentre as diferentes entradas foi a relativa a três entradas, pois indicou um melhor grau de mistura na manta de lodo, mesmo apresentando um volume ligeiramente maior de zonas mortas.

Ficou evidente a carência de trabalhos científicos nacionais que envolvam a simulação de curvas DTR em DFC. Além disso, o uso desta ferramenta para uso específico no tratamento de efluentes é ainda mais escassa.

A literatura internacional possui uma quantidade maior de trabalhos publicados que abordam o uso de curvas DTR em DFC nos mais variados temas e configurações experimentais. Pode-se citar alguns destes trabalhos, como:

- Partwardhan (2001) e Choi et al. (2004) analisaram a distribuição do tempo de residência em um tanque de mistura comparando os resultados simulados com os resultados reais. Os autores concluíram que as predições do modelo em DFC foram válidas e se aproximaram dos resultados reais;
- Aubin et al. (2009) analisaram os efeitos da DTR e do coeficiente de dispersão axial de fluidos Newtonianos e não-Newtonianos em microcanais. Neste caso realizaram apenas simulações em DFC e concluíram que os microcanais deveriam ser projetados com baixas proporções de largura:comprimento para coeficientes de dispersão axial reduzidos;
- Sierra-Pallares et al. (2009) estudaram a influência do tempo de detenção hidráulica (TDH) na síntese de nanopartículas de dióxido de titânio, em particular os diâmetros das partículas produzidas. Para isso, compararam os resultados reais com os obtidos nas simulações em DFC. As curvas DTR auxiliaram no cálculo do TDH e, ao final, os autores comentam que seu estudo

proveu um modelo matemático capaz de prever o tamanho médio de partículas obtidas por meio da decomposição química de um organometálico precursor de um fluido supercrítico;

- Brannok, Wang e Leslie (2010) realizaram uma caracterização de biorreatores de membrana em escala real. Para isso foram feitas modelagens em DFC e validação experimental, e as curvas DTR serviram de auxílio na avaliação do comportamento hidrodinâmico dos reatores;
- Ding et al. (2010) estudaram a otimização de um reator de tanque agitado contínuo (CSTR) para produção de biohidrogênio. Foram realizadas análises do efeito de diferentes tipos de paletas de agitação no comportamento hidrodinâmico. Os autores utilizaram cloreto de lítio como traçador em uma injeção do tipo pulso e na comparação entre os resultados experimentais e os simulados, obtiveram consistência entre eles. As paletas otimizadas resultaram, como esperado, em uma mistura mais eficiente;
- Salem, Okoth e Thoming (2011) avaliaram alternativas para a melhoria da separação sólido-líquido em decantadores de placas inclinadas por meio de simulações em DFC e validação experimental. Para avaliar as melhorias, os autores conduziram ensaios com traçador cloreto de potássio e curvas DTR foram obtidas tanto nas simulações quanto nos ensaios reais. Os autores chegaram ao resultado mais próximo do real com o uso de modelo de turbulência $k-\omega$;
- Kalaga et al. (2012) obtiveram sucesso na predição do comportamento hidrodinâmico de dois reatores de leito fluidizado de múltiplo estágio com mistura axial, sendo um com leito fluidizado convencional e outro com circulação em múltiplo estágio. Os autores avaliaram a interação sólido-líquido durante os experimentos em ambos os reatores. Os sólidos avaliados foram resina (densidade de 110 kg m^{-3}) e contas de vidro (densidade de 2500 kg m^{-3});
- Simcik et al. (2012) propuseram uma modificação no método de obtenção da curva DTR, chamada *Smart RTD*. Para isso foi retirado o termo de difusão e adicionado um termo que permite o cálculo da idade da partícula do traçador e localização instantânea no espaço-tempo. Os autores concluíram que esta modificação satisfaz a construção da curva DTR, tanto experimentalmente

quanto na simulação em DFC. Concluiu-se que esta é uma alternativa viável ao método tradicional de determinação da curva DTR;

- Alvarado et al. (2013) investigaram uma configuração ótima de aeradores em lagoas de estabilização em escala real com auxílio de DFC. Foram analisadas variações na quantidade de aeradores em operação em uma lagoa facultativa em Cuenca (Equador) em termos de grau de mistura. Foram avaliados os vetores velocidade e a curva DTR simulada em DFC. Os autores concluíram que a operação contínua de 6 a 8 aeradores produz melhores resultados do que a operação intermitente de 10 aeradores, como era feito na época da pesquisa. Com isso eles também concluíram que esta forma de operação acarretaria em redução do consumo de energia elétrica demandada pelos aeradores.

3.1.3. Dinâmica de fluidos computacional

A dinâmica de fluidos computacional (DFC) ou *Computational Fluid Dynamics* (CFD) é uma ferramenta computacional empregada para prever ou analisar fenômenos físicos ou físico-químicos que ocorrem em escoamentos de fluidos dentro de um volume de controle. Estes fenômenos podem ser relacionados com a ação e a interação de fatores como dissipação, difusão, convecção, interações com superfícies, condições de contorno e turbulência. Programas de simulação em DFC começaram a ser desenvolvidos no início dos anos 1990, juntamente com o desenvolvimento de algoritmos matemáticos complexos, e exigiam poderosos computadores. Também era necessário conhecimento profundo da dinâmica de fluidos e grande quantidade de tempo para realizar as simulações.

Em consequência das limitações da época, a DFC permaneceu por algum tempo uma ferramenta utilizada quase exclusivamente em pesquisas. Os recentes avanços tecnológicos, principalmente relacionados à capacidade de processamento computacional e gráfico, resultaram na criação de modelos de DFC que permitem análises dos resultados com menos esforço e tempo. Atualmente, modelos avançados contêm algoritmos que permitem soluções robustas de escoamento de fluidos em tempo razoável. A partir do século XXI, a DFC se expandiu amplamente no setor comercial, como observa Shilton (2001), devido ao:

- crescimento acelerado da potência dos computadores;

- desenvolvimento de pacotes de DFC disponíveis comercialmente, desenvolvidos para aplicação flexível em qualquer problema de escoamento; e
- aumento da disponibilidade de interfaces amigáveis de DFC para definição e análise do problema.

Vários são os problemas de engenharia que podem ser analisados e pesquisados pela DFC. Abaixo cita-se alguns temas e sua área de aplicação:

- Engenharia Aeronáutica: aerodinâmica de aviões, turbinas e asas;
- Engenharia Química: reatores, geração de energia e transferência de calor e massa;
- Engenharia Mecânica: sistemas automotivos, motores e fluidos lubrificantes;
- Engenharia Ambiental: dispersão de poluentes no solo, na atmosfera e em corpos d'água, hidráulica e saneamento.

Apesar de ser utilizada de forma predominante nas áreas supracitadas, a DFC também supre necessidades em outras áreas, tais como a medicina (fluxo do sangue nos vasos sanguíneos) e até mesmo nos esportes (corrida automobilística, natação e ciclismo).

A DFC é hoje uma ferramenta consistente, ajuda na redução de tempo no entendimento e análise de problemas e processos de engenharia e ciências correlatas de todo o mundo.

Existem no mercado vários programas computacionais de DFC, a maioria licenciado e comercial. Dentre estes, destaca-se o pacote *Ansys[®] Workbench*, que inclui os *software CFX[™]*, *Fluent[™]* e os programas de análise de criação de malhas (*Mesh[™]*), resolução dos cálculos e análise pós-processamento. Pode-se citar também outros programas comerciais de DFC, como o *Autodesk CFD*, *Solidworks CFD* e o *COMSOL Multiphysics*. Como exemplo de *software* livre pode-se citar o *OpenFOAM*. Neste trabalho será utilizado o pacote *Ansys[®] Workbench* juntamente com o *CFX[™]*.

3.1.4. Aplicações de DFC em reatores anaeróbios

Os principais mecanismos de remoção de poluentes em um reator UASB são de natureza biológica, em que os microrganismos presentes no reator degradam a matéria orgânica do efluente. Entretanto, apesar de o tratamento ser essencialmente biológico, a remoção ocorre associada a parâmetros físicos e pode-se, potencialmente, alcançar maiores eficiências de remoção ajustando estes parâmetros. Uma característica básica de reatores UASB é a sua configuração interna que permite uma separação das três fases (sólida, líquida e gasosa) componentes do escoamento interno. Realizar ajustes neste sistema separador e em outras características, como volume e geometria, culminaria em uma melhoria do escoamento.

Mesmo que bastante discutido e consolidado na literatura, o comportamento hidrodinâmico de reatores UASB é descrito de forma simplificada, tanto em projetos, quanto nas avaliações de desempenho. O equacionamento das variáveis envolvidas no processamento e as relações no escoamento do fluido é complexo e muitas vezes inviável do ponto de vista de tempo e esforço (PASSOS, 2012). Além disso, o sistema hidráulico dos reatores geralmente é descrito como se fosse uma “caixa preta”, sem análises de fluxo no seu interior.

Desta forma, a DFC apresenta-se como uma ferramenta de grande potencial de ser aplicada na modelagem destes fenômenos, predizendo o comportamento do fluido em reatores e possibilitando análises diversas. O *output* (saída dos resultados) das simulações em DFC dá ao projetista ou pesquisador um “olhar interno” sobre o comportamento hidrodinâmico do reator, permitindo observar como o fluido se move. Conforme mencionado, isto contrasta com as simplificações inerentes à abordagem da “caixa preta”, presente na maioria dos estudos tradicionais.

Além de investigar a hidrodinâmica do fluido no interior do reator, a simulação em DFC pode servir de ferramenta auxiliar na modelagem mais completa do processamento anaeróbio, incluindo, além da hidrodinâmica, processos bioquímicos. Entretanto, para utilização segura desta abordagem em projetos, são necessárias mais pesquisas sobre a validação desta forma de modelar estes reatores (SHILTON; GLYNN; PHELPS, 1999).

São listados a seguir alguns estudos de reatores, não necessariamente UASB, envolvendo DFC:

- Generalis e Glover (2005) utilizaram a DFC para modelar reações bioquímicas em reatores tubulares de coluna borbulhante, com relação

comprimento:diâmetro de 20:1. Os autores estudaram a influência do crescimento da biomassa na concentração de sólidos e na produção de ácido cítrico pelo fungo *Aspergillus niger* na hidrodinâmica do reator;

- Latha, Borman e Sleight (2009) avaliaram a modelagem multifásica em DFC da mistura de gás em um digestor anaeróbio. O objetivo da pesquisa foi obter melhor entendimento e otimização da mistura de bolhas em reatores, para melhorar o desempenho da produção de hidrogênio;
- Ren et al. (2009) compararam os resultados de dois reatores UASB na produção de hidrogênio (escala de laboratório) e na produção de metano (escala real), com as simulações feitas em DFC. De forma complementar, os autores desenvolveram um modelo baseado no conceito de CSTRs, denominado *increasing-size CSTRs* (ISC), para descrever a hidrodinâmica destes reatores. Os resultados das simulações confirmaram a descontinuidade na mistura ao longo dos reatores UASB;
- Lima, Neto e Lima (2011) desenvolveram um estudo teórico e experimental para avaliar o comportamento dos fluidos de um reator UASB em escala piloto, tratando efluente doméstico. O estudo teórico foi realizado com o uso do *software CFX™*, específico de fluidodinâmica computacional. Os resultados das simulações foram comparados com medições experimentais da pressão e concentração de sólidos na saída do reator. Estas comparações apresentaram algumas diferenças, mas a concordância entre os valores foi considerada satisfatória;
- Cruz et al. (2012) utilizaram a DFC para o estudo da hidrodinâmica de um reator UASB em escala piloto, considerando um escoamento bifásico, sendo uma fase líquida outra sólida. Os resultados das simulações foram comparados com os dados obtidos experimentalmente. Os resultados das simulações permitiram a detecção de caminhos preferenciais e a formação de vórtices, admitindo a comparação com os ensaios experimentais do tipo estímulo-resposta;
- Hao e Shen (2012) avaliaram, com uso de DFC, a eficiência de separação de sólidos, líquido e gás em reatores UASB, aplicando diferentes velocidades ascensionais, utilizando um modelo *euleriano* multi-fluido. O comportamento dos fluidos no separador trifásico do reator UASB apresentaram o efeito previsto

de separação nas simulações e uma boa concordância com os dados experimentais, obtendo-se um erro relativo de 8%;

- Cruz (2013) realizou um estudo hidrodinâmico computacional de um reator UASB em escala de bancada com validação experimental. Os ensaios foram realizados com água simulando esgoto sanitário, injeção de ar no fundo para simular o efeito do biogás na digestão anaeróbia e com polímero absorvente de água simulando o lodo. Analisou-se o comportamento hidrodinâmico do reator, particularmente a ocorrência de zonas mortas e os resultados foram comparados com o simulado em DFC, obtendo consistência entre eles;
- Gaden (2013) investigou a inserção de uma arquitetura multidimensional ao modelo ADM1 (*Anaerobic Digestion N^o1*) por meio de DFC. Esta foi uma contribuição importante, uma vez que o ADM1 não considera o efeito de uma hidrodinâmica diferente da mistura completa na digestão anaeróbia. Entretanto, o modelo resultante opera apenas em condições limitadas, como a baixa densidade de malha, baixos gradientes de velocidade, baixos gradientes de concentração e um modelo numérico bioquímico estável;

Apesar da carência de mais pesquisas sobre o uso de DFC em processamento anaeróbio, pode-se citar alguns pontos importantes ao analisar os trabalhos supracitados, principalmente os resultados obtidos por Gaden (2013). Apesar dos avanços na capacidade de processamento computacional, a inclusão dos modelos matemáticos da digestão anaeróbia na linguagem de DFC ainda é um empecilho na modelagem conjunta de hidrodinâmica e bioquímica (hidro-bioquímica). Gaden (2013) obteve sucesso neste tipo de simulação para as condições acima citadas e para um pequeno volume de controle, o que torna a previsão do processamento anaeróbio, em termos hidro-bioquímicos, (ainda) inviável.

Por outro lado, tais constatações não impedem o contínuo interesse em desenvolver métodos que auxiliam nestas previsões, mas incentivam a busca por modelagens mais simples e factíveis. Esta dificuldade serviu de inspiração na construção da modelagem proposta neste trabalho.

3.1.5. Modelagem matemática do processamento anaeróbio

A digestão anaeróbia é um processo biológico no qual diferentes grupos e tipos de microrganismos promovem, na ausência de oxigênio, a conversão de compostos orgânicos em produtos mais simples, como os gases metano e carbônico. Este processo é complexo, composto por várias reações que ocorrem em etapas sequenciais e de forma simultânea, cada uma com seu grupo de microrganismo específicos. Em termos do metabolismo anaeróbio, os microrganismos envolvidos são as bactérias e as arqueias.

Os sistemas anaeróbios são sensíveis às condições de operação, que podem ser: excesso ou baixo teor de carga orgânica, presença de inibidores ou controle inadequado da temperatura. A instabilidade é, geralmente, evidenciada com a queda de eficiência de remoção de matéria orgânica, geração de metano, do pH, arraste de sólidos e aumento de ácidos orgânicos voláteis (AOV). O monitoramento constante destes parâmetros torna-se essencial para que se tenha controle do processo e para que sirvam de subsídio na gestão dos sistemas de tratamento anaeróbio.

O termo controle deve ser entendido como malhas de controle em sistemas de tratamento com medições constantes *on line* ou como associações de procedimentos de monitoramento (QUEEN, 2006).

As técnicas de monitoramento no tratamento de efluentes geralmente são limitadas a métodos que permitem medições frequentes a um custo razoável. Pode-se citar os parâmetros pH, vazão do afluente e efluente, produção e pressão de gás como exemplos de análises menos (*on line*) dispendiosas, mas importantes no controle do processo. Alcalinidade, DQO, DBO (demanda bioquímica de oxigênio) e AOV são parâmetros, na maioria das instalações de tratamento de efluentes, determinados *off line*, em laboratórios, mas a tendência é torná-los disponíveis *on line* (BERNARD et al., 2003).

A modelagem do processamento anaeróbio utiliza estes e outros parâmetros para reproduzir matematicamente o comportamento de um reator anaeróbio ou pelo menos a interação entre substrato (efluente) e biomassa (microrganismos).

Os primeiros modelos se baseavam na cinética microbiológica e, desta forma, baseavam-se nos modelos de crescimento celular e do consumo de substrato. Dentre os principais modelos, é importante constatar que houve uma natural evolução destes e, conseqüentemente, um aumento da complexidade. Destes principais modelos, pode-se citar:

- Andrews (1968): este modelo centrava apenas na etapa limitante do processo anaeróbio, a metanogênese a partir do acetato, em que esta etapa possui o grupo de microrganismos (arqueas) mais sensível. Na taxa de crescimento da biomassa, Andrews incluiu também a inibição do crescimento por excesso de ácido acético, para conseguir prever a instabilidade do processo, devido a um pH baixo;
- Hill e Barth (1977): durante um longo período de operação, o passo limitante nem sempre será o mesmo. Os autores, então, propuseram um modelo um pouco mais elaborado, em que foram consideradas duas etapas: acidogênica e metanogênica. Também foram considerados os subprodutos da hidrólise de material orgânico insolúvel como substrato das bactérias acidogênicas. Neste modelo também foi considerada a inibição por ácidos nas taxas de crescimento das bactérias acidogênicas e das arqueas metanogênicas. Por fim, os autores modelaram o efeito inibitório da amônia nas arqueas.
- Mosey (1983): este autor propôs um modelo com cinco grupos de microrganismos: um de bactérias acidogênicas, dois de bactérias acetogênicas (a partir do propionato e butirato) e dois de arqueas metanogênicas (a partir do acetato e do hidrogênio). Foram incluídas duas formas de inibição: pH (quando o seu valor era abaixo de 6) e por pressão parcial de hidrogênio.
- Costello, Greenfield e Lee (1991): Baseado na modelagem proposta por Mosey (1983), os autores consideraram seis grupos de microrganismos: dois acidogênicos (consumidores de glicose e lactato), dois acetogênicos (consumidores de propionato e butirato) e dois metanogênicos (consumidores de hidrogênio e acetato). Foram incluídas três formas de inibição: por pH (todos os grupos) e por hidrogênio e produtos (grupos acidogênicos e acetogênicos).
- Angelidaki, Ellegaard e Ahring (1993): o modelo proposto por estes autores considera as seguintes etapas da digestão anaeróbia: hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese. A principal contribuição deste trabalho foi a constatação de que a amônia agia não só como inibidora, mas também como regulador do processo anaeróbio.
- Angelidaki, Ellegaard e Ahring (1999): pela primeira vez um modelo propôs a caracterização do substrato complexo em proteínas, lipídeos e carboidratos. Após considerar a hidrólise destes compostos complexos, os processos

biológicos são divididos em oito grupos de microrganismos: acidogênicas, lipolíticas, acetogênicas, acidogênicas, acetogênicas (propionato), acetogênicas (butirato), acetogênico (valerato) e metanogênicas.

- Batstone et al. (2002): a *International Water Association* (IWA) propôs a padronização dos modelos de digestão anaeróbia e, em 2002, publicou um modelo genérico, o *Anaerobic Digestion Model N°1* (ADM1), que pode ser aplicado em variados processos. O modelo incluiu duas etapas extracelulares, cinco grupos de bactérias, dois grupos de arqueas, processos físico-químicos e funções de inibição por pH em todos os grupos de microrganismos, amônia livre no grupo metanogênico (arquea) e hidrogênio nos acetogênicos (bactérias). De forma complementar, foram adicionadas duas funções de regulação do processo: inibição por falta de nitrogênio inorgânico e competição entre valerato e butirato pelo mesmo grupo de bactérias.

A partir do ADM1, propositalmente genérico, outros modelos modificaram sua estrutura para uma adaptação em determinadas situações ou uma proposta de um modelo numérico que resulte em simulações mais estáveis e convergentes. Destes trabalhos, pode-se citar:

- Ramirez et al. (2009) propuseram uma pequena modificação no ADM1 para simular a digestão anaeróbia, na faixa termofílica, de lodos de tratamento aeróbio previamente tratados termicamente. Os autores definiram que a consideração de que a etapa de hidrólise segue uma cinética de primeira ordem nem sempre é verdadeira, sendo necessário considerar a lenta degradação dos materiais complexos. Foi adicionado o modelo de Contois para as etapas de desintegração e hidrólise no lugar da cinética de primeira ordem. Também foi integrada uma função de Hill, para modelar a inibição por amônia nas metanogênicas acetoclásticas, no lugar da função não-competitiva. O modelo foi validado com resultados experimentais;
- Galí et al. (2009) modificaram o ADM1 para aplicação em efluentes de processos agrícolas (maçã, pêra, laranja, bagaço, girassol, esterco de porco e glicerol). Esta modificação proposta centrou-se em considerar a etapa de desintegração como limitante. Ao final, os dados simulados foram comparados com dados reais e foram obtidas correlações satisfatórias;

- Hinken et al. (2014) avaliaram e propuseram um modelo modificando o ADM1 para tratamento anaeróbio de efluente à base de amido de trigo e efluente sintético (glicose) em reatores UASB em escala de laboratório. Os autores incluíram expressões que modelam a fermentação de ácido láctico no ADM1, que contém a produção e degradação de lactato e uma função de inibição não competitiva desde parâmetro. Os resultados experimentais e simuladores apresentaram correlação satisfatória, principalmente em relação à produção de biogás e concentração de matéria orgânica no efluente (em termos de DQO).
- Lohani et al. (2016) modelaram o tratamento de esgotos domésticos através do ADM1. Os autores compararam parâmetros monitorados (DQO total e solúvel efluente, pH e produção de biogás) de um reator UASB de 250 litros operando durante 120 dias com os resultados obtidos no modelo ADM1. Os autores concluíram que o modelo fornece uma boa estimativa da realidade e que este poderia ser utilizado de forma viável em análises do desempenho no tratamento anaeróbio de efluentes domésticos, além de fornecer importantes dados de projetos e dimensionamento de sistemas de tratamento de pequena escala em áreas rurais. Os autores compararam os resultados do modelo com uma estação de tratamento de esgotos doméstico da Universidade de Kathmandu contendo um reator UASB de 4 m³, operando com um TDH de 6 horas e produzindo uma vazão média de 1,7 m³ d⁻¹ de biogás.

Os modelos mais complexos buscam uma melhor representação dos processos anaeróbios, entretanto, são mais difíceis de se aplicarem, devido à dificuldade de determinação experimental de alguns coeficientes, como taxas de degradação de cada subproduto da digestão anaeróbia, constantes de saturação, taxas de decaimento de substrato e biomassa, constantes de inibição e outros. Por conseguinte, a utilização de modelos, mais ou menos complexos, deve ser feita de forma controlada e seus fatores intervenientes devem ser bem desenvolvido e modelados.

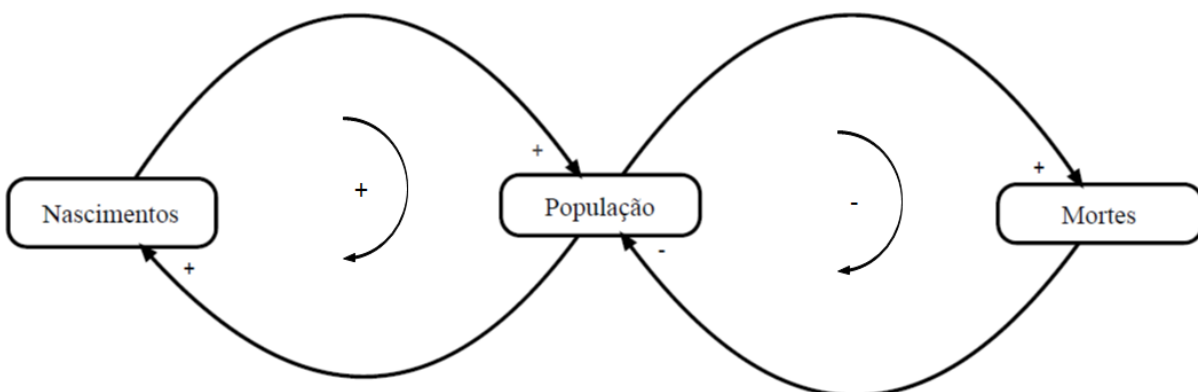
Para este trabalho foram considerados modelos de degradação anaeróbia do acetado baseados em Andrews (1968) e Batstone et al. (2002) (ADM1), principalmente as expressões e os coeficientes cinéticos. Estes valores e expressões serão apresentados na seção Resultados.

3.1.6. A Dinâmica de Sistemas como ferramenta de modelagem de processos ambientais

A Dinâmica de Sistemas foi desenvolvida em 1961 por Jay Wright Forrester, professor do *Massachusetts Institute of Technology* (MIT) como um conjunto de ferramentas e uma abordagem de auxílio na tomada de decisões em indústrias, consolidada na obra “*Industrial Dynamics*”. Forrester desenvolveu uma teoria para simular sistemas complexos, não-lineares, que contenham retro-ações (*feedback loops*)³. Os primeiros problemas industriais abordados foram flutuação de estoques, instabilidade da força de trabalho e queda na participação de mercado (CORBETT, 2007).

Parte fundamental para o desenvolvimento e entendimento do modelo, os diagramas de ciclo causal representam os elementos de um sistema de relação entre eles. Estes diagramas utilizam linguagem de elos fechados (*loops*) que permitem ao usuário expressar palavras e setas o seu entendimento do problema. As interligações das variáveis mostram o caráter entre cada par de conceitos e buscam a resolução de problemas. Um exemplo deste diagrama pode ser observado na Figura 2, onde são expostas as relações entre as variáveis “Nascimentos”, “População” e “Mortes”.

Figura 2 – Exemplo de representação das relações entre população, nascimentos e morte



Na figura anterior, a variável “População” é afetada pelas variáveis “Nascimentos” e “Mortes”. No primeiro *loop*, o sinal positivo indica que quantos mais nascimentos, maior será a população e que quanto maior a população, maior o número de nascimentos, ou seja, um

³ Sequência circular de causas e efeito. Isto ocorre quando uma variável X afeta outra variável Y, que por sua vez afeta X.

feedback positivo. No segundo *loop*, o sinal positivo indica que quanto mais nascimentos, maior o número de mortes e o sinal negativo indica que quanto mais mortes, menor será a população, ou seja, um *feedback* negativo.

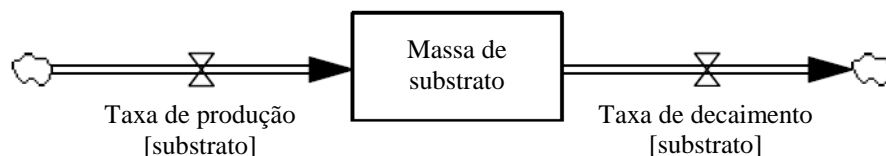
Segundo Batista (2001), a Dinâmica de Sistemas tenta prover ao usuário um entendimento da estrutura básica de um sistema e, assim, entender o comportamento que ele pode produzir. Muitos destes sistemas e problemas que são analisados podem ser desenvolvidos como modelos e serem implementados em uma linguagem computacional.

A Dinâmica de Sistemas aproveita o fato de que um modelo computacional, mesmo de grande complexidade, é capaz de realizar cálculos que a mente humana não seria capaz de fazer e entender. Para o desenvolvimento destes modelos computacional existem no mercado vários *software*, como: *Dynamo*, *Powersim*, *Stella* e *Vensim*.

O *software* Vensim PLE[®], adotado neste trabalho para a aplicação da Dinâmica de Sistemas, é distribuído gratuitamente pelos desenvolvedores e pode ser utilizado livremente para fins acadêmicos. Entende-se como vantagem a adoção deste programa o fato de que a interação *software*/usuário é amigável e de fácil aprendizado, não exigindo do usuário domínio de linguagem computacional, como C ou C++, por exemplo.

O Vensim PLE[®] fornece um modo simples de construir modelos a partir de diagramas causais ou diagramas de estoques e caixas. Os estoques são representados por retângulos, taxas de entrada são representadas por flechas com duas linhas sólidas que apontam para o estoque, as taxas de saída são representadas por flechas com duas linhas sólidas que apontam para fora do estoque. As válvulas controlam as taxas de entrada e saída, e as nuvens representam disponibilidades externas para fornecer ou receber as taxas, como pode-se observar na Figura 3.

Figura 3 – Exemplo simplificado de estoque e caixa para a variável 'substrato'



A descrição matemática de um modelo requer apenas os estoques e suas caixas. Entretanto, para evitar a criação de longas equações, de difícil compreensão, é aconselhável utilizar variáveis auxiliares ou constantes (CORBETT, 2007).

A solução das equações presentes no modelo é obtida por métodos numéricos de integração. Existem vários métodos que podem ser utilizados para a obtenção da solução numérica, e a escolha de qual método adotar é resultado da ponderação entre o tempo gasto na simulação e a precisão da solução. O Vensim PLE[®] oferece duas técnicas de integração para resolução das equações: Euler e Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) (GONÇALVES, 2009). A técnica de integração utilizada nesta tese foi a de Runge-Kutta de quarta ordem.

Apesar de criada em 1961, a ferramenta de Dinâmica de Sistemas ainda não é muito utilizada na análise de sistemas ambientais, principalmente no que concerne o saneamento, especificamente em tratamento biológico. Em pesquisa nos repositórios nacionais e internacionais, foi possível listar alguns poucos trabalhos que abordaram o uso de Dinâmica de Sistemas na modelagem de sistemas ambientais.

- Gonçalves (2009) e Gonçalves e Giorgetti (2013) desenvolveram um modelo numérico para simulação de qualidade da água em rios utilizando o Vensim PLE[®]. O modelo desenvolvido simula 18 variáveis da qualidade da água, bem como o metano e as formas de nitrogênio e fósforo presentes na camada aeróbia e anaeróbia dos sedimentos do rio;
- Ciplak e Barton (2012) analisaram a gestão de resíduos de saúde da Região Metropolitana de Istambul-Turquia através de uma abordagem da Dinâmica de Sistemas. Foram analisados os efeitos da segregação dos resíduos de saúde entre a classificação de doméstico e perigoso, algo que não ocorria na época. Os autores analisaram os benefícios desta segregação a longo prazo e fizeram uma projeção de redução de até dez mil toneladas por ano até 2035;
- Canales e Mendes (2014) utilizaram a Dinâmica de Sistemas para modelar reatores aeróbios em bateladas sequenciais com foco na dinâmica do enchimento e esvaziamento dos tanques de tratamento, considerando grandes variações de vazões ao longo do dia;
- Simonetto et al. (2014) apresentaram um modelo de simulação computacional para avaliação de cenários da reciclagem de resíduos sólidos urbanos (RSU). O modelo objetivou-se como ferramenta de auxílio na gestão dos RSU, bem como na quantificação dos benefícios desta prática. Os autores avaliaram o ganho ambiental do reuso e reciclagem dos RSU e da economia de energia ocasionados pela reciclagem.

Com base na pesquisa bibliográfica aqui apresentada, conclui-se que há uma defasagem do uso de dinâmica de sistemas aplicada ao saneamento, principalmente do âmbito do tratamento biológico de efluentes.

Este trabalho possui dentre seus objetivos o desenvolvimento de modelo de processamento anaeróbio utilizando a ferramenta de dinâmica de sistemas.

4. METODOLOGIA

Os métodos adotados para o desenvolvimento desta tese estão apresentados neste capítulo. Serão abordadas, detalhadamente, a metodologia utilizada em cada etapa deste trabalho, que foi separada, basicamente, em duas: análise hidrodinâmica de reatores por meio de Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC) e modelagem do processamento anaeróbio de substrato por meio de ferramentas de Dinâmica de Sistemas, com ênfase do efeito do pH e da alcalinidade no comportamento do processo. Em ambas as etapas foram realizadas simulações objetivando obtenção de resultados que possibilitassem a compreensão dos fenômenos relacionados ao escoamento e à bioquímica do processo anaeróbio.

4.1. Programas computacionais

Foram utilizados diversos programas computacionais durante o desenvolvimento desta tese, dentre eles: *softwares* de desenho em 3D, construção de malhas, simulação hidrodinâmica, processamento de dados, aquisição de dados experimentais e de dinâmica de sistemas. Todos os programas utilizados estão listados no Quadro 1, juntamente com sua funcionalidade.

Quadro 1 – Programas utilizados no desenvolvimento desta tese

Programa	Versão	Funcionalidade
<i>Ansys® Workbench™</i> (<i>Ansys® Meshing™</i> , <i>Ansys® CFX™ CFX-Solver Manager™</i> e <i>CFD-Post™</i>)	14.0	Desenvolvimento dos modelos em 3D, definição da malha, simulação do escoamento e obtenção das curvas DTR
<i>Microsoft Excel®</i>	2013	Processamento de dados
<i>Go!Link®</i> e <i>Logger Lite®</i>	-	Aquisição de dados experimentais
<i>VenSIM PLE®</i>	6.3	Dinâmica de sistemas

O computador utilizado nas simulações em DFC e em dinâmica de sistemas utilizado nesta tese possuía as seguintes configurações:

- Processador: Intel® Core™ i7-3770 CPU @ 3.40 GHz
- Memória RAM: DDR3 32 Gb
- Disco rígido: Seagate 2000 Gb

4.2. Análise hidrodinâmica de reatores

Nesta seção são descritas as metodologias utilizadas na análise hidrodinâmica de reatores em DFC:

- criação de modelos digitais de reatores UASB baseados em reatores reais;
- realização de testes de independência de malha dos reatores digitais;
- simulação em DFC e caracterização do escoamento não ideal nos reatores UASB;
- obtenção de curvas de distribuição de tempo de residência (DTR) dos reatores UASB simulados;
- validação dos dados simulados com dados reais da caracterização do escoamento em um reator UASB de bancada.

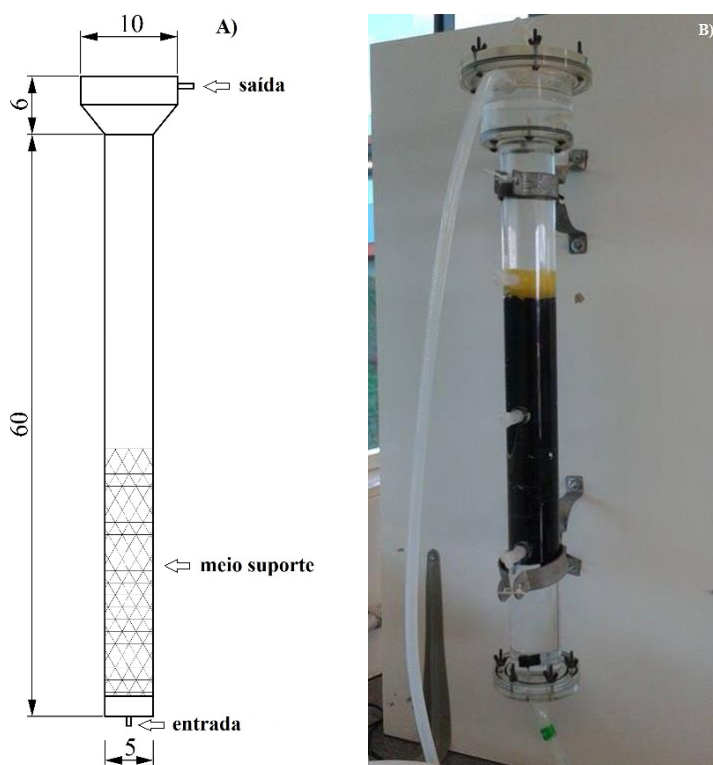
4.2.1. Reatores UASB

A construção digital dos reatores UASB foi baseada nos reatores utilizados por Rocha (2012) e Del Nery (2016), sendo que o primeiro foi projetado em escala de bancada (R1) e o segundo (R2) em escala piloto. Os ensaios hidrodinâmicos do R1 foram realizados no Instituto de Ciências Exatas e Tecnológicas da Universidade Federal do Triângulo Mineiro. O R2 foi instalado e operado no Departamento de Engenharia Hidráulica e Saneamento da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo.

4.2.1.1. Reator em escala de bancada (R1)

O reator em escala de bancada foi utilizado para realização dos ensaios hidrodinâmicos com o objetivo de validação destes ensaios nas simulações em DFC. Na Figura 4 é ilustrada de forma clara as configurações do R1. Todos os ensaios realizados neste reator foram realizados apenas com água e meio suporte abiótico, não havendo, portanto, influência de atividade biológica durante os ensaios.

Figura 4 – Reator UASB em escala de bancada. A) Desenho esquemático (hachura = material suporte); B) Fotografia do reator. Obs: cotas em centímetros



Fonte: Adaptado de Rocha (2012).

O reator, em formato cilíndrico, foi confeccionado em acrílico e possui volume total de aproximadamente 1,50 L. Utilizou-se para preenchimento do reator o mesmo meio suporte utilizado por Rocha (2012), sendo este meio composto por discos plásticos de baixa densidade do tipo MBBR (*Moving Bed Biological Reactor*). A quantidade de meio suporte utilizada no reator resultou em um volume útil de 1,38 L e uma porosidade de 0,88. Os ensaios de traçador em R1 foram conduzidos utilizando água como fluido e a temperatura ambiente.

O modelo digital do R1 foi projetado baseado no reator real e foram respeitados todos os detalhes relevantes e que influenciaram no escoamento, tais como dimensões, rugosidade da parede, porosidade do material suporte e anteparo na parte de baixo próximo à entrada de efluente.

O modelo digital em 3D pode ser visto na Figura 5. Foi inserido um defletor (anteparo) na parte de baixo do reator similar ao encontrado no R1 real. Este anteparo está posicionado 2,1 cm acima da entrada do reator e possui diâmetro de 2 cm, e pode ser observado na Figura 6.

Figura 5 – Reator UASB de bancada digital (3D) (R1)



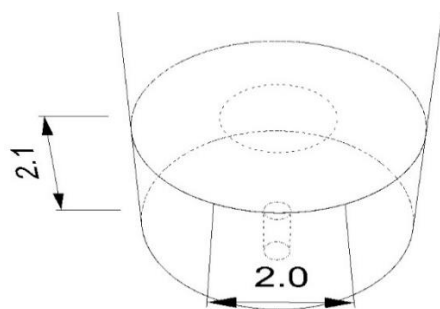
Na Tabela 1 estão listados as características físicas do R1.

Tabela 1 – Parâmetros de projeto do reator UASB em escala de bancada

Parâmetro	Valor
Altura (centímetros)	66
Diâmetro menor (centímetros)	5,0
Diâmetro maior (centímetros)	10
Volume total (litros)	1,50
Volume útil (litros)	1,38
Porosidade do meio (-)	0,88
Rugosidade (mm)	0,005

Fonte: adaptado de Rocha (2012)

Figura 6 – Defletor posicionado na parte inferior do reator (acima da entrada). Obs: cotas em centímetros



4.2.1.2. Reator UASB em escala piloto com formato em Y (R2)

O desenvolvimento do modelo digital do R2 baseou-se em Del Nery et al. (2016). Este reator UASB possui formato de “Y”, similar ao apresentado por Van Haandel et al. (1999). O desenho esquemático e o modelo em 3D deste reator estão contidos na Figura 7 e os dados do projeto estão presentes na Tabela 2.

Uma das estratégias de operação do reator utilizada por Del Nery et al (2016) foi utilizada como parâmetros iniciais neste trabalho, tanto para a simulação em DFC, quanto na elaboração do modelo cinético.

Tabela 2 – Parâmetros de projeto do reator em escala piloto (R2)

Parâmetro	Valor
Altura (metros)	3,7
Diâmetro do corpo (metros)	0,195
Diâmetro do braço (metros)	0,1
Volume do reator (litros)	119,3
Volume da manta de lodo (litros)	62,0
Inclinação do braço (graus)	40

De maneira geral, Del Nery et al. (2016) analisaram o comportamento do processamento anaeróbio da vinhaça de cana-de-açúcar em vários níveis de recirculação do efluente e com aumento sucessivo da carga orgânica aplicada ao lodo. Considerou-se, para este estudo, as seguintes condições de operação:

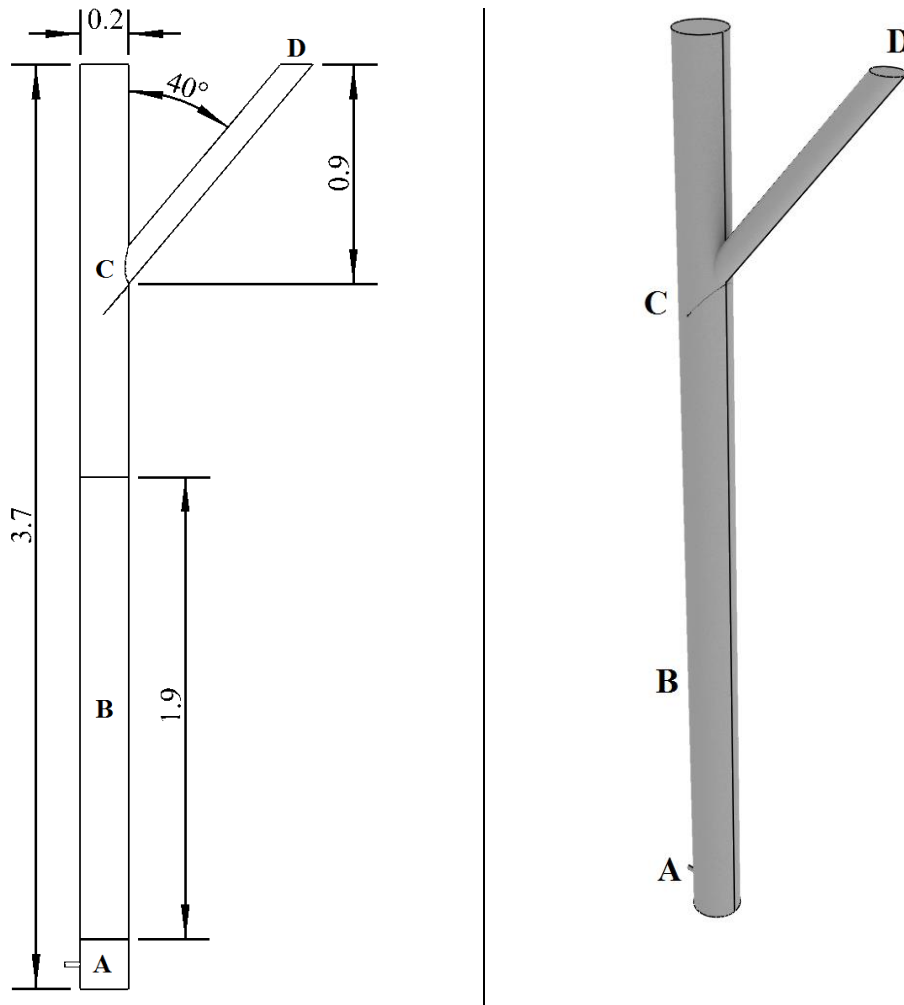
- Porcentagem de recirculação: 200% (ou razão de recirculação: 2);
- Cargas orgânicas volumétricas (COV) aplicadas ao lodo: 7,5, 12,5 e 17,5 kgDQO m⁻³ d⁻¹;
- DQO afluente ao reator: 20 g L⁻¹.

Dadas estas condições, foi possível calcular as vazões de alimentação e recirculação do reator, porosidade da manta de lodo, volume útil e tempo de detenção hidráulica teórico (TDH) para cada condição (COV). Estes valores podem ser visualizados na Tabela 3.

O cálculo da vazão de alimentação se deu através da expressão da carga orgânica volumétrica aplicada ao lodo, considerando apenas o volume de manta de lodo (Equação (1)).

$$\text{Carga orgânica volumétrica} = \frac{\text{Vazão de alimentação} \times \text{DQO afluente}}{\text{Volume de lodo}} \quad (1)$$

Figura 7 – Desenho esquemático do reator UASB em escala piloto e modelo tridimensional (R2). A) entrada de efluente; B) manta de lodo; C) zona de sedimentação e separador trifásico; D) saída de efluente. Obs: cotas em metros.



O tempo de detenção hidráulica foi calculado relacionando o volume do reator e as vazões de alimentação e de recirculação, resultando em dois valores de TDHs para cada COV, sendo a vazão total e o TDH com recirculação posteriormente utilizados como dados de entrada para as simulações em DFC e na dinâmica de sistemas.

Tabela 3 – Parâmetros operacionais do reator UASB em escala piloto (R2)

Parâmetro	Carga orgânica volumétrica (kgDQO m ⁻³ d ⁻¹)		
	7,5	12,5	17,5
Vazão de alimentação (L d ⁻¹)	20,71	38,75	54,25
Vazão de recirculação (L d ⁻¹)	41,42	77,50	108,50
Vazão total (L d ⁻¹)	62,14	116,25	162,75
Porosidade* (-)	0,178	0,204	0,226
Volume útil (L)	73,42	75,01	76,23
Velocidade ascensional média (m s ⁻¹)	2,41 x 10 ⁻⁵	4,51 x 10 ⁻⁵	6,31 x 10 ⁻⁵
TDH sem recirculação (h)	85,10	46,50	33,70
TDH com recirculação (h)	28,36	15,49	11,24

* o cálculo da porosidade do leito será apresentado na seção 4.2.1.2.1.

Como apresentado na Tabela 3, o volume útil variou de acordo com a COV aplicada ao lodo, devido à variação do volume útil da manta de lodo em função de sua porosidade. O volume de cada região do reator, apresentada na Figura 7 como “A”, “B” e “C”, é definido como:

- A (base do reator) = 5,99 L
- B (manta de lodo) = 55,70 L
- C (restante do reator - acima da manta) = 57,62 L

Para o cálculo do volume útil multiplicou-se o volume “B” pelo valor de porosidade obtida para cada carga orgânica volumétrica.

4.2.1.2.1. Cálculo da porosidade da manta de lodo em reatores UASB

Com o intuito de respaldar as simulações e, desta forma, permitir que as análises hidrodinâmicas sejam tão fiéis quanto possível, lançou-se mão do cálculo da porosidade da manta de lodo em reatores UASB proposto por Vlyssides, Barapouti e Mai (2008).

Os autores determinaram uma correlação entre a densidade dos grânulos e a relação SSV/SST, em que o coeficiente de determinação (R^2) obtido foi de 0,968. Esta relação é ilustrada na Equação (2).

$$\rho_p = 1387 - 3,77 \frac{SSV}{SST} \quad (2)$$

Em que:

ρ_p : densidade dos grânulos (kg m^{-3});

$\frac{SSV}{SST}$: porcentagem de sólidos suspensos voláteis (%).

Os autores determinaram de forma complementar uma relação entre o diâmetro dos do grânulo e SSV/SST. Desta relação os autores obtiveram a Equação (3) e R^2 de 0,975.

$$d = -8 \times 10^{-4} \log_{10} \left(1 - \frac{SSV/SST}{97,27} \right) \quad (3)$$

Em que:

d : diâmetro médio dos grânulos do reator UASB (μm).

Ao invés de calcular o diâmetro dos grânulos através da expressão acima, os diâmetros médios foram mensurados por Alves (2015) e aplicados nos cálculos de porosidade para cada COV.

Finalmente, o cálculo da porosidade é realizado através do algoritmo proposto por Elmaleh e Grasmick (1985), em que foram encontradas relações entre o número de Reynolds para uma partícula, o número de Arquimedes e a porosidade, como demonstrado pelas Equações (4), (5) e (6).

$$Re = \frac{\rho u_{up} d}{\mu} \quad (4)$$

$$Ar = \frac{\rho g (\rho_{pe} - \rho) d^3}{\mu^2} \quad (5)$$

$$\varepsilon = \left(\frac{18 \text{ Re} + 2,7 \text{ Re}^{1,69}}{\text{Ar}} \right)^{1/4,7} \quad (6)$$

Em que:

ρ : massa específica do fluido (kg m^{-3});

ρ_{pe} : densidade da partícula esférica (kg m^{-3});

u_{up} : velocidade ascensional do líquido (m s^{-1});

μ : viscosidade dinâmica do fluido ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$);

g : constante de aceleração da gravidade (m s^{-2});

Re : número de Reynolds (-);

Ar : número de Arquimedes (-);

ε : porosidade (-).

A aplicação deste modelo de previsão da porosidade em reatores UASB foi utilizado como dado de entrada nas simulações realizadas no *CFX*TM que, além de fácil de aplicação, mostrou-se uma ferramenta útil na simulação de reatores reais. A porosidade obtida e os parâmetros para o cálculo são apresentados na Tabela 4.

Para a inserção deste modelo como dado de entrada, configurou-se como escoamento em meio poroso a região do reator em que se localiza a manta de lodo. O modelo de porosidade utilizado pelo *CFX*TM é, ao mesmo tempo, uma generalização da lei de Darcy e das equações de Navier-Stokes utilizadas em regiões de escoamento em meio poroso. Este pode ser utilizado para modelar escoamentos em que a geometria é muito complexa. O modelo mantém os termos de advecção e difusão e pode, portanto, ser utilizado para escoamentos em que estes efeitos são importantes (ANSYS CFX, 2013).

Tabela 4 – Parâmetros utilizados no cálculo de porosidade do leito do reator UASB R2

Parâmetro	Valor	Unidade	Observação
ρ_p	1160,8	kg m^{-3}	-
$\rho_{vinhaça}$	1010	kg m^{-3}	Crivelaro et al. (2010)
$\mu_{vinhaça}$	$0,954 \times 10^{-3}$	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$	Trevisoli (2010)
$\frac{SSV^1}{SST}$	79,23	%	Del Nery (2016)
$\frac{SSV^2}{SST}$	76,34	%	Del Nery (2016)

$\frac{SSV^3}{SST}$	76,81	%	Del Nery (2016)
d^1	$1,35 \times 10^{-3}$	m	Alves (2015)
d^2	$1,25 \times 10^{-3}$	m	Alves (2015)
d^3	$1,18 \times 10^{-3}$	m	Alves (2015)
Re^1	0,03442	-	-
Re^2	0,05962	-	-
Re^3	0,07879	-	-
Ar^1	2097,27	-	-
Ar^2	1896,45	-	-
Ar^3	1563,58	-	-
u_{up}^1	$2,41 \times 10^{-5}$	$m\ s^{-1}$	calculado
u_{up}^2	$4,51 \times 10^{-5}$	$m\ s^{-1}$	calculado
u_{up}^3	$6,61 \times 10^{-5}$	$m\ s^{-1}$	calculado
ε^1	0,178	-	-
ε^2	0,204	-	-
ε^3	0,226	-	-

¹ - COV = 7,5 kgDQO $m^{-3}d^{-1}$; ² - COV = 12,5 kgDQO $m^{-3}d^{-1}$; ³ - COV = 17,5 kgDQO $m^{-3}d^{-1}$

4.2.2. Uso de DFC na simulação do escoamento

O escoamento de um fluido no interior de um recipiente (reator) varia de acordo sua configuração interna, devido à variação da como rugosidade da parede, presença ou não de objetos no interior (anteparos, separadores, defletores, etc), pressão na saída, dentre outras características, e com as propriedades do fluido, como a viscosidade e a compressibilidade.

Outro importante fator é a intensidade de entrada do fluido no reator. Nas simulações do escoamento em DFC o usuário deve definir a velocidade de entrada do fluido em uma determinada área. A relação velocidade/área resulta no parâmetro vazão, sendo este um dado de projeto para quase todas as unidades de tratamento.

Uma vantagem de se projetar um reator digital e realizar uma simulação em DFC para analisar o comportamento do escoamento está na facilidade de alterar as características físicas do reator. A inclusão de algum anteparo, modificação da rugosidade da parede interna, testes de várias configurações de entrada do fluido, dentre várias outras possibilidades podem ser avaliadas sem que haja necessidade de construção do reator real.

Todo escoamento obedece às leis de conservação de massa, quantidade de movimento linear e de energia. Estas leis são descritas, normalmente, na forma diferencial, a qual é aplicável em um ponto, mas podem ser descritas na forma integral aplicável a uma região. Desta forma, é possível descrever o comportamento do escoamento a partir destas equações.

Admitindo o fluido como Newtoniano e adotando um sistema de coordenadas cartesianas (x, y, z) tem-se, para o modelo convectivo/difusivo tridimensional transiente, as seguintes equações diferenciais com resolução numérica em cada elemento da malha:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y v_x) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z v_x) \\ = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial z}\right) + S^u \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v_y) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_y) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y v_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z v_y) \\ = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial z}\right) + S^v \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v_z) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_z) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y v_z) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z v_z) \\ = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial z}\right) + S^w \end{aligned} \quad (9)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z) = 0 \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y \phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z \phi) \\ = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial z}\right) + S^\phi \end{aligned} \quad (11)$$

Em que:

ρ = massa específica do fluido (ML^{-3});

v_x = componente x (u) do vetor velocidade U (LT^{-1});

v_y = componente y (v) do vetor velocidade U (LT^{-1});

v_z = componente z (w) do vetor velocidade U (LT^{-1});

t = tempo (T);

p = pressão ($ML^{-1}T^{-2}$);

μ = viscosidade dinâmica absoluta ($ML^{-1}T^{-1}$);

S = termo fonte;

Γ = coeficiente difusivo ($ML^{-1}T^{-1}$);

ϕ = variável genérica.

As equações (7), (8) e (9) são as equações de conservação da quantidade de movimento em x, y e z, respectivamente. A equação (10) corresponde à equação da conservação da massa e a equação (11) à de conservação na forma geral para uma variável genérica ϕ .

4.2.2.1. O modelo de turbulência SST ($k-\omega$)

Uma característica importante do escoamento turbulento é a influência das flutuações da velocidade no progresso do escoamento médio e isto causa aparente aumento da resistência à deformação. Desta forma, o movimento flutuante age sobre o movimento médio de tal forma que a viscosidade aparentemente aumenta. Este é o fundamento teórico central no desenvolvimento de grande quantidade de modelos de turbulência conhecidos como modelos de primeira ordem (SCHLICHTING, 1979).

Na literatura é possível encontrar uma quantidade variada de modelos de turbulência que são classificados pelo número de equações diferenciais usadas. Os modelos de duas equações apresentam maior generalidade, tornando estes os mais utilizados em DFC (PASSOS, 2012).

Apesar disso, cada modelo apresenta características próprias, e isto dificulta na escolha do modelo apropriado para cada tipo de geometria. Pode-se citar os modelos $k-\varepsilon$ (produção e dissipação de energia cinética turbulenta), $k-\omega$ (frequência de turbilhões) e SST (*Shear-Stress Transport* – modelo híbrido do $k-\varepsilon$ e do $k-\omega$).

O modelo $k-\varepsilon$ é um dos mais utilizados em simulações de DFC, sendo que este é o modelo padrão para simulações que requerem o cálculo de turbulência no escoamento. Este modelo proporciona uma boa relação entre precisão e esforço computacional.

O modelo de turbulência SST é mais preciso do que o modelo $k-\varepsilon$ nas proximidades da parede e possui bom comportamento para gradientes moderados de pressão adversa. A principal complexidade adicional na formulação deste modelo, quando comparado a outros modelos mais simples, é a necessidade de computar a distância da parede, necessária nas funções de mistura (MENTER; KUNTZ; LANGTRY, 2003).

As equações resolvidas pelo CFX^{TM} para o modelo SST para k (energia cinética turbulenta) e ω (frequência dos turbilhões) estão listadas a seguir, respectivamente (ANSYS CFX, 2013):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \beta' \rho k \omega + P_{kb} \quad (12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j \omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + (1 - F) \frac{2\rho}{\sigma_\omega \omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 + P_{wb} \quad (13)$$

Em que:

ρ = massa específica do fluido (ML^{-3});

k = energia cinética turbulenta (L^2T^{-2});

μ = viscosidade dinâmica ($ML^{-1}T^{-1}$);

μ_t = viscosidade turbulenta ($ML^{-1}T^{-1}$);

u_j = componente j da velocidade (LT^{-1});

P_k = produção de turbulência ($ML^{-1}T^{-3}$);

ω = taxa de dissipação de turbulência específica (ML^2T^{-3}).

As demais constantes do modelo SST são uma combinação linear das constantes correspondentes aos modelos $k-\varepsilon$ e $k-\omega$ apresentada na equação (14) abaixo:

$$\Phi_3 = F_1 \Phi_1 + (1 - F) \Phi_2 \quad (14)$$

Em que Φ_1 representa as constantes do modelo $k-\varepsilon$ e Φ_2 as do modelo $k-\omega$.

As funções de acoplamento são essenciais para o sucesso do método. Sua formulação é baseada na distância entre o ponto calculado e a parede mais próxima e nas variáveis de escoamento. A função F_1 é dada por:

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho k}{CD_{k\omega} \sigma_{\omega 2} y^2} \right] \right\}^4 \right\} \quad (15)$$

Em que y é a distância entre ponto calculado e a parede mais próxima, ν é a viscosidade cinemática (L^2T^{-1}) e

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2}} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right) \quad (16)$$

Há um limite superior para a tensão cisalhante turbulenta na camada limite no modelo SST. Isto evita níveis excessivos de tensão cisalhante, problema recorrente em outros modelos baseados na hipótese de viscosidade turbulenta. Esta viscosidade é definida como:

$$\mu_t = \rho \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)} \quad (17)$$

Em que a_1 é uma constante com valor típico de 0,31 (ANSYS CFX, 2013) e S denota a magnitude da taxa de deformação ($ML^{-1}T^{-2}$), definido pelas equações (18) e (19):

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (18)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (19)$$

F_2 é a função que restringe as tensões cisalhantes turbulentas na camada limite, definida por:

$$F_2 = \tanh \left\{ \left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \right]^2 \right\} \quad (20)$$

O modelo de turbulência utilizado nesta tese foi o $k-\omega$, uma vez que este apresentou resultados dos testes hidrodinâmicos condizentes com os obtidos em laboratório, como será exposto no item 5.1.

4.2.2.2. Teste de independência de malha

Em uma simulação de DFC, o volume total de fluido que compõe os reatores é dividido em uma malha composta por uma parcela de volumes “menores”, para os quais são realizados os cálculos de conservação de massa e momento. De forma geral, quanto mais refinada a malha, mais precisos são os resultados, mas são requeridos maior tempo e capacidade de processamento para realizar as simulações. A simulação em DFC deve buscar a independência do resultado obtido em relação à densidade da malha adotada (CÓSTOLA; ALUCCI, 2011).

Para assegurar esta independência deve-se realizar uma série de testes de refinamento da malha e comparação dos resultados para que este refinamento não promova alteração nos resultados encontrados. O principal critério de avaliação do nível de refinamento de uma malha é a convergência da simulação (CÓSTOLA; ALUCCI, 2011). Os *software* de DFC normalmente disponibilizam ferramentas que permitem ao usuário monitorar vários parâmetros da simulação e, desta forma, possibilitam uma visão do comportamento da simulação. Por exemplo, o *CFX-SolverTM* permite que o usuário visualize o grau de convergência de vários parâmetros, como a conservação de massa e momento por meio dos critérios *RMS P-Mass*, *RMS U-Mom*, *RMS V-Mom* e *RMS W-Mom*. Outros importantes parâmetros são *RMS K-TurbKE* e *RMS O-TurbFreq*, relacionados ao modelo de turbulência $k-\omega$ SST (*Shear-Stress Transport*) e o parâmetro *Imbalance* (“desequilíbrio” em tradução livre).

Estes parâmetros supracitados estão relacionados com a simulação e retornam ao usuário o comportamento durante toda a simulação. Todavia outros parâmetros podem ser utilizados no teste de independência de malha, como a comparação dos resultados de interesse, como no caso desta tese, a curva de distribuição do tempo de residência dos reatores para cada nível de refinamento da malha.

As malhas analisadas neste trabalho foram não-estruturadas e os volumes foram exclusivamente tetraédricos. A independência de malha foi analisada em dois aspectos:

- observação do parâmetro *Imbalance*, dado em porcentagem, para as variáveis *P-mass*, *U-Mom*, *V-Mom*, *W-Mom* e *Tracador*, sendo esta última variável inserida pelo usuário. Obs: considera-se como aceitáveis valores de *Imbalance* menores de 1%;
- análise estatística (teste t ou teste U, dependendo da normalidade) dos resultados obtidos na simulação das curvas de distribuição do tempo de residência de cada nível de refinamento da malha, a um nível de confiança de 95% ($\alpha = 0,05$).

Os resultados dos testes de independência de malha para cada reator serão abordados no Capítulo 5.

4.2.3. Análise do escoamento não ideal em reatores

Levenspiel (1999) discute sobre a dificuldade de se conhecer precisamente o comportamento de um fluido no interior de um reator e a importância de se obter um mapa de distribuição dos vetores velocidade. Ainda segundo este autor, seria possível prever este comportamento e, desta forma, intervenções poderiam ser feitas para melhorar o desempenho do escoamento.

O aumento da capacidade de processamento em computadores, graças ao avanço tecnológico dos últimos anos, e a disponibilidade de *software* cada vez mais acurados fazem que a afirmação de Levenspiel (1999) se torne obsoleta. Mas apenas conhecer o comportamento do fluido não explana todas as dúvidas acerca de como deve ser um projeto de reatores. O uso conjunto das ferramentas de simulação do fluxo hidrodinâmico e análise de reatores não ideais incrementa o estado da arte neste contexto.

Além de possibilitar a visualização dos campos de velocidade no interior de um reator, a DFC também possibilita a realização de ensaios de estímulo-resposta com traçadores. Estes ensaios virtuais permitem obter melhor entendimento do comportamento do fluido no interior do reator e indicam a presença de zonas mortas, recirculação interna, curtos-circuitos dentre outras anomalias do escoamento. Realizar estes ensaios utilizando a DFC possui a vantagem de, além de ser um processo rápido comparado aos ensaios reais, não há consumo de materiais como traçadores e efluentes.

O tempo em que um elemento de fluido gasta para atravessar um reator, desde sua entrada até a saída é denominado de tempo de detenção hidráulica (TDH). Estes elementos podem caminhar por variadas rotas, permanecendo em tempos diferentes dentro do reator. Detectar o tempo que cada elemento de fluido gasta para atravessar o reator resulta na curva de distribuição do tempo de residência (DTR) (LEVENSPIEL, 1999).

As curvas de DTR são usualmente obtidas em ensaios de estímulo-resposta, nos quais uma perturbação é criada na corrente afluyente ao reator e a resposta deste evento é medida na corrente efluente. Desta forma, obtêm-se uma resposta temporal e, com certa análise matemática, pode-se interpretar a caracterização hidrodinâmica do reator.

A realização destes ensaios de estímulo-resposta envolve a inserção de um traçador no reator. Traçadores são, comumente, corantes, materiais radiativos, sais, ácidos e bases. Deseja-se que um traçador tenha algumas características, como:

- ser inerte;
- ser de fácil detecção;
- possuir propriedades físicas similares às do fluido;
- possuir alta solubilidade no fluido;
- não ser adsorvido em superfícies internas do reator.

Para realizar estes ensaios traçador pode ser inserido de duas formas distintas: pulso ou degrau. A seguir será explanado o método de injeção por pulso, utilizado nesta tese tanto na caracterização do escoamento em laboratório quanto nas simulações em DFC.

4.2.3.1. Injeção pulso

Considera-se como injeção pulso quando a quantidade de traçador é adicionada em um tempo mínimo quando comparado com o TDH do reator. A concentração do traçador é então medida na saída do reator. Como resultado desta medida de concentração (C) ao longo do tempo experimental (t) tem-se uma curva $C \times t$, denominada curva C. A partir desta curva passa a ser possível a realização de cálculos para a interpretação e diagnóstico do comportamento do fluido no interior do reator (LEVENSPIEL, 1999). A equação (21) ilustra a curva C.

$$C_{\text{pulso}} = \int_0^{\infty} C. dt \quad (21)$$

O tempo de residência médio pode ser calculado a partir dos dados obtidos, de acordo com a equação (22):

$$\bar{t} = \frac{\int_0^{\infty} t. C. dt}{\int_0^{\infty} C. dt} \quad (22)$$

Para a injeção tipo pulso a função distribuição do tempo de residência, denominada de curva E, é definida pela equação (23):

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t). dt} \quad (23)$$

Em que:

$$\int_0^{\infty} E(t). dt = 1 \quad (24)$$

Pode-se obter outras informações através das curvas DTR, como a variância da curva (σ^2), que indica a dispersão da distribuição dos dados obtidos. Assim, a dispersão é um importante parâmetro para obtenção de modelos hidrodinâmicos que representem o comportamento do escoamento não-ideal. A variância da curva C é dada por:

$$\sigma^2 = \frac{\int_0^{\infty} (t - \bar{t})^2. C. dt}{\int_0^{\infty} C. dt} = \frac{\int_0^{\infty} t^2. C. dt}{\int_0^{\infty} C. dt} - \bar{t}^2 \quad (25)$$

Existem variadas formas de analisar o comportamento do fluido em um reator, e foi utilizado nesta tese o modelo de reatores em série (*Tanks-In-Series* ou N-CSTR), mas cabe aqui citar o modelo de dispersão como ferramenta alternativa de análise do comportamento hidrodinâmico de reatores. O modelo N-CSTR pode ser utilizado em situações similares em que o modelo de dispersão for utilizado (LEVENSPIEL, 1999).

Uma vantagem do modelo de reatores em série é a sua simplicidade na obtenção dos parâmetros calculados e pode ser utilizado juntamente com modelos cinéticos. Estas características se mostraram de fundamental importância na aplicação da modelagem do processamento anaeróbio abordada nesta tese.

Para o desenvolvimento deste modelo, lança-se mão de uma importante função de DTR para os estudos hidrodinâmicos, denominada E_{θ} (adimensional), definida como:

$$E_{\theta} = \bar{t} \cdot E \quad (26)$$

A função E_{θ} é utilizada, principalmente, na análise comparativa direta de reatores que possuem características distintas. Esta função sempre é acompanhada da função de tempo adimensional, dado como a relação entre o tempo e o tempo de detenção hidráulica médio, como é demonstrado na equação (27):

$$\theta = \frac{t}{\bar{t}} \quad (27)$$

A formulação da curva E_{θ} adimensional auxilia na formulação do modelo de N-CSTR e seu desenvolvimento detalhado é apresentado por Levenspiel (1999). Após este desenvolvimento, chega-se às equações (28) e (29):

$$E_{\theta} = N \cdot \frac{(N \cdot \theta)^{N-1}}{(N-1)!} \cdot e^{-N \cdot \theta} \quad (28)$$

$$N = \frac{1}{\sigma_{\theta}^2} \quad (29)$$

Em que:

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{\sigma^2}{\bar{t}^2} \quad (30)$$

O número de reatores em série obtido neste modelo é uma importante ferramenta na análise hidrodinâmica e indica, principalmente, a tendência do comportamento do fluido no reator, sendo que N próximo de 1 indica que o fluido se comporta próximo ao modelo de mistura

completa. De forma oposta, quanto mais afastado da unidade, o fluido se comportar-se-á próximo ao modelo de fluxo pistonado.

No âmbito da cinética, este modelo indica, por exemplo, que um conjunto de reações ocorre em cada subdivisão (N) e seu produto é imediatamente transpassado para o próximo reator.

Após a determinação deste número N, o mesmo foi utilizado na modelagem hidro-bioquímica a ser descrita no item 4.4. O conjunto de reações bioquímicas consideradas nesta tese ocorrem, em princípio, e um único vaso (reator) de mistura completa. O modelo proposto considera N reatores no qual ocorrem estas reações em série. A proposição do modelo, bem como os resultados das simulações podem ser observados no capítulo 5.

Pode-se calcular, de forma complementar, a quantidade de massa de traçador que atravessa o reator em um determinado tempo. Caso este tempo seja igual à duração do experimento de análise hidrodinâmica, tem-se que a massa calculada corresponderá à toda massa que atravessou o reator. Denomina-se a relação entre a massa de traçador injetada durante o teste de injeção de pulso e a massa recuperada indica como “massa recuperada”, sendo este importante indicador de qualidade do teste, além de indicar o comportamento hidráulico em termos de anomalias. A forma de calcular esta recuperação de massa é apresentada nas Equações (31) e (32).

$$M_o = \int_0^{\infty} Q C(t) dt \quad (31)$$

$$\frac{\Delta M}{M} = \frac{C(t) Q}{M_o} \Delta t \quad (32)$$

Em que:

M_o : massa de traçador injetada (mg)

M: massa de traçador em um determinado tempo t (mg)

A relação $\frac{\Delta M}{M}$ ao final do experimento indica a fração de massa de traçador que atravessou o reator. Ao multiplicar esta fração por 100, tem-se a porcentagem de massa recuperada durante o ensaio de traçador.

4.2.3.1.1. Simulação de injeção de pulso em DFC

Para simular a injeção de um pulso de traçador nas simulações foi utilizada a seguinte expressão (Equação (33)):

$$\text{Tracer} = \mathbf{step}((t - 1[s])/1[s]) * \mathbf{step}((\alpha[s] - t)/1[s]) * \beta \text{ [kg s}^{-1}\text{]} \quad (33)$$

Em que:

α : tempo de injeção do traçador (s);

β : carga de traçador injetado (kg s⁻¹);

t: passo da simulação (s).

Para que a expressão de injeção do traçador tenha sucesso durante a simulação, o valor de α não deve ser menor do que o passo da simulação (t). Para garantir sempre o sucesso da simulação de injeção, considerou-se α igual a t em todas as simulações.

Para o cálculo da carga de traçador injetado (β), definiu-se uma relação entre a massa de traçador e o volume do reator, de forma a padronizar a quantidade de traçador utilizada em reatores de quaisquer dimensões. Dado o volume de traçador, pode-se calcular sua massa necessária para a simulação. A carga de traçador (β) é, então, definida como a relação entre a massa de traçador e o tempo de injeção de traçador (α).

Os cálculos supracitados podem ser conferidos nas Equações (34) e (35).

$$M_{\text{traçador}} = (R_{M/V}) \times V_{\text{reator}} \quad (34)$$

Em que:

$M_{\text{traçador}}$: massa de traçador requerida na simulação (kg);

$R_{M/V}$: relação massa de traçador por volume de reator (kg L⁻¹);

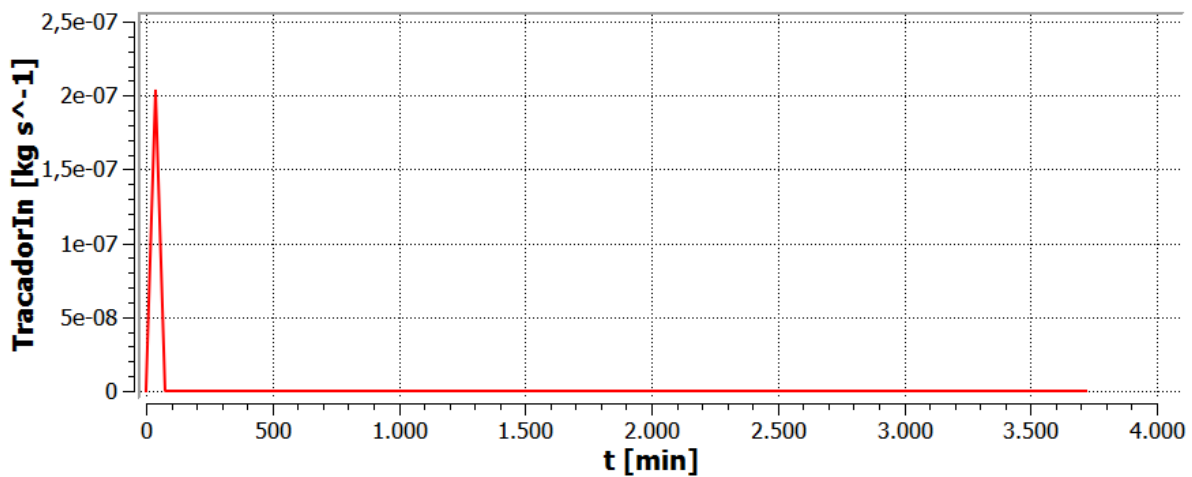
V_{reator} : volume do reator (L).

$$\beta = \frac{M_{\text{traçador}}}{\alpha} \quad (35)$$

Na Figura 8 é ilustrado o gráfico gerado no ensaio de estímulo-resposta por pulso utilizado em uma das simulações realizadas nesta tese ($COV = 7,5 \text{ kgDQO m}^{-3}\text{d}^{-1}$). Fica claro que a duração do pulso apresentou duração pequena quando comparado com o tempo de ensaio, como era de se esperar. Este comportamento estende-se às demais condições (COV-12,5 e COV-17,5).

O traçador utilizado nos experimentos foi o NaCl (sal de cozinha comercial) em concentração de $3,0 \text{ g L}^{-1}$ e volume injetado de $5,0 \text{ mL}$. Foram utilizadas as mesmas condições de injeção do traçador nas simulações realizadas em DFC, com a exceção do coeficiente de difusão do traçador. Neste caso, o coeficiente foi considerado o mesmo de um traçador ideal, ou seja, zero ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$).

Figura 8 – Gráfico do pulso gerado no ensaio de estímulo-resposta.



4.2.4. Validação das curvas DTR simuladas em DFC

A validação proposta neste trabalho foi sobre os ensaios do comportamento hidrodinâmico dos reatores em escala de laboratório. Foram realizados ensaios de acordo com o modelo exposto no item 4.2.3, bem como a forma de calcular e interpretar o comportamento hidrodinâmico.

Para analisar a similaridade dos dados obtidos nos ensaios experimentais e nas simulações em DFC, foram comparados:

- resultados do número de reatores em série calculados (N-CSTR);
- análise estatística entre os dados obtidos (curva E) nos experimentos e nas simulações, considerando um nível de confiança de 95% ($\alpha = 0,05$):
 - teste t de Student, para amostras que seguem uma distribuição normal;
 - teste U de Mann-Whitney, para amostras que não seguem distribuição normal (teste não paramétrico para duas amostras independentes) (HINES, 2006).

Destaca-se aqui que os resultados experimentais foram obtidos nas mesmas condições descritas por Simões (2014) e Silva (2016).

4.3. Modelagem do processamento anaeróbio

Nesta seção são descritas as metodologias utilizadas na modelagem do processamento anaeróbio, que seguem:

- modelo bioquímico do processamento anaeróbio (consumo de substrato e de crescimento da biomassa) adotado nas simulações e seus respectivos parâmetros, referentes ao substrato adotado, bem como um modelo de inibição por pH;
- modelo do comportamento do pH e da alcalinidade no processo de consumo do substrato;
- modelagem integrada (hidro-bioquímica) do processamento anaeróbio: consumo de substrato, crescimento da biomassa, pH e alcalinidade na linguagem da dinâmica de sistemas.

4.3.1. Modelo de consumo do substrato e crescimento da biomassa

Embora complexa, a dinâmica do consumo de substrato e do crescimento microbiano pode ser descrita de forma aproximada baseando-se em alguns parâmetros: taxa de utilização de substrato, taxa de crescimento microbiano e coeficiente de produção celular.

No modelo de digestão anaeróbia (ADM1), existe uma elevada quantidade de variáveis de entrada e de saída inter-relacionadas de forma complexa. O ADM1 é composto, em sua totalidade, por vinte e seis estados dinâmicos na fase líquida e três na fase gasosa; dez variáveis algébricas implícitas; e cinco funções de inibição. Como inclui em seu equacionamento fases da digestão anaeróbia, o ADM1 considera vários componentes da digestão na fase líquida, tanto solúveis quanto insolúveis. Destes compostos, destacam-se os ácidos presentes em sua forma solúvel: ácidos graxos, valerato, butirato, propionato e acetato.

Cada uma das fases e cada um de seus componentes possuem seus respectivos parâmetros cinéticos. O modelo desenvolvido nesta tese foi baseado nos parâmetros relacionados ao acetato e seus valores são listados abaixo (Tabela 5).

As equações utilizadas para o desenvolvimento da parte do modelo que diz respeito à modelagem bioquímica encontram-se abaixo. As Equações (36) e (37) representam as taxas de consumo de substrato (S_{ac}) e de crescimento da biomassa (X_{ac}), e a Equação (38) é a função de inibição por pH. Estas equações foram baseadas em Chapra (1997) e Batstone et al. (2002).

$$\frac{dS_{ac}}{dt} = -\frac{1}{Y} K_{m,ac} \frac{S_{ac}}{K_s + S_{ac}} X_{ac} I_{pH} + \frac{Q(S_o - S_{ac})}{V_{reator}} + K_d X_{ac} \quad (36)$$

$$\frac{dX_{ac}}{dt} = K_{m,ac} \frac{S_{ac}}{K_s + S_{ac}} X_{ac} I_{pH} - K_d X_{ac} - K_r X_{ac} \quad (37)$$

$$I_{pH} = \frac{1 + 2 \times 10^{0,5(pH_{LL} - pH_{UL})}}{1 + 10^{(pH - pH_{UL})} + 10^{(pH_{LL} - pH)}} \quad (38)$$

Em que:

Y: coeficiente de produção de lodo (adimensional);

K_s : constante de Monod ($mg L^{-1}$);

$K_{m,ac}$: máxima taxa de crescimento bacteriano (d^{-1});

K_d : taxa de decaimento bacteriano (d^{-1});

K_r : taxa de respiração endógena (d^{-1});

I_{pH} : fator de inibição por pH (-);

pH_{UL}: limite superior de inibição por pH (-);

pH_{LL}: limite inferior de inibição por pH (-).

Tabela 5 – Parâmetros de cinética biológica e para a inibição por pH

Parâmetros	Valor	Unidade	Fonte
Y	0,05	gSSV/gDBO ₅	Batstone et al. (2002)
K _s	150	mg L ⁻¹	Batstone et al. (2002)
K _{m,ac}	9,4	d ⁻¹	Barrera et al. (2015)
K _d	0,02	d ⁻¹	Batstone et al. (2002)
K _r	0,02	d ⁻¹	Chapra (1997)
pH _{UL}	7	-	Batstone et al. (2002)
pH _{LL}	6	-	Batstone et al. (2002)

4.3.2. Modelo de pH a partir do substrato

Considerou-se que o substrato (efluente) utilizado neste modelo foi composto por acetato, visto que este é um componente importante do processamento anaeróbio. Poder-se-ia, por exemplo, incluir os outros ácidos envolvidos no processo, tais como valerato, butirato e propionato, como mencionado anteriormente. Ao final desta tese será observado que esta inclusão não implicaria em muito esforço, uma vez que a modelagem em dinâmica de sistemas permite a fácil inserção de variáveis em sua linha de cálculo.

Sendo o acetato uma solução ácida, buscou-se relacionar esta acidez à concentração de entrada do substrato, tanto em mg L⁻¹, quanto em mol L⁻¹. A Equação (39) expõe a conversão destas unidades de concentração.

$$S_M = \frac{S}{PM} \quad (39)$$

Em que:

S_M: concentração de substrato (mol L⁻¹);

S: concentração de substrato (mg L⁻¹);

PM: peso molecular (para acetato: 60,05 g mol⁻¹).

Segundo Catani e Alcarde (1966), o pH conferido a uma solução que contém acetato pode ser calculado pela Equação (40).

$$\text{pH}_{\text{Acetato}} = -0,511 \cdot \log_{10}(S_M) + 2,37 \quad (40)$$

Considerando o substrato como sendo a solução (ácida) de acetato, admitindo a necessidade de neutralizar este pH e conferir alcalinidade para o sistema, chegou-se a relação demonstrada na Equação (41).

$$\text{pH} = \text{pH}_{\text{Acetato}} + \Delta\text{pH} \quad (41)$$

Em que:

$\text{pH}_{\text{Acetato}}$: pH da solução de acetato (adimensional);

ΔpH : incremento de pH necessário para elevar o pH a um nível desejado (adimensional).

Para o cálculo deste incremento de pH considerou-se a quantidade de unidades de pH necessária para atingir um pH desejado para o sistema, como indicado pela Equação (42).

$$\Delta\text{pH} = \text{pH}_{\text{desejado}} - \text{pH}_{\text{Acetato}} \quad (42)$$

Segundo Furtado, Poerch e Wasielesky Jr. (2011), no preparo de uma solução de bicarbonato de sódio, para cada 200 mg L⁻¹ deste sal, há um incremento de 0,25 unidades de pH na solução. Então, considerando esta relação de incremento de pH, pode-se calcular a concentração de alcalinizante necessária para atingir este incremento (Equação(43)).

$$[\text{Alcalinizante}_{\text{NaHCO}_3}] = \text{Inc. pH}_{\text{NaHCO}_3} \Delta\text{pH} \quad (43)$$

Em que:

$\text{Inc. pH}_{\text{NaHCO}_3}$: incremento de pH em função da concentração de alcalinizante (NaHCO₃) (+0,25 pH / 200 mg NaHCO₃ L⁻¹);

$[\text{Alcalinizante}_{\text{NaHCO}_3}]$: concentração de alcalinizante (NaHCO₃) (mg L⁻¹).

4.3.3. Modelo de determinação de alcalinidade de água

A alcalinidade total, parte integrante do modelo proposto nesta tese, é conferida ao sistema através da adição de um alcalinizante, como o hidróxido de cálcio ($\text{Ca}(\text{OH})_2$), carbonato de sódio (Na_2CO_3) ou bicarbonato de sódio (NaHCO_3). Este último é comumente utilizado em tratamento anaeróbio de efluentes para regular o pH e tamponar o meio. É demonstrado na equação (44) o cálculo de alcalinidade total inserida no modelo.

$$A_{\text{total}} = [\text{Alcalinizante}_{\text{NaHCO}_3}] \times \text{Inc. alcalinidade}_{\text{NaHCO}_3} \quad (44)$$

Em que:

A_{total} : alcalinidade total ($\text{mg CaCO}_3 \text{ L}^{-1}$);

$\text{Inc. alcalinidade}_{\text{NaHCO}_3}$: incremento de alcalinidade pela adição de alcalinizante (NaHCO_3) (adimensional).

Segundo Furtado, Poerch e Wasielesky Jr (2011), uma solução de $200 \text{ mg NaHCO}_3 \text{ L}^{-1}$ incrementa $100 \text{ mg CaCO}_3 \text{ L}^{-1}$ em termos de alcalinidade. Portanto, este incremento pôde ser considerado no cálculo da alcalinidade total, como demonstrado na Equação (44).

Oliveira (1997) cita que para se obter sucesso com o tratamento anaeróbio em reatores, a operação deve ser especialmente controlada e monitorada, identificando-se com rapidez e segurança quaisquer distúrbios que venham a ocorrer durante o processo. Um importante parâmetro de monitoramento é a alcalinidade, que mede a capacidade tampão do sistema. Ainda segundo Oliveira (1997), o monitoramento de alcalinidade a bicarbonato é mais eficaz quando comparado ao monitoramento apenas do pH, uma vez que o pH é descrito em escala logarítmica e a alcalinidade é linear.

O conhecimento dos compostos que conferem alcalinidade ao sistema, principalmente os relacionados ao equilíbrio do carbonato, é de relevante importância. Segundo Monterani (2013), a determinação da alcalinidade em dois estágios (alcalinidade intermediária – AI e parcial - AP) é importante para se conhecer a estabilidade do sistema. Segundo Ripley, Boyle e Converse (1986) e Cajigas, Pérez e Torres (2006), a relação AI/AP superior a 0,3 pode indicar distúrbios no processamento anaeróbio. Entretanto, outras pesquisas apontam que esta relação pode ser superior a 0,3 sem indicar, conseqüentemente, um distúrbio, dependendo o equilíbrio

da qualidade do efluente a ser tratado (FORESTI, 1994; FORESTI; VAN HAANDEL, 1998; CHERNICHARO, 2008; RODRIGUES, 2008).

Proposto por Rounds (2013), o modelo que se segue descreve, principalmente, as concentrações das espécies aceptoras de prótons que fazem parte da alcalinidade de um sistema, sendo elas os íons bicarbonato (HCO_3^-), carbonato (CO_3^{2-}) e hidróxido (OH^-).

De posse do valor de alcalinidade total (A_{total}), o modelo possibilita o cálculo das concentrações de cada espécie em função do pH, condutividade elétrica e temperatura. Considerou-se a temperatura como 30°C, faixa mesofílica da digestão anaeróbia. A Equação (45) ilustra a conversão de unidades: de mg L^{-1} para mol L^{-1} .

$$A'_{\text{total}} = \frac{A_{\text{total}}}{(M_{\text{CaCO}_3} \times r_{\text{CaCO}_3} \times 1000)} \quad (45)$$

Em que:

A'_{total} : alcalinidade total (mol L^{-1});

M_{CaCO_3} : massa molar do carbonato de cálcio [100,087] (g mol^{-1});

r_{CaCO_3} : razão entre o número de mol e o número de equivalente do carbonato de cálcio [1/2] (mol eq^{-1});

1000: fator de conversão entre unidade de g para mg (mg g^{-1}).

Sendo a alcalinidade total definida como a diferença entre as concentrações das espécies aceptoras e doadoras de prótons presentes na solução (Equação (46)), pode-se chegar nas seguintes relações:

$$A'_{\text{total}} = [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{OH}^-] - [\text{H}^+] \quad (46)$$

Em que:

$[\text{HCO}_3^-]$: concentração do íon bicarbonato (mol L^{-1});

$[\text{CO}_3^{2-}]$: concentração do íon carbonato (mol L^{-1});

$[\text{OH}^-]$: concentração do íon hidroxila (mol L^{-1});

$[\text{H}^+]$: concentração do íon hidrogênio (mol L^{-1}).

As reações provenientes do equilíbrio químico do sistema possibilitam o cálculo das constantes de ionização das diferentes espécies constituintes. De forma simplificada pode-se calcular estas constantes de acordo com o exposto nas Equações (47), (48) e (49) (STUMM; MORGAN, 1996⁴ apud ROUNDS, 2013).

$$k'_1 = k_1 \frac{\gamma_{\text{H}_2\text{CO}_3}}{\gamma_{\text{HCO}_3^-}} \quad (47)$$

$$k'_2 = k_2 \frac{\gamma_{\text{HCO}_3^-}}{\gamma_{\text{CO}_3^{2-}}} \quad (48)$$

$$k'_w = \frac{k_w}{\gamma_{\text{OH}^-}} \quad (49)$$

Em que:

k'_1 : 1ª constante combinada de ionização do ácido carbônico (mol L^{-1});

k'_2 : 2ª constante combinada de ionização do ácido carbônico (mol L^{-1});

k'_w : constante combinada de ionização da água ($\text{mol}^2 \text{L}^{-2}$);

$\gamma_{\text{H}_2\text{CO}_3}$, $\gamma_{\text{HCO}_3^-}$, $\gamma_{\text{CO}_3^{2-}}$, γ_{OH^-} : coeficientes de atividade das espécies.

Segundo Souto (2014) os coeficientes de atividade podem ser determinados a partir da Equação de Debye-Hückel (50):

$$\log_{10}(\gamma_i) = \frac{-A z_i^2 \sqrt{I}}{1 + a_i B \sqrt{I}} \quad (50)$$

Em que:

γ_i : coeficiente de atividade do íon;

z_i : carga do íon;

I: força iônica ($\text{mol}^{1/2} \text{kg}^{-1/2}$);

a_i : diâmetro iônico efetivo (cm);

A: constante característica do solvente ($\text{kg}^{1/2} \text{mol}^{-1/2}$);

⁴ STUMM, W; MORGAN, J. J. **Acqua chemistry: chemical equilibria and rates in natural waters**. 3rd ed. New York, John Wiley and Sons, 1022p, 1996.

B: constante característica do solvente ($\text{kg}^{1/2} \text{cm}^{-1} \text{mol}^{-1/2}$).

Os valores de A, B, z_i e \hat{a}_i são apresentados na Tabela 6 (MISRA, 2012).

Tabela 6 – Valores dos parâmetros A, B (a 25°C e 1 bar), das cargas dos íons (z_i) e do diâmetro efetivo (\hat{a}_i)

Íon	z_i	\hat{a}_i	A	B
OH^-	-1	$3,50 \times 10^{-8}$	0,496	$3,285 \times 10^7$
CO_3^{2-}	-2	$4,50 \times 10^{-8}$	0,509	$3,281 \times 10^7$
HCO_3^-	-1	$4,25 \times 10^{-8}$	0,500	$3,262 \times 10^7$
H^+	+1	$9,00 \times 10^{-8}$	0,527	$3,329 \times 10^7$

Segundo Hem (1985), a força iônica pode ser calculada em função da condutividade elétrica, como demonstrado na Equação (51).

$$I = 0,00001475 \times CE \quad (51)$$

Em que:

CE: condutividade elétrica ($\mu\text{S cm}^{-1}$);

0,00001475: constante de proporcionalidade ($\text{cm } \mu\text{S}^{-1} \times \text{mol kg}^{-1}$).

O cálculo das constantes de dissociação das espécies no sistema carbonato pode ser calculado através da Equação (52) (STUMM; MORGAN, 1996 apud ROUNDS, 2013).

$$\log_{10}(k) = a_1 + a_2 T + \frac{a_3}{T} + a_4 \log_{10}(T) + \frac{a_5}{T^2} \quad (52)$$

Em que:

k: constante de equilíbrio químico;

a_1, a_2, a_3, a_4, a_5 : coeficientes empíricos;

T: temperatura (Kelvin) [303,15].

A Tabela 7 contém os valores dos coeficientes empíricos para o cálculo de k_1 , k_2 e k_w (STUMM; MORGAN, 1996 apud ROUNDS, 2013).

Tabela 7 – Coeficientes empíricos para o cálculo de k_1 , k_2 e k_w

Coeficiente	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
k_1	-356,3094	-0,06091964	21834,37	126,8339	-16844915
k_2	-107,8871	-0,03252849	5151,79	38,92561	-56713,9
k_w	-283,9710	-0,05069842	13323,00	102,24447	-1119669

Finalmente, após a quantificação dos parâmetros supracitados, pode-se calcular as concentrações, em mol L⁻¹, das espécies HCO₃⁻, CO₃²⁻ e OH⁻. Souto (2014) explicita estes cálculos, como demonstrado nas Equações (53), (54) e (55).

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{A'_{\text{total}} - k'_w \times 10^{\text{pH}} + \frac{10^{-\text{pH}}}{\gamma_{\text{H}_3\text{O}^+}}}{2 + \frac{10^{-\text{pH}}}{k'_2}} \quad (53)$$

$$[\text{HCO}_3^-] = \frac{A'_{\text{total}} - k'_w \times 10^{\text{pH}} + \frac{10^{-\text{pH}}}{\gamma_{\text{H}_3\text{O}^+}}}{1 + 2k'_2 \times 10^{\text{pH}}} \quad (54)$$

$$[\text{OH}^-] = k'_w \times 10^{\text{pH}} \quad (55)$$

Para a conversão das concentrações das espécies de mol L⁻¹ em mg CaCO₃ L⁻¹, faz-se as seguintes operações:

$$A_{\text{HCO}_3^-} = [\text{HCO}_3^-] \times M_{\text{CaCO}_3} \times r_{\text{CaCO}_3} \times 1000 \quad (56)$$

$$A_{\text{CO}_3^{2-}} = [\text{HCO}_3^-] \times M_{\text{CaCO}_3} \times 1000 \quad (57)$$

$$A_{\text{OH}^-} = [\text{OH}^-] \times M_{\text{CaCO}_3} \times r_{\text{CaCO}_3} \times 1000 \quad (58)$$

Em que:

$A_{\text{HCO}_3^-}$: concentração do íon bicarbonato em termos de alcalinidade (mg CaCO₃ L⁻¹);

$A_{\text{CO}_3^{2-}}$: concentração do íon carbonato em termos de alcalinidade (mg CaCO₃ L⁻¹);

A_{OH^-} : concentração do íon hidroxila em termos de alcalinidade (mg CaCO₃ L⁻¹).

4.4. Desenvolvimento do modelo hidro-bioquímico do processamento anaeróbio

Para estabelecer uma modelagem que inclua todas as etapas propostas dispostas nos itens anteriores, lançou-se mão da técnica de dinâmica de sistemas. Um sistema pode ser definido, de forma resumida, com um conjunto de elementos que se relacionam entre si ao longo do tempo e que forma um todo unificado (RICHMOND, 1994).

A representação das interconexões entre as variáveis envolvidas na construção do modelo é realizada através dos diagramas de ciclo causal, como mencionado no item 3.1.6. Para o desenvolvimento deste modelo, inicialmente foram construídos os diagramas causais no *software* VUE (*Visual Understanding Environment*)⁵.

Primeiro foram listadas as variáveis que compuseram o modelo e suas interligações. Em prosseguimento, foram identificados os *loops* presentes no modelo e, finalmente foi construído o diagrama com todas as variáveis.

As variáveis que compuseram o modelo podem ser visualizadas pela matriz de conectividade ilustrada no Quadro 2, em que “1” indica relação entre as variáveis e “0” indica a não-relação entre as variáveis.

Após o desenvolvimento do modelo foram diagnosticados, como mostrado no Quadro 2, treze (13) *loops* causais, cada um referente a uma variável de interesse. Após este diagnóstico e análise da intensidade das inter-relações destas variáveis, pôde-se identificar quais variáveis possuíam mais interconexões e gerou-se um diagrama que contempla todas as variáveis.

Na Figura 9 está ilustrado este diagrama de causalidade e demonstra qualitativamente a dinâmica do modelo proposto. É importante notar que a espessura das setas indica a quantidade de conexão entre as variáveis, ou seja, quanto maior a quantidade de *loops* em que a variável aparece, mais espessa será a seta.

A matriz de conectividade do Quadro 2 compila todas as interconexões do modelo e as figuras apresentadas no Apêndice A ilustram os *loops* de cada variável do modelo.

Depois de identificadas as variáveis do sistema, e dada a construção do diagrama de causalidade, foi possível inserir as equações descritas anteriormente (com exceção das relacionadas à Dinâmica de Fluidos Computacional) no *software* Vensim PLE[®]. Os resultados desta inserção das equações serão apresentados no próximo capítulo.

⁵ Software livre disponibilizado pela *Tufts University*. Disponível em: <http://vue.tufts.edu/>

Quadro 2 – Matriz de conectividade das variáveis do modelo proposto

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
A		1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0
B	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C	1	0		1	0	0	0	0	0	1	0	1	0
D	0	0	0		1	0	0	1	0	0	0	0	0
E	0	0	0	0		1	1	0	0	0	0	0	0
F	0	0	0	0	0		1	0	0	0	0	0	0
G	0	0	0	0	0	0		1	0	0	0	0	0
H	0	0	0	0	0	0	0		1	0	0	0	0
I	0	0	0	0	0	0	0	0		1	0	0	0
J	1	0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	1
K	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0		0	0
L	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0		0
M	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

A: concentração de biomassa [mg L^{-1}];

B: taxa de decaimento de biomassa [$\text{mg L}^{-1} \text{d}^{-1}$];

C: concentração de substrato [mg L^{-1}];

D: pH gerado pelo substrato [-];

E: dosagem de alcalinizante [$\text{mg L}^{-1} \text{d}^{-1}$];

F: incremento total de pH pelo alcalinizante [-];

G: pH da solução de alcalinizante [-];

H: pH do sistema [-];

I: inibição por pH [-];

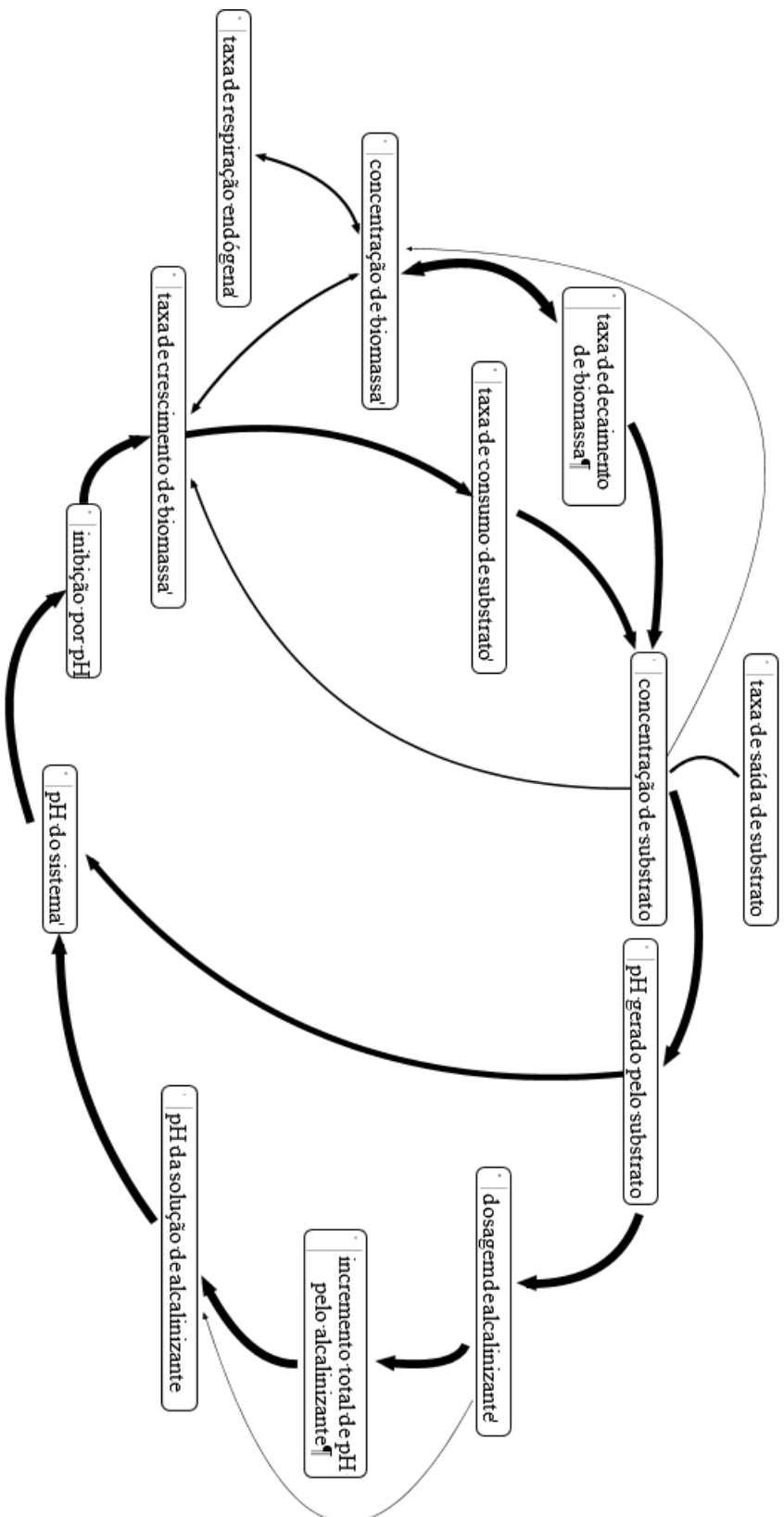
J: taxa de crescimento de biomassa [$\text{mg L}^{-1} \text{d}^{-1}$];

K: taxa de respiração endógena [d^{-1}];

L: taxa de saída de substrato [$\text{mg L}^{-1} \text{d}^{-1}$];

M: taxa de consumo de substrato [$\text{mg L}^{-1} \text{d}^{-1}$].

Figura 9 – Diagrama de causalidade do modelo proposto contendo todos os *loops*



5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados dos ensaios hidrodinâmicos de bancada para validação dos ensaios simulados em Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC), as simulações do reator piloto em DFC, bem como os testes de independência de malhas. Os resultados das simulações realizados no *CFX*TM foram analisados no *software CFD-Post*TM, componente do pacote *Ansys*[®], em que o usuário é capaz de visualizar os vetores velocidade, linhas de fluxo e outras variáveis de interesse, bem como criar gráficos e tabelas e extrair estes resultados com o objetivo de interpretar estes dados.

Após a determinação do comportamento hidrodinâmico do reator piloto, será apresentado o modelo em sua forma de dinâmica de sistemas implementado no *software Vensim PLE*[®]. Finalmente, será feita uma breve discussão sobre o modelo e sua utilidade na área de desenvolvimento de reatores e previsão de comportamento para auxílio de tomada de decisão.

5.1. Análise hidrodinâmica de reatores UASB em escala de bancada e piloto

Nesta seção estão apresentadas as análises hidrodinâmicas dos dois reatores UASB (R1 e R2) descritos no item 4.2.1.

Primeiramente foi realizada a análise do R1 (reator de bancada), tanto seu modelo virtual 3D quanto o reator físico. Os resultados dos ensaios experimentais para este reator serviram para validar as simulações realizadas em DFC pelo *software CFX*TM.

Em seguida, foi feita a simulação em DFC do ensaio de pulso para o R2 (reator em escala piloto) e o resultado desta análise foi incluído no modelo hidro-bioquímico.

Todas as simulações em DFC realizadas no *CFX*TM foram realizadas de acordo com as condições abaixo:

- *Analysis type: Transient*
- *Residual type: RMS*
- *Residual target: 10^{-4}*

- *Transient scheme: Second Order Backward Euler*
- *Turbulence numerics: High resolution*

Os dados de entrada para a realização das simulações em DFC (R1 e R2) estão listados nas Tabelas Tabela 8 e Tabela 9:

Tabela 8 – Dados de entrada para simulações em DFC para o reator R1

Parâmetro	R1-C1*	R1-C2**
Vazão ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$)	$4,26 \times 10^{-8}$	$2,74 \times 10^{-7}$
Área da entrada (m^2)	$1,96 \times 10^{-5}$	$1,96 \times 10^{-5}$
Velocidade de entrada (<i>inlet</i>) (m s^{-1})	$2,37 \times 10^{-3}$	$1,38 \times 10^{-2}$
Pressão relativa na saída (<i>outlet</i>) (Pa)	0	0
Tempo de simulação (<i>total time</i>) (min)	1995	501
Passo da simulação (<i>timestep</i>) (min)	15	3

*R1-C1: reator 1, condição 1. **R1-C2: reator 1, condição 2.

As características de R1-C1 e R1-C2 serão expostas no item 5.1.1.

Tabela 9 – Dados de entrada para simulações em DFC para o reator R2

Parâmetro	Condição (COV - $\text{kgDQO m}^{-3}\text{d}^{-1}$)		
	7,5	12,5	17,5
Vazão ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$)	$7,19 \times 10^{-7}$	$1,34 \times 10^{-6}$	$1,88 \times 10^{-6}$
Área de entrada (m^2)	$3,14 \times 10^{-4}$	$3,14 \times 10^{-4}$	$3,14 \times 10^{-4}$
Velocidade de entrada (<i>inlet</i>) (m s^{-1})	$2,29 \times 10^{-3}$	$4,28 \times 10^{-3}$	$6,00 \times 10^{-3}$
Pressão relativa na saída (<i>outlet</i>) (Pa)	0	0	0
Tempo de simulação (<i>total time</i>) (min)	3720	2250	1500
Passo da simulação (<i>timestep</i>) (min)	60	30	10

5.1.1. Reator de bancada (R1)

Foram realizados ensaios de traçador para determinar a curva de Distribuição do Tempo de Residência (DTR) no reator de bancada (R1). A obtenção dos dados destes ensaios foi feita de duas formas: simulação em DFC e experimentos em laboratório. Para cada forma de obtenção de dados foram consideradas duas condições distintas:

- Condição 1: vazão = 4,0 litros por dia ($TDH_{teórico} = 9,0$ horas);
- Condição 2: vazão = 26,68 litros por dia ($TDH_{teórico} = 1,52$ horas).

As condições dos experimentos e seus respectivos resultados (simulados e experimentais) estão listadas na Tabela 10.

Tabela 10 – Análise hidrodinâmica do R1 (simulado e experimental) em duas diferentes condições

Condição 1*		
Parâmetro	Simulado	Experimental
Vazão ($L d^{-1}$)	4,0	4,0
$TDH_{teórico}$ (h)	9,0	9,0
$TDH_{médio}$ (h)	9,8	9,4
σ_{θ}^2 (-)	0,21	0,22
N	4,83	4,54
Recuperação de massa (%)	82,4	89,7
Condição 2**		
Parâmetro	Simulado	Experimental
Vazão ($L d^{-1}$)	26,68	26,68
$TDH_{teórico}$ (h)	1,52	1,52
$TDH_{médio}$ (h)	1,40	2,57
σ_{θ}^2 (-)	0,18	0,15
N	5,55	6,67
Recuperação de massa (%)	81,7	88,8

* Simões (2014); **Silva (2016)

O reator R1 foi desenvolvido em 3D e duas malhas foram geradas no *software Meshing*TM, incluso no pacote *Ansys*[®], uma com as configurações padrões do *software* e outra com refinamento na área correspondente ao meio suporte.

Foi realizado um teste de independência de malhas na escolha da malha que resultou em um melhor desempenho na simulação. Os resultados dispostos na Tabela 11 informam que os parâmetros estiveram de acordo a metodologia de avaliação da malha. Isto é, se o valor de *Imbalance* é menor que 1% e se os dados das curvas DTR obtidas para malha padrão e refinada são estatisticamente semelhantes. O teste foi realizado com os dados de entrada referentes à condição 2. Uma vez que teste foi realizado para uma condição, seu resultado pode ser aproveitado para outras condições, ou seja, o teste foi válido para as condições 1 e 2.

De forma complementar, pode-se analisar a semelhança entre os dados obtidos nas simulações do R1 utilizando as malhas padrão e refinada através de comparação entre as curvas E_{θ} obtidas e a análise de um gráfico de regressão linear entre os resultados.

Tabela 11 – Teste de independência de malha para R1

Parâmetro	Malha padrão (M1) (%)	Malha refinada (M2) (%)
<i>P-Mass</i>	< 1	< 1
<i>U-Mom</i>	< 1	< 1
<i>Imbalance</i> <i>V-Mom</i>	< 1	< 1
<i>W-Mom</i>	< 1	< 1
Tracador	< 1	< 1
Teste U	P = 0,806*	

*não há diferença significativa entre M1 e M2.

A Figura 10 contém as duas curvas DTR geradas nas simulações do escoamento no R1 para a condição 2 e, após uma análise qualitativa, pode-se perceber a similaridade entre os dados obtidos. Esta semelhança fica evidenciada na elevada quantidade de segmentos das curvas que se sobrepõem.

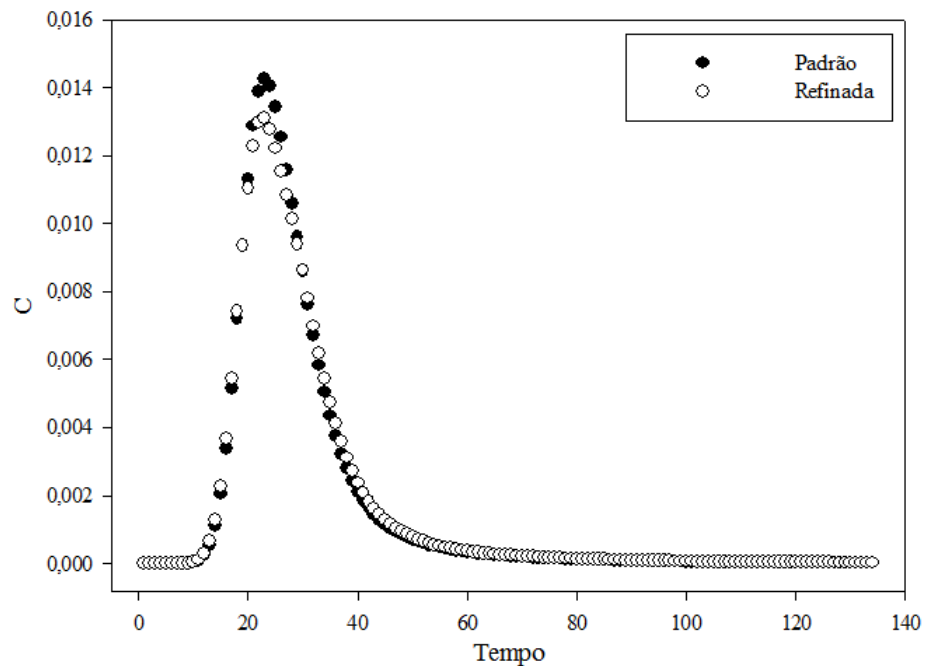
Outra análise mais aprofundada pode ser obtida ao observar a Figura 11. Os dados de concentração do traçador (C) de cada ensaio simulado utilizando as malhas padrão e refinada foram confrontados e uma regressão linear foi realizada. O resultado desta regressão pode ser observado pela linha de tendência obtida e, também, pelo coeficiente de determinação desta regressão ($R^2 = 0,9965$). Outras figuras obtidas durante o teste de independência de malha e as simulações estão dispostas no Apêndice B.

As informações das malhas testadas nas simulações estão listadas na Tabela 12 e as malhas geradas podem ser observadas na Figura 12.

Tabela 12 – Informações das malhas testadas para R1

Item	Valor	
	M1	M2
Quantidade de Nós	9437	17100
Quantidade de Elementos (tetraedros)	44915	84023

Figura 10 – Curvas de DTR do R1 para M1 e M2 (condição 2)



Após a realização do Teste de Independência de Malhas, escolheu-se a malha padrão (M1) na realização das simulações e obtenção das curvas de DTR para as condições 1 e 2.

Figura 11 – Gráfico de dispersão dos dados da curva DTR entre as simulações utilizando malha padrão e malha refinada (condição 2)

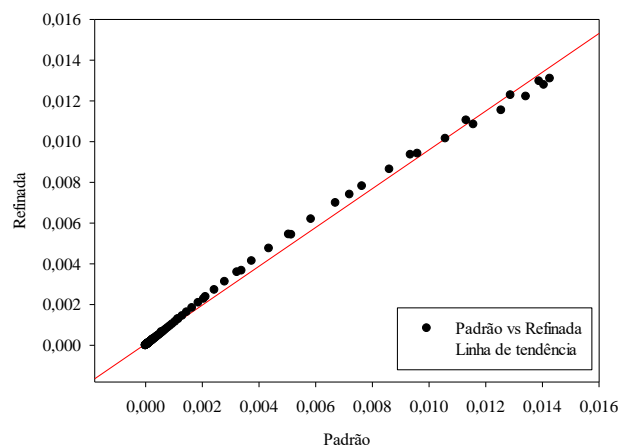
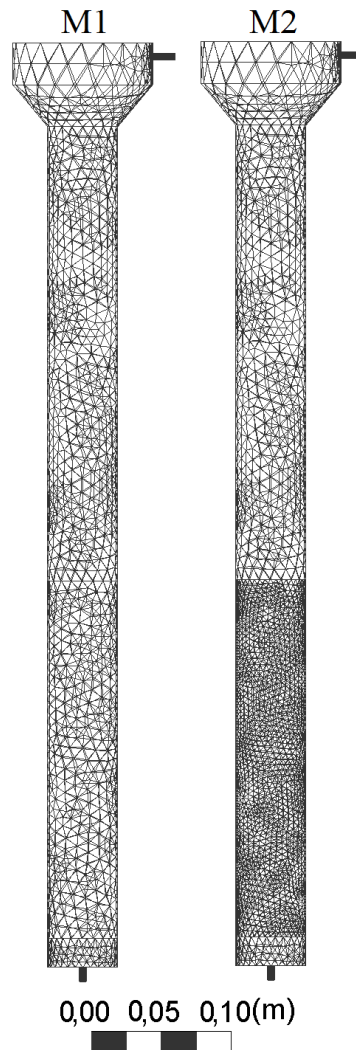


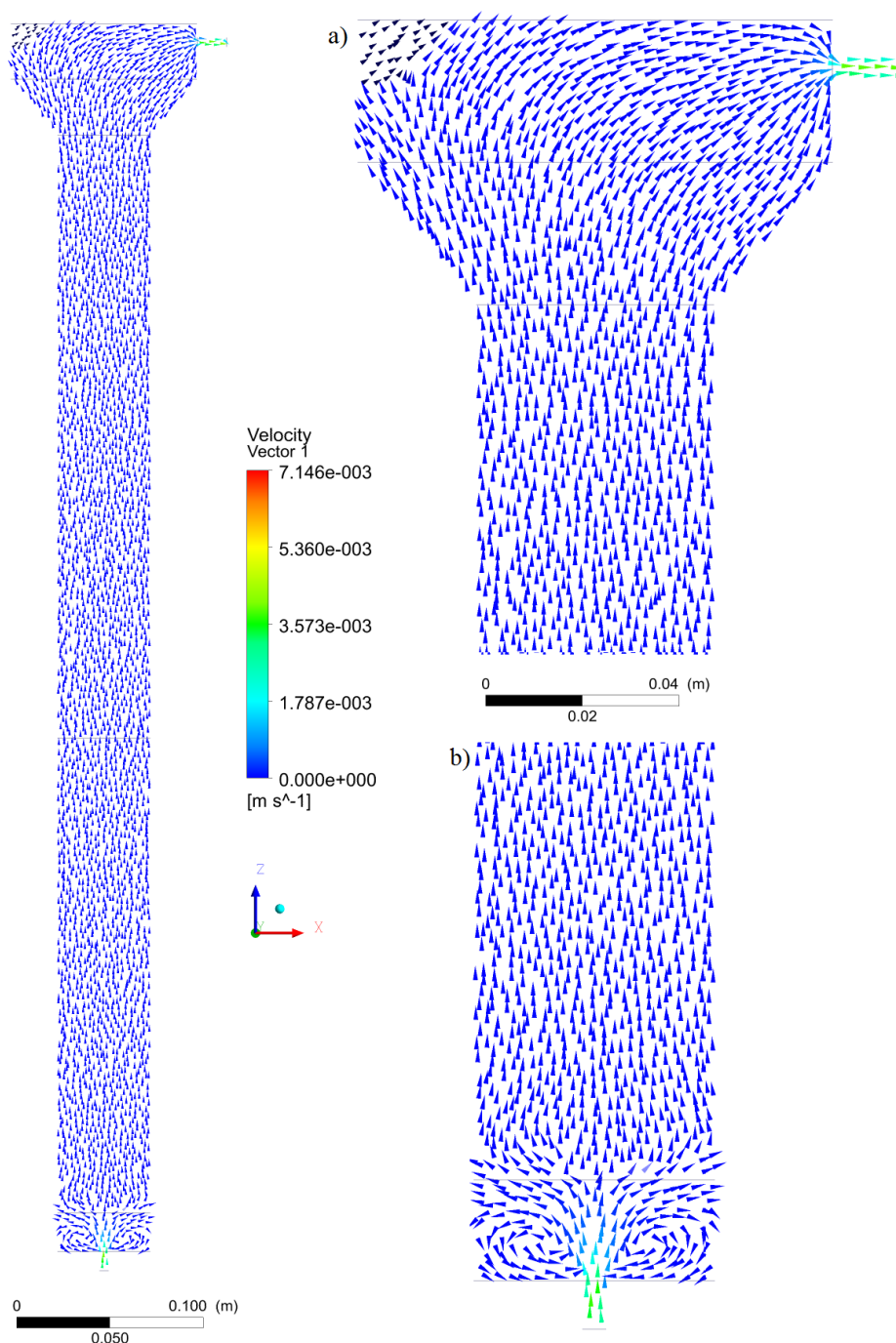
Figura 12 – Malhas testadas no teste de independência do R1



5.1.1.1. Validação da simulação do ensaio de traçador em DFC - Condição 1

O resultado da simulação em DFC no *software CFXTM* do escoamento no R1 para a condição 1 pode ser observado na Figura 13, onde são expostos os vetores velocidade no interior do reator.

Figura 13 – Vetores velocidade em R1 (condição 1). a) topo do reator (saída); b) base do reator (entrada)

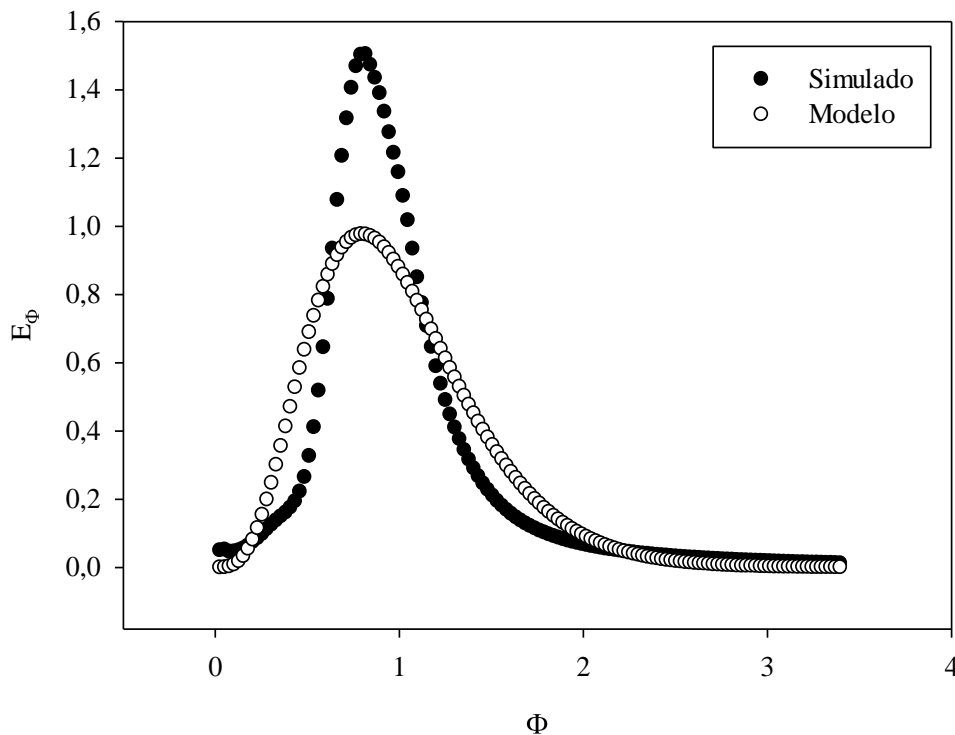


Observa-se, ao analisar a Figura 13, uma pequena zona de recirculação na base do reator. Isto se deve ao ponto de entrada do fluido no reator, e, devido a pequena velocidade de entrada, esta zona de recirculação se dissipa após se deparar com o defletor (Figura 6) e entrar em contato com o meio poroso (meio suporte). Após esta pequena zona de recirculação o fluxo se comporta de maneira uniforme, com vetores velocidade em sentido constante no “eixo Z”, ocorrendo mudança de sentido apenas na parte superior do reator (saída).

Os dados gerados na simulação do ensaio de injeção de pulso para a condição 1 resultaram na Figura 14 e os dados gerados no experimento, para a mesma condição, resultaram na Figura 15. Nestas figuras, onde se lê “Simulado” e “Experimental”, entende-se como os dados obtidos nos ensaios hidrodinâmicos, após normalização dos dados (concentrações e tempos adimensionais), seja na simulação em DFC ou em nos experimentos de laboratório. E onde se lê “Modelo” entende-se como os dados resultantes do ajuste do modelo N-CSTR descrito por Levenspiel (1999).

De forma complementar, pode-se analisar a similaridade dos dados obtidos nas simulações e nos experimentos em laboratório. Esta comparação pode ser observada na Figura 16 e na Tabela 13, onde é exposta uma análise estatística comparativa entre as duas séries de dados.

Figura 14 – Curvas DTR do ensaio simulado de traçador para condição 1



Após o teste de normalidade para os dados experimentais e simulados, concluiu-se que ambos não possuíam distribuição normal. Para verificar a similaridade destes dados obtidos lançou-se mão do teste U de Mann-Whitney. Após a realização deste teste, concluiu-se que as amostras são estatisticamente iguais, pois o mesmo resultou em $p = 0,940$ ($\alpha = 0,05$).

Figura 15 – Curvas de DTR do ensaio experimental de traçador para condição 1

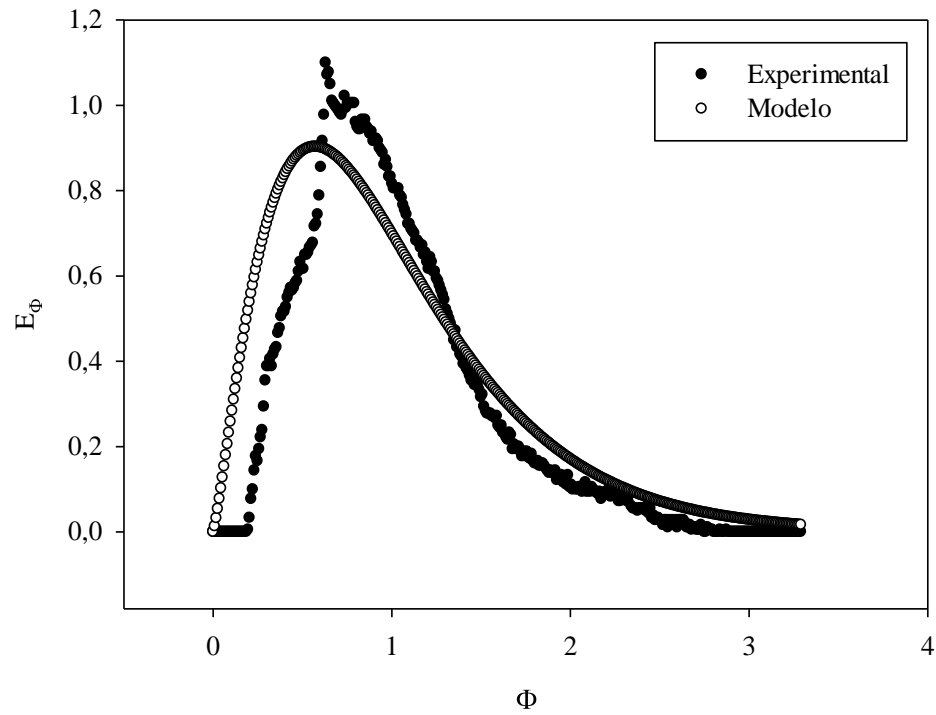
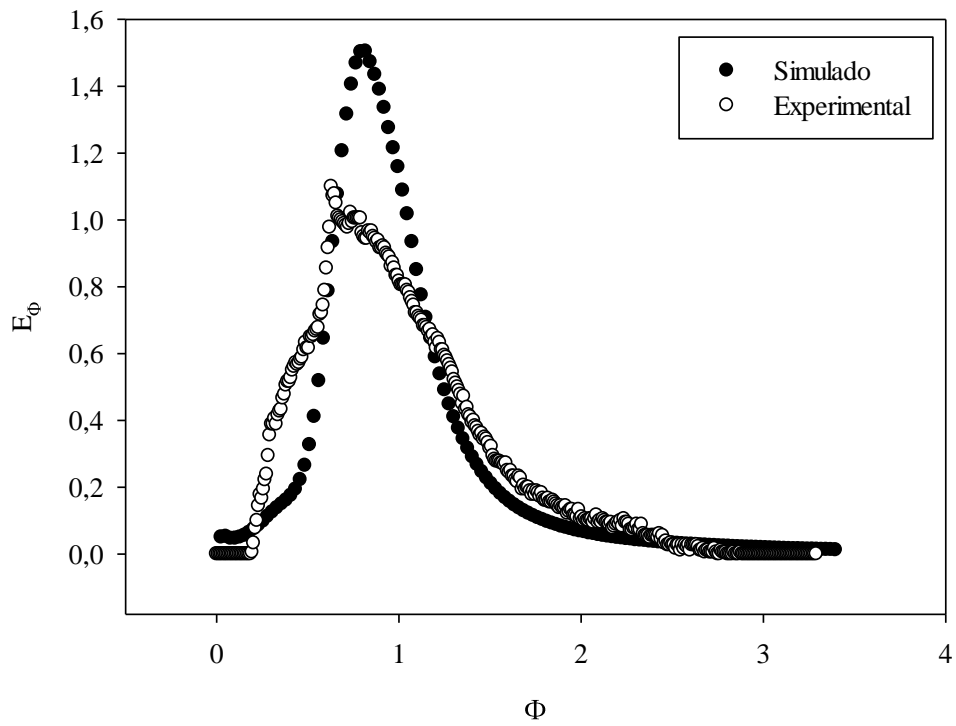
Figura 16 – Curvas E_Φ dos ensaios de injeção de pulso: simulado e experimental (condição 1)

Tabela 13 – Estatística descritiva dos dados obtidos na simulação e no experimento para a condição 1

Parâmetro	Simulado	Experimental
Tamanho da amostra	133	372
Média	0,294	0,303
Mediana	0,0792	0,144
1º quartil	0,0302	0,0106
3º quartil	0,331	0,572
Desvio padrão	0,428	0,336
Erro padrão	0,0371	0,0174
Possui distribuição normal?	Não	Não

5.1.1.2. Validação da simulação do ensaio de traçador em DFC - Condição 2

Da mesma forma apresentada na condição 1, o resultado da simulação em DFC no *software CFXTM* do escoamento no R1 para a condição 2 pode ser observado na Figura 17, onde são expostos os vetores velocidade no interior do reator.

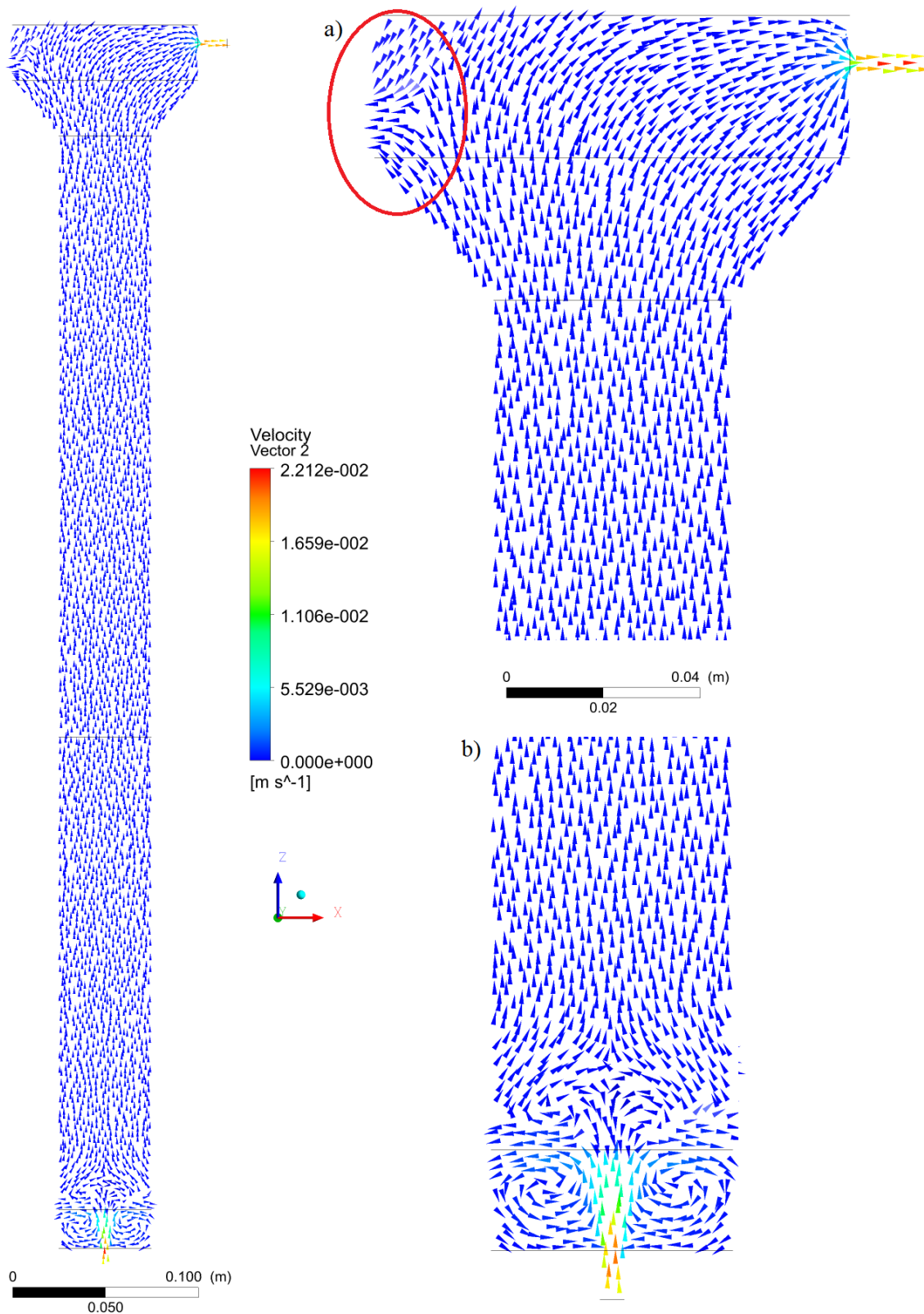
Percebe-se, entretanto, uma zona de recirculação na base do reator um pouco maior do que a apresentada na condição 1. Isto se justifica pela maior vazão de entrada, portanto, uma maior velocidade de entrada de fluido no reator. Esta zona de recirculação também se dissipa após o se deparar com o defletor (Figura 6) e entrar em contato com o meio suporte, entretanto, esta zona apresenta uma intensidade maior, causando maior mistura na parte inferior do reator.

Dados importantes também foram aferidos nesta simulação, como o padrão de escoamento e a obtenção das curvas DTR, relevantes na análise hidrodinâmica.

Com os dados gerados na condição 2 foi possível analisar, tanto graficamente quanto estatisticamente, a relação entre o simulado e o experimental, de forma similar ao realizado para a condição 1 (Figuras 18, 19 e 20).

Como apresentado na Tabela 10, o número N calculado para os dados obtidos experimentalmente e na simulação em DFC foram próximos, 6,67 e 5,55, respectivamente. Esta estreita relação pode ser evidenciada nas Figuras 18, 19 e 20, onde são comparados os resultados da simulação e da experimentação.

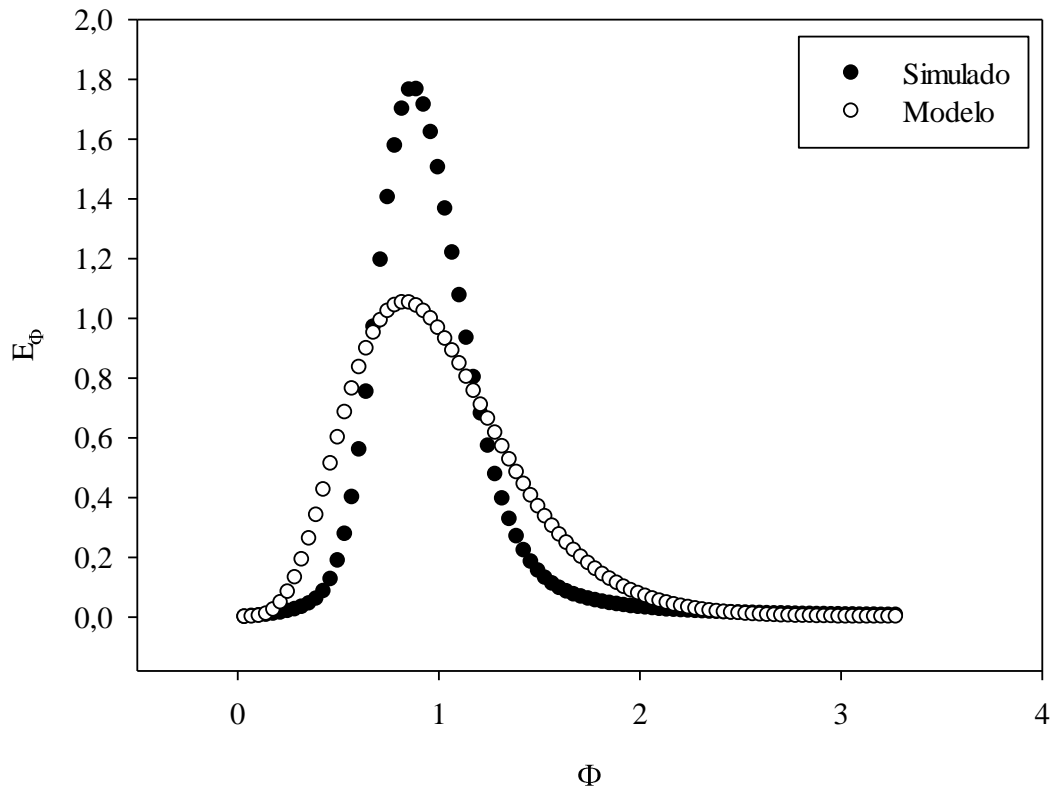
Figura 17 – Vetores velocidade em R1 (condição 2). a) topo do reator (saída); b) base do reator (entrada)



Os vetores velocidade presentes na parte superior esquerda de R1 (condição 2) apresentado na Figura 18a), destacados por um círculo vermelho, indicam sentido contrário ao

fluxo de saída do fluido no reator. Entretanto, esta imagem indica um comportamento e que nesta região não há uma saída do reator. Apesar dos vetores indicarem saída além do limite das paredes do reator, não há fluxo, apenas o tamanho das setas que indicam os vetores está em escala maior.

Figura 18 – Curvas E_{Φ} do ensaio simulado de traçador e do modelo N-CSTR para condição 2



Uma análise estatística foi requerida, neste caso, para garantir que a afirmação de similaridade não seja feita apenas por suposição. Como a distribuição de ambos os dados não seguiram uma distribuição normal, foi realizado o teste U de Mann-Whitney, e concluiu-se que as amostras são estatisticamente iguais, pois o mesmo resultou em um $P = 0,561$ ($\alpha = 0,05$).

A estatística descritiva dos dados obtidos na condição 2 pode ser observada na Tabela 14.

Após as análises estatísticas das condições 1 e 2, para os dados obtidos nas simulações e nos ensaios experimentais, pode-se concluir que o método de análise hidrodinâmica de reatores proposto por Levenspiel (1999) pode ser realizado em ambiente virtual através da Dinâmica de Fluidos Computacional.

Desta forma, julga-se que o desenvolvimento de reatores pode ser feito com as ferramentas de DFC disponíveis atualmente e análises do comportamento hidrodinâmico

podem ser realizados com confiança, uma vez que os resultados das simulações se assemelham aos resultados experimentais.

Figura 19 – Curvas E_{Φ} do ensaio experimental de traçador e do modelo N-CSTR para condição 2

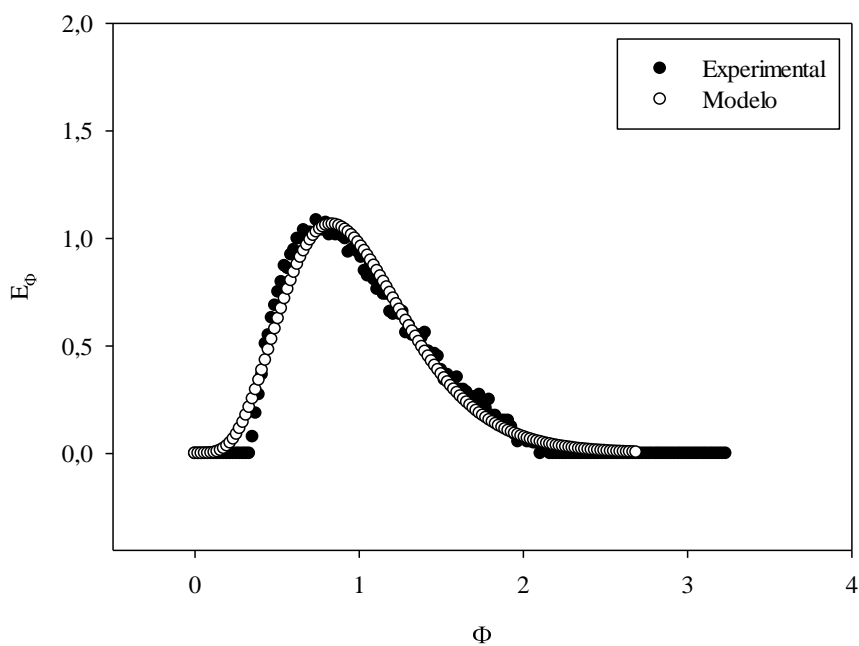


Figura 20 – Curvas E_{Φ} dos ensaios de injeção de pulso: simulado e experimental (condição 2)

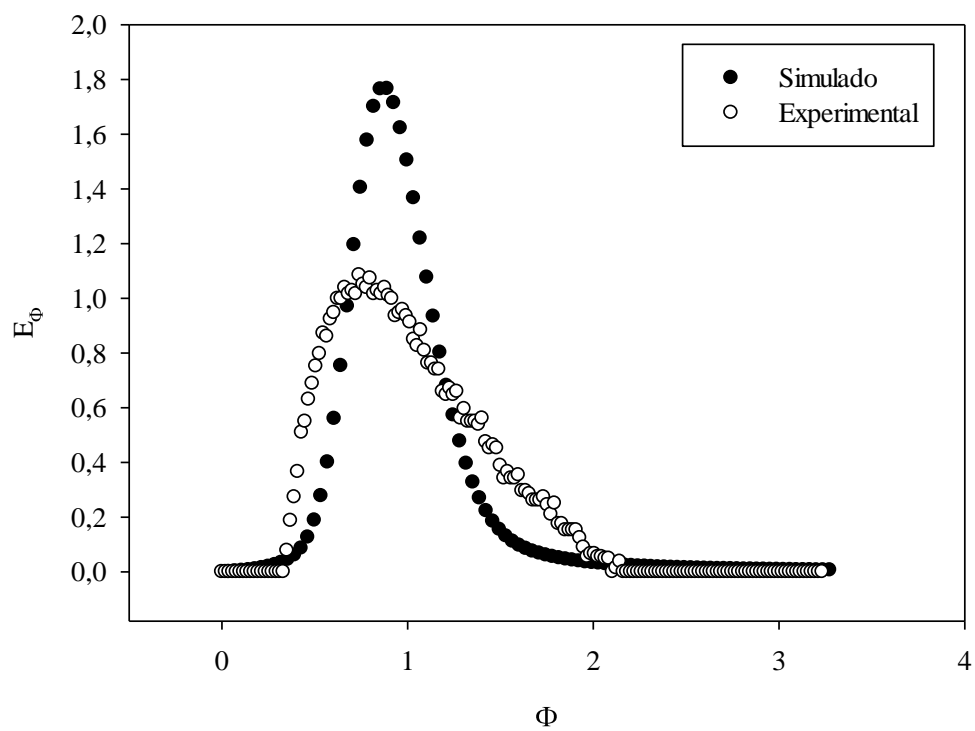


Tabela 14 – Estatística descritiva dos dados obtidos na simulação e no experimento para a condição 2

Parâmetro	Simulado	Experimental
Tamanho da amostra	167	167
Média	0,168	0,308
Mediana	0,00691	0,660
1º quartil	0,00213	0,000
3º quartil	0,0458	0,621
Desvio padrão	0,409	0,377
Erro padrão	0,0317	0,0292
Possui distribuição normal?	Não	Não

5.1.2. Reator em escala piloto (R2)

Nesta seção são apresentados os resultados das simulações do escoamento no R2 e sua respectiva análise hidrodinâmica. Ao final são obtidas as curvas de DTR desta simulação e é calculado o número de reatores de mistura completa em série (N-CSTR) equivalente para este reator.

5.1.2.1. Teste de independência de malha

No item 5.1.1 foi demonstrado o teste de independência de malha para o R1 e, de forma similar, este método também será apresentado para o R2.

O reator em escala piloto possui maiores dimensões quando comparado ao reator de bancada e possui maior detalhamento em seu interior, como mostrado no item 4.2.1 (Figuras 5 e 7). Desta forma, a geração da malha correspondente a este objeto em 3D resulta em maior quantidade de nós e elemento tetraédricos e, conseqüentemente, demanda maior capacidade de processamento durante a simulação. Então, torna-se indispensável uma análise criteriosa do teste de independência de malha, uma vez que a escolha de uma malha muito refinada demandaria tempo de simulação e esforço computacional excessivo. O contrário também é

válido, uma malha grosseira não contemplaria os detalhes do reator e, assim, os resultados não seriam confiáveis.

Foram geradas três malhas para o R2: malha padrão (MP), malha parcialmente refinada (MPR) e malha completamente refinada (MCR). A MP foi gerada com as configurações padrão do *Meshing*TM; a MPR foi gerada refinando apenas a região do reator referente à manta de lodo (local onde ocorre escoamento em meio poroso); e a MCR foi gerada refinando uma única vez todas as partes do reator. As malhas podem ser observadas na Figura 21 e seus dados estão dispostos na Tabela 15.

Tabela 15 – Dados das malhas de R1 (MP, MPR e MCR)

Item	MP	MPR	MCR
Nós	12776	27335	71210
Elementos	59132	133362	357770

Realizou-se uma simulação em DFC do escoamento do R2 para cada uma das malhas e comparou-se os valores de *Imbalance* de cada uma das simulações, como pode ser observado na Tabela 16.

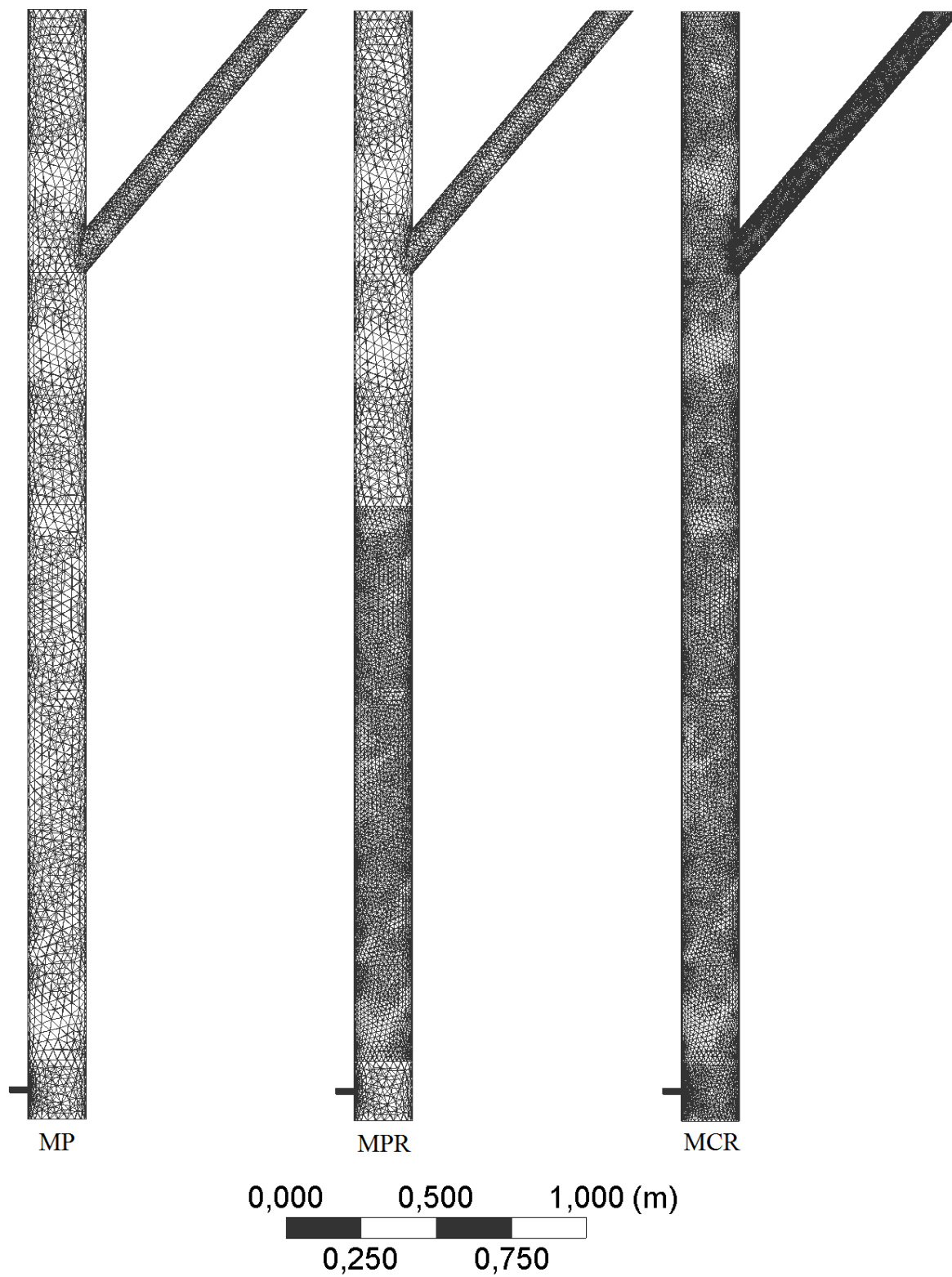
Tabela 16 – Teste de independência de malha para R2

Parâmetro	MP (%)	MPR (%)	MCR (%)
<i>P-Mass</i>	> 1	< 1	> 1
<i>U-Mom</i>	< 1	< 1	< 1
<i>V-Mom</i>	< 1	< 1	< 1
<i>W-Mom</i>	< 1	< 1	< 1

O teste de independência de malha realizado para o R2 indicou que apenas a malha parcialmente refinada (MPR) não falhou nas análises iniciais de desempenho durante a simulação. Como indicado na Tabela 16, o parâmetro *P-Mass* esteve abaixo de 1% ao final da simulação referente a MPR. Desta forma, decidiu-se utilizar esta malha na simulação do ensaio de traçador, obtenção da curva de DTR e do número N-CSTR.

As figuras que ilustram a tela de resultado das simulações do R2, em termos de *Imbalance*, estão presentes no Apêndice B.

Figura 21 – Malhas geradas no R2 para o teste de independência de malha (MP, MPR e MCR)



5.1.2.2. Simulação do ensaio de traçador no R2

As simulações em DFC realizadas no reator R2 visaram dar suporte ao entendimento do comportamento hidrodinâmico deste reator em diferentes condições. Sabe-se que em condições reais de operação o fluxo no interior de um reator anaeróbio é trifásico (líquido, sólido e gás), entretanto, para fins de simplificação e economia no processamento das simulações, considerou-se apenas o fluxo do líquido (monofásico). Configurou-se no *CFX*TM o líquido escoando em meio poroso na região da manta de lodo e livre nas demais regiões.

Os dados de entrada para as simulações realizadas para o R2, foram exibidos nas Tabelas 3 e 9. De posse destes dados de entrada e após a escolha da malha que resultou no melhor desempenho durante o teste de independência de malha, foi inserida a expressão de injeção de traçador no *CFX*TM (Equação (33)) e analisou-se o comportamento hidrodinâmico do R2 para condições operacionais listadas anteriormente (COV-7,5; COV-12,5; COV-17,5) de acordo com a metodologia proposta por Levenspiel (1999).

Os resultados das simulações estão expostos na Tabela 17, porém uma análise do comportamento hidrodinâmico de cada COV será feita nos itens a seguir.

Tabela 17 – Análise hidrodinâmica de R2 - modelo N-CSTR (simulado)

Parâmetro	COV (kgDQO m ⁻³ d ⁻¹)		
	7,5	12,5	17,5
TDH _{teórico} (h)	28,36	15,49	11,24
TDH _{médio} (h)	20,49	11,52	8,27
σ_{θ}^2 (-)	0,09	0,10	0,10
N	11	10	10

Uma vez realizadas as análises hidrodinâmicas das simulações de injeção por pulso de traçador, pode-se concluir que o reator tem comportamento tendendo ao fluxo pistonado para todas as condições de operação, pois resultaram em valores de N iguais a 11, 10 e 10, para cargas orgânicas de 7,5, 12,5 e 17,5 kgDQO m⁻³d⁻¹, respectivamente. Estes valores serão utilizados na modelagem integrada (hidrodinâmica + bioquímica), apresentadas posteriormente no item 5.1.3.

Ao se comparar os valores de $TDH_{teórico}$ e $TDH_{médio}$ de cada simulação, pode-se observar que o $TDH_{teórico}$ sempre apresentou valores superiores ao $TDH_{médio}$. Tal comportamento está ligado à região acima do separador trifásico, onde o biogás produzido no processamento anaeróbico é encaminhado e não há fluxo de líquido nesta região, sendo este apenas um local de estagnação (zona morta).

As relações entre $TDH_{teórico}$ e $TDH_{médio}$ foram calculadas⁶ para cada condição operacional e estão listadas abaixo:

- COV-7,5: 0,72
- COV-12,5: 0,74
- COV-17,5: 0,74

Para todas as condições estudadas, a relação $TDH_{médio}/TDH_{teórico}$ ficou abaixo de 75%, indicando que a região superior do reator R2 corresponde a aproximadamente 25% de volume morto.

O volume desta região em R2 foi de 21,91 litros. Ao relacionar este valor com o volume total de R2 (119,3 L), chega-se à relação de 18,36%, ou seja, aproximadamente 20% do volume do reator não é apropriadamente aproveitado. As implicações desta constatação podem ser observadas quando se calcula o $TDH_{teórico}$ deste tipo de reator e o resultado sempre é superior ao real, podendo levar o projetista a decisões mal fundamentadas. Uma análise mais detalhada sobre este tema está presente no item 5.1.2.2.4.

5.1.2.2.1. Análise hidrodinâmica: condição COV-7,5

Segundo os dados de entrada apresentados pelas Tabelas 3 e 9 e os dados para a simulação da injeção de pulso, pôde-se realizar a simulação do escoamento de vinhaça no interior do reator R2 e, assim, analisar o comportamento hidrodinâmico.

A injeção do pulso (Equação (33)) foi simulada sob as seguintes condições:

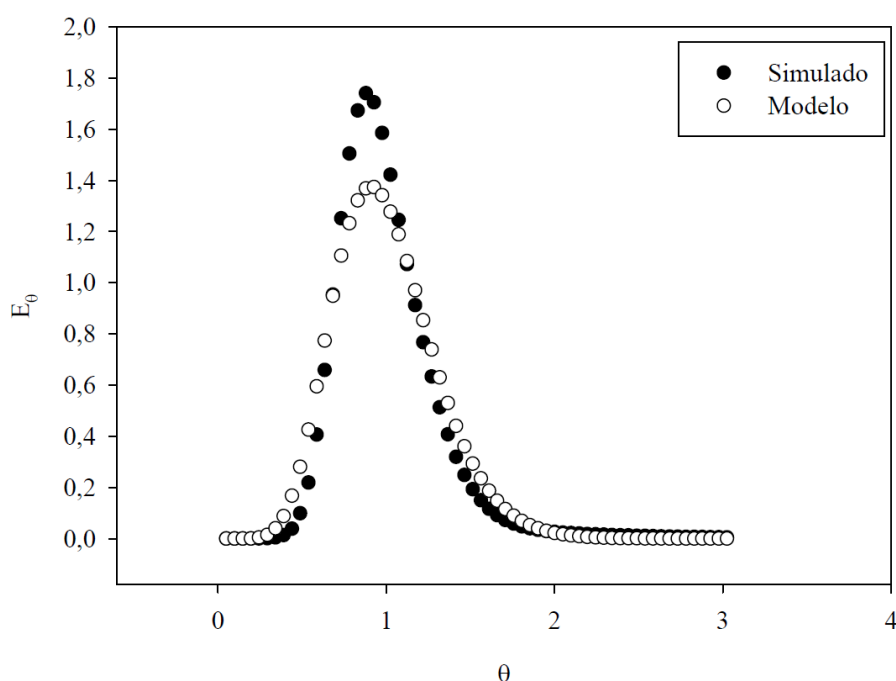
⁶Relação entre TDHs médio e teórico = $\frac{TDH_{médio}}{TDH_{teórico}}$

- $R_{M/V} = 0,01 \text{ g L}^{-1}$
- $\alpha = 60 \text{ min}$
- $\beta = 0,204 \text{ mg s}^{-1}$

Dada as condições iniciais supracitadas, simulou-se a injeção de 735,27 mg do traçador no reator R2 para a condição COV-7,5.

A simulação do ensaio de traçador e do fluxo de vinhaça pelo reator resultou em um conjunto de dados “concentração vs tempo” (curvas C e E_θ), na espacialização dos vetores velocidade e em linhas de fluxo. Os resultados da curva E_θ , de vetores velocidade e de linhas de fluxo são mostrados a seguir.

Figura 22 – Curva E_θ para o R2 considerando os dados simulados e o modelo N-CSTR – COV-7,5



De acordo com os resultados já aprestados na Tabela 17, para uma COV de 7,5 $\text{kgDQO m}^{-3}\text{d}^{-1}$, o modelo de reatores de mistura completa em série (N-CSTR) indicou número N igual a 11. Isto indica que o escoamento deste reator, para suas respectivas condições de operação, tende a ser pistonado. Este resultado pode ser corroborado por meio da análise dos vetores velocidade em seu perfil longitudinal obtidos na simulação em DFC. Na Figura 23 são ilustrados os vetores velocidade no reator R2 após o escoamento atingir o regime permanente. Observa-se na parte inferior do reator, próximo à entrada do afluente, uma pequena zona de recirculação interna provocada pelo fluxo de entrada do fluido (setas vermelhas). Esta zona de recirculação estende-se por aproximadamente 40 centímetros a partir do fundo do reator. A

partir deste ponto os vetores velocidade apontam predominantemente em direção ao eixo “z”. Considerando o reator com aproximadamente 3,73 metros de comprimento, a região de recirculação praticamente não influencia no escoamento.

Outro importante resultado obtido na simulação do ensaio do traçador foi a recuperação da massa de traçador injetado no reator. Para a condição COV-7,5 foram recuperados 560,90 mg de traçador, indicando 76,4% de recuperação. Pode-se inferir que a quantidade de traçador não recuperada ficou “presa” no interior do reator R2 devido a três motivos:

- 1) a zona de recirculação presente nos primeiros 40 centímetros do reator representa um local em que uma parcela do fluido fica por tempo maior do que o previsto, indicando uma retenção temporária do traçador;
- 2) a zona de estagnação presente no topo do reator possui um volume representativo perante o volume total do reator e nesta região o escoamento apresenta-se praticamente parado (velocidades próximas de zero), como será exposto a seguir;
- 3) pode-se considerar que o erro numérico associado à solução das equações relacionadas ao escoamento do fluido (advecção e difusão) possam estar interferindo em uma parcela dos resultados das simulações.

Acredita-se, portanto, que os motivos “1” e “2” são mais significativos nos resultados de recuperação de massa. Entretanto, como demonstrado na validação da simulação do ensaio de traçador (item 5.1.1 - Tabela 10), a recuperação da massa demonstrada para a condição COV-7,5 pode estar representando um comportamento condizente com a realidade.

Desta forma, pode-se identificar poucas zonas de mistura no interior do reator e, portanto, uma predominância de linhas de fluxo paralelas entre si. Este escoamento pode ser, portanto, caracterizado como próximo ao pistonado. A Figura 24 indica de maneira clara estas linhas de fluxos presentes no interior do reator R2, identificadas pela simulação em DFC. Ademais, o formato tubular do reator e a elevada relação entre altura e diâmetro favorecem para este tipo de escoamento.

Realizou-se uma simulação com os dados de entrada da condição COV-12,5 desconsiderando a zona estagnada a fim de verificar sua influência no $TDH_{\text{médio}}$, no escoamento e na porcentagem de recuperação de massa. Esta simulação será apresentada no item 5.1.2.2.4.

Figura 23 – Vetores velocidade para COV-7,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator

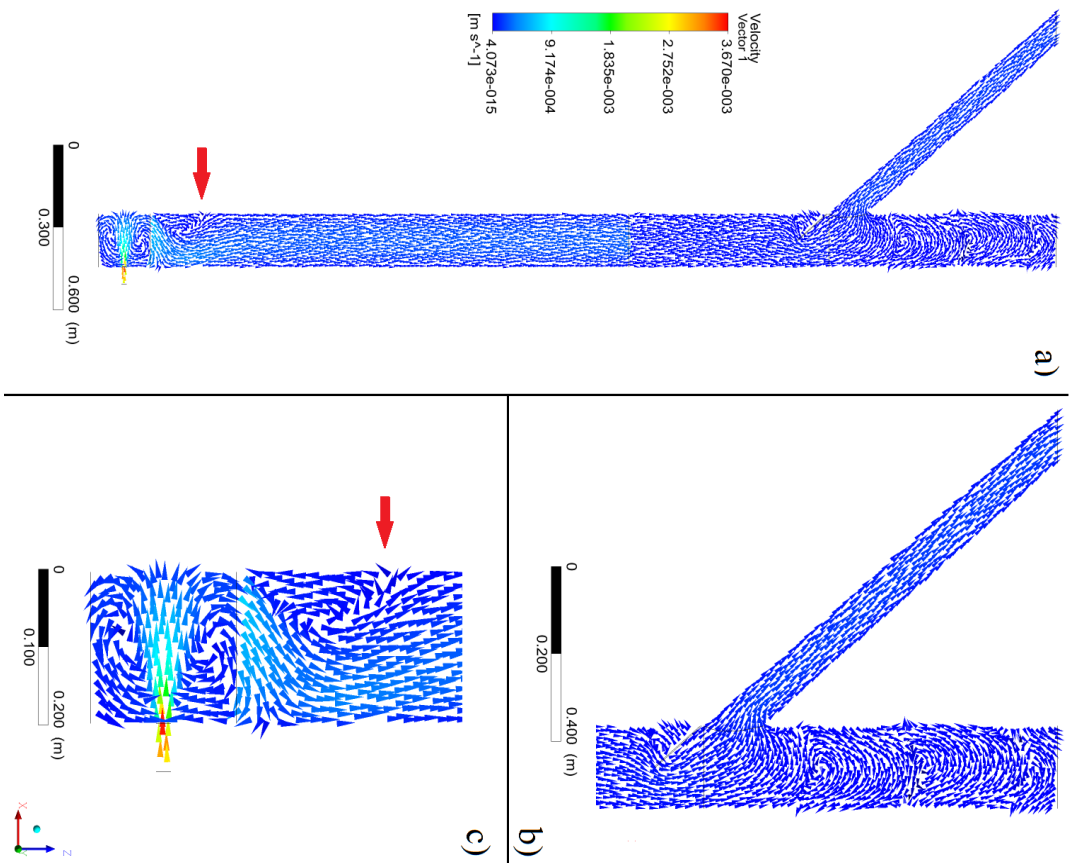
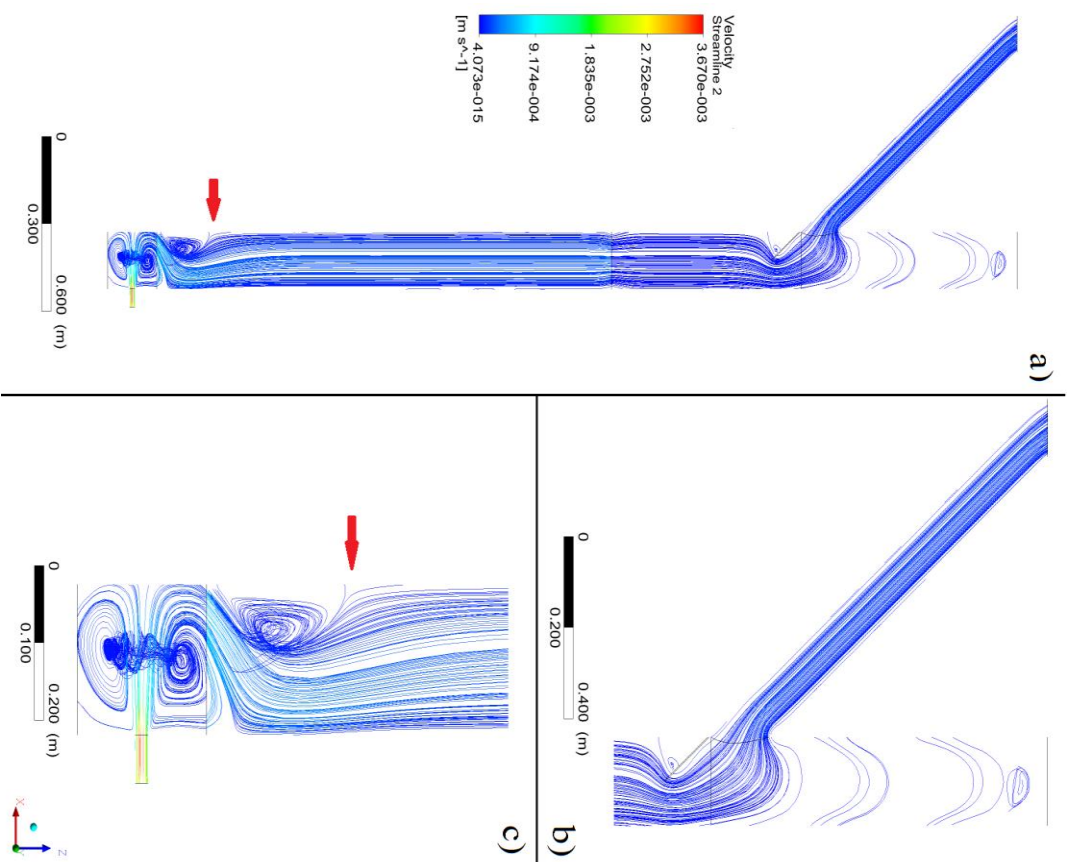


Figura 24 – Linhas de fluxo para COV-7,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator



Duas importantes observações podem ser feitas a respeito dos resultados obtidos na simulação:

- 1) as linhas de fluxos evidenciaram a estagnação do escoamento na parte superior do reator, demonstrando uma significativa zona morta presente neste reator (Figura 24b). Esta região de estagnação foi projetada como uma zona de sedimentação, onde a velocidade de escoamento apresenta-se quase nula;
- 2) a pequena porosidade ($\epsilon = 0,178$) calculada para a COV de $7,5 \text{ kgDQO m}^{-3}\text{d}^{-1}$ na manta de lodo ocasionou aumento da velocidade do fluido, observável na transição entre o fundo e a manta de lodo (Figura 24c), que pode ter contribuído na determinação do número N igual a 11, visto que o aumento da velocidade diminui o tempo de permanência do fluido na região porosa (manta de lodo).

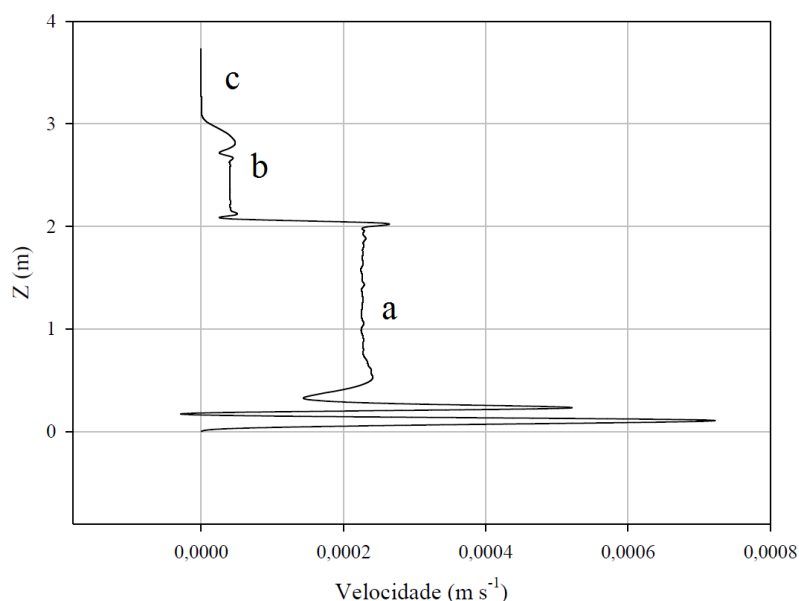
Por meio da ferramenta “*probe*” presente no *CFD-Post*TM pôde-se aferir a velocidade em qualquer ponto do reator. Configurou-se tal ferramenta para retornar a velocidade do fluido a duas diferentes alturas: a) 1,15 m; b) 2,15 m; e c) 3,15 m sendo a primeira contida na manta de lodo, segunda logo acima da mesma e a terceira na região de estagnação. As amostragens foram realizadas variando apenas a posição no eixo “z”, enquanto “x” e “y” se mantiveram na posição zero (ponto “a” (0,0,1.15); ponto “b” (0,0,2.15); ponto “c” (0,0,3.15)). Estas amostragens resultaram em:

- a) $v_a = 2,26 \times 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$ (H = 1,15 m)
- b) $v_b = 4,24 \times 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ (H = 2,15 m)
- c) $v_c = 7,07 \times 10^{-8} \text{ m s}^{-1}$ (H = 3,15 m)

Ao relacionar os valores supracitados conclui-se que a velocidade no meio poroso (manta de lodo) é cerca de cinco vezes maior do que fora da mata de lodo ($v_a/v_b = 5,33$), enquanto a velocidade na região do topo do reator se aproxima de zero (na ordem de 10^{-8}).

A fim de ilustrar os dados de velocidade ao longo da altura do reator R2, traçou-se uma linha ao longo do eixo Z (mantendo a mesma posição “x” e “y” igual a zero - Figura 69) com 30 pontos de amostragem igualmente espaçados, e foi gerado o gráfico “velocidade vs altura (Z)”, como se vê na Figura 25.

Figura 25 – Perfil de velocidade no R2 ao longo do eixo Z



Observa-se, então, pela Figura 25 que a velocidade reduz à medida que a fluido percorre o reator no eixo “Z”. Destaca-se a manta de lodo (a) apresentando velocidade superior à zona de sedimentação (b) e, como já mencionado, velocidades próximas de zero na denominada zona de estagnação (c). As velocidades na parte inferior do reator R2 apresentam-se com elevada variação devido à recirculação que ocorre na entrada de afluente, como pôde ser observado na Figura 24c.

Desta forma, após expostos os argumentos e interpretações sobre o comportamento hidrodinâmico do R2 nas condições de COV-7,5, os resultados aqui obtidos corroboram e justificam o escoamento tendendo ao pistonado indicado pelo ensaio de traçador realizado em DFC (N = 11).

5.1.2.2.2. Análise hidrodinâmica: condição COV-12,5

O comportamento hidrodinâmico para a condição de COV-12,5 se assemelha ao discutido no item anterior (COV-7,5), desta forma serão expostas as principais considerações sobre a presente discussão.

Os parâmetros para a simular a injeção de pulso, dada pela Equação (33), para esta condição foram:

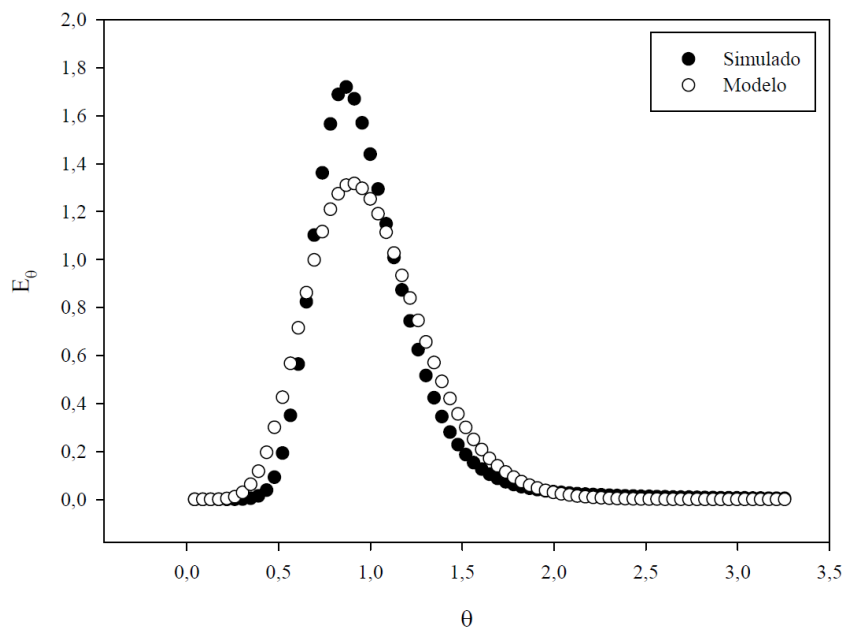
- $R_{M/V} = 0,01 \text{ g L}^{-1}$
- $\alpha = 30 \text{ min}$
- $\beta = 0,417 \text{ mg s}^{-1}$

Dada as condições iniciais supracitadas, simulou-se a injeção de 750,15 mg do traçador no reator R2 para a condição COV-12,5. Foram recuperados 565,82 mg desta quantia de traçador inserida no reator, dado que resulta em 75,43% de recuperação.

A curva E_{θ} (Figura 26), os vetores velocidade (Figura 27) e as linhas de fluxo (Figura 28) da simulação do escoamento de R2 para a condição COV-12,5 são apresentadas a seguir.

O modelo de reatores de mistura completa em série (N-CSTR) retornou número de reatores igual a dez (10), indicando que este reator na condição COV-12,5 apresenta escoamento tendendo ao pistonado. Portanto, devido às características do reator (tubular, altura elevada e pequeno diâmetro) e as análises já realizadas, justifica-se o comportamento hidrodinâmico tendendo ao pistonado.

Figura 26 – Curva E_{θ} para o R2 considerando os dados simulados e o modelo N-CSTR – COV-12,5



A vazão na condição COV-12,5 foi 1,87 vezes maior do que a apresentada pela COV-7,5 e, conseqüentemente, as velocidades no interior do reator, como pode ser observado pela Figura 27. Destaca-se também o ponto em que a recirculação do fluido deixa de acontecer, indicado pela seta vermelha nas Figuras 27 e 28, em que este ponto apresenta-se a, aproximadamente, 54 cm do fundo do reator. Entretanto, mesmo este valor sendo 14 cm maior

do que o visto em COV-7,5, o volume ocupado pela zona de mistura ainda é pequeno em relação ao ocupado pelo fluxo laminar, observado no restante do reator. Este comportamento pode ser facilmente diagnosticado analisando as linhas de fluxo apresentadas na Figura 28.

5.1.2.2.3. Análise hidrodinâmica: condição COV-17,5

Tal qual as condições apresentadas anteriormente, a simulação da COV-17,5 resultou, apesar de possuir a maior vazão das três simulações, resultados que podem classificar o comportamento hidrodinâmico como tendendo ao pistonado.

Os seguintes valores foram utilizados para o teste de traçador (Equação (33)) realizado na condição COV17,5:

- $R_{M/V} = 0,01 \text{ g L}^{-1}$
- $\alpha = 10 \text{ min}$
- $\beta = 1,27 \text{ mg s}^{-1}$

Dada as condições iniciais supracitadas, simulou-se a injeção 762,31 mg de traçador no reator R2 para a condição COV-17,5. Foram recuperados 575,98 mg desta quantia de traçador inserida no reator, dado que resulta a 75,56% de recuperação.

O resultado do modelo N-CSTR para a condição COV-17,5 resultou em 10 reatores de mistura completa em série, mesmo valor encontrado para a COV-12,5. Isto indica que as condições se comportaram de maneira similar, apesar da diferença de vazão afluente.

Este comportamento se repete na espessura da zona de recirculação presente na base do reator R2. A condição COV-17,5 apresentou uma zona de recirculação de aproximadamente 56 cm, enquanto a COV-12,5 obteve 54 cm. Portanto, as Figuras 29, 30 e 31 apresentam, respectivamente, os vetores velocidade, as linhas de fluxo e a curva E_{θ} para a simulação na condição COV-17,5.

Figura 27 – Vetores velocidade para COV-12,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator

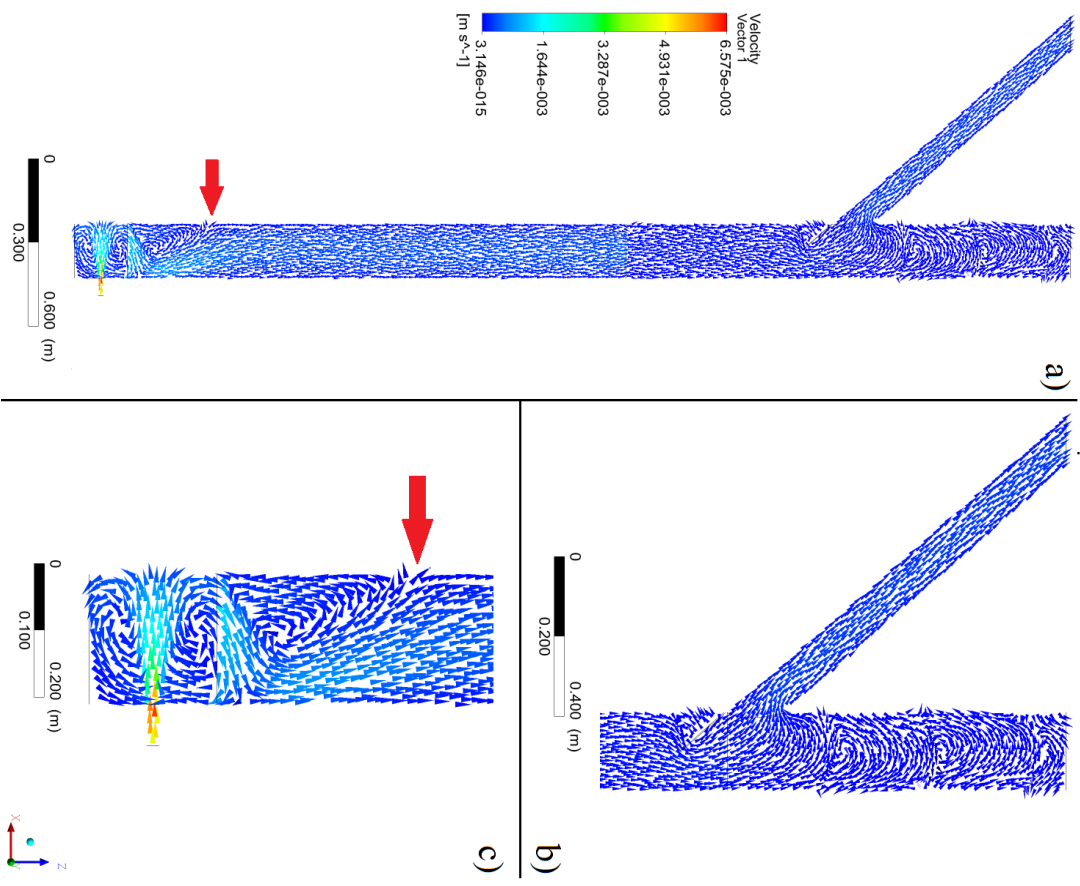


Figura 28 – Linhas de fluxo para COV-12,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator

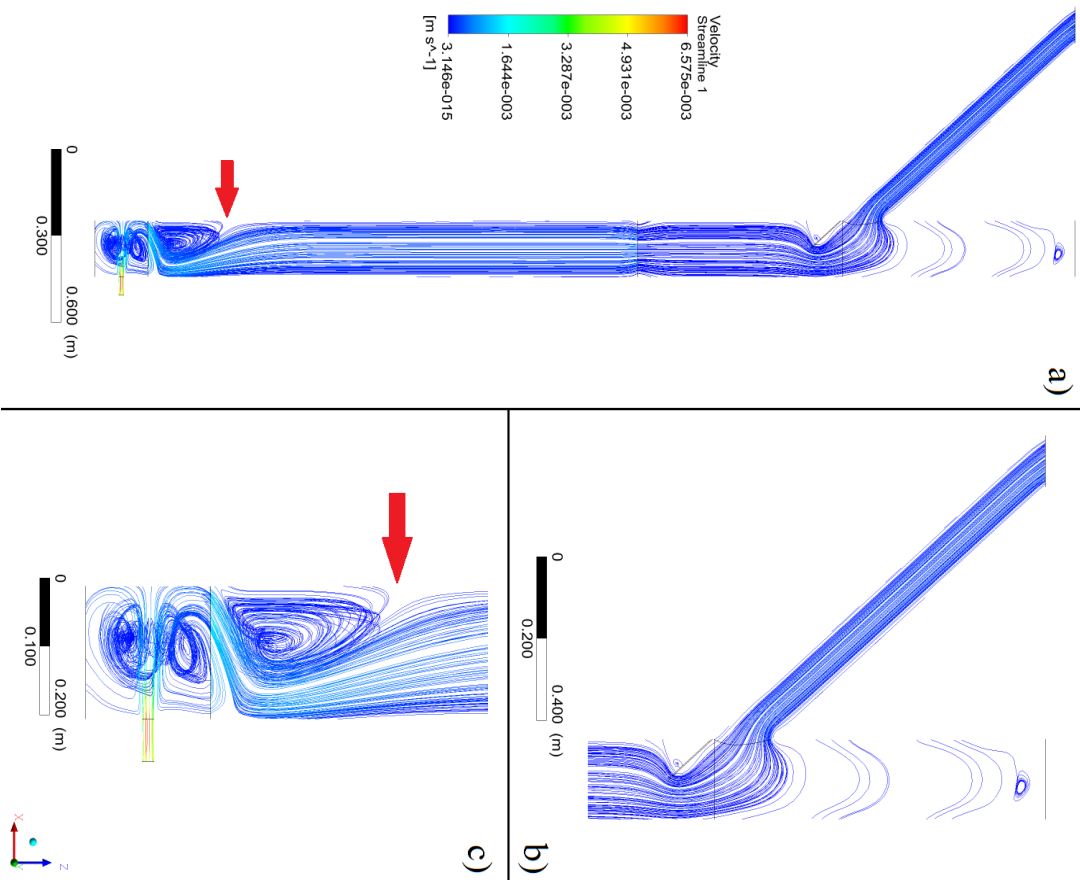
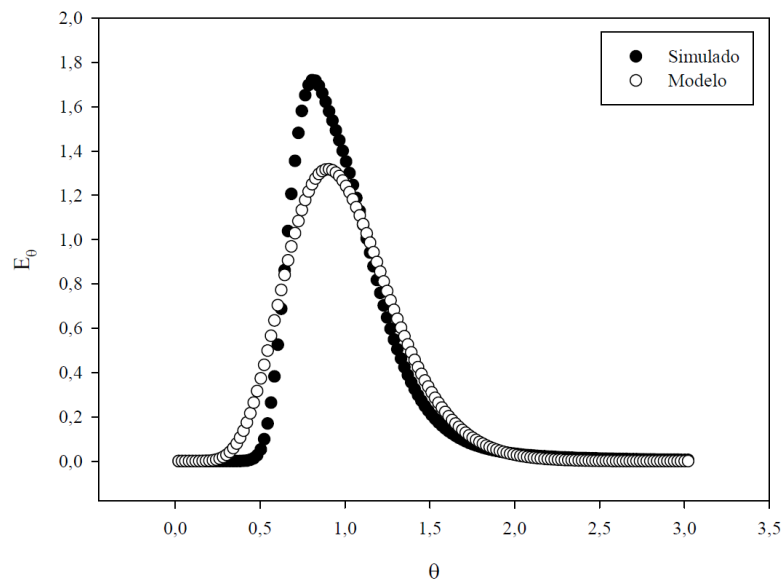


Figura 29 – Curva E_{θ} para o R2 considerando os dados simulados e o modelo N-CSTR – COV-17,5



5.1.2.2.4. Análise hidrodinâmica: reator sem a zona estagnada (COV-12,5)

Após as simulações em DFC realizadas e dos resultados obtidos, tanto no ensaio de traçador quanto na análise do escoamento, surgiram algumas indagações acerca da zona de estagnação e de sua influência nos resultados. Desta forma decidiu-se realizar uma simulação teste com o reator R2 (modificado) sem a parte superior, região em que a velocidade de escoamento se aproximou de zero em todas as condições anteriormente testadas, denominado como reator R2_{mod}. Esta nova configuração pode ser visualizada na Figura 32.

Definiu-se que os dados da condição COV-12,5 seriam os dados de entrada da simulação da injeção de pulso (traçador). Esta escolha foi aleatória, uma vez que o objetivo desta simulação foi a verificação da influência da zona estagnada no escoamento e no ensaio de traçador.

Figura 30 – Vetores velocidade para COV-17,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator

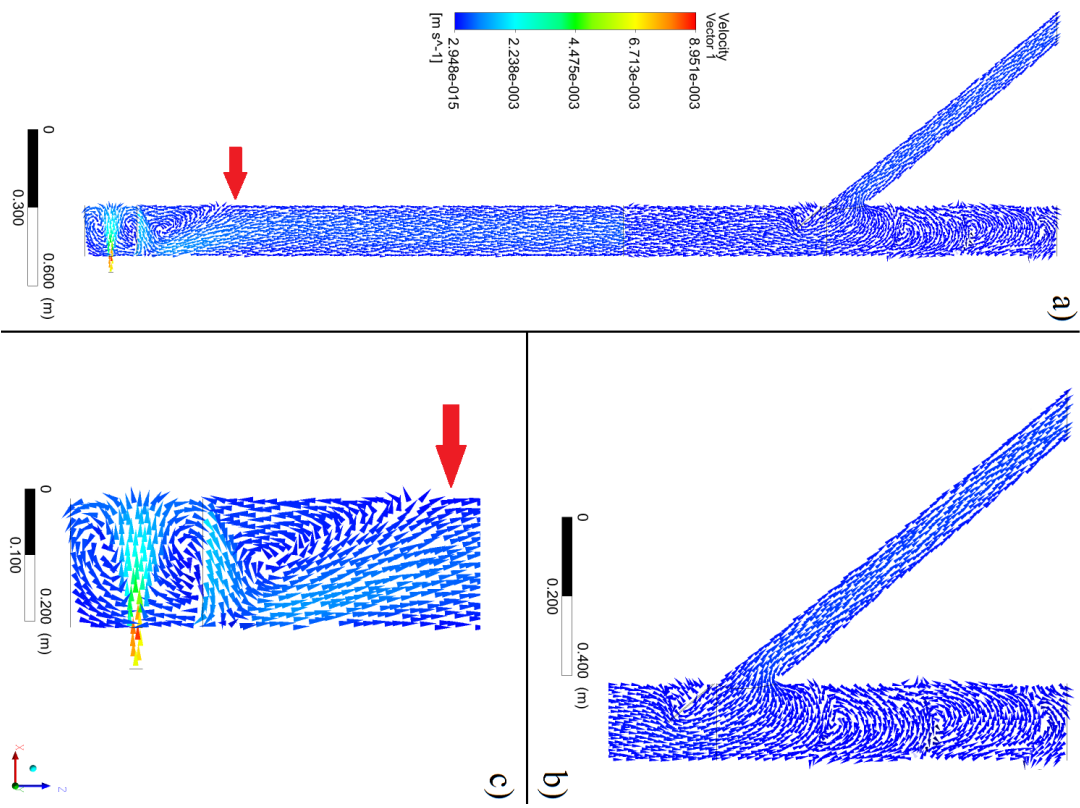


Figura 31 – Linhas de fluxo para COV-17,5. a) reator; b) braço de saída e zona estagnada; c) entrada. Obs: setas em vermelho indicam o fim da zona de recirculação na parte inferior do reator

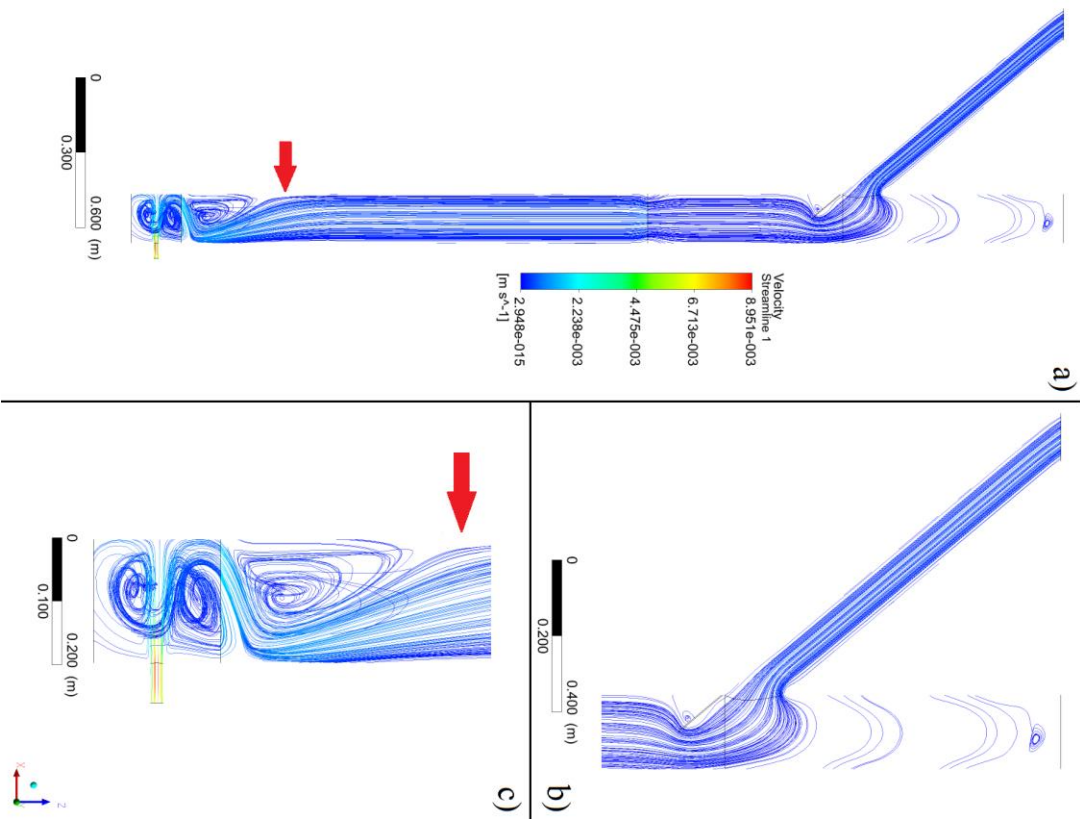
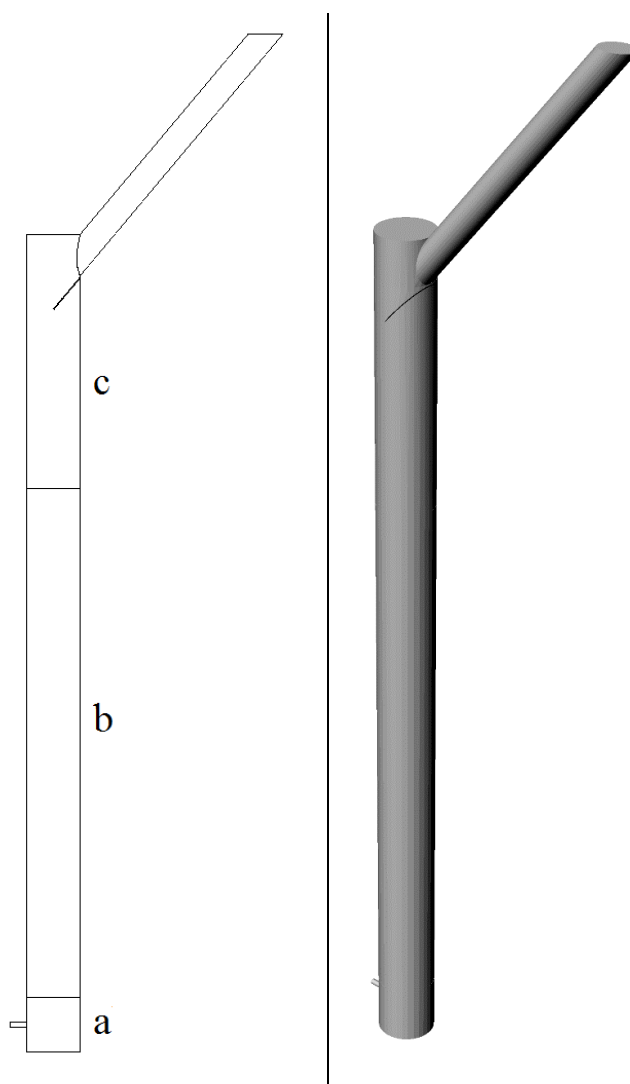


Figura 32 – Reator R2 modificado ($R2_{mod}$) – vista em corte longitudinal (esquerda) e vista tridimensional (direita). Obs: a) base; b) manta de lodo; c) zona de sedimentação e braço de saída do efluente



Com a remoção da região que apresentou estagnação, o novo volume do reator, sem considerar a porosidade da manta de lodo (região “b” na Figura 32), foi de 97,41 L e o volume útil, devido à porosidade em COV-12,5, foi de 53,11 L. Ao relacionar os volumes úteis de R2 (75,01 L) e $R2_{mod}$ para a condição COV-12,5 percebe-se que o volume de $R2_{mod}$ equivale a aproximadamente 71% do volume inicial de R2. Este efeito sobre o volume pode ser observado quando se calcula o $TDH_{teórico}$ para ambos R2 e $R2_{mod}$, como apresentado abaixo:

- $TDH_{teórico}$ para R2 (COV-12,5): 15,52 horas
- $TDH_{teórico}$ para $R2_{mod}$ (COV-12,5): 10,96 horas

A relação entre os TDH calculados segue a mesma tendência da relação entre os volumes, em que o TDH para $R2_{mod}$ equivale a aproximadamente 71% do TDH para R2, ambos na condição COV-12,5.

A simulação do ensaio de traçador em DFC resultou nas curvas C e E_{θ} , no $TDH_{\text{médio}}$, no modelo N-CSTR e na massa recuperada. Após análise destes resultados, foi realizado um teste estatístico entre os resultados obtidos em $R2$ e $R2_{\text{mod}}$ com o objetivo de verificar a similaridade dos dados obtidos em ambas as simulações.

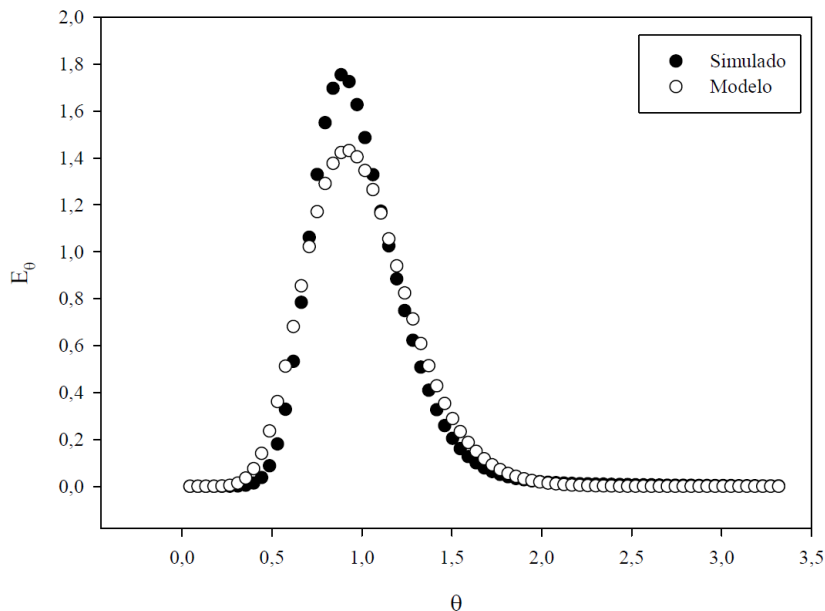
Os seguintes valores foram utilizados para o teste de traçador (Equação (33)) realizado na condição $COV_{12,5}$ para $R2_{\text{mod}}$:

- $R_{M/V} = 0,01 \text{ g L}^{-1}$
- $\alpha = 30 \text{ min}$
- $\beta = 0,295 \text{ mg s}^{-1}$

Dada as condições iniciais supracitadas, simulou-se a injeção $531,02 \text{ mg}$ de traçador no reator $R2_{\text{mod}}$ para a condição $COV-12,5$.

A curva E_{θ} obtida nesta simulação está representada na Figura 33 e pode-se notar uma significativa semelhança com a curva gerada na condição $COV-12,5$ para $R2$ (item 5.1.2.2.2 - Figura 26).

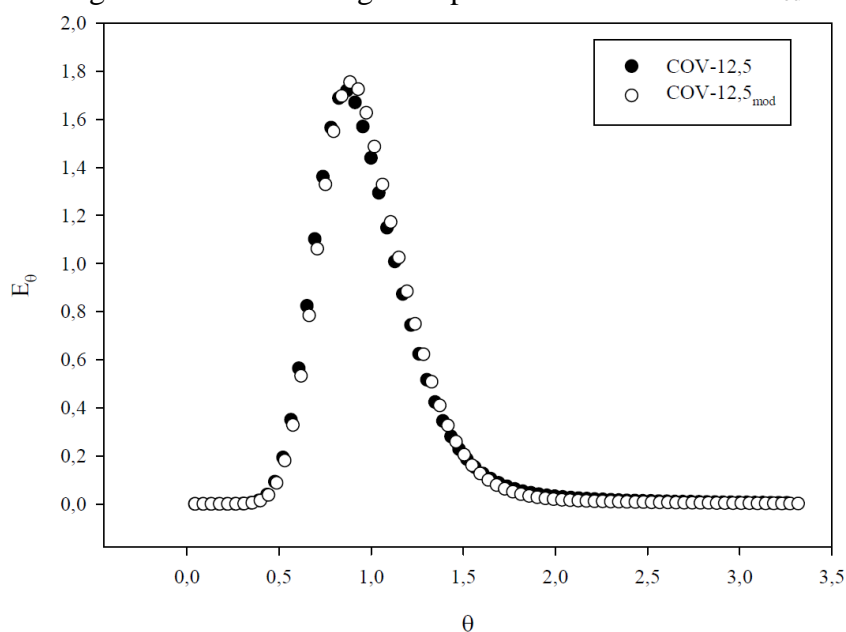
Figura 33 – Curva E_{θ} para $R2_{\text{mod}}$ na condição $COV-12,5$ (simulado e modelo N-CSTR)



Os dados obtidos a partir das curvas E_{θ} gerada para os reatores $R2$ e $R2_{\text{mod}}$ foram plotados (Figura 34) e, apenas com uma comparação visual, pode-se comprovar a semelhança entre os dados obtidos. Desta forma, para comprovar esta similaridade, foi realizada uma análise estatística (teste U de Mann-Whitney) entre os dados das curvas E_{θ} . Após aplicar este teste,

concluiu-se que a diferença entre as médias dos dois grupos analisados não foi grande o suficiente para excluir a possibilidade de que a diferença entre os dados foi devida a uma variabilidade aleatória na amostragem. Portanto, não houve diferença estatística entre os dois grupos de dados ($P = 0,238$; $\alpha = 0,05$).

Figura 34 – Curvas E_{θ} gerada para os reatores R2 e R2_{mod}



Os resultados desta simulação, obtidos na aplicação do modelo N-CSTR e na análise da curva E_{θ} , são apresentados na Tabela 18. De maneira complementar compara-se os resultados da simulação de R2 para COV-12,5 com o objetivo de relacionar os resultados e analisar os efeitos da supressão da zona de estagnação.

Tabela 18 – Comparação entre os resultados obtidos na simulação da condição COV-12,5 para o reator R2_{mod} e R2

Parâmetro	Reator	
	R2 _{mod}	R2
TDH _{teórico} (h)	10,96	15,49
TDH _{médio} (h)	11,30	11,52
Relação TDH _{médio} /TDH _{teórico}	1,03	0,74
Massa injetada (mg)	531,02	750,15
Massa recuperada (mg)	404,90	565,82
Recuperação de massa (%)	76,24	75,43
N-CSTR	12	10

Sobre o tempo de detenção hidráulica, nota-se que o $TDH_{\text{médio}}$ de R2 equivale a 74% do $TDH_{\text{teórico}}$, enquanto esta relação se aproxima da unidade em $R2_{\text{mod}}$. Nota-se também que os valores de $TDH_{\text{médio}}$ para ambos os reatores foram muito próximos, chegando a relação ser aproximadamente uma unidade. Estas constatações indicam que a zona de estagnação do reator não contribui para o escoamento do fluido durante sua operação, mas apenas leva ao erro de cálculo de $TDH_{\text{teórico}}$. Portanto, pode-se concluir que o cálculo do $TDH_{\text{teórico}}$ de um reator que apresenta evidentes zonas mortas deve ser realizado desconsiderando o volume ocupado por tal zona.

A recuperação de massa de traçador injetada, um importante indicador do comportamento hidrodinâmico de um reator, apresentou valores similares para todas as simulações realizadas neste estudo, sendo estes em torno de 75%. De fato, esta constância na recuperação de massa, mesmo quando suprimida a região superior do reator (zona de estagnação), indica que o traçador não se difundiu nesta região nas simulações de R2.

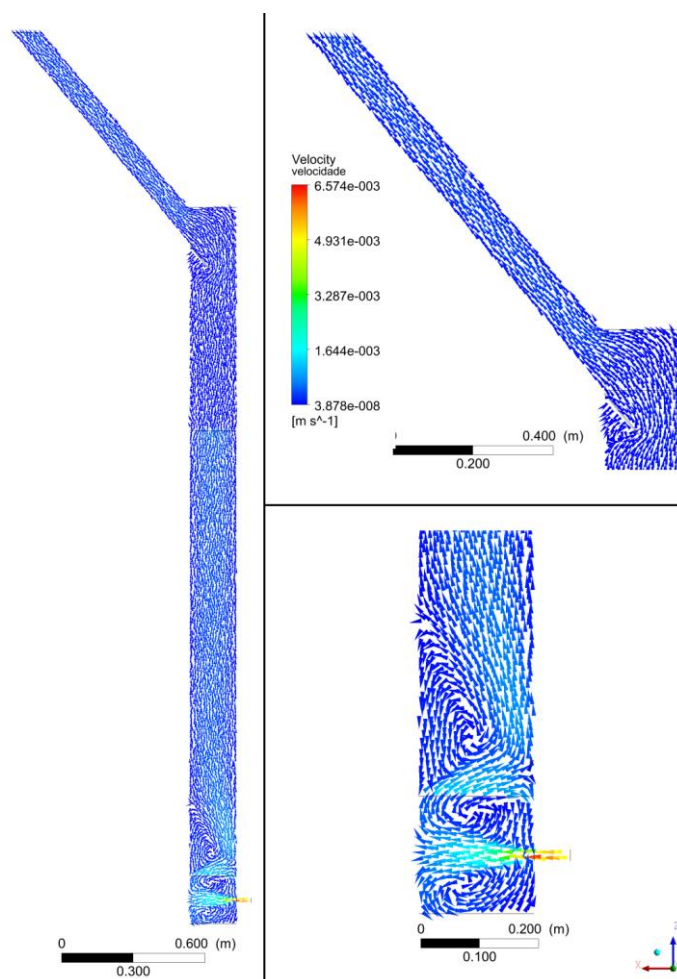
As hipóteses sobre os motivos da retenção de aproximadamente 25% de traçador no reator foram apresentadas anteriormente no item 5.1.2.2.1. Dentre as hipóteses, sugeriu-se que uma fração do traçador permanecia na zona estagnada do reator durante o escoamento. Entretanto, ao analisar os dados apresentados na Tabela 18, conclui-se que o traçador não permanece nesta região de forma a contribuir significativamente na sua retenção no interior do traçador.

Portanto, pode-se inferir que: ou o traçador fica “preso” no reator durante o escoamento na região de recirculação observada na base do reator; ou este residual de traçador não recuperado se deve a erro numérico durante a resolução das equações do escoamento; ou a junção destes dois fatores foram responsáveis por este comportamento.

O número de reatores de mistura completa calculados para esta simulação retornou o valor de 12, indicando tendência de escoamento pistonado, mesmo comportamento apresentado pelas outras simulações realizadas neste trabalho.

Os vetores velocidade resultantes desta simulação podem ser observados pela Figura 35. Cabe ressaltar que os resultados obtidos foram similares aos apresentados no item 5.1.2.2 (COV-12,5), uma vez que os dados de entrada foram os mesmos. Sendo assim, as mesmas observações realizadas naquele item podem ser feitas neste item, como a extensão zona de mistura na região da base (54 cm), valores de velocidade na manta de lodo e na região de sedimentação.

Figura 35 – Vetores velocidade para COV-12,5_{mod}



5.1.3. Modelo hidro-bioquímico do processamento anaeróbio

Como última etapa desta tese, foi desenvolvido um modelo que integrou a análise do comportamento hidrodinâmico de um reator UASB⁷ (número N-CSTR) e a modelagem da digestão anaeróbia da vinhaça⁸. Ressalta-se que a ferramenta utilizada nesta integração de modelos foi a dinâmica de sistemas, através do *software* VensimPLE[®].

⁷ A aplicação do modelo não se restringe apenas ao reator UASB, pois ensaios de traçadores (pulso ou degrau) podem ser realizados em qualquer tipo de reator e, assim, pode-se determinar o número N-CSTR para cada tipo.

⁸ O modelo da digestão anaeróbia, baseado no ADM1, foi desenvolvido de forma genérica. A escolha da vinhaça como substrato teve objetivo de exemplificar a aplicação do modelo e corroborar com os dados obtidos por Del Nery et al. (2016).

5.1.3.1. Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa

O modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa foi baseado nos estudos de Chapra (1997) e Batstone et al. (2002), sendo este último o modelo de digestão anaeróbia ADM1. Os parâmetros utilizados nesta etapa da modelagem, bem como seus respectivos valores, foram expostos no item 4.3.1 (Tabela 5, página 85).

O resultado da construção desta etapa do modelo no Vensim PLE[®] pode ser visualizado na Figura 36. Nesta figura é possível observar todos elementos constituintes da modelagem bioquímica, ademais é importante enfatizar que o modelo proposto opera em regime permanente (fluxo contínuo). Os termos “Taxa de saída de biomassa” e “Taxa de saída de substrato” indicam a saída contínua do residual de cada uma destas variáveis. A retirada de biomassa do sistema indica o descarte de lodo e a saída de substrato indica o efluente do sistema. Estas considerações são importantes, pois este conjunto de equações e relações equivalem a uma unidade de reator de mistura completa ($N\text{-CSTR} = 1$). Denota-se, didaticamente, este conjunto como “blocos de equações”.

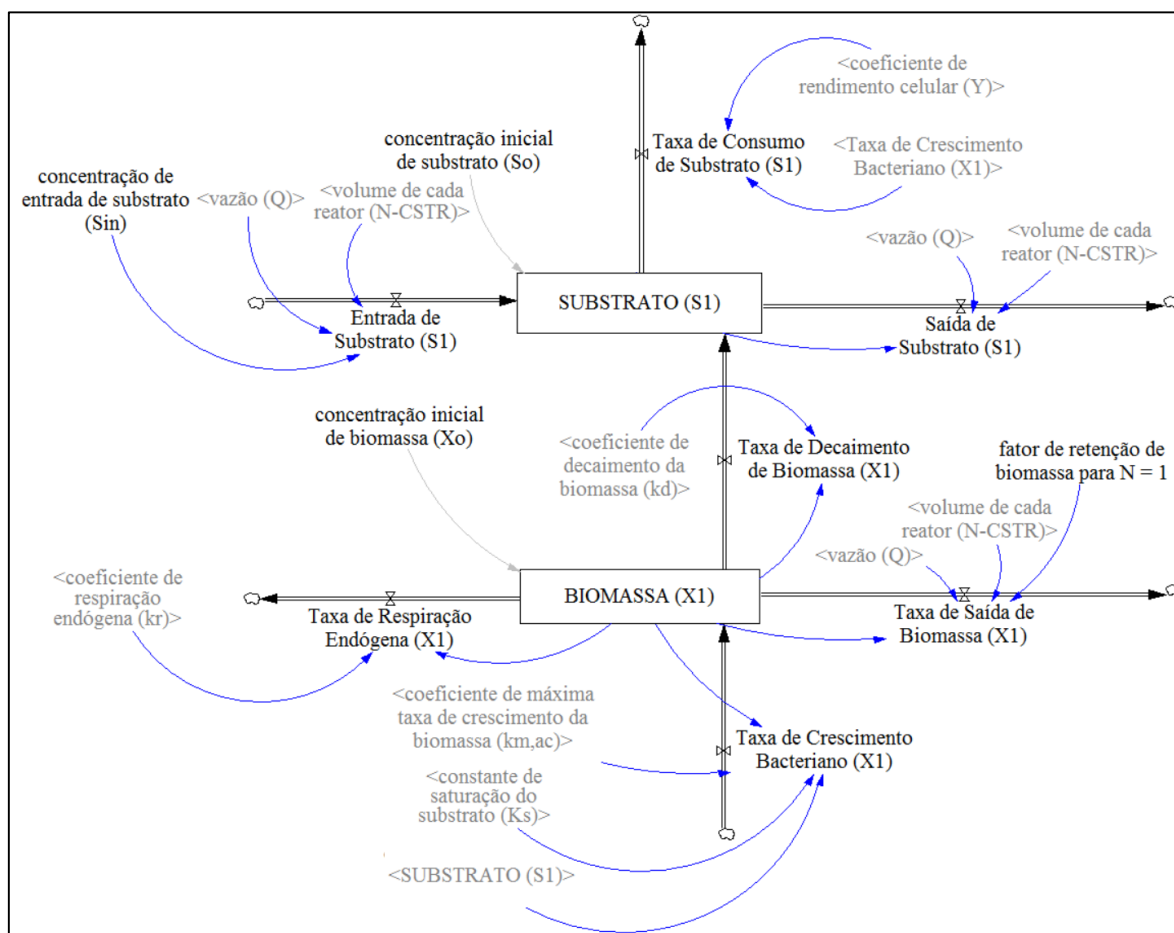
De acordo com os resultados obtidos nas simulações do ensaio de traçador, exibido no item 5.1.2.2, o número de reatores de mistura completa em série para o R2 foi igual a 11, 10 e 10, para as condições COV-7,5, COV-12,5 e COV-17,5, respectivamente.

Entretanto, considerando que este número indica a divisão de todo o reator em N partes, que as reações ocorrem exclusivamente na manta de lodo e que esta região ocupa aproximadamente metade do reator, optou-se por considerar que esta região equivale a $N/2$ reatores de mistura completa determinado pelo ensaio de traçador. Portanto, os números $N\text{-CSTR}$ para cada condição simulada foram 6, 5 e 5, respectivamente.

Por conseguinte, este foi o número de blocos de equações implementados no Vensim PLE[®] para cada. A implementação de N blocos de equações no modelo para cada condição justifica o termo “hidro-” no nome desta modelagem.

As Figuras 70, 71, 72 e 73 (Apêndice D) ilustram a implementação destes blocos de equações para a condição COV-7,5 feita no Vensim PLE[®]. Suprimiu-se as representações das condições COV-12,5 e COV-17,5 pela da similaridade com a forma adotada para COV-7,5.

Figura 36 – Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa implementado no Vensim PLE® para N = 1



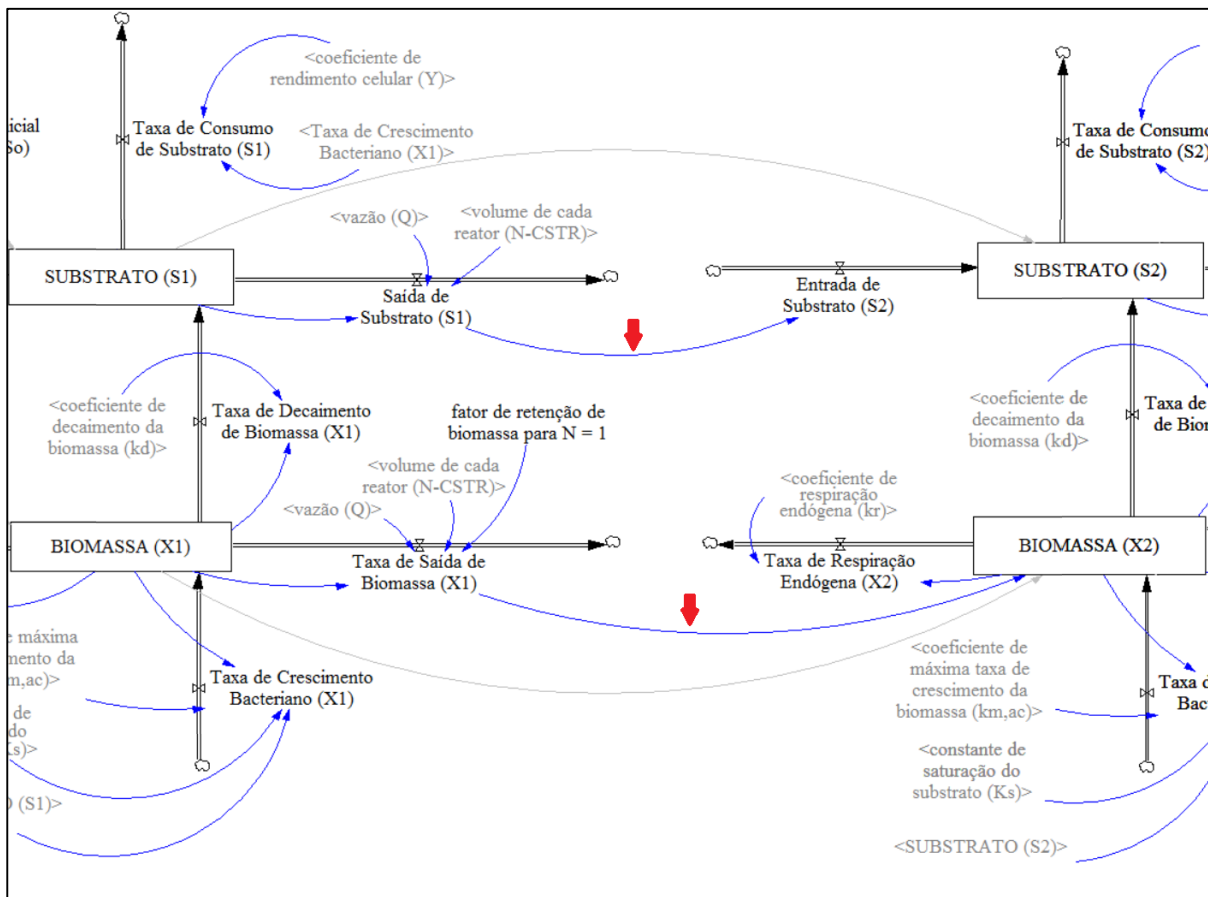
Para que a conexão entre os blocos de equações fosse realizada, considerou-se que as taxas de saída de biomassa e de substrato de um bloco “N” como as taxas de entrada para o bloco subsequente “N+1”. Na Figura 37 são ilustradas estas conexões, indicadas pelas setas vermelhas, entre os blocos de equações $N = 1$ e $N = 2$. Foram realizadas conexões da mesma forma para os demais blocos de equações ($N = 2 \rightarrow N = 3 \rightarrow N = 4$ e assim por diante).

Os reatores anaeróbios possuem a característica de produzir baixa quantidade de biomassa durante a operação⁹, quando representado no modelo como “coeficiente de rendimento celular (Y)”. Em sistemas aeróbios os valores de Y variam de acordo com o efluente a ser tratado e, de forma complementar, pode-se citar o valor $Y = 0,414$ para o tratamento de efluente de curtume (GOMES, 2006) e $Y = 0,6$ para esgotos sanitários (VON SPERLING, 2007), sendo todos para lodos ativado. Por outro lado, valores comuns de Y para a digestão anaeróbia estão na faixa de 0,05 para consumo de acetato (BATSTONE et al., 2002) e 0,15 para

⁹ Comparados aos sistemas aeróbios.

tratamento de esgotos sanitários (TCHOBANOGLIOUS; BURTON; STENSEL, 2003; CHERNICHARO, 2008). Ao comparar os valores de Y para as digestões aeróbia e anaeróbia, percebe-se que o coeficiente desta representa, aproximadamente, apenas um quarto do valor daquela. Em termos práticos, a remoção de biomassa de reatores aeróbios é feita, geralmente, de forma contínua, enquanto para sistemas anaeróbios a remoção é feita de forma intermitente e o cronograma desta retirada pressupõe estudo e monitoramento contínuo do lodo presente no reator anaeróbio (BASTOS, 2007).

Figura 37 – Conexões entre os blocos de equações $N = 1$ e $N = 2$. As setas vermelhas indicam as conexões do substrato e da biomassa



Desta forma, como o modelo considera um reator de mistura completa e taxa de saída de biomassa constante (tal qual um sistema de lodos ativados) e esta não é a realidade dos reatores anaeróbios, principalmente os de biomassa dispersa, incluiu-se um novo parâmetro ao modelo: fator de retenção de biomassa (FRB).

Define-se fator de retenção de biomassa como a relação entre a quantidade de sólidos retida no reator e a quantidade de sólidos que transpassa ao próximo bloco de equações ou junto

ao efluente final. Os valores de FRB variam entre 0 e 1, em que 0 indica total retenção de biomassa e 1 indica o transpasse total de biomassa.

Portanto, o equacionamento referente à biomassa (Equação (37)) passou a incluir o termo de taxa de saída de biomassa, como pode ser visto na Equação (59).

$$\frac{dX_{ac}}{dt} = K_{m,ac} \frac{S_{ac}}{K_s + S_{ac}} X_{ac} I_{pH} - K_d X_{ac} - K_r X_{ac} - \left(\frac{X_{ac} Q}{V_{reator}} \right) FRB \quad (59)$$

Como o FRB é um parâmetro incomum para se obter experimentalmente, decidiu-se que uma forma de se estimar este valor é analisar o perfil longitudinal de algum parâmetro que represente indiretamente este comportamento da biomassa. Para esta tese foi utilizado o perfil de concentração de ácido acético na vinhaça afluyente, ao longo da manta de lodo e no efluente do reator UASB operado por Del Nery et al. (2016). A coleta de amostras na manta foi realizada a cada vinte centímetros, resultando em oito pontos de amostragem nesta região de lodo e total de dez pontos analisados (entrada, manta de lodo e saída). O reator UASB e os respectivos pontos de amostragem podem ser visto na Figura 74 (Anexo A). Os dados foram obtidos para cada carga orgânica volumétrica aplicada ao lodo e estão apresentados na Tabela 19.

A concentração de ácido acético decresce de maneira acentuada nos primeiros 40 cm da manta de lodo e depois permanece praticamente constante. Este comportamento pode ser facilmente visualizado nas Figuras 38, 39 e 40. Para cada condição foram realizadas duas regressões para duas faixas de alturas diferentes: 0 a 40 cm e 60 a 400 cm. Adotou-se estes valores pois a concentração de ácido acético apresentou-se praticamente constante próximo à posição de 60 cm. Este comportamento foi observado nas três condições estudadas (COV-7,5, COV-12,5 e COV-17,5).

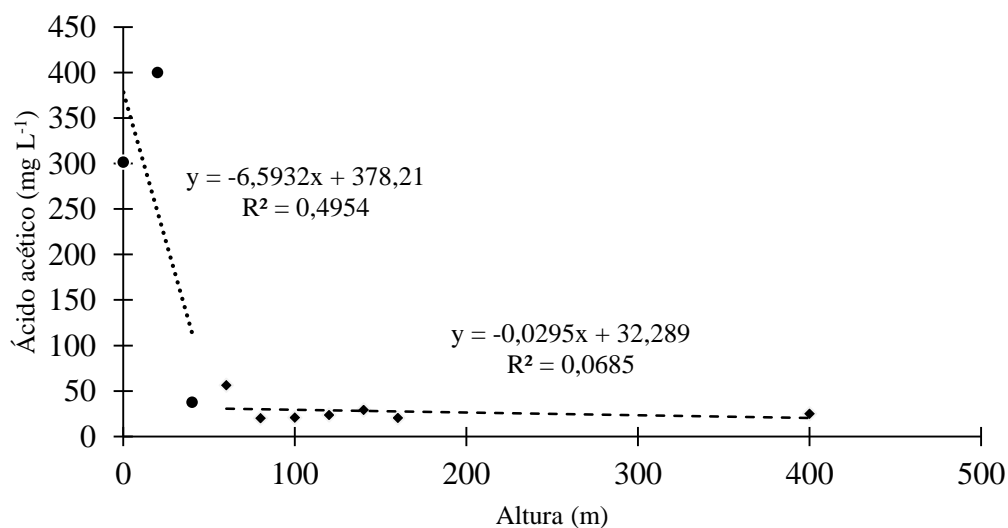
As regressões lineares realizadas em cada condição estudada estão dispostas nessas figuras supracitadas, e os valores calculados estão apresentados na Tabela 19.

Tabela 19 – Perfis de ácido acético no reator UASB tratando vinhaça em diferentes cargas orgânicas volumétricas aplicada ao lodo.

Ponto	Altura (cm)	Concentração de ácido acético (mg L ⁻¹)		
		COV-7,5	COV-12,5	COV17,5
P01 (Afluente)	0	301,38	265,93	366,43
P02	20	400,00	448,47	557,19
P03	40	37,65	34,12	10,36
P04	60	56,23	46,08	63,76
P05	80	20,13	48,77	76,27
P06	100	20,75	33,40	81,59
P07	120	23,35	57,60	72,68
P08	140	29,00	62,77	71,07
P09	160	20,32	49,55	75,26
P10 (efluente)	400	24,97	29,73	45,36

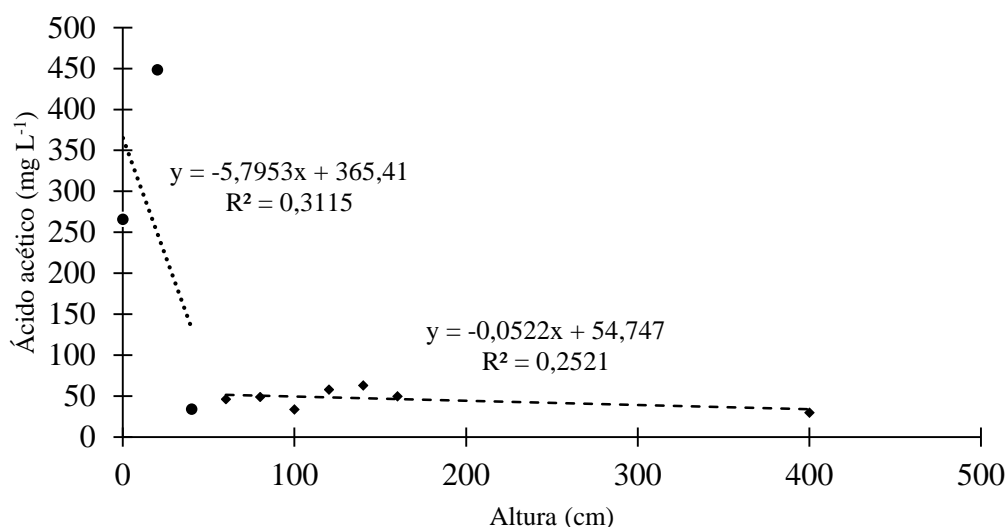
Fonte: Del Nery et al. (2016)

Figura 38 – Perfil de ácido acético ao longo da altura (H) do reator em escala piloto (R2) – condição COV-7,5



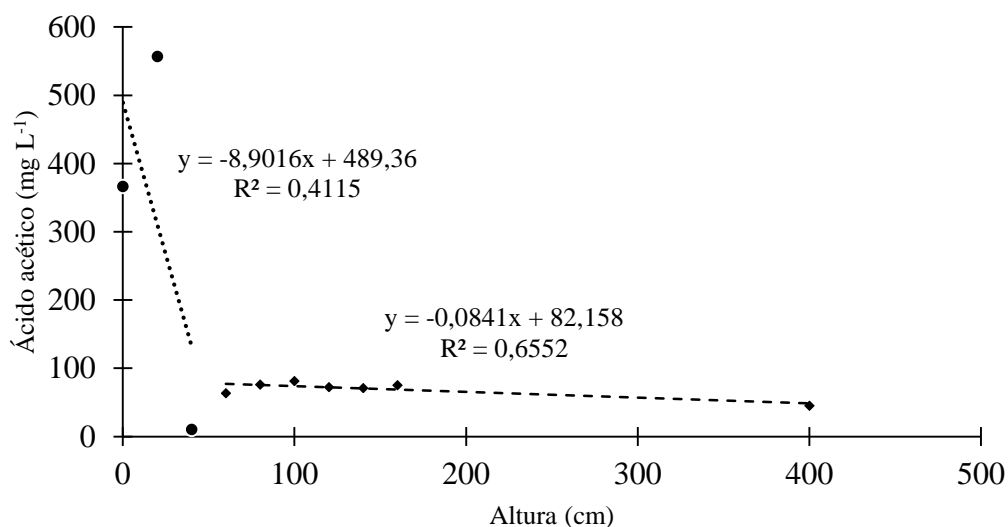
Fonte: adaptado de Del Nery et al. (2016).

Figura 39 – Perfil de ácido acético ao longo da altura (H) do reator em escala piloto (R2) – condição COV-12,5



Fonte: adaptado de Del Nery et al. (2016).

Figura 40 – Perfil de ácido acético ao longo da altura (H) do reator em escala piloto (R2) – condição COV-17,5



Fonte: adaptado de Del Nery et al. (2016).

À partir dos dados apresentados na Tabela 19, calculou-se as eficiências globais de remoção de ácido acético em cada condição de operação. Desta forma, para as cargas orgânicas volumétricas de 7,5, 12,5 e 17,5 kgDQO m⁻³d⁻¹ foram obtidas 91,7, 81,4 e 79,5% de eficiência de remoção de acetato, respectivamente.

Observou-se aumento da concentração de ácido acético no ponto P02 (20 cm). Isto pode ser explicado através do metabolismo anaeróbio, em que o acetato, juntamente com o gás H₂,

são os penúltimos subprodutos gerados na digestão (acetogênese) antes de se converterem em metano, principal composto do biogás. Portanto, em 20 cm de manta o processo de conversão de matéria orgânica em biogás ainda não se completou, mas este comportamento não influenciou negativamente o modelo hidro-bioquímico proposto nesta tese.

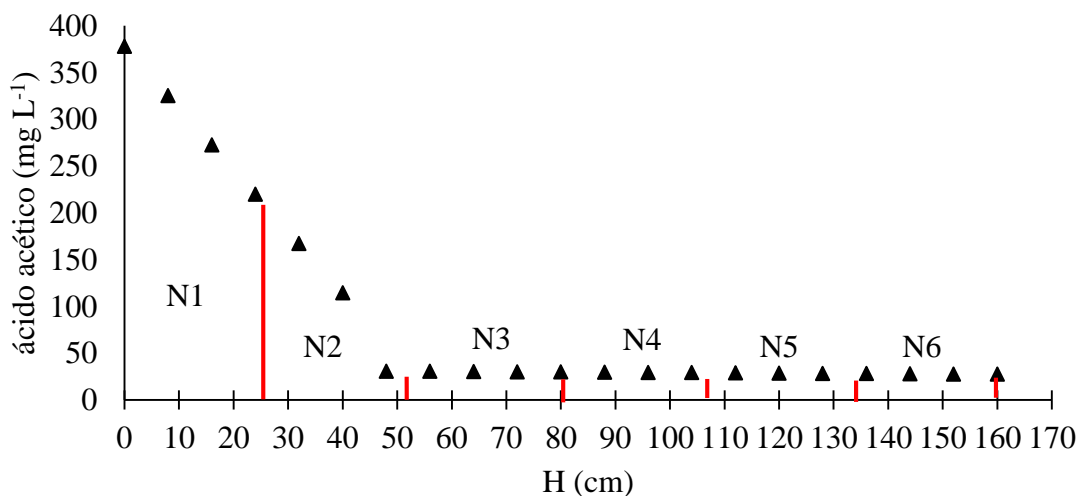
Os dados do perfil de concentração de ácido acético na manta de lodo, obtidos por Del Nery et al. (2016), indicam como os resultados devem se comportar quando aplicados em dinâmica de sistema, por meio do *software* Vensim PLE®. O parâmetro FRB se mostrou imprescindível no ajuste do modelo, ou seja, de acordo com a variação dos valores de FRB, pôde-se comparar os dados reais com os resultados da simulação.

Os resultados, em termos de N-CSTR, obtidos nos ensaios hidrodinâmicos para cada condição simulada, auxiliaram para indicar a concentração de ácido acético em cada posição na manta de lodo, além de indicar a quantidade de blocos de equações implementadas no Vensim PLE®. Na Figura 41 é ilustrado didaticamente este comportamento para a condição COV-7,5.

Portanto, pode-se inferir que os dois primeiros blocos de equações apresentaram resultados que indicam redução significativa da concentração do ácido acético, enquanto os restantes mantiveram valores praticamente constantes, apresentando ligeira redução.

As condições COV-12,5 e COV-17,5 apresentam comportamento igual ao descrito acima, em que os dois primeiros N (0 a 40 cm) apresentam queda acentuada da concentração do ácido acético e o restante mantém praticamente constante. Portanto não se torna necessário ilustrar este comportamento para esta condição, a fim de não se tornar repetitiva esta discussão.

Figura 41 – Perfil de ácido acético para R2 ao longo da manta de lodo e separado pelo número N obtido por meio de ensaio de traçador – condição COV-7,5



▲ Perfil de ácido acético

Esta determinação do local onde se inicia a constância da concentração (a partir de $N=3$) foi fundamental na aplicação do conceito apresentado pelo fator de retenção de biomassa. Na prática, durante a modelagem do consumo de acetato, tornou-se necessário variar os valores de FRB apenas no segundo bloco de equações ($N = 2$), como será apresentado posteriormente. Portanto, de posse destes dados, pôde-se ajustar o parâmetro FRB no Vensim PLE[®] de forma a garantir que a simulação apresentasse resultados próximos à realidade.

Determinar, então, a distribuição da concentração do ácido acético ao longo da manta de lodo, tornou-se fundamental no ajuste do modelo por meio da manipulação do valor de FRB para cada condição simulada no Vensim PLE[®].

Os resultados das simulações no Vensim PLE[®] estão apresentados no item 5.1.3.4.

5.1.3.2. Fator de inibição por pH

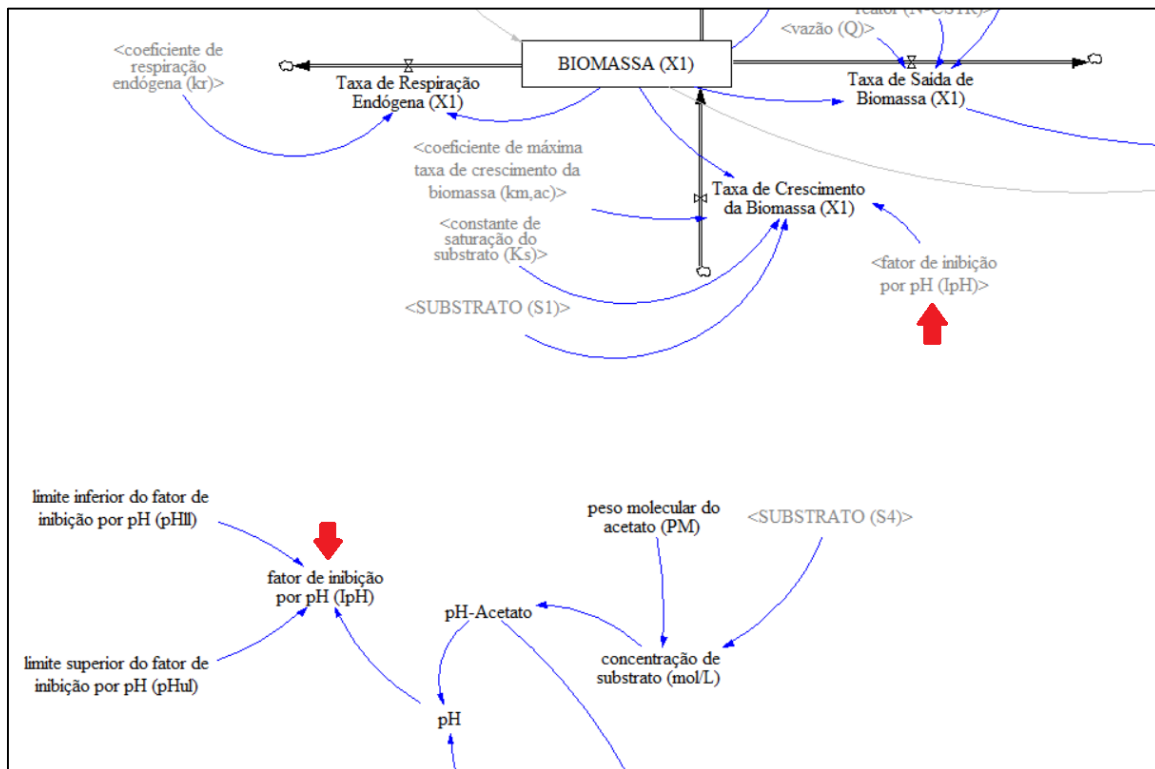
O fator de inibição por pH (I_{pH}) atua no termo de crescimento da biomassa das taxas de consumo de substrato e a de crescimento da biomassa. Batstone et al. (2002) expuseram duas formas de inibição por pH, apenas pH baixo e considerando pH baixo e pH alto. Na construção deste modelo foi considerada a inibição por pH baixo e pH alto.

Na implementação do modelo no Vensim PLE[®], o fator de inibição é ligado diretamente ao termo “Taxa de Crescimento de Biomassa”, como pode ser visto na Figura 42 (indicado pelas setas vermelhas). As ligações mostradas nesta figura ilustram a conexão do I_{pH} com a taxa de crescimento da biomassa com o “Bloco” $n = 1$, mas esta ligação se repete em todos os outros “Blocos”, indicando que o fator de inibição age sobre todas as taxas de crescimento da biomassa presentes no modelo. Nota-se, ainda, a relação entre o “ I_{pH} ” e o “pH”, sendo este o pH resultante entre as interações do pH conferido pelo substrato (acetato) e pelo alcalinizante (bicarbonato de sódio).

Considerou-se a concentração do quarto “reator” ($N = 4$) como a concentração final da digestão anaeróbia e, portanto, confere pH ácido ao sistema, denominado “pH-Acetato”. O pH gerado pelo alcalinizante (“pH-Alcalinizante”) e, adicionalmente, responsável por neutralizar o sistema, será analisado posteriormente no item 5.1.3.3.

Para o cálculo do pH do sistema, fez-se uma média entre o “pH-Acetato” e o “pH-Alcalinizante”, como mostrado na Equação (41).

Figura 42 – Fator de inibição por pH implementado no modelo hidro-bioquímico

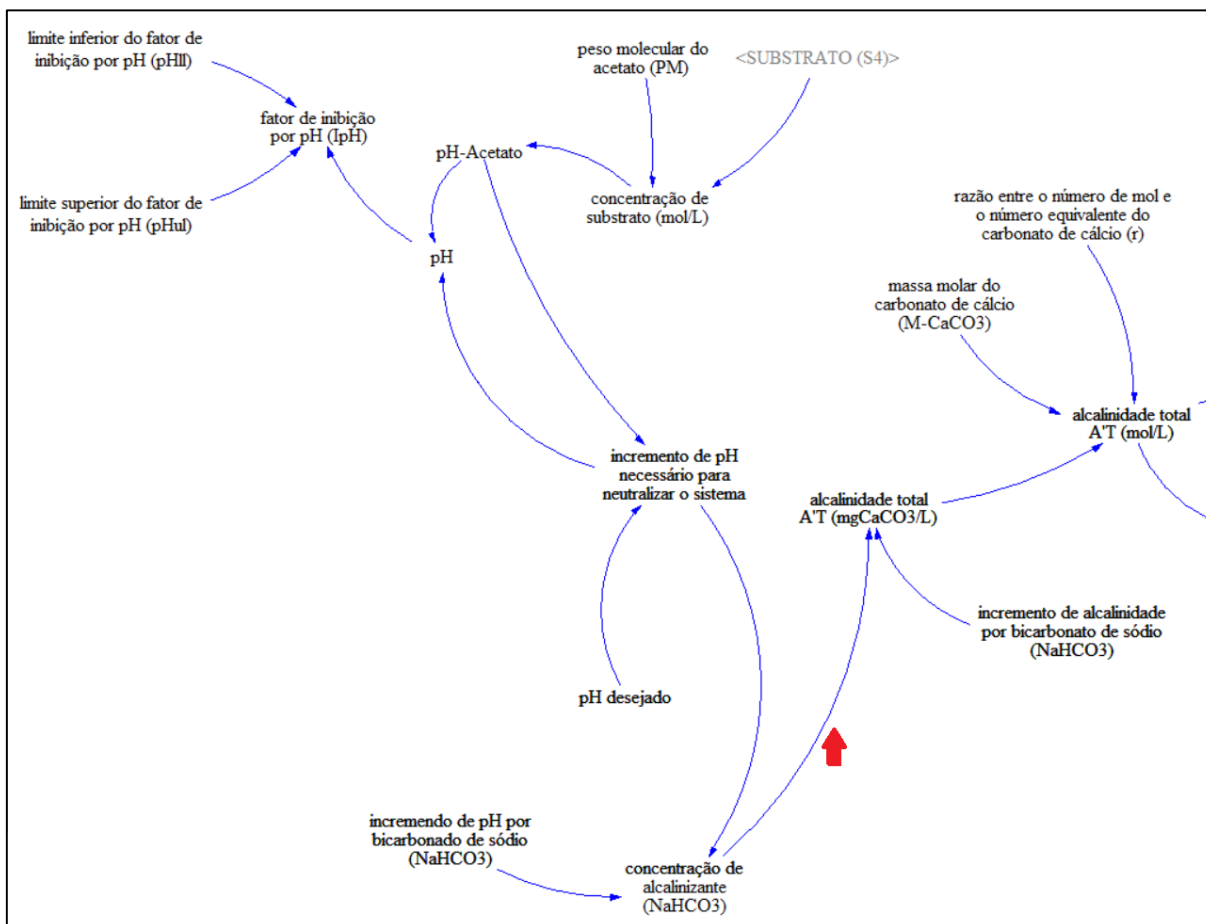


5.1.3.3. Modelo de aplicação de alcalinizante

A implementação do desenvolvimento do modelo de aplicação de alcalinizante no Vensim PLE® seguiu os itens 4.3.2 e 4.3.3. Buscou-se integrar os modelos de pH e de alcalinidade de modo que o pH exercesse influência na quantidade de alcalinizante necessária para neutralizar o meio (ou fixar um valor pré-determinado pelo usuário). De forma complementar, dada esta quantidade de alcalinizante necessária, foi possível calcular as concentrações das formas de alcalinidade presentes no sistema (carbonato e bicarbonato).

NA Figura 43 são ilustradas estas interações entre as variáveis referentes ao pH e à alcalinidade.

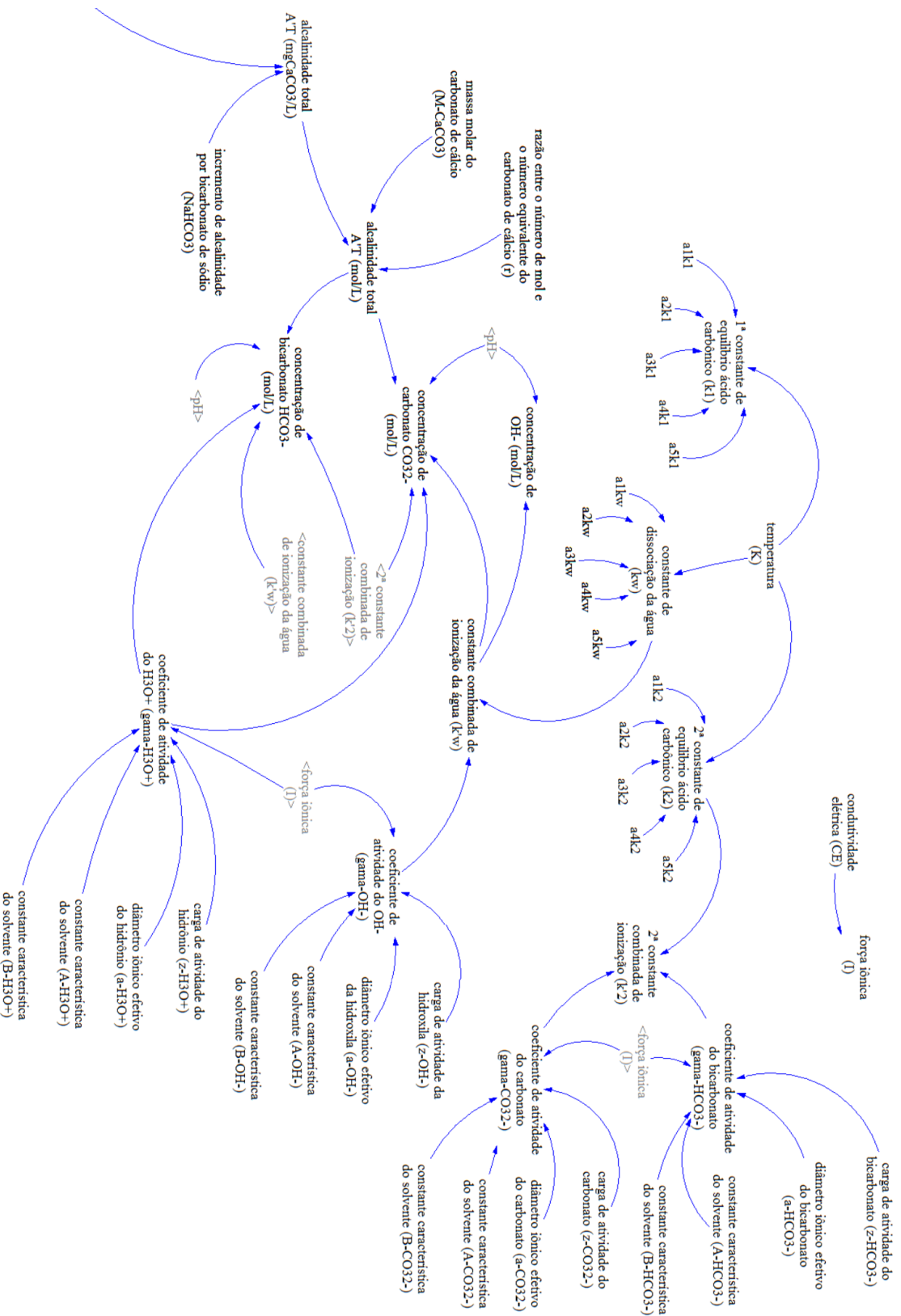
Figura 43 – Integração entre os modelos de pH e de alcalinidade implementados no modelo hidro-bioquímico



Destacou-se na Figura 43 (seta vermelha) a ligação entre a “concentração de alcalinizante (NaHCO₃)” e a “alcalinidade total A'T (mgCaCO₃/L)”. Os valores obtidos na primeira variável referem-se à quantidade de alcalinizante necessária para equilibrar o sistema, em termos de pH, e a segunda variável é o resultado da conversão deste valor em termos de alcalinidade (mg CaCO₃ L⁻¹).

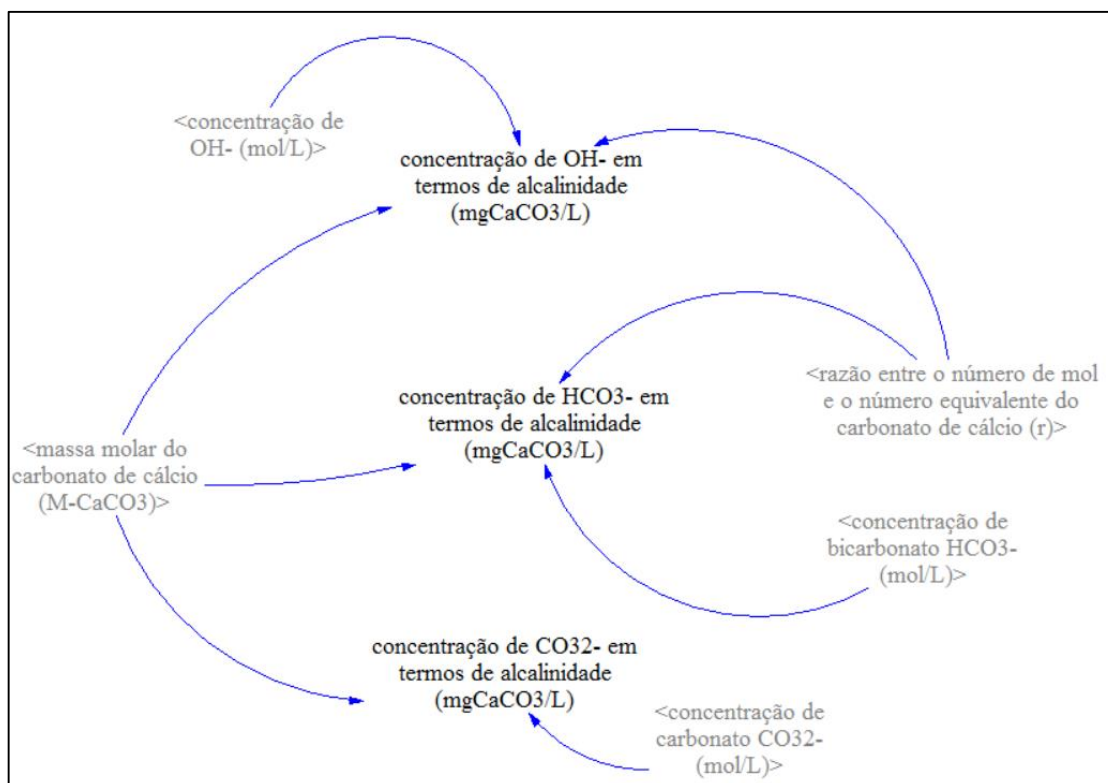
Após a determinação da alcalinidade total do sistema, o modelo de alcalinidade implementado permitiu o cálculo das concentrações dos outros três tipos de alcalinidade: alcalinidade a carbonato, alcalinidade a bicarbonato e alcalinidade a hidróxido, conforme pode ser observada na Figura 44.

Figura 44 – Modelo de cálculo de alcalinidade implementado no modelo hidro-bioquímico



Por fim, para calcular as concentrações das formas de alcalinidade, em termos de $\text{mg CaCO}_3 \text{ L}^{-1}$, utilizou-se o esquema conforme Figura 45.

Figura 45 – Modelo de cálculo das concentrações das formas de alcalinidade implementado no modelo hidro-bioquímico.



5.1.3.4. Resultados obtidos na simulação do modelo hidro-bioquímico

Configurou-se todas as simulações do modelo hidro-bioquímico, realizadas no Vensim PLE[®], para tempo simulado de 100 dias e passo de 0,03125¹⁰ dias, resultando em 3200 iterações. Estas configurações foram aplicadas às três condições de operação estudadas nesta tese, em termos de carga orgânica (COV-7,5, COV-12,5 e COV-17,5).

Os resultados de cada condição são apresentados nos próximos itens, e expostos, para cada condição de operação, os dados de entrada da modelagem, os ajustes necessários para o

¹⁰ O software VensimPLE[®] admite passos de 1 a 0,0078125, dependendo da unidade de tempo desejada pelo usuário. Escolheu-se o passo de 0,03125 dias pois este não apresentou falhas durante as simulações e fez com que o tempo de processamento do computador durante as simulações não fosse muito elevado. Os resultados dos diferentes passos foram comparados e não diferiram entre si.

parâmetro FRB, as concentrações de acetato e de biomassa em cada bloco de equações (N), as demandas calculadas de alcalinizante para que se atinja o pH desejado e as comparações entre o simulado e o real.

5.1.3.4.1. COV-7,5 – simulação no Vensim PLE®

Apresentam-se no Quadro 3 os principais dados de entrada do modelo hidro-bioquímico proposto nesta tese. Os dados aqui apresentados são um compilado dos dados já exibidos em itens anteriores.

Os dados de entrada que complementam o Quadro 3 são referentes ao modelo de determinação de alcalinidade estão presentes nas Tabelas 6 e 7.

Quadro 3 – Dados de entrada do modelo hidro-bioquímico – condição COV-7,5

Parâmetro	Unidade	Valor	Observação
Vazão sem recirculação	L d ⁻¹	20,71	Del Nery et al. (2016)
Vazão de recirculação	L d ⁻¹	41,42	Del Nery et al. (2016)
Volume de reação ¹¹	L	61,69	Calculado
Concentração afluyente de substrato (S _{in})	mgHAc L ⁻¹	301,38	Del Nery et al. (2016)
Concentração inicial de biomassa (X ₀)	mgSST L ⁻¹	100	Adotado
Número de reatores de mistura completa em série (N-CSTR)	-	6	Calculado
Temperatura	K	303,15	Adotado
Coefficiente de produção de lodo (Y)	kg STV kg DQO ⁻¹	0,05	Batstone et al.(2002)
Constante de Monod (K _s)	mg L ⁻¹	150	Batstone et al.(2002)
Taxa de decaimento bacteriano (K _d)	d ⁻¹	0,02	Batstone et al. (2002)
Taxa de respiração endógena (k _r)	d ⁻¹	0,02	Chapra (1997)
Máxima taxa de crescimento bacteriano (K _{m,ac})	d ⁻¹	9,4	Barrera et al. (2015)
Condutividade elétrica (CE)	μS cm ⁻¹	50	Adotado
Limite superior de inibição por pH (pH _{UL})	-	7,0	Batstone et al. (2002)
Limite superior de inibição por pH (pH _{LL})	-	6,0	Batstone et al. (2002)
pH desejado	-	7,0	Adotado

¹¹ Volume total da manta de lodo, considerando a base do reator e a região de lodo.

Os resultados obtidos durante a simulação do modelo hidro-bioquímico para a condição COV-7,5 são mostrados nas Tabelas 20, 21, 22, 23 e 24, e separados nas categorias: consumo de substrato e crescimento de biomassa; fator de inibição por pH; e aplicação de alcalinizante. Vale observar que os modelos se interagem e alguns parâmetros são dependentes entre si, mas optou-se pela divisão em categorias, pois assim a apresentação dos resultados mostrar-se-á de mais fácil entendimento.

Tabela 20 – Resultados da simulação para o modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa – COV-7,5

Parâmetro	Unidade	Valor
Concentração de substrato para N = 1 (S1)	mg L ⁻¹	116,80
Concentração de substrato para N = 2 (S2)	mg L ⁻¹	83,56
Concentração de substrato para N = 3 (S3)	mg L ⁻¹	64,92
Concentração de substrato para N = 4 (S4)	mg L ⁻¹	45,24
Concentração de substrato para N = 5 (S5)	mg L ⁻¹	32,79
Concentração de substrato para N = 6 (S6)	mg L ⁻¹	24,51
Concentração de biomassa para N = 1 (X1)	mg L ⁻¹	1,54 x 10 ⁻⁴⁴
Concentração de biomassa para N = 2 (X2)	mg L ⁻¹	3,84
Concentração de biomassa para N = 3 (X3)	mg L ⁻¹	2,55
Concentração de biomassa para N = 4 (X4)	mg L ⁻¹	3,51
Concentração de biomassa para N = 5 (X5)	mg L ⁻¹	2,87
Concentração de biomassa para N = 6 (X6)	mg L ⁻¹	2,44
Taxa de saída de biomassa em N = 6	mg L ⁻¹ d ⁻¹	14,75
Carga de biomassa efluente em N = 6*	kg d ⁻¹	0,92

* excedente no sistema

Dos resultados apresentados na Tabela 20, destaca-se a eficiência de remoção de substrato de 91,9%, dada pela relação entre a concentração inicial de ácido acético e S6, sendo que este equivale à saída do efluente do reator. Para que a eficiência atingisse este valor, o valor de FRB foi ajustado em 0,426. O resultado obtido na simulação, em termos de concentração do ácido acético, foi similar ao relatado por Del Nery et al. (2016). A Tabela 21 resume estes resultados e permite compará-los, a fim de analisar a qualidade da simulação frente aos dados reais.

Calculou-se, também, a concentração de ácido acético afluente ao reator, porém com influência da recirculação, ou seja, a concentração deste ácido após a mistura afluente + efluente, dada pela média ponderada entre vazão e concentração de entrada e saída¹².

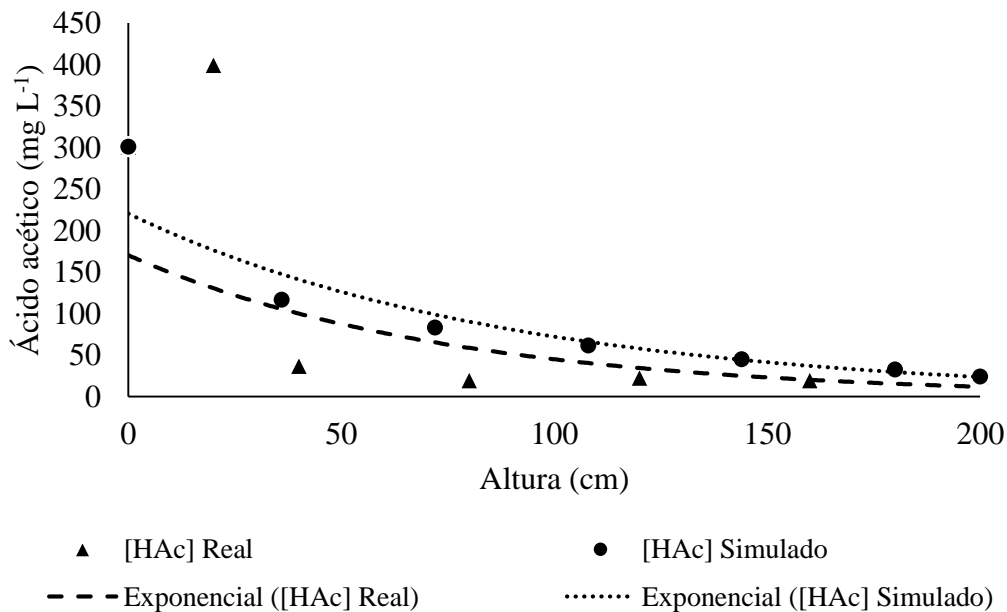
Tabela 21 – Resultados da simulação e do monitoramento de R2 para COV-7,5

Parâmetro	Unidade	Simulado	Real
Ácido acético afluente (vinhaça)	mg L ⁻¹	301,38	301,38
Ácido acético afluente (mistura)	mg L ⁻¹	116,80	117,11
Ácido acético efluente	mg L ⁻¹	24,51	24,97
Eficiência de remoção	%	91,9	91,7

FRB = 0,426

Na Figura 46 é representada a variação da concentração de ácido acético ao longo da manta de lodo obtida na simulação e obtida por Del Nery et al. (2016).

Figura 46 – Perfil de ácido acético ao longo da manta de lodo – simulado e real na condição COV 7,5



Nota-se, portanto, semelhança entre os perfis de ácido acético obtidos, principalmente na segunda metade da manta de lodo (100 a 200 cm), onde os dados mais se aproximam. Isto se torna mais evidente comparando as curvas da Figura 46.

¹² Conhecida como equação da mistura.

Ambos os resultados, simulado e real, iniciaram e terminaram em situações similares e, apesar de apresentarem ligeira diferença no intermédio (entre o começo e o final da manta), o modelo de consumo de substrato apresentou-se como uma ferramenta adequada na previsão de concentração ao final do processamento anaeróbio.

Outro importante resultado foi a taxa de saída de biomassa, em que esta indica a quantidade de sólidos produzidos por dia no reator. Esta simulação resultou em uma produção diária de 14,75 miligramas de sólidos suspensos voláteis por litro. Como informação complementar, pôde-se calcular a carga resultante de sólidos produzidos, resultando em 0,92 kgSSV d⁻¹. Esta informação é relevante para a gestão dos sólidos em um sistema, principalmente na programação de descarte de lodo em reatores anaeróbios.

Os resultados do modelo de pH obtidos na simulação para COV-7,5 estão listados na Tabela 22.

Tabela 22 – Resultados da simulação para o modelo de pH – COV-7,5

Parâmetro	Unidade	Valor
Concentração de substrato para N = 6 (S6)	mol L ⁻¹	1,94 x 10 ⁻³
pH do substrato (acetato)	-	3,76
Incremento de pH para atingir o pH desejado	-	3,24
pH	-	7,0
Fator de inibição (I _{pH})	-	0,78

Os dados obtidos na simulação do modelo de pH resultaram em um fator de inibição de 0,78, ou seja, para um pH de 7,0 há inibição de aproximadamente 22% da taxa de crescimento de biomassa.

Para o desenvolvimento do modelo hidro-bioquímico, percebeu-se a necessidade de fixar o valor de pH em benefício do cálculo de alcalinizante necessário para atingir o pH desejado. Apesar desta decisão aparentar uma limitação do modelo, em operação de reatores anaeróbios, deseja-se sempre manter o pH do meio próximo de valores que resultem em equilíbrio e bom funcionamento do sistema. Para a estabilidade do processamento anaeróbio em reatores, recomenda-se pH com valores próximos à neutralidade (SPEECE, 1996).

Os resultados obtidos para a fração do modelo hidro-bioquímico referente ao cálculo da alcalinidade e da concentração de alcalinizante necessária para neutralizar o pH gerado pelo ácido acético estão listados na Tabela 23.

Tabela 23 – Resultados da simulação para o modelo de alcalinidade – COV-7,5

Parâmetro	Unidade	Valor
Concentração de alcalinizante (NaHCO ₃)	mg L ⁻¹	2595,71
k ₁	mol L ⁻¹	4,705 x 10 ⁻⁷
k ₂	mol L ⁻¹	5,154 x 10 ⁻¹¹
k _w	mol ² L ⁻²	1,443 x 10 ⁻¹⁴
Força iônica (I)	mol ^{1/2} kg ^{-1/2}	7,375 x 10 ⁻⁴
Alcalinidade total	mg CaCO ₃ L ⁻¹	1297,86
Alcalinidade a bicarbonato	mg CaCO ₃ L ⁻¹	1296,4
Alcalinidade a carbonato	mg CaCO ₃ L ⁻¹	1,132
Alcalinidade a hidróxido	mg CaCO ₃ L ⁻¹	7,443 x 10 ⁻⁴

Os resultados obtidos nesta parte da simulação hidro-bioquímica proporcionaram a observação do comportamento da alcalinidade no reator. Percebe-se que a alcalinidade a bicarbonato, importante no estudo de reatores anaeróbios, possui valor maior de 1000 mgCaCO₃ L⁻¹. Isto indica quantidade de alcalinidade no reator suficiente para conferir estabilidade. Viana (2006) cita que valores de alcalinidade a bicarbonato em torno de 1280 mg CaCO₃ L⁻¹ indicam estabilidade no processamento anaeróbio de vinhaça, principalmente durante o período de adaptação. Matín et al. (2008) também mostram que valores de alcalinidade em torno de 2800 mg CaCO₃ L⁻¹ indicam um tratamento anaeróbio estável.

O resultado obtido nesta simulação é corroborado por estes autores, entretanto a concentração de bicarbonato citada por eles considera todos os processos envolvidos na digestão anaeróbia, e não apenas a digestão do ácido acético. Portanto, considerando apenas o consumo do acetato, a alcalinidade calculada necessária para manter o sistema estável se mostrou satisfatória para manter a estabilidade de todos os processos da digestão anaeróbia.

Longo (2015), operando o mesmo reator estudado por Del Nery et al. (2016), utilizou-se da relação 0,125 gNaHCO₃ para cada gDQO afluente para calcular a quantidade de alcalinizante necessária para manter o sistema estável. Considerando esta relação e os valores de DQO afluente ao reator operado por Del Nery et al. (2016), pôde-se calcular a quantidade de alcalinizante aplicada ao reator durante a operação. Para a condição COV-7,5 a DQO de alimentação do reator, segundo Del Nery et al. (2016), foi de 22450 mg L⁻¹, indicando necessidade de suplementação de bicarbonato de 2806,25 mgNaHCO₃ L⁻¹.

Na Tabela 24 são exibidos valores de NaHCO_3 suplementares ao tratamento, tanto real quanto simulado, e também são apresentados os valores de alcalinidade total simulada e real.

Tabela 24 – Alcalinidade efluente e alcalinizante necessário na suplementação afluente, real e simulado – COV-7,5

Parâmetro	Unidade	Simulado	Real
Alcalinizante (NaHCO_3)	mg L^{-1}	2595,71	2806,25
Alcalinidade total no efluente	$\text{mgCaCO}_3 \text{ L}^{-1}$	3787	1297,86

Como a suplementação adotada por Longo (2015) resultou em uma operação estável durante o processamento anaeróbio da vinhaça, pode-se inferir que o dado de alcalinizante necessário para neutralizar o pH obtido na simulação está condizente com a realidade. Entretanto, os valores de alcalinidade total diferiram significativamente. A provável explicação está na complexidade de determinar as fontes de alcalinidade de um reator anaeróbio em operação. No modelo hidro-bioquímico proposto nesta tese foi considerada apenas a alcalinidade proveniente do cálculo do alcalinizante utilizado na neutralização da acidez provocada pelo substrato (ácido acético). Outras são as fontes de alcalinidade em um sistema anaeróbio, como o consumo de outros ácidos envolvidos na digestão anaeróbia (butirato, propionato, etc).

5.1.3.4.2. COV-12,5 – simulação no Vensim PLE®

Os resultados aqui apresentados e suas respectivas discussões foram realizadas da mesma forma apresentada na condição COV-7,5.

Os dados de entrada que complementam o Quadro 4 e são referentes ao modelo de determinação de alcalinidade estão presentes nas Tabelas Tabela 6 e Tabela 7.

Os resultados obtidos durante a simulação do modelo hidro-bioquímico para a condição COV-12,5 são mostrados nas Tabelas 25, 26, 27, 28 e 29, e separados nas categorias: consumo de substrato e crescimento de biomassa; fator de inibição por pH; e aplicação de alcalinizante.

Quadro 4 – Dados de entrada do modelo hidro-bioquímico – condição COV-12,5

Parâmetro	Unidade	Valor	Observação
Vazão sem recirculação	L d ⁻¹	38,75	Del Nery et al. (2016)
Vazão de recirculação	L d ⁻¹	77,50	Del Nery et al. (2016)
Volume de reação	L	61,69	Calculado
Concentração afluyente de substrato (S _{in})	mg L ⁻¹	265,93	Del Nery et al. (2016)
Concentração inicial de biomassa (X _o)	mg L ⁻¹	100	Adotado
Número de reatores de mistura completa em série (N-CSTR)	-	5	Calculado
Temperatura	K	303,15	Adotado
Coefficiente de produção de lodo (Y)	kg STV kg DQO ⁻¹	0,05	Batstone et al.(2002)
Constante de Monod (K _s)	mg L ⁻¹	150	Batstone et al.(2002)
Taxa de decaimento bacteriano (K _d)	d ⁻¹	0,02	Batstone et al. (2002)
Taxa de respiração endógena (k _r)	d ⁻¹	0,02	Chapra (1997)
Máxima taxa de crescimento bacteriano (K _{m,ac})	d ⁻¹	9,4	Barrera et al. (2015)
Condutividade elétrica (CE)	μS cm ⁻¹	50	Adotado
Limite superior de inibição por pH (pH _{UL})	-	7,0	Batstone et al. (2002)
Limite superior de inibição por pH (pH _{LL})	-	6,0	Batstone et al. (2002)
pH desejado	-	7,0	Adotado

Vale observar, novamente, que os modelos se interagem e alguns parâmetros são dependentes entre si, mas optou-se pela divisão em categorias, pois assim a apresentação dos resultados mostrar-se-á de mais fácil entendimento.

Dos resultados apresentados na Tabela 25, destaca-se a eficiência de remoção de substrato de 83,0%, dada pela relação entre a concentração inicial de ácido acético e S5, sendo que este equivale à saída do efluente do reator. Para que a eficiência atingisse este valor, o valor de FRB foi ajustado em 0,265. O resultado obtido na simulação, em termos de concentração do ácido acético, foi similar ao relatado por Del Nery et al. (2016). Na Tabela 26 são resumidos estes resultados, a fim de analisar a qualidade da simulação frente aos dados reais.

Tabela 25 – Resultados da simulação para o modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa – COV-12,5

Parâmetro	Unidade	Valor
Concentração de substrato para N = 1 (S1)	mg L ⁻¹	118,70
Concentração de substrato para N = 2 (S2)	mg L ⁻¹	79,77
Concentração de substrato para N = 3 (S3)	mg L ⁻¹	67,66
Concentração de substrato para N = 4 (S4)	mg L ⁻¹	54,63
Concentração de substrato para N = 5 (S5)	mg L ⁻¹	45,09
Concentração de biomassa para N = 1 (X1)	mg L ⁻¹	7,00 x 10 ⁻⁴⁵
Concentração de biomassa para N = 2 (X2)	mg L ⁻¹	7,23
Concentração de biomassa para N = 3 (X3)	mg L ⁻¹	2,51
Concentração de biomassa para N = 4 (X4)	mg L ⁻¹	3,15
Concentração de biomassa para N = 5 (X5)	mg L ⁻¹	2,66
Taxa de saída de biomassa em N = 5	mg L ⁻¹ d ⁻¹	28,08
Carga de biomassa efluente em N = 5*	kg d ⁻¹	2,91

* excedente no sistema

Calculou-se, também, a concentração de ácido acético no afluente ao reator, porém com influência da recirculação, ou seja, a concentração deste ácido após a mistura afluente + efluente, calculada pela equação da mistura.

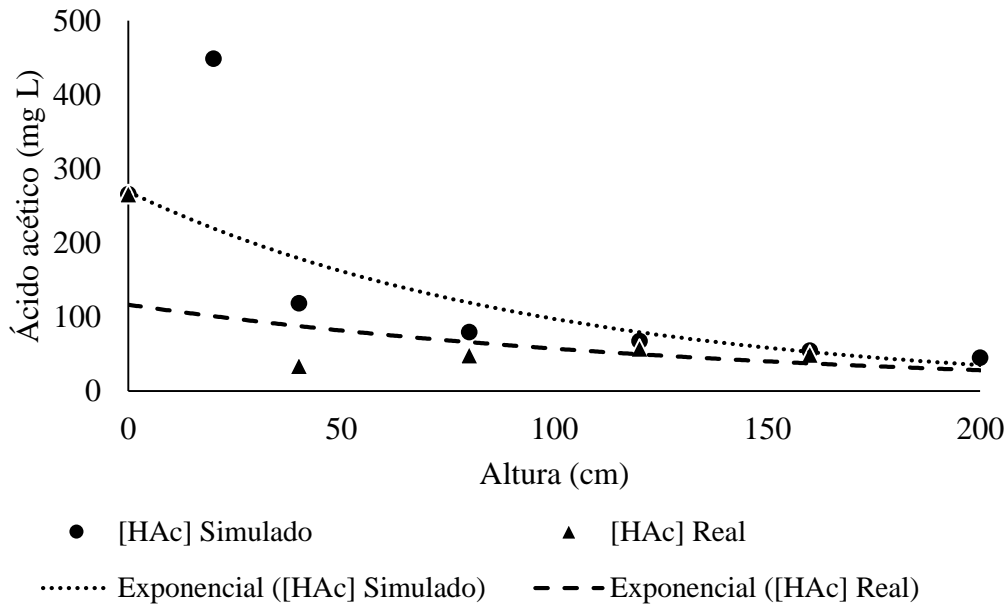
Tabela 26 – Resultados da simulação e do monitoramento de R2 para COV-7,5

Parâmetro	Unidade	Simulado	Real
Ácido acético afluente (vinhaça)	mg L ⁻¹	265,93	265,93
Ácido acético afluente (mistura)	mg L ⁻¹	118,7	121,68
Ácido acético efluente	mg L ⁻¹	45,09	49,55
Eficiência de remoção	%	81,4	83,0

FRB = 0,265

O gráfico da Figura 47 representa a concentração de ácido acético ao longo da manta de lodo obtida na simulação e obtida por Del Nery et al. (2016).

Figura 47 – Perfil de ácido acético ao longo da manta de lodo – simulado e real na condição COV 7,5



Da mesma forma apresentada pela condição COV-7,5, uma grande semelhança pode ser notada entre os perfis de ácido acético obtidos, principalmente na segunda metade da manta de lodo (100 a 200 cm), onde os dados mais se aproximam. Isto se torna mais evidente comparando as curvas acima.

Ambos os resultados, simulado e real, iniciaram e terminaram em situações similares e, apesar de apresentarem ligeira diferença no intermédio (entre o começo e o final da manta), o modelo de consumo de substrato apresentou-se como uma ferramenta adequada na previsão de concentração ao final do processamento anaeróbio.

Outro importante resultado foi a taxa de saída de biomassa, em que esta indica a quantidade de sólidos produzidos por dia no reator. Esta simulação resultou em uma produção diária de 28,08 miligramas de sólidos suspensos voláteis por litro. Como informação complementar, pôde-se calcular a carga resultante de sólidos produzidos, resultando em 2,941 kgSSV d⁻¹.

Os resultados do modelo de pH obtidos na simulação para COV-12,5 estão listados na Tabela 27.

Tabela 27 – Resultados da simulação para o modelo de pH – COV-12,5

Parâmetro	Unidade	Valor
Concentração de substrato para N = 5 (S5)	mol L ⁻¹	1,98 x 10 ⁻³
pH do substrato (acetato)	-	3,75
Incremento de pH para atingir o pH desejado	-	3,25
pH	-	7,0
Fator de inibição (I _{pH})	-	0,78

Os dados obtidos na simulação do modelo de pH, de forma similar à condição COV-7,5, resultaram em um fator de inibição de 0,78, ou seja, para um pH de 7,0 há uma inibição de aproximadamente 22% da taxa de crescimento de biomassa.

Os resultados obtidos na parte do modelo hidro-bioquímico referente ao cálculo da alcalinidade e da concentração de alcalinizante necessária para neutralizar o pH gerado pelo ácido acético estão listados na Tabela 28.

Tabela 28 – Resultados da simulação para o modelo de alcalinidade – COV-12,5

Parâmetro	Unidade	Valor
Concentração de alcalinizante (NaHCO ₃)	mg L ⁻¹	2598,58
k ₁	mol L ⁻¹	4,705 x 10 ⁻⁷
k ₂	mol L ⁻¹	5,154 x 10 ⁻¹¹
k _w	mol ² L ⁻²	1,443 x 10 ⁻¹⁴
Força iônica (I)	mol ^{1/2} kg ^{-1/2}	7,375 x 10 ⁻⁴
Alcalinidade total	mg CaCO ₃ L ⁻¹	1299,29
Alcalinidade a bicarbonato	mg CaCO ₃ L ⁻¹	1297,82
Alcalinidade a carbonato	mg CaCO ₃ L ⁻¹	1,47
Alcalinidade a hidróxido	mg CaCO ₃ L ⁻¹	7,443 x 10 ⁻⁴

Os resultados obtidos nesta parte da simulação hidro-bioquímica proporcionaram a observação do comportamento da alcalinidade no reator. Percebe-se que a alcalinidade a bicarbonato, importante no estudo de reatores anaeróbios, possui valor maior de 1000 mg CaCO₃ L⁻¹. A importância deste valor foi discutida no item anterior (COV-7,5).

Calculando-se a suplementação de bicarbonato adotada por Longo (2015) a partir de 0,125 gNaHCO₃ para cada gDQO afluente, tem-se que, para a aplicação de carga orgânica de

12,5 kgDQO m⁻³ d⁻¹, descrita por Del Nery et al. (2016) (DQO = 21880 mg L⁻¹), foi de 2735,00 mgNaHCO₃ L⁻¹.

Na Tabela 29 são exibidos os valores de NaHCO₃ suplementares ao tratamento, tanto real quanto simulado, e também são apresentados os valores de alcalinidade total simulada e real.

Tabela 29 – Alcalinidade efluente e alcalinizante necessário na suplementação afluente, real e simulado – COV-12,5

Parâmetro	Unidade	Simulado	Real
Alcalinizante (NaHCO ₃)	mg L ⁻¹	2598,58	2735,00
Alcalinidade total efluente	mgCaCO ₃ L ⁻¹	4765,00	1299,99

Como a suplementação adotada por Longo (2015) resultou em uma operação estável durante o processamento anaeróbico da vinhaça, pode-se inferir que o dado de alcalinizante necessário para neutralizar o pH obtido a simulação está condizente com a realidade.

5.1.3.4.3. COV-17,5 – simulação no Vensim PLE®

Os resultados aqui apresentados e suas respectivas discussões foram realizadas da mesma forma apresentada nas condições COV-7,5 e COV-12,5.

Apresentam-se no Quadro 5 os principais dados de entrada do modelo hidro-bioquímico proposto nesta tese. Os dados aqui apresentados são um compilado dos dados já exibidos em itens anteriores, reunidos em apenas um quadro.

Os dados de entrada que complementam o quadro acima e são referentes ao modelo de determinação de alcalinidade estão presentes nas Tabelas 6 e 7.

Quadro 5 – Dados de entrada do modelo hidro-bioquímico – condição COV-17,5

Parâmetro	Unidade	Valor	Observação
Vazão sem recirculação	L d ⁻¹	54,25	Del Nery et al. (2016)
Vazão de recirculação	L d ⁻¹	108,50	Del Nery et al. (2016)
Volume de reação	L	162,75	Calculado
Concentração afluente de substrato (S _{in})	mg L ⁻¹	366,73	Del Nery et al. (2016)
Concentração inicial de biomassa (X _o)	mg L ⁻¹	100	Adotado

Número de reatores de mistura completa em série (N-CSTR)	-	5	Calculado
Temperatura	K	303,15	Adotado
Coefficiente de produção de lodo (Y)	kg STV kg DQO ⁻¹	0,05	Batstone et al.(2002)
Constante de Monod (K _s)	mg L ⁻¹	150	Batstone et al.(2002)
Taxa de decaimento bacteriano (K _d)	d ⁻¹	0,02	Batstone et al. (2002)
Taxa de respiração endógena (k _r)	d ⁻¹	0,02	Chapra (1997)
Máxima taxa de crescimento bacteriano (K _{m,ac})	d ⁻¹	9,4	Barrera et al. (2015)
Condutividade elétrica (CE)	μS cm ⁻¹	50	Adotado
Limite superior de inibição por pH (pH _{UL})	-	7,0	Batstone et al. (2002)
Limite superior de inibição por pH (pH _{LL})	-	6,0	Batstone et al. (2002)
pH desejado	-	7,0	Adotado

Os resultados obtidos durante a simulação do modelo hidro-bioquímico para a condição COV-12,5 são mostrados nas Tabelas 30, 31, 32, 33 e 34 abaixo e separados nas categorias: consumo de substrato e crescimento de biomassa; fator de inibição por pH; e aplicação de alcalinizante. Vale observar que os modelos se interagem e alguns parâmetros são dependentes entre si, mas optou-se pela divisão em categorias pois assim a apresentação dos resultados mostrar-se-á de mais fácil entendimento.

Tabela 30 – Resultados da simulação para o modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa – COV-17,5

Parâmetro	Unidade	Valor
Concentração de substrato para N = 1 (S1)	mg L ⁻¹	172,55
Concentração de substrato para N = 2 (S2)	mg L ⁻¹	120,73
Concentração de substrato para N = 3 (S3)	mg L ⁻¹	105,60
Concentração de substrato para N = 4 (S4)	mg L ⁻¹	88,55
Concentração de substrato para N = 5 (S5)	mg L ⁻¹	75,61
Concentração de biomassa para N = 1 (X1)	mg L ⁻¹	4,20 x 10 ⁻⁴⁵
Concentração de biomassa para N = 2 (X2)	mg L ⁻¹	10,49
Concentração de biomassa para N = 3 (X3)	mg L ⁻¹	3,31
Concentração de biomassa para N = 4 (X4)	mg L ⁻¹	4,15
Concentração de biomassa para N = 5 (X5)	mg L ⁻¹	3,49

Taxa de saída de biomassa em N = 5	mg L ⁻¹ d ⁻¹	46,02
Carga de biomassa efluente em N = 5*	kg d ⁻¹	7,49

* excedente no sistema

Dos resultados apresentados na Tabela 30, destaca-se a eficiência de remoção de substrato de 79,4%, dada pela relação entre a concentração inicial de ácido acético e S5, sendo que este equivale à saída do efluente do reator. Para que a eficiência atingisse este valor, o valor de FRB foi ajustado em 0,244. O resultado obtido na simulação, em termos de concentração do ácido acético, foi similar ao relatado por Del Nery et al. (2016). A Tabela 31 resume estes resultados e permite compará-los, a fim de analisar a qualidade da simulação frente aos dados reais.

Calculou-se, também, a concentração de ácido acético afluente ao reator, porém com influência da recirculação, ou seja, a concentração deste ácido após a mistura afluente + efluente, calculada pela equação da mistura.

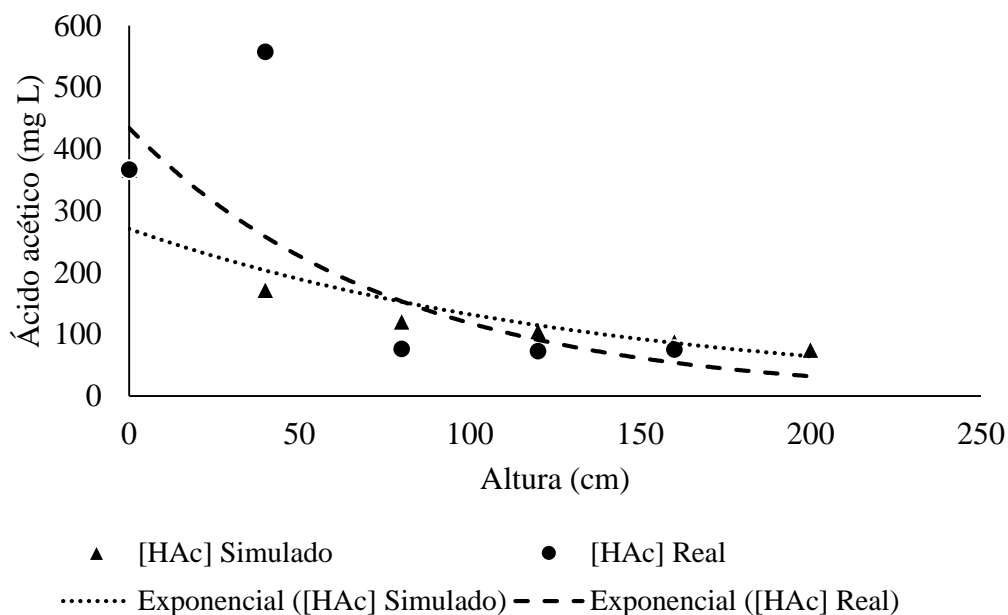
Tabela 31 – Resultados da simulação e do monitoramento de R2 para COV-17,5

Parâmetro	Unidade	Simulado	Real
Ácido acético afluente (vinhaça)	mg L ⁻¹	366,43	366,43
Ácido acético afluente (mistura)	mg L ⁻¹	172,55	172,33
Ácido acético efluente	mg L ⁻¹	75,61	75,26
Eficiência de remoção	%	79,4	79,5

FRB = 0,244

O gráfico da Figura 48 representa a concentração de ácido acético ao longo da manta de lodo obtida na simulação e obtida por Del Nery et al. (2016).

Figura 48 – Perfil de ácido acético ao longo da manta de lodo – simulado e real na condição COV 17,5



Da mesma forma apresentada pelas condições COV-7,5 e COV-12,5, uma grande semelhança pode ser notada entre os perfis de ácido acético obtidos, entretanto para a condição COV-17-5 os dados se aproximam logo após os primeiros 50 cm de manta de lodo. Isto indica que este modelo se apresenta ligeiramente mais ajustado para esta carga orgânica volumétrica.

Outro importante resultado foi a taxa de saída de biomassa, em que esta indica a quantidade de sólidos produzidos por dia no reator. Esta simulação resultou em uma produção diária de 46,02 miligramas de sólidos suspensos voláteis por litro. Como informação complementar, pôde-se calcular a carga resultante de sólidos produzidos, resultando em 7,49 kgSSV d⁻¹. Esta informação torna-se relevante para a gestão dos sólidos de um sistema, principalmente na programação de descarte de lodo em reatores anaeróbios.

Os resultados do modelo de pH obtidos na simulação para COV-17,5 estão listados na Tabela 32.

Os dados obtidos na simulação do modelo de pH, de forma similar às anteriores, resultaram em um fator de inibição de 0,78, ou seja, para um pH de 7,0 há inibição de aproximadamente 22% da taxa de crescimento de biomassa.

Tabela 32 – Resultados da simulação para o modelo de pH – COV-17,5

Parâmetro	Unidade	Valor
Concentração de substrato para N = 5 (S5)	mol L ⁻¹	2,87 x 10 ⁻³
pH do substrato (acetato)	-	3,67
Incremento de pH para atingir o pH desejado	-	3,33
pH	-	7,0
Fator de inibição (I _{pH})	-	0,78

Os resultados obtidos na parte do modelo hidro-bioquímico referente ao cálculo da alcalinidade e da concentração de alcalinizante necessária para neutralizar o pH gerado pelo ácido acético estão listados na Tabela 33.

Tabela 33 – Resultados da simulação para o modelo de alcalinidade – COV-17,5

Parâmetro	Unidade	Valor
Concentração de alcalinizante (NaHCO ₃)	mg L ⁻¹	2664,99
k ₁	mol L ⁻¹	4,705 x 10 ⁻⁷
k ₂	mol L ⁻¹	5,154 x 10 ⁻¹¹
k _w	mol ² L ⁻²	1,443 x 10 ⁻¹⁴
Força iônica (I)	mol ^{1/2} kg ^{-1/2}	7,375 x 10 ⁻⁴
Alcalinidade total	mg CaCO ₃ L ⁻¹	1332,5
Alcalinidade a bicarbonato	mg CaCO ₃ L ⁻¹	1330,99
Alcalinidade a carbonato	mg CaCO ₃ L ⁻¹	1,50
Alcalinidade a hidróxido	mg CaCO ₃ L ⁻¹	7,443 x 10 ⁻⁴

Os resultados obtidos nesta parte da simulação hidro-bioquímica proporcionaram a observação do comportamento da alcalinidade no reator. Percebe-se que a alcalinidade a bicarbonato, importante no estudo de reatores anaeróbios, possui valor maior de 1000 mg CaCO₃ L⁻¹. A importância deste valor foi discutida no item COV-7,5.

O resultado obtido nesta simulação é corroborado por Viana (2006), entretanto a concentração de bicarbonato citada por eles considera todos os processos envolvidos na digestão anaeróbia, e não apenas a digestão do ácido acético. Portanto, considerando apenas o consumo do acetato, a alcalinidade calculada necessária para manter o sistema estável se mostrou satisfatória para manter a estabilidade de todos os processos da digestão anaeróbia.

Calculando-se a suplementação de bicarbonato adotada por Longo (2015) a partir de 0,125 gNaHCO₃ para cada gDQO afluente, tem-se que, para a aplicação de carga orgânica de 17,5 kgDQO m⁻³ d⁻¹, descrita por Del Nery et al. (2016) (DQO = 19250 mg L⁻¹), foi de 2406,25 mgNaHCO₃ L⁻¹.

Na Tabela 34 são exibidos os valores de NaHCO₃ suplementares ao tratamento, tanto real quanto simulado, e também são apresentados os valores de alcalinidade total simulada e real.

Tabela 34 – Alcalinidade efluente e alcalinizante necessário na suplementação afluente, real e simulado – COV-17,5

Parâmetro	Unidade	Simulado	Real
Alcalinizante (NaHCO ₃)	mg L ⁻¹	2664,99	2406,25
Alcalinidade total efluente	mgCaCO ₃ L ⁻¹	5491	1332,5

Como a suplementação adotada por Longo (2015) resultou em uma operação estável durante o processamento anaeróbio da vinhaça, pode-se inferir que o dado de alcalinizante necessário para neutralizar o pH obtido a simulação está condizente com a realidade.

Uma constatação interessante sobre a determinação da concentração do alcalinizante por meio do modelo hidro-bioquímico é não dependência da DQO afluente. Desta forma, de acordo com a acidez (neste caso provocada pelo ácido acético) do efluente, através deste modelo, faz-se possível determinar a quantidade de alcalinizante a ser introduzida junto ao afluente.

5.1.3.5. Influência da carga orgânica nas simulações

Neste item são feitas algumas notas sobre o efeito da variação da carga orgânica volumétrica aplicada ao lodo com os resultados obtidos pelo modelo hidro-bioquímico.

Abaixo estão elencadas algumas importantes observações:

- 1) O aumento progressivo da COV não implicou na redução significativa do pH do sistema. Da mesma forma, uma pequena variação negativa no pH ocasionou no

aumento da quantidade de alcalinizante necessária para neutralizar o sistema. A diferença entre a concentração de alcalinizante para a condição COV-7,5 (2595,51 mgNaHCO₃ L⁻¹) e COV-17,5 (2664,99 mgNaHCO₃ L⁻¹) foi de apenas 69,28 mgNaHCO₃ L⁻¹;

- 2) A quantidade de alcalinizante necessária para neutralização do sistema, em termos de massa, é função da vazão afluyente (sem recirculação) e da sua concentração. Como as concentrações de alcalinizante foram bastante próximas, a sua carga terá variação significativa de acordo com a vazão. A Tabela 35 indica os valores de carga de alcalinizante necessários para cada carga orgânica volumétrica considerada nas simulações;

Tabela 35 – Carga de alcalinizante calculada através dos dados obtidos nas simulações do modelo hidro-bioquímicos para diferentes cargas orgânicas volumétricas

Parâmetro	Unidade	Carga orgânica volumétrica (kgDQO m ⁻³ d ⁻¹)		
		7,5	12,5	17,5
Alcalinizante	mgNaHCO ₃ L ⁻¹	2595,71	2598,58	2664,99
Vazão (sem recirculação)	L d ⁻¹	20,71	38,75	54,25
Carga	gNaHCO ₃ d ⁻¹	53,76	100,69	144,58

- 3) Nota-se, pois, que o aumento da carga necessária de alcalinizante aumenta na mesma proporção em que a vazão cresce. Esta análise se torna de grande valia como ferramenta de tomada de decisão, no caso, a quantidade de bicarbonato de sódio consumida por dia de operação;
- 4) O ajuste do parâmetro FRB se deu de forma muito similar para as maiores cargas orgânicas volumétricas aplicadas (12,5 e 17,5), uma vez que seus valores foram bem próximos, 0,265 e 0,244, respectivamente. Os gráficos em que foram comparados os resultados das simulações e da análise real reforçam a qualidade do ajuste (Figuras Figura 46, Figura 47 e Figura 48);
- 5) Ressalta-se que a simulação não levou em conta a recirculação da alcalinidade, considerou apenas a alcalinidade fornecida ao sistema pela adição de alcalinizante.

6. CONCLUSÕES

Os objetivos propostos inicialmente nesta tese foram todos alcançados. Como este trabalho foi dividido em duas etapas, cita-se, então, as principais conclusões de cada etapa.

Etapa 1: Análise hidrodinâmica de reatores anaeróbios: aplicação da Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC):

Foram desenvolvidos dois reatores (R1 [1,5 litros] e R2 [119,31 litros]) em ambiente virtual tridimensional baseados em reatores reais. Estes modelos foram objetos de estudo nas avaliações hidrodinâmicas e validação da simulação do método de injeção de pulso.

Para a validação da simulação do método de injeção de pulso, foram realizados testes estatísticos entre os dados reais e simulados em duas condições, função das vazões: condição 1 - $4,0 \text{ L d}^{-1}$ e condição 2 - $26,68 \text{ L d}^{-1}$) no R1. Tanto para a condição 1 quanto para a condição 2, os resultados gerados nas simulações e nos ensaios de bancada não apresentaram diferenças estatísticas. Isto indica que a simulação do método de injeção de pulso pode ser utilizada como método alternativo ao ensaio de laboratório.

Portanto, a simulação do método de injeção de pulso na DFC pode substituir e/ou complementar os ensaios experimentais, desde que o modelo seja bem configurado e as características do objeto de estudo (reator) seja representada da forma mais fidedigna possível.

Além dos resultados dos ensaios de traçador, em que se calcula o número de reatores de mistura completa em série (N-CSTR), os vetores de velocidade e as linhas de fluxo geradas na simulação do escoamento se mostraram indispensáveis na compreensão dos resultados gerados nas simulações dos ensaios de traçador. A interpretação destes resultados indicou as regiões em que as anomalias do escoamento ocorreram.

Na concepção das malhas utilizadas para os reatores R1 e R2, percebeu-se a não necessidade de um refinamento exagerado, sendo que ambos os reatores foram simulados com malhas parcialmente refinadas. Isto levou à economia de tempo e processamento durante as simulações.

Etapa 2: Modelagem de um sistema dinâmico aplicado ao processamento anaeróbio:

- Realizar levantamento bibliográfico sobre os coeficientes (cinéticos, pH e alcalinidade) para a implementação do modelo dinâmico;

- Aplicar os resultados da Etapa 1 no modelo dinâmico e analisar os efeitos do número N-CSTR no comportamento do sistema para três diferentes cargas orgânicas volumétricas (COV) utilizadas por Del Nery et al. (2016);
- Ajustar e analisar os resultados gerados no modelo hidro-bioquímico de acordo com os dados obtidos por Del Nery et al. (2016) sob a ótica do controle operacional de alcalinidade, de pH em reatores anaeróbios e do consumo de substrato (acetato).

Esta tese apresentou uma proposta de modelo hidro-bioquímico do processamento anaeróbio da vinhaça, especificamente o consumo de ácido acético, entretanto, observou-se durante o desenvolvimento do modelo que este pode ser utilizado para simular a digestão anaeróbia de outros efluentes, desde que se utilize os parâmetros referentes a cada efluente.

7. COMENTÁRIOS FINAIS

O modelo proposto, como pôde-se perceber, lançou mão de outros modelos já existentes, como: análise da hidrodinâmica de reatores, ADM1 e cálculo de alcalinidade de uma amostra de água (ou efluente). O que se fez de inovação foi a integração destes modelos e, na medida do necessário, algumas adaptações.

A Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC) se mostrou, como esperado, uma ferramenta essencial e inovadora na análise do comportamento hidrodinâmico dos reatores estudados. De forma complementar, foi possível estabelecer um nível maior de confiança nesta ferramenta através da validação experimental dos dados obtidos computacionalmente.

Dada a afirmação anterior, afirma-se que o uso de *software* de DFC, como o *CFX*TM, torna-se imprescindível no desenvolvimento de reatores e na compreensão de seu comportamento hidrodinâmico. Por meio das simulações computacionais, resultados experimentais que demandariam longos tempos para se alcançar e elevados recursos financeiros podem ser reduzidos a um computador e uma licença de *software*.

A ferramenta de dinâmica de sistemas se mostrou útil na implementação de todas as etapas do modelo e, principalmente, o *software* VensimPLE[®] se mostrou uma ferramenta robusta, de fácil acesso e compreensão. Além disso, o programa possibilita ao usuário alterar os dados de entrada e observar, em tempo real, os efeitos em todas as variáveis inter-relacionadas do modelo.

A utilização de dados de entrada reais no modelo e a comparação dos resultados simulados com os reais se mostraram essenciais na confiabilidade dos resultados obtidos nas simulações.

Aponta-se o pH do efluente como parâmetro unificador dos modelos matemáticos utilizados na elaboração do modelo hidro-bioquímicos. Identificou-se como importante limitação do modelo a necessidade de fixar um valor de pH do efluente após a adição de alcalinizante.

Outra limitação, essa talvez a de maior dificuldade em obtenção experimental, é o efeito do efluente no pH. Utilizou-se no modelo hidro-bioquímico o pH resultante de certa concentração de ácido acético, entretanto, para tornar esse modelo mais genérico, deve-se determinar o pH gerado por cada ácido presente no metabolismo anaeróbico. Uma pesquisa mais aprofundada neste tema elucidaria esta lacuna.

Portanto, indica-se para futuras pesquisas neste tema:

- Determinar o efeito da concentração dos componentes de um efluente no pH;
- Implementar o modelo hidro-bioquímico, da forma apresentada nesta tese, para cada ácido componente no processamento anaeróbio, considerando as rotas paralelas e em série (acidogênese ► acetogênese ► metanogênese);
- Implementar, na medida do possível, o modelo ADM1 completo em dinâmica de sistemas.

REFERÊNCIAS

ALVARADO, A. et al. CFD study to determine the optimal configuration of aerators in a full-scale waste stabilization pond. **Water Research**, v. 47, n. 13, p. 4528 – 4537, 2013. ISSN 0043-1354. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135413004247>>.

ALVES, I. **Caracterização de grânulos de reator UASB empregado no processamento de vinhaça**. Dissertação (mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, SP. 85f. 2015.

ANDREWS, J. F. Mathematical model for the continuous culture of microorganisms utilizing inhibitory substrates. **Biotech. and Bioeng.** Vol X, pp 707-723, 1968.

ANGELIDAKI, I.; ELLEGAARD, L.; AHRING, B. K. A mathematical model for dynamic simulations of complex substrates: focusing on ammonia inhibition. **Biotech. and Bioeng.** Vol. 42, pp 159-166. 1993.

_____ A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. **Biotech. and Bioeng.** Vol 63, N3, pp 363-372, 1999.

ANSYS CFX. **Solver Theory Guide**, 2013.

AUBIN, J. et al. Effect of microchannel aspect ratio on residence time distributions and the axial dispersion coefficient. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 48, n. 1, p. 554 – 559, 2009. ISSN 0255-2701. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0255270108001773>>.

BARRERA, E.L. et al. Modeling the anaerobic digestion of cane-molasses vinasse: Extension of the Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1) with sulfate reduction for a very high strength and sulfate rich wastewater, **Water Research**, Volume 71, 15 March 2015, Pages 42-54, ISSN 0043-1354, <http://dx.doi.org/10.1016/j.watres.2014.12.026>.

BARROS, V. G. **Conversão anaerobia de vinhaça e melão em reatores UASB inoculados com lodo granulado**. Dissertação (mestrado). Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias, 2013.

BASTOS, et al. Gerenciamento de lodo em um Sistema UASB + BF. **Revista AIDIS de Ingeniería y Ciencias Ambientales**. v.1, n.2. 10p. Ciudad de Mexico, MX. 2007.

BATSTONE, D. J. et al. The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). **Science and Technical Report No. 13**. First Edition. London, IWA Publishing, 77p, 2002.

BATSTONE, D. J.; HERNANDEZ, J.; SCHMIDT, J. Hydraulics of laboratory and full-scale upflow anaerobic sludge blanket (UASB) reactors. **Biotechnology and Bioengineering**, Wiley Subscription Services, Inc., A Wiley Company, v. 91, n. 3, p. 387–391, 2005. ISSN 1097- 0290. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/bit.20483>>.

BERNARD, O. et al. **Dynamical model development and parameter identification for an anaerobic wastewater treatment process**. *Biotchnol. and Bioenerg.*, 75(4) 424-438, 2003.

BRANNOCK, M.; WANG, Y.; LESLIE, G. Mixing characterisation of full-scale membrane bioreactors: CFD modelling with experimental validation. **Water Research**, v. 44, n. 10, p. 3181 – 3191, 2010. ISSN 0043-1354. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135410001508>>.

BROWN, A. et al. Influência do carregamento orgânico, hidráulico e recirculação sobre o desempenho de reator UASB empregado no tratamento de vinhaça. In: **X LATIN American Workshop and Symposium on Anaerobic Digestion**. Ouro Preto, MG, Brasil: [s.n.], 2011.

CABELLO, P. E.; SCOGNAMIGLIO, F. P.; TERÁN, F. J. C. Tratamento de vinhaça em reator anaeróbio de leito fluidizado. **Engenharia Ambiental**, v. 6, p. 321–338, 2009.

CAJIGAS, A.; PÉREZ, A.; TORRES, P. Importancia del pH y la alcalinidad en el tratamiento anaerobio de las aguas residuales del proceso de extracción de almidón de yuca. **Scientia et Technica**, v. XI, n. 27, 2005.

CAMPOS, J. R. (coord.). **Tratamento de esgotos sanitários por processo anaeróbio e disposição controlada no solo**. 1ª ed. Rio de Janeiro, 1999. 464p.

CANALES, F. A.; MENDES, C. A. B. Dinâmica de sistemas para modelagem de reatores em bateladas sequenciais. **Revista Eletrônica em Gestão, Educação e Tecnologia Ambiental**. Vol. 18, n.3, p. 1207-1222, 2014

CATANI, R. A.; ALCARDE, J. C.. "O pH de soluções de ácido acético, cítrico, oxálico e tartárico". **An. Esc. Super. Agric. Luiz de Queiroz**, Piracicaba , v. 23, p. 145-163, 1966 . Available from <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0071-12761966000100015&lng=en&nrm=iso>. access on 08 June 2015.

CHAPRA, S. C. **Surface Water-Quality Modeling**. McGraw-Hill. 1997. 844p.

CHERNICHARO, C. A. L. **Princípios do tratamento biológico de águas residuárias. Volume 5: Reatores anaeróbios.** Belo Horizonte: Desa/UFMG, 2008.

CIPLAK, N.; BARTON, J. R. A system dynamics approach for healthcare waste management: a case study in Istanbul Metropolitan City, Turkey. **Waste Management & Research.** Vol.30, n.6, p.576-586. 2012.

COLTRE, H. C. de S. et al. Estudo dos processos de mistura em reservatório de Água predial. In: **XIX Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos.** [S.l.: s.n.], 2011.

CORBETT, T. **Introdução a Dinâmica de Sistemas.** 2003. Disponível em: <www.corbett.pro.br/introds.pdf>.

COSTELLO, D. J.; GREENFIELD, P. F.; LEE, P. I. Dynamic modelling of a single stage high-rate anaerobic reactor – I model derivation. **Wat. Res.**, 25, 847-858, 1991.

CÓSTOLA, C.; ALUCCI, M. P. Aplicação de CFD para o cálculo de coeficientes de pressão externos nas aberturas de um edifício. **Ambiente Construído.** Porto Alegre, v.11, n.1, p.145-158. 2011

CRIVELARO, S. H. R. et al . Evaluation of the use of vinasse as a biostimulation agent for the biodegradation of oily sludge in soil. **Braz. arch. biol. technol.**, Curitiba , v. 53, n. 5, p. 1217-1224, Oct. 2010

CRUZ, D. B. et al. Estudo hidrodinâmico computacional de um reator UASB em escala piloto. In: **Congresso Interamericano de Engenharia Sanitária e Ambiental**, 33. [S.l.: s.n.], 2012.

CRUZ, D. B. **Estudo Hidrodinâmico Computacional de Reator UASB em Escala de Bancada com Validação Experimental.** Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) — Universidade Tecnológica Federal do Paraná Campus Campo Mourão, 70 f., 2013.

CRUZ, D. B. et al. Avaliação do comportamento hidrodinâmico de reator anaeróbio de manta de lodo e fluxo ascendente com diferentes configurações do sistema de distribuição do afluente utilizando fluidodinâmica computacional. **Eng. Sanit. Ambient.** v.21. n.4. pags.721-730. 2016.

DAOUD, I. L. A. **Estudo Numérico do Escoamento e do Comportamento de Inclusões Não-metálica em Distribuidores de Lingotamento Contínuo de Aço.** Dissertação

(Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2006. Disponível em: <<http://www.lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/8233/000571938.pdf>>.

DEL NERY, V. et al. **Performance of a high UASB reactor for sugarcane vinasse degradation and energy generation.** In. XII Latin American Workshop and Symposium of Anaerobic Digestion, 2016, Peru.

DING, J. et al. CFD optimization of continuous stirred-tank (CSTR) reactor for biohydrogen production. **Bioresource Technology**, v. 101, n. 18, p. 7005 – 7013, 2010. ISSN 0960-8524. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852410006693>>.

DÖLL, M. M. R.; FORESTI, E. Efeito do bicarbonato de sódio no tratamento de vinhaça em AnSBBR operado a 55 e 35°C. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 15, p. 275–282, 2010.

ELMALEH, S.; GRASMICK, A. (1985), **Mathematical Models for Biological Aerobic Fluidized Bed Reactors**, In: Mathematical models in biological wastewater treatment, Jørgensen, S.E. and Gromiec, M.J. (Eds), Elsevier, Netherlands.

FERNANDEZ, N. et al. Performance evaluation of an anaerobic fluidized bed reactor with natural zeolite as support material when treating high-strength distillery wastewater. **Renewable Energy**, v. 33, p. 2458–2466, 2008.

FORESTI, E. Fundamentos do processo de Digestão Anaeróbia. **III Taller y Seminario Latinoamericano: “Tratamiento Anaerobio de Aguas Residuales”**. Montevideo. Universidad de la República. 1994.

FORESTI, E.; VAN HAANDEL, A. Fundamentos do Tratamento Anaeróbio. En: **Tratamento de Esgotos Sanitarios por Processo Anaeróbio e disposição controlada no solo**. PROSAB. 1998.

FURTADO, P. S.; POERSCH, L. H.; WASIELESKY JR., W., Effect of calcium hydroxide, carbonate and sodium bicarbonate on water quality and zootechnical performance of shrimp *Litopenaeus vannamei* reared in bio-flocs technology (BFT) systems, **Aquaculture**, Volume 321, Issues 1–2, 16 November 2011, Pages 130-135, ISSN 0044-8486, <http://dx.doi.org/10.1016/j.aquaculture.2011.08.034>.

GADEN, D. L. **Modelling Anaerobic Digesters in Three Dimensions: Integration of Biochemistry with Computational Fluid Dynamics.** Tese (Doutorado) — University of Manitoba, Winnipeg, 2013.

GALÍ, A. et al. Modified version of ADM1 model for agro-waste application. **Bioresource Technology**. Vol 100, Nº11, pp 2783-2790. 2009. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852408011346>>

GENERALIS, S. C.; GLOVER, G. M. C. Modelling biochemical reaction with computational fluid dynamics. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, v. 3, p. 19, 2005.

GOMES, M. R. **Determinação dos coeficientes cinéticos e avaliação da eficiência de um sistema de lodos ativados no tratamento de efluentes de curtume**. Dissertação (mestrado em Tecnologias Ambientais). Universidade Federal do Mato Grosso do Sul. Campo Grande, MS. 78f. 2006.

GONÇALVES, J. C. S. I. **Desenvolvimento de modelo numérico para a simulação da qualidade da água em rios utilizando o software Vensim PLE®**. Dissertação (mestrado). São Carlos, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo. 2009. 203p.

GONÇALVES, J. C. S. I.; GIORGETTI, M. F. Mathematical model for the simulation of water quality in rivers using the Vensim PLE® software. **Journal of Urban and Environmental Engineering**. Vol.7, n.1m p.48-63. 2013.

GONZALEZ, J. et al. Influence of organic volumetric loading rate, nutrient balance and alkalinity: Cod ratio on the anaerobic sludge granulation of an UASB reactor treating sugar cane molasses. **International Biodeterioration e Biodegradation**, v. 41, p. 127–131, 1998.

HAO, F.; SHEN, M. 3d simulation on four design methods of water distribution uniformity for typical peripheral feed sedimentation tank. **Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering**, v. 28, n. 19, p. 56–62, 2012. Disponível em: <<http://www.ingentaconnect.com/content/tcsae/tcsae/2012/00000028/00000019/art00008>>.

HEM, J. D. **Study and interpretation of chemical characteristics of natural water: U.S. Geological Survey Water Syple**. Paper 2254, 263p, 1985. Disponível em: <http://pubs.usgs.gov/wsp/wsp2254/>.

HILL, D. T.; BARTH, C. L. **A dynamic model for simulation of animal waste digestion**. Journal Water Pollution Control Federation. Vol 49, Nº 10, 1977.

HINES, W. W. **Probabilidade e estatística na engenharia**. Ed. LTC. Rio de Janeiro. 588p. 2006.

HINKEN, L. et al. Modified ADM1 for modelling as UASB reactor laboratory plant treating starch wastewater and synthetic substrate load tests. **Water Research**. Vol 64, pp 82-93. 2014.

KALAGA, D. V. et al. Liquid phase axial mixing in solid-liquid circulating multistage fluidized bed: CFD modeling and RTD measurements. **Chemical Engineering Journal**, v. 191, n. 0, p. 475 – 490, 2012. ISSN 1385-8947. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1385894712003245>>.

LATHA, S.; BORMAN, D.; SLEIGH, P. CFD multiphase modelling for evaluation of gas mixing in an anaerobic digester. In: AQUA ENVIRO TECHNOLOGY TRANSFER. **14th CFD multiphase modelling for evaluation of gas mixing in an anaerobic digester**. The Royal Armouries, Leeds, UK., 2009. p. 16.

LEVENSPIEL, O. **Chemical Reaction Engineering**. [S.l.]: Wiley, New York, 1999.

LIMA, M. G. S.; NETO, S. R. de F.; LIMA, A. G. B. de. Theoretical/experimental study of an upflow anaerobic sludge blanket reactor treating domestic wastewater. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, v. 9, p. 22, 2011.

LOHANI, S. P. et al. ADM1 modeling of UASB treating domestic wastewater in Nepal. **Renewable Energy**. v.96. p.263-268. 2016.

LONGO, R. R. **Geração de metano em reator UASB: Avaliação de parâmetros de monitoramento para controle do processo de tratamento anaeróbio de vinhaça**. Dissertação (mestrado). Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos. 146f. 2015.

MARTÍN, M. A. Kinect study of the anaerobic digestion of vinasse pretreated with ozone, ozone plus ultraviolet light, and ozone plus violet light in the presence of titanium dioxide. **Process Biochemistry**. v.37, p. 699-709, 2002.

MENTER, F. R.; KUNTZ, M.; LANGTRY, R. Ten years of industrial experience with the SST turbulence model. **Proceedings of the 4th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer**, pp. 625-632. 2003.

MOTTERANN, F. **Caracterização da comunidade microbiana de um reator aneróbio de leito fluidificado envolvida na degradação de surfactant não iônico álcool etoxilado de cadeia não ramificada (GENAPOL)**. Tese de doutorado (Egenharia Hidráulica e Sanitária). Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo. São Carlos, 2013.

MORAES, B. S. et al. Anaerobic digestion of vinasse from sugarcane biorefineries in Brazil from energy, environmental, and economic perspectives: Profit or expense? **Applied Energy**,

v. 113, n. 0, p. 825 – 835, 2014. ISSN 0306-2619. Disponível em:
<<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261913005849>>.

MOSEY, F.E. (1983). Mathematical modelling of the anaerobic digestion process: regulatory mechanisms for the formation of short-chain volatile acids from glucose. **Wat. Sci. Tech.** Vol. 15, pp. 209-232.

NANDY, T.; SHASTRY, S.; KAUL, S. Wastewater management in a cane molasses distillery involving bioresource recovery. **Journal of Environmental Management**, v. 65, p. 25–38, 2002.

OLIVEIRA, R. A. **Efeitos da concentração de sólidos suspensos do afluente no desempenho e características do lodo de reatores anaeróbios de fluxo ascendente com manta de lodo tratando águas residuárias de suinocultura**. 359f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) Dpto. de Hidráulica e Saneamento, Universidade de São Paulo. São Carlos. 1997.

PASSOS, R. G. **Avaliação de desempenho de lagoas de estabilização por meio de dados de monitoramento e modelagem em fluidodinâmica computacional (CFD)**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais, 2012.

PATWARDHAN, A. W. Prediction of residence time distribution of stirred reactors. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 40, n. 24, p. 5686–5695, 2001. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie0103198>>.

PINTO, C. P. **Tecnologia da Digestão Anaeróbia da Vinhaça e Desenvolvimento Sustentável**. Dissertação (Mestrado) — Faculdade de Engenharia Mecânica - Universidade Estadual de Campinas. Campinas. 1999.

PONTES, P. P. **Reatores UASB aplicados ao tratamento combinado de esgotos sanitários e lodo excedente de filtro biológico percolador**. Tese (Doutorado em Saneamento, Meio Ambiente e Recursos Hídricos). 198f. Universidade Federal de Minas Gerais. Belo Horizonte. 2003.

QUEEN, A. S. **Simulador de reatores anaeróbios com base no ADM1**. Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Telecomunicações e Controle. Universidade de São Paulo, 2006).

RAMIREZ, I. et al. Modified ADM1 disintegration/hydrolysis structures for modeling batch thermophilic anaerobic digestion of thermally pretreated waste activated sludge. **Water Research**. Vol 43, pp 3479-3492. 2009. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135409003224>>.

REN, T.-T. et al. Hydrodynamics of upflow anaerobic sludge blanket reactors. **AIChE Journal**, Wiley Subscription Services, Inc., A Wiley Company, v. 55, n. 2, p. 516–528, 2009. ISSN 1547-5905. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/aic.11667>>.

RICHMOND, B. Systems thinking/system dynamics: let's just get on it. **System Dynamics Review**. v.10, p.135-157, 1994.

RIPLEY, I. E.; BOYLE, W. C.; CONVERSE, J. C. Improved Alkalimetric Monitoring for Anaerobic Digestion of High-Strength Waste. **Water Environment Federation**, v.58, n. 5, p. 406-411, 1986.

ROCHA, V. C. **Processamento anaeróbio de vinhaça pré-tratada com biopolímero à base de cálcio**. Dissertação (mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2012.

RODRIGUES, L. S. **Concepção e avaliação de sistemas de tratamento com reator anaeróbio de manta de lodo (UASB) e lagoa de polimento para águas residuárias de suinocultura**. (Tese de doutorado) – Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Belo Horizonte, 2008.

ROUNDS, S. **Alkalinity Calculation Methods**, 2013. Disponível em: <<http://or.water.usgs.gov/alk/methods.html#speciation>>. Acesso em: 27 mar. 2015.

SALEM, A.; OKOTH, G.; THOMING, J. An approach to improve the separation of solid-liquid suspensions in inclined plate settlers: {CFD} simulation and experimental validation. **Water Research**, v. 45, n. 11, p. 3541 – 3549, 2011. ISSN 0043-1354. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135411002089>>.

SCHLICHTING, H. **Boundary-Layer Theory**. New York McGraw-Hill, 817p, 1979.

SHILTON, A.; GLYNN, D.; PHELPS, P. An inside look - the potential of CFD technology. **Water21**, v. 1.1, p. 37–38, 1999.

SIERRA-PALLARES, J. et al. Particle diameter prediction in supercritical nanoparticle synthesis using three-dimensional CFD simulations. Validation for anatase titanium dioxide production. **Chemical Engineering Science**, v. 64, n. 13, p. 3051 – 3059, 2009. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250909001808>>.

SILVA, M. F. **Análise hidrodinâmica de reatores de bancada com variações do sentido do fluxo e tipo de traçador**. Trabalho de Conclusão de Curso (Engenharia Ambiental) – Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Uberaba, 2016.

SIMCIK, M. et al. Smart RTD for multiphase flow systems. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 90, n. 11, p. 1739 – 1749, 2012. ISSN 0263-8762. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263876212001268>>.

SIMÕES, A. N. **Análise hidrodinâmica de reatores em escala de bancada com modelagem de sistemas**. Trabalho de Conclusão de Curso (Engenharia Ambiental) – Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Uberaba, 2014.

SIMONETTO, E. O. et al. O uso de dinâmica de sistemas para avaliação de cenários da reciclagem de resíduos sólidos urbanos. **Revista Gestão, Inovação e Tecnologias**. Vol. 4, n.2, p.910-924, 2014.

SIQUEIRA, L. M. **Influência da taxa de carregamento orgânico na degradação anaeróbia da vinhaça em reator de leito fluidizado**. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de São Carlos, 2008.

SOUTO, R. T. et al. Estudo comparativo de modelo de determinação da alcalinidade em amostras de água subterrânea. **XVIII Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas**. Belo Horizonte. 2014.

SPEECE, R.E. **Anaerobic Biotechnology for Industrial Wastewaters**. Archae Press, Nashville Tennessee, 1996. 416p.

STUMM, W.; MORGAN, J.J., 1996, **Aquatic chemistry: Chemical equilibria and rates in natural waters**, 3rd ed.: New York, John Wiley & Sons, 1022 p.

TARUYANON, K.; TEJASEN, S. Modelling of two-stage anaerobic treating wastewater from a molasses-based ethanol distillery with the IWA Anaerobic Digestion No. 1. **Engineering Journal**. v.14, p.25-36, 2010.

TCHOBANOGLIOUS, G.; BURTON, F. L.; STENSEL, H. D. **Wastewater Engineering: Treatment and Reuse**. Metcalf & Eddy, Inc., McGraw-Hill, New York, NY, USA, 4th edition, 2003.

VIANA, A.B. **Tratamento anaeróbio de vinhaça em reator UASB operado em temperaturas na faixa termofílica e submetido ao aumento progressivo de carga orgânica**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Hidráulica e Saneamento), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, 2006.

VLYSSIDES, A. G., BARAMPOUTI, E. M. P., MAI, S. T. Simple estimation of granule size distribution and sludge bed porosity in a UASB reactor. **Global NEST Journal**. vol. 10, n. 1, pag-73-19, 2008.

VON SPERLING, M. **Biological Wastewater Treatment Series: Volume Five: Activated Sludge and Aerobic Biofilm Reactors**. IWA Publishing. London, UK. 336f. 2007.

WILKIE, A. C.; RIEDESEL, K. J.; OWENS, J. M. Stillage characterization and anaerobic treatment of ethanol stillage from conventional and cellulosic feedstocks. **Biomass and Bioenergy**, v. 19, n. 2, p. 63 – 102, 2000. ISSN 0961-9534. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0961953400000179>>.

APÊNDICE A

Este apêndice contém as figuras referentes aos diagramas de causalidade de treze variáveis contidas no modelo proposto, sendo elas:

- concentração de biomassa;
- taxa de decaimento de biomassa;
- concentração de substrato;
- pH gerado pelo substrato;
- dosagem de alcalinizante;
- incremento total de pH pelo alcalinizante;
- pH da solução de alcalinizante;
- pH do sistema;
- inibição por pH;
- taxa de crescimento de biomassa;
- respiração endógena;
- taxa de saída de substrato;
- taxa de consumo de substrato.

Figura 49 – Diagrama de causalidade. Variável: concentração de biomassa

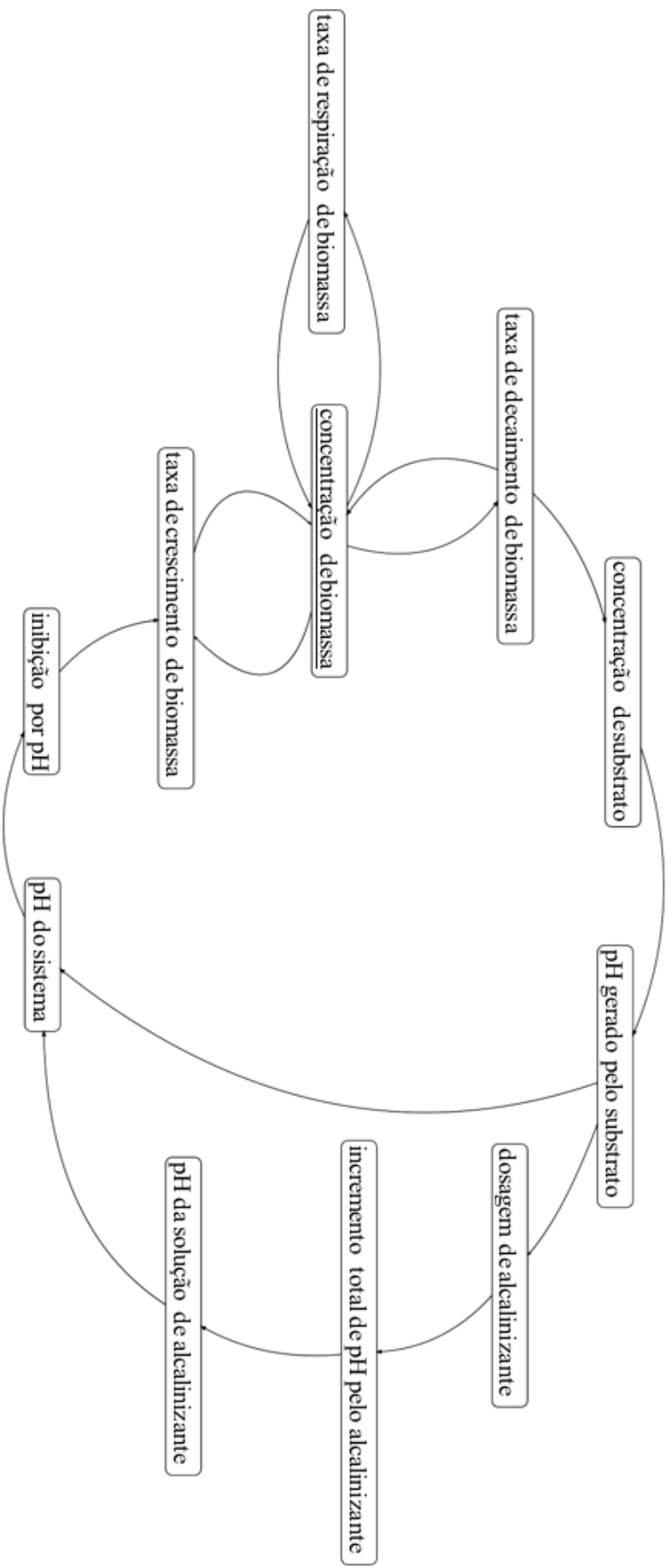


Figura 50 – Diagrama de causalidade. Variável: taxa de decaimento de biomassa

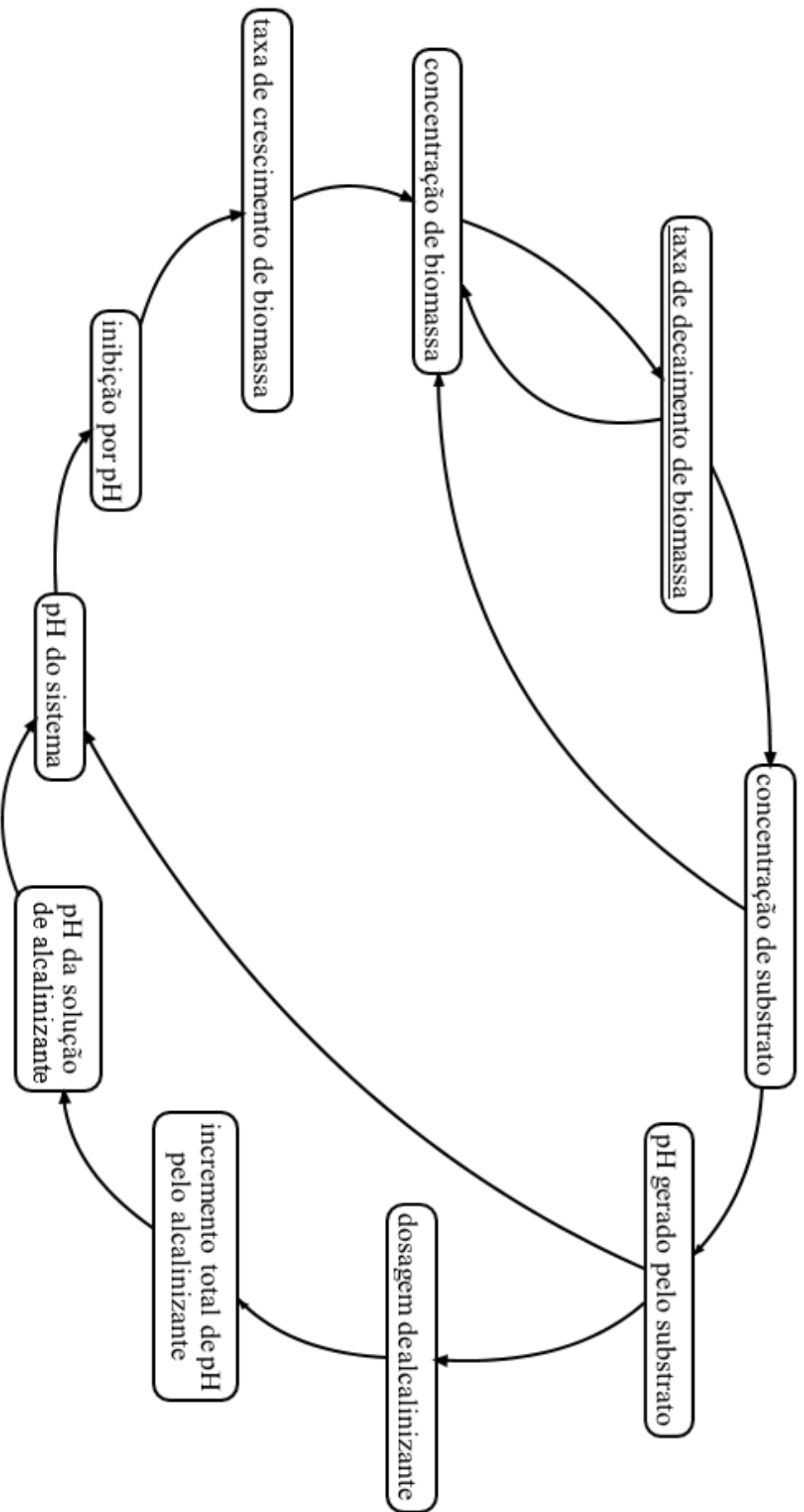
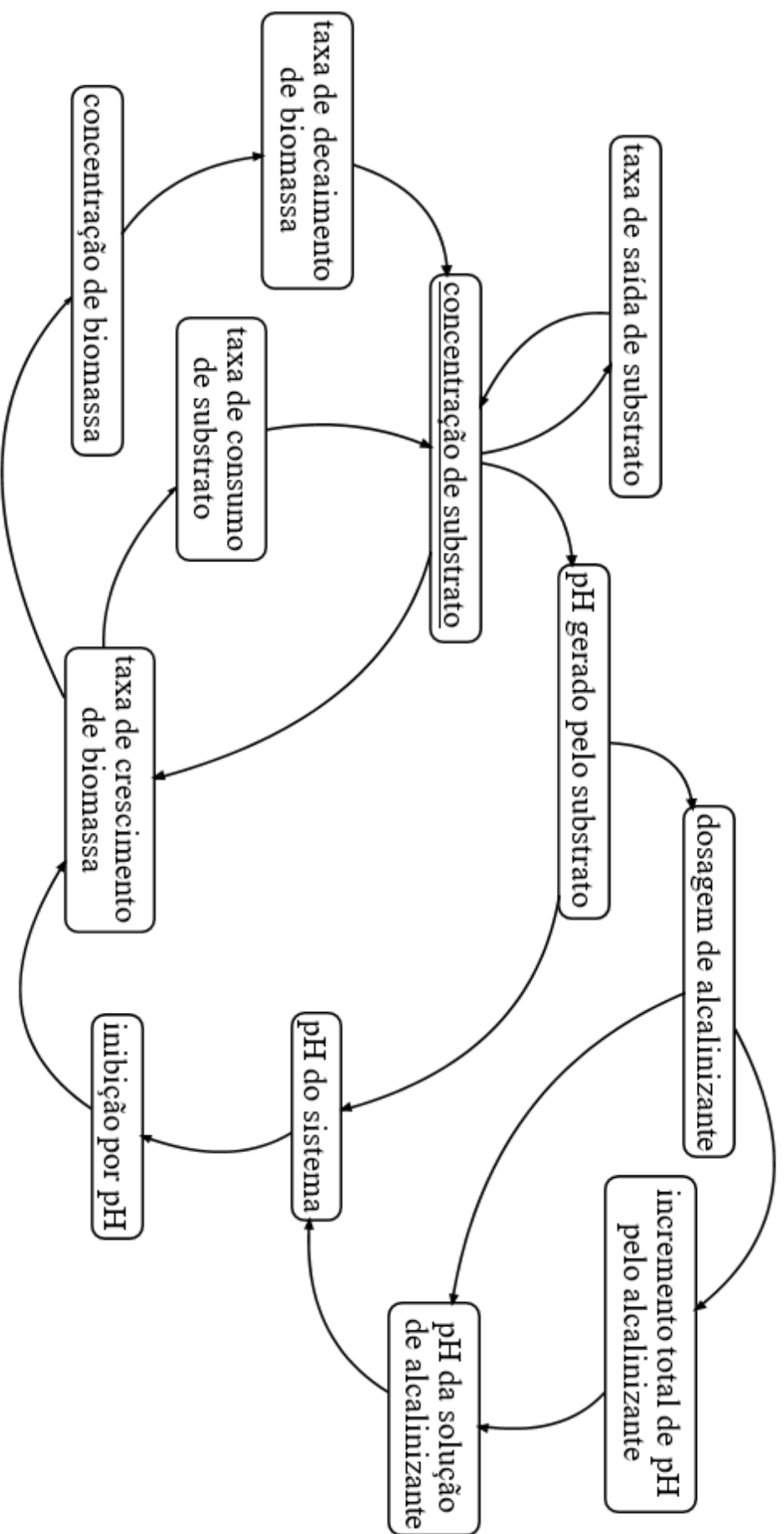


Figura 51 – Diagrama de causalidade. Variável: concentração de substrato



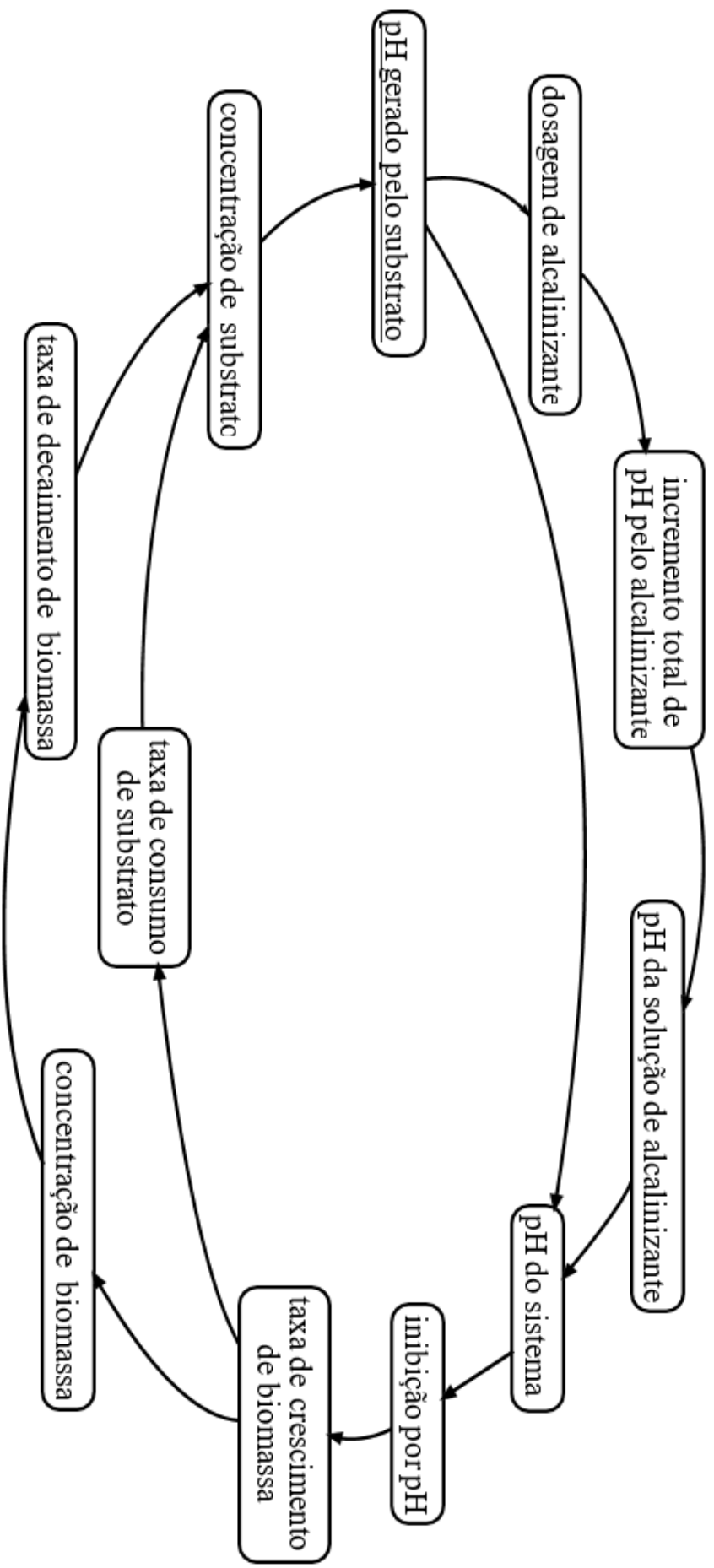


Figura 52 – Diagrama de causalidade. Variável: pH gerado pelo substrato

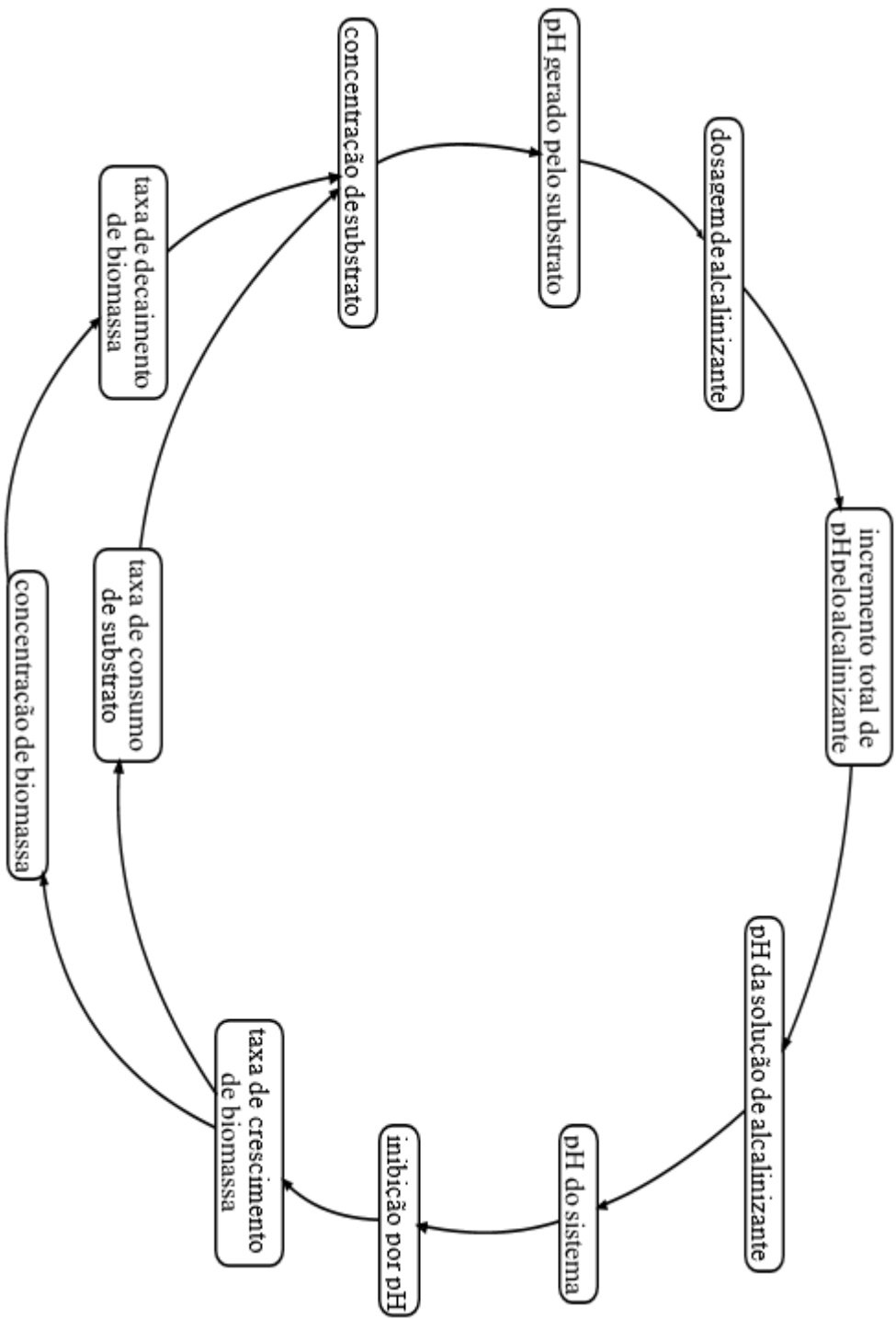


Figura 53 – Diagrama de causalidade. Variável: dosagem de alcalinizante

Figura 54 – Diagrama de causalidade. Variável: incremento total de pH pelo alcalinizante

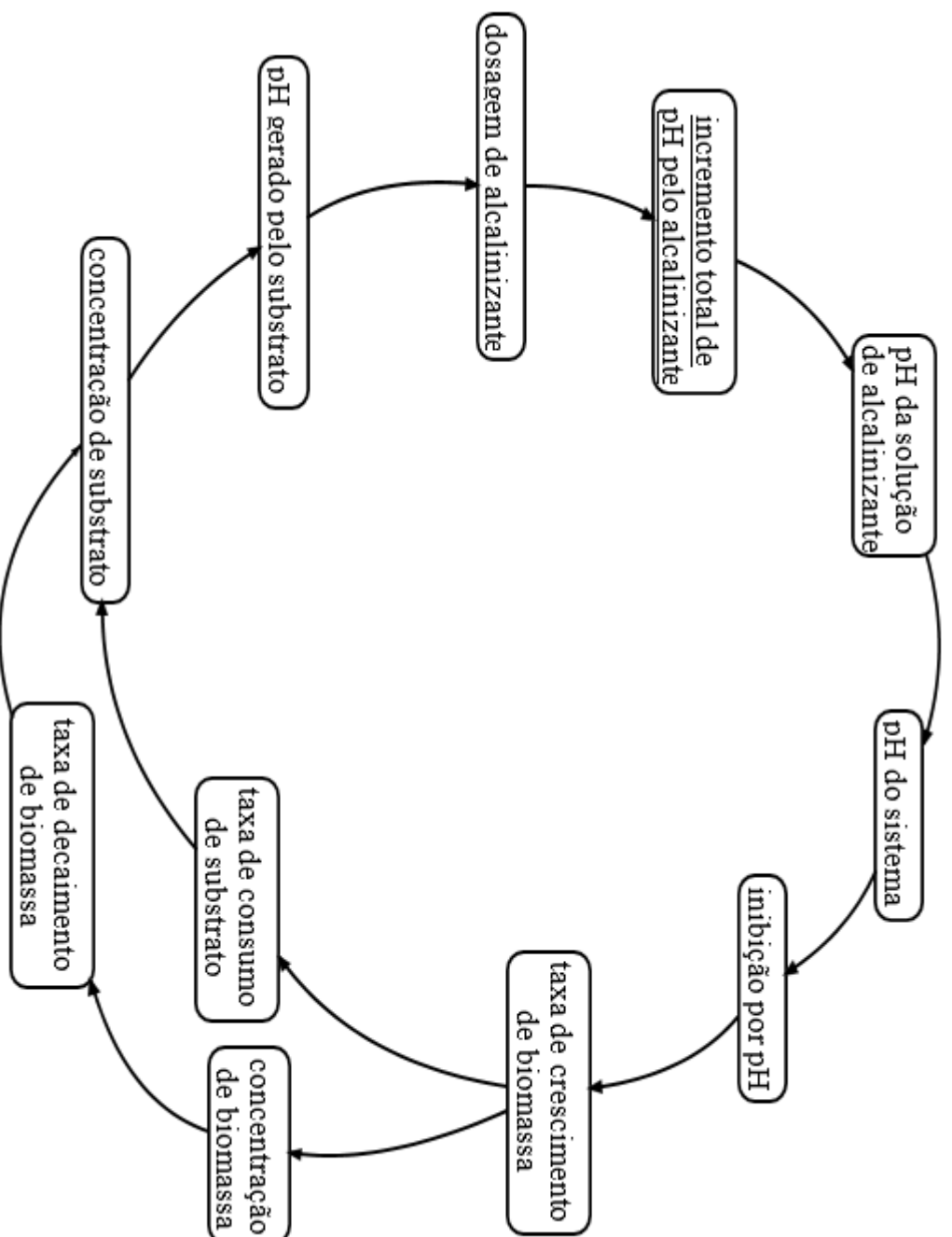


Figura 55 – Diagrama de causalidade. Variável: pH da solução de alcalinizante

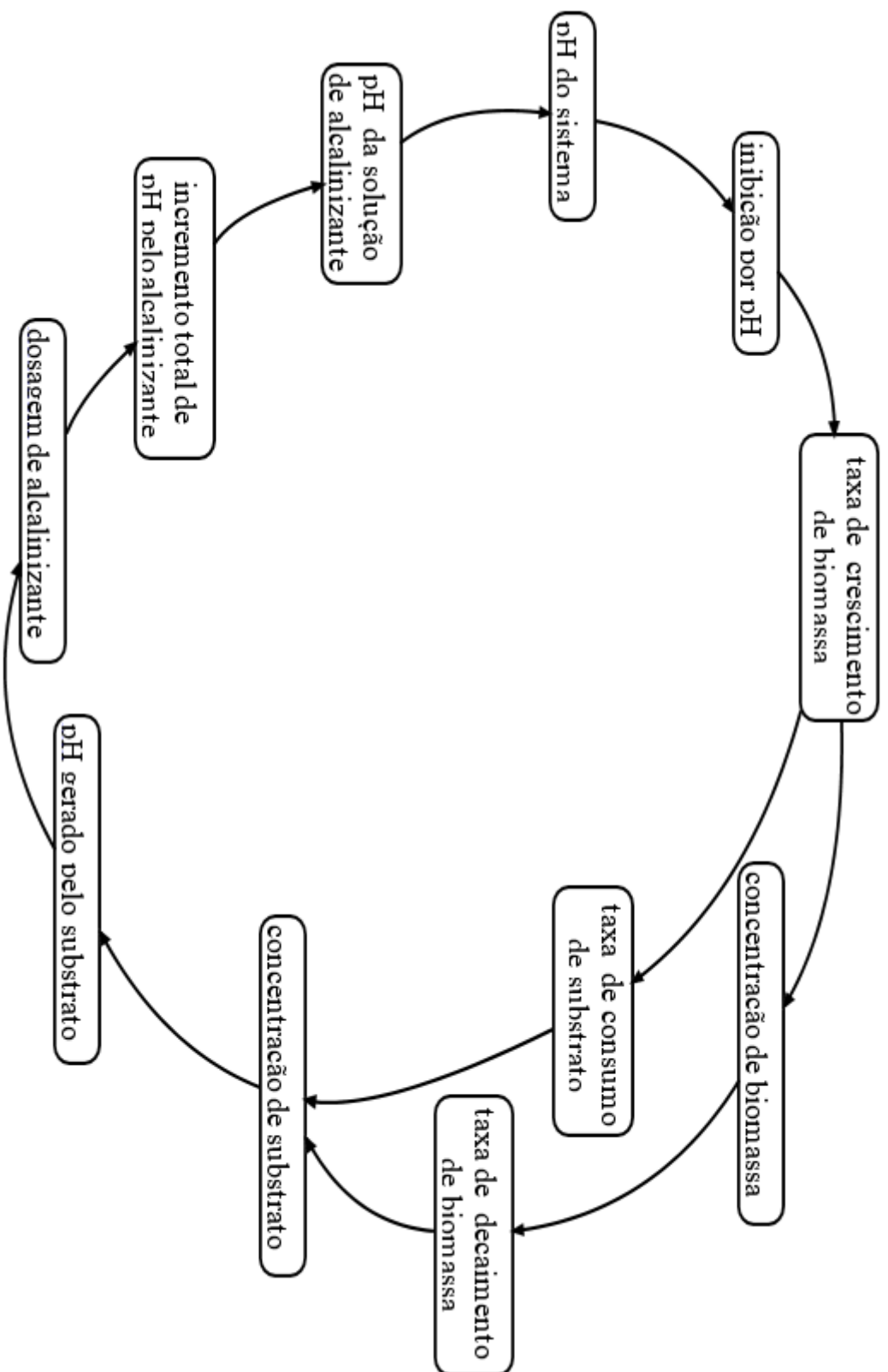


Figura 56 – Diagrama de causalidade. Variável: pH do sistema

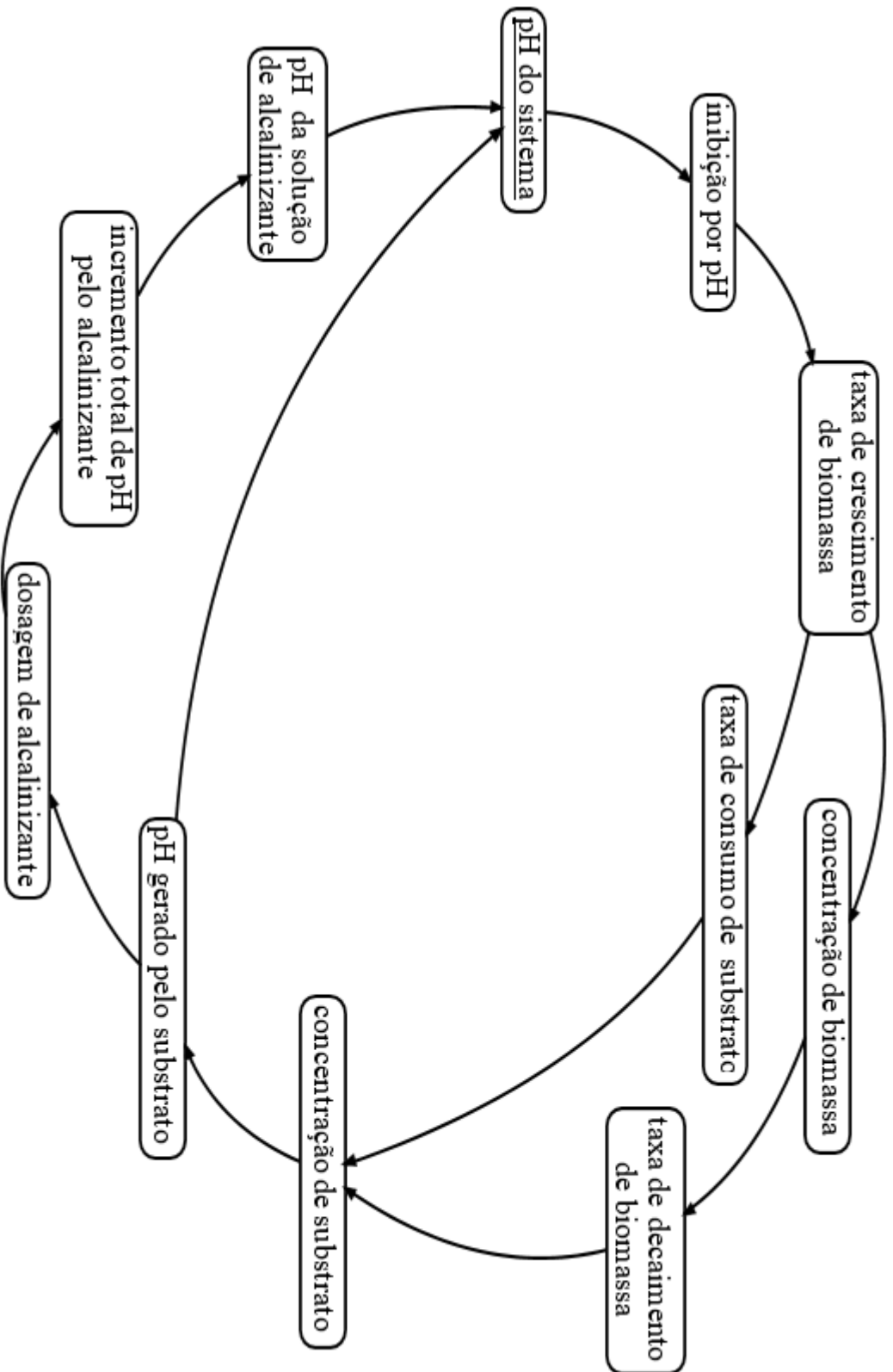


Figura 57 – Diagrama de causalidade. Variável: inibição por pH

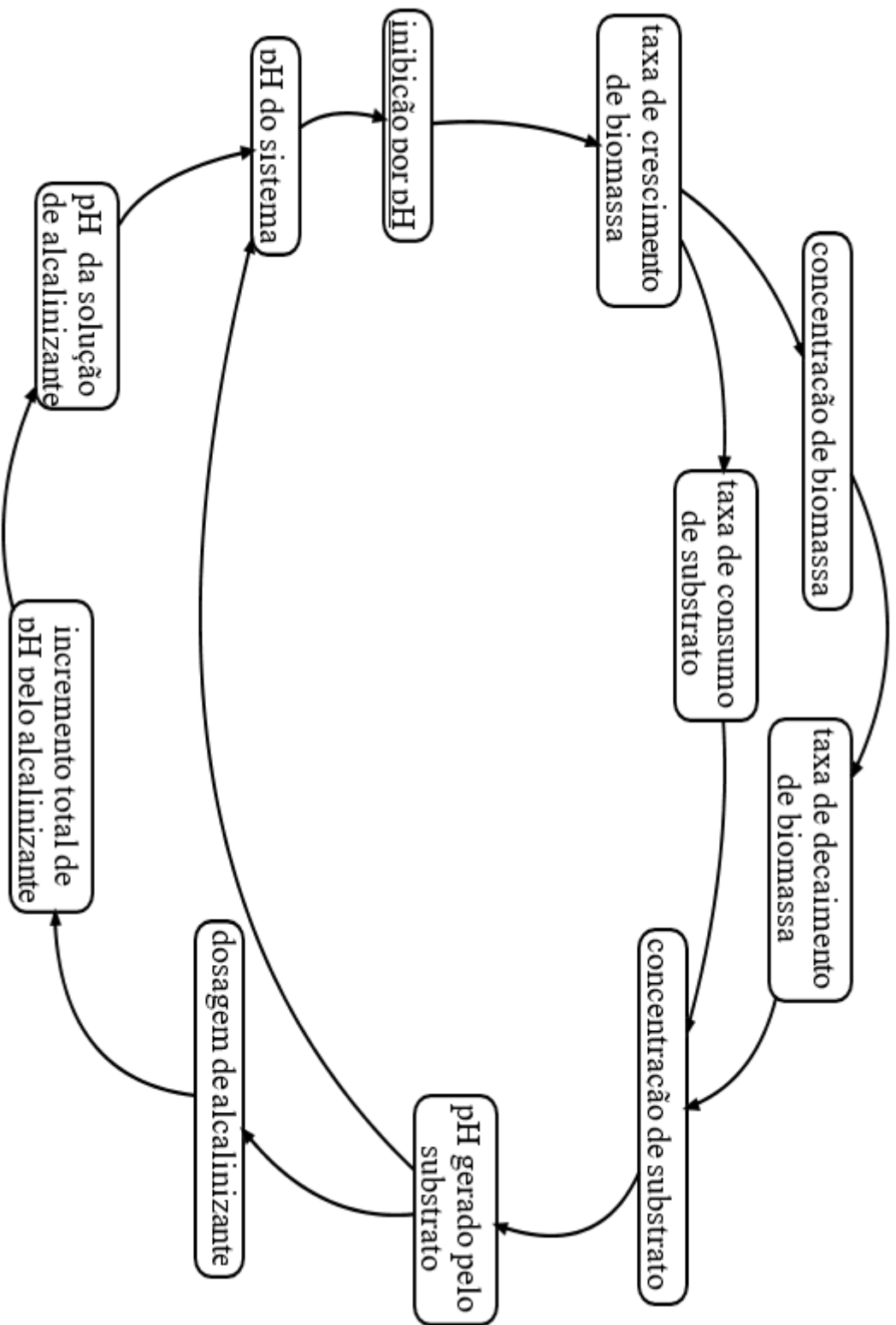


Figura 58 – Diagrama de causalidade. Variável: taxa de crescimento de biomassa

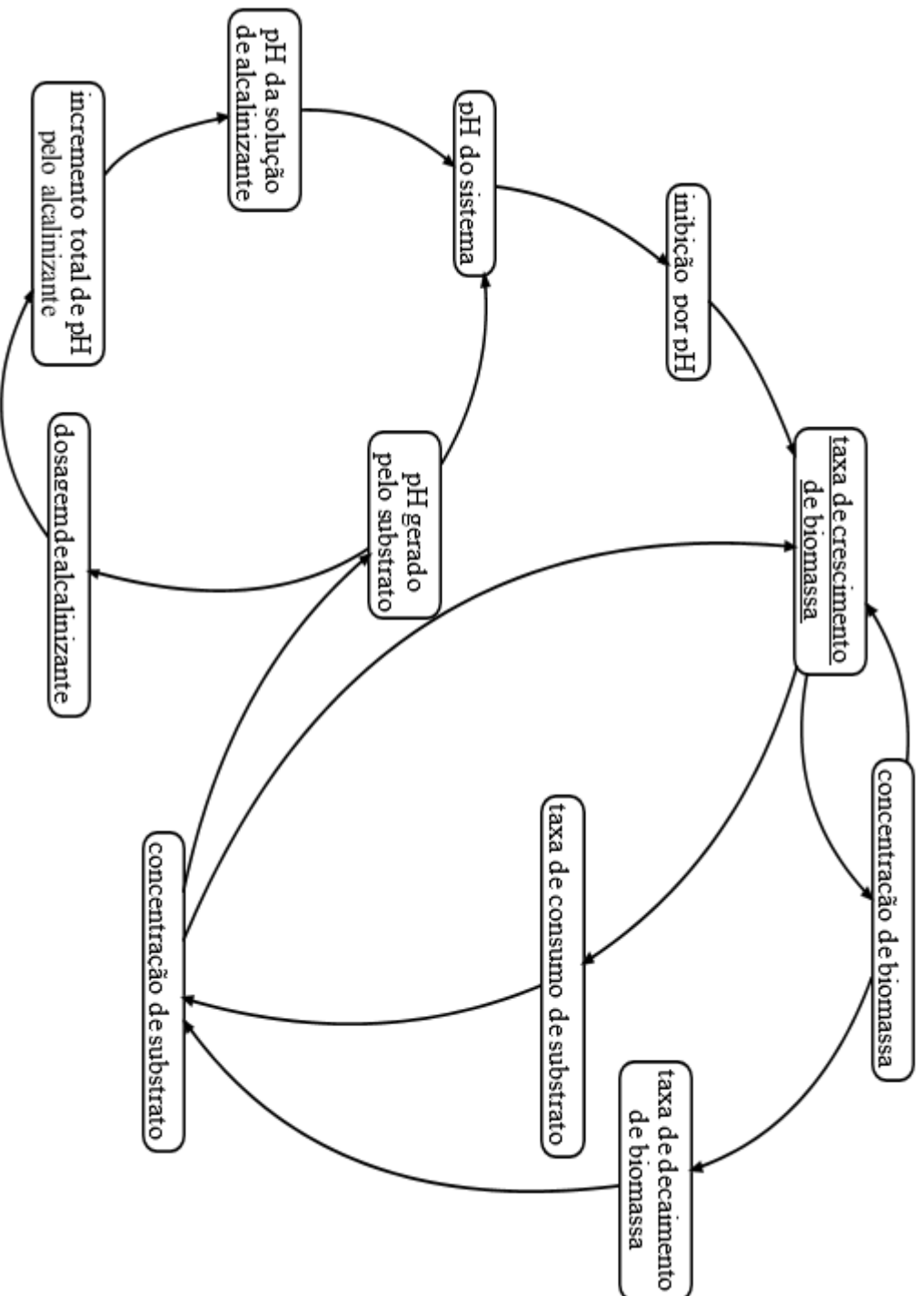


Figura 59 – Diagrama de causalidade. Variável: taxa de consumo de substrato

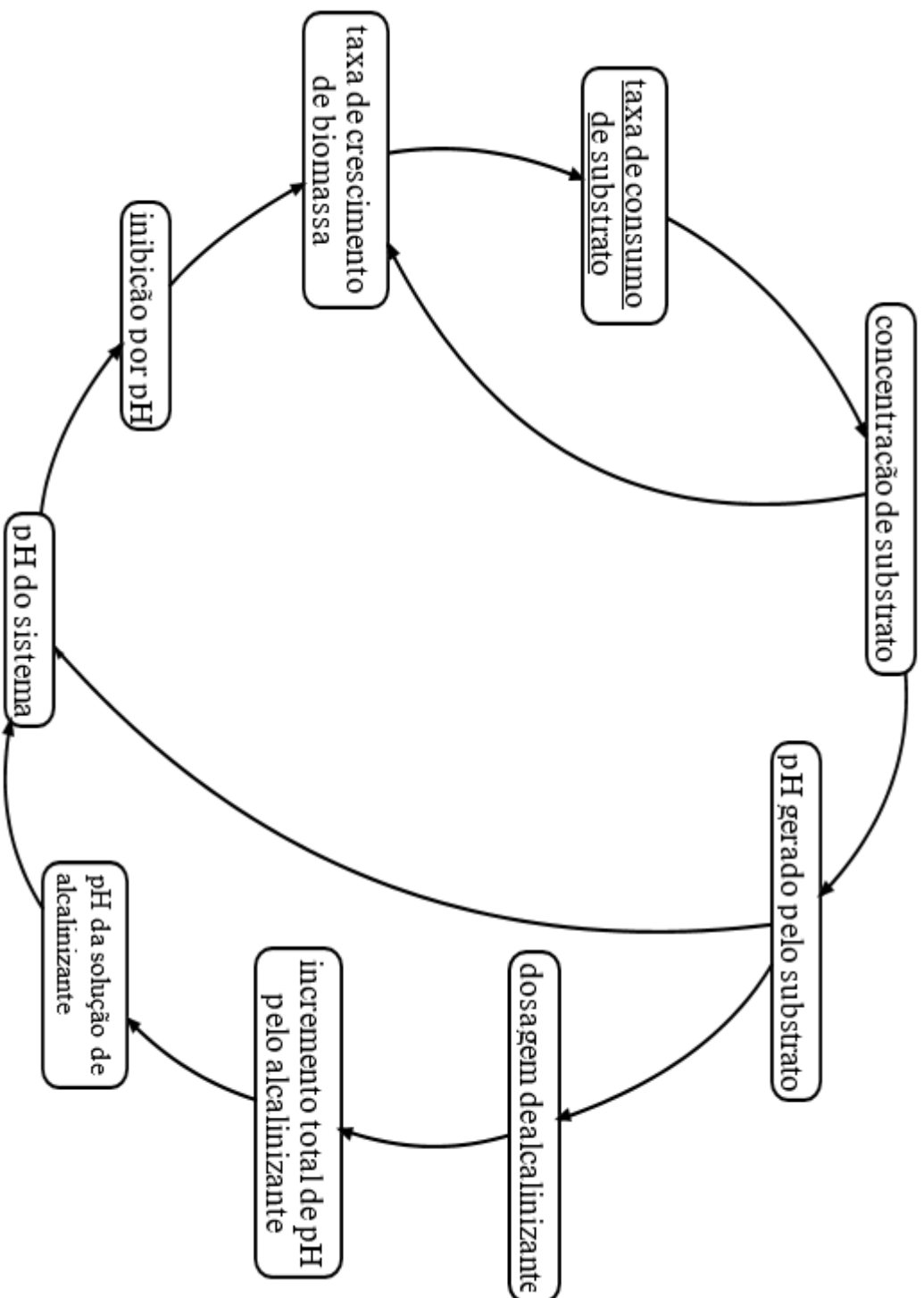


Figura 60 – Diagrama de causalidade. Variável: taxa de respiração endógena

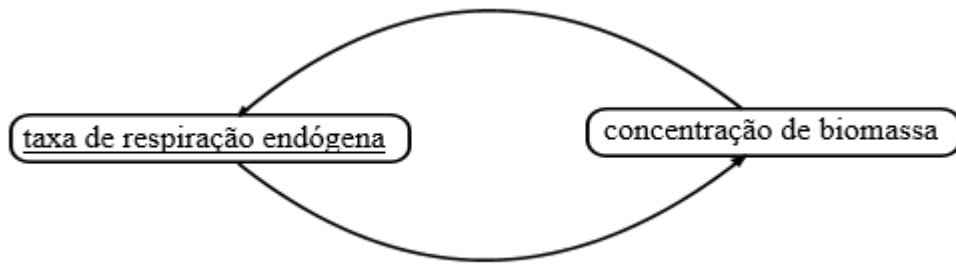
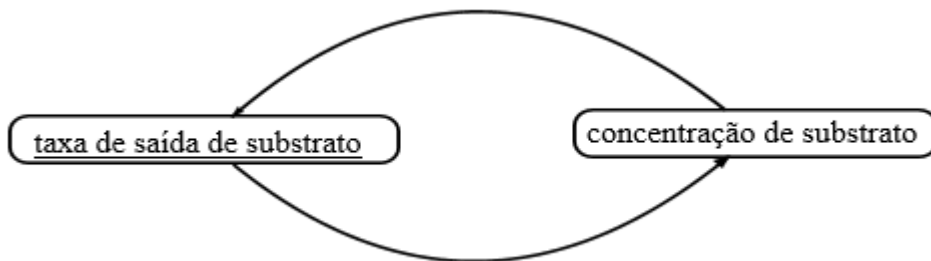


Figura 61 - Diagrama de causalidade. Variável: taxa de saída de substrato



APÊNDICE B

Neste apêndice se encontram as figuras geradas nas simulações utilizadas no teste de independência de malhas e que auxiliaram na interpretação dos resultados deste teste.

Os testes foram realizados para os reatores R1 e R2.

Figura 62 – Tela de monitoramento do parâmetro *Imbalance* no *CFX-Solver*TM: Malha padrão, Reator R1

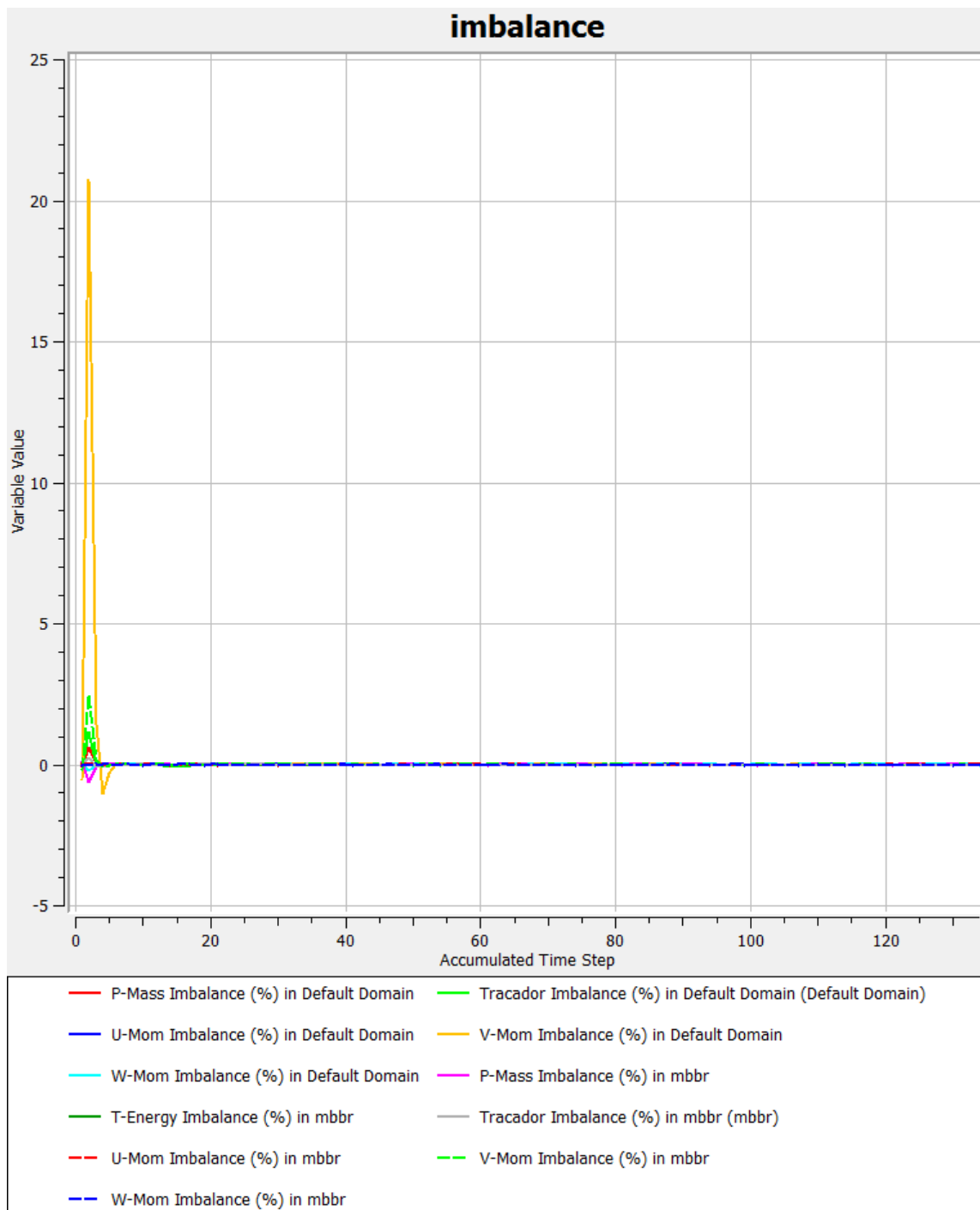


Figura 63 – Tela de monitoramento do parâmetro *Imbalance* no *CFX-Solver*TM: Malha refinada, Reator R1

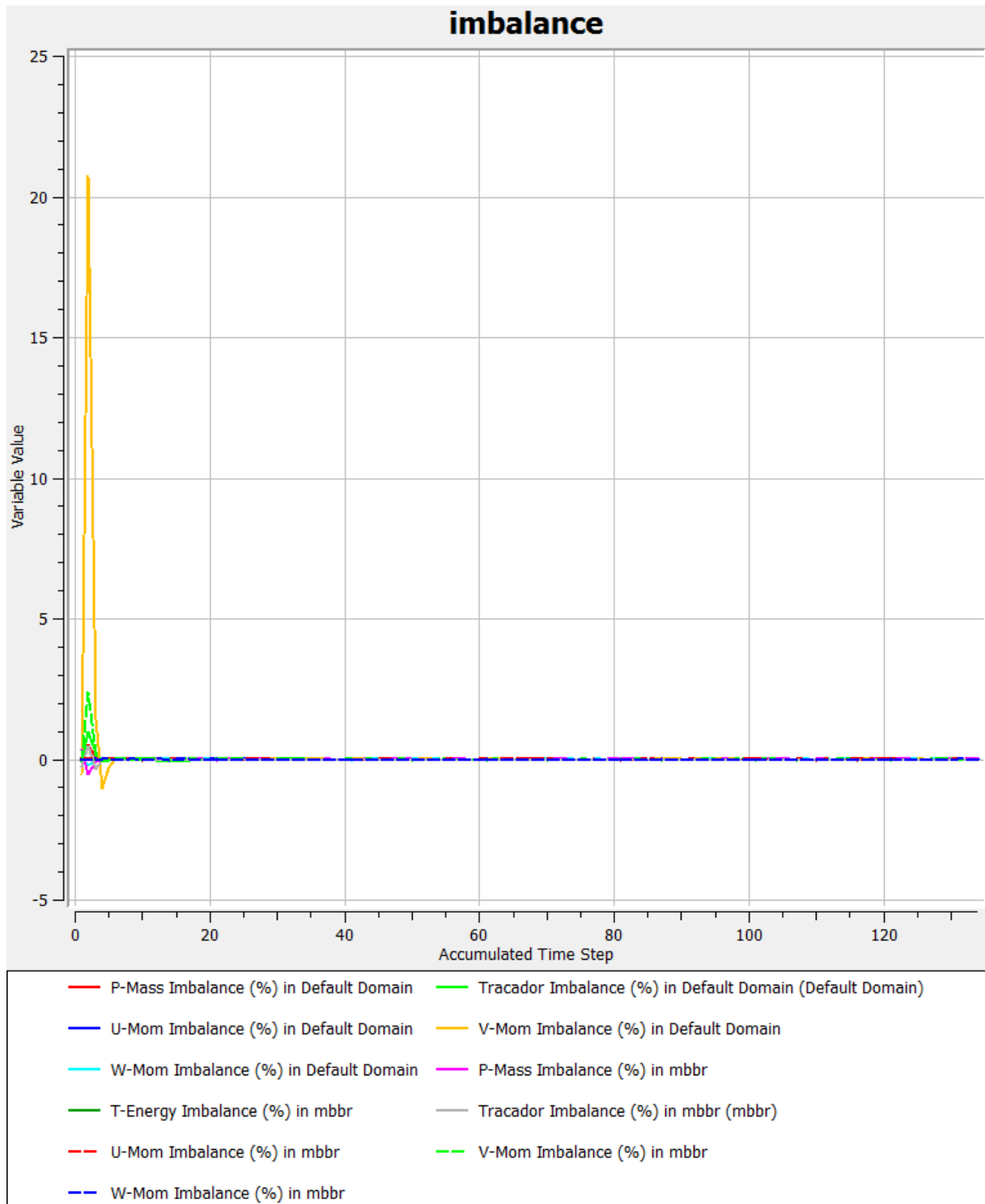


Figura 64 – Tela de monitoramento do parâmetro *User Points* (Traçador) no *CFX-Solver*TM: Malha padrão, Reator R1

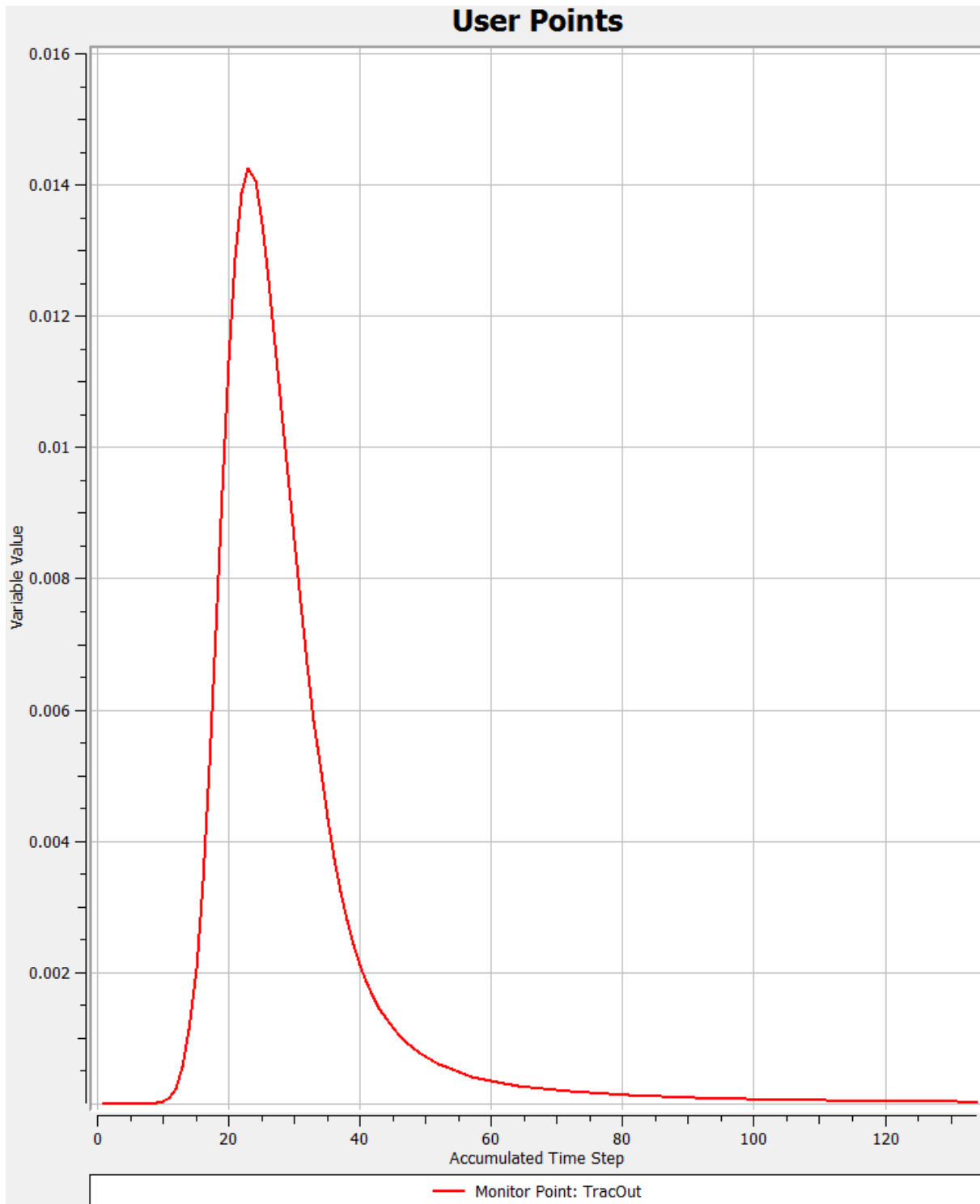


Figura 65 – Tela de monitoramento do parâmetro User Points (Traçador) no *CFX-Solver*TM: Malha refinada, Reator R1

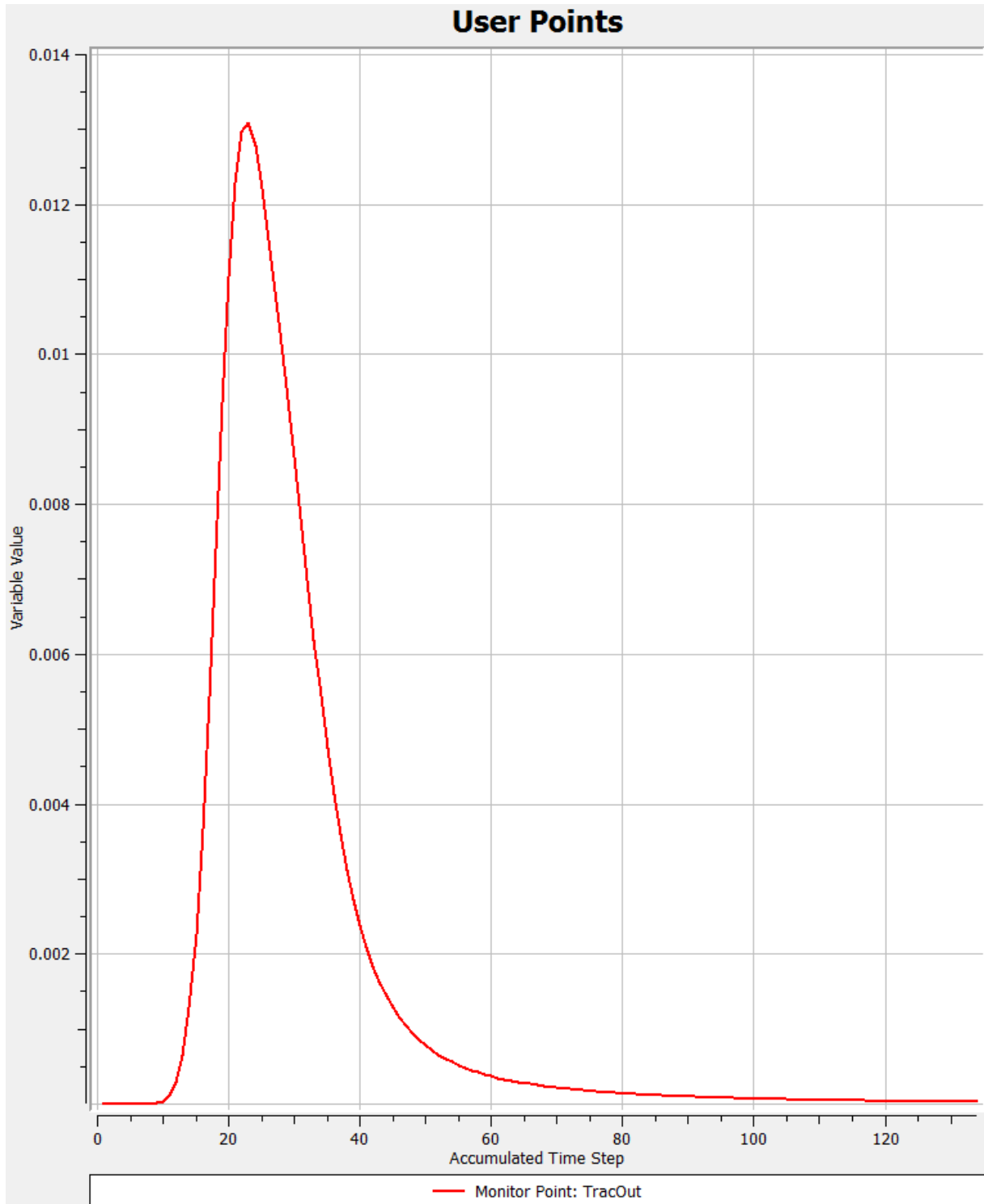


Figura 66 – Tela de monitoramento do parâmetro *Imbalance* no *CFX-Solver*TM: Malha padrão (MP), Reator R2

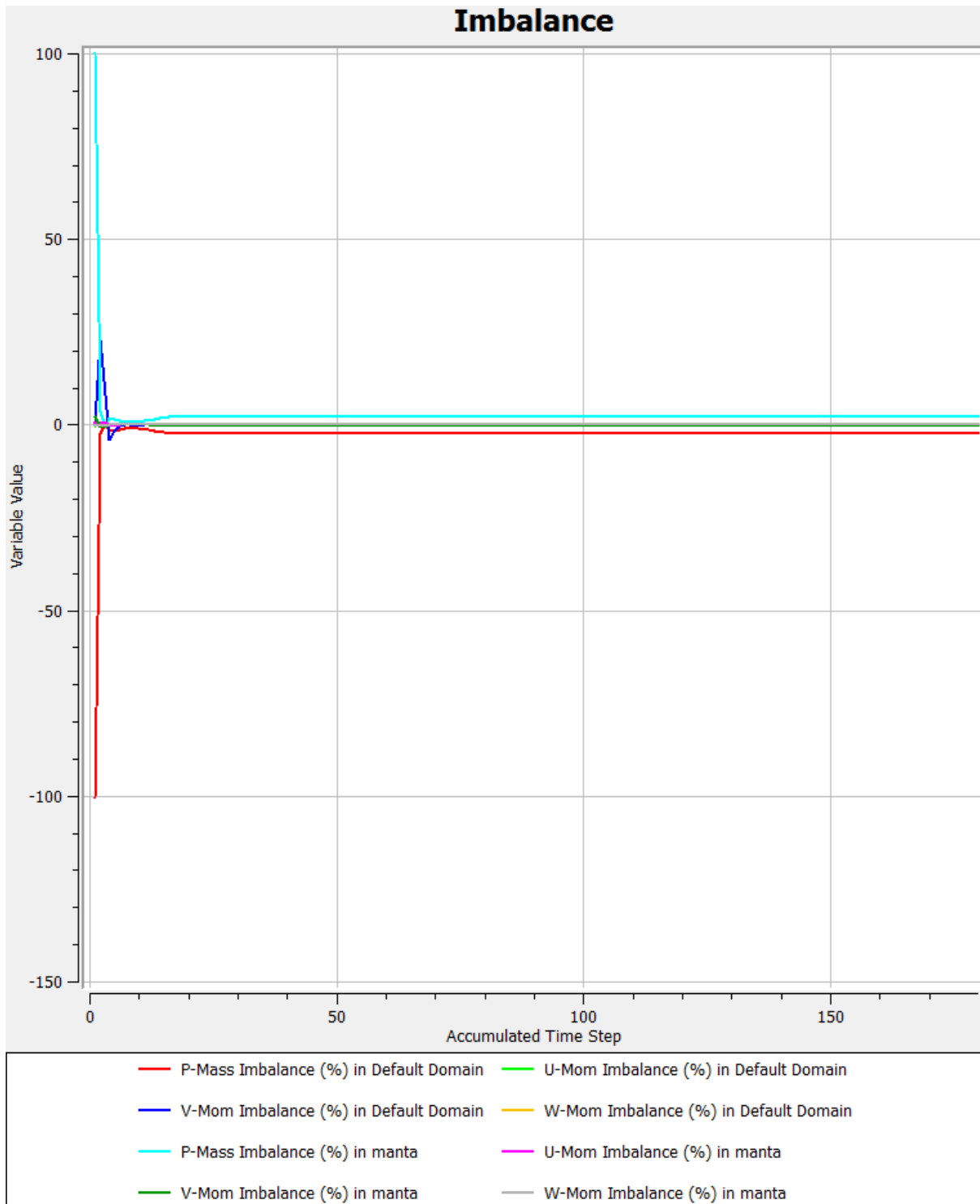
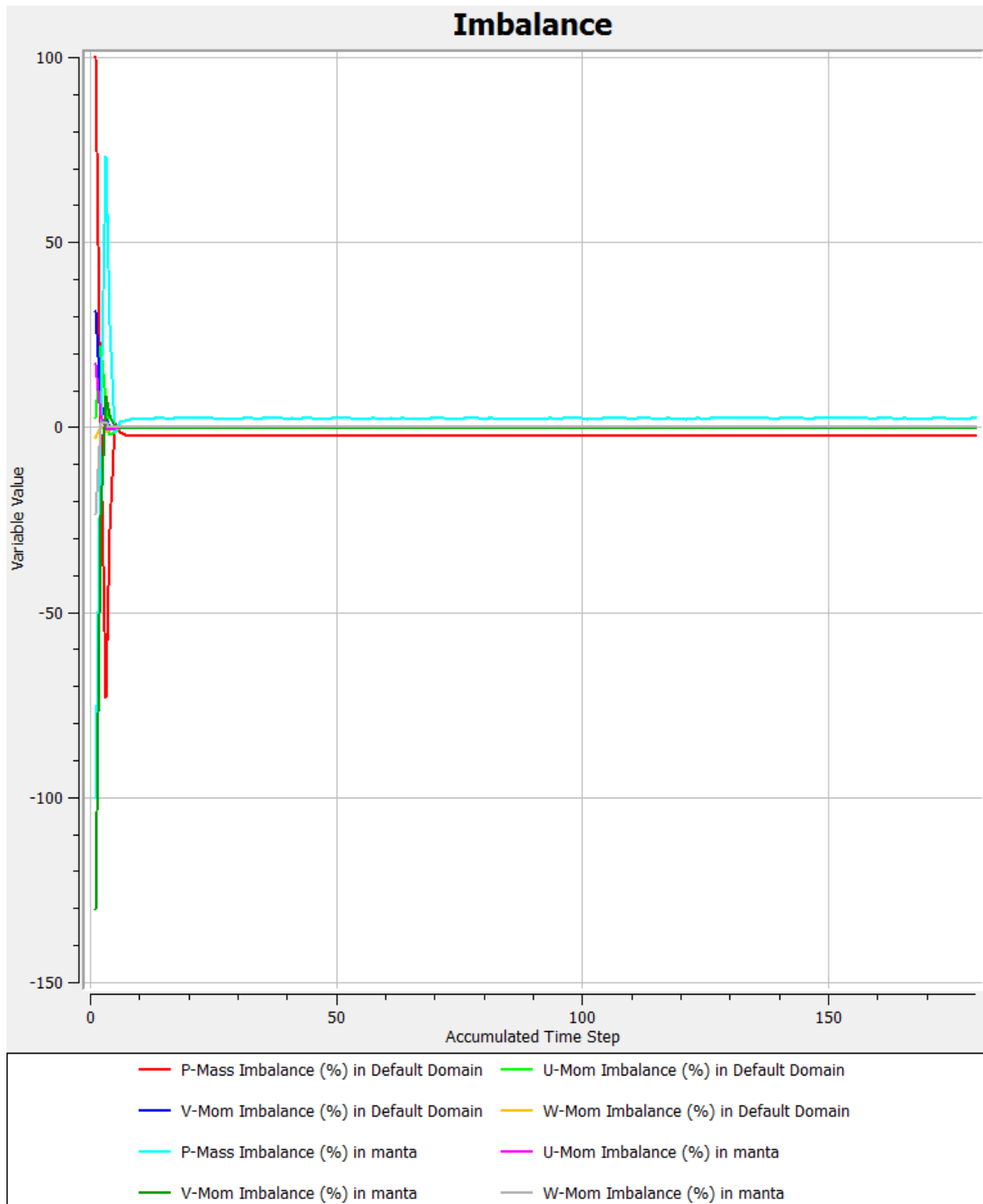


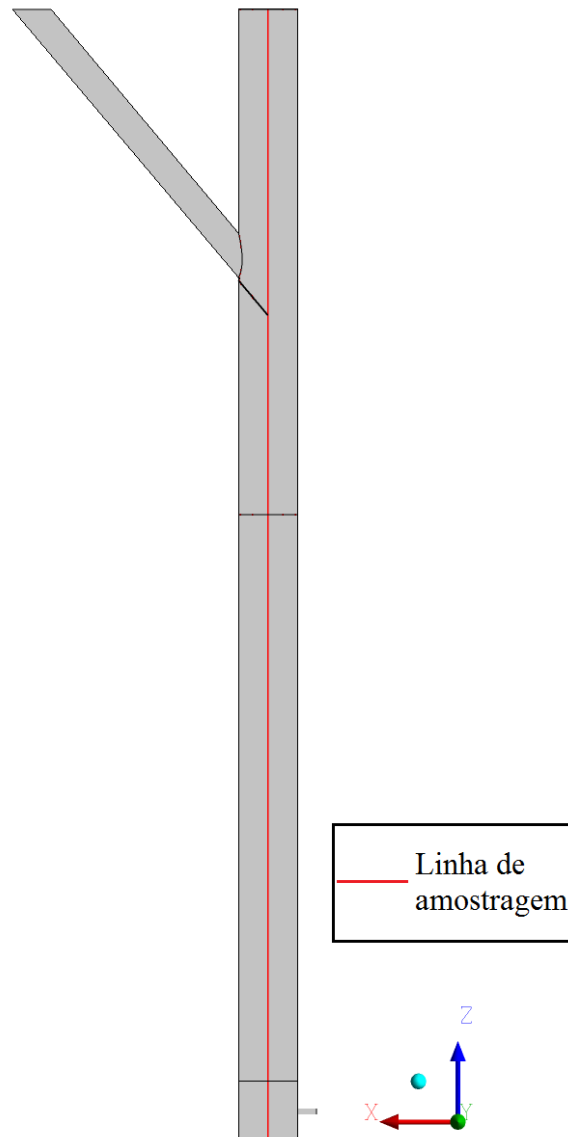
Figura 67 – Tela de monitoramento do parâmetro Imbalance no *CFX-Solver*TM: Malha completamente refinada (MCR), Reator R2



APÊNDICE C

Na Figura 69 são exibidas a linha (em vermelho) de amostragem. Foram realizadas amostragem de velocidade ao longo do reator no sentido do eixo Z.

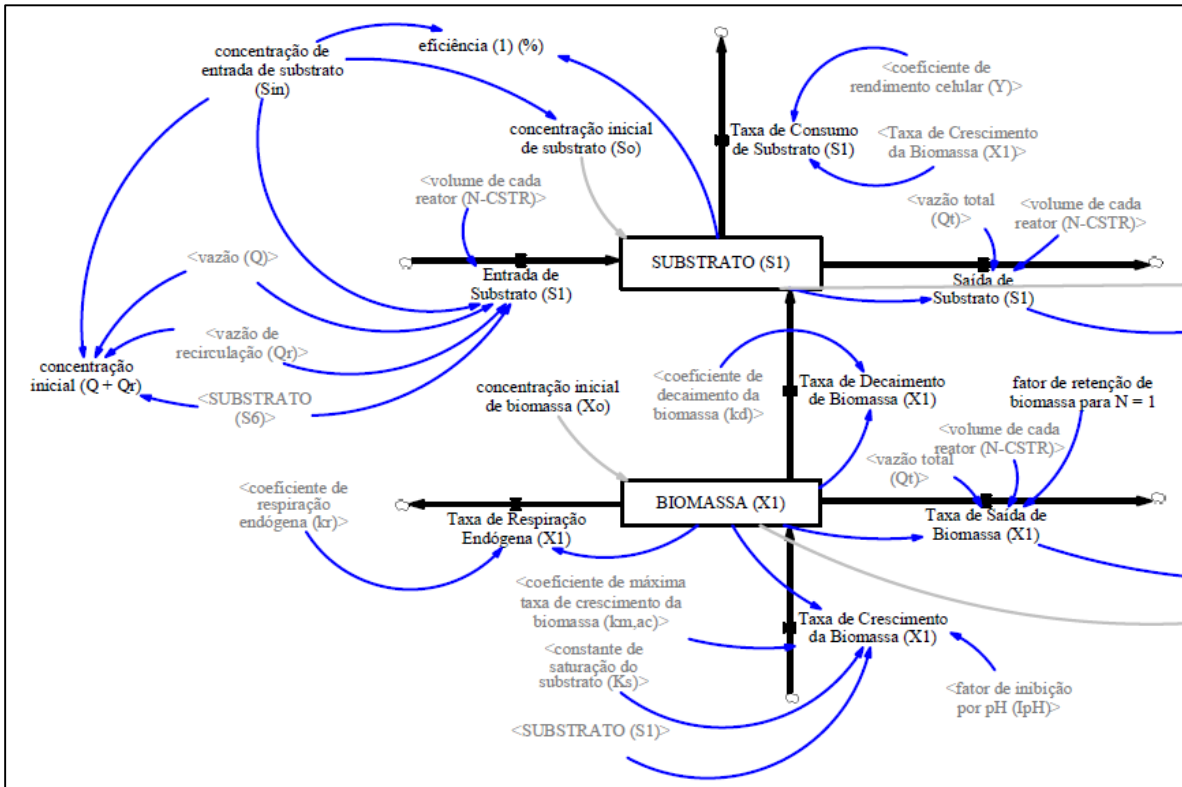
Figura 69 – Linha de amostragem ao longo do eixo Z



APÊNDICE D

A representação gráfica completa do modelo abaixo exigiu a segmentação em duas partes (Figuras Figura 70, Figura 71, Figura 72 e Figura 73).

Figura 70 – Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa implementado no Vensim PLE[®] (N = 1) para a condição COV-7,5



A implementação do modelo hidro-bioquímico nas condições COV-12,5 e COV-17,5, ambas com $N = 5$, foi igual à condição COV-7,5, diferenciando apenas a quantidade de blocos de equações.

Figura 71 – Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa implementado no Vensim PLE® (N = 2 e N = 3) para a condição COV-7,5

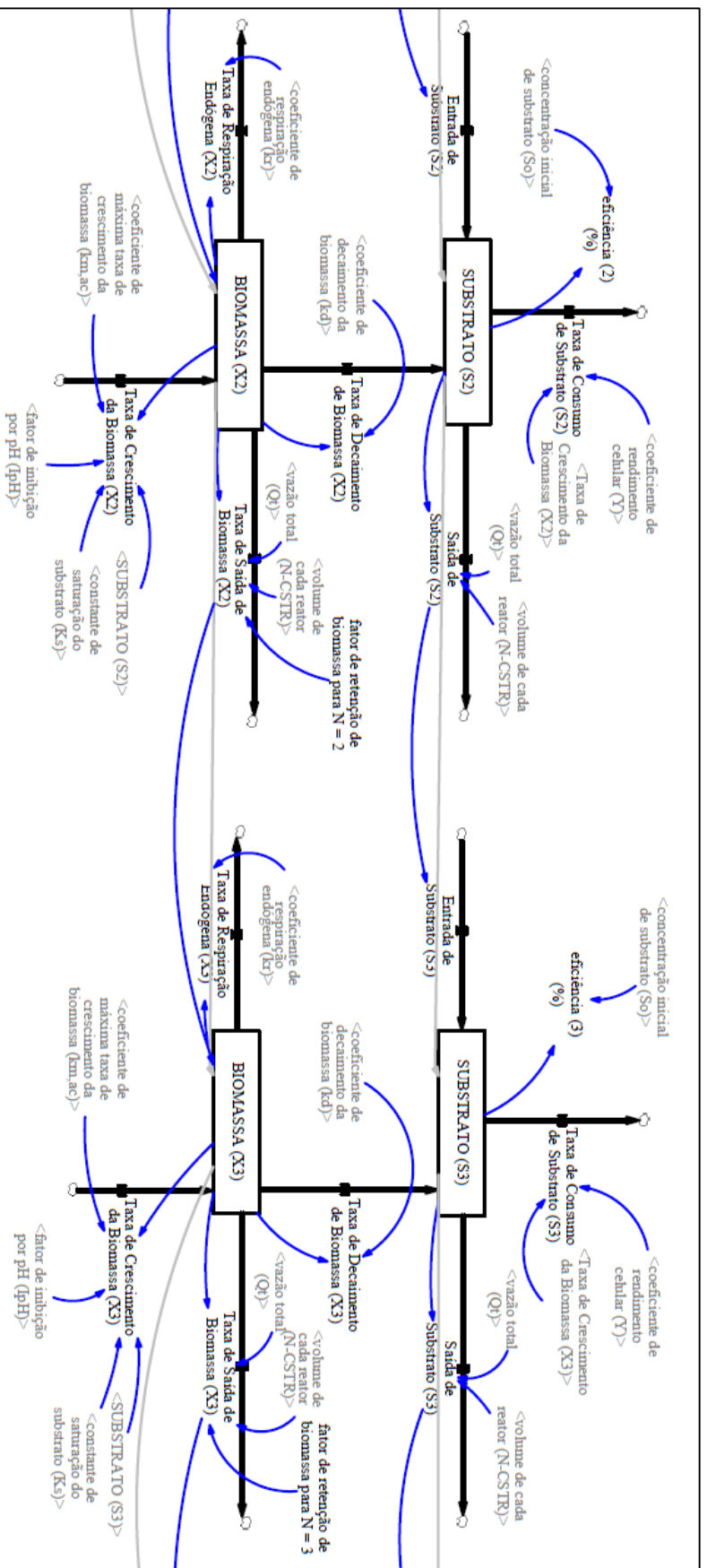


Figura 72 – Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa implementado no Vensim PLE® (N = 4 e N = 5) para a condição COV-7,5

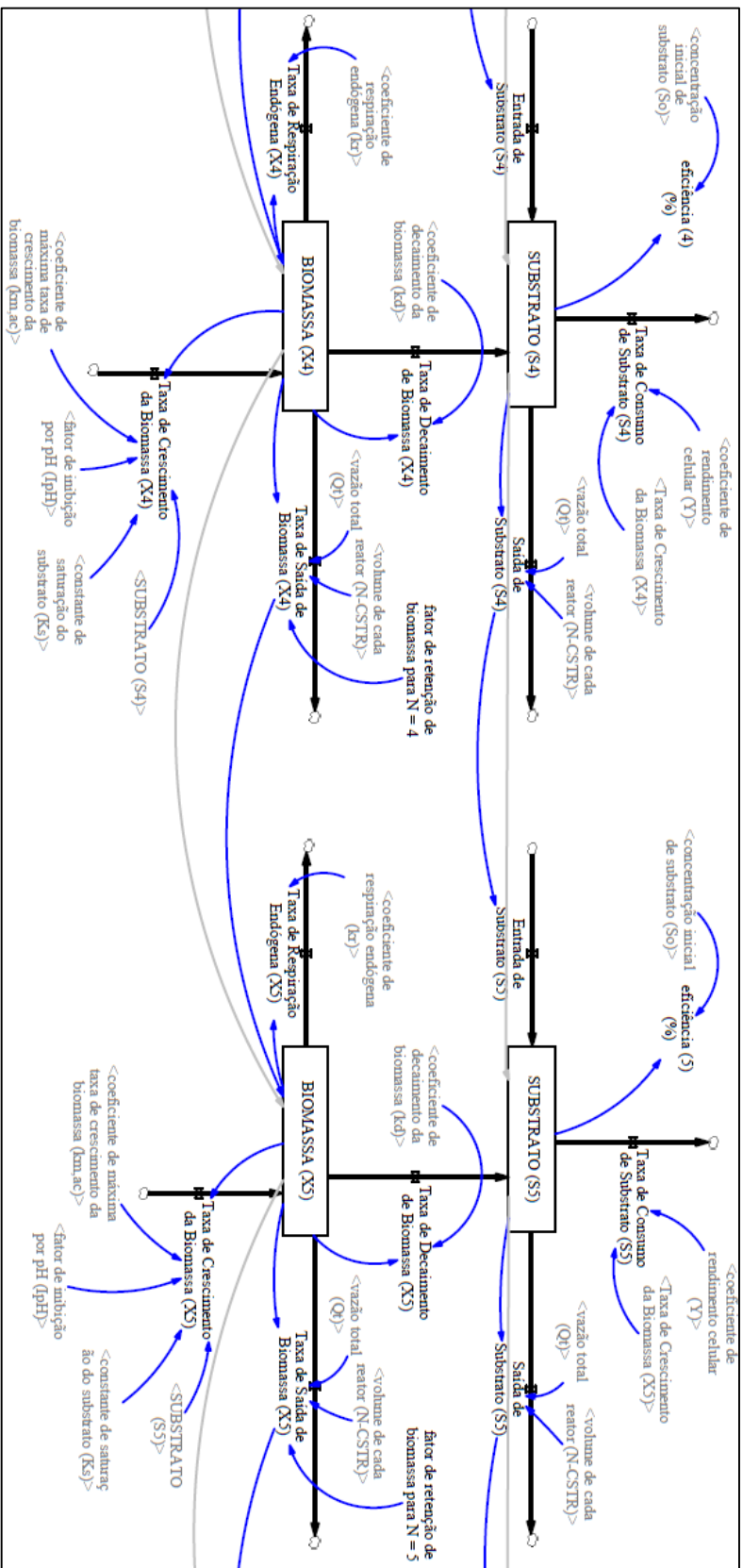
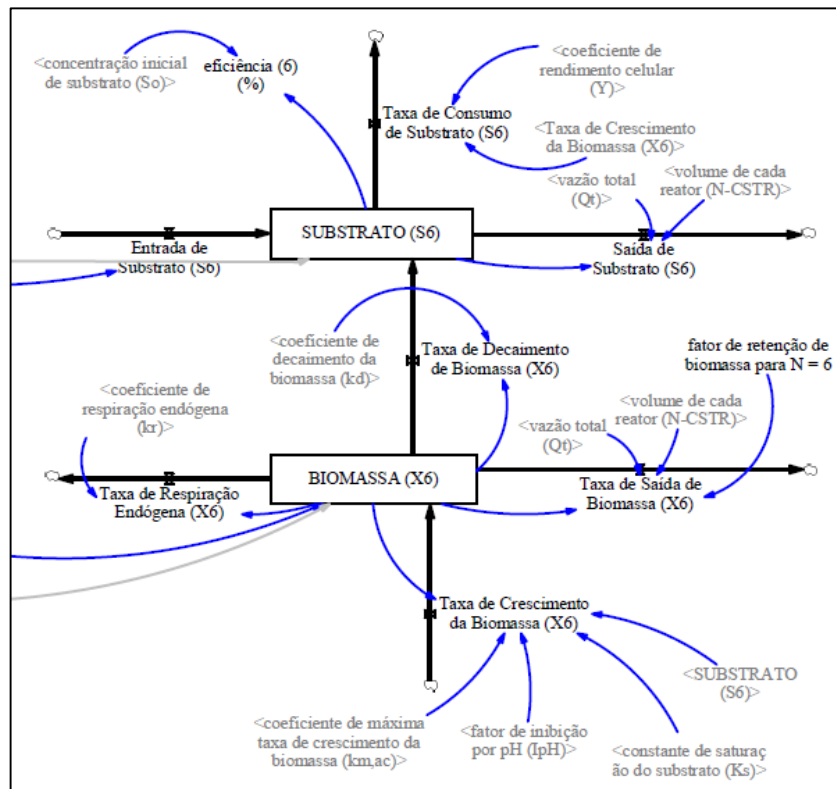


Figura 73 – Modelo de consumo de substrato e crescimento de biomassa implementado no Vensim PLE® (N = 6) para a condição COV-7,5



ANEXO A

Figura 74 – Fotografia do reator UASB (R2) piloto operado por Del Nery et al. (2016). Obs. Pontos de amostragem na manta de lodo indicado em vermelho



Fonte: adaptado de Longo (2015)