

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO DESEMPENHO DE REATORES DE FLUXO CONTÍNUO E EM BATELADA NO TRATAMENTO DE EFLUENTE TÊXTIL UTILIZANDO O SOFTWARE LIVRE PYTHON.

R.V.SAWAKI¹, T. C. PARENTE¹, J.E.C. ALEXANDRE², A.C. LIMA³, J.P. RIBEIRO³,
E.F.ABDALA NETO², R.F. NASCIMENTO³

¹ Universidade Federal do Ceará, Departamento de Engenharia Química

² Universidade Federal do Ceará, Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental

³ Universidade Federal do Ceará, Departamento de Química Analítica

E-mail para contato: rafa3103@gmail.com

RESUMO – A modelagem e simulação de processos está cada vez mais presente, devido a sua sofisticação para encontrar soluções para problemas complexos e a possibilidade de validação de projetos, de acordo com a previsão dos resultados. Neste trabalho, tratamos de modelar e simular a eficiência de reatores de fluxo contínuo para o tratamento de efluentes têxteis frente a eficiência de um reator batelada tanto em escala de laboratório quanto em escala industrial (*scale up*) utilizando o software livre iPython Notebook v3.4.

1. INTRODUÇÃO

A agressividade ao meio ambiente vem aumentando progressivamente à medida que ocorre o acelerado crescimento populacional e o aumento da atividade industrial. Dentro deste contexto, o setor têxtil apresenta especial destaque, devido a elevada demanda de água exigida em seus processos e a conseqüente geração de grandes volumes de efluentes. (MEDEIROS, 2011) Desse modo, a Fábrica de Redes Isaac, localizada em Serrinha – CE, estabelece parceria com a Universidade Federal do Ceará em busca do tratamento adequado ao efluente gerado em seu processo, produzindo em torno de vinte mil litros de efluente por dia.

A simulação de processos vem ganhando espaço, devido a sua capacidade de apresentar soluções cada vez mais sofisticadas de problemas cada vez mais complexos encontrados em diversas áreas de estudo, além da simplicidade de uso e sofisticação dos ambientes de desenvolvimento de modelos computacionais, vinculado ao crescimento exponencial do poder de processamento das máquinas. A simulação de processos é definida como a representação de um sistema real explicado por meio de uma modelagem matemática que produz um modelo computacional capaz de entender o comportamento desse sistema, gerando vários cenários experimentais, e de analisar estratégias para sua operação.

Atualmente, a construção e operação de plantas industriais são baseadas principalmente na experiência dos responsáveis pelo seu projeto, por isso a importância da aplicação da modelagem matemática em sistemas reais e simulação de vários cenários de comportamento desses sistemas. O *scale up* de reatores é um passo importante e essencial na construção e otimização de plantas industriais, e esse termo é definido como “o desenho de um piloto ou

um reator industrial capaz de replicar através de uma metodologia padrão os resultados obtidos em laboratório”, porém há poucas metodologias padrões, sendo a experiência, como já mencionado, a principal ferramenta para desenvolvê-lo, o que acarreta inúmeras dificuldades e erros durante e após a operação de planejamento.

O objetivo deste trabalho é simular o tratamento do efluente têxtil em fluxo contínuo em escala de bancada e em escala industrial, neste último é realizado o *scale up* tomando como base o reator em batelada utilizado durante os experimentos laboratoriais.

2. MODELAGEM E SIMULAÇÃO

O percentual de remoção de DQO foi analisado a partir de um estudo de cinética de degradação para os tempos experimentais. Para tal, utilizou-se o software R versão 3.0.3 pelo método do ajuste de regressão não linear. Os dados de cinética foram então inseridos nos balanços de massa para cada reator CSTR, realizando a simulação do processo no software iPython Notebook versão 3.4.2. Desse modo, foi calculado o volume necessário de reator em fluxo contínuo, em escala de laboratório, no mesmo tempo de operação que o reator em batelada (60 minutos) e comparou-se os valores. Comprovada as vantagens do CSTR, foi realizado o *scale up* a partir do tempo de tratamento em batelada e obtido o dimensionamento do reator em fluxo contínuo baseando-se nas dimensões do reator em batelada. Desse modo, foi calculado o volume necessário de reator em fluxo contínuo para atender a demanda da fábrica de redes (13,88L/min).

A modelagem do reator CSTR em escala de bancada foi realizada tomando como base a concentração de oxigênio consumido nas amostras coletadas. Desse modo, aplicou-se um balanço de massa para cada reator, equação (1), juntamente com o valor da constante de velocidade de reação no software iPython Notebook 3.4.2. As condições iniciais utilizadas foram a DQO no efluente bruto e o tempo inicial. Toma-se como objetivo a obtenção de uma DQO menor que 200 mg/L, valor predito pela portaria 154/2002 da SEMACE (Superintendência Estadual do Meio Ambiente do Ceará).

$$\frac{dC_{An}}{dt} = \frac{\varphi * C_{An-1} - \varphi * C_{An} - k * C_{An}^2}{V_n} \quad (1)$$

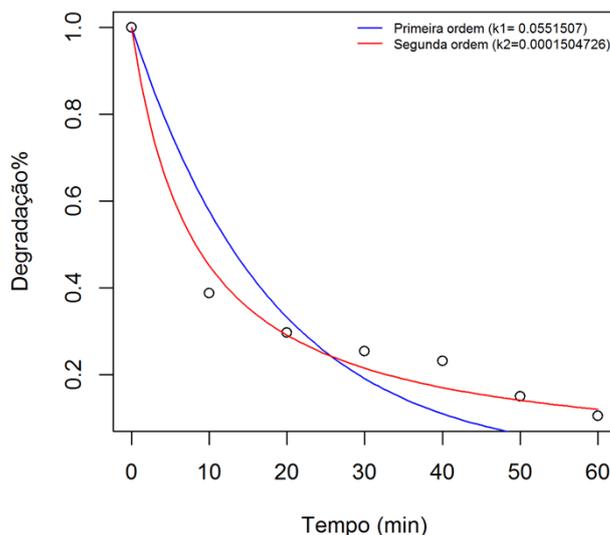
As hipóteses usadas para esta simulação foram: mistura homogênea; regime transiente (concentração varia com o tempo) e escoamento turbulento; vazão de entrada e saída iguais em todos os reatores; e, mesmas condições iniciais de entrada em todos os reatores. A modelagem do reator CSTR em escala industrial possui as mesmas condições que o de bancada e para seu dimensionamento utilizou-se os seguintes critérios: semelhança geométrica (com impelidor na metade da altura de líquido) e manutenção do mesmo nível de agitação.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os dados experimentais foram então tratados pelo método de ajuste de regressão não linear obtendo um modelo de cinética de segunda ordem. O valor da constante de velocidade

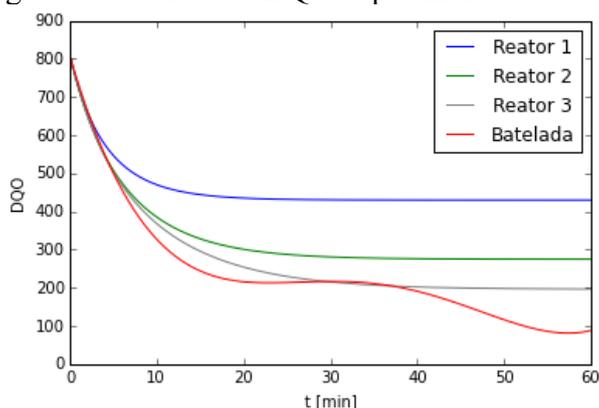
de reação k obtido foi de $0,0001504726 \text{ L mg}^{-1} \text{ min}^{-1}$ ou $k = 4,8 \text{ L mol}^{-1} \text{ min}^{-1}$ mostrado na figura 2, gerado pelo software R 3.0.3.

Figura 2 – Gráfico do modelo de ajuste de regressão não linear.



Pelas simulações para o reator CSTR em escala de bancada, chegou-se à conclusão que seriam necessário três CSTR's em série de 4,5L cada (total de 13,5 litros tratados) para se atingir a DQO necessária. O tempo de residência em cada reator foi de 13,63 minutos e o tempo de tratamento da efluente de 44 minutos. A figura 3 mostra um gráfico com as curvas de DQO para cada CSTR e o ajuste dos pontos experimentais do processo em batelada em escala laboratorial.

Figura 3 – Gráfico de DQO experimental e teórica.



De acordo com a curva experimental, o tempo de tratamento em batelada seria de aproximadamente 39 minutos, tratando 2,7L de efluente, o que há uma diferença de 5 minutos para um volume de tratamento cinco vezes menor.

Para o *scale up* do CSTR, encontrou-se que seria necessário também uma sequência de necessários dois reatores de 385 litros de volume útil para obter uma DQO de $199,76 \text{ mg O}_2$

por litro, utilizando a vazão de 20000 L/dia ou 13,9 L/min. O tipo de impelidor escolhido foi a turbina de Rushton, pois oferece mistura de forma axial, ideal para processos em que não há limitações quanto ao cisalhamento. Aplicando um fator de segurança de 25%, obtém-se um volume total de 510 litros para cada reator. Sabendo o volume necessário e o tempo de operação do processo em batelada, foi realizado o *scale up* utilizando as equações explanadas abaixo. O subscrito 1 indica a dimensão do modelo e o subscrito 2 indica a dimensão do protótipo.

$$\left(\frac{T}{D}\right)_1 = \left(\frac{T}{D}\right)_2 \quad (2)$$

$$\left(\frac{H}{D}\right)_1 = \left(\frac{H}{D}\right)_2 \quad (3)$$

$$\left(\frac{h}{D}\right)_1 = \left(\frac{h}{D}\right)_2 \quad (4)$$

$$\left(\frac{B}{D}\right)_1 = \left(\frac{B}{D}\right)_2 \quad (5)$$

$$Re_{impelidor} = \frac{ND^2}{\nu} \quad (6)$$

$$(N_A)_1 = (N_A)_2 \quad (7)$$

$$\left(\frac{\dot{W}_u}{V_l}\right)_1 = \left(\frac{\dot{W}_u}{V_l}\right)_2 = N_A \quad (8)$$

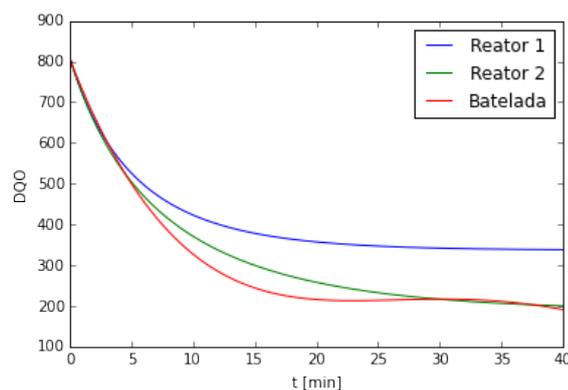
$$V_{liquido} = V_l = \frac{\pi T^2}{4} H \quad (9)$$

$$\dot{W}_u = \rho \cdot N^3 \cdot D^5 \cdot N_{PO} \quad (10)$$

$$\text{Margem de segurança para o volume} \quad (11)$$

A figura 4 mostra um gráfico com as curvas de DQO para cada CSTR e o ajuste dos pontos experimentais do processo em batelada em escala laboratorial.

Figura 4 – Gráfico de DQO experimental e teórica.

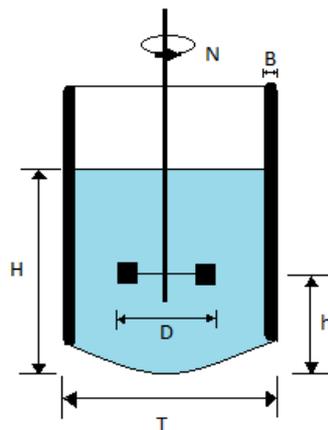


Os resultados obtidos nas equações estão na tabela 1 e a ilustração do reator está na figura 5. Os eletrodos utilizados no sistema em batelada foram dimensionados como chichanas para o reator em fluxo contínuo simulado, sendo posicionados na lateral do reator.

Tabela 1 – Resultados obtidos para reator em escala industrial.

Dimensões	Batelada (cm)	Contínuo (cm)	Aumento (%)
T	10	50,78	507,81
H	37,43324	190,09	507,81
h	18,71662	95,05	507,81
B	5	25,39	507,81
D	5	8,89	177,73
H-h	18,71662	95,05	507,81

Figura 5 – Ilustração do reator contínuo simulado



4. ANALISE ECONÔMICA

A técnica de eletrocoagulação flotação utilizando corrente contínua pulsada é conhecida por seu baixo custo. Para a escala em bancada, podemos calcular a potência, em Watts, consumida através da equação 12. A tensão para a cidade de Fortaleza é de 220 volts e a corrente empregada no trabalho é 0,377 ampères. Com isso, multiplica-se pelo tempo experimental, em horas, de operação necessário para obter DQO de 200mgO₂/L e depois divide-se pelo volume de efluente tratado. Desse modo temos um resultado de 21,27 e 4,49 kWh/m³ para o reator em batelada e o CSTR, respectivamente. De acordo com a companhia energética do Ceará (COELCE), o valor do kW/h é de R\$ 0,29815. Assim, conclui-se que temos um custo de operação no valor de R\$ 6,09 e 1,34 / m³ para o reator em batelada e o CSTR, respectivamente.

$$P = U * i \tag{12}$$

5. NOMENCLATURA

B – Largura da chicana.	D - Diâmetro do impelidor	k – Constante de velocidade da reação.	ρ – Densidade da água.	U – Tensão aplicada na eletrólise.	V_l, V_n – Volume do líquido útil.
Can – Concentração do reagente.	h – Altura entre o impelidor e o fundo do reator.	Na – Nível de agitação.	Re impelidor – Número de Reynolds do impelidor.	φ – Vazão de entrada e saída.	Wu – Potência útil.
i – Corrente.	H – Volume útil.	N – Número de rotação do impelidor.	T – Diâmetro do reator.	ν – Viscosidade da água.	

6. CONCLUSÕES

O objetivo de comparação entre o reator contínuo e batelada foi alcançado. Viu-se que em 60 minutos atinge-se a DQO com valor inferior a 200 ppm O_2 para 13,5 litros de efluente enquanto que, no batelada, para esse mesmo tempo tratam-se 2,7 litros, além de que o gasto energético para o tratamento foi de 4,54 vezes menor para o CSTR. O volume requerido pela fábrica para operar o reator em batelada seria de 20000 litros, enquanto que no sistema contínuo industrial, esse volume foi diminuído para 770 litros para um tempo de 40 minutos que seria o mesmo tempo do batelada real de 2,7L. Valor mais viável para instalação da estação de tratamento de efluente (ETE).

Embora o investimento inicial em sistemas contínuos seja maior, normalmente os custos operacionais por volume de efluente tratado são menores. Fato que leva a preferência por reatores de sistema contínuo quando a capacidade de processamento requerida é grande.

Para a validação do modelo do CSTR em bancada, seria necessário fazer o tratamento do efluente têxtil em laboratório do modo como foi proposto e a medição da potência do impelidor para completar o cálculo do gasto energético total.

7. REFERÊNCIAS

MEDEIROS, A. G. Avaliação dos tratamentos convencional e por oxidação química na degradação de corantes em efluentes têxteis. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Processos). Universidade da região de Joinville, UNIVILLE, 2011.