



BRENO LEAL DE PAULA

**ANÁLISE COMPUTACIONAL E EXPERIMENTAL DE
DESLOCAMENTO MISCÍVEL EM MEIO POROSO**

1^a edição

LAVRAS – MG

2022

BRENO LEAL DE PAULA

**ANÁLISE COMPUTACIONAL E EXPERIMENTAL DE DESLOCAMENTO MISCÍVEL EM
MEIO POROSO**

1^a edição

Monografia apresentada à Universidade Federal
de Lavras, como trabalho de conclusão de
curso.

Profa. DSc. Camila Silva Franco

Orientador

LAVRAS – MG

2022

**Ficha catalográfica elaborada pela Coordenadoria de Processos Técnicos
da Biblioteca Universitária da UFLA**

Paula, Breno Leal de

Análise computacional e experimental de deslocamento miscível
em meio poroso / . 1^a ed. – Lavras : UFLA, 2022.

41 p. :

Trabalho de Conclusão de Curso–Universidade Federal de
Lavras, 2022.

Orientador: Profa. DSc. Camila Silva Franco .

Bibliografia.

1.

CDD-808.066

Aos esquecidos pelo tempo...

AGRADECIMENTOS

Á Evelise, que com seu enorme coração e sua mente brilhante me ajudou a enxergar mais longe e com sua paciência me acolheu apesar de tudo.

À minha família pelo incondicional apoio.

Á Camila por sua orientação e fibra.

Ao Ivan, Daniela, Lara e todos os que tenho o prazer de conviver, pelo companheirismo e aprendizado .

Nil posse creari de nihilo.

(Titus Lucrecio)

RESUMO

Tendo em vista a elevada demanda de processos para o tratamento de águas residuárias, para minimização dos impactos ambientais e para garantia da devida potabilidade, se faz cada vez mais necessária a avaliação de novos materiais e metodologias para a o dimensionamento e otimização dos processos. Nesse sentido, como forma de garantir o devido dimensionamento e a redução de custos em novos processos a fluido dinâmica vem como ferramenta essencial aplicada à engenharia. Atrelado a isso é necessário a garantia da representatividade dos modelos, perpassando sobre a discretização dos fenômenos ou os devidos ajustes para o as condições de contorno e o equacionamento teórico. Sendo assim esse trabalho apresenta uma metodologia para geração de malha por meio da discretização visual e da segmentação pela rotina *snappyHexMesh*, para os meios porosos. Realizando ainda um estudo comparativo entre dados reais obtidos pela implementação de uma coluna de eluição e a simulação do sistema pela metodologia proposta. A parte experimental foi executada utilizando a alga *Lithothamnium calcareum* e areia em uma razão volumétrica de 50% para cada, e para a solução eluída foi utilizada uma solução de dicromato de potássio a uma concentração de $668,15\text{mgL}^{-1}$. Os resultados obtidos demonstram a possibilidade de aplicação mediante o aprimoramento das técnicas de imageamento utilizadas na modelagem, com correspondência ainda baixa, dada a amostragem em superfície, para parâmetros como tortuosidade e porosidade na faixa de 30% de erro. Para os parâmetros de transporte da solução para o meio estacionário, houve um bom ajuste dos modelos de transporte expressos em termos característicos do meio e de fluxo, na faixa de 5% de divergência mesmo com os parâmetros do meio não sendo tão adequados. Com a possibilidade de trabalhos futuros, há a potencialidade de implementação de soluções em largas escalas a partir dos parâmetros de transferência apresentados com equações de transporte mais robustas por meio da equação de transferência de massa.

Palavras-chave: Lithothamnium. CFD. Transferência de massa. OpenFoam

LISTA DE FIGURAS

Figura 4.1 – Diagrama	19
Figura 4.2 – Diagrama da metodologia utilizada	26
Figura 4.3 – Volume elementar representativo para a porosidade	27
Figura 4.4 – Metodologia de caracterização do REV para porosidade	28
Figura 4.5 – Exemplo de detalhamento da malha	29
Figura 5.1 – Resultado da simulação	33
Figura 5.2 – Ajuste entre os modelos	35

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Dados básicos da <i>Lithothamnium</i>	14
Tabela 5.1 – Dados obtidos do adsorvente	32
Tabela 5.2 – Dados obtidos do adsorvente	34

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	OBJETIVOS	13
2.1	Objetivos específicos	13
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	14
3.1	Propriedades físicas e química do meio poroso	14
3.2	Modelos de fluxo e transporte	15
3.3	Obtenção da geometria do meio	18
3.3.1	Microtomografia	18
3.3.2	Modelos de geração de malha numéricos e estatísticos	18
4	METODOLOGIA PARA COLETAS EXPERIMENTAIS E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	19
4.1	Concepção do leito filtrante com alga marinha <i>Lithothamnium calcareum</i>	19
4.1.1	Porosidade	20
4.1.2	Tortuosidade	21
4.1.3	Vazão	22
4.1.4	Velocidade experimental	22
4.1.5	Condutividade hidráulica	22
4.1.6	Gradiente hidráulico	23
4.1.7	Parâmetros de fluxo e resistência	24
4.1.8	Avaliação quantitativa	25
4.2	Pré-processamento, processamento e pós processamento	25
4.2.1	Geração do meio	26
4.2.2	Superfície tridimensional	26
4.2.3	Volume Elementar Representativo- REV	27
4.2.4	Geração da malha	28
4.2.5	Geração dos parâmetros iniciais	30
4.2.6	Porosidade	31

4.2.7	Velocidade	31
4.2.8	Condutividade hidráulica	31
4.2.9	Transferência de calor (simplificação da TM)	31
5	Resultados e Discussão	32
6	CONCLUSÃO	36
	REFERÊNCIAS	37

1 INTRODUÇÃO

O estudo de meios porosos exerce um papel importante em várias áreas associadas desde a mineração de recursos como petróleo, água e alguns minérios, até na em estudos de contaminação de mananciais, desenvolvimento de filtros e nos estudos de absorção de medicamentos. Na área ambiental o conhecimento da dinâmica dos fluidos em meios porosos permite estimar os fluxos de água subterrânea (BEAR, 1988) e poluentes no solo (BEAR; CHENG, 2010), dimensionar estruturas de tratamento e conhecer os parâmetros de operação de dispositivos para o tratamento de águas para o consumo humano ou para a disposição adequada de águas residuárias.

Para tal, destacam-se exemplos das aplicações de simulações numéricas computacionais aplicadas a área ambiental associada aos meios porosos, como a modelagem de ruptura de reservatórios e barramentos por modelagem numérica (HU et al., 2012), a modelagem de meios porosos em macroescala (BATTIATO et al., 2019), a simulação de fluxo multifásico (HORGUE et al., 2015), a previsão de pluma de contaminação por meio de simulação computacional e proposituras para controle em água subterrânea contaminada por lixões (ZHOU et al., 2014) e o dimensionamento de filtros para gases (DELHOMÉNIE; HEITZ, 2005).

No caso do tratamento de efluentes, a adsorção têm sido alternativa predominante onde as menores concentrações tornam os processos químicos de coagulação, precipitação, imobilização economicamente menos vantajosos pelo gasto de material e com contínuo controle do processo. Atrelado a isso, cabe citar, a menor sensibilidade da adsorção às condições de pH se comparado com certos processos e métodos (SADEGH; ALI, 2021), como a coagulação (AMIRTHARAJAH; MILLS, 1982). As aplicações mais comuns da adsorção se dão na descoloração de óleos, na remoção de poluentes orgânicos e inorgânicos de efluentes líquidos e na purificação de diversas substâncias (TREYBAL, 1955; NASCIMENTO et al., 2020).

Um dos focos deste trabalho se trata do estudo de processos para adsorção de metais pesados, devido à preocupações com exposição e toxicidade destes em concentrações danosas à população (TCHOUNWOU et al., 2012), e na garantia do atendimento da legislação associada ao lançamento de efluentes por meio do cumprimento dos valores máximos de lançamento estabelecidos na resolução normativa CONAMA 430 (CONAMA, 2011). A adsorção pode ser utilizada tanto para materiais

orgânicos como para inorgânicos, sendo a escolha do adsorvente dependente principalmente das características relativas à carga do adsorvato e suas propriedades físicas.

O adsorvente selecionado neste trabalho foi a alga marinha *Lithothamnium Calcareum*. Tal seleção ocorre pelo uso consolidado de granulado bioclástico da alga em aplicações agrícolas, como corretor gradual do solo (LÓPEZ-BENITO, 1963), como suplementação animal (LOPES, 2012), na indústria cosmética (RESENDE et al., 2021) e com potencialidade farmacêutica (TADDEI et al., 2014), para o tratamento de água em atendimento a parâmetros de potabilidade (FRANCO, 2015) e no uso como material suplementar em reator aeróbio em sistema de lodos ativados (NOGUEIRA et al., 2019).

Fato este que junto com a alta disponibilidade na costa marinha, com a capacidade de ser produzida em larga escala em regiões marítimas e ainda apresentando a possibilidade de cultivo da mesma em efluentes ou em sistemas de larga escala. Estes fatores garantem certas vantagens no uso dos granulados e do esqueleto carbonáceo das algas *Lithothamnium Calcareum*.

As vantagens físicas do esqueleto de carbonato de cálcio da alga estão associadas à acentuada área superficial, na faixa de $8,18 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$, a presença de microporosidade em sua estrutura (SILVA et al., 2021b). Porém inferiores aos valores encontrados em carvões ativados de alta superfície a qual a área superficial se encontra na faixa de $10^3 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$ (EMROOZ et al., 2021).

Cabe ainda salientar a potencialidade do uso da fluidodinâmica computacional (CFD) no dimensionamento de estruturas de forma mais realista e com o uso de modelos mais precisos e complexos que levam em consideração as tivas de reação, a fluidificação do meio, a prevenção de zonas mortas e a otimização dos designs para maior eficiência e para garantia dos de limpeza e manutenção (SAMSTAG et al., 2016).

2 OBJETIVOS

O objetivo deste trabalho foi estudar e simular o fluxo e os processos em meio poroso para o tratamento de efluentes com a estrutura carbonácea da alga *Lithothamnium Calcareum* como matriz de adsorção.

2.1 Objetivos específicos

- Realizar a caracterização física do meio poroso;
- Gerar uma malha computacional representativa do meio poroso em leito fixo;
- Simular as condições de fluxo e das dinâmicas de transporte em leito fixo;
- Validar o modelo de deslocamento miscível gerado pelo OpenFoam por meio de ensaio experimental.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Propriedades físicas e química do meio poroso

A alga *Lithothamnium calcareum* pertence ao grupo das algas vermelhas, sendo parte da família das coralinaceae. Tal família apresenta a capacidade de acumulação de carbonato de cálcio e de magnésio em suas paredes, de tal forma que propiciam a formação de granulados bioclásticos com potencial de exploração econômica, sendo os principais gêneros o *Maerl* e a *Lithothamnium calcareum*, de prevalência respectiva no Brasil e na França.(DIAS, 2000)

A caracterização mais aprofundada das propriedades físicas e químicas da matriz com alga *Lithothamnium calcareum* foram realizadas por (SILVA et al., 2021c; ALMEIDA et al., 2021; FRANCO, 2015). Na qual uma síntese dos elementos de interesses nestes trabalhos é apresentada na tabela 3.1 abaixo:

Tabela 3.1 – Dados básicos da *Lithothamnium*

Parâmetro	Magnitude	Unidade
Área superficial	8,6	$m^2 g^{-1}$
Massa específica	0,49	gml^{-1}
V_p	$1,5 \times 10^{-3}$	cm^3
Tamanho do poro	3,906	Å

Fonte: (SILVA et al., 2021c)

Outras caracterizações da alga foram realizadas, sendo avaliado sua composição química e sua capacidade de adsorção, tais estudos foram realizados por (LÓPEZ-BENITO, 1963), (ALMEIDA et al., 2021), (SILVA et al., 2021a), (FRANCO, 2015).

Segundo os dados de cinética de sorção obtidos por (SILVA et al., 2021a) em tempos curtos de contato há um melhor ajuste dos modelos de adsorção de pseudo primeira ordem, porém em tempos maiores ocorre a prevalência de um melhor ajuste da curva de adsorção de Elovich. Tal questão é de suma importância para a previsão do modelo de transferência a ser utilizado, sendo válido citar algumas cinéticas mais complexas evidenciadas no estudo (SILVA et al., 2021a), possivelmente ocasionadas por precipitações, reações químicas e deposição em múltiplas camadas.

O estudo da adsorção com a estrutura carbonácea da alga é relativamente recente, sendo que os estudos que fazem a caracterização da dinâmica de reação para adsorção de metais pesados foram realizados apenas por (SILVA et al., 2021a; VENEU et al., 2018; WANG et al., 2018). Sendo tal uso tão pouco considerado na patente de beneficiamento e exploração conforme (MENDES, 2013)

Os resultados de Wang (2018) mostram que o tratamento térmico, para o aumento da capacidade adsorptiva, é mais eficiente na abertura e criação de sítios quanto mais próximo do ponto de degradação do material, que ocorre por volta de 750°C . Com equilíbrios chegando na faixa de $30,94\text{mgg}^{-1}$ para Cd(II) e $112,19\text{mgg}^{-1}$ para Pb(II).

Wang (2018), assim como Silva(2021), encontraram melhor ajuste de longo termo para processos de pseudo segunda ordem, sendo ainda apontado a ocorrência caracterizada de precipitação em superfície na forma de $\text{Cd}(\text{OH})_2$, CdCO_3 e $\text{Cd}(\text{HCO}_3)_2$, estas características permitem o uso da alga para a remediação de sítios contaminados de maneira a promover a devida imobilização das espécies químicas. Veneu (2018) também aponta para a formação de novos minerais na superfície do leito na sorção em coluna para remoção de Cádmiio.(VENEU et al., 2018)

3.2 Modelos de fluxo e transporte

Os tipos de escoamento são geralmente separados em laminar e turbulento, de uma maneira abstrata chamados de fluxo de Darcy e fluxo não darciniano.

O primeiro modelo para a representação dos meios porosos é o modelo de Darcy (BROWN, 2002). O fluxo na equação de Darcy é representativo para valores baixos do número de Reynolds, onde os efeitos viscosos são muito maiores que os efeitos cinéticos. Para contabilizar tais efeitos cinéticos Forchhheimer adicionou um termo de segunda ordem para representar os efeitos inerciais microscópicos (ZENG; GRIGG, 2006).

Um dos principais pontos para caracterização e simplificação dos modelos trata-se do dimensionamento da escala na qual os fatores que influenciam o processo ocorrem. Nesse sentido alguns fatores são caracterizados por números adimensionais associados ao regime, concentração, propriedades do fluido e velocidade do escoamento. Os parâmetros do modelo de transporte são altamente sensíveis ao regime apresentado, sendo importante avaliar a relação entre os diversos fatores. A principal forma

de avaliação se faz por meio da ponderação dos números adimensionais como Reynolds, Forchheimer (ZENG; GRIGG, 2006), Peclet (HUYSMANS; DASSARGUES, 2005), Schmidt e Sherwood. Para os meios porosos em regimes de escoamento não laminares é mais recomendado o uso do número de Forchheimer para determinação do tipo de regime predominante.

O uso do número de Reynolds para meios porosos é indicado apenas para cenários como solos e leitos filtrantes com boa distribuição de partículas e com características mais homogêneas de diâmetro médio de partículas na faixa de 40 a 80 % (ZENG; GRIGG, 2006). Nesses casos o critério estabelecido para os meios porosos não consolidados é de um número de Reynolds com valores de até 3 para a devida representatividade do fluxo Darciniano. Nestes casos as estimativas de fluxo expressas abaixo de 3 são condizentes com a equação de Darcy, enquanto acima desses valores é indicado o uso da equação de Darcy-Fochheimer.

A simulação computacional de meios porosos não é um fato novo e permitiu certos avanços no tema como o estudo dos regimes de transição, principalmente a partir da década de 80, na qual os fatores teóricos e experimentais eram divididos e refinados a nível de propriedades físicas e não meros ajustes teóricos (ZENG; GRIGG, 2006).

No entanto, conforme aponta (ZENG; GRIGG, 2006), ainda não há consenso sobre os parâmetros de números adimensionais para uma descrição precisa dos modelos mais indicados em cada tipo de sistema. Sendo os valores padrões adaptados de sistemas que não correspondem às condições de estudo ou sujeito a simplificações grosseiras ou ajustes inadequados.

O transporte do soluto para o meio estacionário ocorre pelo gradiente de concentração, dependendo da velocidade de deslocamento o fluxo pode ser considerado como difusivo ou advectivo, sendo que o fluxo difusivo ocorre em menores velocidades e na interface entre o fluido e a matriz sólida devido a formação da camada limite, evidenciando assim a importância do número de Péclet para as transferências de massa. De tal forma que segue como eixo central na determinação dos parâmetros e equacionamentos conforme apresentado nos estudos de validação e dimensionamento como segue nos artigos aqui analisados.

Antes de tudo cabe citar o papel da conectividade, da porosidade e da tortuosidade nos mecanismos de fluxo e transporte nos meios porosos. De tal forma que a tortuosidade garante a chance de colisões e contato entre o soluto em movimento e a superfície do material e a conectividade se associa

com o volume que participa dos processos de transporte. Em seu trabalho com movimento de contaminantes no solo Alexandre Knop (KNOP; THOMÉ, 2004) faz uma breve introdução aos tipos de mecanismos bem estabelecidos na literatura, servindo como literatura introdutória sobre os processos de mobilidade e transferência de massa em meios porosos, como o solo.

O estudo de transporte em meios porosos tem sido largamente utilizado para a avaliação de deslocamento de contaminantes no solo e no dimensionamento de reatores de leito fixo (OGATA; BANKS, 1961; GUPTA; BHATTACHARYYA, 2011; NASCIMENTO et al., 2020). Sendo encontrado na literatura o uso contínuo de vários modelos para o ajuste aos dados apresentados sem as devidas considerações sobre as condições na qual o processo ocorre (QIU et al., 2009).

Os modelos mais comuns para o dimensionamento de estruturas de tratamento são os modelos de BDST (Bed Depth Service Time) (CLARK, 1987; THOMAS; CRITTENDEN, 1998), a qual considera uma taxa de transferência constante em relação ao gradiente de concentração de maneira a prever o tempo para saturação da coluna, o modelo de Thomas adaptado, que faz uso da solução de Ogata para o dimensionamento de leitos fixos com base na conservação da massa no sistema (THOMAS, 1944). E métodos simplificados como MTZL (Mass Transfer Zone Length), LUB (Length of Unused Bed) e EBCT (Empty Bed Contact Time), Sendo que todos os métodos apresentados dependem de análises de bancada e em escala piloto para a determinação das taxas de funcionamento pela curva de ruptura.

Para a previsão de plumas de contaminação é recorrente o uso de simulação computacional pelo método dos elementos finitos utilizando os modelos de Van Genuchten ou soluções analíticas como proposto por Bear (PATIL; CHORE, 2014; PARKER; GENUCHTEN et al., 1984; BEAR, 1988). As soluções analíticas são restritas a casos bem específicos, limitada pela heterogeneidade do meio e das condições físicas do escoamento (PATIL; CHORE, 2014).

A simulação computacional utilizando de parâmetros como tortuosidade e conectividade é mais recente, dada a alta complexidade dos meios porosos, sendo trabalhos como o de Icard (ICARDI et al., 2014) essenciais para impulsionar a fronteira sobre a discretização dos meios porosos e o a realização do devido estudo das condições de maior relevância e interesse nos dimensionamentos. Bem como o trabalho de Icard tem-se vários trabalhos que envolvem a caracterização tomográfica e

a simulação de parâmetros mais precisos, saindo de modelos baseados em dados médios para mais robustos e precisos com a devida discretização preconizada por Bear (FOURIE et al., 2007).

3.3 Obtenção da geometria do meio

3.3.1 Microtomografia

O método mais comum de caracterização dos meios porosos é a avaliação por meio de microtomografia computadorizada, na qual a amostra é condicionada em um aparato fixo, submetida à um feixe cônico rotativo de raio-x. Utilizada para a geração de um escaneamento por camadas de sobreposição, sendo os dados adquiridos por um sensor de varredura do tipo ccd e diretamente processados (DENISON*; CARLSON; KETCHAM, 1997).

Diversos são os trabalhos na literatura de caracterização por microtomografia, sendo uma técnica recorrente para a avaliação de rochas, minerais, solos, materiais e outros (KETCHAM; CARLSON, 2001).

3.3.2 Modelos de geração de malha numéricos e estatísticos

Além dos modelos obtidos a partir de tomografia computadorizada existem os matemáticos, que usam das técnicas numéricas e estocásticas de recriação do meio poroso tridimensional. Uma das técnicas de geração tridimensional do meio poroso se dá pela reprodução de imagens 2d para 3d usando da extrapolação das propriedades do meio partindo-se de modelos estocásticos (HAJIZADEH; SAFEKORDI; FARHADPOUR, 2011). Outra técnica é a reconstrução com base em propriedades de interesse, podendo citar as reconstruções tridimensionais utilizando pontos estatísticos (OKABE; BLUNT, 2005) e (OKABE; BLUNT, 2007).

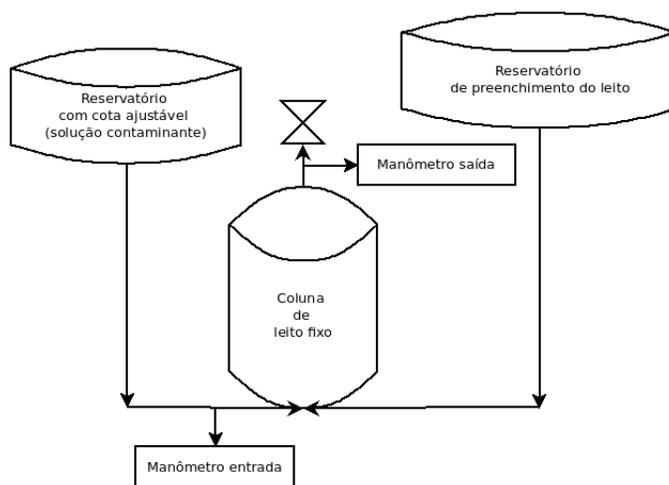
4 METODOLOGIA PARA COLETAS EXPERIMENTAIS E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

4.1 Concepção do leito filtrante com alga marinha *Lithothamnium calcareum*

A coluna de leito fixo consistiu de uma coluna em PVC de comprimento médio (L) de 20,023 cm, um diâmetro médio (d) de 4,421 cm, totalizando um volume de $307,369 \text{ cm}^3$. Como meio de adsorção foi utilizado uma mistura a 50% da alga e de areia, sendo as extremidades preenchidas com tecido fino de poliamida com mesh de 0,3 mm. Nas extremidades foi utilizado de tampão roscável e selado com fita de PTFE e a conexão realizada com niple de inox. Sendo o sistema de teste conectado por meio de mangotes flexíveis com comprimento médio de 30 a 40 cm, ligando a coluna aos reservatórios e às buretas para o monitoramento das cargas hidráulicas. Sendo o substrato substituído a cada experimento.

O filtro foi montado como leito filtrante de fluxo ascendente, conforme a figura 4.1:

Figura 4.1 – Diagrama



Fonte: do Autor, 2022

A escolha de tal modelo de fluxo foi realizada em vias de evitar a ocupação do volume poroso por ar que por ventura pudesse ficar aprisionado na coluna. O volume de poros do meio foi obtido pelo emprego das massas específicas aparente com o material seco em estufa e pela massa específica das partículas sólidas pelo método do picnômetro.

No ensaio, a coluna foi preenchida com a mistura e saturada, inicialmente com água destilada, até ser estabelecido o regime permanente. Em seguida, a solução com o contaminante, com concentração inicial conhecida, C_0 , foi aplicada mantendo-se a mesma carga hidráulica sobre a coluna durante o tempo de duração do ensaio.

O efluente aqui ponderado foi a solução de dicromato de potássio em concentração de 668,15 mgL^{-1} .

A solução migrou através da amostra impulsionada pelo gradiente hidráulico, mensurado nas buretas. As amostras efluentes da coluna foram coletadas e as concentrações de solutos foram determinadas por espectrometria de absorção atômica.

As curvas de eluição foram avaliadas utilizando um modelo analítico para determinar os parâmetros de transporte associados, sendo estes o fator de retardamento e coeficiente de dispersão hidrodinâmica, pela minimização do erro pelo método de Gauss, com a condição de $R > 1$ (OGATA; BANKS, 1961).

4.1.1 Porosidade

A porosidade do meio é definida como a relação entre o volume total de poros sobre o volume total, podendo-se representar conforme a equação da porosidade 4.1:

$$\varepsilon = \phi = \frac{V_p}{V} = \frac{1}{V} \int f(x) d\Omega \quad (4.1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} V \text{ é o volume total} \\ V_p \text{ é o volume poroso} \\ \Omega \text{ é o espaço analisado} \end{array} \right.$$

A porosidade pode ser obtida por meio da medição do volume dos espaços vazios, ou por meio da diferença de massa do sistema com e sem fluido (TEIXEIRA et al., 2017). Tanto a porosidade quanto os parâmetros de tortuosidade e conectividade tendem a alterar com a fluidificação do

meio, porém a coluna foi totalmente preenchida, sendo negligenciadas neste estudo as condições de fluidificação (GIDASPOW; JUNG; SINGH, 2004).

A porosidade é uma das propriedades mais importantes para a dinâmica e transporte em meios porosos, junto com os fatores de conectividade dos poros. Esta propriedade define o armazenamento de fluidos no solo e a interface onde ocorrem os mecanismos de troca e transporte. Existem formas empíricas de determinar a porosidade de acordo com a distribuição granulométrica, como proposto por (KRUMBEIN; MONK, 1943), fato que tem utilidade para a produção de filtros e leitos fluidificados.

O cálculo da porosidade foi realizado a partir da obtenção de dados da massa específica de partículas, aferição da massa do material granular após secagem em estufa e a medição do volume interno da coluna (TEIXEIRA et al., 2017), pela relação da massa específica aparente e a massa específica de partículas. Sendo utilizado o método do picnômetro para determinação da densidade dos sólidos conforme ASTM D854-02.

4.1.2 Tortuosidade

A tortuosidade, junto com a conectividade são parâmetros essenciais para a modelagem de transporte de massa em escala microscópica nos meios porosos. Sendo que esta impacta enormemente nos processos difusivos em meios porosos, causando o aprisionamento de material e a geração de zonas mortas. (NUNES et al., 2015; FU; THOMAS; LI, 2021). Thomas (2021) traz uma discussão mais aprofundada sobre os diferentes tipos de tortuosidade previstas na literatura e as implicações sobre os cálculos e as considerações sobre os modelos mais representativos do material.

A tortuosidade aqui considerada é a forma simplificada, com o equacionamento geométrico que dado pela seguinte expressão, conforme Carman (GHANBARIAN et al., 2013) na equação 4.2 :

$$\tau = \left(\frac{L_g}{L} \right)^2 \quad (4.2)$$

sendo

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau \text{ a tortuosidade} \\ L_g \text{ o caminho médio percorrido} \\ L \text{ o comprimento da coluna} \end{array} \right.$$

4.1.3 Vazão

A vazão foi determinada com a coleta de alíquotas em tempo determinado, utilizando-se de frascos de aproximadamente 20 mL. Para maior controle foi realizada a pesagem dos frascos vazios e com líquido de maneira a obter-se a vazão mássica, sendo a volumétrica obtida pela relação da massa específica da água nas temperaturas aferidas.

4.1.4 Velocidade experimental

Dois tipos de velocidade foram estimadas uma global que representa o fluxo médio estimado em toda a coluna dada a seção transversal da coluna e a outra a nível dos poros.

A velocidade média foi estimada a partir da vazão, pelo princípio de conservação da massa a nível da área transversal da coluna, e a velocidade média a nível dos poros estimada dividindo-se a velocidade na coluna pela porosidade conforme as equações 4.3 e 4.4.

$$q = \frac{Q}{A_t} \quad (4.3)$$

e

$$v_p = \frac{q}{\phi} \quad (4.4)$$

sendo

$$\left\{ \begin{array}{l} Q \text{ a vazão em } m^3s^{-1} \\ q \text{ a velocidade de Darcy a nível macroscópico em } ms^{-1} \\ \phi \text{ a porosidade efetiva} \\ v_p = \text{ a velocidade a nível de poros em } ms^{-1} \end{array} \right.$$

4.1.5 Condutividade hidráulica

A condutividade hidráulica é função da permeabilidade característica do material pela forma, compactidade, e distribuição espacial e granulométrica, e ainda das propriedades do fluido. Deste modo considerou-se para este estudo a constância dos fatores de permeabilidade, viscosidade e massa específica com a consideração de um meio isotrópico e com conectividade bem distribuída. A relação

entre a condutividade hidráulica e a permeabilidade do material pode ser expressa conforme a equação 4.5:

$$K = \frac{k\rho g}{\mu} \quad (4.5)$$

sendo

$$\left\{ \begin{array}{l} K \text{ a condutividade hidráulica em } m^2 s^{-1} \\ k \text{ a permeabilidade expressa em } m^2 \\ \rho \text{ a massa específica do fluido em } kg m^{-3} \\ \mu \text{ a viscosidade em } kg m^{-1} s^{-1} \end{array} \right.$$

A condutividade hidráulica foi estimada a partir da lei de Darcy, conforme a equação 4.6, para o fluxo em meios porosos:

$$Q = \frac{KA\Delta P}{L} \quad (4.6)$$

sendo

$$\left\{ \begin{array}{l} K \text{ a condutividade hidráulica} \\ Q \text{ a vazão em } m^3 s^{-1} \\ A \text{ a área da seção transversal em } m^2 \\ L \text{ o comprimento da colina do leito fixo em m} \end{array} \right.$$

Para os cálculos de adsorção experimental os resultados foram convertidos para cm/h , tendo em vista a garantia da visualização de escalas de mais fácil apreciação.

4.1.6 Gradiente hidráulico

O gradiente hidráulico no sistema é equivalente à perda de carga ou à diferença manométrica entre a entrada do sistema e a saída, pode ser entendida como gradiente de pressão dado pelo equacionamento 4.6. A diferença de carga foi medida a partir de duas buretas acopladas com mangotes flexíveis sendo representada na equação simplesmente por ΔP .

4.1.7 Parâmetros de fluxo e resistência

O ajuste para o coeficiente de retardo e para a dispersão hidrodinâmica foram realizados pela minimização dos erros na função de transferência segundo a equação proposta (OGATA; BANKS, 1961) nos casos de ausência do retardamento causado pela adsorção:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}} \right) + e^{\frac{ux}{D}} \operatorname{erfc} \left(\frac{x+ut}{2\sqrt{Dt}} \right) \right\} \quad (4.7)$$

Considerando o coeficiente de retardamento (BOUWER, 1991) conforme Freeze & Charry (1979):

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{Rx-ut}{2\sqrt{DRt}} \right) + e^{\frac{ux}{D}} \operatorname{erfc} \left(\frac{Rx+ut}{2\sqrt{DRt}} \right) \right\} \quad (4.8)$$

Tal que, R é o fator de retardo aproximado pela tortuosidade, sendo escrito na seguinte forma :

$$R = \frac{v_p}{v_0} \quad (4.9)$$

Em que::

$$\left\{ \begin{array}{l} R \text{ retardo} \\ v_p \text{ a velocidade de deslocamento a nível de poros em } ms^{-1} \\ v_0 \text{ a velocidade de dispersão do soluto em } ms^{-1} \end{array} \right\}$$

ou

$$R = \left(1 + \frac{k_d \rho}{\varepsilon} \right) \quad (4.10)$$

Sendo:

$$\left\{ \begin{array}{l} R \text{ retardo} \\ k_d \text{ o coeficiente de pdistribuição } m^3 kg^{-1} \\ \rho \text{ a massa específica em } kgm^{-3} \end{array} \right\}$$

implicando em uma migração transiente com base no acúmulo pelo adsorvato (OGATA; BANKS, 1961; GUPTA; BHATTACHARYYA, 2011; NASCIMENTO et al., 2020), conforme a equação 4.11:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C - v \nabla C \quad (4.11)$$

O termo completo para a equação de transporte pode ser simulado, porém as condições apresentadas pelo problema não implicam em decaimento ou em mecanismos mais complexos de transporte.

4.1.8 Avaliação quantitativa

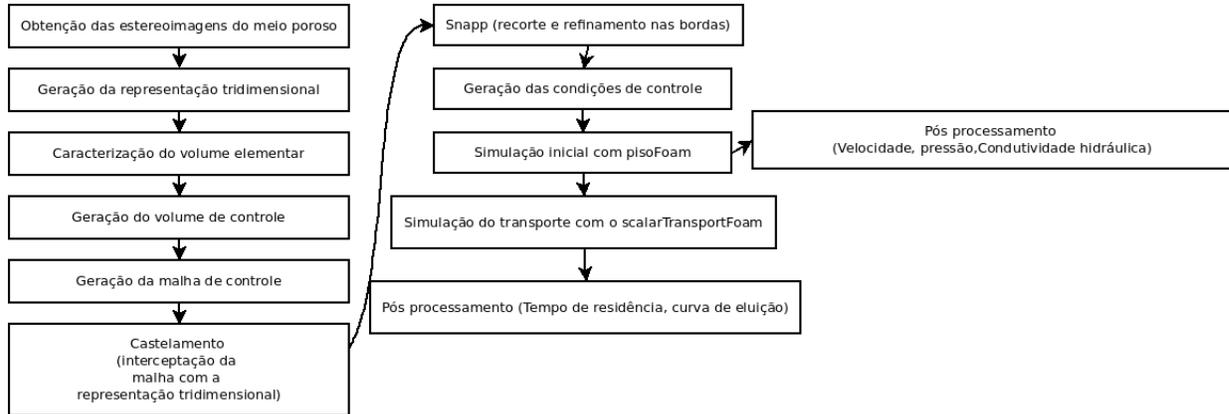
Em posse dos dados de fluxo, retardo e condutividade hidráulica, foi avaliado a compatibilidade dos modelos de Freezy & Cherry com a resolução numérica pelo método de transferência de massa conforme as equações 4.11 e 4.8 e os resultados experimentais obtidos. Levando ainda em consideração o regime de fluxo e a predominância do modelo de transporte.

Para tal, foram avaliados os fatores adimensionais, sendo o número de Reynolds, Forchheimer utilizados para validar a ponderação de regime daciniano e o número de Péclet para avaliação da dominância dos processos de transporte por difusão ou convecção.

4.2 Pré-processamento, processamento e pós processamento

Na figura 4.2 abaixo é apresentada a metodologia utilizada para a simulação do meio, conforme segue nos subitens a seguir:

Figura 4.2 – Diagrama da metodologia utilizada



Fonte: do Autor, 2022

4.2.1 Geração do meio

A geração do meio foi realizada pela obtenção de duas fotografias representativas da seção transversal do material, com sobreposição de 80% com uma câmera de 20 MP e distância focal de 2.2. As fotos foram tiradas a uma distância de 10 cm da amostra em um suporte simplificado e com um espaçamento de 3,0 cm entre as imagens. Foi realizado o tratamento das imagens com a suavização e preenchimento de falhas usando a biblioteca do python OpenCV, com a realização de suavização gaussiana, preenchimento de falhas por convolução de um kernel para médias. A obtenção da estereo imagem foi realizada com as bibliotecas Numpy e OpenCV (VIRTANEN et al., 2020), utilizando o processo de triangulação para geração de uma nova imagem com dados de distância relativa em profundidade por gradiente de cinza.

4.2.2 Superfície tridimensional

Após a elaboração da imagem com dados de profundidade foi realizado a conversão da imagem estereoscópica para formato tridimensional no formato .obj onde os dados de profundidade da ortofoto foram convertidos para um modelo de superfície triangular.

4.2.3 Volume Elementar Representativo- REV

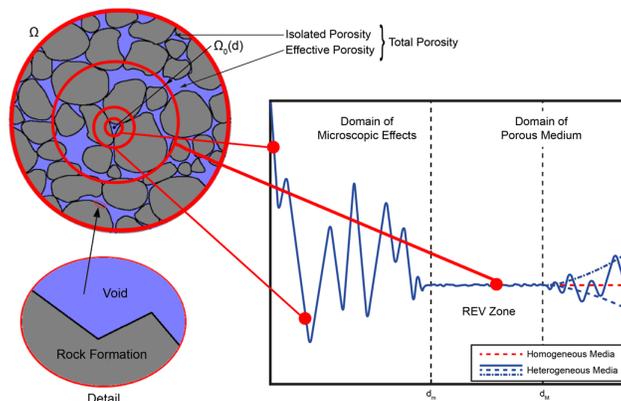
O tipo de equacionamento e as considerações a serem mensuradas dependem da escala de observação, quando tratado em uma escala maior (eg. 1:0,01) as propriedades do meio são homogeneizadas criando condições de isonomia e isotropia que permitem a estimativas de parâmetros médios para o meio em determinadas localidades.

Quanto menor o volume analisado maior a variação das propriedades do meio devido a presença de condições complexas que levam a parâmetros específicos e variáveis no espaço. Este conceito está atrelado na determinação de fatores como a porosidade, tortuosidade e outras características escalares associadas ao meio poroso.(BACHMAT; BEAR, 1987).

A figura 4.3 apresenta um diagrama de representação do volume representativo em função da porosidade. De tal forma que a mesma pode ser obtida pela seguinte função espacial:

$$f(x) = \begin{cases} x = 1, & \text{se } x \text{ é poro.} \\ x = 0, & \text{se } x \text{ é matriz.} \end{cases} \quad (4.12)$$

Figura 4.3 – Volume elementar representativo para a porosidade



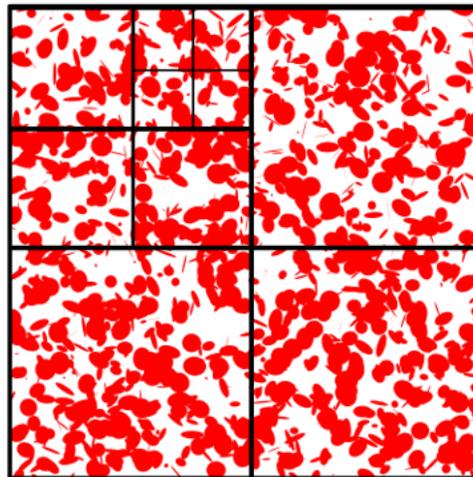
Fonte: (DRUETTA et al., 2016)

As flutuações do volume elementar ainda são desconsideradas em diversas simulações computacionais, mesmo em vários estudos com microtomografia de raio-x. Borges(2018) apresenta em sua caracterização essa dificuldade de garantia da representatividade dada a escala das análises, uma

vez que o meio analisado, o solo, possui elevada anisotropia em escalas micrométricas (BORGES et al., 2018). No mesmo trabalho é citado que o REV na escala de 17 mm^3 é capaz de representar os valores de conectividade e tortuosidade para solos.

A caracterização do meio foi realizada por meio de segmentação da imagem com o fracionamento e cálculo da minimização das diferenças em cada subdivisão; O algoritmo foi implementado com a biblioteca OpenCV seguindo na figura 4.4 abaixo o exemplo da discretização:

Figura 4.4 – Metodologia de caracterização do REV para porosidade



Fonte: do Autor, 2022

A menor escala foi de $0,1 \text{ mm}^2$, sendo considerada a porosidade média em termos superficiais internas ao volume de controle como parâmetro de análise para minimização dos residuais.

4.2.4 Geração da malha

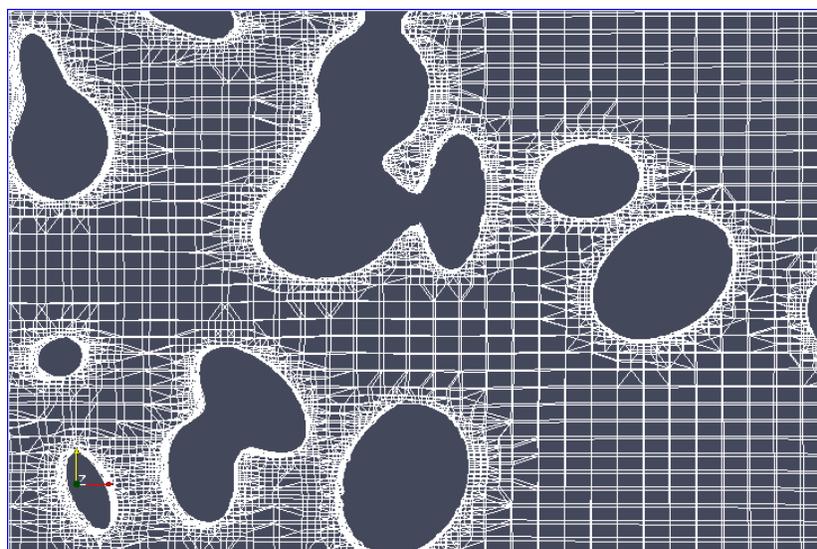
Para a geração da malha foi realizado o fatiamento da renderização tridimensional para obtenção de um corte com informações da matriz original de maneira representativa. De tal forma que o problema pudesse ser reduzido a uma fina superfície, o que reduz a demanda computacional para a resolução via volumes finitos. O método dos volumes finitos se dá pela discretização do espaço

em volumes de controle, sendo possível aplicar diretamente as equações de conservação de massa e de momento. Aplicando assim os fluxos nos nós pelo balanço nas faces, garantindo assim melhor convergência mesmo em problemas anisotrópicos ou que envolvam turbulência.

A geração da malha de controle foi feita pela formação de um bloco com espessura de 2 mm na malha obtida anteriormente para o volume elementar representativo. Utilizando a rotina do blockMesh, que gera uma malha com volume de controle prismático para a discretização do meio, gerou-se uma malha de 0,028 x 0,022 x 0,002 m com espaçamento de 500 blocos em x, 500 em y e 2 em z. Criando 6 superfícies de controle, com as condições estabelecidas na entrada, na saída e nas faces laterais.

A partir da malha inicial foi ajustado a malha à superfície gerada por meio da rotina snappyHex-Mesh¹, onde realizou-se o refinamento da mesma na área superficial para um melhor ajuste e convergência dos valores. Conforme pode ser visto na figura 4.5.

Figura 4.5 – Exemplo de detalhamento da malha



Fonte: do Autor

Foi adotado como condição de contorno a simetria de fluxo para as paredes laterais e valor inicial de velocidade 0 para a entrada e uma pressão estática de entrada equivalente a fração final do

¹ <http://www.wolfodynamics.com/wiki/meshing_OF_SHM.pdf>

meio, considerando a perda de carga homogênea de 27,45 Pa por centímetro, ou seja, foi utilizado uma pressão de 0,27 Pa na entrada e a saída livre com pressão 0 Pa .

4.2.5 Geração dos parâmetros iniciais

Para garantir a convergência e reduzir o custo computacional foi realizada uma simulação inicial, garantindo assim a geração dos parâmetros iniciais nas seguintes condições:

- regime estacionário
- pressão de entrada constante
- forças viscosas desprezíveis ($Re < 1$)
- regime laminar
- O modelo de turbulência utilizado foi o k-e

Dada as condições consideradas foi utilizado o modelo RAS (Reynolds Averaged Simulation) para os cálculos de fluxo considerando a turbulência, com os solvers pcg (Preconditioned conjugate gradient) para a pressão e o solver pbicg (Preconditioned bi-conjugate gradient) para a velocidade. Por meio da rotina *pisoFOAM* (ISSA, 1986).

A discretização temporal utilizada foi estipulada conforme estimado a velocidade do meio e dividindo em proporção à discretização espacial utilizada sendo o espaçamento de 0,02s, sendo o critério de convergência os residuais gerados estipulado na faixa de 10^{-7} .

As rotinas foram rodadas em processamento paralelo, com paralelismo simplificado por regiões por meio da decomposição da malha² em 10 subdomínios. Para tal utilizou-se um processador Ryzen 3900, dos quais foram utilizados 20 threads, gastando um período de 8 horas e 64 Gb de memória RAM. Como teste de malha foi utilizado a rotina *checkMesh*, a qual a não ortogonalidade ficou em média de 13, passando em todos os testes de angulação e acoplamento, ainda gerando bons resultados de convergência para o número de Courant.

² <<https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v6-running-applications-parallel/>>

4.2.6 Porosidade

A porosidade no meio simulado foi calculada pela diferença entre o volume da malha de elemento de controle e o volume da malha gerado após o castelamento realizado com o `snappyHexMesh`.

O volume de poros encontrado foi de:

$V_p = 4,9857 \times 10^{-8}$ e o volume total pelo `blockMesh` foi:

$V_t = 1,2961 \times 10^{-7}$

4.2.7 Velocidade

A velocidade média foi estimada com o uso do `paraview`, o `ParaView` é um software de plataforma múltipla de código aberto para visualização científica interativa e possui ferramentas de análise de fluxo e de propriedades escalares e vetoriais por meio de análises estatísticas e numéricas como histogramas e integrações. Sendo considerado o `boxplot` pela análise estatística dos dados obtidos na simulação como condição média do meio.

4.2.8 Condutividade hidráulica

A permeabilidade do meio poroso simulado foi obtida por meio da integração dos parâmetros de velocidade no volume de poros simulado, seguindo a equação 4.13, sendo posteriormente calculado a condutividade hidráulica pela equação 4.5 .

$$k = \mu \left(\frac{P_1 - P_0}{L_x} \right)^{-1} \left(\frac{1}{V} \int_V v_x dV \right) \quad (4.13)$$

4.2.9 Transferência de calor (simplificação da TM)

Para a simulação, conforme a equação 4.11, foi realizada a analogia com a transferência de calor para o meio, sendo utilizados os dados de dispersão hidrodinâmica e retardamento calculados experimentalmente.

Sendo assim foi utilizado os parâmetros de fluxo calculados e a aproximação do modelo de fluxo de massa pela equação do transporte ajustado pela modificação do solver de transferência de massa nativo do `OpenFOAM` com a rotina `scalarTransportFoam`.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Segue abaixo os resultados obtidos para este trabalho, conforme apresentado na tabela 5.1:

Tabela 5.1 – Dados obtidos do adsorvente

Parâmetro	Experimental	Método proposto	Unidade
Massa específica	2470	-	kgm^{-3}
Massa específica aparente	1170	-	kgm^{-3}
ε	0,5229	0,3845	-
q	$6,71 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-4}$	ms^{-1}
v	$1,29 \times 10^{-3}$	$2,12 \times 10^{-3}$	ms^{-1}
K	$3,84 \times 10^{-5}$	$1,69 \times 10^{-3}$	m^2s^{-1}
D	$1,29 \times 10^{-2}$	-	m^2s^{-1}

Fonte:do Autor, 2022

A massa específica de partículas encontrada experimentalmente foi de $2,47 \text{ gcm}^{-3}$ sendo tal valor elevado para o material, tal discrepância se deve à presença de areia na mistura, cuja massa específica de partículas gira em torno de $2,9 \text{ gcm}^{-3}$. A massa específica média apresentada pelo material na coluna foi de $1,17 \text{ gcm}^{-3}$, sendo esse valor considerando para o cálculo do volume de poros da coluna. A partir desses dados foi calculado o volume poroso conforme apresentado anteriormente, de tal forma que o volume poroso encontrado na coluna como um todo foi de $160,7 \text{ cm}^3$.

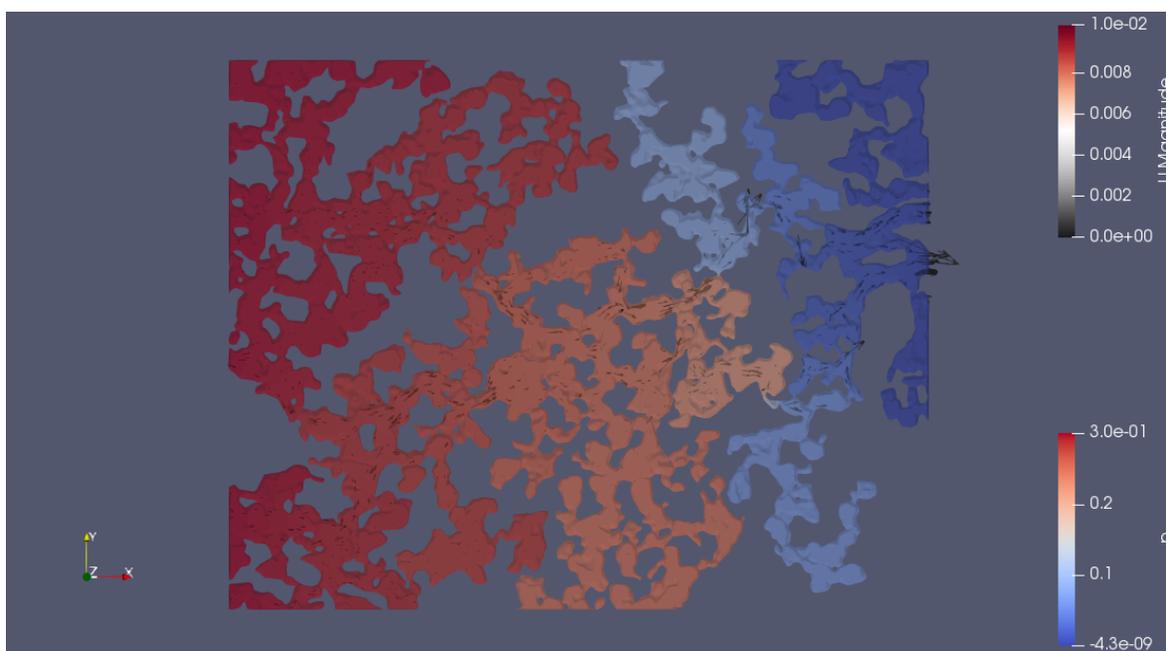
A porosidade determinada experimentalmente foi de 0,5229, enquanto a calculada computacionalmente foi de 0,3845, tal diferença se deve principalmente à estrutura de meso e microporosidade nas partes internas da alga.

A vazão média na coluna para uma carga fixada de 4 cm foi de $3725 \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$, correspondendo assim à um fluxo médio de $242,66 \text{ cmh}^{-1}$, e à uma velocidade de escoamento à nível de poros em torno de 464 cmh^{-1} . Para a simulação computacional os valores médios de fluxo e velocidade a nível de poros, considerando a carga utilizada, foram respectivamente 72 cmh^{-1} e 763 cmh^{-1} .

A condutividade hidráulica obtida experimentalmente foi de $1388,21 \text{ cm}^2\text{h}^{-1}$, por conta das restrições apresentadas no fluxo pelo uso do registro a condutividade hidráulica ficou na faixa de $6,1 \times 10^4 \text{ cm}^2\text{h}^{-1}$, devendo-se considerar a perda de carga imposta pelo registro adicionado no sistema uma vez que a condição de saída livre não é válida.

O resultado da simulação poder ser avaliado na figura 5.1. Sendo apresentado os vetores de velocidade com suas respectivas magnitudes e o gradiente de pressão ao longo do volume de poros do elemento da coluna.

Figura 5.1 – Resultado da simulação



Fonte: do Autor,2022

Os resultados obtidos na simulação computacional apresentaram algumas divergências em relação aos experimentalmente, conforme visto na tabela 5.1. Tais discrepâncias podem estar associadas à presença de zonas mortas no material como pode ser observado na figura 5.1.

Esse efeito em materiais granulares é bem menor, sendo uma diferença significativa para o processo, que pode ser ajustada pelo ajuste da metodologia de geração com a aplicação de resina líquida e o corte de mais seções representativas.

O valor de k_d , obtido por (SILVA et al., 2021a) foi utilizado para o cálculo preliminar do fator de retardo a taxa de remoção. Sendo o k_d na ordem de $0,01 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1}$, implicando em um coeficiente de retardo de 1,047. A taxa de adsorção máxima para o cromo foi de $0,0455 \text{ mg g}^{-1}$, indicando uma baixa interação com o substrato mesmo em tempos de contato prolongados.

Os resultados obtidos para o cromato refletem a não interação entre o cromato e a superfície da alga, sendo assim o cromo para o atual experimento funcionou como um traçador para validação do modelo de transporte quase sem apresentar sorção significativa no meio. O número de Péclet obtido foi alto, indicando a prevalência dos processos de advecção no transporte, sendo calculado a partir do coeficiente de difusão hidrodinâmico de $4645,96 \text{ cm}^2\text{h}^{-1}$, ou $1,29 \times 10^{-2} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, valor extremamente alto para o processo.

Tabela 5.2 – Dados obtidos do adsorvente

	D	R	R^2
Experimental	$1,29 \times 10^{-2} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$	1,042	0,90
Simulação	$4,29 \times 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$	4,29	0,66

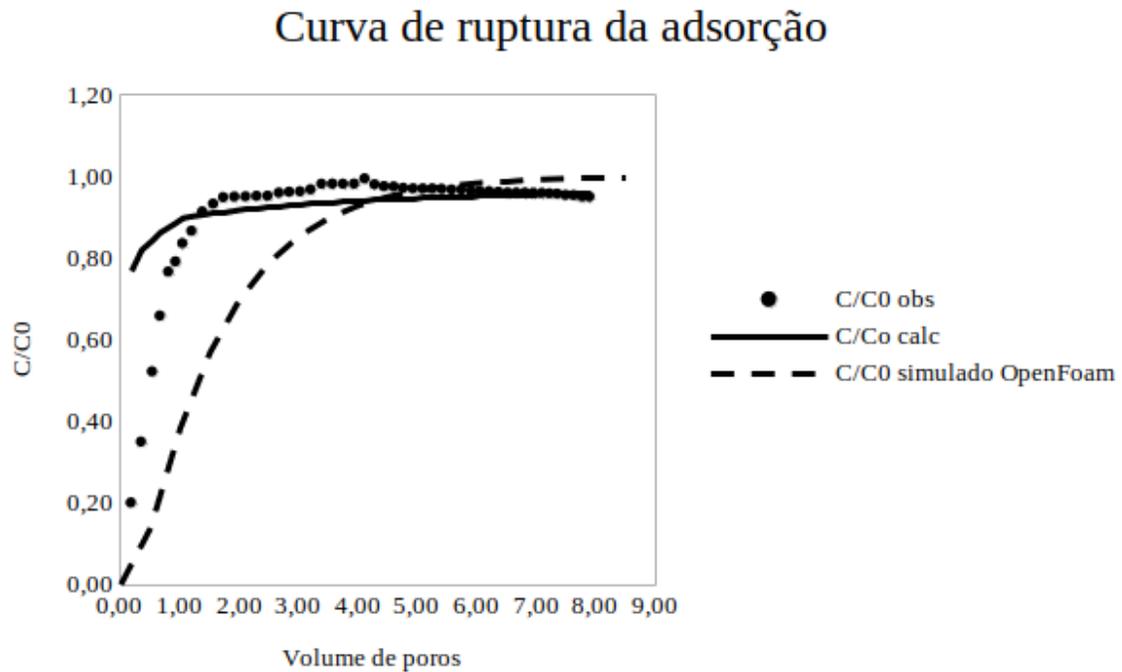
Fonte:do Autor, 2022

O filtro tem taxa de filtração de $58 \text{ m}^3\text{m}^{-2}\text{dia}^{-1}$, valor que já se enquadra entre filtro rápido e filtro lento. Mostrando assim características de fluidificação do meio.

Para solutos não reativos, o valor de R é igual à unidade e, portanto, o soluto é transportado com a mesma velocidade de percolação do solvente. Para solutos reativos, $R > 1,0$, sendo estes transportados a uma velocidade menor do que a do solvente, graças ao acúmulo no meio. Tal condição foi poco observada uma vez que o retardo foi pequeno, indicando uma baixa resistênciã do material poroso e uma baixa reação entre o cromato e o meio poroso.

Mesmo com as condições apresentadas os resultados ainda permitem comparação como pode ser visto no gráfico representado na figura 5.2.

Figura 5.2 – Ajuste entre os modelos



Fonte: do Autor, 2022

na qual os menores valores de velocidade média no meio simulado contribuíram para um maior fator de retardo, implicando em um tempo de contato relativamente maior e a presença de deslocamento difusivo nestas áreas.

6 CONCLUSÃO

A metodologia utilizada para geração da malha mostrou baixa capacidade de representar o meio poroso, tanto para a caracterização das propriedades básicas como porosidade e condutividade, quanto para o uso na simulação de processos computacionais. Cabendo a possibilidade de melhoria com a implementação de caracterização por cortes ao invés de reconstrução da superfície.

Apesar dos valores discrepantes para a caracterização da alga há a possibilidade do uso das propriedades obtidas no ensaio de coluna fixa para o dimensionamento de filtros de acordo com a capacidade requerida, dadas as condições de parâmetros de capacidade máxima adsorvível, concentração de entrada e concentração de saída. Sendo uma alternativa ao modelo BDST de forma mais robusta.

Espera-se uma melhor eficiência da estrutura calcarea da alga como material adsorvente em condições de menores fluxos e em leitos fluidificados quando em forma de menor diâmetro, tendo em vista que os processos de transferência aqui predominantes ocorreram de forma advectiva, e uma das principais vantagens do uso da alga é a precipitação em superfície e a adsorção em camadas por suas elevadas cargas superficiais e sua capacidade tampão em pH próximo a 8.

O uso da fluidodinâmica computacional é de suma importância para a previsão e aperfeiçoamento dos modelos tradicionais, servindo como alternativa e complementação para refino dos mecanismos de transporte e desenvolvimento de materiais, metodologias para aplicação mais rigorosa na engenharia de processos de tratamento de efluentes e na remediação de sítios contaminados.

É válido citar que o maior problema encontrado foi a ocorrência de encapsulamento do material adsorvente, ficando aberta a possibilidade de trituração do mesmo em partículas mais finas de maneira a elevar sua superfície de contato e o uso apenas do material adsorvente, tendo em vista que foi utilizado material com 50% em volume de areia, basicamente inerte e de baixa contribuição para o fluxo.

REFERÊNCIAS

- ALMEIDA, A. E. da S. et al. Iron removal by fixed-bed adsorption with thermochemically treated lithothamnium calcareum algae. **Environmental Technology & Innovation**, Elsevier, v. 24, p. 101888, 2021.
- AMIRTHARAJAH, A.; MILLS, K. M. Rapid-mix design for mechanisms of alum coagulation. **Journal-American Water Works Association**, Wiley Online Library, v. 74, n. 4, p. 210–216, 1982.
- BACHMAT, Y.; BEAR, J. On the concept and size of a representative elementary volume (rev). In: **Advances in transport phenomena in porous media**. [S.l.]: Springer, 1987. p. 3–20.
- BATTIATO, I. et al. Theory and applications of macroscale models in porous media. **Transport in Porous Media**, Springer, v. 130, n. 1, p. 5–76, 2019.
- BEAR, J. **Dynamics of fluids in porous media**. [S.l.]: Courier Corporation, 1988.
- BEAR, J.; CHENG, A. H.-D. **Modeling groundwater flow and contaminant transport**. [S.l.]: Springer, 2010. v. 23.
- BORGES, J. A. et al. X-ray microtomography analysis of representative elementary volume (rev) of soil morphological and geometrical properties. **Soil and Tillage Research**, Elsevier, v. 182, p. 112–122, 2018.
- BOUWER, H. Simple derivation of the retardation equation and application to preferential flow and macrodispersion. **Groundwater**, Wiley Online Library, v. 29, n. 1, p. 41–46, 1991.
- BROWN, G. Henry darcy and the making of a law. **Water Resources Research**, Wiley Online Library, v. 38, n. 7, p. 11–1, 2002.
- CLARK, R. M. Evaluating the cost and performance of field-scale granular activated carbon systems. **Environmental science & technology**, ACS Publications, v. 21, n. 6, p. 573–580, 1987.
- CONAMA, R. N. 430, de 13 de maio de 2011. **Dispõe sobre as condições e padrões de lançamento de efluentes, complementa e altera a Resolução**, Conselho Nacional do Meio Ambiente, n. 357, 2011.
- DELHOMÉNE, M.-C.; HEITZ, M. Biofiltration of air: a review. **Critical reviews in biotechnology**, Taylor & Francis, v. 25, n. 1-2, p. 53–72, 2005.
- DENISON*, C.; CARLSON, W.; KETCHAM, R. Three-dimensional quantitative textural analysis of metamorphic rocks using high-resolution computed x-ray tomography: Part i. methods and techniques. **Journal of Metamorphic Geology**, Wiley Online Library, v. 15, n. 1, p. 29–44, 1997.
- DIAS, G. Granulados bioclásticos: algas calcárias. **Revista Brasileira de Geofísica**, SciELO Brasil, v. 18, p. 307–318, 2000.
- DRUETTA, P. et al. Methods in oil recovery processes and reservoir simulation. **Advances in Chemical Engineering and Science**, Scientific Research Publishing, v. 6, n. 4, p. 39–435, 2016.

EMROOZ, H. B. M. et al. Adsorption mechanism of a cationic dye on a biomass-derived micro-and mesoporous carbon: structural, kinetic, and equilibrium insight. **Biomass Conversion and Biorefinery**, Springer, v. 11, n. 3, p. 943–954, 2021.

FOURIE, W. et al. The simulation of pore scale fluid flow with real world geometries obtained from x-ray computed tomography. In: **Proceedings of the Boston COMSOL conference**. [S.l.: s.n.], 2007.

FRANCO, C. S. **Sistema alternativo de tratamento de água em escala descentralizada**. Tese (Doutorado) — Tese de Doutorado—Universidade Federal de Lavras 2015, 113f. Lavras-MG, 2015.

FU, J.; THOMAS, H. R.; LI, C. Tortuosity of porous media: Image analysis and physical simulation. **Earth-Science Reviews**, Elsevier, v. 212, p. 103439, 2021.

GHANBARIAN, B. et al. Tortuosity in porous media: a critical review. **Soil science society of America journal**, Wiley Online Library, v. 77, n. 5, p. 1461–1477, 2013.

GIDASPOW, D.; JUNG, J.; SINGH, R. K. Hydrodynamics of fluidization using kinetic theory: an emerging paradigm: 2002 flour-daniel lecture. **Powder Technology**, Elsevier, v. 148, n. 2-3, p. 123–141, 2004.

GUPTA, S. S.; BHATTACHARYYA, K. G. Kinetics of adsorption of metal ions on inorganic materials: a review. **Advances in colloid and interface science**, Elsevier, v. 162, n. 1-2, p. 39–58, 2011.

HAJIZADEH, A.; SAFEKORDI, A.; FARHADPOUR, F. A. A multiple-point statistics algorithm for 3d pore space reconstruction from 2d images. **Advances in water Resources**, Elsevier, v. 34, n. 10, p. 1256–1267, 2011.

HORGUE, P. et al. An open-source toolbox for multiphase flow in porous media. **Computer Physics Communications**, Elsevier, v. 187, p. 217–226, 2015.

HU, K. C. et al. Three-dimensional numerical modeling of the interaction of dam-break waves and porous media. **Advances in Water Resources**, Elsevier, v. 47, p. 14–30, 2012.

HUYSMANS, M.; DASSARGUES, A. Review of the use of pécelet numbers to determine the relative importance of advection and diffusion in low permeability environments. **Hydrogeology Journal**, Springer, v. 13, n. 5, p. 895–904, 2005.

ICARDI, M. et al. Pore-scale simulation of fluid flow and solute dispersion in three-dimensional porous media. **Physical review E**, APS, v. 90, n. 1, p. 013032, 2014.

ISSA, R. I. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 62, n. 1, p. 40–65, 1986.

KETCHAM, R. A.; CARLSON, W. D. Acquisition, optimization and interpretation of x-ray computed tomographic imagery: applications to the geosciences. **Computers & Geosciences**, Elsevier, v. 27, n. 4, p. 381–400, 2001.

- KNOP, A.; THOMÉ, A. **Movimento de contaminantes no solo**. [S.l.]: Artigo Geotecnia e meio ambiente, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. 14f, 2004.
- KRUMBEIN, W.; MONK, G. Permeability as a function of the size parameters of unconsolidated sand. **Transactions of the AIME**, OnePetro, v. 151, n. 01, p. 153–163, 1943.
- LOPES, N. M. Suplementação de vacas leiteiras com farinha de algas (lithothamnium calcareum). 2012.
- LÓPEZ-BENITO, M. Estudio de la composición química del lithothamnium calcareum (aresch) y su aplicación como corrector de terrenos de cultivo. Consejo Superior de Investigaciones Científicas (España), 1963.
- MENDES, C. M. **Process for producing a marine mineral concentrate made from lithothamnium seaweed, and the marine mineral concentrate obtained therefrom**. [S.l.]: Google Patents, 2013. US Patent App. 13/442,277.
- NASCIMENTO, R. F. d. et al. Adsorção: aspectos teóricos e aplicações ambientais. 2020.
- NOGUEIRA, M. F. M. et al. Estudo do efeito da adição de material granulado bioclástico (lithothamnium calcareum) aplicado na remoção de carga orgânica e poluentes no tratamento de efluentes em biorreator aeróbio. Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, 2019.
- NUNES, G. L. et al. Difusibilidade em meios porosos via modelagem computacional. 2015.
- OGATA, A.; BANKS, R. B. **A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media: fluid movement in earth materials**. [S.l.]: US Government Printing Office, 1961.
- OKABE, H.; BLUNT, M. J. Pore space reconstruction using multiple-point statistics. **Journal of petroleum science and engineering**, Elsevier, v. 46, n. 1-2, p. 121–137, 2005.
- OKABE, H.; BLUNT, M. J. Pore space reconstruction of vuggy carbonates using microtomography and multiple-point statistics. **Water Resources Research**, Wiley Online Library, v. 43, n. 12, 2007.
- PARKER, J. C.; GENUCHTEN, M. T. V. et al. Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments. Virginia Agricultural Experiment Station, 1984.
- PATIL, S.; CHORE, H. Contaminant transport through porous media: An overview of experimental and numerical studies. **Advances in environmental research**, Techno-Press, v. 3, n. 1, p. 45–69, 2014.
- QIU, H. et al. Critical review in adsorption kinetic models. **Journal of Zhejiang University-Science A**, Springer, v. 10, n. 5, p. 716–724, 2009.
- RESENDE, D. I. et al. Trends in the use of marine ingredients in anti-aging cosmetics. **Algal Research**, Elsevier, v. 55, p. 102273, 2021.

- SADEGH, H.; ALI, G. A. Potential applications of nanomaterials in wastewater treatment: nanoadsorbents performance. In: **Research Anthology on Synthesis, Characterization, and Applications of Nanomaterials**. [S.l.]: IGI Global, 2021. p. 1230–1240.
- SAMSTAG, R. W. et al. Cfd for wastewater treatment: an overview. **Water Science and Technology**, IWA Publishing, v. 74, n. 3, p. 549–563, 2016.
- SILVA, J. R. M. e. et al. Adsorption of metal ions in red marine algae lithothamnium calcareum in the treatment of industrial effluents. **Revista Ambiente & Agua**, scielo, v. 16, 00 2021. ISSN 1980-993X. Disponível em: <http://old.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1980-993X2021000500306&nrm=iso>.
- SILVA, R. P. da et al. Characterisation and traceability of calcium carbonate from the seaweed lithothamnium calcareum. **Solids**, v. 2, n. 2, p. 192–211, 2021. ISSN 2673-6497. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2673-6497/2/2/13>>.
- SILVA, R. P. da et al. Characterisation and traceability of calcium carbonate from the seaweed lithothamnium calcareum. **Solids**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 2, n. 2, p. 192–211, 2021.
- TADDEI, S. R. de A. et al. Effect of lithothamnium sp and calcium supplements in strain-and infection-induced bone resorption. **The Angle Orthodontist**, v. 84, n. 6, p. 980–988, 2014.
- TCHOUNWOU, P. B. et al. Heavy metal toxicity and the environment. **Molecular, clinical and environmental toxicology**, Springer, p. 133–164, 2012.
- TEIXEIRA, P. C. et al. **Manual de métodos de análise de solo**. [S.l.]: Embrapa Brasília, DF, 2017.
- THOMAS, F. W. J.; CRITTENDEN, B. **Adsorption technology and design**. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 1998.
- THOMAS, H. C. Heterogeneous ion exchange in a flowing system. **Journal of the American Chemical Society**, ACS Publications, v. 66, n. 10, p. 1664–1666, 1944.
- TREYBAL, R. E. Stage efficiencies of liquid extraction columns. **Industrial & Engineering Chemistry**, ACS Publications, v. 47, n. 12, p. 2435–2436, 1955.
- VENEU, D. M. et al. Cadmium removal by bioclastic granules (lithothamnium calcareum): batch and fixed-bed column systems sorption studies. **Environmental technology**, Taylor & Francis, v. 39, n. 13, p. 1670–1681, 2018.
- VIRTANEN, P. et al. Scipy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in python. **Nature methods**, Nature Publishing Group, v. 17, n. 3, p. 261–272, 2020.
- WANG, W. et al. Three-dimensional mesoporous calcium carbonate–silica frameworks thermally activated from porous fossil bryophyte: adsorption studies for heavy metal uptake. **RSC advances**, Royal Society of Chemistry, v. 8, n. 45, p. 25754–25766, 2018.

ZENG, Z.; GRIGG, R. A criterion for non-darcy flow in porous media. **Transport in porous media**, Springer, v. 63, n. 1, p. 57–69, 2006.

ZHOU, Y. et al. Simulation on forecast and control for groundwater contamination of hazardous waste landfill. **Environmental earth sciences**, Springer, v. 72, n. 10, p. 4097–4104, 2014.