

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Instituto de Geociências e Ciências Exatas

Campus de Rio Claro

FELIPE COELHO MORILLA

RESOLUÇÃO DE PROBLEMA DE VALOR NO CONTORNO
ASSOCIADO AO PROJETO DE REATORES DE FLUXO
DISPERSO EMPREGADOS NO TRATAMENTO DE EFLUENTES

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Instituto de Geociências e Ciências Exatas - Campus
de Rio Claro, da Universidade Estadual Paulista
Júlio de Mesquita Filho, para obtenção do grau de
Licenciado em Física

Rio Claro - SP

2011

FELIPE COELHO MORILLA

RESOLUÇÃO DE PROBLEMA DE VALOR NO CONTORNO
ASSOCIADO AO PROJETO DE REATORES DE FLUXO
DISPERSO EMPREGADOS NO TRATAMENTO DE EFLUENTES

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Instituto de Geociências e Ciências Exatas - Campus
de Rio Claro, da Universidade Estadual Paulista
Júlio de Mesquita Filho, para obtenção do grau de
Licenciado em Física

Comissão Examinadora

_____ (orientador)

Rio Claro, ____ de _____ de _____.

Assinatura do aluno

assinatura do orientador

AGRADECIMENTOS

Agradeço...

Primeiramente a minha família por sempre me apoiar e incentivar durante toda minha vida.

À minha namorada Paola por toda ajuda prestada durante o processo de formulação desse trabalho, além de seu carinho e amizade em todos os momentos que passamos juntos.

Aos amigos e companheiros da Física que me acompanharam durante essa longa caminhada durante todos esses anos.

Aos amigos-irmãos que conheci durante esses últimos anos de graduação, da República Vuco-Vuco que considero um verdadeiro símbolo de alegria e companheirismo.

À Cia Éxciton pelos momentos tristes e alegres, pela oportunidade de conhecer pessoas maravilhosas e de aprender a observar de maneira mais crítica e multilateral.

À A.A.A. Ayrton Senna da Silva por proporcionar uma das maiores emoções da minha vida, ser campeão do INTERUNESP.

Ao Profº Samuel Conceição de Oliveira por sua orientação e correção desse trabalho.

Aos membros da Banca Examinadora pelas críticas construtivas, contribuindo com a melhora desse trabalho.

A Deus por estar sempre presente em minha vida, me guiando e protegendo.

“Quando todos pensam iguais, ninguém está pensando.”

(Walter Lipmann)

RESUMO

O objetivo deste trabalho foi desenvolver um método numérico para resolver problemas de valor no contorno concernentes ao uso do modelo de dispersão para descrever o comportamento hidráulico de reatores químicos ou biológicos empregados no tratamento de águas residuárias. O método numérico foi implementado em linguagem FORTRAN, gerando um programa computacional o qual foi usado para resolver casos envolvendo cinéticas de reação de ordens inteiras e fracionárias. O método desenvolvido foi capaz de resolver os problemas propostos evidenciando ser uma ferramenta útil para um projeto mais preciso de reatores de tratamento de águas residuárias.

Palavras-chave: modelagem matemática, simulação de reatores químicos, fluxo disperso, tratamento de água residuária, eficiência de remoção de poluentes.

ABSTRACT

The objective of this work was to develop a numerical method to solve boundary value problems concerning to the use of dispersion model for describing the hydraulic behavior of chemical or biological reactors employed in the wastewater treatment. The numerical method was implemented in FORTRAN language generating a computational program which was applied to solve cases involving reaction kinetics of both integer and fractional orders. The developed method was able to solve the proposed problems evidencing to be a useful tool that provides more accurate design of wastewater treatment reactors.

Keywords: mathematical modeling, chemical reactor simulation, dispersed flow, wastewater treatment, removal efficiency.

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 - Diagrama esquemático de uma estação de tratamento de esgoto convencional.....	4
Figura 2 – Reator contínuo de fluxo em pistão	8
Figura 3 – Reator contínuo de mistura completa	10
Figura 4 – Ilustração das seções propostas por Wilhelm e Wehner(1946)	12
Figura 5 – (a) Curvas de eficiência geradas a partir dos dados obtidos por meio da solução numérica (b) Curvas de eficiência geradas a partir de dados obtidos via solução analítica (Von Sperling, 1996)20	
Figura 6 – Razão entre o volume do reator de fluxo disperso e o volume do reator de fluxo pistonado para reações de segunda ordem, em função de $f = C_A/C_{A0}$, d e kt_hC_0 (Levenspiel 1959,1961)	21
Figura 7 – Curvas de eficiência para reações de 2ª ordem obtidas com a metodologia numérica	22
Figura 8 – Curvas de f em função de z parametrizadas pelo valor de $kt_hC_0 - 1/2$ em um reator de fluxo em pistão ideal	23
Figura 9 – Decaimento da concentração de poluente em função do parâmetro $kt_hC_0 - 1/2$	24

ÍNDICE DE QUADROS

Quadro 1 - Principais modelos hidráulicos de reatores e suas características, de acordo com a classificação de Von Sperling (1996).....	7
Quadro 2 – Tempo de detenção hidráulica para ordens de reação comumente observadas em reatores contínuos de fluxo em pistão e reatores contínuos de mistura completa.....	10
Quadro 3 – Valores da fração remanescente de poluente (f) na saída do reator obtido via método numérico e via método analítico para reação de 1ª ordem.....	19
Quadro 4 – Comparação entre valores obtidos numericamente e obtidos através da Figura 6.....	21
Quadro 5 – Valores de $f(0^+)$, $f(1)$ e $[df/dz]_{z=1}$ obtidos para cinética de reação de ordem $\frac{1}{2}$	24

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	1
2.	OBJETIVOS	3
3.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	4
3.1.	Etapas do Tratamento de Esgoto	4
3.1.1	Tratamento secundário	5
3.2.	Equacionamento do balanço de massa	5
3.3	Modelagem do comportamento hidráulico de reatores	6
3.3.1	Reator de Batelada	7
3.3.2	Reator de Fluxo em Pistão	8
3.3.3	Reator Contínuo de Mistura Completa.....	10
3.3.4	Reator de Fluxo Disperso	11
3.4.	Métodos Numéricos	15
3.4.1	Método de Newton-Raphson.....	15
3.4.2	Métodos de Runge-Kutta	16
4.	METODOLOGIA	17
5.	RESULTADOS E DISCUSSÃO	19
5.1.	Cinética de 1ª Ordem.....	19
5.2.	Cinética de 2ª Ordem.....	20
5.3.	Cinética de Ordem Fracionária.....	22
6.	CONCLUSÃO	25
	REFERÊNCIAS	25
	BIBLIOGRAFIAS CONSULTADAS.....	28

1. INTRODUÇÃO

O saneamento básico tem como principal objetivo a manutenção da vida por meio da oferta de água potável e do desenvolvimento de soluções para o escoamento e tratamento do esgoto sanitário. No mundo, diversas atividades são realizadas dividindo o mesmo espaço e condições naturais. Devido à grande diversidade de usos da água, o esgoto gerado apresenta composição química e orgânica variada, dificultando o tratamento.

Durante os processos de tratamento as águas residuárias passam por reatores, nos quais ocorrem mudanças na composição e concentração de seus constituintes devido a processos químicos e/ou biológicos.

O estudo da cinética dessas reações se dá por meio da análise do comportamento da taxa de reação em função da concentração dos reagentes envolvidos. Geralmente se utiliza uma equação do tipo lei de potência para expressar essa dependência, sendo a potência, a ordem de reação. As reações mais frequentes no tratamento de esgotos são as de ordem zero e primeira ordem, sendo as reações de segunda ordem restritas a efluentes industriais específicos. Também podem ocorrer ordens fracionárias, sendo muito escassos os exemplos na literatura sobre estes casos.

Para se dimensionar o volume do reator requerido para se atingir uma determinada eficiência de tratamento é necessário não só conhecer a cinética governante da decomposição do poluente, mas, também o comportamento hidráulico do reator.

O comportamento hidráulico do reator é uma função do padrão de mistura na unidade, que por sua vez, depende da forma geométrica do reator, da quantidade de energia introduzida por unidade de volume (agitação), do tamanho da unidade e de outros fatores. Há dois modelos hidráulicos básicos, representando graus de mistura limites para o escoamento dos elementos de fluido no interior do reator, quais sejam: o reator de fluxo em pistão, no qual não ocorre nenhum grau de mistura e o reator de mistura completa, no qual a mistura dos elementos de fluido é total e perfeita. Entre estes dois extremos, encontram-se outros modelos de grau de mistura intermediário tais como o modelo de fluxo disperso e o modelo de arranjo de células de mistura completa em série e/ou paralelo.

Embora sendo mais complexo do ponto de vista matemático, o modelo de fluxo disperso é por vezes utilizado para descrever sistemas reais de tratamento de esgotos tendo em vista que pode melhor representar a realidade dos reatores por meio do emprego de um parâmetro de dispersão, que caracteriza as condições de mistura no reator.

Analisando a problemática da gestão hídrica e as dificuldades no tratamento de esgoto, percebe-se a necessidade de desenvolvimento de técnicas mais modernas e apuradas tais como modelagem matemática e simulação computacional, visando melhorias nos processos e na capacitação de pessoal especializado, tudo isso resultando em aumento da eficiência de tratamento e em menores impactos ambientais.

As técnicas de modelagem e simulação, quando utilizadas corretamente em análises de prognóstico permitem: simular cenários para estudos de projetos; mapear e determinar áreas de risco, localizar os destinos prováveis de contaminantes ou outras substâncias de interesse; fornecer informações para a elaboração de Planos de Mitigação e ainda prever a evolução de eventos em tempo real (ROSMAN, 2009).

Quando o modelo hidráulico do reator é de fluxo disperso e a ordem de reação é diferente de um, a solução da equação diferencial que descreve a decomposição do poluente ao longo da unidade de tratamento somente pode ser obtida por meio de métodos numéricos complexos. Diante desta dificuldade apresentada pela utilização do modelo de fluxo disperso, profissionais da área evitam o seu uso, baseando seus projetos em equações inapropriadas para sistemas reais de tratamento de esgotos.

Nesse contexto, o objetivo geral desse trabalho é contribuir para projeto de reatores de fluxo disperso, desenvolvendo uma metodologia numérica, em linguagem FORTRAN, que possibilite determinar a concentração do poluente na saída do reator, tanto para reações de primeira e segunda ordens como para reações de ordens fracionárias, generalizando e facilitando a utilização desse modelo no dimensionamento de sistemas de tratamento de esgotos que fazem uso de reatores com esse comportamento hidráulico.

2. OBJETIVOS

O objetivo deste trabalho consistiu em desenvolver um programa computacional em linguagem FORTRAN, para resolver o problema de valor no contorno decorrente da utilização do modelo de fluxo disperso para descrever o comportamento hidráulico de reatores tubulares, considerando cinéticas de remoção de poluente de 1ª e 2ª ordens e ordens fracionárias.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. Etapas do Tratamento de Esgoto

O processo de remoção de poluentes e purificação da água ocorre por meio de diversas etapas, as quais estão representadas esquematicamente na Figura 1.

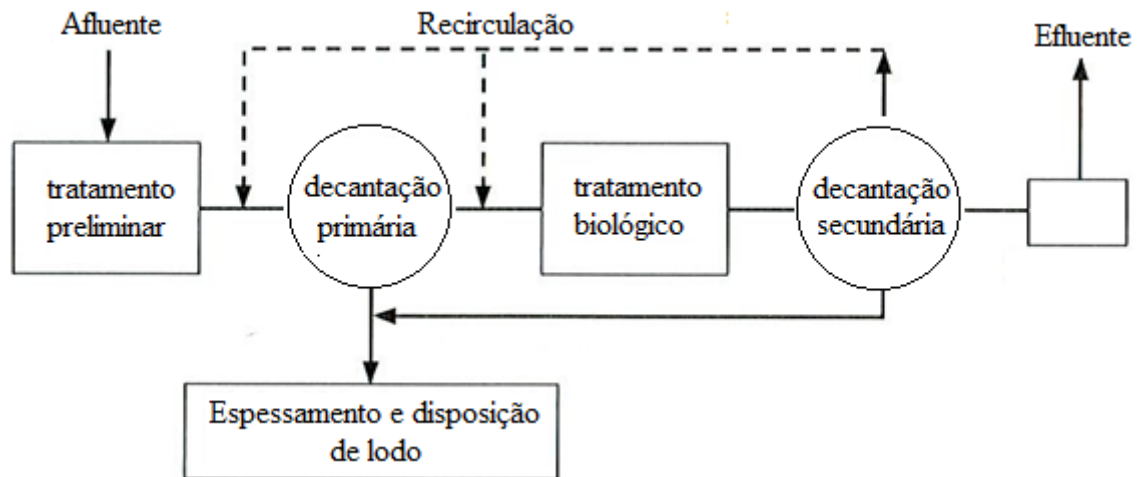


Figura 1 - Diagrama esquemático de uma estação de tratamento de esgoto convencional

Conforme a Figura 1, as etapas envolvidas num sistema convencional de tratamento de águas residuárias são:

- **Tratamento Preliminar:** Nesta etapa, ocorre a remoção de grandes sólidos e areia e é feita com o uso de grades que impedem a passagem de materiais maiores; caixas para retenção de areia e tanques para retirada de óleos e graxas por flutuação e flotação em casos de esgoto industrial com alto teor destas substâncias.
- **Tratamento Primário:** Nesta etapa, ocorre a remoção de sólidos não grosseiros em suspensão por sedimentação, reduzindo a matéria orgânica contida no efluente. Em alguns casos, esse processo pode ser otimizado pela adição de agentes químicos que por meio de coagulação/floculação possibilita a obtenção de flocos de matéria poluente de maiores dimensões e, assim, mais facilmente decantáveis.
- **Tratamento Secundário:** Nesta etapa se processa a fase biológica, na qual ocorre a remoção de matéria orgânica dissolvida e, eventualmente, nutrientes como

nitrogênio e fósforo pela ação de microrganismos. Finalizado o tratamento secundário e sendo este eficiente, as águas residuais tratadas apresentarão um reduzido nível de poluição, podendo na maioria dos casos, serem despejadas no corpo receptor.

- **Tratamento Terciário:** Corresponde à etapa de remoção de poluentes tóxicos, não biodegradáveis e, quando necessário, eliminação adicional de poluentes não degradados no tratamento secundário.
- **Etapa de Desinfecção:** Consiste na remoção de organismos patogênicos, podendo ser realizada por meio de diferentes métodos tais como cloração, ozonização, radiação, etc.

3.1.1 *Tratamento secundário*

Nesta etapa de tratamento, ocorrem processos químicos e/ou biológicos, os quais são realizados em unidades denominadas reatores. O tratamento de águas residuárias tem como objetivo atingir uma determinada eficiência, sendo a mesma diretamente relacionada ao grau de remoção do poluente. Para isso deve se conhecer as características de cada tipo de reator, modelando seu comportamento hidráulico em função do padrão de mistura dos elementos de fluido no interior da unidade. Cada modelo de reator corresponde a um balanço de massa, o qual descreve as mudanças ocorridas na composição do efluente devido a tais reações.

Os principais reatores utilizados no tratamento de esgotos são os reatores em batelada; reatores contínuos de fluxo em pistão; reatores contínuos de mistura completa e reatores contínuos de fluxo disperso, além de outros sistemas que consistem em variantes dos anteriores tais como arranjo de células de mistura completa em série e/ou paralelo e reatores com reciclo.

3.2. **Equacionamento do balanço de massa**

A análise do balanço de massa é um meio conveniente de definir o que ocorre nos reatores de tratamento durante o tempo de residência do efluente no reator. Para Von Sperling (1996), o balanço de massa pode ser generalizado pela seguinte equação:

$$[\text{Acumula} = \text{Entra} - \text{Sai} + \text{Produzido} - \text{Consumido}]_{V.C.} \quad (1)$$

onde V.C. representa o volume de controle sobre o qual se efetua o balanço de massa.

Para reatores de mistura completa, a Equação 1, para a condição operacional desejada de volume constante de água (V) no interior do reator, pode ser expressa matematicamente como:

$$\frac{dC}{dt}V = QC_0 - QC + r_pV - r_cV \quad (2)$$

onde: C = concentração do composto em um tempo t (ML^{-3}); C_0 = concentração afluenta do composto (ML^{-3}); V = volume elementar de qualquer reator (L^3); Q = vazão de água residuária (L^3T^{-1}); t = tempo (T); r_p = taxa de reação de produção do composto ($\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$); r_c = taxa de reação de consumo do composto ($\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$).

Analisando o termo de acúmulo da Equação 2, podem-se ter duas situações distintas para a operação do reator: (i) operação em estado estacionário ou permanente ou (ii) operação em estado dinâmico ou transiente. No estado estacionário não há acúmulo de massa do constituinte no sistema, ou seja, $\frac{dC}{dt} = 0$. Já no estado dinâmico ocorre acúmulo de massa do constituinte no sistema fazendo com que $\frac{dC}{dt} \neq 0$.

3.3 Modelagem do comportamento hidráulico de reatores

Para o adequado dimensionamento dos reatores, onde o tratamento da água residuária será realizado, é fundamental conhecer o comportamento hidráulico do reator e o modelo que melhor o descreve.

Von Sperling (1996) apresenta uma classificação de modelos hidráulicos de reatores frequentemente utilizados em tratamento de esgotos. Tal classificação baseia-se no regime de fluxo com que a água residuária é alimentada/retirada do reator e no padrão de mistura dos elementos fluidos no interior da unidade, conforme apresentado no Quadro 1.

Quadro 1 - Principais modelos hidráulicos de reatores e suas características, de acordo com a classificação de Von Sperling (1996)

MODELOS HIDRÁULICOS	ESQUEMA	CARACTERÍSTICAS
Batelada		O reator de batelada é aquele no qual não há fluxo entrando e saindo. O conteúdo do reator é misturado completamente. Todos os elementos são expostos ao tratamento por um tempo igual a permanência do substrato no reator. Em consequência, o reator em batelada se comporta como um volume discretizado num reator de fluxo em pistão.
Fluxo em Pistão		As partículas de fluido entram continuamente na extremidade do tanque, passam através do mesmo e são descarregadas na outra extremidade, na mesma sequência que entraram. As partículas permanecem no tanque por um período igual ao tempo de detenção hidráulico.
Mistura Completa		As partículas que entram no tanque são imediatamente dispersas em todo o corpo do reator. O fluxo de entrada e saída é contínuo. As partículas deixam o tanque à sua medida de sua proporção estatística.
Fluxo Disperso		O fluxo disperso ou arbitrário é obtido em um sistema qualquer com um grau de mistura intermediário entre os dois extremos idealizados de fluxo em pistão e mistura completa. Na realidade a maior parte dos reatores se comportam como reatores de fluxo disperso. No entanto, devido a maior dificuldade de sua modelagem, são feitas aproximações para um dos modelos hidráulicos ideais. O fluxo de entrada e saída é contínuo.

3.3.1 Reator de Batelada

No reator de batelada não há fluxo entrando nem saindo do reator durante o tratamento. O conteúdo do reator é misturado completamente, sendo todos os constituintes do

meio reacional expostos ao tratamento por um mesmo tempo, o qual é igual ao tempo de permanência da água residuária no reator.

A equação do balanço de massa de um constituinte que é degradado em um reator de batelada de mistura completa, pode ser obtida a partir da Equação 2, fazendo-se $Q=0$ e $r_p=0$:

$$\frac{dC}{dt} = -r_c \quad (3)$$

onde r_c é a taxa de degradação do constituinte, dada genericamente por $r_c = kC^n$.

Na expressão da taxa de degradação apresentada anteriormente, k é a constante de velocidade da reação, a qual é dependente da temperatura e da presença ou não de catalisador e n é a ordem da reação. Segundo Von Sperling (1996), as ordens mais frequentemente encontradas no ramo de tratamento de esgotos são as de ordem zero e de primeira ordem. As reações de segunda ordem podem ocorrer no caso de alguns despejos industriais específicos. A ordem de reação não é necessariamente um número inteiro, e a determinação em laboratório das taxas de degradação de certos compostos industriais pode conduzir a ordens fracionárias.

3.3.2 Reator de Fluxo em Pistão

O fluxo em pistão ideal é aquele no qual cada elemento de fluido deixa o reator na ordem em que entrou sendo que nenhum elemento se antecipa a outro ou sofre atraso no percurso. O fluxo se dá como êmbolos que fluem da montante para a jusante, sem mistura entre os êmbolos e sem dispersão como ilustrado pela Figura 2. Conseqüentemente cada elemento é exposto ao tratamento pelo mesmo período de tempo (como no reator em batelada), sendo este tempo igual ao tempo de detenção hidráulico teórico (ARCEIVALA, 1981), dado por $t_h = \frac{V}{Q}$.

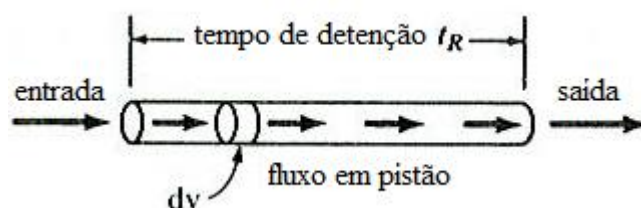


Figura 2 – Reator contínuo de fluxo em pistão

Quando o comportamento hidrodinâmico do reator é caracterizado como sendo de fluxo em pistão, a conversão química ou biológica no reator em condições estacionárias pode ser determinada pela análise do balanço de massa em um elemento diferencial de volume (dV) do reator. Sabe-se que o escoamento do tipo fluxo em pistão é mais realista quanto maior a relação comprimento/diâmetro do reator, de forma que nesta condição, os elementos de fluido apresentam velocidade e concentração uniformes em uma dada seção transversal do reator.

Segundo Metcalf & Eddy (2003), a equação geral de balanço de massa de um constituinte que é degradado em um elemento de volume (ΔV) de um reator de fluxo em pistão é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \Delta V = QC|_x - QC|_{x+\Delta x} - r_c \times \Delta V \quad (4)$$

Dividindo-se ambos os membros por ΔV e lembrando que $\Delta V = A\Delta x$, obtém-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{QC|_x - QC|_{x+\Delta x}}{A\Delta x} - r_c \quad (5)$$

Considerando Q constante e aplicando limite em ambos os membros para Δx tendendo a zero, tem-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{Q}{A} \frac{\partial C}{\partial x} - r_c \quad (6)$$

Considerando $r_c = -kC^n$ e operação no estado estacionário ($\frac{\partial C}{\partial t} = 0$) obtém-se a concentração somente em função de x :

$$0 = -\frac{Q}{A} \frac{dC}{dx} - r_c \quad (7)$$

onde: $u = \frac{Q}{A}$ representa a velocidade média de escoamento do fluido na seção transversal do reator.

3.3.3 Reator Contínuo de Mistura Completa

Segundo Von Sperling (1996), o reator contínuo de mistura completa é aquele no qual todos os elementos de fluido que adentram no reator são instantânea e completamente dispersos no meio reacional podendo ser ilustrado pela Figura 3.

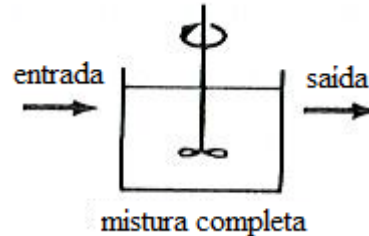


Figura 3 – Reator contínuo de mistura completa

Ao contrário dos reatores de fluxo em pistão, os reatores contínuos de mistura completa apresentam uniformidade e contínua redistribuição de seus componentes, resultando concentrações uniformes de reagentes e produtos em qualquer ponto do reator.

Considerando as características hidrodinâmicas deste tipo de reator e o fato de que no, estado estacionário, o termo de acúmulo é nulo, a equação de balanço de massa para um componente que está sendo degradado a uma taxa $r_c = kC^n$, é dada por:

$$0 = QC_0 - QC - r_c \times V \quad (8)$$

A solução em $t_h \left(t_h = \frac{V}{Q} \right)$ das Equações (7) e (8) para as ordens de reação comumente observadas em tratamento de esgotos são apresentadas no Quadro 2.

Quadro 2 – Tempo de detenção hidráulica para ordens de reação comumente observadas em reatores contínuos de fluxo em pistão e reatores contínuos de mistura completa

ORDEM DE REAÇÃO	FLUXO EM PISTÃO	MISTURA COMPLETA
0	$\frac{(C_0 - C)}{k}$	$\frac{(C_0 - C)}{k}$
1	$\frac{1}{k} \left[\ln \frac{C_0}{C} \right]$	$\frac{1}{k} \left(\frac{C_0}{C} - 1 \right)$
2	$\frac{1}{k} \left(\frac{1}{C_0} - \frac{1}{C} \right)$	$\frac{1}{kC} \left(\frac{C_0}{C} - 1 \right)$
n	$-\frac{1}{k} \int_{C_0}^C \frac{dC}{C^n}$	$\frac{1}{k} \frac{(C_0 - C)}{C^n}$

3.3.4 Reator de Fluxo Disperso

Para a modelagem de reatores não ideais deve-se considerar a dispersão. Reatores contínuos de fluxo em pistão e de mistura completa são tidos como reatores ideais e representam condições limítrofes do reator de fluxo disperso, correspondendo respectivamente às condições de dispersão nula (nenhum grau de mistura) e infinita (total grau de mistura).

Os reatores reais, frequentemente apresentam números de dispersão intermediários. Porém devido à complexidade numérica do modelo matemático que considera o fenômeno de dispersão, profissionais da área de projeto evitam seu uso, fazendo aproximações que podem ocasionar erros e comprometer a eficiência de tratamento desejada.

De acordo com Metcalf & Eddy (2003), o coeficiente de dispersão é um parâmetro que engloba efeitos de transporte causados por escoamento não uniforme, fenômenos difusivos (moleculares e turbulentos) e fenômenos de mistura.

Visando definir uma medida da intensidade de dispersão axial foi definido um parâmetro adimensional, denominado número de dispersão, dado por:

$$d = \frac{D}{uL} \quad (9)$$

onde: d = número de dispersão (-); D = coeficiente de dispersão axial ($L^2 T^{-1}$); L = comprimento do reator (L); u = velocidade média de escoamento na seção transversal do reator (LT^{-1}).

Os valores limites do número de dispersão representativos das condições ideais de fluxo em pistão e de mistura completa são: $d=0$ e $d=\infty$, respectivamente.

A dispersão é a maior causa do desvio do comportamento de reatores reais em relação ao comportamento ideal de fluxo em pistão, sendo que sua consideração torna-se importante para um adequado projeto das unidades de tratamento a fim de se alcançar a eficiência desejada.

Segundo Arceivala(1983), os fatores que afetam a intensidade de dispersão dos elementos fluidos nas unidades de tratamento são: magnitude de mistura; geometria da unidade; energia introduzida por unidade de volume (agitação); tipo e disposição das entradas e saídas das unidades de tratamento; velocidade de fluxo e suas flutuações; diferenças entre a densidade e temperatura do afluente e do conteúdo do reator.

Metcalf & Eddy (2003), equacionam o balanço de massa para reatores de fluxo disperso da seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} A \Delta x = \left(uAC - AD \frac{\Delta C}{\Delta x} \right)_x - \left(uAC - AD \frac{\Delta C}{\Delta x} \right)_{x+\Delta x} - r_c \times A \Delta x \quad (10)$$

onde: $\frac{\partial C}{\partial t}$ = taxa de variação com o tempo da concentração; A = seção transversal de escoamento; Δx = variação de espaço; u = velocidade média de escoamento do fluido na seção transversal; C = concentração do poluente; D = coeficiente de dispersão axial.

Na equação (10) o termo uAC representa o transporte de massa devido à advecção (convecção) e o termo $AD \frac{\Delta C}{\Delta x}$ representa o transporte de massa por dispersão.

Dividindo ambos os membros por $uA\Delta x$ e calculando o limite quando Δx tende a zero, obtém-se:

$$\frac{1}{u} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D}{u} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{r_c}{u} \quad (11)$$

No estado estacionário, $\partial C / \partial t = 0$ e a Equação 11 torna-se:

$$\frac{D}{u} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{r_c}{u} = 0 \quad (12)$$

Wilhelm e Wehner (1956) resolveram analiticamente a Equação 12 para a cinética de 1ª ordem considerando além da seção reacional, duas outras seções hipotéticas, uma antes e outra após o reator, situadas no domínio entre $-\infty$ e $+\infty$, de forma que a seção reacional esteja situada entre 0 e 1 em termos da coordenada adimensional z ($z=x/L$), conforme esquematizado na Figura 4.

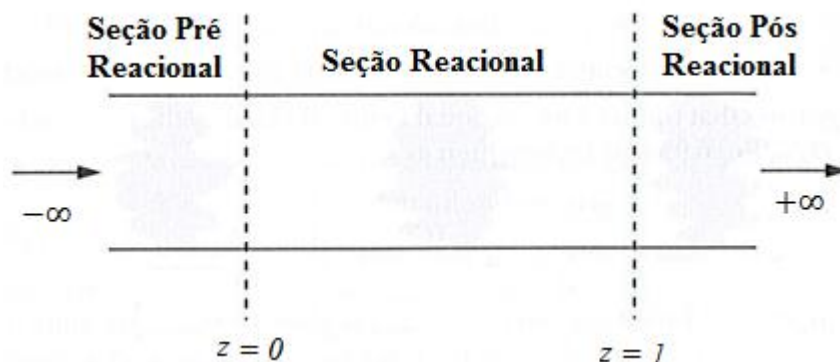


Figura 4 – Ilustração das seções propostas por Wilhelm e Wehner(1946)

Equações de balanço de massa do poluente e condições de contorno específicas foram formuladas para cada seção considerada.

Segundo Danckwerts (1953) as condições nas fronteiras da seção reacional são dadas pelas seguintes equações:

$$f(0-) = 1 = f(0+) - d \frac{df(0+)}{dz} \quad (13)$$

$$\frac{df(1)}{dz} = 0 \quad (14)$$

Ao analisar a Equação 13, nota-se que ocorre uma descontinuidade na entrada do reator devido ao termo $d \frac{df(0+)}{dz}$, correspondente à dispersão longitudinal do material no efluente. A Equação (14) estabelece o final do reator como sendo o final do tratamento, não ocorrendo a partir daí, mudanças na concentração do efluente.

As equações diferenciais representativas do balanço de massa nas três seções consideradas são:

$$d_a \frac{d^2 f}{dz^2} - \frac{df}{dz} = 0 \quad z \leq 0 \quad (15)$$

$$d_b \frac{d^2 f}{dz^2} - \frac{df}{dz} - Rf = 0 \quad 0 \leq z \leq 1 \quad (16)$$

$$d_c \frac{d^2 f}{dz^2} - \frac{df}{dz} = 0 \quad z \geq 1 \quad (17)$$

Os números de dispersão d_a, d_b, d_c podem diferir uns dos outros devido a possíveis diferenças de escoamento nas seções. As condições de contorno na fronteira entre as seções são:

$$(a) \quad f(-\infty) = 1 \quad (18)$$

$$(b) \quad f(0-) - d_a \frac{df(0-)}{dz} = f(0+) - d_b \frac{df(0+)}{dz} \quad (19)$$

$$(c) \quad f(0-) = f(0+) \quad (20)$$

$$(d) \quad f(1-) - d_b \frac{df(1-)}{dz} = f(1+) - d_c \frac{df(1+)}{dz} \quad (21)$$

$$(e) \quad f(1-) = f(1+) \quad (22)$$

$$(f) \quad f(\infty) \text{ é finito} \quad (23)$$

As condições (b) e (d) resultam da conservação de massa do reagente na entrada e na saída do leito do reator levando em consideração as condições de fluxo e de dispersão. As condições (c) e (e) provem do argumento intuitivo de que no estado estacionário as concentrações devem ser contínuas na entrada e na saída do reator.

As soluções gerais para as três seções, contendo as constantes arbitrárias N_i são:

$$f = N_1 + N_2 \exp\left(\frac{z}{d_a}\right) \quad z \leq 0 \quad (24)$$

$$f = N_3 \exp\frac{(1+a)z}{2d_b} + N_4 \exp\frac{(1-a)z}{2d_b} \quad 0 \leq z \leq 1 \quad (25)$$

$$f = N_5 + N_6 \exp\left(\frac{z}{d_c}\right) \quad z \geq 1 \quad (26)$$

Aplicando as condições de contorno dadas pelas Equações (18) a (23), determinam-se as constantes arbitrárias N_i e, conseqüentemente, as soluções completas das Equações (15), (16) e (17):

$$\frac{1-f}{1-f(0)} = \exp\frac{z}{d_a} \quad z \leq 0 \quad (27)$$

$$f = g_0 \exp\left(\frac{z}{2d_b}\right) \left\{ (1+a) \exp\frac{a(1-z)}{2d_b} - (1-a) \exp\frac{a(z-1)}{2d_b} \right\} \quad 0 \leq z \leq 1 \quad (28)$$

$$f = f(1) = 2ag_0 \exp\left(\frac{1}{2d_b}\right) \quad z \geq 1 \quad (29)$$

onde:

$$a = \sqrt{1 + 4 \cdot k \cdot t_h \cdot d} \quad (30)$$

$$g_0 = \frac{2}{(1+a)^2 e^{\frac{a}{2d}} - (1-a)^2 e^{\frac{-a}{2d}}} \quad (31)$$

Sabendo que $f = \frac{C}{C_0}$, tem-se:

$$C = C_0 \frac{4ae^{\frac{1}{2d}}}{(1+a)^2 e^{\frac{a}{2d}} - (1-a)^2 e^{\frac{-a}{2d}}} \quad (32)$$

3.4. Métodos Numéricos

3.4.1 Método de Newton-Raphson

O método de Newton-Raphson é um dos métodos mais usuais para o cálculo de raízes de equações não lineares e se trata de um método particular do método de iteração linear.

O método de iteração linear consiste em estimar a raiz de uma função $f(x)$ usando o processo iterativo:

$$x_{n+1} = \varphi(x_n) \quad (33)$$

onde:

$$\varphi(x) = x + A(x)f(x) \quad (34)$$

sendo que para x igual à raiz de $f(x)$, tem-se $f(x) = 0$, ou seja, $x = \varphi(x)$ para qualquer $A(x) \neq 0$.

O método de Newton-Raphson resume-se em escolher uma função $\varphi(x)$ tal que $\varphi'(\alpha) = 0$, onde α é a raiz de $f(x)$ e $\alpha \in [a, b]$. Baseado no princípio de convergência do método de iteração linear de que é preciso $|\varphi'(x)| < 1$ em um intervalo $[a, b]$ que contenha a raiz de $f(x)$. Com isso, teremos $|\varphi'(x)| < 1$ para valores próximos de α .

Derivando $\varphi(x)$ em relação a x , obtém-se:

$$\varphi'(x) = 1 + A'(x)f(x) + A(x)f'(x) \quad (35)$$

Calculando a Equação (35) para $x = \alpha$, tem-se:

$$\varphi'(\alpha) = 1 + A(\alpha)f'(\alpha) \quad (36)$$

Exigindo que $\varphi'(\alpha) = 0$, tem-se:

$$A(\alpha)f'(\alpha) = -1 \quad \Rightarrow \quad A(\alpha) = \frac{-1}{f'(\alpha)} \quad (37)$$

Substituindo a Equação (37) na Equação (34), obtém-se:

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \quad (38)$$

O método de Newton-Raphson consiste em utilizar o processo de iteração linear com a função de iteração dada pela Equação (38).

3.4.2 Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta podem ser entendidos como um aperfeiçoamento do método de Euler, com uma estimativa melhor da derivada da função. A diferença entre o método de Euler, que estima o valor de y_{n+1} por meio do valor de y_n e da derivada no ponto x_n , e os métodos de Runge-Kutta é que com esses busca-se uma melhor estimativa da derivada com uma avaliação da função em mais pontos no intervalo $[x_n, x_{n+1}]$.

Os métodos de Runge-Kutta de ordem n fornecem valores aproximados da solução da equação diferencial $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$, que coincidem com os valores obtidos por meio da expansão em série de Taylor de y , em torno do ponto x , até o termo h^n , ou seja,

$$y(x + h) \cong y(x) + f(x, y(x))h + f'(x, y(x))\frac{h^2}{2!} + \dots + f^{(n-i)}(x, y(x))\frac{h^n}{n!} \quad (39)$$

Os métodos de Runge-Kutta são algoritmos explícitos que envolvem avaliações da função $f(x, y)$ em pontos entre x_n e x_{n+1} .

Para o desenvolvimento desse trabalho foi utilizado o método de Runge-Kutta-Gill de 4ª ordem, que possui como estimativa de y_{n+1} a Equação 40.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} [k_1 + (2 - \sqrt{2})k_2 + (2 + \sqrt{2})k_3 + k_4] \quad (40)$$

onde:

$$k_1 = f(x_n, y_n) \quad (41)$$

$$k_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right) \quad (42)$$

$$k_3 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}\right)hk_1 + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)hk_2\right) \quad (43)$$

$$k_4 = f\left(x_n + h, y_n - \frac{h}{\sqrt{2}}k_2 + \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)hk_3\right) \quad (44)$$

$$h = x_{n+1} - x_n \quad (45)$$

4. METODOLOGIA

O desenvolvimento do presente trabalho consistiu basicamente de duas etapas. Na primeira etapa, desenvolveu-se uma metodologia numérica para a solução do modelo de dispersão para uma ordem de reação genérica n . Na segunda etapa foi feita a validação da metodologia desenvolvida, comparando-se os resultados obtidos via método numérico com aqueles disponíveis na literatura para cinéticas de 1ª e 2ª ordens. As etapas são descritas detalhadamente a seguir

Para o desenvolvimento da metodologia numérica, inicialmente adimensionalizou-se a equação representativa do balanço de massa em reator de fluxo disperso para ordem de reação genérica n , obtendo-se:

$$d \frac{d^2 f}{dz^2} - \frac{df}{dz} - Rf^n = 0 \quad (46)$$

onde: $d=D/(uL)$; $f=C/C_0$; $z=x/L$; $R=k_n t_h C_0^{(n-1)}$; $t_h=L/u=V/Q$

As condições de contorno adotadas foram aquelas usadas por Wilhelm e Wehner (1956) para a seção reacional, as quais foram pioneiramente propostas por Danckwerts (1953). Tais condições escritas em termos de variáveis e parâmetros adimensionais são dadas por:

$$z = 0: \quad f(0-) = 1 = f(0+) - d \frac{df(0+)}{dz} \quad (47)$$

$$z = 1: \quad \frac{df(1)}{dz} = 0 \quad (48)$$

A Equação (47) representa a dispersão na entrada do reator enquanto que a Equação (48) estabelece a saída do reator como sendo o final do tratamento, não ocorrendo mudanças na concentração do poluente a partir deste ponto.

Uma vez que as condições de contorno são dadas para dois valores distintos de z , o problema fica caracterizado como sendo um problema de valor no contorno, possível de ser resolvido por diferentes métodos, dentre os quais o *shooting method* (Ramirez, 1998; Lee, 1992). A aplicação do *shooting method* à resolução do problema proposto consistiu no procedimento descrito a seguir:

Inicialmente, realizou-se uma mudança de variável fazendo-se $y=df/dz$. Desta forma, a Equação (46) foi representada por um sistema equivalente de duas equações diferenciais de 1ª ordem dado por:

$$\begin{cases} \frac{df}{dz} = y \\ \frac{dy}{dz} = \frac{1}{d}(y + Rf^n) \end{cases} \quad (49)$$

Para a obtenção do valor de f na saída do reator foi necessário integrar numericamente o sistema desde $z=0$ (entrada do reator) até $z=1$ (saída do reator). Para tanto, utilizou-se o método de Runge-Kutta-Gill de 4ª ordem com passo de integração variável.

Como $y(0)$ não era conhecido *à priori*, teve-se que atribuir um valor inicial a $f(0^+)$ na Equação 47, calculando-se o valor de $y(0)$ a partir desta equação. Conhecidos os valores de partida de f e y em $z=0$, integrou-se o sistema e verificou-se ao final da integração se $y(1)$ era nulo conforme imposto pela condição de contorno na saída do reator. Caso não fosse, o valor atribuído a $f(0^+)$ era iterado e a integração refeita, repetindo-se todo o procedimento até satisfazer-se a condição de contorno na saída do reator.

Para a iteração do valor $f(0^+)$ utilizou-se o método de Newton-Raphson, sendo a função a ser zerada dada por:

$$g(f(0^+)) = [y(1)]_{\text{calculado}} - [y(1)]_{\text{estipulado}} \quad (50)$$

A derivada de $g(f(0^+))$ com relação à $f(0^+)$, necessária no método de Newton-Raphson, foi calculada numericamente usando fórmula de diferença finita à frente.

Para a validação da metodologia desenvolvida, as soluções numéricas obtidas foram comparadas com resultados obtidos via métodos analíticos (caso da cinética de 1ª ordem) ou com gráficos de soluções numéricas disponíveis na literatura (caso da cinética de 2ª ordem). Desta forma, avaliou-se a confiabilidade na metodologia desenvolvida.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1. Cinética de 1ª Ordem

No Quadro 3 estão apresentados os valores de f obtidos via solução analítica e via solução numérica para valores de d e $k_1 t_h$ típicos para reações de 1ª ordem.

Quadro 3 – Valores da fração remanescente de poluente (f) na saída do reator obtido via método numérico e via método analítico para reação de 1ª ordem

d = 0.5	Kth	Analítica	Numérica
	1	0.447398523	0.447398501
	2	0.248551626	0.248551606
	3	0.153723395	0.153723378
	4	0.101564401	0.101564387
	5	0.0702319939	0.0702319831
	6	0.0502336257	0.050233617
	7	0.036885911	0.036885879
	8	0.2766385	0.276638442
	9	0.0211136006	0.0211135959
	10	0.0163540852	0.0163540813
d = 1.0	Kth	Analítica	Numérica
	1	0.467655882	0.467655861
	2	0.279387046	0.279387027
	3	0.186411926	0.186411909
	4	0.132637283	0.132637269
	5	0.984888974	0.984888855
	6	0.0754121008	0.0754120907
	7	0.0591055609	0.0591055522
	8	0.0471877199	0.0471877124
	9	0.0382435573	0.0382435508
	10	0.0313856894	0.0313856837
d = 4.0	Kth	Analítica	Numérica
	1	0.481772488	0.481772469
	2	0.30211413	0.302114112
	3	0.212115928	0.212115912
	4	0.15871097	0.15871069
	5	0.123738174	0.123738163
	6	0.0993062541	0.0993062537
	7	0.0814383673	0.0814383638
	8	0.0679167886	0.0679167804
	9	0.05704094473	0.05704094399
	10	0.0490695748	0.0490695681

Analisando-se os dados do Quadro 3, pode-se afirmar que o método numérico utilizado mostrou-se eficaz na resolução do problema de valor no contorno referente ao caso da cinética de primeira ordem, apresentando valores de f na saída do reator concordantes com aqueles previstos pela solução analítica para todos os valores de d e $k_1 t_h$ empregados.

Na Figura 5 estão apresentadas as curvas de Eficiência x $k_1 t_h$, parametrizadas pelo número de dispersão d . Eficiência pode ser definida como a porcentagem de degradação do poluente devido ao tratamento biológico de efluentes ($E = 1 - f$). Como se observa, as curvas obtidas numericamente são praticamente idênticas às obtidas analiticamente.

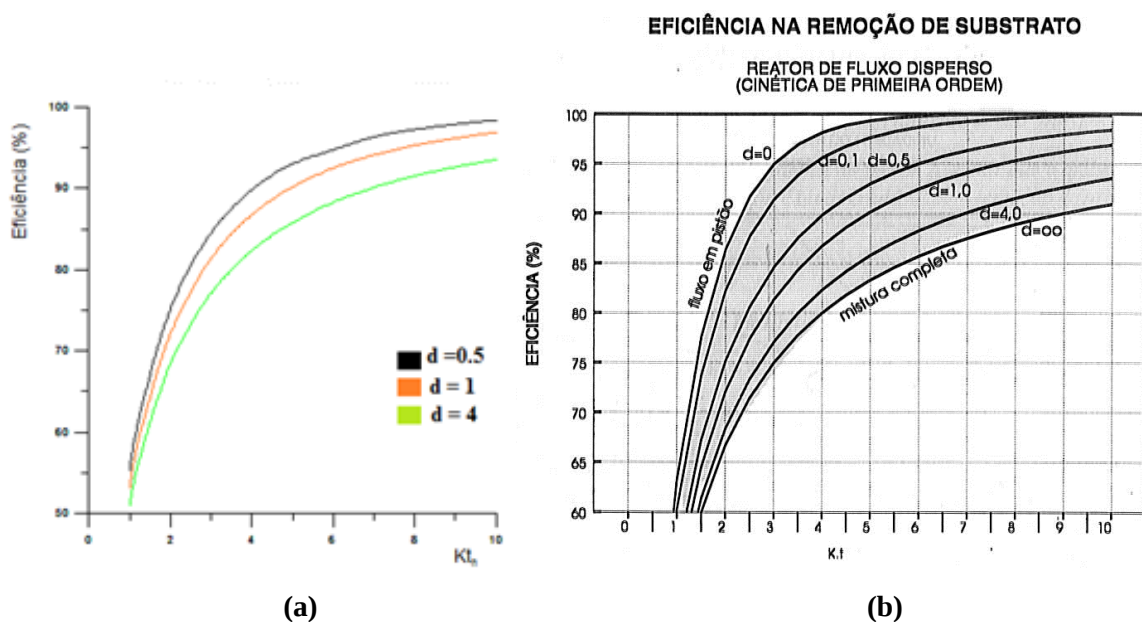


Figura 5 – (a) Curvas de eficiência geradas a partir dos dados obtidos por meio da solução numérica
(b) Curvas de eficiência geradas a partir de dados obtidos via solução analítica (Von Sperling, 1996)

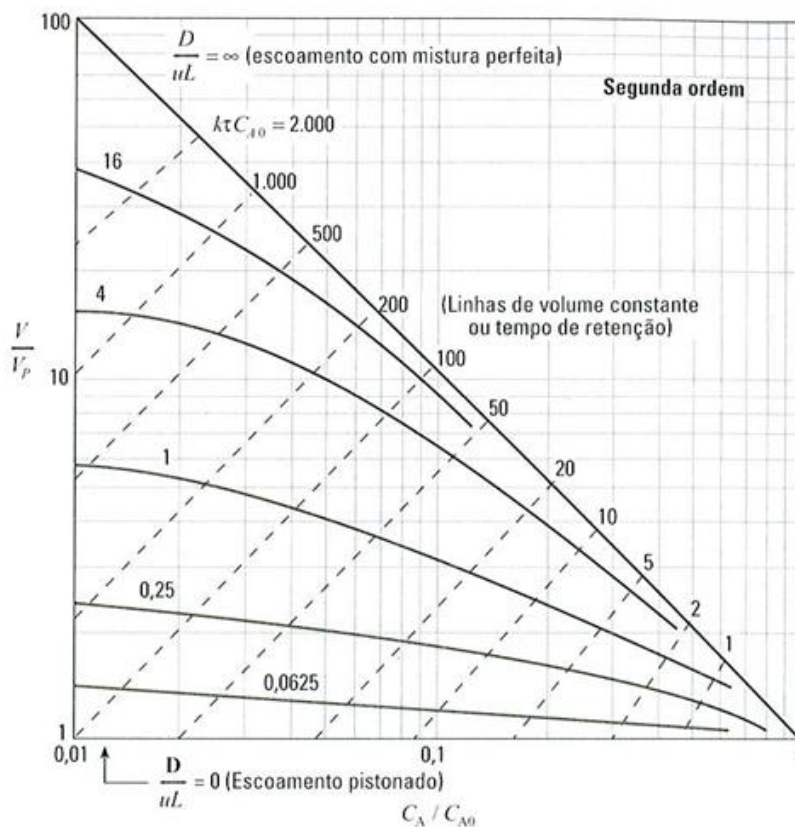
5.2. Cinética de 2ª Ordem

No Quadro 4 estão apresentados os valores de f obtidos com a metodologia numérica aqui desenvolvida para valores de d e $k_2 t_h C_0$ típicos para reações de 2ª ordem e os valores de f lidos a partir da Figura 6, a qual apresenta o gráfico da solução numérica disponível na literatura.

Embora havendo alguma imprecisão na leitura dos valores de f a partir do gráfico apresentado na Figura 6, observa-se uma boa concordância dos valores lidos com aqueles obtidos neste trabalho.

Quadro 4 – Comparação entre valores obtidos numericamente e obtidos através da Figura 6

$Kt_h C_0$	Número de Dipersão	Fração Remanescente de poluente obtido através da solução numérica proposta	Fração Remanescente de poluente obtida a partir da Figura 6
1	0,25	0,551279242	0,57
2	1	0,457588671	0,41
5	1	0,299865641	0,28
10	4	0,247689817	0,25
20	0,25	0,087491661	0,08
50	4	0,106118612	0,11
100	4	0,070250412	0,07
200	16	0,060127691	0,06
500	16	0,035894026	0,037
1000	16	0,023742548	0,025
2000	16	0,015357198	0,016

**Figura 6** – Razão entre o volume do reator de fluxo disperso e o volume do reator de fluxo pistonado para reações de segunda ordem, em função de $f = C_A/C_{A0}$, d e $kt_h C_0$ (Levenspiel 1959,1961)

Na Figura 7 estão apresentadas curvas de eficiência de remoção de poluente em função de $kt_h C_0$ para valores do número de dispersão baixo, médio e alto.

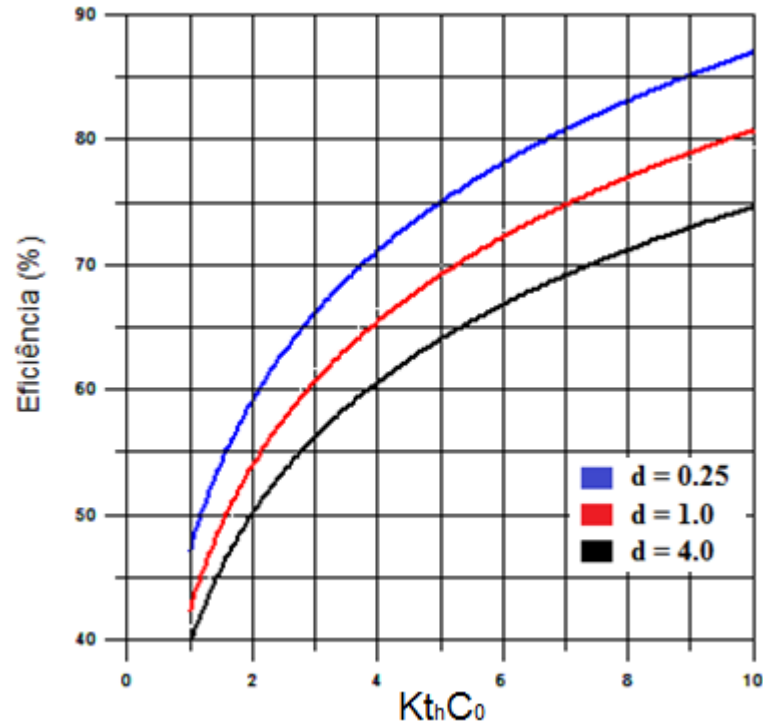


Figura 7 – Curvas de eficiência para reações de 2ª ordem obtidas com a metodologia numérica

5.3. Cinética de Ordem Fracionária

Não foram encontrados registros na literatura de ordens fracionárias e suas respectivas constantes de velocidade. O fato de ordens fracionárias ocorrerem para efluentes industriais muito específicos explica a escassez de dados cinéticos relativos à remoção de poluentes destes efluentes, dificultando nestes casos o estabelecimento de faixas de valores característicos do parâmetro $R = kt_h C_0^{(n-1)}$, importante para a convergência do método conforme se demonstra ilustrativamente a seguir para o caso de reação de ordem $\frac{1}{2}$ e reator de fluxo em pistão ideal, para o qual $d=0$. Neste caso a equação de balanço de massa torna-se:

$$-\frac{df}{dz} - kt_h C_0^{-1/2} f^{1/2} = 0 \quad (51)$$

Separando as variáveis na Equação 20, obtém-se:

$$\frac{df}{f} = -kt_h C_0^{-1/2} dz \quad (52)$$

Integrando ambos os termos da Equação 21 ao longo do reator, tem-se:

$$\int_1^f \frac{df}{f} = -kt_h C_0^{-1/2} \int_0^1 dz \quad (53)$$

Após a integração da Equação 22, obtém-se:

$$\left[\frac{f^{1/2}}{1/2} \right]_1^f = -kt_h C_0^{-1/2} \quad (54)$$

Calculando

$$f^{1/2} = 1 - \frac{1}{2} kt_h C_0^{-1/2} \Rightarrow kt_h C_0^{-1/2} = 2(1 - f^{1/2}) \quad (55)$$

A análise da Equação 24 mostra que existe teoricamente um valor máximo para o parâmetro $kt_h C_0^{-1/2}$ que proporciona a remoção total do poluente ($f=0$), sendo este valor no caso igual a 2. Portanto, simulações de casos com valores de $kt_h C_0^{-1/2}$ acima do máximo conduzirão a obtenção de valores de f negativos, os quais trarão dificuldades numéricas para o método de integração, conforme se pode inferir a partir da Figura X.

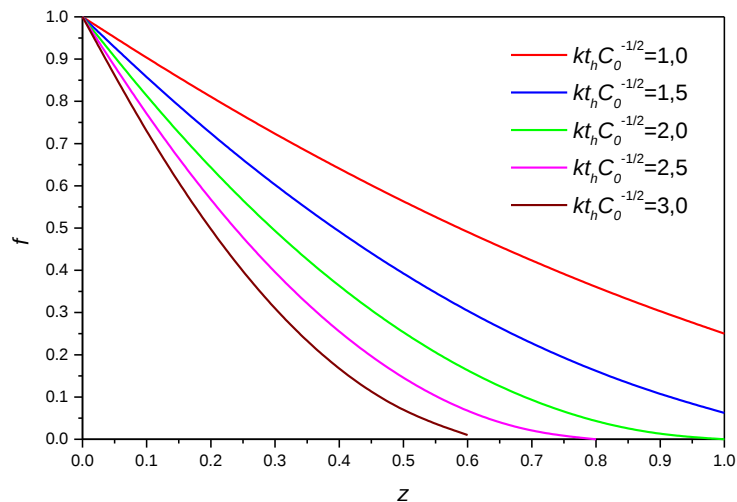


Figura 8 – Curvas de f em função de z parametrizadas pelo valor de $kt_h C_0^{-1/2}$ em um reator de fluxo pistonado ideal

Tais considerações podem ser extrapoladas ao caso de reatores de fluxo disperso para os quais o número de dispersão é diferente de zero. Neste caso, o valor máximo do parâmetro $kt_h C_0^{-1/2}$ será maior que 2, pois o reator de fluxo disperso é menos eficiente do que o reator de fluxo pistonado ideal, requerendo um maior valor deste parâmetro para que ocorra uma completa remoção do poluente, isto é, para que f seja nulo. Entretanto, o valor 2 permanece como uma referência para que não sejam utilizados valores do parâmetro $kt_h C_0^{-1/2}$ fora da realidade. No Quadro 5 estão apresentados alguns resultados relativos à cinética de ordem $\frac{1}{2}$ para números de dispersão baixo, médio e alto e valores de $kt_h C_0^{-1/2}$ em torno de 2.

Quadro 5 – Valores de $f(0^+)$, $f(1)$ e $[df/dz]_{z=1}$ obtidos para cinética de reação de ordem $\frac{1}{2}$

D	$kt_h C_0^{-1/2}$	$f(0^+)$	$f(1)$	$[df/dz]_{z=1}$
0,5	1,9	0,546514788	0,0922242371	-2.64767715E-011
0,5	2,0	0,535053424	0,0784270649	-3,28961775E-011
0,5	2,3	0,504287353	0,0465968686	2,86236228E-012
0,5	2,4	0,495076841	0,0386617618	1,40754041E-011
0,5	2,5	0,486319042	0,0318363768	1,30241001E-011
0,5	2,6	0,477977948	0,0259997829	1,11383774E-011
0,5	2,7	0,470020981	0,0210407132	1,35773511E-011
1,0	1,5	0,472466566	0,19734788	-4.96861233E-012
2,5	2,0	0,282049766	0,139784675	-3,55163684E-012
4,0	2,0	0,244105943	0,150243384	-1.68272532E-012

Na Figura 8 estão apresentadas curvas de eficiência de remoção de poluente em função do parâmetro $R = kt_h C_0^{-1/2}$ para valores do número de dispersão baixo, médio e alto e cinética de ordem $\frac{1}{2}$.

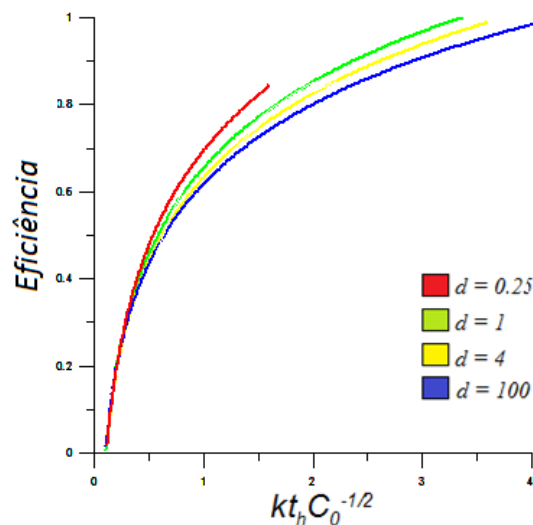


Figura 9 – Curvas de eficiência de remoção de poluente em função do parâmetro $kt_h C_0^{-1/2}$

6. CONCLUSÃO

O método numérico mostrou-se eficaz na solução dos problemas de valor no contorno associados ao modelo de fluxo disperso para cinéticas de 1ª e 2ª ordens.

O método numérico também foi eficaz quando utilizado para resolver o caso de reações de ordem 1/2. O sucesso da utilização da metodologia desenvolvida neste trabalho para solucionar problemas de valor no contorno referentes às cinéticas de remoção de poluente de ordens fracionárias tem como principal limitante os valores assumidos do parâmetro $R = kt_h C_0^{(n-1)}$, sendo fundamental o uso de valores típicos para cada sistema reacional.

A metodologia aqui desenvolvida pode vir a ser uma ferramenta muito útil para o projeto de estações de tratamento de efluentes, mais precisamente no que se refere ao dimensionamento dos reatores nos quais se conduz a despoluição das águas residuárias adequando-as aos padrões legais exigidos pelos órgãos governamentais de controle ambiental.

REFERÊNCIAS

ARCEIVALA, S.J. **Wastewater treatment and disposal**. New York: Marcel Dekker, 1981

BASSANEZI, R.C. **Ensino-aprendizagem com modelagem matemática**. 3. ed. São Paulo: Contexto, 2006.

VON SPERLING, M. **Princípios básicos do tratamento de esgotos**. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental: Universidade Federal de Minas Gerais: 1996. (Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias, v.2).

WEHNER, J.F.; WILHELM, R.H. Boundary conditions of flow reactor. **Chem. Engng Sci.**, New York, v.6, p. 89-93, 1956.

METCALF; EDDY. **Wastewater Engineering: Treatment and Reuse**. Revised by George Tchobanoglous, Franklin L. Burton, H. David Stensel. 4th ed. Boston: McGraw-Hill, 2003

LEVENSPIEL, O. **Chemical Reaction Engineering**. New York: John Wiley & Sons, 1999.

LEE, J.M. **Biochemical Engineering**. Englewood Cliffs: Prentice-Hall International, 1992, p. 54-73

RAMIREZ, W.F. Solution of partial differential equation. In: RAMIREZ, W.F. **Computational methods in process simulation**. Boston: Butterworth Heineman, 2. ed., 1988. Cap. 10, 389-413.

BIBLIOGRAFIA CONSULTADA

CRITTENDEN, J.C. et al. (Rev.). **Water treatment: Principal and Design**, 2nd ed. Hoboken: J. Wiley, 2005.

EDZWALD, J.K. (Ed.). **Water Quality & Treatment**, 6th ed. Denver: McGraw-Hill, 2011

VISSMAN JUNIOR, W.; HAMMER, M.J. **Water Supply and Pollution Control**. 7th ed. Upper Saddle River: Pearson Prentice Hall, 2005.

SERVIÇO AUTÔNOMO DE ÁGUA E ESGOTO (Aracruz). **Sistemas de tratamento de esgoto**. Aracruz: SAAE, 2006.

RUGGIERO, M. A. G. e LOPES, V. L. R. **Cálculo Numérico: aspectos teóricos e computacionais**. 2ª edição. São Paulo: Makron Books, 1996

FRANCO, N.B. **Cálculo Numérico**. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006