UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Investigação Numérica e Experimental de Sistemas de Concentração Solar com Lentes de Fresnel para Desinfecção de Água

Grégori Ullmann

Uberlândia – MG
2025

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Investigação Numérica e Experimental de Sistemas de Concentração Solar com Lentes de Fresnel para Desinfecção de Água

Grégori Ullmann

Orientadores:
Prof. Dr. Marcos Antonio de Souza Barrozo
Prof. Dr. Luiz Gustavo Martins Vieira

Tese de doutorado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Uberlândia – MG
2025

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

U42
2025

Ullmann, Grégori, 1993-
Investigação Numérica e Experimental de Sistemas de Concentração Solar com Lentes de Fresnel para Desinfecção de Água [recurso eletrônico] / Grégori Ullmann. - 2025.

Orientador: Marcos Antonio de Souza Barrozo.
Coorientador: Luiz Gustavo Martins Vieira.
Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Pós-graduação em Engenharia Química.
Modo de acesso: Internet.
DOI http://doi.org/10.14393/ufu.te.2025.454
Inclui bibliografia.
Inclui ilustrações.

1. Engenharia química. I. Barrozo, Marcos Antonio de Souza, 1961-, (Orient.). II. Vieira, Luiz Gustavo Martins,1976-, (Coorient.). III. Universidade Federal de Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Química. IV. Título.

CDU: 66.0

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:
Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química
Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 1K, Sala 206 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902
Telefone: (34)3239-4249 - www.ppgeq.feq.ufu.br - secppgeq@feq.ufu.br

ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-graduação em:	Engenharia Química				
Defesa de:	Tese de Doutorado, 11/2025, PPGEQ				
Data:	29 de julho de 2025	Hora de início:	8:30	Hora de encerramento:	11:30
Matrícula do Discente:	12013EQU005				
Nome do Discente:	Grégori Ullmann				
Título do Trabalho:	Investigação Numérica e Experimental de Sistemas de Concentração Solar com Lentes Fresnel para Desinfecção de Água				
Área de concentração:	Desenvolvimento de Processos Químicos				
Linha de pesquisa:	Processos de Separação				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	Estudo de Concentradores Solares				
ODS-ONU:	ODS 6 – Água Potável e Saneamento, ODS 7 – Energia Limpa e Acessível e ODS 11 – Cidades e Comunidades Sustentáveis				

Reuniu-se por meio de webconferência, a Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, assim composta: Professores Doutores: Julio Cesar de Souza Inácio Gonçalves - ICTE/UFTM, Laiane Alves de Andrade - DTQM/UFMT, Danylo de Oliveira Silva - FEQUI/UFU, Fabiana Regina Xavier Batista - PPGEQ/UFU, Luiz Gustavo Martins Vieira - PPGEQ/UFU, coorientador, e Marcos Antonio de Souza Barrozo - PPGEQ/UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Prof. Dr. Luiz Gustavo Martins Vieira, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, agradeceu a presença do público e concedeu ao discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir, o presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente aos examinadores, que passaram a arguir o candidato. Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final considerando o candidato:

Aprovado

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.

Documento assinado eletronicamente por **Luiz Gustavo Martins Vieira**, **Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/07/2025, às 11:32, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Danylo de Oliveira Silva**, **Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/07/2025, às 11:36, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Laiane Alves De Andrade**, **Usuário Externo**, em 29/07/2025, às 11:36, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Fabiana Regina Xavier Batista**, **Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/07/2025, às 11:36, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Marcos Antonio de Souza Barrozo**, **Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/07/2025, às 11:36, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **JULIO CESAR DE SOUZA INACIO GONCALVES**, **Usuário Externo**, em 31/07/2025, às 21:30, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **6546200** e o código CRC **56B69DE2**.

Referência: Processo nº 23117.051677/2025-61 SEI nº 6546200

AGRADECIMENTOS

O desenvolvimento deste trabalho ao longo dos últimos anos não teria sido possível sem a contribuição de diversos profissionais excepcionais e o suporte de pessoas muito importantes em minha vida.

Agradeço aos meus orientadores Luiz Gustavo Martins Vieira e Marcos Antonio de Souza Barrozo por todo apoio, ensinamento, confiança em meu trabalho, parceria e amizade. Principalmente por me apoiarem perante decisões difíceis e serem compreensivos nos momentos de dificuldade. Não somente no período do doutorado, mas ao longo de toda minha jornada na Faculdade de Engenharia Química, vocês foram fundamentais para meu desenvolvimento e me abriram portas para diversas oportunidades sempre que possível. Sou muito privilegiado por ter trabalhado e aprendido com dois grandes nomes da ciência no Brasil.

Aos membros da banca muito obrigado por toda a atenção e pelas contribuições para que este trabalho fosse aprimorado e enriquecido. À professora Patrícia Angélica Vieira e aos colegas do Instituto de Química, Eduardo e Ivo, por todo o ensinamento e apoio no desenvolvimento das metodologias experimentais.

Aos meus pais, Ruben e Mara, à minha irmã Silvia, e à minha esposa Camila por todo o apoio emocional, amor incondicional e por me apoiarem diversas vezes no desenvolvimento deste trabalho. Trilhamos esse caminho juntos dia após dia e sou muito grato a Deus por ter vocês em minha vida. Aos meus sogros Annibale e Maely e a todos os meus amigos que sempre me apoiaram, aconselharam e incentivaram estendo meus agradecimentos, assim como aos colegas de laboratório, república e da UFU. Todos os momentos com vocês me trouxeram muito aprendizado, risadas e leveza para o dia a dia.

Preciso fazer um agradecimento especial a três talentosos colegas de profissão: Diogo, Daiane e Amanda. Sem o auxílio de vocês em diversas etapas deste trabalho os resultados não seriam os mesmos. Muito obrigado pelo suporte que vocês ofereceram de forma incondicional e por me ensinarem tanto.

E por fim, meus profundos agradecimentos à minha segunda casa, a Universidade Federal de Uberlândia. Mais de uma década se passou desde o início na graduação, e a UFU se tornou um grande capítulo da minha vida pessoal e profissional. Obrigado por todas as oportunidades concedidas e pelas pessoas que conheci ao longo desses anos. Onde quer que eu vá levarei com orgulho o nome dessa instituição que foi um divisor de águas em minha vida.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS 1
LISTA DE TABELAS 4
RESUMO 8
ABSTRACT 9
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO 10
1.1 Objetivo geral 12
CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 13
2.1 Água e sua importância no desenvolvimento humano 13
2.2 Acesso à água potável no Brasil 15
2.3 Tecnologias de tratamento de água doméstica 16
2.4 Desinfecção solar da água (SODIS) 17
2.5 Modelos de Cinética de Desinfecção Aplicáveis à SODIS 20
2.6 Unidades de Tratamento Solar de Água 26
2.7 Concentradores Solares 27
2.8 Actinometria com Ferrioxalato de Potássio 30
2.9 Lentes de Fresnel 31
2.10 Lentes de Fresnel na FEQUI-UFU 33
2.11 Fluidodinâmica Computacional (CFD) aplicada ao projeto de fotorreatores 35
CAPÍTULO 3 - MATERIAIS E MÉTODOS 38
3.1 Concepção e Construção das Unidades Experimentais 38
3.1.1 Sistema Concentrador Pontual 38
3.1.2 Sistema Concentrador Linear 40
3.2 Caracterização UV-VIS dos Componentes Ópticos 42
3.3 Espectros de radiação solar e lâmpada halógena 45
3.2 Metodologia Experimental 46
3.2.1 Preparação da solução actinométrica 47
3.2.2 Experimentos de Actinometria (Sistema Concentrador Pontual) 48

3.2.3 Experimentos de Actinometria (Sistema Concentrador Linear)..... 50
3.3 Fluidodinâmica Computacional (CFD)..... 52
3.3.1 Metodologia de Modelagem e Geometrias..... 52
3.3.2 Estratégia de Simulação do Sistemas Concentrador Linear..... 57
3.3.3 Equação de Transporte Radiativo (RTE)..... 59
3.3.4 Modelo de Ordenadas Discretas (DOM)..... 60
3.3.5 Equação de Transporte de Movimento..... 62
3.3.6 Equação de Transporte de Espécies Químicas..... 63
3.3.7 Funções Customizadas (*User-defined functions* - UDFs)..... 64
3.3.7.1 Concentração dos Raios de Luz com Lentes de Fresnel..... 65
3.3.7.2 Recirculação das Espécies Químicas (Sistema Lente Linear)..... 66
3.3.7.3 Cinética de Reação (Sistemas Lente Pontual e Linear)..... 67
3.3.8 Malhas computacionais e discretização angular..... 70
3.3.8.1 Sistema Concentrador Pontual..... 70
3.3.8.2 Sistema Concentrador Linear..... 72
3.3.9 Discretização Angular..... 73
3.4 Planejamento de Simulações (Actinometria com FeOx)..... 75
3.4.1 Sistema concentrador com lente pontual..... 76
3.4.2 Sistema concentrador com lente linear..... 77
3.5 Simulações de Inativação Bacteriana..... 79
3.5.1 Desenvolvimento do modelo cinético e reprodução de resultados da literatura..... 79
3.5.2 Sistema concentrador com lente pontual..... 83
3.5.3 Sistema concentrador com lente linear..... 85
CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO..... 89
4.1 Estudo de Independência de Malha e Discretização Angular..... 89
4.1.1 Sistema concentrador pontual..... 89
4.1.2 Sistema concentrador linear..... 94

4.2 Validação experimental dos modelos computacionais 102
4.2.1 Sistema concentrador pontual 102
4.2.2 Sistema concentrador linear 103
4.3 Efeitos das variáveis operacionais 111
4.3.1 Sistema concentrador pontual 111
4.3.2 Sistema concentrador linear 115
4.4 Cinética de inativação bacteriana 126
4.4.1 Reprodução do modelo computacional de García-Gil et al. (2019) 126
4.4.2 Desempenho do sistema concentrador com lente de Fresnel pontual na desinfecção de *E.coli* 129
4.4.3 Desempenho do sistema concentrador com lente de Fresnel linear na desinfecção de *E.coli* 138
CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES 146
5.1 Conclusões 146
5.2 Sugestões para trabalhos futuros 150
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 151
APÊNDICE A – UDF PARA OBTENÇÃO DAS COORDENADAS DOS CENTROIDES DE CADA ELEMENTO DE CONTROLE DO DOMÍNIO 164
APÊNDICE B – UDF PARA SIMULAÇÃO DO PERFIL DE DIREÇÃO DOS RAIOS DE LUZ (SISTEMAS LENTE LINEAR E PONTUAL) 166
APÊNDICE C – UDF PARA IMPORTAÇÃO DE CAMPO DE RADIAÇÃO INCIDENTE 2D EM GEOMETRIA 3D (SISTEMA LENTE LINEAR) 167
APÊNDICE D – UDF PARA RECIRCULAÇÃO DAS ESPÉCIES QUÍMICAS (SISTEMA LENTE LINEAR) 170
APÊNDICE E – UDF PARA MODELAGEM DA CINÉTICA DA ACTINOMETRIA COM FERRIOXALATO DE POTÁSSIO 175
APÊNDICE F – UDF PARA MODELAGEM DA CINÉTICA DA DESINFECÇÃO DE *E.COLI* (CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017a;GARCÍA-GIL et al., 2019) 177

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Objetivos de desenvolvimento sustentável estabelecidos na ONU.....14
Figura 2.2 – Índice de atendimento total de água no Brasil. 15
Figura 2.3 – Garrafas PET expostas ao Sol em tratamento SODIS. 18
Figura 2.4 – Representação esquemática simplificada de mecanismos de degradação celular induzidos pela radiação solar em um processo SODIS. 20
Figura 2.5 – Representação de uma cinética de desinfecção típica.....21
Figura 2.6 – Exemplos de concentradores solares usualmente aplicados no tratamento de água: a) coletor tipo caixa, b) coletor tipo calha parabólica, c) coletor parabólico composto, d) coletor tipo calha V.....28
Figura 2.7 – Lente convencional e lente de Fresnel. 32
Figura 2.8 – Exemplos de unidades concentradoras com aplicação de lente de Fresnel: a) conversão e armazenamento de energia solar: b) pirólise solar c) dessalinização solar. 33
Figura 3.1 – Unidade experimental com lente de Fresnel do tipo pontual. a) 1-Lente de Fresnel pontual, 2-Estrutura de suporte, 3-Frasco de penicilina com solução actinométrica, 4-lâmpada halógena, 5-célula de medição e radiômetro SolarLight ®. 39
Figura 3.2 – Maquete 3D da unidade experimental com lente de Fresnel linear: a) 1 – lente linear, 2- reator tubular, 3- estrutura de suporte, 4- base superior, 5 – sensor UV do radiômetro, b) 6 - mangueiras opacas, 7 - tanque de PVC de 5L, 8 - agitador mecânico, 9 - válvula de amostragem, 10 - válvula de limpeza, 11- bomba de recirculação, 12 - base rotatória.....40
Figura 3.3 – Fluxograma da operação da unidade concentradora com lente linear. 41
Figura 3.4 – Transmitância (%) da solução de ferrioxalato de potássio 0,04 mol/L.....44
Figura 3.5 – Espectro solar ASTM G-173 AM 1.5 com sua componente direta (AM1.5d) em destaque. Dados do modelo de GUEYMARD, (1995). 45
Figura 3.6 – Irradiância espectral típica para lâmpadas halógenas. 46
Figura 3.7 – Curva de calibração de Fe^{2+} obtida com o preparo de 14 soluções de íons ferrosos, para leitura a 510 nm no espectrofotômetro. 48
Figura 3.8 – Subdivisões consideradas na superfície coletora da lente de Fresnel pontual: (a) representação esquemática da irradiação da superfície da lente; (b) radiações incidentes medidas em cada região.....49
Figura 3.9 – Posicionamento da unidade experimental em relação ao Sol e localização da unidade experimental.....51
Figura 3.10 – Estratégia de modelagem e simulação dos sistemas concentradores propostos. 53

Figura 3.11 – Representação esquemática do domínio computacional 2D de um plano transversal do sistema concentrador linear: (a) Esquema 3D do sistema concentrador linear; (b) Seção transversal κ utilizada nas simulações 2D de radiação. 55
Figura 3.12 – Geometrias representativas dos volumes internos dos reatores utilizados no sistema concentrador pontual. 56
Figura 3.13 – Exemplo de domínio computacional simulado e dimensões 56
Figura 3.14 – Procedimento para simulação do campo de radiação no sistema concentrador linear. 59
Figura 3.15 – Esquema de direções possíveis de raios de luz em direção a um ponto no espaço: a) direções possíveis, b) simplificação via DOM. 61
Figura 3.16 – Sistema de coordenadas angulares. 62
Figura 3.17 – Exemplo das regiões de aplicação dos modelos $k - \varepsilon$ e $k - \omega$ no modelo $k - \omega$ *SST*. 63
Figura 3.18 – Malha computacional gerada para uma simulação do sistema concentrador pontual – D_L = 13,5 cm e V_R = 15 mL. Vista do domínio completo: (a) em perspectiva e (b) frontal. Vista do volume interno do reator: (c) em perspectiva e (d) frontal. 71
Figura 3.19 – Malhas computacionais do domínio 2D em que a etapa de solução da RTE é conduzida: (a) domínio 2D com detalhe para (b) região do reator tubular, destacando-se elementos hexaédricos e tetraédricos. 72
Figura 3.20 – Detalhes do domínio computacional construído para reprodução da modelagem do fotorreator acoplado a um CPC de García-Gil et al. (2019): a) dimensões da geometria; b) corte transversal da malha híbrida de 482590 elementos. 80
Figura 3.21 – Espectro de transmitância de lentes de Fresnel lineares de diferentes tipos de materiais. 86
Figura 4.1 – Efeito do tamanho de malha e da discretização angular na radiação média incidente dentro do fotorreator – sistema concentrador pontual. 90
Figura 4.2 – Efeito da discretização angular no cálculo do campo de radiações do sistema concentrador pontual. Malha de 359.782 elementos: (a) 3x3 – simulação 1; (b) 10x10 – simulação 5; (c) 15 x 15 – simulação 9. 92
Figura 4.3 – Efeito do tamanho de malha no cálculo do campo de radiações do sistema concentrador pontual com ângulos de controle 15x15. (a) 359.782 elementos; (b) 597.107 elementos; (c) 1.198.061 elementos. 93
Figura 4.4 – Efeito do tamanho de malha e da discretização angular na radiação média incidente dentro do fotorreator – sistema concentrador linear. 94

Figura 4.5 – Efeito da discretização angular no cálculo do campo de radiações do sistema concentrador linear. Malha de 177.027 elementos (a) 3x10 – simulação 4 (b) 3x60 – simulação 8. 96
Figura 4.6 – Efeito do tamanho de malha no cálculo do campo de radiações do sistema concentrador linear com ângulos de controle 3x60: (a) 19.633 elementos; (b) 44.519 elementos; (c) 123.957 elementos; (d) 177.027 elementos. 98
Figura 4.7 – Linhas de monitoramento posicionadas ao longo de uma seção transversal do reator tubular. 99
Figura 4.8 – Radiação incidente em linhas de monitoramento posicionadas ao longo de uma seção transversal do reator tubular: a) linha de topo a 9 mm do centro, b) linha central, c) linha de fundo a 9 mm do centro. 100
Figura 4.9 – Concentração de Fe^{2+} ao longo da linha central do plano transversal situado no comprimento intermediário do reator tubular. 102
Figura 4.10 – Resultados experimentais e numéricos dos ensaios de validação com actinometria para o sistema com lente de Fresnel pontual. 103
Figura 4.11 – Resultados experimental e numérico dos ensaios de validação com actinometria para o sistema com lente de Fresnel linear. 104
Figura 4.12 – Formação e circulação de bolhas de ar dentro da solução actinométrica: a) identificação visual; b) remoção das bolhas mediante agitação e condicionamento do tanque antes do início das corridas experimentais. 105
Figura 4.13 – Contornos obtidos para simulação do Ensaio 1: a) radiação incidente ($W \cdot m^{-2}$), b) velocidade ($m \cdot s^{-1}$), c) taxa de reação ($kgmol \cdot m^{-3}s^{-1}$), e d) concentração de íons Fe^{2+} ($kmol \cdot m^{-3}$) 108
Figura 4.14 – Contornos obtidos para simulação do Ensaio 2: a) radiação incidente ($W \cdot m^{-2}$), b) velocidade ($m \cdot s^{-1}$), c) taxa de reação ($kgmol \cdot m^{-3}s^{-1}$), e d) concentração de íons Fe^{2+} ($kmol \cdot m^{-3}$) 109
Figura 4.15 – Contornos obtidos para simulação do Ensaio 3: a) radiação incidente ($W \cdot m^{-2}$), b) velocidade ($m \cdot s^{-1}$), c) taxa de reação ($kgmol \cdot m^{-3}s^{-1}$), e d) concentração de íons Fe^{2+} ($kmol \cdot m^{-3}$) 110
Figura 4.16 – Superfícies de resposta para o fator de concentração (*FC*), índice de uniformidade (UI_{RAD}) e concentração de produto (C_{Fe2+}) em função das variáveis independentes. 112
Figura 4.17 – Contornos de radiação incidente ($W \cdot m^{-2}$) para os ensaios: a) 1; b) 5; c) 9 do planejamento fatorial para a lente de Fresnel pontual. 113

Figura 4.18 – Superfícies de resposta para concentração de Fe^{2+} em função das variáveis independentes para níveis intermediários das terceiras variáveis: a) vazão de recirculação e posição do reator b) radiação solar incidente e posição do reator c) radiação solar incidente e vazão de recirculação.....119
Figura 4.19 – Contornos de radiação incidente e concentração de Fe^{2+} para: Caso 10 (D_L=21,87cm, Q=2,4 L·min^{-1} e I_S=201,25 W·m^{-2}) e Caso 14 (D_L=13,5cm, Q=2,4 L·min^{-1} e I_S=201,25 W·m^{-2}).....120
Figura 4.20 – Contornos de radiação incidente e concentração de Fe^{2+} para: Caso 9 (D_L=5,13cm; Q=2,40 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}), Caso 10 (D_L=21,87cm; Q=2,40 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}) e Caso 15 (D_L=13,50cm; Q=2,40 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}) 121
Figura 4.21 – Contornos de radiação incidente e concentração de Fe^{2+} para: Caso 11 (D_L=13.50cm; Q=0,4 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}), Caso 12 (D_L=13,50cm; Q= 4,40 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}) e Caso 15 (D_L=13,50cm; Q=2,40 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}).....123
Figura 4.22 – Velocidades de escoamento e concentração de Fe^{2+} *versus* posição radial nas linhas transversais ao longo do reator para o Caso 11 (D_L=13.50cm; Q=0,4 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}). Eixo Y corresponde ao eixo vertical em direção à lente de Fresnel. 124
Figura 4.23 – Velocidades de escoamento e concentração de Fe^{2+} *versus* posição radial nas linhas transversais ao longo do reator para o Caso 12 (D_L=13,50cm; Q= 4,40 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}). Eixo Y corresponde ao eixo vertical em direção à lente de Fresnel. 125
Figura 4.24 – Contornos de radiação incidente: a) Resultado reportado por García-Gil et al. (2019); b) resultado obtido na reprodução do modelo 127
Figura 4.25 – Contornos de velocidade: a) Resultado reportado por García-Gil et al. (2019); b) resultado obtido na reprodução do modelo 127
Figura 4.26 – Curva de desinfecção de *E.coli* para diferentes radiações incidentes no CPC de García-Gil et al. (2019).....128
Figura 4.27 – Contornos de radiação UVA incidente no reator (frasco) na simulação com a lente de Fresnel pontual.....131
Figura 4.28 – Cinética de desinfecção de água contaminada por *E.coli* para irradiação com e sem lente de Fresnel: a) concentração de *E.coli;* b) concentração de catalase; c) concentração de superóxido dismutase; d) acúmulo de peróxido de hidrogênio. 133
Figura 4.29 – Contornos de concentração de catalase em três diferentes instantes da simulação com a lente de Fresnel. 135
Figura 4.30 – Contornos de concentração de superóxido dismutase em três diferentes instantes da simulação com a lente de Fresnel. 135

Figura 4.31 – Contornos de concentração de peróxido de hidrogênio em três diferentes instantes da simulação com a lente de Fresnel. 135
Figura 4.32 – Contornos de concentração de *E. coli* em três diferentes instantes da simulação com a lente de Fresnel. 136
Figura 4.33 – Cinética de desinfecção de água contaminada por *E.coli* para irradiação com diferentes tipos de concentrador solar sob irradiação de 35W·m^{-2} e vazão de recirculação de 12,12 L·min^{-1}: a) concentração de *E.coli;* b) concentração de catalase; c) concentração de superóxido dismutase; d) acúmulo de peróxido de hidrogênio. 140
Figura 4.34 – Contornos de radiação incidente e concentração de *E. coli* nos primeiros 5 minutos de irradiação: Lente PMMA-UV, CPC, Lente PMMA. 141
Figura 4.35 – Cinética de desinfecção de água contaminada por *E.coli* com lente de Fresnel linear UV sob irradiação de 35 W·m^{-2} e diferentes vazões de operação: a) concentração de *E.coli;* b) concentração de catalase; c) concentração de superóxido dismutase; d) acúmulo de peróxido de hidrogênio. 142
Figura 4.36 – Contornos de tensão de cisalhamento na parede do reator tubular: a) vazão baixa, b) vazão média, c) vazão alta..... 143
Figura 4.37 – Conversão por passe no reator de acordo com a vazão de recirculação. 144

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Mecanismos de desinfecção solar de *E. coli* baseado na geração de ROS intracelular e inativação das enzimas protetoras. 25
Tabela 3.1 – Valores de radiação UVA incidente nas subdivisões da lente. 49
Tabela 3.2 – Experimentos de actinometria com lente de Fresnel pontual. Radiação incidente média na superfície da lente igual a 10 $W \cdot m^{-2}$. 50
Tabela 3.3 – Experimentos de actinometria com lente de Fresnel linear. 52
Tabela 3.4 – Valores de rendimento quântico e coeficiente neperiano de absorção molar para o ferrioxalato de potássio de acordo com o comprimento de onda. 68
Tabela 3.5 – Parâmetros utilizados na modelagem da reação química de conversão de Fe^{3+} em Fe^{2+} sob irradiação do actinômetro ferrioxalato de potássio. 69
Tabela 3.6 – Tamanhos de malhas para estudo de independência de malha no domínio do ar – sistema concentrador pontual. 71
Tabela 3.7 – Tamanhos de malhas para estudo de independência de malha no sistema concentrador linear 2D. 73
Tabela 3.8 – Tamanhos de malhas para estudo de independência de malha no reator tubular– sistema concentrador linear 3D. 73
Tabela 3.9 – Combinações de número de divisões de ângulos de controle para o estudo de discretização angular – sistema concentrador pontual. 74
Tabela 3.10 – Combinações de número de divisões de ângulos de controle para estudo de discretização angular – sistema concentrador linear. 75
Tabela 3.11 – Planejamento fatorial 3^k para estudo de efeito das variáveis do sistema concentrador pontual. 77
Tabela 3.12 – Variáveis e sua forma codificada – sistema concentrador pontual. 77
Tabela 3.13 – Planejamento composto central para estudo de efeito das variáveis do sistema concentrador linear. 78
Tabela 3.14 – Variáveis e sua forma codificada – sistema concentrador linear. 79
Tabela 3.15 – Condições de contorno e esquemas de resolução empregados por García-Gil et al. (2019). 81
Tabela 3.16 – Condições de contorno e esquemas de resolução empregados nas simulações de desinfecção com e sem lente de Fresnel pontual. 84
Tabela 3.17 – Casos simulados para comparação entre o uso de concentradores com lentes de Fresnel PMMA, PPMA UV e concentrador parabólico composto (CPC). 85

Tabela 3.18 – Casos simulados para análise determinística da vazão na desinfecção de *E. coli* com lente de Fresnel linear. 86
Tabela 3.19 – Condições de contorno e esquemas de resolução empregados nas simulações de desinfecção com lente de Fresnel linear. 88
Tabela 4.1 – Planejamento do estudo de independência de malha e discretização angular – sistema concentrador pontual. 91
Tabela 4.2 – Planejamento do estudo de independência de malha e discretização angular – sistema concentrador linear. 95
Tabela 4.3 – Resultados das simulações de actinometria com ferrioxalato de potássio realizadas no sistema concentrador linear para 4 tamanhos de malha – Radiação incidente genérica igual a 10 $W \cdot m^{-2}$. 101
Tabela 4.4 – Resultados do planejamento fatorial 3^2 para a análise do fator de concentração (FC), índice de uniformidade da radiação (UI_{RAD}) e concentração de Fe^{2+} (C_{Fe2+}) para o sistema concentrador com lente de Fresnel pontual. 111
Tabela 4.5 – Resultados do PCC para o sistema concentrador linear. 116
Tabela 4.6 – Valores de concentração de produto obtidos nos pontos axiais e centrais do PCC. 117

RESUMO

O acesso universal à água é um direito fundamental do ser humano e um dos 17 objetivos de desenvolvimento sustentável da Organização das Nações Unidas. Fatores como pobreza extrema, isolamento geográfico e mudanças climáticas são os principais desafios para garantir o acesso à água de forma segura para uma parcela considerável da população global, principalmente em comunidades rurais de países subdesenvolvidos e em desenvolvimento. Entre as tecnologias existentes para tratamento de água para regiões remotas, destaca-se a desinfecção solar da água (SODIS) que pode ser intensificada com a utilização de concentradores solares que aumentam a intensidade de raios solares, reduzem o tempo necessário de exposição e aumentam a taxa de inativação de microrganismos. Este trabalho avaliou o potencial de concentradores solares alternativos como as lentes de Fresnel pontual e linear em processos fotoativados como a SODIS através do uso de fluidodinâmica computacional para resolução das equações de movimento, radiação e transporte de espécies. Para isso, duas unidades experimentais e seus respectivos modelos computacionais foram desenvolvidos e validados experimentalmente através de actinometria com ferrioxalato de potássio. Planejamentos de simulações foram conduzidos com o intuito de se avaliar o efeito das variáveis operacionais nas principais respostas que caracterizam o desempenho destes concentradores. Nos modelos computacionais foi implementada uma cinética mecanicista de desinfecção de *E. coli* baseado na geração de espécies reativas de oxigênio (ROS) e inativação de enzimas de proteção celular disponível na literatura para avaliação numérica do desempenho destes sistemas concentradores Fresnel. Os resultados obtidos indicam que os modelos computacionais desenvolvidos reproduziram satisfatoriamente os campos de radiação e velocidade, e foi observado um alto potencial de intensificação de radiação nos reatores com o uso das lentes. No sistema concentrador Fresnel linear foi constatado que a vazão de recirculação possui um efeito pequeno na taxa de reação dentro da faixa de 0,4 $L \cdot min^{-1}$ a 3,95 $L \cdot min^{-1}$ e a conversão depende fortemente da posição do reator e da irradiação solar. Resultados de cinética de desinfecção mostraram que para a lente pontual é importante se garantir uma boa distribuição de radiação enquanto na unidade com lente linear é necessário buscar um ponto de equilíbrio entre o aumento do tempo de residência no reator e a fluidodinâmica dentro do reator tubular. Ambos os sistemas concentradores simulados foram capazes de reduzir substancialmente o tempo de tratamento da SODIS convencional considerando as dimensões das unidades experimentais projetadas e os diferentes tipos de lente de Fresnel utilizados.

Palavras-chave: CFD, fotorreator, radiação solar, DOM, SODIS, *E. coli*

ABSTRACT

Universal access to water is one of the United Nation's 17 sustainable development goals and a fundamental human right. However, factors such as extreme poverty, geographical isolation, and climate change pose challenges to ensuring access to safe water for populations located mainly in rural communities in underdeveloped and developing countries. Among the existing technologies for water treatment in remote regions, solar water disinfection (SODIS) stands out, which can be intensified by solar concentrators that increase the intensity of sunlight, shortening the time required for exposure and increasing the rate of microorganism inactivation. This study evaluated the potential of alternative solar concentrators, such as point and linear Fresnel lenses, in photoactivated processes such as SODIS using computational fluid dynamics to solve the equations of momentum, radiation, and species transport. To this end, two experimental units and their respective computational models were developed and validated experimentally through actinometry with potassium ferrioxalate, and a simulation design was conducted to evaluate the effect of operational variables on the main responses that characterize the performance of these concentrators. A mechanistic model of *E. coli* disinfection based on the generation of reactive oxygen species (ROS) and inactivation of cell protection enzymes available in the literature was implemented in the computational models to enable the numerical evaluation of the performance of these Fresnel lens concentrator systems. The results obtained indicate that the computational models developed reproduced the radiation and velocity fields properly, and a high potential for radiation intensification in the reactors was observed using the lenses. In the linear Fresnel concentrator system, it was found that the recirculation flow rate has a small effect on the reaction rate within the range of 0.4 $L \cdot min^{-1}$ to 3.95 $L \cdot min^{-1}$, and the conversion depends mainly on the position of the reactor and solar irradiation. Disinfection kinetics results showed that for the point lens it is important to ensure adequate radiation distribution, while in the unit with a linear lens it is necessary to seek a balance between increasing the fluid's residence time in the reactor and the fluid dynamics inside the tubular reactor. Both solar concentrator systems were able to substantially reduce the treatment time of conventional SODIS to just a few minutes of operation, based on the dimensions of the development of the experimental rigs.

Keywords: CFD, photoreactors, solar radiation, DOM, SODIS, *E. coli*

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

Os métodos de tratamento de água possuem um importante papel no desenvolvimento de sociedades. Há séculos o ser humano tem desenvolvido mecanismos para tratamento de água, desde métodos físicos mais simples como filtração e tratamento térmico até processos químicos mais elaborados como cloração que visam a desinfecção para consumo humano. Além destes métodos, tratamentos com radiação UV visam a remoção de compostos mais difíceis (recalcitrantes) e desinfecção em complementação ou até mesmo substituição a produtos químicos. Muitos desses processos têm sido implementados em unidades de tratamentos de água e efluentes (ETA/ETEs) realizando o tratamento de grandes volumes para áreas urbanas, porém o acesso a água potável e de qualidade ainda não é realidade para toda a população do planeta.

Entre os métodos comumente empregados por comunidades que não possuem fácil acesso à água potável estão os processos de peneiramento, filtração, pasteurização e a desinfecção solar da água (SODIS – *Solar Water Disinfection*). O peneiramento visa realizar a remoção de partículas grandes ao passo que a filtração, geralmente realizada com materiais disponíveis como malhas de tecido, cerâmica, carvão e areia, visa remover particulados mais finos e alguns organismos vivos maiores dependendo do tamanho dos poros. Já a pasteurização e a SODIS são alguns métodos simples para promover a desinfecção da água, reduzindo a concentração de patógenos a níveis não-detectáveis e propiciando uma fonte de água segura para consumo. Entretanto, o processo de pasteurização da água requer o uso de combustíveis para a elevação da temperatura, sendo economicamente e sustentavelmente inviável. Nesse sentido o método SODIS, conhecido há mais de 40 anos, oferece uma alternativa de desinfecção usando uma energia limpa e acessível com relativa abundância em certas partes do globo, a energia solar.

O método SODIS consiste na exposição da água à radiação solar direta por um período mínimo de 6 horas. O líquido é geralmente acondicionado em recipientes transparentes, como garrafas de polietileno tereftalato (PET), maximizando a penetração da radiação ultravioleta. Após esse intervalo, ocorre a redução significativa na concentração de microrganismos patogênicos e os níveis microbianos atingem padrões aceitáveis segundo critérios de potabilidade, não representando risco à saúde humana (não-detecção em amostras de 100 mL). Essa técnica caracteriza-se pela simplicidade operacional e baixo custo, e é uma solução viável em comunidades com infraestrutura hídrica insuficiente, porém sua efetividade depende da manutenção de índices adequados de irradiância solar durante o período de exposição. Dessa

forma, essa condição impõe restrições geográficas à aplicação desse método, especialmente em regiões com baixa incidência solar ou elevada nebulosidade (MCGUIGAN et al., 2012).

A criação de novos modelos de unidades de tratamento solar de água baseia-se em um banco de dados robusto disponível na literatura. Esse repositório inclui modelos de refletores parabólicos (cilíndricos e discos), concentradores solares parabólicos compostos (CPC), espelhos planos não-concentradores, coletores de placa inclinada, refletores do tipo Fresnel e lentes de Fresnel. Apesar de serem usualmente aplicadas em processos de conversão de energia, acredita-se que essas lentes possuem um grande potencial de aplicação no tratamento de efluentes e água visando o consumo humano.

Para apoiar o desenvolvimento de novos tipos de reatores solares, a fluidodinâmica computacional (CFD) tem sido bastante empregada. Com vastas aplicações em diversas áreas da engenharia além do desenvolvimento de reatores, essa área da engenharia possibilita a redução de tempo e custo, e aumento da confiabilidade e segurança no*s* projetos. Diversos estudos de unidades de tratamento de água com o uso tanto de radiação UV artificial quando natural (solar) têm sido elaborados com o auxílio de simulação computacional, o que permite uma ampla gama de dados obtidos em relação a procedimentos experimentais e a análise aprofundada dos fenômenos no interior dos reatores.

Na Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia, o Laboratório de Separação e Energias Renováveis (LASER) tem desenvolvido ao longo da última década diversas pesquisas envolvendo concentradores solares para processos de conversão de biomassa e reaproveitamento de resíduos agroindustriais, e possui uma considerável produção cientifica de aplicação de CFD em processos de separação como hidrociclonagem, secagem, leitos fluidizados e tambores rotativos. Dada a crescente preocupação com as questões que envolvem saneamento básico no mundo e entre elas o acesso à água potável, questionou-se a possibilidade de implementação das Lentes Fresnel para a desinfecção de microrganismos presentes na água.

Dessa forma, este trabalho buscou projetar sistemas de reatores solares para tratamento de água acoplados a concentradores do tipo Lente de Fresnel, linear e pontual, e estudar as características destes sistemas através do desenvolvimento de modelos CFD para a resolução de equações de transporte de momento, radiação e espécies químicas. Para isso, a reação de actinometria com ferrioxalato de potássio foi modelada e utilizada como representativa de reações que absorvem fótons. Por fim, foram analisados os desempenhos dos concentradores propostos na desinfecção da *E. coli* através de simulações com um modelo cinético disponível na literatura que apresentou boa reprodutibilidade e pôde ser implementado.

1.1 Objetivo geral e específicos

O objetivo deste estudo foi projetar e estudar as características de sistemas de reatores acoplados a Lentes de Fresnel visando seu uso em tratamento solar de água, como desinfecção e degradação de contaminantes. Para este propósito, foram estabelecidos os seguintes objetivos específicos descritos a seguir:

1. Projetar, construir e caracterizar unidades de reatores solares acoplados a Lentes de Fresnel pontual e linear.
2. Desenvolver modelos e metodologias de fluidodinâmica computacional para simular os sistemas projetados, bem como validá-los com experimentos de actinometria.
3. Conduzir planejamentos de simulações para verificação dos efeitos das variáveis inerentes de cada sistema nas principais respostas que caracterizam seu desempenho.
4. Estudar numericamente o desempenho dos sistemas propostos na desinfecção e degradação de água contaminada por bactérias, fazendo uso dos modelos desenvolvidos e de cinética validada e disponível na literatura.

CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica a seguir foi estruturada para fornecer uma base sólida sobre os aspectos fundamentais relacionados ao tratamento de água, abordando desde sua importância para o desenvolvimento sustentável até aos métodos de desinfecção solar, em especial o método SODIS (*Solar Water Disinfection*), que utiliza a radiação solar para eliminar microrganismos patogénicos e objeto de estudo desta tese. Para aprofundar esta temática, são analisados diferentes modelos cinéticos de desinfecção e sistemas de tratamento solar de água com foco nos concentradores solares e lentes de Fresnel, que oferecem potencial para aumentar a eficiência da desinfecção. Estudos desenvolvidos na FEQUI-UFU são discutidos e a aplicação da fluidodinâmica computacional (CFD) na simulação e otimização de fotorreatores solares é apresentada como base teórica para a técnica aplicada na presente tese. Desta forma, a revisão estabelece o arcabouço teórico necessário para fundamentar o estudo do sistema concentrador baseado em lentes de Fresnel, auxiliando na compreensão de sua viabilidade e impacto na desinfecção da água.

2.1 Água e sua importância no desenvolvimento humano

A água é o principal elemento do desenvolvimento do ser humano e possui um papel fundamental na saúde dos ecossistemas, cadeias alimentares, seleção natural e nos padrões climáticos. A história do planeta Terra e de seus habitantes baseia-se fundamentalmente nas relações dos indivíduos com as fontes de água potável. A formação de comunidades, cidades, civilizações foi ditada ao longo dos séculos pela proximidade a esta fonte primária de vida de todos os animais e principalmente para os mamíferos. Apesar do nome, 70% da superfície do planeta Terra é coberta por água e deste percentual, 97,5% correspondem ao volume de água salgada presente nos oceanos e mares, e apenas 2,5% são correspondentes a água doce, sendo esta, distribuída em rios, lagos, geleiras, calotas polares e águas subterrâneas.

Apesar de todo o desenvolvimento humano, científico e tecnológico, a escassez de recursos hídricos, principalmente água potável, ainda é realidade na história recente para bilhões de pessoas no mundo, fato pelo qual em 25 de setembro de 2015, líderes de 193 nações estabeleceram o acesso universal equitativo à água segura para todos como um dos 17 objetivos globais de desenvolvimento sustentável (Figura 2.1). Somadas, estas metas oferecem caminhos práticos efetivos para endereçar as causas de conflitos violentos, abusos de direitos humanos, mudanças climáticas e garantir um futuro para todas as pessoas no planeta, e retratam o

entendimento das nações de que o desenvolvimento sustentável em todos os lugares deve integrar o crescimento econômico com o bem-estar social e a proteção ambiental.

Figura 2.1 – Objetivos de desenvolvimento sustentável estabelecidos na ONU.

Fonte: ONU (2015).

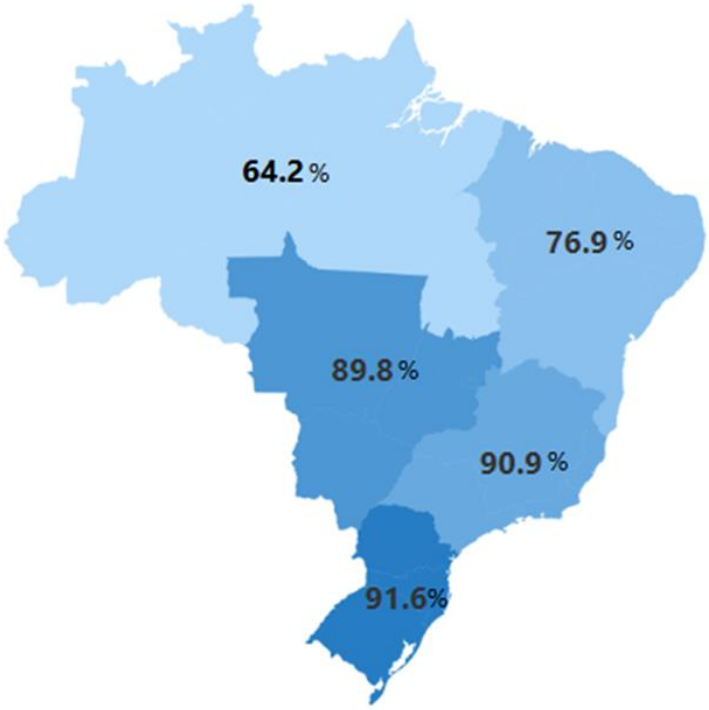
Passados quase 10 anos da definição destas metas, a relevância deste ODS 6 ainda é muito grande, particularmente pelo avanço das mudanças climáticas em um planeta que a cada ano registra recordes de altas temperaturas. Em 26 de outubro de 2023, os níveis de água na bacia do rio Amazonas no porto de Manaus atingiram os menores índices recordados desde 1902. A transição do fenômeno La Niña para o El Niño aparenta ter sido um fator chave para este recorde de tempo quente e seco, combinado com o aquecimento anômalo ao longo de todos os oceanos (ESPINOZA et al., 2024; WMO, 2024).

Além da seca, as mudanças climáticas também potencializam e aumentam a incidência de outros desastres naturais como enchentes que, além dos danos diretos em vidas humanas, animais e construções, também propicia a transmissão de doenças veiculadas pela água. Assim, tanto em eventos de seca extrema quanto em enchentes, doenças causadas por água contaminada são ao lado de problemas psicológicos e mentais uma das maiores consequências em decorrência destes desastres (LEE et al., 2020).

2.2 Acesso à água potável no Brasil

No Brasil, um dos países com as maiores bacias hidrográficas do mundo, entre elas a da Amazônia, aproximadamente 32 milhões de pessoas ainda não possuem acesso a água tratada segundo dados do Sistema Nacional de Informações sobre Saneamento (SNISA, 2022). Como pode-se observar na Figura 2.2, no atual cenário, as regiões Norte e Nordeste possuem os menores índices de atendimento total de água, e a média de abastecimento de água no país corresponde a aproximadamente 85%. Dificuldades de infraestrutura, decisões governamentais e características de clima são alguns dos fatores que contribuem para os índices observados nestas regiões.

Figura 2.2 – Índice de atendimento total de água no Brasil.



Fonte: Adaptado de SNISA (2022).

O impacto do acesso à água tratada e ao saneamento básico de qualidade traz diversos benefícios, principalmente para crianças na fase chamada primeira infância. Sintomas como diarreia e vômito são comuns em doenças transmitidas pela água e, crianças pequenas de até 2 anos, sem o tratamento adequado podem sofrer sérios danos e problemas no desenvolvimento ou podem ser levadas a óbito devido a subnutrição e desidratação. A implantação de sistemas de coleta de esgoto e tratamento de água em mais regiões no Brasil foi fundamental para uma redução significativa nos quadros de diarreia infantil, observando-se um comportamento

inversamente proporcional entre o percentual de cobertura de saneamento básico e a incidência de diarreia em crianças de até 2 anos de idade (FREITAS; MAGNABOSCO, 2024).

2.3 Tecnologias de tratamento de água doméstica

Um dos grandes desafios para o acesso universal à água potável e segura reside no fato de que grande parte das comunidades afetadas pela escassez hídrica ou de saneamento são comunidades rurais, geralmente distantes de centros urbanos e que não contam com infraestrutura suficiente para a instalação de serviços essenciais, como água, esgoto e eletricidade. Em alguns casos, fatores como características de relevo, hidrografia e conflitos político-sociais impedem a instalação de sistemas interligados para transporte, tratamento e armazenamento de água. É neste contexto que as tecnologias de tratamento doméstico de água surgem para possibilitar um tratamento mínimo visando ao consumo seguro.

Estima-se que o uso de tecnologias de baixo custo para tratamento de água seja responsável por evitar aproximadamente 829000 mortes anualmente, sendo reconhecidas como as mais viáveis ferramentas de curto e médio prazo para comunidades que não possuem acesso à água segura para consumo em países subdesenvolvidos (CHAÚQUE et al., 2023; WHO, 2019). Ainda que em nível doméstico, o tratamento da água necessita de algumas etapas similares ao tratamento convencional realizado em ETAs, como métodos físicos de remoção de sólidos reduzindo a turbidez, removendo macromoléculas e até mesmo eliminando determinados tipos de patógenos.

Dentre alguns métodos existentes de tratamento destacam-se: sedimentação, coagulação e floculação filtros de areia e de cerâmica, pasteurização, cloração e biofiltros (WHO, 2011). Devido às condições de implementação destes métodos de tratamento, materiais presentes na região são muitas vezes utilizados em substituição a determinados componentes do que viria a ser um equipamento sofisticado. Essas modificações de materiais são frutos de observação das comunidades e de pesquisas empregadas que resultam em diversas aplicações desde o uso de resíduos agroindustriais e argila natural para a remoção de metais pesados da água (SENANU; KRANJAC-BERISAVLJEVIC; COBBINA, 2023) até a aplicação de extratos de sementes de plantas nativas para processos de floculação e coagulação (MEGERSA et al., 2014; RASHEED; ALKARADAGHI; AL-ANSARI, 2023).

Para serem apropriadas para uso e bem aceitas pelas comunidades, as tecnologias de tratamento doméstico de água devem atender a três critérios fundamentais: possuir baixo custo de implementação, considerando que essas populações geralmente também enfrentam

vulnerabilidade econômica; facilidade de instalação e uso; e devem ser sustentáveis, não demandando insumos que necessitam ser continuamente fornecidos para seu correto funcionamento (MCGUIGAN et al., 2012). Além disso, escolha do método de tratamento deve considerar as condições de infraestrutura da comunidade. Em muitos locais afetados pela escassez de água potável, a ausência de energia elétrica é um desafio adicional, o que torna as tecnologias que utilizam energia solar alternativas especialmente adequadas e eficientes para garantir o acesso à água segura, como a desinfecção solar da água, também conhecida como SODIS, em que a radiação é utilizada diretamente na degradação de patógenos com simples implementação e uso (ABRAHAM; PLOURDE; MINKOWYCZ, 2015; BURCH; THOMAS, 1998).

2.4 Desinfecção solar da água (SODIS)

Dentre os métodos de tratamento de água para uso doméstico a SODIS talvez seja o mais fácil de ser usado e o de menor custo associado. Sob incidência da parcela da radiação proveniente do Sol que atinge a superfície da Terra, microrganismos patógenos podem sofrer degradação celular através de mecanismos endógenos e exógenos, os quais liberam espécies reativas de oxigênio, também conhecidas como ROS (do inglês *Reactive Oxigen Species*), extremamente reativas e capazes de se ligar a outras moléculas causando modificações celulares que levam à inativação do microrganismo. Como pode ser observado na Figura 2.3, em sua forma mais simples, o método SODIS consiste em abastecer garrafas transparentes com água e deixá-las expostas ao Sol por 6 horas consecutivas. Após este período a água pode ser consumida em até 24 horas, evitando assim mecanismos de reparação e crescimento dos microrganismos no período pós-exposição (MCGUIGAN et al., 2012).

Figura 2.3 – Garrafas PET expostas ao Sol em tratamento SODIS.

Fonte: Adaptado de Luzi et al. (2016).

Os mecanismos de formação das espécies químicas reativas (ROS) nas células dos organismos patogênicos envolvem a absorção de radiação na faixa UVA do espectro solar (300 nm a 400 nm) por moléculas cromóforas internas à célula, o que modifica a cadeia de elétrons e gera espécies oxidativas. Essas espécies, por sua vez, alteram o funcionamento da célula ao atacar proteínas e lipídios, o que resulta na perda da permeabilidade da membrana celular ou ruptura do DNA. Além disso, a ação da radiação UVA não se limita apenas à formação de espécies oxidativas mas também promove a degradação de enzimas que possuem função de proteção contra ROS gerados no interior da célula, como a catalase e a superóxido dismutase (CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017a). A literatura reconhece e estuda efeitos sinérgicos entre a radiação solar incidente e o aumento de temperatura no recipiente, fenômeno provocado naturalmente pela absorção dos raios de luz pelo material da garrafa ou pela superfície onde ela se encontra apoiada (CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017b; VIVAR et al., 2017).

Na Figura 2.4 mostra-se uma representação esquemática simplificada dos efeitos da radiação solar em células de organismos patogênicos. A radiação UVC (200 nm a 280 nm) é o comprimento de onda mais energético do espectro ultravioleta e que proporciona maiores danos ao DNA da célula. As células irradiadas pela radiação UVC geram dímeros de pirimidina e purina no DNA, provocando a inativação celular. Além disso, esse comprimento de onda

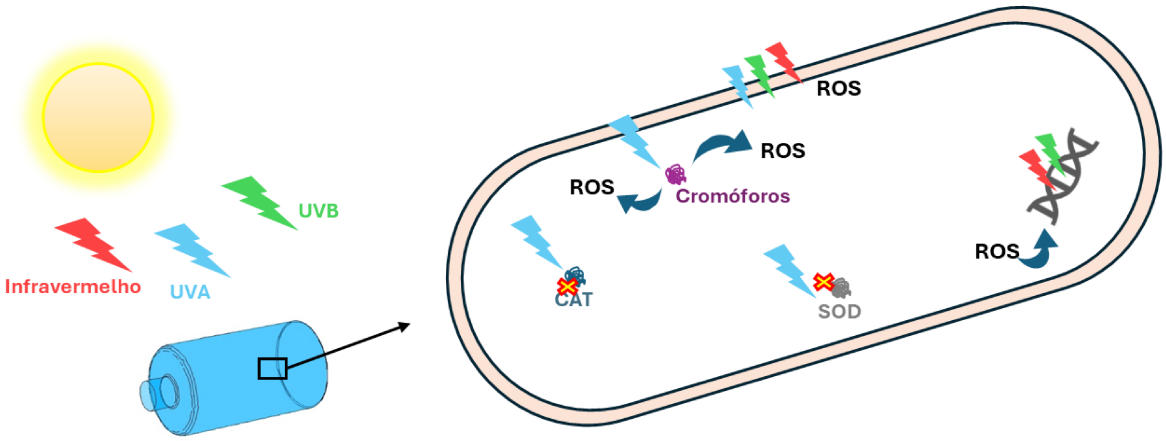
também gera danos às proteínas que absorvem a luz entre 190 nm e 220 nm (HENRIKSEN et al., 1990).

Contudo, raios UVC não atingem a superfície da Terra porque são absorvidos pela camada ozônio, o que possibilita a vida na terra como conhecemos hoje. Dessa forma, em processos de desinfecção com radiação solar a radiação UVC não é contabilizada. A radiação UVB (280 nm a 320 nm), ainda que em pouca quantidade, também provoca alterações no DNA, sendo que os principais produtos da absorção de fótons UVB são dímeros de pirimidina ciclobutano, pirimidina-pirimidona (6-4), fotoprodutos de citosina e de purinas. Também ocorrem danos a certas proteínas apesar de a maioria absorver comprimentos de onda menores.

A radiação UVA (320 nm a 400 nm) também pode provocar danos à estrutura do DNA por diferentes mecanismos. Esses efeitos ocorrem especialmente pela absorção da radiação por cromóforos e por moléculas fotossensíveis, como quinonas, NADH e NADPH, que induzem reações químicas no interior das células e geram espécies reativas de oxigênio (ROS) que atacam estruturas celulares. A radiação UVA também atua simultaneamente na inativação de enzimas responsáveis pela proteção celular contra os danos provocados pelas espécies reativas de oxigênio, como a catalase (CAT) e a superóxido dismutase (SOD). Como resultado, o acúmulo de danos oxidativos nas células torna-se o principal fator responsável pela eficácia da desinfecção obtida por meio do processo SODIS (ALFÉREZ; IBÁÑEZ; AGUADO, MARÍA INMACULADA POLO LÓPEZ, 2014).

O infravermelho (760 nm a 1400 nm) atua na desnaturação de proteínas estruturais e funcionais da célula do microrganismo, comprometendo assim seu metabolismo e integridade e causando um efeito sinérgico com a radiação UVA em processos SODIS cuja temperatura atinge patamares superiores a 45°C (CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017c;VIVAR et al., 2017).

Figura 2.4 – Representação esquemática simplificada de mecanismos de degradação celular induzidos pela radiação solar em um processo SODIS.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Apesar dos benefícios apresentados, o método SODIS possui desafios voltados à dependência de condições climáticas – fato pelo qual esta técnica é mais implementada em regiões com maior incidência de luz ao longo do ano – limitação de volume de água tratada e necessidade de etapas anteriores de filtração para reduzir a turbidez a níveis suficientes para a degradação dos microrganismos até limites de detecção aceitáveis (CHAÚQUE; ROTT, 2021). Para endereçar estes problemas, pesquisas em diversas áreas são continuamente desenvolvidas pela comunidade científica, como estudos de viabilidade de aplicação da SODIS de acordo com as características climáticas e sociais (BURCH; THOMAS, 1998;MORENO-SANSEGUNDO et al., 2021;NAKADA; URBAN, 2024) desenvolvimento de recipientes e fotorreatores para aumentar ou tornar o processo mais rápido aproveitando ao máximo a janela solar de um dia (FENDRICH et al., 2018;MARTÍNEZ-GARCÍA et al., 2020;MORTAZAVI; MALEKI, 2019) ou buscando entender a eficiência da SODIS em matrizes aquosas com diversos níveis de turbidez e matéria sólida e tecnologias simples de filtração para redução da turbidez (BORDE et al., 2016;CHAUKURA et al., 2023;GARCÍA-GIL; VALVERDE et al., 2020).

2.5 Modelos de Cinética de Desinfecção Aplicáveis à SODIS

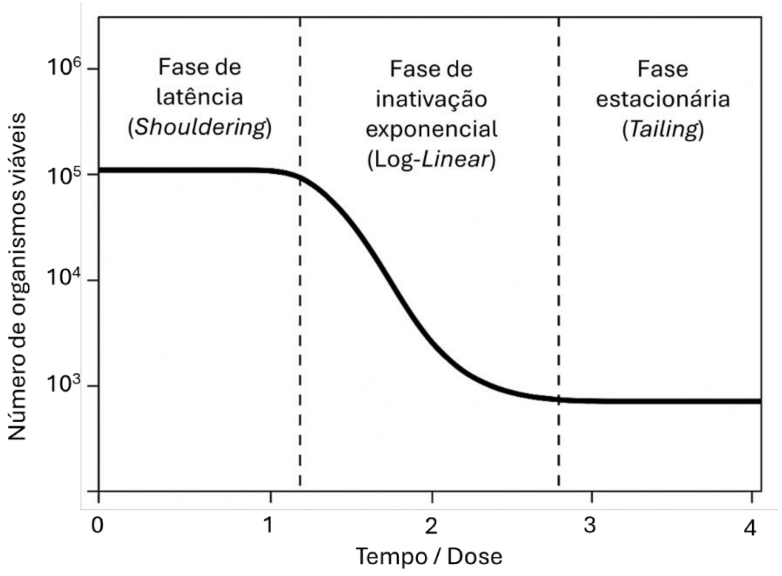
A cinética de desinfecção geralmente é caracterizada por três fases distintas em função da dose de agente oxidante e tempo de exposição, como representado na Figura 2.5: latência, inativação exponencial e fase estacionária. A fase de latência é caracterizada principalmente pelo efeito *"shoulder"* e refere-se a uma fase inicial de atraso na cinética em que a inativação é lenta ou insignificante antes de ocorrer um declínio mais rápido no número de organismos

vivos. Esse fenômeno pode ser atribuído ao tempo necessário para que o agente desinfetante penetre as paredes celulares ou supere os mecanismos de proteção existentes na célula. A presença desse efeito pode afetar significativamente o tempo de contato necessário para atingir o nível desejado de inativação e consequentemente a cinética geral da desinfecção (JENSEN, 2010; SONG; OGUMA; TAKIZAWA, 2023).

Já a fase de decaimento exponencial é caracterizada por uma rápida queda no número de organismos viáveis e geralmente é representada por modelos log-linear em que a taxa de inativação é diretamente proporcional à concentração de microrganismos viáveis. À medida que o número de microrganismos viáveis diminui, a taxa de inativação também diminui, resultando em uma relação linear entre o logaritmo da concentração microbiana e o tempo. Essa premissa é verdadeira no caso de distribuição uniforme do agente desinfetante e quando pode-se assumir que os microrganismos são igualmente sensíveis (AMOS; DAVEY; THOMAS, 2001).

A última fase clássica de processos de desinfecção é caracterizada por um comportamento estacionário, em que a taxa de inativação diminui significativamente à medida que a desinfecção progride, resultando em uma fração persistente de microrganismos viáveis. Esse fenômeno é um desafio comum nos processos de desinfecção, pois pode limitar a eficácia do tratamento e exigir doses mais altas de agente desinfetante, ou tempos de contato mais longos para atingir o nível desejado de inativação. Esse fenômeno pode ser atribuído a fatores como agregação microbiana, mecanismos de resistência ou efeitos protetores da matéria orgânica.

Figura 2.5 – Representação de uma cinética de desinfecção típica.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

A agregação microbiana pode proteger parte dos microrganismos, reduzindo sua exposição ao desinfetante e, consequentemente, diminuindo a taxa de inativação. Além disso, mecanismos de resistência, como a produção de enzimas capazes de degradar o agente desinfetante, também podem contribuir para a concentração residual de microrganismos. A matéria orgânica pode interferir no processo de desinfecção ao reagir com o desinfetante ou fornecer uma barreira luminosa para os microrganismos. Portanto, compreender os fatores que influenciam a degradação de microrganismos é fundamental para desenvolver estratégias de desinfecção eficazes (FALSANISI et al., 2008).

Na literatura diversos modelos de desinfecção têm sido empregados em estudos para verificação dos melhores ajustes de diferentes dados de inativação de microrganismos, os quais em sua maioria correspondem a formas modificadas do modelo de Chick [Eq.(2.1)] para as diferentes etapas da desinfecção. Apesar da abordagem bastante simples, esse modelo tem sido adotado em diversas aplicações que usam métodos químicos para a desinfecção como ozônio, cloro e peróxido de hidrogênio (MCCLELLAN, 2000). Já o modelo de Chick-Watson [Eq.(2.2)] adiciona o efeito da concentração de agente desinfetante na velocidade relativa da reação, obtendo-se uma constante pseudo-cinética.

$$\frac{dN}{dt} = -kN \tag{2.1}$$

$$\frac{dN}{dt} = -k \cdot C^n N \tag{2.2}$$

Em que k e k' são as constantes de decaimento bacteriano, N é a concentração de microrganismos viáveis (CFU/100ml), C é a concentração de desinfetante e n é o coeficiente de diluição.

Em alguns estudos com uso de radiação UVC para avaliação da performance de desinfecção de fotorreatores, estes incluindo modelagem CFD do fenômeno, a cinética de Chick-Watson tem sido adaptada com relativa precisão através de ajustes para determinação das constantes de decaimento em função do comprimento de onda utilizado para a desinfecção de alguns vírus usados como indicadores de desempenho, uma vez que existem certas limitações em sua aplicação para desinfecção de bactérias (CASADO; YUNTA; MARUGÁN, 2023; SOBHANI; SHOKOUHMAND, 2017).

A simplicidade é a principal característica e vantagem de modelos cinéticos baseados na lei de Chick, porém algumas premissas do modelo tais como assumir uma cinética de primeira ordem e uso de parâmetros para ajuste do modelo a dados experimentais obtidos, faz

com que sua aplicação não possa ser diretamente feita em diferentes sistemas de desinfecção sem a condução de experimentos de calibração uma vez que detalhes sobre os fenômenos físicos e biológicos no material celular não são abordados (DALRYMPLE et al., 2010). Como observado anteriormente na Figura 2.5, um modelo deve ser capaz de representar as diferentes fases da cinética de desinfecção de determinado microrganismo. E é no sentido de buscar um maior detalhamento e compreensão da cinética de desinfecção da SODIS que pesquisadores têm realizado trabalhos que visam o desenvolvimento de modelos mecanicistas e pseudo-mecanicistas, os quais levam em consideração mecanismos intra e extracelulares de degradação de microrganismos tais como *E. coli*, esporos de fungos (XIA et al., 2022), protozoários e vírus (GARCÍA-GIL; ABELEDO-LAMEIRO et al., 2020; GARCÍA-GIL; MARTÍNEZ et al., 2020).

Castro-Alférez et al. (2017a) propuseram um modelo mecanicista para representar a degradação de *E. coli* durante o processo de desinfecção solar através do efeito sinérgico entre a geração foto-iniciada de espécies reativas de oxigênio (ROS) e a foto-inativação das enzimas protetoras, catalase (CAT) e superóxido dismutase (SOD). Esse é o mesmo modelo representativo ilustrado anteriormente na Figura 2.4. Essa modelagem mecanicista enfatiza que, em condições de irradiação solar, os fótons promovem um aumento na produção interna de ROS, tipicamente envolvendo radicais como a hidroxila (OH^-) e o ânion superóxido (O_2^-). No mecanismo celular normal, a enzima SOD converte o ânion superóxido, que possui alta reatividade, em peróxido de hidrogênio (H_2O_2), sendo que a CAT atua de forma subsequente na decomposição do H_2O_2 em água e oxigênio. Dessa forma, essas enzimas desempenham papéis críticos na neutralização dos agentes oxidantes e na manutenção do equilíbrio redox dentro da célula.

Entretanto, a exposição à radiação solar não só eleva a geração de ROS, como também provoca danos diretos nas moléculas enzimáticas responsáveis pela defesa antioxidante. A foto-inativação da CAT e SOD compromete o metabolismo redox, resultando na acumulação de H_2O_2 e outros radicais livres. Esse acúmulo intensifica o estresse oxidativo, promovendo danos severos a biomoléculas essenciais, como proteínas, lipídios e ácidos nucleicos, e contribuindo para a rápida inativação ou morte celular. Adicionalmente, a presença elevada de H_2O_2, não mais eficientemente decomposta devido à inativação da catalase, pode desencadear reações do tipo Fenton, levando à formação de radicais hidroxila ainda mais agressivos. Em síntese, o efeito da radiação solar atua em duas frentes: intensifica a geração de ROS, enquanto reduz a capacidade intrínseca de defesa antioxidante da célula, através da danificação enzimática. Essa combinação resulta em um mecanismo eficaz de desinfecção por SODIS que envolve tanto a ação direta dos fótons quanto a falência dos sistemas de defesa celular.

O mecanismo proposto pelos autores é detalhado na Tabela 2.1. A cinética começa com a formação natural de espécies reativas de oxigênio (ROS) dentro da célula bacteriana, principalmente o radical superóxido (O_2^-) [Equação (2.4)]. Esse radical é formado durante a respiração celular aeróbica e é intensificada pela excitação da nicotinamida adenina dinucleotídeo (NADH), uma coenzima importante para o metabolismo celular, que atua no transporte de elétrons e geração de adenosina trifosfato (ATP) que acaba fornecendo elétrons para o oxigênio molecular [Equação (2.5)].

Após sua formação, o O_2^- é convertido em peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e oxigênio molecular novamente, através da atuação da enzima superóxido dismutase (SOD) [Equação.(2.6)]. A formação de peróxido faz com que processos foto-Fenton sejam intensificados dentro da célula. Nestes processos, a radiação incidente ajuda a promover a regeneração do Fe^{3+} em Fe^{2+} [Equação (2.7)] mantendo assim a geração de radicais hidroxila altamente reativos [Equação (2.8)] que promovem danos a biomoléculas essenciais e formadoras de estruturas celulares, como proteínas, lipídios e DNA. O mecanismo considera ainda as etapas de recombinação dos ROS devido sua alta reatividade [Equação (2.9) e Equação (2.10)].

Um mecanismo importante envolvido no modelo apresentado na Tabela 2.1 é a etapa de decomposição do peróxido de hidrogênio. A catalase é a enzima responsável por essa conversão e é a primeira barreira contra o H_2O_2 [Equação (2.11)] dentro da célula. Porém, como mencionado anteriormente, a radiação incidente (principalmente a UV) promove a foto-inativação dessa enzima [Equação (2.12)] e da superóxido dismutase [Equação (2.13)], removendo os mecanismos de proteção celular. Os danos celulares provenientes do acúmulo de espécies reativas de oxigênio são representados na Equação (2.14) e Equação (2.15), através da conversão de matéria orgânica reduzida (O_{red}) em oxidada (OM_{ox}). Estudos mostram que as ROS causam danos substanciais às biomoléculas que compõem a parede celular, como sacarídeos e amidos. Um dos principais alvos é a camada de peptidoglicano em que as ROS desintegram a estrutura do glicano e o ácido lipoteicoico, outro polímero estrutural da parede.

Por fim, todo o mecanismo se conclui na conversão de bactérias viáveis (B_v) em bactérias inativas (B_i) [Equação (2.16)]. Observa-se, portanto, que em quatro etapas deste mecanismo a radiação tem participação ativa e, nas suas expressões que representam a taxa de reação, os termos e^a_{NADH}, e^a_{Fe3+}, e^a_{CAT} e e^a_{SOD}dizem respeito às taxas volumétricas locais de absorção de fótons.

A taxa volumétrica local de absorção de fótons (LVRPA, do inglês *Local Volumetric Rate of Photon Absorption*) é uma grandeza fundamental para descrever a quantidade de energia

luminosa absorvida por unidade de volume e por unidade de tempo dentro de um volume. Essa taxa depende tanto das propriedades ópticas dos compostos quanto da distribuição espectral da radiação incidente, sendo essencial para modelar processos fotoquímicos intracelulares que geram espécies reativas de oxigênio. Seu cálculo se dá pela integral do produto do coeficiente de absorção de determinado componente ($\kappa_{\lambda,i}$) pela radiação incidente (G_λ) ambos para um determinado comprimento de onda, conforme descrito na Equação ((2.3).

$$e_i^a = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \kappa_{\lambda,i} \cdot G_\lambda d\lambda \tag{2.3}$$

Tabela 2.1 – Mecanismos de desinfecção solar de *E. coli* baseado na geração de ROS intracelular e inativação das enzimas protetoras.

Etapa	Reação	Taxa	Equação
Formação de ROS Internos	$O_2 + e^- \longrightarrow O_2^{\cdot-}$	$k_1[O_2][e^-]$	(2.4)
	$O_2 + e^- \xrightarrow{h\nu,NADH} O_2^{\cdot-}$	$k_2[O_2][e^-]e^a_{NADH}$	(2.5)
	$O_2^{\cdot-} + H^+ \xrightarrow{SOD} \frac{1}{2}H_2O_2 + \frac{1}{2}O_2$	$k_3[O_2^{\cdot-}][SOD]$	(2.6)
	$Fe^{2+} + H_2O_2 \longrightarrow Fe^{3+} + HO^- + HO^\cdot$	$k_4[Fe^{2+}][H_2O_2]$	(2.7)
	$Fe^{3+} + H_2O \xrightarrow{h\nu} Fe^{2+} + HO^\cdot + H^+$	$k_5[Fe^{3+}][H_2O]e^a_{Fe^{3+}}$	(2.8)
Recombinação de ROS	$H_2O_2 + HO^\cdot \longrightarrow HO_2^\cdot + H_2O$	$k_6[H_2O_2][HO^\cdot]$	(2.9)
	$HO_2^\cdot \longrightarrow \frac{1}{2}H_2O_2 + \frac{1}{2}O_2$	$k_7[HO_2^\cdot]^2$	(2.10)
Decomposição de H2O2	$H_2O_2 \xrightarrow{CAT} \frac{1}{2}O_2 + H_2O$	$k_8[H_2O_2][CAT]$	(2.11)
Foto-inativação das enzimas protetoras	$CAT \xrightarrow{h\nu} CAT_i$	$k_9[CAT]e^a_{CAT}$	(2.12)
	$SOD \xrightarrow{h\nu} SOD_i$	$k_{10}[SOD]e^a_{SOD}$	(2.13)
Danos celulares causados por ROS	$OM_{red} + HO^\cdot \longrightarrow OM_{ox}$	$k_{11}[HO^\cdot]$	(2.14)
	$OM_{red} + O_2^{\cdot-} \longrightarrow OM_{ox}$	$k_{12}[O_2^{\cdot-}]$	(2.15)
Inativação Bacteriana	$B_v \xrightarrow{HO^\cdot, O_2^{\cdot-}} B_i$	$k_{13}[HO^\cdot][O_2^{\cdot-}][B_v]$	(2.16)

Fonte: Adaptado de Castro-Alférez et al. (2017a)

Em seu trabalho, Castro-Alférez et al. (2017a) reuniram todas as etapas descritas anteriormente em um conjunto de quatro equações, assumindo uma aproximação de estado

estacionário (produto sendo imediatamente consumido) para as concentrações das espécies Fe^{2+}, Fe^{3+}, O_2^{-}, HO^{-}, e $HO_2^{-\cdot}$ e rearranjando as equações da mecânica descrita. As seguintes equações, portanto, compõem o modelo cinético desenvolvido pelos autores: inativação bacteriana [Eq.(2.17)], decomposição do H_2O_2 [Eq.(2.18)], inativação da catalase [Eq. (2.19)], e inativação da superoxidase dismutase [Eq.(2.20)].

$$r_{B_V} = k_{13} \cdot \frac{2 \cdot \gamma_3 [H_2O_2]_t}{k_6 [H_2O_2]_t + k_{11}} \cdot \frac{\gamma_1 + \gamma_2 \cdot e^a_{NADH}}{k_3 [SOD]_t + k_{12}} \cdot \{B_V\}_t \quad (2.17)$$

$$r_{H_2O_2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{k_3 [SOD]_t (\gamma_1 + \gamma_2 \cdot e^a_{NADH})}{k_3 [SOD]_t + k_{12}} \cdot \frac{\gamma_3 \cdot k_6 [H_2O_2]_t^2}{k_{11} + k_6 [H_2O_2]_t} - (\gamma_3 + k_8 [CAT]_t)[H_2O_2]_t \quad (2.18)$$

$$r_{CAT} = k_9 \cdot e^a_{CAT} \cdot [CAT]_t^2 \quad (2.19)$$

$$r_{SOD} = k_{10} \cdot e^a_{SOD} \cdot [SOD]_t^2 \quad (2.20)$$

Neste modelo, as constantes das reações de redução da atividade das enzimas CAT (k_9 = $1.5 \cdot 10^7$ cm^3 $Einstein^{-1}$) e SOD (k_{10} = $1.56 \cdot 10^6$ cm^3 $Einstein^{-1}$) ilustram as diferentes cinéticas de redução entre essas espécies químicas, sendo a redução da atividade da catalase mais rápida do que a da superoxidase dismutase. As constantes k_3 = $1 \cdot 10^9$ $M^{-1}s^{-1}$, k_6 = $2{,}7 \cdot 10^7$ $M^{-1}s^{-1}$ e k_8=$9 \cdot 10^5$ $M^{-1}s^{-1}$ são obtidas da literatura (ABREU; CABELLI, 2010;BUXTON et al., 1988;TAO et al., 2009), ao passo que as demais foram obtidas através de regressões com base nos experimentos conduzidos pelos autores: k_9 = $1{,}5 \cdot 10^7$ $cm^3 \cdot Einstein^{-1}$, k_{10} = $1{,}56 \cdot 10^6$ $cm^3 \cdot Einstein^{-1}$, k_{11} = $2{,}04 \cdot 10^4$ s^{-1}, k_{12} = $1{,}36 \cdot 10^5$ s^{-1}, k_{13} = $8{,}03 \cdot 10^{15} M^{-2} \cdot s^{-1}$, γ_1= $5{,}4 \cdot 10^{-6}$ $M \cdot s^{-1}$, γ_2= $1{,}14 \cdot 10^5$ $M \cdot cm^3 \cdot Einstein^{-1}$, γ_3= $1{,}4 \cdot 10^{-3}$ s^{-1}.

Apesar de não incorporar efeitos de temperatura e outras características físico-químicas de águas contaminadas, como presença de fotossintetizantes naturais e turbidez, o modelo desenvolvido fornece uma interessante base para desenvolvimento de modelos mais completos e pode ser utilizado para otimizar e estudar a SODIS em outros sistemas concentradores com distribuição de fótons similar ao sistema utilizado e que não atinjam temperaturas em que os efeitos sinérgicos entre temperatura e radiação são relevantes.

2.6 Unidades de Tratamento Solar de Água

As unidades solares de tratamento de água representam um grupo bastante promissor de tecnologias para lidar com os desafios de escassez de água segura, especialmente em ambientes

com recursos e infraestrutura limitados. Essas unidades fazem uso da energia solar para conduzir diversos processos de desinfecção e purificação da água, oferecendo alternativas sustentáveis aos métodos convencionais que consomem muita energia e demandam insumos para manter operação como produtos químicos. Diversos tipos de unidades de tratamento solar de água são empregados atualmente ou se encontram em desenvolvimento, cada um com seu próprio conjunto de vantagens, limitações e características operacionais. Entre elas podem-se citar os sistemas de intensificação da SODIS com reatores de diferentes formatos e materiais, sistemas de bombeamento e recirculação, destilação solar e unidades híbridas que combinam também processos de separação além da desinfecção.

O uso de garrafas PET para realização de tratamento solar da água é uma prática comum e considerada nos protocolos de desinfecção devido à sua disponibilidade e fácil obtenção, porém pesquisadores buscaram verificar a adequabilidade do uso de sacos plásticos transparentes de diferentes composições em termos de capacidade de desinfecção e resistência à deterioração dos polímeros (GUTIÉRREZ-ALFARO et al., 2017). Devido à maior transmitância dos materiais e sua menor espessura em relação às garrafas PET, todos os designs avaliados apresentaram melhor capacidade de degradação de bactérias *E.coli* do que as garrafas com redução de 6 log da concentração de *E.coli* em 60 minutos.

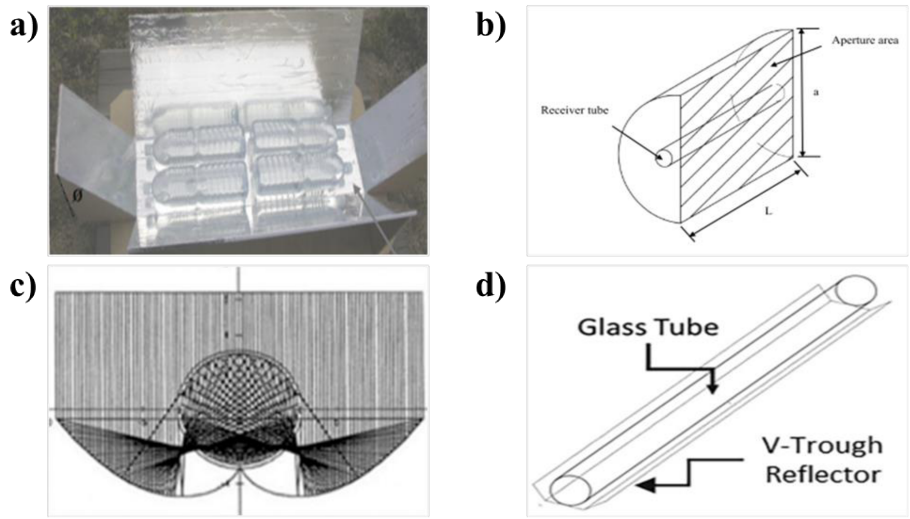
Alternativamente, a destilação solar apresenta uma solução sustentável e ecologicamente adequada para a produção de água potável, especialmente em regiões com acesso limitado a recursos de água doce. Dentre os diferentes tipos de destiladores solares, os destiladores solares ativos que incorporam tecnologias como os coletores tipo calha parabólica, apresentam uma maior produtividade, atingindo 12,4 litros por metro quadrado por dia (ALMAJALI et al., 2025). Estudos conduzidos na Universidade Federal de Uberlândia mostraram a viabilidade da aplicação de concentradores solares do tipo parabólico (*solar dish*) e lente de Fresnel para intensificação da produção de água para consumo através da vaporização e subsequente destilação da água (PRADO, 2015a; PRADO; VIEIRA; DAMASCENO, 2016).

2.7 Concentradores Solares

Dentre as várias estratégias possíveis para intensificar o tratamento de água nas unidades de tratamento solar de água, o uso de concentradores solares talvez seja a mais simples e que forneça resultados satisfatórios com um custo relativamente acessível. A intensificação dos raios de luz no comprimento de onda de determinadas reações ou para ativação de certos catalisadores pode ser atingida de diversas formas, seja através da reflexão ou refração da luz.

Devido ao seu alto potencial de concentração de energia, os sistemas concentradores aqui apresentados possuem tanto aplicações no setor energético (geração e armazenamento de energia) quanto no tratamento de efluentes e água. Na Figura 2.6 apresentam-se alguns exemplos de coletores solares utilizados para potencializar a quantidade de fótons no interior dos reatores.

Figura 2.6 – Exemplos de concentradores solares usualmente aplicados no tratamento de água: a) coletor tipo caixa, b) coletor tipo calha parabólica, c) coletor parabólico composto, d) coletor tipo calha V.



Fonte: Adaptado de Amin (2009), El Golli et al. (2024), García-Gil et al. (2019) e Martínez-García et al. (2020).

Talvez um dos mais simples métodos de concentração solar, os coletores do tipo caixa, oferecem uma melhoria simples e prática ao método convencional de desinfecção solar da água (SODIS), concentrando a luz solar dentro de uma caixa com paredes revestidas de alumínio ou constituídas de metal polido, e que também elevam a temperatura da água para níveis superiores a 50°C. Com um custo relativamente baixo e facilidade de aplicação a nível doméstico em ambientes com recursos limitados, estudos empíricos revelam que esses coletores mantêm temperaturas elevadas o suficiente para gerar um efeito sinérgico com a radiação UVA levando a reduções acima de 3 log na concentração de bactérias, e também reduzem o tempo de exposição solar em relação à SODIS convencional desempenhada com garrafas PET (AMIN; HAN, 2009). Porém este tipo de concentrador ainda possui limitações relacionadas ao volume de água tratada, qualidade do revestimento reflexivo para correto direcionamento dos raios de

luz e dependência de uma água com baixos níveis de turbidez para maior penetração dos raios UV, este último um desafio comum a todas as unidades concentradoras.

Dentre os principais modelos de concentração de luz utilizando a reflexão, os coletores solares de calha parabólica possuem uma vasta aplicação na literatura. Estes refletores são caracterizados por seu formato de calha parabólica e uma superfície refletora usualmente composta de alumínio anodizado, que agem em conjunto para focalizar a radiação solar em um receptor tubular. El Golli et al. (2024) realizaram um estudo voltado para o desenvolvimento e implementação de um concentrador parabólico do tipo calha (PTC – *Parabollic Through Collector*) no tratamento de efluentes contendo corantes industriais e contaminantes farmacológicos emergentes. O sistema desenvolvido pelos autores apresentou uma eficiência de 61% no tratamento do corante *Remazol Brilliant Blue* e 88% de redução da concentração de ciprofloxacino em matrizes de efluentes analisadas, demonstrando o benefício da intensificação da luz proporcionada pelo coletor solar.

A funcionalidade dos PTCs está intimamente ligada ao seu design, o qual maximiza a coleta e a concentração da luz solar, essencial para a degradação eficaz de poluentes. O formato de calha parabólica garante uma grande área de coleta, e a superfície reflexiva direciona a radiação para o receptor tubular, intensificando assim a energia solar disponível para as reações fotoquímicas. Esse conjunto de fatores associado com a alta produtividade de água por dia faz com que os PTC sejam posicionados como uma interessante opção para o tratamento de água em comunidades rurais que não dispõem de água segura para consumo (BANDALA; ESTRADA, 2007).

Os concentradores parabólicos compostos (CPCs), por sua vez, oferecem vantagens diferentes na utilização da energia solar para o tratamento de efluentes devido a seus recursos de design e operação. Os CPCs podem aproveitar a radiação direta e difusa sem a necessidade de um sistema de rastreamento solar, permitindo a captação eficaz de energia solar mesmo em condições climáticas adversas e ao longo de várias horas do dia captando as diversas posições do sol, o que os torna mais versáteis do que outros concentradores, mas que proporciona uma intensidade menor de radiação no reator tubular (GENG et al., 2024). Um estudo desenvolvido por Gómez-Couso et al. (2012) demonstrou que reatores solares estáticos de vidro borossilicato de 2,5 litros equipados com concentradores parabólicos compostos (CPCs) podem aumentar significativamente a eficácia da SODIS contra oocistos de *Cryptosporidium parvum*, permitindo uma inativação mais rápida e completa do que as garrafas PET tradicionais. Os CPCs aprimoraram a distribuição da radiação solar no reator superando as principais limitações, como a turbidez, que tradicionalmente impede a penetração de radiação UV. Até mesmo

amostras de água altamente turvas (100 NTU) alcançaram a inativação quase total dos oocistos em 10 a 12 horas de exposição à luz solar, auxiliada por efeitos térmicos sinérgicos que elevaram a temperatura da água acima de 58°C.

2.8 Actinometria com Ferrioxalato de Potássio

A actinometria é uma prática muito comum e utilizada há quase 1 século para caracterização de sistemas fotoquímicos. Ela tem sido muito aplicada no design de sistemas concentradores solares para contabilizar o fluxo fotônico dentro dos reatores. Essa técnica consiste na utilização de uma reação química simples e bem conhecida que possibilita calcular o número de fótons potencialmente absorvidos em uma determinada configuração experimental a qual pode ser um fotorreator, com a inserção direta da solução actinométrica em seu interior, ou a caracterização de uma lâmpada com o uso de uma célula actinométrica.

O procedimento é similar a uma titulação de bancada e, como resultado, encontra-se a quantidade de fótons responsável pela conversão do reagente em determinado produto (ZALAZAR et al., 2005). Esta solução deve ter um rendimento quântico ($\phi_{Ac,\lambda}$) conhecido no intervalo de comprimento de onda trabalhado, com pouca sensibilidade a alterações de concentração e temperatura e possibilitar análises simples e precisas (BRAUN; OLIVEROS; MAURETTE, 1991; SILVARES, 2006). O rendimento quântico de formação de Fe^{2+} do FeOx é independente da temperatura quando esta é entre 5°C e 80°C (NICODEM; AQUILERA, 1983). O tempo de reação em um experimento de actinometria deve ser curto o suficiente para que a conversão da reação seja baixa e a concentração do reagente possa ser considerada constante e igual à concentração antes da irradiação, fazendo com que o efeito de absorção dos produtos no campo de radiação possa ser negligenciado.

A escolha de um actinômetro para quantificação do fluxo de fótons em um fotorreator é primariamente dependente da faixa de comprimento de onda incidente no reator. Em experimentos de actinometria realizados com luz solar usualmente é utilizado o ferrioxalato de potássio, $Fe(C_2O_4)_3$, como actinômetro devido à sua faixa de sensibilização de 250 nm a 436 nm (UV visível), simplicidade de produção que facilita o preparo de grandes volumes e por utilizar componentes químicos com maior grau de segurança. Na presença de fótons dentro desta faixa de comprimento de onda os íons férricos (Fe^{3+}) da solução são reduzidos a íons ferrosos (Fe^{2+}) conforme a seguinte reação global:

$$2Fe^{3+} + C_2O_4^{2-} \xrightarrow{hv} 2Fe^{2+} + 2CO_2 \quad (2.21)$$

Dessa forma, a variação do número de moléculas (Δn_{Ac}) para a formação de íons Fe^{2+} é diretamente proporcional ao número de fótons absorvidos ($N_{f,\lambda}$) durante o intervalo de tempo em que o reator é iluminado considerando-se o rendimento quântico ($\Phi_{Ac,\lambda}$) conhecido para o actinômetro naquela faixa de radiação:

$$N_{f,\lambda} = \frac{\Delta n_{Ac}}{\Phi_{Ac,\lambda}} \quad (2.22)$$

Os íons Fe^{2+} produzidos durante a irradiação da solução actinométrica podem ser complexados com o uso de 1,10-fenantrolina, formando o complexo tri(1,10-fenantrolina)-Fe^{2+} - $[Fe(fen)_3]^{2+}$, que pode ter sua absorbância medida em um espectrofotômetro com feixe de comprimento de onda de 510 nm. As etapas antes e após a irradiação da solução actinométrica devem ser conduzidas em sala escura com meia luz, para reduzir ao máximo a exposição das soluções a quantidades de fótons adicionais.

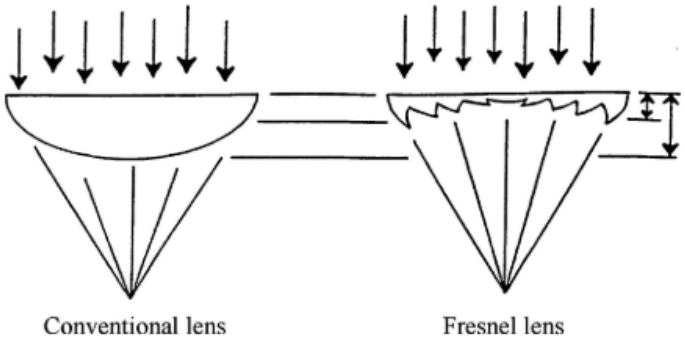
2.9 Lentes de Fresnel

Um tipo particular de concentrador que tem ganhado certa atenção na comunidade científica visando aplicações como conversão térmica e geração de energia consiste nas lentes tipo Fresnel. No início do século XIX, a engenharia óptica experimentou um avanço significativo com o desenvolvimento das lentes de Fresnel, batizadas em homenagem ao seu inventor, Augustin-Jean Fresnel. Essas lentes foram projetadas principalmente para aumentar a eficiência e a praticidade da iluminação dos faróis, representando uma grande melhoria em comparação com os sistemas luminosos anteriores. Augustin-Jean Fresnel desenvolveu esse design inovador de lente para superar as limitações das lentes convexas tradicionais, especialmente no que diz respeito à redução do volume e do peso associados às grandes lentes de vidro, sem comprometer a capacidade de foco eficaz da luz (BISCAYNE NATIONAL PARK; CAPE HATTERAS NATIONAL SEASHORE, 2024).

O princípio fundamental por trás das lentes de Fresnel envolve segmentar a superfície curva de uma lente convencional em uma série de seções anulares concêntricas, ou "anéis", o que reduz substancialmente a quantidade de material necessário sem comprometer a função de foco, conforme a representação esquemática da Figura 2.7. Esse design permite que a lente

mantenha uma distância focal curta e baixa espessura, proporcionando um efeito de concentração de luz poderoso, porém sutil. Essa inovação transformou a navegação marítima ao permitir que os faróis projetassem feixes de luz poderosos visíveis a longas distâncias, reduzindo os desafios impostos por componentes de vidro pesados e frágeis. As lentes de Fresnel se tornaram um sucesso prático e foram adotadas em diversas aplicações ópticas, não apenas em faróis, mas também em tecnologias de sinalização e iluminação (EGGER, 1979).

Figura 2.7 – Lente convencional e lente de Fresnel.

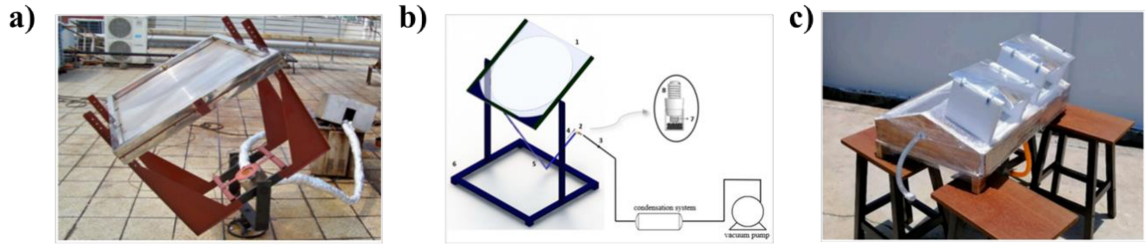


Fonte: Adaptado de Sierra, Azquez (2005).

A transição das lentes de Fresnel de aplicações puramente focadas na iluminação para a área de captação de energia solar marcou o início de uma nova era para esta tecnologia, impulsionada pela necessidade global de fontes de energia sustentáveis. Ao contrário dos elementos ópticos tradicionais, que se concentram principalmente na colimação da luz ou na formação de imagens, as lentes de Fresnel em aplicações solares funcionam como concentradores eficientes, leves e econômicos, capazes de intensificar a radiação solar incidente em receptores ou células fotovoltaicas, aumentando a eficiência geral da conversão de energia. As lentes aplicadas nestes tipos de processos não requerem um alto nível de detalhe na imagem formada pela luz, e, portanto, os tipos mais utilizados são "*non-imaging*", os quais proporcionam designs flexíveis, com altos fatores de concentração em comprimentos focais mais curtos (XIE et al., 2011). Kaddoura e Zeaiter (2019) apresentaram um estudo numérico e experimental sobre a combinação de uma lente de Fresnel pontual com um receptor de cavidade otimizado para o armazenamento de energia térmica utilizando sal fundido como fluido de transferência de calor (HTF). O sistema proposto pelos autores demonstrou capacidade para aumento de 200°C na temperatura do HTF em 10 a 15 min de operação, apresentando uma eficiência térmica que variou de 87% a 97% de acordo com diferentes irradiações solares.

No que diz respeito ao tratamento de água, as lentes de Fresnel têm sido utilizadas para impulsionar processos de dessalinização solar capazes de produzir água potável a partir de fontes salobras. O projeto destas lentes concentra-se em maximizar a eficiência da evaporação solar, otimizando as etapas de evaporação e condensação para aumentar o rendimento da produção de água potável. Estes sistemas apresentaram um potencial de produção de mais de 100 litros de água potável por dia em condições típicas de alta irradiância direta em regiões áridas, demonstrando o potencial da tecnologia para implantação em ambientes com escassez de recursos (SANSOM et al., 2019). Exemplos de unidades experimentais combinadas com lentes de Fresnel são apresentados na Figura 2.8.

Figura 2.8 – Exemplos de unidades concentradoras com aplicação de lente de Fresnel: a) conversão e armazenamento de energia solar: b) pirólise solar c) dessalinização solar.



Fonte: Adaptado de Xie; Dai; Wang (2011), Martins et al. (2022), Choong; Ho; Bahar (2020).

Apesar do grande volume de aplicações de lentes de Fresnel em sistemas de geração e conversão de energia, pouca informação é encontrada na literatura sobre a aplicação de tais sistemas concentradores em processos de desinfecção solar. O conjunto de características dessas lentes indica um alto potencial de aplicação nesta área, vislumbrando reduções no tempo de exposição da água no sol, intensificação da degradação dos microrganismos e quebra dos mecanismos de reparação, economia energética com o uso de energia solar, e sugerindo que trabalhos voltados para este campo de aplicação merecem uma maior atenção da comunidade científica.

2.10 Lentes de Fresnel na FEQUI-UFU

Na Universidade Federal de Uberlândia diversas pesquisas têm sido realizadas com o foco na utilização da energia solar para conversão térmica de biomassa em processos como calcinação e pirólise, visando o reaproveitamento de resíduos. Estes estudos englobam a análise tanto com concentradores refletores parabólicos quanto com lentes de Fresnel. A posição

geográfica da cidade de Uberlândia, no Triângulo Mineiro, propicia meses com baixa nebulosidade durante o ano e uma incidência solar bastante interessante para o estudo e implementação destes tipos de processo.

Prado (2015b) investigou detalhadamente a utilização de uma lente de Fresnel reaproveitada de um projetor e acoplada a um sistema concentrador solar para a dessalinização de água, demonstrando que o sistema pode atingir temperaturas próximas dos 72 °C em condições médias de irradiância (aproximadamente 890 $W \cdot m^{-2}$), com taxas de aquecimento de aproximadamente 0,70°C/min para o maior absorvedor estudado. Com relação à produtividade de água potável, o autor observou que a lente de Fresnel possibilitou a geração de volumes de água destilada estimados em 5,4 $kg \cdot m^{-2} \cdot dia^{-1}$, o que seria suficiente para saciar a sede diária de uma família de duas pessoas, sendo este sistema adequado para utilização em residências rurais ou pequenas comunidades, embora a produção específica dependa das concentrações salinas e da quantidade de água para ser processada.

Palhares et al. (2020) desenvolveram e validaram um modelo físico-matemático para descrever o comportamento de aquecimento de amostras de materiais condutores submetidas à luz solar concentrada através de uma lente de Fresnel. A definição de um fator de aquecimento, que agrega informações como a massa da amostra, a área da lente e a radiação solar, permitiu aos autores a criação de equações de regressão para a previsão da temperatura de equilíbrio, tempo de aquecimento e taxa inicial de aquecimento para diversos materiais. Testes experimentais com alumínio, bronze, cobre e aço inoxidável validaram o modelo, demonstrando uma boa concordância com desvios relativos abaixo de 9% para o tempo de aquecimento, abaixo de 3% para a temperatura de equilíbrio e abaixo de 17% para as previsões da taxa térmica inicial. Os resultados obtidos demonstraram que as respostas térmicas dependem significativamente da massa da amostra e do calor específico do material, com a área da lente e a radiação solar exerce uma influência positiva na temperatura e taxa de aquecimento.

Para tornar o processo de produção de cal (CaO) mais sustentável, Palhares (2022) investigou a calcinação de cascas de ovos, um resíduo da avicultura, utilizando um concentrador solar de lente de Fresnel. Foi demonstrado que o sistema proposto pode atingir uma conversão entre 43,15% e 86,05%, em apenas 20 minutos, dependendo das condições experimentais. A calcinação completa foi alcançada em 30 minutos para partículas com dimensões entre 600 e 1000 μm, a uma temperatura entre 876 e 896 °C, utilizando uma massa de 2,0 g de cascas de ovos.

Um estudo desenvolvido por Martins et al. (2022) demonstrou ser possível a utilização de lente de Fresnel para conduzir a pirólise catalítica da *Spirulina platensis*, aumentando

significativamente a sustentabilidade e eficiência do processo, através do uso da radiação solar concentrada como fonte de aquecimento sem a necessidade de combustíveis fósseis ou eletricidade. A lente de Fresnel permitiu um aquecimento rápido, atingindo temperaturas ideais de pirólise (cerca de 600 °C) em aproximadamente 5 minutos, proporcionando um ambiente controlado e energeticamente eficiente para a conversão da biomassa. Consequentemente, a integração da lente de Fresnel não só facilitou a obtenção de bio-óleo com rendimento mais elevado (até 43,4%) em comparação com os catalisadores convencionais, como também suportou um processo de pirólise mais sustentável, destacando o seu potencial como tecnologia limpa e econômica para a produção de biocombustível a partir de microalgas.

Diante do consolidado histórico de pesquisas da Universidade Federal de Uberlândia sobre lentes de Fresnel em diversas áreas de aplicação, como pirólise de biomassa, aquecimento e dessalinização, apresenta-se uma oportunidade promissora para sua investigação na desinfecção solar da água. A intensificação da radiação solar proporcionada por essas lentes pode otimizar processos como a SODIS, ampliando a eficiência na inativação de microrganismos patogênicos. Além disso, as características meteorológicas da região do Triângulo Mineiro, marcada por altos índices de irradiância solar, baixa nebulosidade e longos períodos de estiagem, favorecem a condução destes estudos.

2.11 Fluidodinâmica Computacional (CFD) aplicada ao projeto de fotorreatores

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) passou a ser amplamente utilizada no desenvolvimento e na melhoria de fotorreatores por permitir simulações minuciosas e integradas envolvendo o escoamento de fluidos, o transporte de radiação, a transferência de massa e as reações químicas envolvidas. Por meio da aplicação de CFD, é possível analisar variações espaciais e temporais no interior dos reatores, o que possibilita a estimativa de parâmetros como velocidades do fluido, perfis de radiação, concentrações de reagentes e produtos, bem como as taxas de reação.

Avanços significativos no desenvolvimento de modelos numéricos de resolução de turbulência, e transporte de massa e energia foram fundamentais para predições confiáveis da degradação fotocatalítica e inativação microbiana. Modelos de turbulência, como o realizável k-ε, têm demonstrado resultados aceitáveis em fotorreatores anulares, apoiando a modelagem para capturar características fluidodinâmicas relevantes nestes tipos de reatores que possuem uma lâmpada UV no interior, como predição de zonas mortas, tempo de residência e intensidade do campo de radiação (NAGHAVI; JALALI; RAISEE, 2021; QI et al., 2011).

Além disso, técnicas de resolução e estratégias de refino de malha evoluíram para aumentar a precisão numérica e a eficiência computacional. Por exemplo, melhorias nos métodos de soluções da equação de transporte de energia (RTE) como o modelo de ordenadas discretas (DOM) reduziram a difusão numérica e os erros de "*false scattering*", contribuindo para cálculos mais precisos do campo de radiação (CRAIG et al., 2016; MOGHIMI; CRAIG; MEYER, 2015). O desenvolvimento e a validação de ferramentas CFD de código aberto que incorporam modelos avançados de radiação também expandiram o acesso a recursos sofisticados de simulação para uma comunidade de pesquisa mais ampla (MORENO-SANSEGUNDO; CASADO; MARUGÁN, 2020).

A modelagem da radiação constitui um aspecto central das simulações CFD em fotorreatores, com vários métodos de solução empregados dependendo da complexidade do reator e da precisão desejada. O método de ordenadas discretas (DO) é amplamente utilizado, resolvendo a Equação de Transporte Radiativo (RTE) em diferentes direções angulares e capturando efetivamente os fenômenos de absorção, emissão e dispersão de radiação. Sua integração em pacotes CFD comerciais e relativa eficiência computacional o tornam uma técnica preferida em muitas aplicações fotoquímicas e solares térmicas (CRAIG et al., 2016; GARCÍA-GIL et al., 2019; MOGHIMI; CRAIG; MEYER, 2015).

No entanto, a precisão do método DO depende fortemente da discretização angular e do refino da malha. A resolução angular incorreta pode induzir o chamado "*ray-effect*", sombras ou faixas de radiação artificiais no campo, que pode ser mitigado pelo aumento do número de ângulos discretos e pelo emprego de esquemas de discretização de ordem superior. Adicionalmente, o refinamento da malha reduz principalmente os erros de "*false scattering*", que são menos prejudiciais quando são empregados esquemas *upwind* de segunda ordem (CRAIG et al., 2016; MOGHIMI; CRAIG; MEYER, 2015). No entanto, o DO pode ser computacionalmente desafiador ao lidar com geometrias altamente complexas devido ao aumento do número de direções necessárias, às vezes resultando em difusão numérica que pode reduzir a fidelidade da solução.

As aplicações de desinfecção solar da água (SODIS) também se beneficiaram da modelagem CFD multifísica. García-Gil et al. (2019) desenvolveram rotinas para o cálculo da posição do vetor solar com base em dados geográficos e temporais, permitindo fazer predições realistas da irradiância solar para fotorreatores tubulares acoplados a coletores parabólicos compostos (CPC), e através de simulações puderam identificar o perfil de radiação incidente em diferentes localidades. Os modelos cinéticos validados previram com sucesso a inativação da E. coli, estabelecendo um procedimento bastante robusto para o dimensionamento da

tecnologia SODIS em fotorreatores acoplados a concentradores solares. Casado et al. (2023) ampliaram ainda mais o leque de simulações de inativação microbiana ao integrarem métodos de rastreamento de partículas com radiação e cinética de reação, permitindo o cálculo de eficiências de desinfecção resolvidas espacial e temporalmente ao longo de trajetórias microbianas individuais, em vez de avaliar somente o comportamento médio do volume do reator.

Um ponto em comum entre todos os estudos de CFD aqui mencionados é que a configuração otimizada de um sistema de fotorreatores, tanto com fonte de luz natural ou artificial, necessariamente passa pela intensificação da radiação incidente dentro do reator. O presente trabalho busca contribuir com esta estratégia através da investigação do uso de lentes de Fresnel, então predominantemente utilizadas em outras aplicações energéticas, para concentrar os raios de luz no reator e fornecer fótons para a desinfecção solar da água. Os esforços aqui apresentados são precursores desta área na Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia e possuem como objetivo adicional pavimentar um caminho para investigações, não apenas na área de desinfecção de microrganismos como também outros processos fotocatalíticos.

CAPÍTULO 3 - MATERIAIS E MÉTODOS

O desenvolvimento do presente trabalho foi estratificado nas seguintes etapas: concepção das unidades experimentais, execução de análises experimentais de actinometria com ferrioxalato de potássio, desenvolvimento de modelos de fluidodinâmica computacional representativos destas unidades, execução de planejamentos de simulação para verificação dos efeitos das variáveis operacionais e finalmente, a avaliação numérica do desempenho dos concentradores na desinfecção de água contaminada por *E.coli*. As seções apresentadas neste capítulo buscam detalhar a metodologia de cada uma destas etapas.

3.1 Concepção e Construção das Unidades Experimentais

As unidades de concentração solar com lentes de Fresnel foram inicialmente projetadas com o auxílio do software *Spaceclaim* do pacote *Ansys® Workbench*. Estruturas para rotação nos ângulos azimute e zênite foram projetadas para facilitar a operação manual e prover estabilidade das unidades quando posicionadas com a face da lente voltada para o Sol. A principal diferença entre os dois sistemas, além do tipo de lente empregada, é a configuração do reator e a presença de recirculação, sendo o sistema com lente linear dotado de uma bomba que promove a recirculação de água ao longo de um tubo, enquanto o sistema com lente pontual possui apenas o frasco que contém a solução a ser tratada.

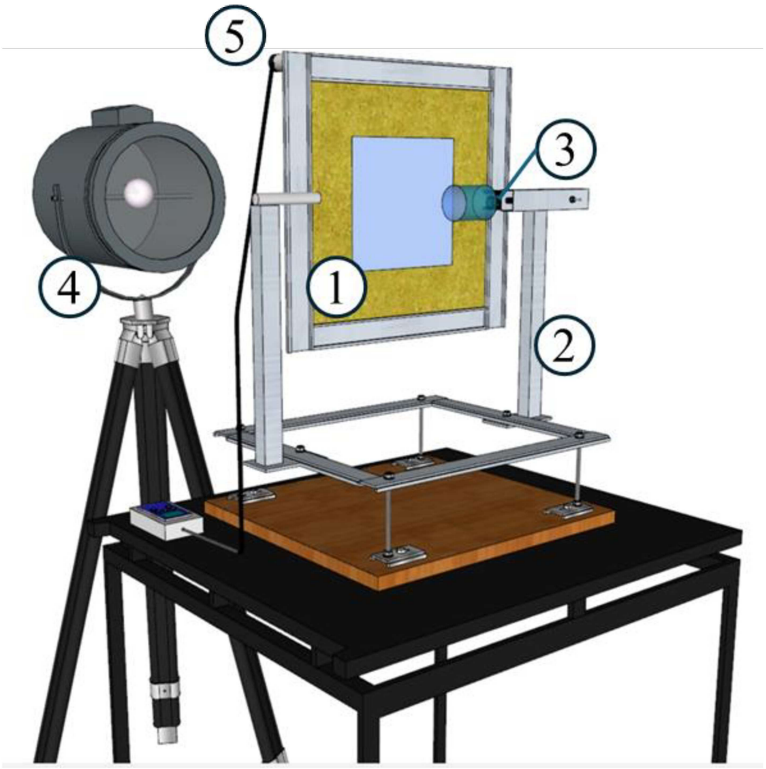
3.1.1 Sistema Concentrador Pontual

Na Figura 3.1 apresenta-se esquematicamente a unidade experimental com lente de Fresnel pontual, detalhando os demais componentes que a constituem. O sistema concentrador conta com lente de Fresnel pontual reaproveitada de um retroprojetor, estrutura de suporte para ajustes do ângulo azimute e inclinação da lente, radiômetro SolarLight ® Modelo PMA2100 Dual-Input Data Logging com sensor UVA, e reator constituído de frascos de penicilina de diferentes volumes (15 mL, 39 mL, 62 mL) constituídos de vidro comum com paredes de 2 mm de espessura. A lente de Fresnel possui lados de 30 cm de comprimento totalizando uma área de 900 cm^2, e uma distância focal de 13,5 cm. Para os testes com lâmpada halógena que serão detalhados nas próximas seções, esta área foi reduzida para 171,61 cm^2 possibilitando analisar uma área de coleta de luz menos heterogênea na lente devido à característica da fonte emissora utilizada que consistia em uma lâmpada halógena PAR 64 1000W F2 da GE acoplada a um

canhão de luz para focalização. A medição da temperatura atingida pela solução era realizada ao final de cada experimento.

A concepção dos reatores batelada utilizados nessa unidade foi realizada com base em materiais de fácil obtenção no mercado. Devido à alta capacidade concentradora das lentes de Fresnel pontuais e a alta temperatura atingida no ponto focal da lente, o uso de garrafas PET não pôde ser implementado. Dessa forma, os materiais de vidro foram mais indicados para esse caso. Portanto, devido à alta disponibilidade e facilidade de obtenção, frascos de penicilina de diferentes volumes constituídos de vidro comum com paredes de 2 mm de espessura foram utilizados como fotorreatores nesta unidade. A extremidade da tampa foi acoplada a uma haste ajustável para posicionamento em diferentes elevações dentro do trajeto dos raios de luz convergidos até o ponto focal.

Figura 3.1 – Unidade experimental com lente de Fresnel do tipo pontual. a) 1-Lente de Fresnel pontual, 2-Estrutura de suporte, 3-Frasco de penicilina com solução actinométrica, 4-lâmpada halógena, 5-célula de medição e radiômetro SolarLight ®.

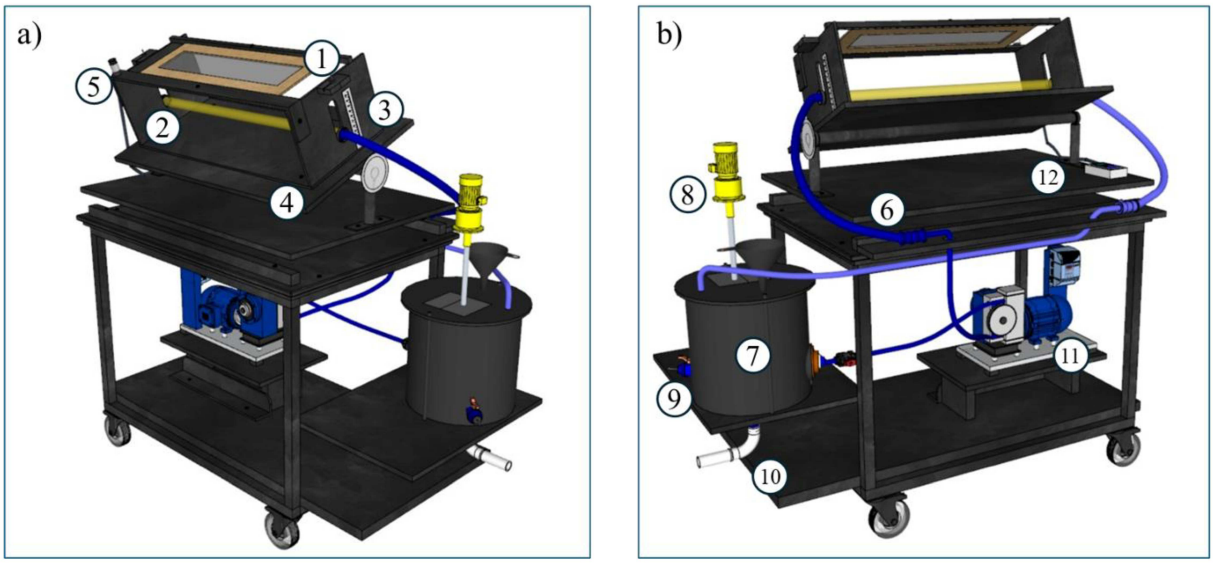


Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.1.2 Sistema Concentrador Linear

Na Figura 3.2 apresenta-se a unidade experimental com sistema de concentração de luz por lente de Fresnel linear, a qual foi projetada e construída na Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia com os seguintes componentes: (1) lente de Fresnel linear PMMA da NTKJ Co. Ltda. com área útil de 1000 cm^2 (20 cm x 50 cm^2) e comprimento focal de 20 cm, (2) reator tubular de vidro borossilicato Duran® com diâmetro interno de 26 mm, espessura de 2 mm e 50 cm de comprimento, (3) estrutura de suporte da lente com dispositivo de posicionamento do reator tubular ao longo do foco, (4) base superior com rolamentos para alinhamento com a radiação direta incidente, (5) radiômetro SolarLight ® Modelo PMA2100 Dual-Input Data Logging com sensor UVA, (6) mangueiras opacas para circulação da solução, (7) tanque de PVC de 5L usado como reservatório, (8) agitador mecânico com pás de PVC para homogeneização da solução contida no tanque, (9) válvula de PVC para amostragem no fundo do tanque, (10) válvula de purga no fundo do tanque para permitir a troca de solução e limpeza do tanque, (11) bomba para promover a recirculação do fluido e com inversor de frequência acoplado para controle da vazão, e (12) base rotatória para posicionamento do ângulo azimute.

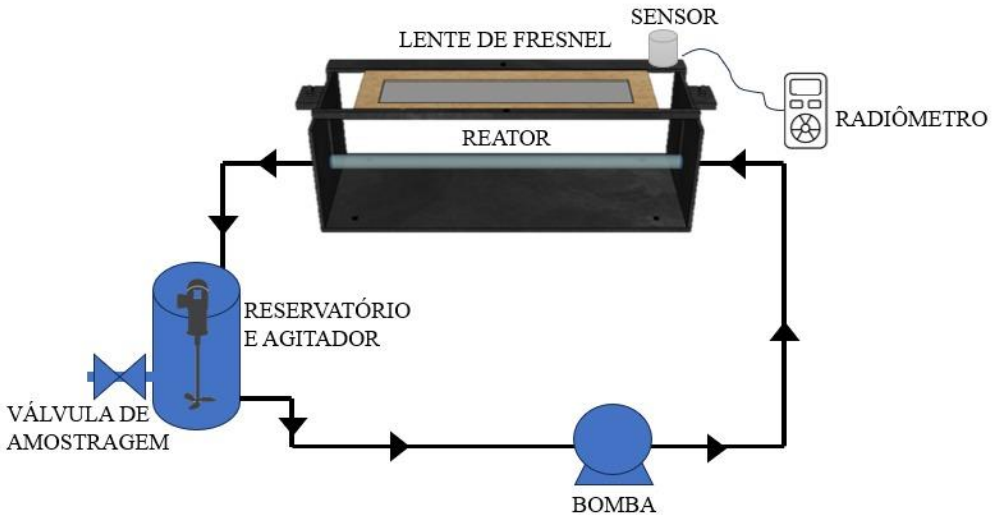
Figura 3.2 – Maquete 3D da unidade experimental com lente de Fresnel linear: a) 1 – lente linear, 2- reator tubular, 3- estrutura de suporte, 4- base superior, 5 – sensor UV do radiômetro, b) 6 - mangueiras opacas, 7 - tanque de PVC de 5L, 8 - agitador mecânico, 9 - válvula de amostragem, 10 - válvula de limpeza, 11- bomba de recirculação, 12 - base rotatória.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

O fluxograma representativo do processo é apresentado por sua vez na Figura 3.3. A solução presente no reservatório que conta com agitação é enviada para o reator tubular pela bomba peristáltica. Ao chegar no reator, a solução é irradiada pelos raios solares concentrados através da lente de Fresnel linear, ocorrendo a reação e o fluido retorna ao reservatório onde ocorre a diluição da solução. A válvula de amostragem era posicionada próximo a tubulação de saída para a bomba, possibilitando uma coleta representativa da concentração na entrada do reator e evitando o ingresso de bolhas na unidade.

Figura 3.3 – Fluxograma da operação da unidade concentradora com lente linear.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Todos os acessórios de tubulação, como válvulas, mangueiras e adaptadores são constituídos de materiais não metálicos, em sua maioria de PVC, para evitar processos oxidativos com a estrutura destes materiais quando utilizadas soluções diferentes de água que podem possuir um relevante grau de acidez, como o ferrioxalato de potássio – actinômetro utilizado nos experimentos de validação do modelo CFD e também como reação representativa de reações fotoativadas durante a análise dos efeitos das variáveis operacionais.

Com exceção ao tubo de vidro borossilicato, todos os demais componentes da unidade são opacos, e a unidade experimental encontra-se acoplada em uma bancada com rodas para possibilitar o posicionamento e movimentação da unidade. Nos experimentos com actinometria de ferrioxalato de potássio, a área efetiva da lente é reduzida com uma cobertura de 3 camadas de papel pardo para 661,2 cm^2 (17,4 cm x 38 cm), visando corresponder ao modelo utilizado

nas simulações CFD. As estruturas da unidade foram pintadas de preto para reduzir os efeitos de reflexão da superfície e garantir que apenas a radiação transmitida da lente incidisse sobre o reator.

3.2 Caracterização UV-VIS dos Componentes Ópticos

Os componentes ópticos dos dois sistemas concentradores foram analisados através de espectroscopia de absorção molecular na região do ultravioleta e visível (UV-vis) em um espectrofotômetro Shimadzu/UV-2600i no Laboratório da Graduação 5T06 do Instituto de Química da UFU (IQ-UFU). Amostras da solução actinométrica de ferrioxalato de potássio, tubo de vidro borossilicato Schott® e vidros de penicilina foram analisadas no equipamento em uma faixa de radiação de 190 nm a 800 nm. Os valores de absorbância obtidos para cada comprimento de onda foram tratados para obtenção dos respectivos valores de transmitância conforme a forma mais simples da Lei de Beer Lambert que estabelece uma relação empírica entre a absorção da luz e as propriedades de um material à medida que a luz viaja por ele através de um caminho com comprimento definido:

$$A = \ln\left(\frac{I_{0,\lambda}}{I_{\lambda}}\right) = \varepsilon c l \tag{3.1}$$

$$A = \ln\left(\frac{1}{T}\right) \tag{3.2}$$

Em que A é a absorbância, $I_{0,\lambda}$ é a radiação monocromática incidida por um feixe de luz de determinado comprimento de onda λ, I é a radiação monocromática transmitida através de um caminho óptico l, T é a transmitância do material, dada pela relação $\left(\frac{I}{I_0}\right)$, ε é coeficiente de absorção molar do material/solução, e c é a concentração das espécies absorvedoras.

Os valores médios de transmitância calculados para as amostras de cada componente do sistema apresentados nas próximas subseções foram calculados através da média com área normalizada, utilizando o método dos trapézios para o cálculo da integral das curvas obtidas, e dividindo pelo intervalo do comprimento de onda, conforme a equação a seguir:

$$T = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} T(\lambda) d\lambda \tag{3.3}$$

Em que λ_2 é o limite superior e λ_1 o limite inferior do intervalo de comprimento de onda avaliado por meio da técnica UV-vis.

Na Figura 3.4 são apresentados os espectros de transmitância dos componentes ópticos do sistema. O actinômetro Ferrioxalato de Potássio utilizado neste trabalho possui uma faixa de comprimentos de onda de excitação de 250 a 550 nm e um rendimento quântico que varia nessa faixa entre aproximadamente 1,24 e 0,15, respectivamente (BRAUN; OLIVEROS; MAURETTE, 1991; ZALAZAR et al., 2005). Devido à concentração utilizada no estudo (0,04 mol/L), foi realizada uma caracterização com a técnica de UV-Vis para determinar o intervalo de absorção completa dos fótons incidentes na solução de acordo com o comprimento de luz incidente. Pode-se observar que na faixa de comprimento de onda de 200nm a 400 nm toda a luz incidida na solução é absorvida. Na faixa de luz visível a absorbância da solução decresce, permitindo a passagem parcial de luz e aumentando a transmitância da solução. Tomando como base a faixa de 250 nm a 550 nm para excitação das espécies químicas na reação de actinometria, pôde-se calcular uma transmitância média (método dos trapézios) de aproximadamente 4,6%, ou seja, 95,4% da radiação nessa faixa de comprimento de onda que é irradiada na solução é absorvida e utilizada na redução de íons Fe^{3+} em Fe^{2+}.

Para o tubo de vidro borossilicato Schott®, foi encontrada uma transmitância de 85,0% para a faixa 250 nm a 550 nm (actinometria) e para a faixa UVA relevante para a desinfecção este percentual é de 80%. Estes resultados levantados confirmam a preferência de mercado no uso de vidros de borossilicato para a construção de reatores solares, devido seu valor comercial reduzido em relação a vidros de quartzo, fornecendo uma transmitância satisfatória para processos com comprimentos de onda maiores ou iguais à faixa UVA.

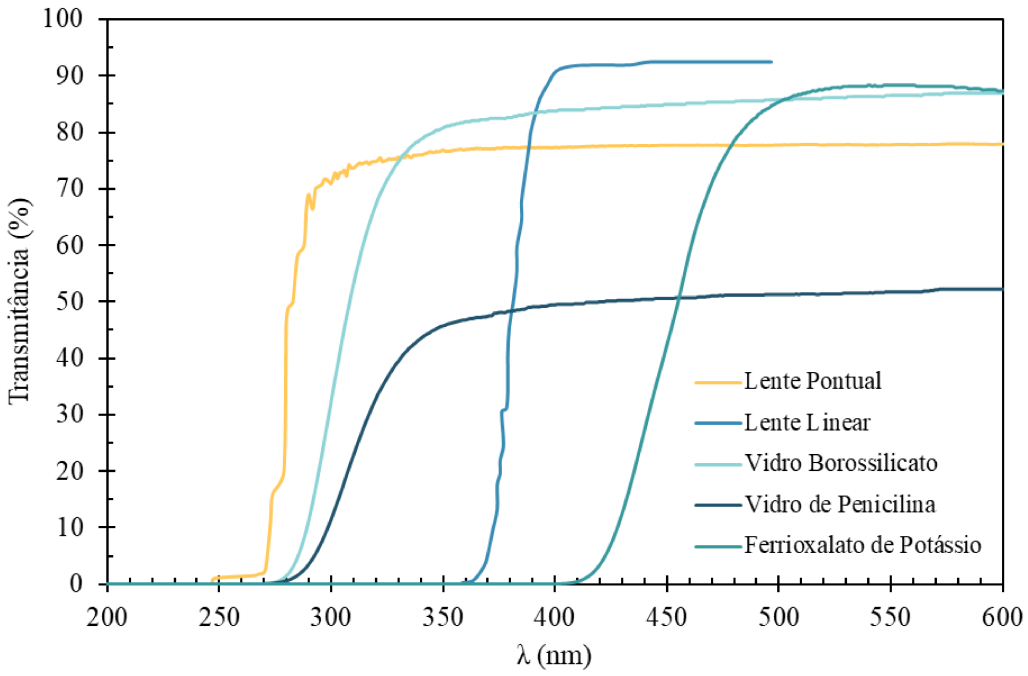
Originalmente frascos de penicilina não têm como objetivo aplicações ópticas. Seu uso neste trabalho foi definido devido a disponibilidade deste material no laboratório, custo reduzido e relativa resistência a altas temperaturas. Dessa forma, como pode-se observar na Figura 3.4, os valores de transmitância obtidos para as paredes dos frascos de penicilina são menores que aqueles obtidos para o tubo de borossilicato, e apresentaram uma transmitância média de 40,05% para a faixa 250 nm a 550 nm e 39,70% para a faixa UVA relevante para a desinfecção.

Dados de transmitância para a lente de Fresnel linear foram obtidos do fabricante NTKJ Co. Ltda. O polimetacrilato de metila (PMMA), também conhecido como acrílico, é um dos

plásticos com maior transparência, sendo um substituto direto do vidro em variadas aplicações. No processo de moldagem o PMMA pode ser trabalhado para formar as estruturas que compõem a lente de Fresnel, possibilitando aplicações em processos de concentração solar. O percentual de transmitância médio para a faixa 250 a 550 nm foi de 77,14%, enquanto para a faixa UVA foi de 37,93%. Já para os valores de transmitância obtidos para com lente de Fresnel pontual reaproveitada de um retroprojetor observa-se uma transmitância média de 73,43% no intervalo de 250 a 550 nm e 76,14% para a faixa UVA, valore estes próximos do observado para a lente de Fresnel linear.

Os valores de transmitância aqui levantados foram utilizados para contabilizar as perdas por absorção pelos materiais das lentes e reatores, simulando no CFD apenas o percentual de luz que passa por esses meios. Para cada tipo de reação modelada, a respectiva faixa de radiação foi contabilizada, ou seja, para a actinometria a faixa de 250 a 550 nm foi utilizada e para a desinfecção da *E. coli* a faixa UVA foi utilizada.

Figura 3.4 – Transmitância (%) da solução de ferrioxalato de potássio 0,04 mol/L.



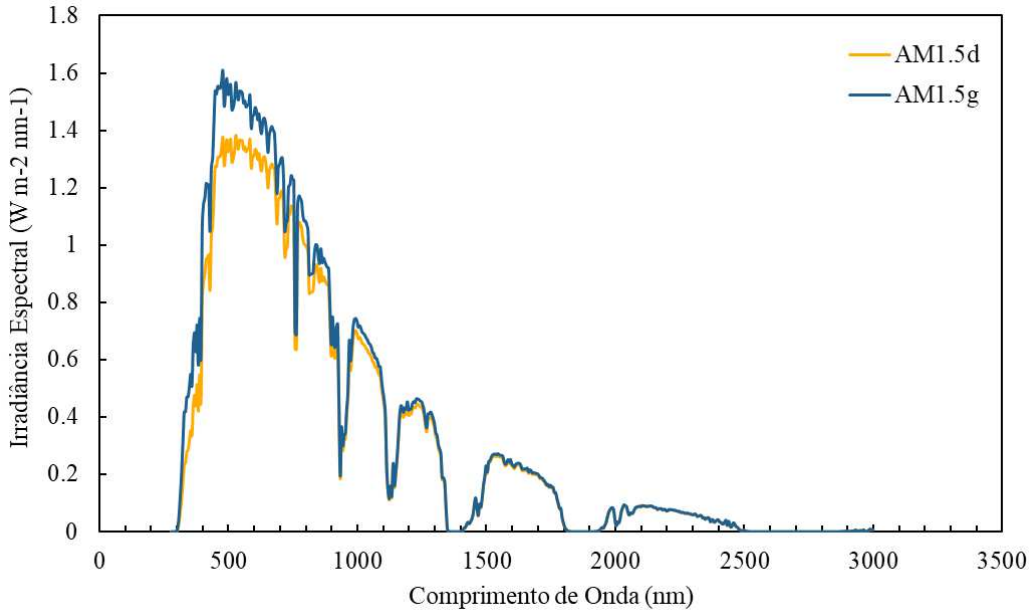
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.3 Espectros de radiação solar e lâmpada halógena

Na modelagem de fotorreatores com fontes de luz policromáticas é importante a caracterização dos espectros de radiação emitida, sejam elas uma fonte natural (Sol) ou uma fonte artificial. O espectro solar utilizado para o cálculo da radiação incidente a ser atribuída na modelagem dos concentradores foi o espectro padrão ASTM G-173 AM1.5 (BIRD; HULSTROM; LEWIS, 1983), amplamente utilizado pela comunidade científica para ferramentas de cálculo de incidência solar terrestre de acordo com a posição geográfica de módulos solares, hora e dia do ano, selecionando-se a componente direta da radiação conforme apresentado na Figura 3.5.

Para cada experimento de actinometria realizado neste trabalho foram anotados o dia e hora, e dados teóricos de radiação solar direta interceptada pela lente foram respectivamente obtidos. De posse destes valores foi possível calcular o percentual de contribuição de cada faixa do espectro de radiação que atua na redução dos íons Fe^{3+}, partindo-se do valor de radiação UVA incidente medido na lente com o radiômetro, sendo elas: 300 nm a 400 nm, 400 nm a 436 nm, e 436 nm a 550 nm. Os percentuais médios de contribuição do espectro de luz obtidos do modelo AM1.5d foram respectivamente 4% para a faixa UVA (300 nm a 400 nm), 3% para a faixa 400 nm a 436 nm e 16 % para a faixa 436 nm a 550 nm.

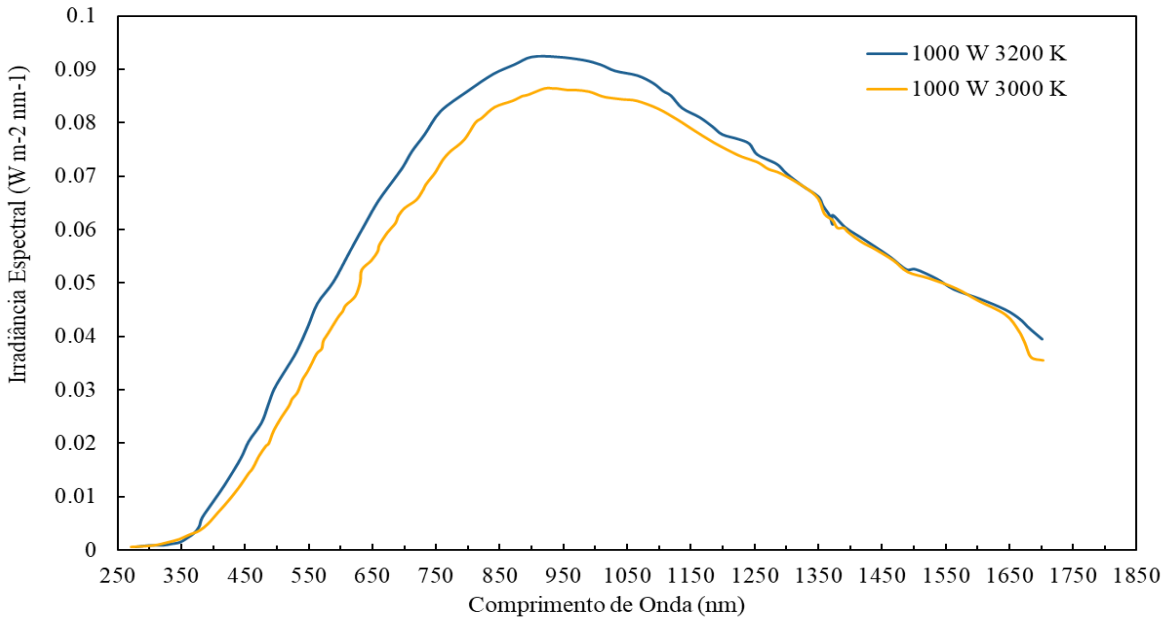
Figura 3.5 – Espectro solar ASTM G-173 AM 1.5 com sua componente direta (AM1.5d) em destaque. Dados do modelo de GUEYMARD, (1995).



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Em relação ao espectro emitido pela lâmpada halógena, dados de irradiância espectral comuns para lâmpadas halógenas de 1000W foram obtidos da literatura e o mesmo procedimento aplicado aos valores do espectro solar foi realizado (RATAJCZAK, 2013). Deste espectro (Figura 3.6) foram calculados os seguintes percentuais médios de contribuição para cada comprimento de onda relevante na actinometria com ferrioxalato: 0,26 % para a faixa UVA (300 nm a 400 nm), 0,12 % para a faixa 400 nm a 436 nm e 3,00 % para a faixa 436 nm a 550 nm.

Figura 3.6 – Irradiância espectral típica para lâmpadas halógenas.



Fonte: Adaptado de (RATAJCZAK, 2013).

3.2 Metodologia Experimental

Nesta seção são apresentados os procedimentos experimentais realizados com o intuito de comparar suas respostas com os modelos computacionais representativos das unidades experimentais que foram desenvolvidos nesta tese e serão apresentados na sequência do trabalho. Dessa forma, o preparo da solução actinométrica e os detalhes dos experimentos em ambas as unidades são apresentados em subseções separadas.

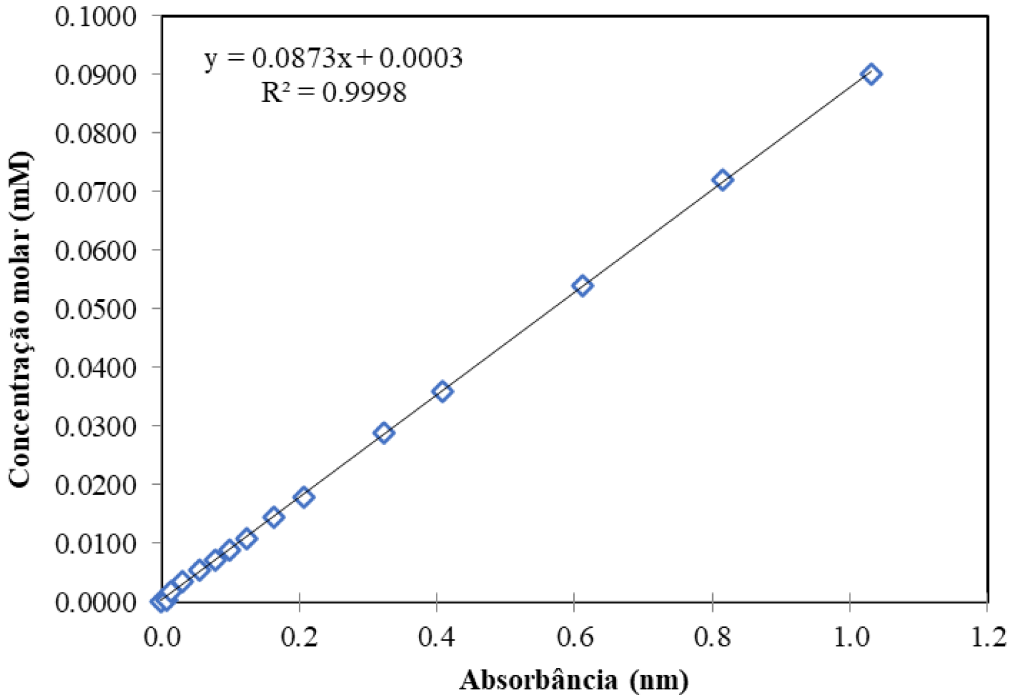
3.2.1 Preparação da solução actinométrica

Foram preparadas soluções aquosas de ferrioxalato de potássio com 0,04 mol/L de nitrato de ferro (III) nonahidratado $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ e 0,12 mol/L de oxalato de potássio $K_2C_2O_4 \cdot H_2O$ em meio ácido e com água ultrapura com condutividade de 0,5µS/cm. As soluções foram preparadas em sala escura e ficaram acondicionadas em galões de 5 L opacos, que foram armazenados por sua vez em ambiente com ausência de luz até o momento dos experimentos. Os experimentos de actinometria foram conduzidos especificamente para cada unidade concentradora (linear e pontual) e os detalhes de cada procedimento são apresentados nas seções a seguir.

Ao longo dos experimentos foram coletados 100 µL de amostra em tempos definidos que foram inseridos em uma solução contendo 2 mL de 1,10-fenantrolina, 1,6 mL de acetato de sódio e 6,3 mL de água, completando um volume total de 10 mL em um vidro âmbar coberto por papel alumínio. As soluções complexantes foram agitadas vigorosamente por 1 minuto e acondicionadas em um compartimento fechado por 60 min para garantir a completa complexação dos íons Fe^{2+} gerados no processo de irradiação dos reatores. Após o período de repouso as amostras foram colocadas no espectrofotômetro e a leitura da absorbância foi realizada a 510 nm. O cálculo dos valores de concentração de Fe^{2+} em função da absorbância foi realizado com uma curva de calibração obtida através dos procedimentos padrão de análise de água e efluentes (BAIRD et al., 2017).

Neste trabalho, a actinometria foi utilizada como uma reação representativa para a investigação dos parâmetros operacionais dos sistemas concentradores e, portanto, os valores de concentração de Fe^{2+} obtidos em cada intervalo de tempo foram utilizados para verificar a adequação dos modelos de radiação e cinética simulados.

Figura 3.7 – Curva de calibração de Fe^{2+} obtida com o preparo de 14 soluções de íons ferrosos, para leitura a 510 nm no espectrofotômetro.



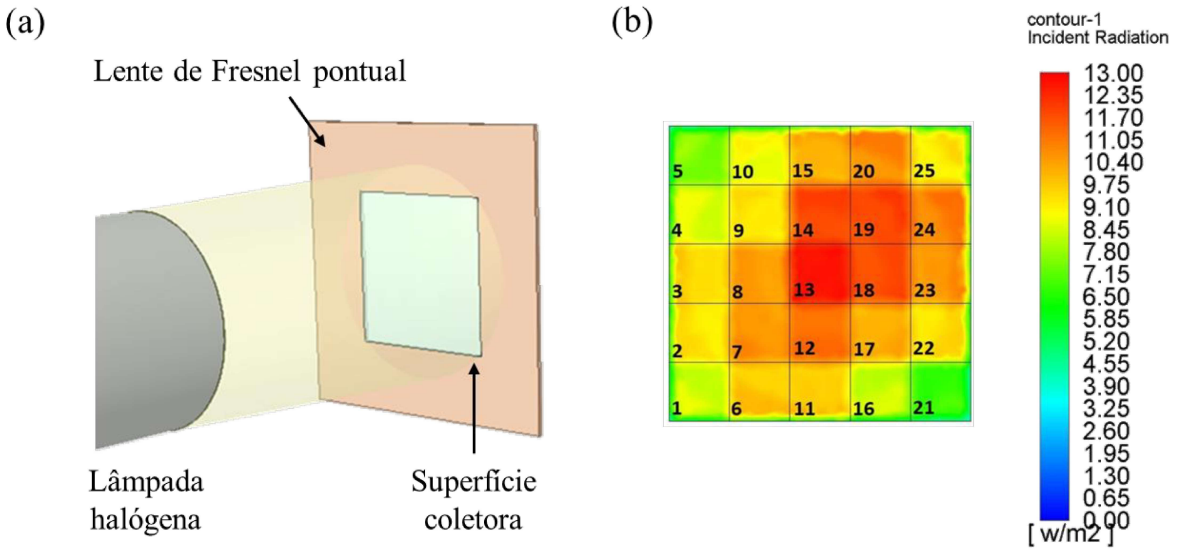
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.2.2 Experimentos de Actinometria (Sistema Concentrador Pontual)

Os experimentos do sistema concentrador com lente de Fresnel pontual foram realizados com o auxílio de uma lâmpada halógena PAR 64 1000W F2 da GE acoplada a um canhão de luz que foi posicionado a 45 cm da unidade apontando para a superfície livre da lente.

Dada a natureza da fonte de luz e consequente distribuição não-homogênea na área de coleta (superfície exposta da lente) foi necessário criar virtualmente subdivisões para medição com o sensor do radiômetro conforme é apresentado na Figura 3.8 . Com a lâmpada ligada, o sensor foi posicionado em cada uma das 25 posições (área de 6,9 cm^2) e mantido nesta posição até a estabilização da medida de radiação incidente ($W \cdot m^{-2}$). Os valores medidos e apresentados na Tabela 3.1 compõem uma radiação UVA média de 10,17 $W \cdot m^{-2}$. Para possibilitar a comparação com as simulações de actinometria conduzidas no modelo computacional representativo desta unidade, esses valores de radiação UVA foram convertidos de acordo com as proporções do espectro da lâmpada utilizada e apresentado anteriormente na Figura 3.6.

Figura 3.8 – Subdivisões consideradas na superfície coletora da lente de Fresnel pontual: (a) representação esquemática da irradiação da superfície da lente; (b) radiações incidentes medidas em cada região.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Tabela 3.1 – Valores de radiação UVA incidente nas subdivisões da lente.

Seção	I ($W \cdot m^{-2}$)	Seção	I ($W \cdot m^{-2}$)	Seção	I ($W \cdot m^{-2}$)
1	7,28	10	7,96	19	11,10
2	8,33	11	8,87	20	9,65
3	8,64	12	10,70	21	5,92
4	7,72	13	12,30	22	8,43
5	6,57	14	11,30	23	9,60
6	8,78	15	9,24	24	9,74
7	9,91	16	7,52	25	7,92
8	10,00	17	9,55	-	-
9	8,74	18	11,20	-	-

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Foram definidos 10 tempos de amostragem para construção da cinética de formação do Fe^{2+} sendo estes: 15 s, 30 s, 45 s, 60 s, 75 s, 90 s, 120 s, 150 s, 180 s e 240 s. Cada tempo dos experimentos corresponde a um frasco de penicilina completamente preenchido com a solução

do actinômetro, devidamente vedado e sem a presença de bolhas. Os frascos foram acondicionados em um recipiente escuro e no momento de prendê-los na haste já ajustada para a posição desejada em relação ao ponto focal, um tecido escuro foi posicionado na frente da lente de Fresnel e ao redor dos limites da unidade para reduzir a exposição dos frascos à radiação antes da execução dos testes. Após o posicionamento do frasco, o tecido é retirado e o cronômetro é acionado simultaneamente dando início ao teste.

Ao final do tempo de irradiação do reator o tecido é recolocado na unidade e o frasco desacoplado, o lacre é então removido e uma amostra de 100 μL é coletada para o procedimento de complexação de Fe^{2+} com 1,10-fenantrolina e subsequente análise no espectrofotômetro, conforme descrito na seção anterior. Após a coleta da amostra do frasco uma verificação da temperatura atingida foi realizada. Em todos os casos, devido ao curto período de exposição dos frascos à radiação e à baixa incidência de luz na faixa UVA-Vis promovida pela lâmpada halógena, os máximos valores de temperatura (observados nos maiores tempos) não ultrapassaram 63°C.

Foram realizados 3 experimentos com as configurações apresentadas na Tabela 3.2. O objetivo foi buscar variações na posição e volume do reator, D_L e V_R respectivamente, para viabilizar a aplicação do modelo CFD em um planejamento de simulações com a reação de actinometria.

Tabela 3.2 – Experimentos de actinometria com lente de Fresnel pontual. Radiação incidente média na superfície da lente igual a 10 $W \cdot m^{-2}$.

Ensaio	D_L (cm)	V_R (mL)
1	13,50 (foco)	62
2	8,25	39
3	3,00	15

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

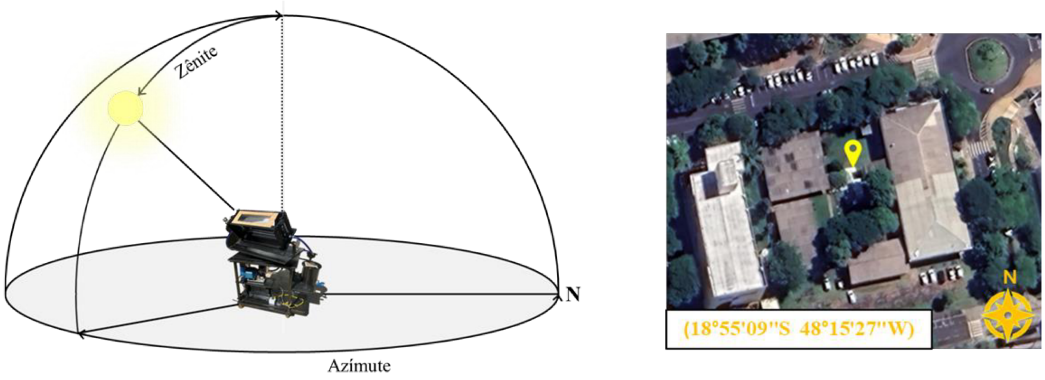
3.2.3 Experimentos de Actinometria (Sistema Concentrador Linear)

Devido à extensão da lente de Fresnel linear e à estrutura da unidade experimental, os experimentos do modelo concentrador linear foram conduzidos sob radiação solar, fornecendo assim uma distribuição homogênea de radiação direta na superfície da lente. Ambos os testes preliminares e os experimentos foram conduzidos nos meses de maio e junho de 2024, períodos caracterizados por clima seco e baixa nebulosidade. Esses procedimentos foram realizados no campus Santa Mônica da Universidade Federal de Uberlândia (18°55'09"S 48°15'27"W), nos

entre 10 e 13 h, buscando garantir menor nebulosidade e variações no ângulo azimutal e de zênite do Sol. Dessa forma, buscou-se condições climáticas favoráveis com ausência de nuvens para garantir uma radiação direta constante durante as corridas experimentais.

A estrutura da unidade experimental possibilita um ajuste manual de forma que a face da lente de Fresnel possa estar voltada para a radiação direta do Sol ao longo do experimento conforme apresentado no esquema da Figura 3.9.

Figura 3.9 – Posicionamento da unidade experimental em relação ao Sol e localização da unidade experimental.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

No início de cada experimento, a unidade foi posicionada e ajustada para que a lente de Fresnel ficasse alinhada com os ângulos azimute e zênite diretamente para o Sol. Um tecido escuro foi utilizado para proteger a unidade até o início das corridas experimentais. Em cada teste 5 L da solução de FeOx foram carregados no reservatório fechado, a agitação foi acionada a 100 rpm e mantida contante ao longo de toda a corrida. Após 5 minutos de agitação no tanque reservatório, a bomba foi acionada até a vazão desejada e a recirculação foi mantida por mais 5 minutos antes de iniciar a irradiação da solução recirculante.

Amostras foram coletadas através de uma válvula no fundo do tanque reservatório, este posicionado próximo à sucção da bomba, nos seguintes tempos: 0 s (sem irradiação), 5 s, 10 s, 15 s, 20 s, 25 s, 30 s, 35 s e 40 s. Cada amostra coletada era inserida em um vidro âmbar contendo a solução complexante de 1,10-fenantrolina previamente preparada, o vidro agitado vigorosamente por 1 min e então armazenado em um compartimento escuro por 90 min para garantir a completa complexação dos íons Fe^{2+} formados. Após este intervalo de tempo, a absorbância das amostras foi lida no espectrofotômetro a 510 nm e a concentração de Fe^{2+} calculada.

Em cada amostragem o valor de radiação incidente foi anotado e ao final de cada corrida experimental a temperatura da solução de ferrioxalato presente no tanque de recirculação foi medida, não ultrapassando 35°C em nenhuma das corridas realizadas. Ao se iniciar e finalizar cada experimento a unidade foi lavada continuamente com água da torneira e em seguida com água deionizada.

Na Tabela 3.3 apresenta-se a configuração dos experimentos realizados com o intuito de comparação com os resultados do modelo computacional representativo da unidade experimental que será apresentado nas próximas seções.

Tabela 3.3 – Experimentos de actinometria com lente de Fresnel linear.

Ensaio	**D_L (cm)**	**Q ($L \cdot min^{-1}$)**
1	20 (foco)	2,4
2	13,5	1,4
3	7,0	0,4

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.3 Fluidodinâmica Computacional (CFD)

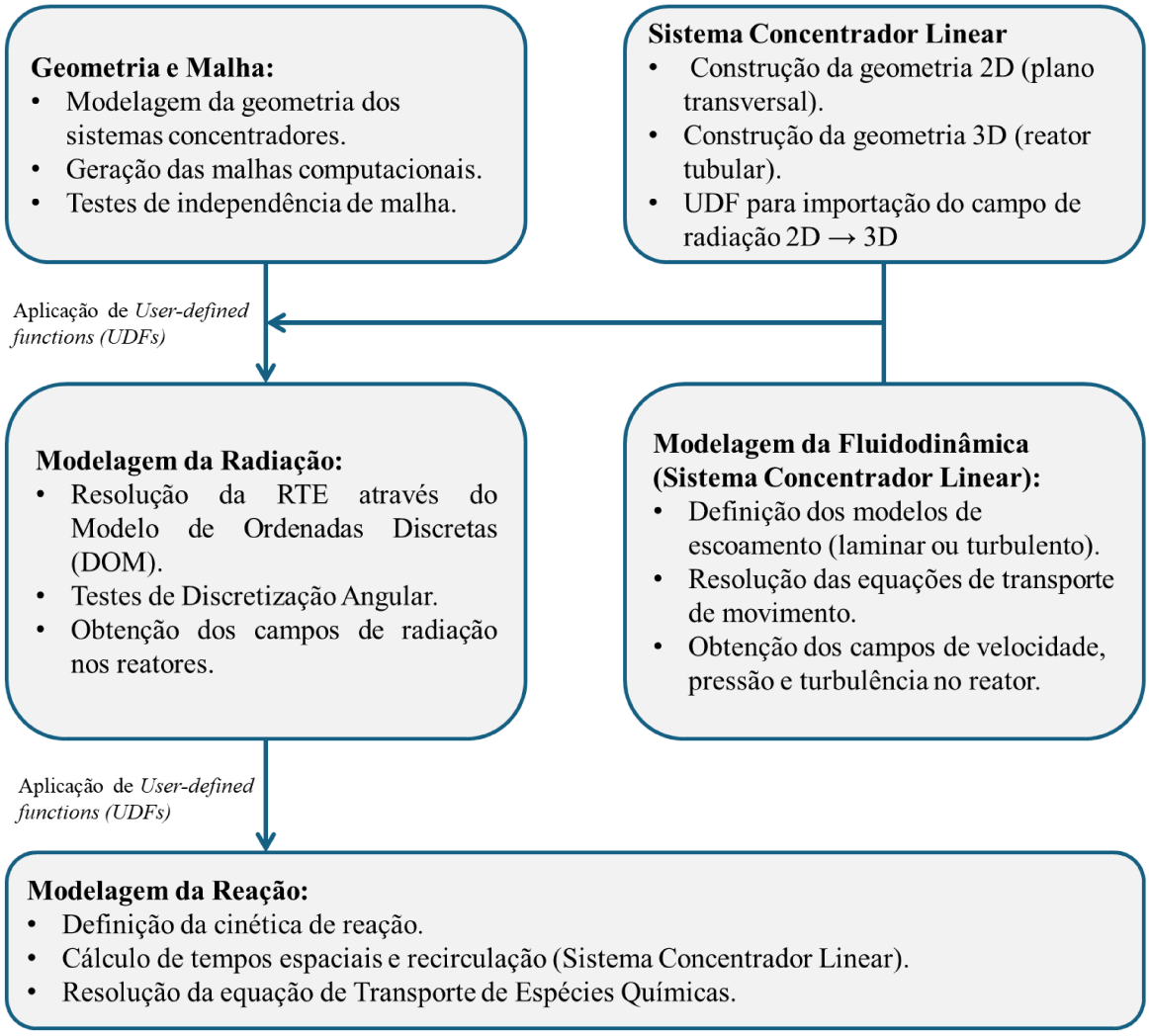
Esta seção detalha a metodologia empregada para a modelagem computacional das unidades concentradoras solares pontual e linear. A metodologia de fluidodinâmica computacional consiste nas seguintes etapas: concepção do modelo geométrico representativo, geração das malhas computacionais em que serão resolvidas as equações de conservação de massa, momento e energia, seleção dos métodos de solução de tais equações e definição das condições de contorno e, após a execução das simulações, o tratamento dos dados obtidos em uma etapa usualmente denominada como pós-processamento. Toda a metodologia numérica por meio de simulações CFD foi realizada utilizando o *software* Fluent® versão 14.5. A modelagem das geometrias e malhas foi realizada utilizando as ferramentas Spaceclaim® e Gambit®, respectivamente.

3.3.1 Metodologia de Modelagem e Geometrias

A modelagem CFD dos sistemas concentradores pontual e linear foi realizada em diferentes etapas conforme apresentado na Figura 3.10. O primeiro passo foi a identificação e construção das geometrias projetadas, buscando identificar as regiões em que são resolvidas

cada tipo de equação (atmosfera e interior do reator), a existência de possíveis simetrias ou simplificações para tonar os cálculos menos demandantes em termos computacionais, e a atribuição das condições de contorno no sistema. Após a construção das geometrias representativas das unidades experimentais, é necessário subdividir o domínio em células computacionais. As malhas computacionais destes dois sistemas concentradores foram criadas com elementos hexaédricos para o domínio do interior dos reatores, e elementos tetraédricos para o domínio da atmosfera, onde se resolvem apenas a equação de transporte radiativo (RTE), configurando-se estas malhas como híbridas. Para determinação da correta representatividade destas malhas em face dos fenômenos estudados, testes de independência de malha são realizados através da construção de malhas com diversos graus de refino e subsequente avaliação da resposta obtida.

Figura 3.10 – Estratégia de modelagem e simulação dos sistemas concentradores propostos.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

A solução das equações que regem os fenômenos ocorridos em um fotorreator, Equação de Transporte Radiativo, Equação de Transporte de Movimento, e Equação de Transporte de Espécies Químicas, foi dividida em três etapas sendo a primeira a resolução dos campos de velocidade do escoamento (aplicável para o sistema linear com recirculação), a segunda a resolução dos campos de radiação (aplicável a ambos os sistemas concentradores pontual e linear), e a terceira é a resolução das equações de conservação das espécies.

Esta estratégia empregada foi assumida com base em trabalhos da literatura que apresentaram sua aplicação com benefícios como redução do tempo de cálculo e aumento da estabilidade do sistema, porém com algumas premissas e limitações (CASADO, 2017;CASADO et al., 2017;GARCÍA-GIL et al., 2019;MORENO; CASADO; MARUGÁN, 2019;MORENO-SANSEGUNDO; CASADO; MARUGÁN, 2020), detalhadas a seguir.

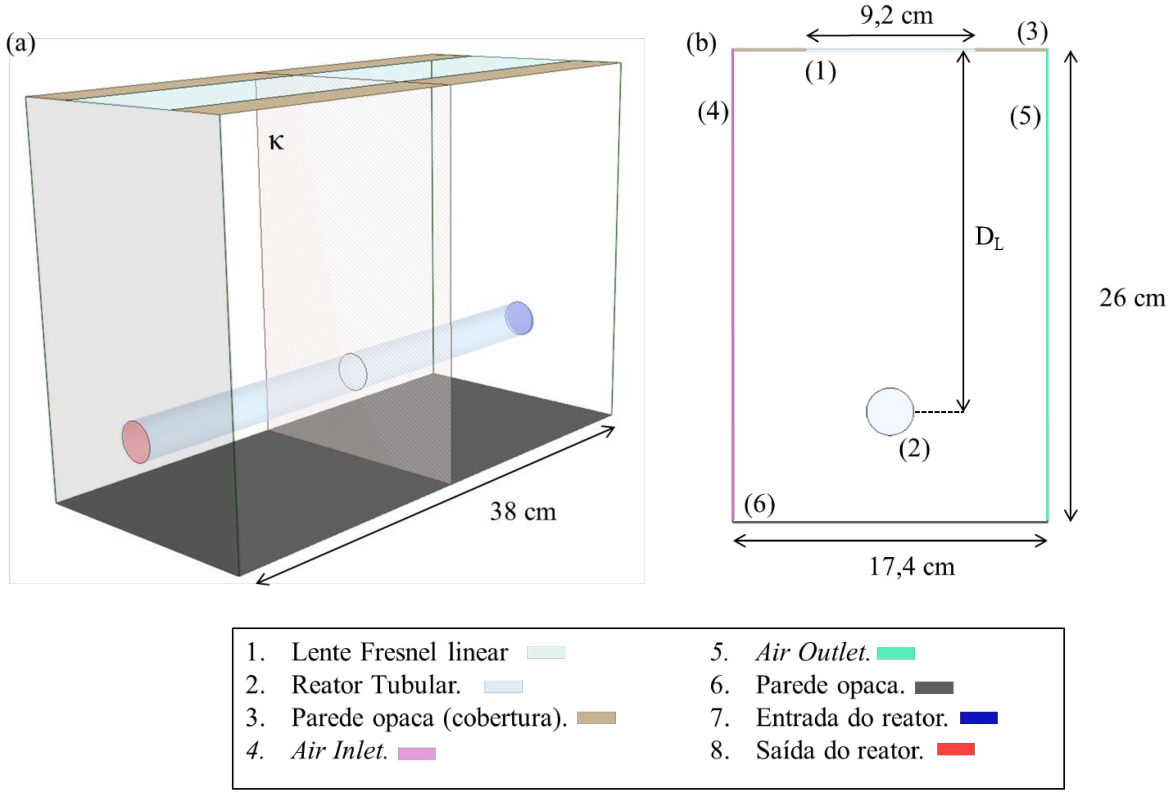
- A concentração das espécies dissolvidas é suficientemente baixa para considerar que a densidade e viscosidade do meio são iguais às do solvente (água). Essa premissa permite o desacoplamento da fluidodinâmica da solução das equações de transporte das espécies químicas.
- Reagentes e produtos são transparentes à radiação incidente, não absorvendo nem dispersando os raios de luz. Com essa premissa os campos de radiação podem ser calculados de forma independente ao cálculo do transporte das espécies químicas.
- As temperaturas de operação dos sistemas concentradores com lentes de Fresnel pontual e linear são consideradas baixas o suficiente para não impactar a solução da equação de transporte radiativo.
- As soluções empregadas nos fotorreatores são monofásicas e não há formação de segunda fase no decorrer das reações químicas que são realizadas sob influência da radiação incidente.

Adicionalmente, a resolução das equações de transporte de movimento e de radiação foram resolvidas em estado estacionário, ao passo que a resolução das equações de transporte das espécies químicas foi conduzida em estado transiente dadas as características do fenômeno.

Conforme indicado na Figura 3.10 e exemplificado no modelo geométrico da Figura 3.11, a simulação dos fenômenos do sistema concentrador linear ainda foi dividida em mais uma etapa que consiste na construção de duas geometrias e malhas representativas desse sistema, sendo a primeira uma malha bidimensional representativa de um plano transversal da unidade (reator tubular, lente e paredes da vizinhança do sistema), e uma malha tridimensional

representando o reator tubular. A solução da Equação de Transporte Radiativo (RTE) foi resolvida no domínio 2D e então uma *user-defined function* (UDF) foi desenvolvida para possibilitar a importação dos resultados para cada célula do domínio 3D.

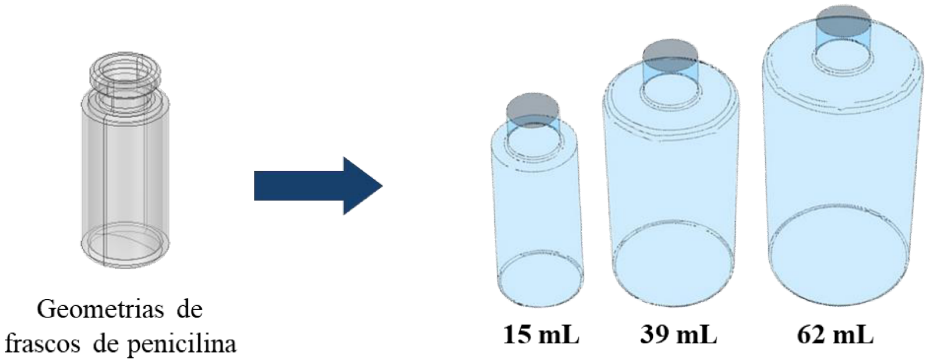
Figura 3.11 – Representação esquemática do domínio computacional 2D de um plano transversal do sistema concentrador linear: (a) Esquema 3D do sistema concentrador linear; (b) Seção transversal κ utilizada nas simulações 2D de radiação.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Já a modelagem do concentrador pontual foi realizada em um único domínio computacional devido à sua complexidade (ausência de simetria). As geometrias dos reatores utilizados no sistema concentrador pontual (vidros de penicilina) foram construídas utilizando-se o software Ansys Spaceclaim®, sendo o volume útil de cada reator extraído a partir da geometria da casca dos reatores. Como simplificação, as paredes e sua respectiva espessura não foram incluídas no domínio de simulação. O efeito da espessura na transmitância do vidro já foi contabilizado na caracterização UV-VIS do material. Na Figura 3.12 mostra-se o resultado das extrações dos volumes internos das geometrias de frascos de penicilina.

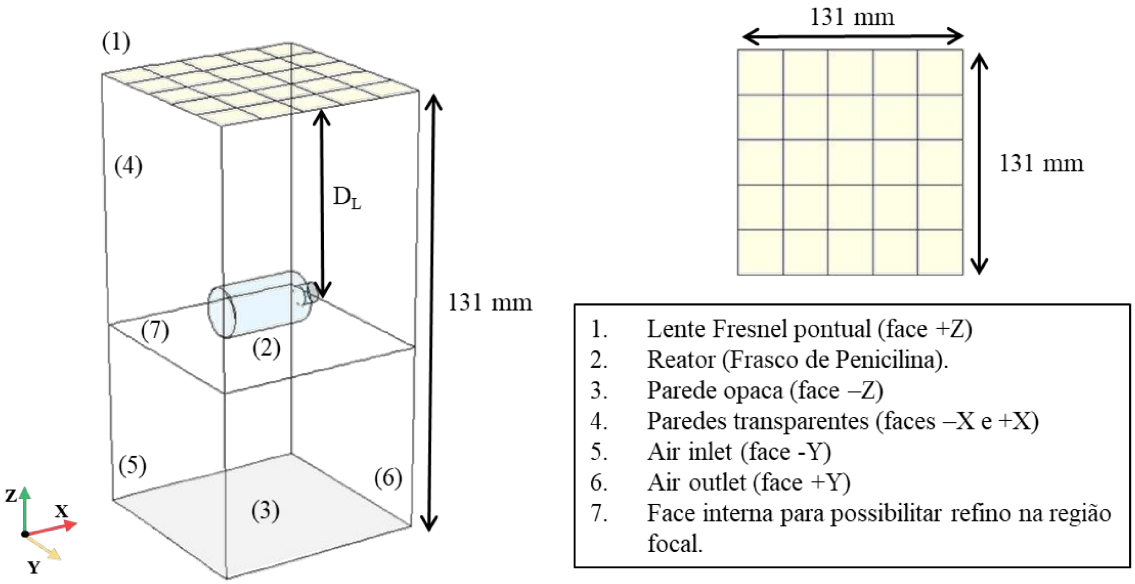
Figura 3.12 – Geometrias representativas dos volumes internos dos reatores utilizados no sistema concentrador pontual.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

O domínio completo que compreende a lente de Fresnel pontual e o reator é apresentado na Figura 3.13. A lente de Fresnel pontual teve sua área subdividida em 25 seções, uma vez que seus testes de experimentais de actinometria foram conduzidos conforme apresentado na seção 3.2.2. A subdivisão visa, portanto, representar a distribuição de luz assimétrica na superfície da lente inserindo os valores de radiação mensurados em cada seção no *solver*. Portanto, cada elemento da lente é uma fronteira do domínio a qual emite uma determinada quantidade de radiação.

Figura 3.13 – Exemplo de domínio computacional simulado e dimensões



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.3.2 Estratégia de Simulação do Sistemas Concentrador Linear

Conforme mencionado na seção anterior, devido ao alto custo computacional envolvido para o processamento das simulações em domínio 3D do sistema concentrador linear, levando em conta suas dimensões como comprimento da lente e do tubo, distância focal da lente, e volume total do espaço entre lente e reator tubular, foi necessário o desenvolvimento de um algoritmo para a transposição dos resultados obtidos em um domínio 2D para o domínio 3D do fotorreator. Esse algoritmo demandou a criação de uma UDF para realizar a importação da radiação incidente calculada no domínio 2D.

Esta estratégia de simulação do campo de radiação do sistema concentrador com lente de Fresnel linear foi estabelecida considerando-se as premissas descritas a seguir:

- A seção transversal da malha do domínio 3D (plano κ da Figura 3.11) deve ser idêntica à do domínio 2D que a representa. Ou seja, as divisões de células nessa face devem ser idênticas, com mesmo tamanho, quantidade de elementos e tipo de malha gerada.
- O campo de valores da resposta estudada não muda ao longo do comprimento do reator. Por exemplo, a radiação incidente em uma seção transversal do reator tubular é igual a radiação incidente em uma seção transversal ao final deste reator tubular.
- A resposta estudada não varia com o tempo, e se mantém constante ao longo de todo o tempo de simulação. Esta premissa é válida em situações como testes experimentais de curta duração (até 1 hora) em horários do dia com baixa variação nos valores de radiação incidente (geralmente horários próximos ao meio-dia e baixa umidade relativa do ar com pouca formação de nuvens na atmosfera), ou ainda no caso de fontes artificiais de luz.

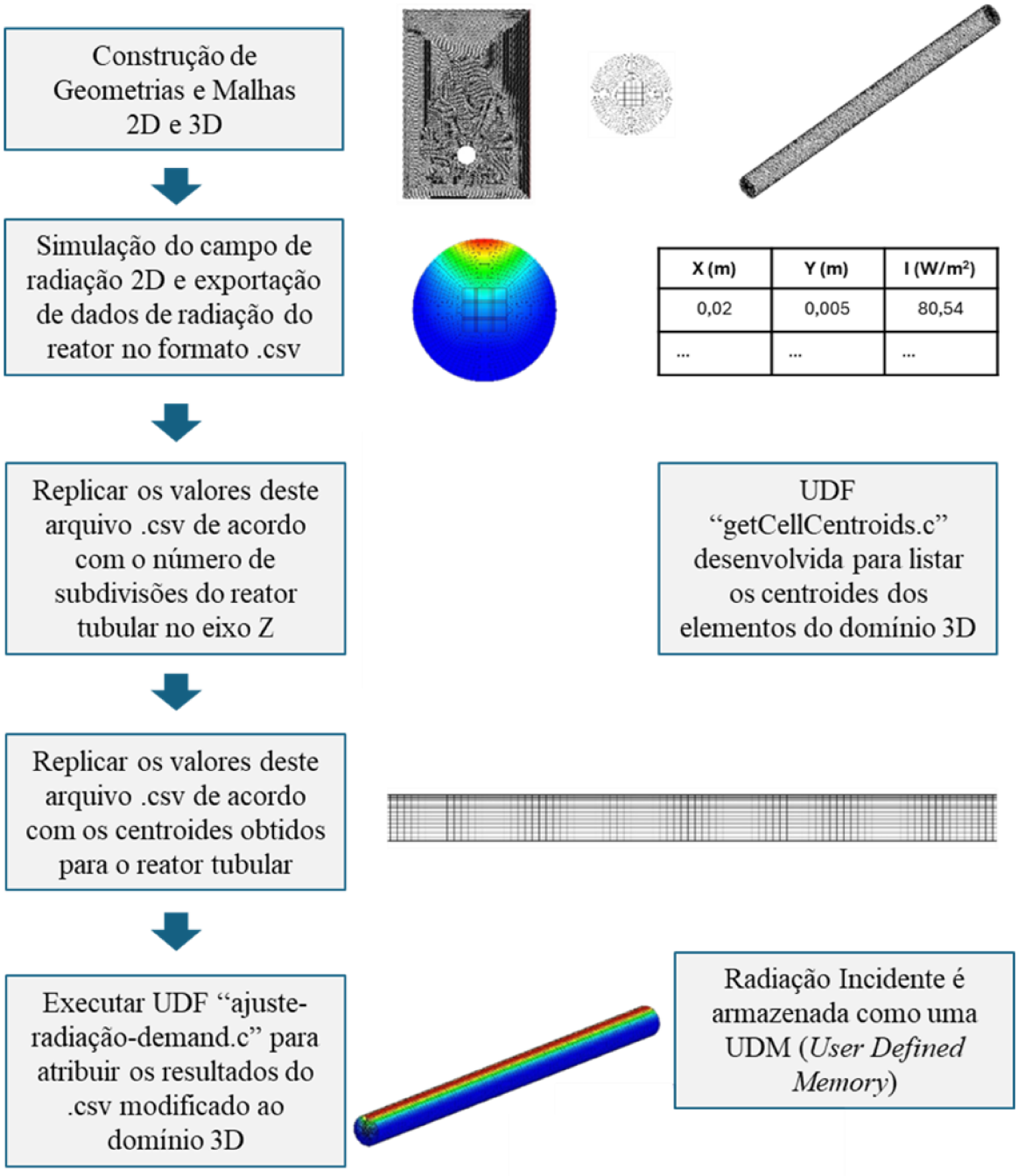
Dessa forma, na Figura 3.14 apresenta-se um resumo das etapas realizadas neste procedimento. A Figura 3.11 pode ser usada como referência para entendimento dos componentes do domínio que são mencionados a seguir.

1. Inicialmente é construída a geometria e malha bidimensional, constituída pela face circular do reator tubular, lente de Fresnel linear (representada por uma linha no domínio 2D), e demais fronteiras da vizinhança, e então uma geometria e malha 3D do reator tubular, proveniente do modelo bidimensional, é gerada com as mesmas subdivisões, tipo de malha e distanciamento de elementos.

Escolhe-se então a quantidade de subdivisões no terceiro eixo espacial para completar a malha volumétrica do reator.

2. Após terminar de rodar a simulação do campo de radiação 2D, gera-se um arquivo *profile* em formato *csv (*comma-separated values*) com a distribuição de valores de radiação incidente calculados para cada elemento de controle do domínio do reator. Este arquivo pode ser facilmente gerado na interface gráfica do Fluent selecionando-se a resposta e o domínio desejados.
3. Rodar a UDF "getCellCentroids.c" (Apêndice A) no ambiente da simulação do domínio 3D para coletar as coordenadas XYZ do domínio que representa o volume do reator tubular. Separa-se os valores Z desta lista.
4. Ajustar o arquivo *csv gerado da malha bidimensional, adicionando uma coluna com as coordenadas Z extraídas do *csv tridimensional, e replicar os valores XY e Radiação Incidente para cada conjunto de valores Z que são as subdivisões do volume neste eixo. Os valores de radiação incidente foram obtidos através das simulações com a UDF que calcula a direção dos raios de luz até o reator (Apêndice B). Cada segmento na coordenada Z deverá conter as coordenadas X e Y do domínio 2D. Ou seja, é necessário replicar as coordenadas nesse csv o número de vezes igual ao número de segmentos na coordenada Z. Esta etapa foi realizada de forma manual, porém pode ser automatizada com alguma rotina computacional caso o usuário opte.
5. Inicializar a simulação no domínio 3D (transporte de momento e espécies químicas), e rodar a UDF "radiation_initialize.c" (Apêndice C). Dessa forma o campo de radiação simulado em um domínio bidimensional ficará armazenado em uma *user-defined memory* (UDM) e disponível para alimentar a cinética de reação a ser simulada no interior do reator.

Figura 3.14 – Procedimento para simulação do campo de radiação no sistema concentrador linear.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.3.3 Equação de Transporte Radiativo (RTE)

Em estudos numéricos de fotorreatores a modelagem correta da radiação que incide o volume do reator é a etapa mais importante. A determinação dos valores de radiação incidente,

e outras respostas associadas, se dá através da resolução da Equação de Transporte Radiativo (RTE). Através do balanço de transporte de energia em forma de radiação e considerando fatores de atenuação e intensificação da radiação como absorção, espalhamento e fontes emissoras de luz, a RTE descreve a propagação da radiação em um meio, sendo extremamente importante, não apenas em processos oxidativos avançados, como também nas áreas de energias renováveis, astrofísica, óptica, meteorologia, automação, medicina, sistemas de combustão etc. (ZHAO J. M.AND LIU, 2017).

A Equação de Transporte Radiativo para um meio com absorção, espalhamento e emissão em uma posição $\vec{r}$ com direção $\vec{s}$ é descrita por:

$$\frac{dI(\vec{r},\vec{s})}{ds} + (\alpha + \sigma_s)I(\vec{r},\vec{s}) = \alpha n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi}\int_0^{4\pi} I(\vec{r},\vec{s}')\Phi(\vec{s}\cdot\vec{s}')d\Omega' \tag{3.4}$$

Em que $\vec{s}'$ é o vetor de espalhamento (*scattering*), s é o comprimento do caminho óptico, α é o coeficiente de absorção, n o índice de refração, σ_s é o coeficiente de espalhamento, σ a constante de Stefan-Boltzmann ($5{,}669 \cdot 10^{-8}$ W·m^{-2}K^{-4}), I a intensidade de radiação (função de $\vec{r}$ e $\vec{s}$), T a temperatura local, Φ é a função de fase e Ω' o ângulo sólido que descreve a distribuição direcional da radiação em relação à matéria.

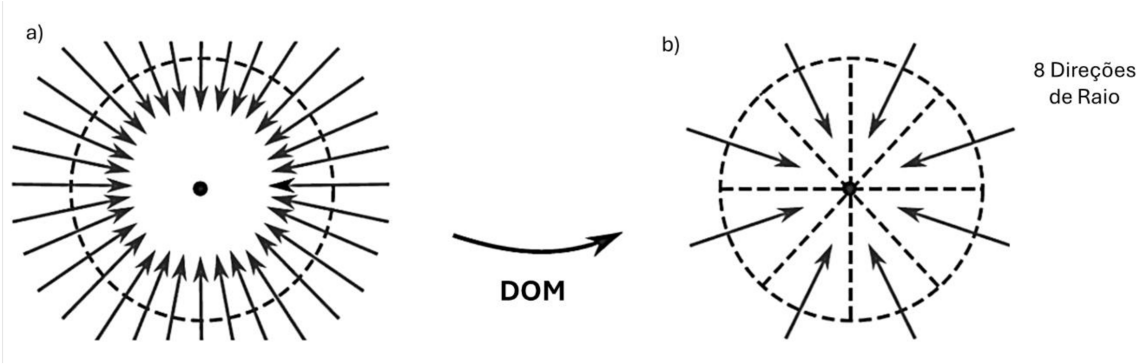
Para resolução numérica da RTE existem diversos modelos desenvolvidos ao longo das décadas como Rosseland (SIEGEL; HOWELL, 1992), P-1 (CHENG, 1964), Discrete Transfer (CARVALHO; FARIAS; FONTES, 1991; N. G. SHAH, 1979), Discrete Ordinates(CHUI; RAITHBY, 1993; RAITHBY; CHUI, 1990), e Monte Carlo. Dentre estes modelos, o DOM (do inglês *discrete ordinates model*), ou Modelo das Ordenadas Discretas, é um dos mais empregados em estudos de fotorreatores através de técnicas de fluidodinâmica computacional. Este modelo abrange toda uma gama de espessuras ópticas e permite a resolução de físicas que vão desde transferência de radiação entre superfícies, até radiação em problemas de combustão. Neste trabalho, o Modelo das Ordenadas Discretas foi escolhido para a resolução da RTE nos sistemas de concentração com lentes de Fresnel.

3.3.4 Modelo de Ordenadas Discretas (DOM)

O modelo de ordenadas discretas (DOM) resolve a equação de transporte radiativo para um número finito de ângulos sólidos discretos, cada um associado a uma direção vetorial fixa no sistema cartesiano, como pode-se observar no esquema apresentado na Figura 3.15. A luz

pode chegar em um ponto através de infinitas direções no espaço e a aplicação do modelo de ordenadas discretas visa reduzir este número para uma quantidade suficiente de direções de forma que o perfil do campo de radiação calculado na RTE ainda seja representativo.

Figura 3.15 – Esquema de direções possíveis de raios de luz em direção a um ponto no espaço: a) direções possíveis, b) simplificação via DOM.

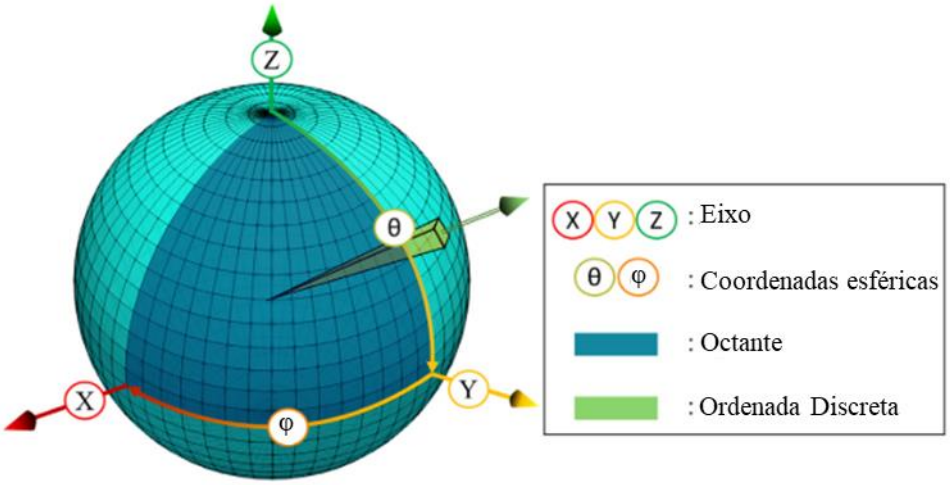


Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Dessa forma, o cálculo leva em consideração a divisão de uma esfera (3D) ou círculo (2D) em 8 octantes e um plano de simetria para tornar o cálculo mais eficiente. Cada octante pode ser dividido em N_θ e N_φ segmentos, sendo que o mínimo de direções de raio a serem resolvidas é 4 (para o círculo 2D) e 8 (para uma esfera).

N_θ e N_φ são chamados de ângulos de controle polar e azimutal, respectivamente. Como pode-se observar na Figura 3.16, estes ângulos são medidos em relação ao sistema de coordenadas cartesianas global (x, y, z). A combinação do número de subdivisões N_θ e N_φ é chamada de discretização angular e, em sistemas de resolução da RTE através do Modelo de Ordenadas Discretas, o procedimento de obtenção da combinação ideal destes parâmetros é fundamental para otimizar a velocidade da simulação sem perder a resolução do traçado dos raios de luz no meio simulado. Isso porque, para cada direção de raio s 1 equação de transporte radiativo precisa ser resolvida e, portanto, para uma esfera simples com $N_\theta = 1$ e $N_\varphi = 1$, ou seja, 8 direções de raio de luz precisam ser resolvidas. Em uma esfera com $N_\theta = 15$ e $N_\varphi = 15$ (por exemplo, Figura 3.16), 1800 equações de transporte radiativo precisam ser resolvidas simultaneamente.

Figura 3.16 – Sistema de coordenadas angulares.



Fonte: Adaptado de Moreno; Casado; Marugán (2019)

Esse número de equações RTE a serem resolvidas é ainda maior dado que para cada célula do domínio computacional estudado (malha), uma intensidade de raio de luz é calculada em cada direção. Portanto, em um domínio computacional 3D discretizado em 100000 elementos de malha, 180.000.000 de equações RTE precisam ser resolvidas, se considerada uma discretização angular de $N_\theta = 15$ x $N_\varphi = 15$.

3.3.5 Equação de Transporte de Movimento

Nos sistemas analisados neste trabalho, três tipos de condições de escoamento foram analisados: um sistema com o fluido estagnado (processo batelada no sistema com lente de Fresnel pontual), um sistema com escoamento laminar e outro com escoamento turbulento (sistema com lente de Fresnel linear). Para calcular os campos de velocidades em um escoamento as equações clássicas de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos e incompressíveis são resolvidas.

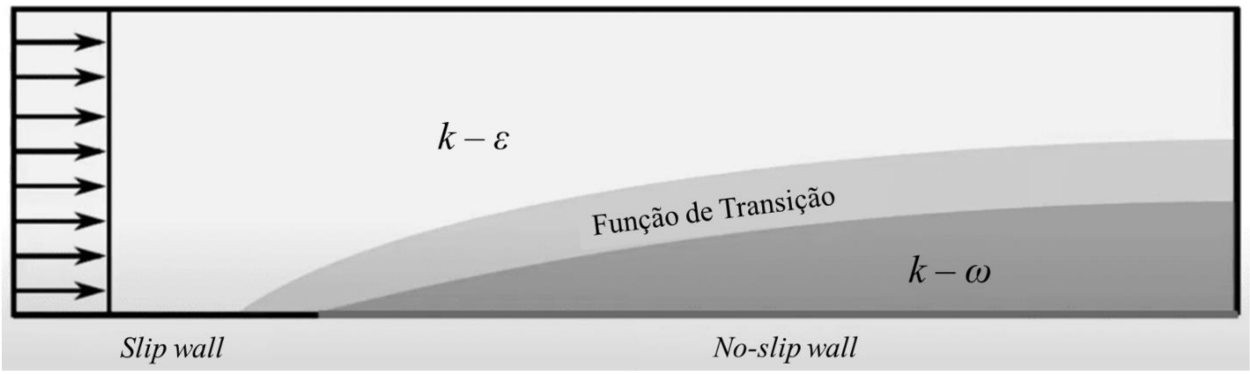
$$\frac{d\rho}{dt} + \nabla(\rho\bar{u}) = 0 \tag{3.5}$$

$$\rho\nabla \cdot (\rho\bar{u}\bar{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho\vec{g} \tag{3.6}$$

Em que ρ é a densidade do fluido, $\bar{u}$ é o vetor velocidade, P é a pressão, $\bar{\tau}$ é o tensor de tensões de Cauchy devido a viscosidade molecular, e $\vec{g}$ é a aceleração da gravidade.

Para representar adequadamente a turbulência foi selecionado o modelo *k-ω* SST (*shear stress transport*) com correções para baixo número de Reynolds. Devido às condições de operação da bomba de recirculação no sistema com lente de Fresnel linear, um range de números de Reynolds entre 776 e 4013 foi calculado e, portanto, capturar as características do escoamento próximo às paredes e onde há a maior probabilidade de ocorrerem as reações foto-oxidativas é de fundamental importância. Conforme apresentado na Figura 3.17, para possibilitar uma transição suave entre estes dois modelos uma função hiperbólica é implementada (Função de Transição). Esta função juntamente com um limitador de viscosidade adicional, forma a base para o modelo *k- ω* SST (MENTER, 1994).

Figura 3.17 – Exemplo das regiões de aplicação dos modelos $k-\varepsilon$ e $k-\omega$ no modelo $k-\omega$ *SST.*



Fonte: adaptado de (ANSYS, 2012)

3.3.6 Equação de Transporte de Espécies Químicas

A modelagem de fotorreatores requer, além da correta modelagem do transporte de radiação e do escoamento, a simulação transiente do balanço de massa de cada espécie química envolvida no mecanismo de reação estudado. Dessa forma, além do transporte de matéria pelos mecanismos de difusão e convecção, o termo de reação precisa ser incluído na modelagem. Para cada espécie química individual *i* no domínio computacional a equação de conservação de massa pode ser expressa por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla(\rho \bar{u} Y_i) = -\nabla \overline{J_i} + R_i + S_i \tag{3.7}$$

Em que Y_i é a fração mássica de *i* na mistura, J_i é o fluxo difusivo e R_i o termo de reação (produção ou consumo de *i*). O balanço material e a fluidodinâmica do escoamento são acoplados por meio do vetor velocidade $\bar{u}$. O parâmetro S_i é a taxa de criação pela adição de fase dispersa e qualquer outro termo fonte definido pelo usuário.

Já o fluxo difusivo J_i, que surge dos gradientes de concentração e temperatura, pode ser calculado pela primeira lei de Fick para escoamentos laminares e turbulentos, respectivamente:

$$\overline{J_\iota} = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i \tag{3.8}$$

$$\overline{J_\iota} = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_i \tag{3.9}$$

Em que $D_{i,m}$ é o coeficiente de difusividade mássica da espécie *i* na mistura, Sc_t é o número de Schmidt ($\frac{\mu_t}{\rho D_t}$, sendo μ_t a viscosidade turbulenta e D_t a difusividade turbulenta).

Para processos com reações termoativadas, o cálculo de R_i em softwares comerciais como o ANSYS Fluent® já se encontra implementado e é amplamente utilizado. Porém, na área de processos oxidativos avançados, reações induzidas por radiação incidente precisam ser na maioria das vezes modeladas e incluídas em tais *solvers* em forma de funções customizadas, também chamadas de UDFs (*user-defined functions*). As cinéticas de reação incluídas nestas UDFs definem a taxa de consumo ou produção das espécies em função do campo de radiação incidente em cada elemento de malha do volume do reator. Além disso em sistemas com recirculação, um modelo de cálculo de diluição precisa ser contabilizado para representar corretamente o domínio do tanque de armazenamento que não foi simulado (Apêndice D). As UDFs de cinética desenvolvidas são apresentadas no Apêndice E e Apêndice F.

3.3.7 Funções Customizadas (*User-defined functions* - UDFs)

No presente trabalho, para modelar corretamente diversos fenômenos físicos envolvidos nos processos fotoativos dos sistemas de concentração solar por lentes de Fresnel, foi necessário o desenvolvimento de várias *user-defined functions* (UDFs). Uma UDF é um script escrito em linguagem de programação C ou C++, que pode ser dinamicamente carregada no ANSYS Fluent® para realizar comandos, modificar parâmetros e carregar modelos como cinéticas de reação.

Para modelar corretamente os processos físicos e químicos que acontecem nos sistemas concentradores com lente de Fresnel projetados neste estudo diversas UDFs foram criadas, implementadas e testadas. Algumas UDFs foram obtidas de estudos disponíveis na literatura e modificadas de acordo com as necessidades dos modelos aqui desenvolvidos. Estes códigos estão detalhados nas subseções a seguir.

3.3.7.1 Concentração dos Raios de Luz com Lentes de Fresnel

A modelagem da radiação transmitida por uma lente de Fresnel depende efetivamente da correta modelagem do trajeto dos raios de luz até o ponto focal da lente. Nos *solvers* atualmente disponíveis no mercado não há nenhuma função pré-desenvolvida e implementada para a modelagem do perfil de convergência dos raios de luz para um ponto no espaço. Portanto, neste estudo desenvolveu-se um set de UDFs para direcionar os raios de luz provenientes da lente de Fresnel até o ponto focal determinado.

Na literatura, Kaddoura e Zeaiter (2019) desenvolveram UDFs para realizar esse direcionamento dos raios de luz em direção a um ponto focal em que se encontrava posicionado um absorvedor de luz, visando estudar a aplicação de lentes de Fresnel pontuais em sistemas de armazenamento de energia solar. Tal algoritmo, desenvolvido para uso com o Modelo de Ordenadas Discretas (DOM) em um domínio bidimensional, percorre cada célula computacional na superfície da lente, encontra as coordenadas do centroide destas células e calcula o vetor direção do raio em direção ao ponto focal da lente. Esta função foi adaptada para os sistemas com lente de Fresnel linear e pontual estudados neste trabalho, sendo que para o sistema com lente de Fresnel pontual, uma terceira UDF que representa o cálculo na terceira dimensão do domínio foi adicionada.

A opção por simular o sistema com lente de Fresnel linear através de simulações 2D se dá pelo grande número de células computacionais que seria necessário em um domínio 3D, inviabilizando os cálculos através do uso do DOM. Neste caso, dado que a seção transversal em qualquer ponto sistema reator tubular e lente de Fresnel é constante ao longo de todo o comprimento do tubo, e que o padrão de concentração também não varia ao longo deste comprimento, optou-se pelo desenvolvimento de um procedimento híbrido (2D e 3D) para viabilizar o processo de simulação do sistema Lente linear. Já o sistema com lente pontual, devido às características irregulares da geometria do reator, precisou ser simulado apenas em um domínio tridimensional. A UDF desenvolvida para a definição do trajeto dos raios de luz transmitidos pelas lentes de Fresnel é apresentada no Apêndice B. Para cada direção de raio

atribuída no modelo DOM no Fluent® uma função customizada deve ser escrita variando-se o índice das componentes dos vetores, sendo 1 para a direção x, 2 para a direção y e 3 a para direção z.

3.3.7.2 Recirculação das Espécies Químicas (Sistema Lente Linear)

O reator tubular acoplado a uma lente de Fresnel linear dispõe de uma bomba que promove a recirculação contínua do fluido, conduzindo a solução irradiada no tubo de borossilicato para um tanque de 5 L que contém um agitador para completa homogeneização da solução. Dessa forma, a recirculação da solução deve ser modelada através de um balanço material conforme apresentado a seguir.

$$Y_i = \frac{Y_{i_out} \cdot \Delta t + ST \cdot Y_{i_in}}{\Delta t + ST} \tag{3.10}$$

Em que Y_i é a fração mássica da espécie na entrada do reator tubular em cada passo de tempo no tanque, ST é o tempo espacial no reservatório e Δt é o passo de tempo da etapa da simulação em que o transporte das espécies é calculado. O tempo espacial (ST) é o tempo espacial no tanque, calculado como a razão entre o volume do tanque dividido pela vazão da solução.

Casado (2017) e García-Gil et al. (2019) desenvolveram rotinas para cálculo da recirculação em fotorreatores que também dispunham de sistemas de recirculação das soluções irradiadas. Tais rotinas foram adaptadas e implementadas para as soluções estudadas neste trabalho. Para cada tipo de reação deve-se ajustar os códigos apresentados no Apêndice D, sendo que o primeiro calcula a concentração média na face de saída do reator tubular, calcula a fração mássica de cada espécie na entrada do reator tubular e armazena os resultados em um campo de memórias escalares (UDMIs), enquanto o segundo carrega os valores deste campo e os atribui como condições de contorno de fração mássica na face de entrada do reator tubular. A primeira função apresentada no Apêndice D deve ser compilada enquanto segunda pode somente ser interpretada. Os exemplos de códigos apresentados neste apêndice referem-se à reação de actinometria realizada com ferrioxalato de potássio, porém o mesmo racional pode ser aplicado a simulações com bactérias ou quaisquer outros tipos de espécies químicas de acordo com a aplicação desejada.

3.3.7.3 Cinética de Reação (Sistemas Lente Pontual e Linear)

A modelagem da cinética de reação, juntamente com a correta predição do campo de radiação, é uma etapa fundamental da modelagem CFD de um fotorreator.

A reação escolhida para verificação do modelo computacional dos concentradores com lentes de Fresnel pontual e linear, e condução da análise de efeitos via planejamentos de simulação, foi a actinometria química com ferrioxalato de potássio descrita na seção 2.8.

A reação de conversão de íons Fe^{3+} em íons Fe^{2+} através da absorção de fótons (fluxo de radiação), pode ser representada por (CASSANO et al., 1995; SILVARES, 2006):

$$R_{Fe^{3+}} = -2\Phi_{Fe^{3+}}\alpha_{Fe^{3+}}[Fe^{3+}]G_v \tag{3.11}$$

Em que $R_{Fe^{3+}}$ é a taxa de consumo de íons férricos (kmol·m^{-3}·s^{-1}), $\Phi_{Fe^{3+}}$ é o rendimento quântico da reação fotoquímica do íon férrico (kmol·einstein^{-1}), G_v^{abs}é a radiação absorvida no elemento de volume(einstein·m^{-2}·s^{-1}), e $\alpha_{Fe^{3+}}$ é o coeficiente neperiano de absorção molar. A radiação absorvida, G_v^{abs}, pode ser estimada para uma determinada faixa de comprimento de onda (Δλ) conforme a Equação (3.12) (CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017a). O cálculo leva em consideração a radiação incidente no elemento de volume ($I_{\Delta\lambda}$), dada em W·m^{-2}, este obtido através da resolução da RTE no domínio, a energia média dos fótons na faixa Δλ significativa para a reação estudada ($\bar{E}_{p,\lambda}$), dada em J·fóton^{-1}, e o número de Avogadro (N_A) em fóton·einstein^{-1}:

$$G_v^{abs} = \frac{I_{\Delta\lambda}}{\bar{E}_{p,\lambda} \cdot N_A} \tag{3.12}$$

Como a reação de actinometria ocorre com absorção de fótons na faixa de 250 a 550 nm e as simulações de transporte de radiação são monocromáticas, foi necessário adaptar a Equação (3.11) para ponderar o percentual de cada faixa do espectro que contribui para a reação em relação à radiação resultante que chega no reator após passar pela lente, levando à Equação (3.13). Isso foi necessário para garantir que os valores dos parâmetros $\Phi_{Fe^{3+}}$ e $\alpha_{Fe^{3+}}$correspondessem aos valores encontrados na literatura (ZALAZAR et al., 2005), delimitando-se assim 3 faixas de comprimento de onda: 320 a 400 nm, 400 a 436 nm, e 436 nm a 550 nm.

$$R_{Fe^{3+}} = -2(\Phi_{Fe^{3+}}\alpha_{Fe^{3+}}[Fe^{3+}]G_v)_{320-400nm} - 2(\Phi_{Fe^{3+}}\alpha_{Fe^{3+}}[Fe^{3+}]G_v)_{400-436nm} - 2(\Phi_{Fe^{3+}}\alpha_{Fe^{3+}}[Fe^{3+}]G_v)_{436-550nm} \quad (3.13)$$

O espectro UVB (250 nm a 320 nm) não foi considerado dado que as lentes de Fresnel (PMMA) utilizadas absorvem toda essa faixa de radiação. A escolha pelas três faixas de comprimento de onda citadas anteriormente busca uma melhor representação da média dos valores utilizados de (ZALAZAR et al., 2005), como pode ser observado na Tabela 3.4.

Tabela 3.4 – Valores de rendimento quântico e coeficiente neperiano de absorção molar para o ferrioxalato de potássio de acordo com o comprimento de onda.

λ (nm)	**ϕ_λ (mol einstein^{-1})**	**α^{Fe3+} (cm^2 mole^{-1} x 10^{-3})**
275	1,24	4991,5
305	1,24	4991,5
310	1,24	4991,5
324	1,23	3970,4
359	1,14	1903,3
370	1,14	1406,1
385	1,14	953,9
410	1,09	338,8
423	1,04	162,2
436	1,01	103,6
490	0,94	2,44
523	0,59	0,49
545	0,15	0,27
580	0,013	0,55

Fonte: adaptado de Zalazar et al. (2005).

A energia do fóton média nestas faixas de comprimento de onda pode ser estimada conforme a equação abaixo, sendo *h* a constante de Planck (6,626·10^{-34} J·s), *c* a velocidade da luz (3·10^8 m·s^{-1}) e $\Delta\lambda$ o valor médio do intervalo de comprimento de onda considerado:

$$\bar{E}_{p,\lambda} = \frac{h \cdot c}{\Delta\lambda} \quad (3.14)$$

Dessa forma, na Tabela 3.5 apresenta-se um resumo dos parâmetros utilizados no cálculo da taxa de consumo de íons férricos Fe^{3+} na reação de actinometria com ferrioxalato de potássio utilizada para validação dos modelos CFD implementados para investigação do uso de lentes de Fresnel em fotorreatores. O código da UDF desenvolvida por sua vez é apresentado no Apêndice E.

Tabela 3.5 – Parâmetros utilizados na modelagem da reação química de conversão de Fe^{3+} em Fe^{2+} sob irradiação do actinômetro ferrioxalato de potássio.

Parâmetro	Unidade	Valor
Na	Fóton·Einstein^{-1}	6,022e^{23}
h	J·s	6,626e^{-34}
c	m·s^{-1}	3,0e^{8}
$MM_{Fe^{3+}}$	kg·kmol^{-1}	55,845
$\rho_{Fe^{3+}}$	kg·m^{-3}	7870
$D_{Fe^{2+}H2O}$	m^{2}s^{-1}	8,5·10^{-10}
$D_{Fe3^{+}H2O}$	m^{2}s^{-1}	8,5·10^{-10}

Fonte: adaptado de Cassano et al. (1995) e Silvares (2006).

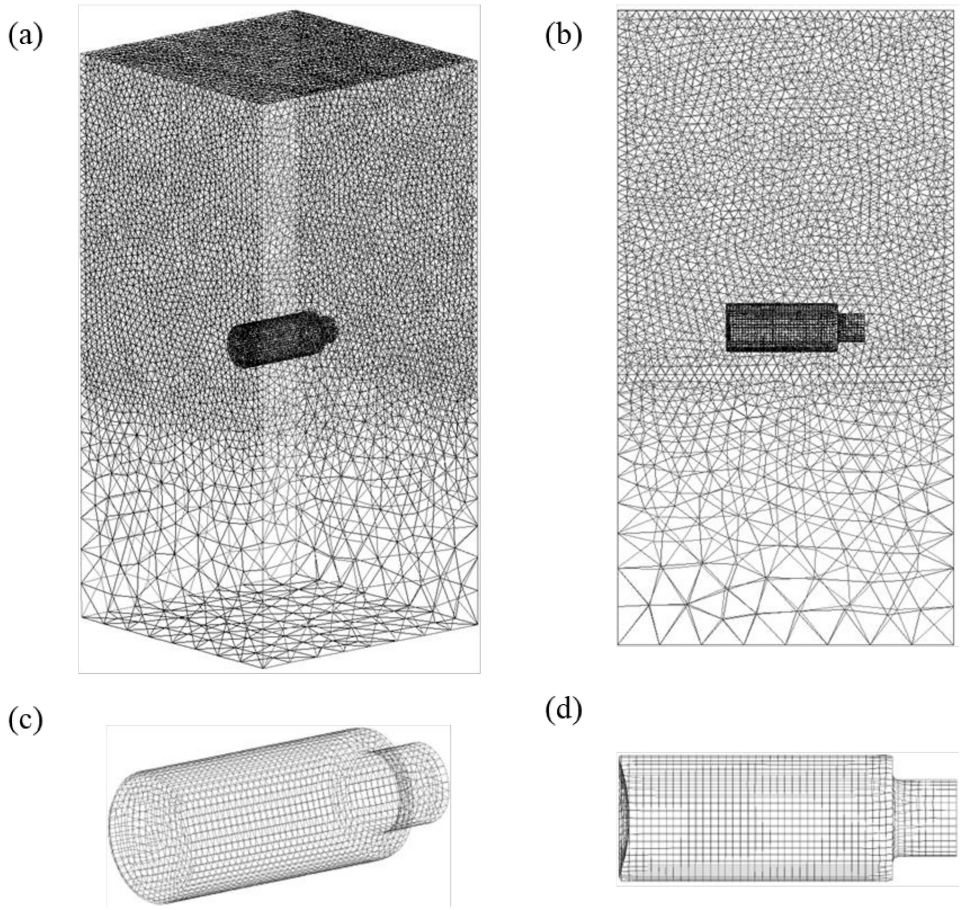
3.3.8 Malhas computacionais e discretização angular

A seguir são apresentadas as configurações das malhas utilizadas no estudo de independência de malha que buscou definir a melhor configuração para se conduzir as demais simulações dos planejamentos, bem como são apresentadas as combinações de números de divisão de ângulos de controle utilizadas para verificação da melhor discretização angular dos sistemas estudados. Em todas as análises a radiação incidente foi a variável monitorada, dada sua influência direta na cinética de reação.

3.3.8.1 Sistema Concentrador Pontual

Foram construídas 4 malhas com diferentes graus de refino para realização de testes de independência de malha com a geometria nas configurações do menor reator estudado: D_L = 13,5 cm (foco) e V_R = 15 mL. Nesta análise foram observadas as respostas de radiação incidente, em $W \cdot m^{-2}$, e foi registrado o tamanho do menor elemento do volume de controle para aplicação desta proporção nas demais malhas do planejamento fatorial. As malhas geradas para este sistema concentrador são híbridas, intercalando uma região com elementos tetraédricos (atmosfera entre reator e lente) e uma região com elementos hexaédricos (interior do reator). As malhas foram construídas utilizando-se o software Ansys Meshing® e a região em que os raios de luz convergem para o ponto focal possui maior refinamento que a região imediatamente após o reator em direção a base do domínio, como pode-se observar na Figura 3.18. Na figura em questão e na Tabela 3.6 apresentam-se os tamanhos de malha considerados nos testes de independência de malha do sistema concentrador pontual para a definição do tamanho de elemento mínimo a ser utilizado nas demais malhas do estudo.

Figura 3.18 – Malha computacional gerada para uma simulação do sistema concentrador pontual – D_L = 13,5 cm e V_R = 15 mL. Vista do domínio completo: (a) em perspectiva e (b) frontal. Vista do volume interno do reator: (c) em perspectiva e (d) frontal.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Tabela 3.6 – Tamanhos de malhas para estudo de independência de malha no domínio do ar – sistema concentrador pontual.

Malha	**Número de elementos no domínio ar**	**Tamanho do menor elemento (mm)**
1	359.782	4,5
2	597.107	3,6
3	967.673	3,0
4	1.198.061	2,8

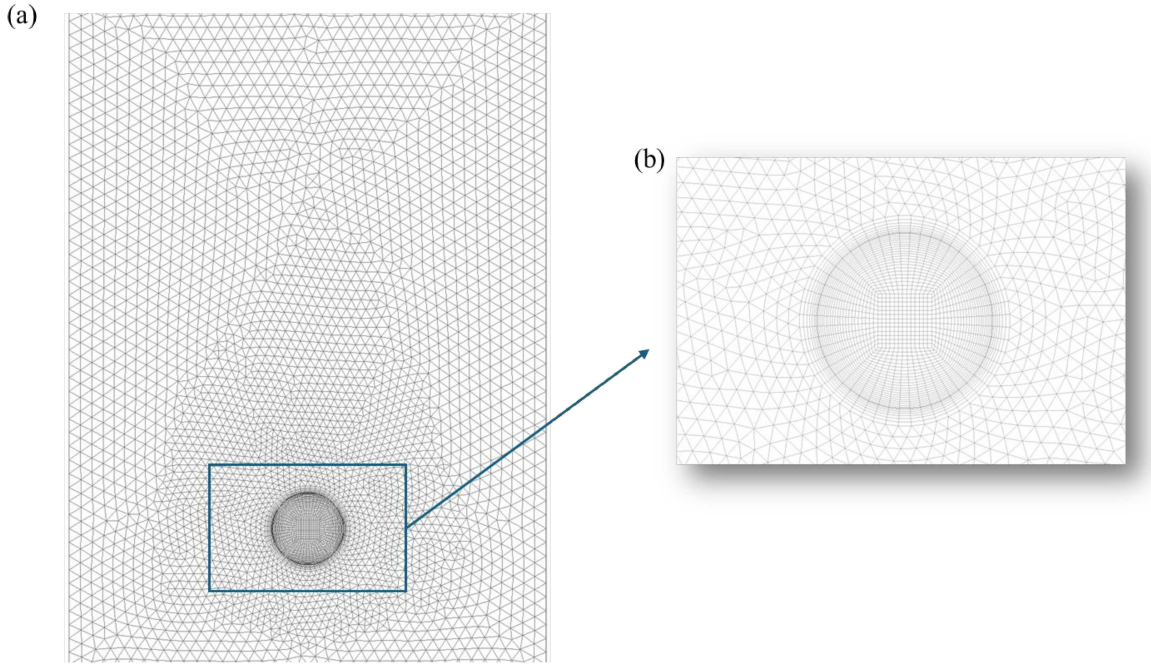
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.3.8.2 Sistema Concentrador Linear

De forma similar ao sistema concentrador pontual, testes de independência de malha foram realizados levando em consideração tanto o domínio ar quanto o domínio do reator, para determinação do tamanho do menor elemento do volume de controle, sendo a proporção obtida em ambos os volumes (reator e ar) aplicada nas demais malhas 2D do estudo, as quais variam em suas geometrias a posição do reator tubular em relação à lente de Fresnel. A configuração do sistema concentrador linear analisada consistiu em um reator tubular de diâmetro interno D_i = 26 mm e D_L = 20 cm (foco). Ainda de forma similar ao sistema concentrador pontual, as malhas bidimensionais do estudo consistem em malhas híbridas com elementos hexaédricos estruturados no interior do reator tubular, e elementos tetraédricos na região que compreende o ar entre o reator e a lente de Fresnel, como pode-se observar na Figura 3.19. Na Tabela 3.7 e na Tabela 3.8 são apresentados os tamanhos de malha utilizados.

Os ensaios numéricos para determinar os tamanhos de elemento de malha a serem utilizados no sistema foram conduzidos considerando-se uma radiação genérica de 10 $W \cdot m^{-2}$ incidindo sobre a lente de Fresnel, e uma solução padrão de ferrioxalato de potássio contendo 0,04 M de íons Fe^{3+}.

Figura 3.19 – Malhas computacionais do domínio 2D em que a etapa de solução da RTE é conduzida: (a) domínio 2D com detalhe para (b) região do reator tubular, destacando-se elementos hexaédricos e tetraédricos.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Tabela 3.7 – Tamanhos de malhas para estudo de independência de malha no sistema concentrador linear 2D.

Malha	Número de elementos no domínio ar	Tamanho máximo de elemento (mm)
1	19.633	2,5
2	44.519	1,5
3	123.957	0,9
4	177.027	0,7

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Tabela 3.8 – Tamanhos de malhas para estudo de independência de malha no reator tubular– sistema concentrador linear 3D.

Malha	Número de elementos	Subdivisões ao longo do comprimento do tubo
1	124735	95
2	249470	190
3	374205	285
4	498940	380

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.3.9 Discretização Angular

A implementação do modelo DOM para resolução da RTE necessita da correta combinação de parâmetros de discretização angular N_θ e N_ϕ. A depender da combinação de valores para estes parâmetros a solução pode ficar mais precisa dado o maior número de subdivisões que são realizadas no domínio para delineamento do traçado do raio de luz. Entretanto, o custo computacional aumenta demasiadamente, e quando associada a malhas com alto grau de refino, a simulação pode tornar-se inviável dependendo do hardware utilizado. Portanto, para os modelos CFD apresentados neste trabalho tornou-se necessário a condução de testes de discretização angular que, assim como os testes de independência de malha, visam a determinação da melhor combinação de N_θ e N_ϕ que forneça uma resposta satisfatória a um custo computacional relativamente aceitável.

Na Tabela 3.9 apresenta-se o planejamento de testes de discretização angular no sistema concentrador com lente de Fresnel pontual. A geometria escolhida para a condução destas simulações-teste foi a mesma configuração utilizada nos testes de independência de malha: D_L = 13,5 cm e V_R = 15 mL, e o tamanho de malha escolhido foi o tamanho ideal determinado após a condução do teste de independência de malha. A resposta monitorada foi a Radiação Incidente ($W \cdot m^{-2}$), diretamente associada aos processos conduzidos em fotorreatores. As combinações dos parâmetros N_θ e N_ϕ foram selecionadas com base em testes de discretização angular realizados na literatura (MORENO; CASADO; MARUGÁN, 2019).

Tabela 3.9 – Combinações de número de divisões de ângulos de controle para o estudo de discretização angular – sistema concentrador pontual.

Caso	**Discretização Angular** N_θ **x** N_ϕ
1	3 x 3
2	10 x 10
3	15 x 15
4	20 x 20

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Já para o sistema concentrador linear, a discretização angular foi realizada considerando-se a variação de apenas um dos fatores, dado que as simulações de solução do campo de radiação incidente são realizadas em domínio 2D, prática também adotada em trabalhos correlatos da literatura (KADDOURA; ZEAITER, 2019; PERALTA MUNIZ MOREIRA; LI PUMA, 2021). Os testes também foram conduzidos com as malhas ideais para o estudo obtidas após condução dos testes de independência de malha. Na Tabela 3.10 apresenta-se o planejamento do estudo de discretização angular do sistema concentrador linear.

Tabela 3.10 – Combinações de número de divisões de ângulos de controle para estudo de discretização angular – sistema concentrador linear.

Caso	Discretização Angular N_θ x N_ϕ
1	3 x 10
2	3 x 40
3	3 x 60
4	3 x 120
5	3 x 160
6	3 x 180
7	3 x 200

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.4 Planejamento de Simulações (Actinometria com FeOx)

Após a execução da metodologia voltada para a validação do modelo CFD desenvolvido para as unidades concentradoras pontual e linear, foram elaborados planejamentos para estudo dos efeitos das variáveis operacionais inerentes ao processo de irradiação dos reatores com as lentes de Fresnel. Ao passar pela lente, os raios de luz são dirigidos até o ponto focal, região onde há a maior concentração de radiação por área, e em processos que buscam incrementos térmicos com o uso de cavidades receptoras, como processos de pirólise, calcinação e geração de energia, o posicionamento do reator/receptor se dá preferencialmente no foco da lente. Entretanto, para a aplicação estudada no presente trabalho, questionava-se o impacto do posicionamento (D_L) e volume dos reatores (V_R) no índice de uniformidade da radiação incidente no interior do reator, bem como em sua intensidade média e efeito nas reações que ocorrem durante a irradiação.

Portanto, foram estudados nestes planejamentos os efeitos das variáveis nas respostas: fator de concentração da radiação incidente dentro do reator (*FC*), concentração de produto (C_{Fe2+}) e o Índice de Uniformidade da radiação dentro do reator (UI_{RAD}). Este índice consiste no grau de homogeneidade do campo de radiação em uma superfície, ou em um conjunto de superfícies e valores próximos de 1 para esta resposta indicam que os valores de radiação no interior do fotorreator estão bem distribuídos, sendo essa resposta calculada de forma ponderada pela área das faces das células computacionais no interior do reator conforme a Equação (3.15) (ANSYS, 2012).

$$UI_{RAD} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}[(|IR_i - \overline{IR}|)A_i\,]}{2|\overline{IR}|\sum_{i=1}^{n} A_i} \tag{3.15}$$

$$\overline{IR} = \frac{\sum_{i=1}^{n} IR_i A_i}{\sum_{i=1}^{n} A_i} \tag{3.16}$$

O fator de concentração de radiação (*FC*) corresponde à razão entre a radiação incidente média no volume do reator e a radiação transmitida pela lente de Fresnel, e a concentração de produto (C_{Fe2+}) foi calculada no interior do reator através da média volumétrica.

Nesse sentido, foram estudadas de forma numérica diferentes configurações em ambos os sistemas concentradores. No sistema concentrador pontual a distância do reator até a lente (D_L) e o volume interno do reator (V_R) foram analisados sob uma incidência de radiação constante, ao passo que no sistema concentrador linear além da distância do reator tubular até a lente (D_L), a variável vazão de recirculação (Q) e a radiação solar incidente (I_S) foram estudadas. Em ambos os sistemas, diferentes geometrias contendo as variações de (D_L), e (V_R) no caso da lente de Fresnel pontual, foram simuladas dentro do planejamento respeitando-se os máximos tamanhos de malha definidos pelos testes de independência de malha e combinação de número de divisões de ângulos de controle levantados pelo estudo de discretização angular.

3.4.1 Sistema concentrador com lente pontual

Neste sistema, a radiação incidente na superfície da lente foi mantida constante e as variáveis D_L e V_R foram estudadas. Para isso, escolheu-se delinear um planejamento fatorial 3^k (k=2) que é apresentado na Tabela 3.11. Conforme citado anteriormente, três tamanhos de frasco de penicilina (15, 39 e 62 mL) foram analisados e adicionalmente três elevações do reator ao longo do caminho dos raios de luz até o ponto focal foram avaliadas: 3,00 cm, 8,25 cm e 13,5 cm (ponto focal). As equações a seguir apresentam as codificações dos valores apresentados na Tabela 3.11.

$$X_1 = \frac{V_R - 39{,}0}{23{,}0} \tag{3.17}$$

$$X_2 = \frac{D_L - 82{,}5}{52{,}5} \tag{3.18}$$

Tabela 3.11 – Planejamento fatorial 3^k para estudo de efeito das variáveis do sistema concentrador pontual.

Simulação	X_1 (Volume do Reator)	X_2 (Posição do Reator)
1	-1	-1
2	-1	0
3	-1	1
4	0	-1
5	0	0
6	0	1
7	+1	-1
8	+1	0
9	+1	1

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

A correspondência de cada um dos fatores com a sua forma codificada pode ser visualizada na Tabela 3.12.

Tabela 3.12 – Variáveis e sua forma codificada – sistema concentrador pontual.

Nível	D_L (cm) Posição do Reator	V_R (mL) Volume do Reator
-1	3,00	15
0	8,25	39
1	13,50	62

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.4.2 Sistema concentrador com lente linear

Nas simulações do sistema concentrador linear a variável radiação solar incidente (I_S) foi incluída para permitir uma análise de sua influência e dos efeitos combinados com as demais variáveis operacionais. Dessa forma, foi delineado por um planejamento composto central (PCC) conforme apresentado na Tabela 3.13. A escolha da radiação UVA é apenas um parâmetro mensurável da intensidade da radiação total incidida na lente, sendo que os valores equivalentes de radiação para a actinometria nas outras duas faixas de comprimento de onda para a reação são calculados com base nesse valor e então implementados em sua totalidade na

simulação. As equações a seguir representam as codificações dos valores apresentados na Tabela 3.13.

$$X_1 = \frac{D_L - 13{,}50}{6{,}50} \tag{3.19}$$

$$X_2 = \frac{Q - 2{,}40}{1{,}55} \tag{3.20}$$

$$X_3 = \frac{I_S - 201{,}25}{89{,}36} \tag{3.21}$$

Tabela 3.13 – Planejamento composto central para estudo de efeito das variáveis do sistema concentrador linear.

Simulação	**X1 (Posição do Reator Tubular)**	**X2 (Vazão)**	**X3 (Radiação UVA Incidente)**
1	-1	-1	-1
2	-1	-1	1
3	-1	1	-1
4	-1	1	1
5	1	-1	-1
6	1	-1	1
7	1	1	-1
8	1	1	1
9	-1,287	0	0
10	1,287	0	0
11	0	-1,287	0
12	0	1,287	0
13	0	0	-1,287
14	0	0	1,287
15	0	0	0
16	0	0	0

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

A correspondência de cada um dos fatores com a sua forma codificada pode ser visualizada na Tabela 3.14.

Tabela 3.14 – Variáveis e sua forma codificada – sistema concentrador linear.

Nível	D_L (cm) Posição do Reator Tubular	Q (L·min^{-1}) Vazão de Recirculação	I_S (W·m^{-2}) Radiação UVA Incidente	I_S (W·m^{-2}) Total Actinometria
-α	5,13	0,40	15,00	86,23
-1	7,00	0,85	19,46	111,90
0	13,50	2,40	35,00	201,25
1	20,00	3,95	50,54	290,61
α	21,87	4,40	55,00	316,27

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.5 Simulações de Inativação Bacteriana

O modelo cinético de desinfecção obtido da literatura é apresentado nesta seção bem como as condições de simulação da etapa de reprodução do modelo, necessária para possibilitar sua implementação nos modelos computacionais das unidades concentradoras solares desenvolvidas nesta tese. Por fim apresentam-se os casos e condições de simulação das análises numéricas de desempenho dos concentradores solares na desinfecção de água contaminada.

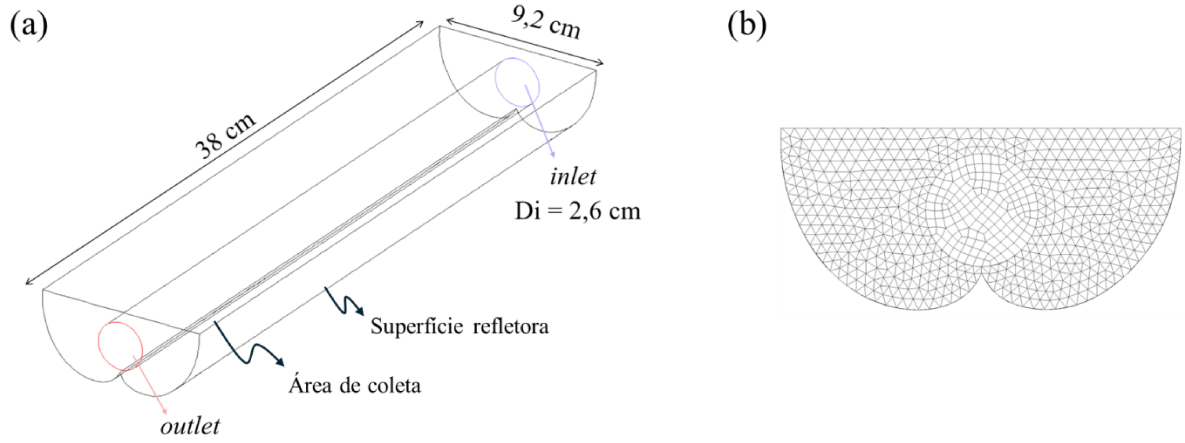
3.5.1 Desenvolvimento do modelo cinético e reprodução de resultados da literatura

A avaliação da performance de desinfecção dos sistemas concentradores propostos neste trabalho foi realizada de forma numérica buscando-se empregar o modelo mecanicista desenvolvido por Castro-Alférez et al. (2017a) no lugar da reação de actinometria com ferrioxalato de potássio. Após uma pesquisa bibliográfica para a identificação dos modelos de desinfecção via SODIS mais utilizados na literatura, o modelo de Castro-Alférez et al. (2017a) foi selecionado devido ao seu tratamento explícito do termo de radiação dentro da cinética através da taxa volumétrica local de fótons absorvidos (LVRPA, do inglês *Local Volumetric Rate of Photons Absorption*), e por ter sido validado com êxito em simulações CFD e experimentos de um reator acoplado a um CPC realizados por García-Gil et al. (2019).

Após a escolha do modelo, o próximo passo foi a sua implementação no ambiente do software Fluent e o desenvolvimento da UDF referente ao modelo para possibilitar a simulação da reação. Uma vez o modelo implementado, buscou-se a reprodução de alguns resultados obtidos por García-Gil et al. (2019) para garantir que o modelo empregado nas simulações com a lente de Fresnel proporcionasse resultados confiáveis. Para isso, a geometria e a malha do sistema CPC desenvolvidos pelos autores foram reconstruídos e as mesmas condições de

contorno empregadas foram aplicadas. Esses detalhes encontram-se respectivamente na Figura 3.20 e Tabela 3.15. A malha híbrida deste modelo reproduzido era composta de 482590 elementos e as mesmas dimensões de tubo e refletor, incluindo a curvatura das parábolas, foram aplicadas. Essa etapa de reprodução contou com a gentil contribuição dos autores para o correto desenvolvimento da UDF que descreve as cinéticas das espécies envolvidas no modelo de Castro-Alférez et al. (2017a).

Figura 3.20 – Detalhes do domínio computacional construído para reprodução da modelagem do fotorreator acoplado a um CPC de García-Gil et al. (2019): a) dimensões da geometria; b) corte transversal da malha híbrida de 482590 elementos.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Tabela 3.15 – Condições de contorno e esquemas de resolução empregados por García-Gil et al. (2019).

Informação	Condição aplicada
Condições de contorno	Área de coleta: *Semi-transparent:* Irradiação Direta = 15,7 $W \cdot m^{-2}$, 16,4 $W \cdot m^{-2}$, 18,6 $W \cdot m^{-2}$, 21,7 $W \cdot m^{-2}$, 24,8 $W \cdot m^{-2}$ Superfície Refletora: *Opaque:* Emissividade Interna e Externa = 0,15 (85% de reflexão para o alumínio anodizado) Paredes laterais: *Semi-transparent* Parede do reator tubular: *Semi-transparent* (*no-slip*) Entrada do reator: *Velocity inlet*: 0,39 m/s (12,12 L/min) Saída do reator: *Pressure-outlet:* 101325 Pa Frações mássicas iniciais das espécies modeladas: $H_2O_2 = 9{,}63 \cdot 10^{-17}$ (equivalente à concentração de 20 nM) SOD = $1{,}27 \cdot 10^{-10}$ (equivalente à concentração de 20 μM) CAT = $4{,}51 \cdot 10^{-9}$ (equivalente à concentração de 92 μM) Bactéria = $1{,}97 \cdot 10^{-7}$ (equivalente à concentração de 10^6 CFU/mL)
Aceleração gravitacional	9.81 m/s^2
Tipo de malha adotada	Hexaédrica (reator) Tetraédrica (atmosfera entre reator e refletor)
Modelo de Turbulência	k-ε *standard*
Modelo de Resolução da RTE	DOM
Discretização Angular	$N_\theta = 15$ x $N_\phi = 15$
Modelo Cinético	(CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017a) (Apêndice F)
Modo de simulação	Estacionário (Equação de Movimento e RTE) Transiente (Conservação de massa e espécies)
Acoplamento Pressão-Velocidade	SIMPLE
Discretização Espacial	Gradiente: *Least Squares Cell Based* Pressão: PRESTO! Momento: *First Order Upwind* Energia cinética turbulenta: *First Order Upwind* Taxa de dissipação turbulenta: *First Order Upwind* Espécies: *Second Order Upwind* Energia: *First Order Upwind* Ordenadas Discretas: *First Order Upwind*
Formulação Transiente	*First Order Implicit*
Critérios de Convergência	$1 \cdot 10^{-6}$ (Equação de movimento e RTE) $1 \cdot 10^{-4}$ (Conservação de massa e espécies)
Time-step size	1 s (Conservação de massa e espécies)

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Em seu trabalho, os autores modelaram as concentrações considerando as espécies reativas intracelulares dentro da *E. coli* – catalase (CAT), superóxido dismutase (SOD), H_2O_2 – com concentrações molares intracelulares iniciais de $9{,}2 \cdot 10^{-5}$ M, $2 \cdot 10^{-5}$ M, $2 \cdot 10^{-10}$ M, respectivamente. A inativação bacteriana (R1) foi formulada por volume de água, ao passo que as concentrações de CAT, SOD e H_2O_2 referem-se ao volume intracelular das bactérias.

Embora o modelo cinético considere as espécies catalase como livremente distribuídas no meio, vale reforçar que na realidade elas são intracelulares. A opção por tratá-las como espécies independentes no domínio computacional decorre de uma limitação da metodologia de simulação de reação através da fluidodinâmica computacional, que não permite modelagem reacional acoplada diretamente ao volume celular. Para contornar essa restrição, foi aplicada uma correção volumétrica baseada na razão entre o volume de cada bactéria e o volume total do sistema.

A concentração de NADH foi considerada constante dentro da célula bacteriana e igual a $2{,}5 \cdot 10^{-4}$ M e todas as concentrações se referem ao volume celular na solução. O volume bacteriano foi aproximado usando dimensões representativas da *E. coli* (1 μm de comprimento × 0,5 μm de diâmetro), resultando em um volume de aproximadamente $1{,}96 \times 10^{-13}$ cm³ por bactéria. Como as concentrações de CAT, SOD e NADH são intracelulares, os autores corrigiram essas concentrações para estarem referenciadas ao volume do reator e não das células, multiplicando-as pela razão entre o volume bacteriano e o volume total de água, levando em consideração a concentração bacteriana típica de 10^6 UFC mL^{-1}. Todos esses ajustes foram necessários para adaptar as taxas de reação para unidades compatíveis com o ANSYS Fluent 14.5 ($kmol \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$).

No que diz respeito aos parâmetros ópticos, os coeficientes de absorção molar específicos (κ*) para as espécies intracelulares na faixa UV-A (300–400 nm) foram obtidos na literatura: $2{,}6 \cdot 10^5$ $M^{-1} \cdot cm^{-1}$ para CAT, 800 $M^{-1} \cdot cm^{-1}$ para SOD e 6220 $M^{-1} \cdot cm^{-1}$ para NADH. Esses valores foram convertidos em coeficientes de absorção volumétrica (κ) através da sua multiplicação pelas concentrações molares intracelulares das respectivas espécies. Os coeficientes de absorção volumétrica resultantes para NADH, CAT e SOD na água a granel foram extremamente baixos e com impacto negligenciável para a modelagem do transporte de radiação. A taxa volumétrica local de absorção de fótons (LVRPA) foi então usada para acoplar mecanicamente a intensidade da radiação com a cinética de inativação bacteriana nas condições do reator.

Por fim, o cálculo do efeito de diluição do tanque seguiu o mesmo racional empregado nas simulações de actinometria. A UDF de recirculação (Apêndice A.4) foi adaptada para

incluir as quatro espécies químicas e seus respectivos produtos, garantindo assim a recirculação de todas as espécies no sistema e evitando a simulação CFD do tanque de armazenamento. Todas as simulações de cinética de desinfecção neste trabalho foram conduzidas até atingirem o limite de detecção encontrado por García-Gil et al. (2019) uma vez que foram consideradas a mesma concentração inicial explorada pelos autores (10^6 CFU·mL^{-1}), características da água e apenas o método de concentração foi alterado.

3.5.2 Sistema concentrador com lente pontual

Com o modelo de García-Gil et al. (2019) e Castro-Alférez et al. (2017a) reproduzido com sucesso na etapa anterior, o modelo foi então aplicado ao domínio do sistema concentrador que utiliza a lente de Fresnel pontual. Para fins de análise da dinâmica de desinfecção no reator foram utilizadas as mesmas configurações geométricas da condição do planejamento fatorial que proporcionaram as maiores conversões nos ensaios de actinometria, ou seja, a de maior radiação incidente média dentro do fotorreator, e uma condição sem lente, com a mesma radiação UVA média incidente utilizada nas simulações e experimentos de actionometria com a lente pontual, 9,81 W·m². Dado o alto grau de concentração da lente, este valor foi considerado pequeno o suficiente para permitir a análise da curva de cinética e influência da lente de Fresnel em pequenos recipientes de água como os utilizados na presente tese.

Duas condições diferentes de desinfecção foram simuladas: SODIS com auxílio da lente de Fresnel pontual e a SODIS convencional. Esta última consistiu na atribuição do valor médio de radiação UVA em todo o volume do frasco, ou seja, cada célula computacional recebeu um valor constante de 9,81 W·m^{-2}. Essa condição visa a comparação do potencial de desinfecção da lente pontual com a máxima conversão possível através de um processo SODIS convencional sem concentração de luz, isto é, se toda a radiação incidente no frasco fosse dispersada igualmente em todos os pontos do frasco.

A radiação foi mantida constante ao longo de todas as simulações e foram monitoradas as concentrações de cada uma das espécies da reação (CAT, SOD, H_2O_2 e Bactéria) versus o tempo de irradiação. As condições de simulação destes dois ensaios computacionais são apresentadas na Tabela 3.16. As fronteiras do sistema e demais elementos do domínio são as mesmas apresentadas anteriormente na Figura 3.13.

Tabela 3.16 – Condições de contorno e esquemas de resolução empregados nas simulações de desinfecção com e sem lente de Fresnel pontual.

Informação	Condição aplicada
Condições de contorno	Lente de Fresnel Pontual: *Semi-transparent:* Irradiação Direta = 9,81 $W \cdot m^{-2}$ Condição sem lente = 9,81 $W \cdot m^{-2}$ distribuídos em todas as células do volume do reator Superfície inferior: *Opaque* Paredes laterais: *Semi-transparent* Parede do reator: *Semi-transparent* Tampa do reator: *Opaque* Entrada do domínio ar: *Semi-transparent* *Air velocity inlet*: 0 m/s Saída do domínio ar: *Pressure-outlet:* 101325 Pa Frações mássicas iniciais das espécies modeladas (atribuídas diretamente no volume do reator): $H_2O_2 = 9{,}63 \cdot 10^{-17}$ (equivalente à concentração de 20 nM) SOD = $1{,}27 \cdot 10^{-10}$ (equivalente à concentração de 20 µM) CAT = $4{,}51 \cdot 10^{-9}$ (equivalente à concentração de 92 µM) Bactéria = $1{,}97 \cdot 10^{-7}$ (equivalente à concentração de 10^6 CFU/mL)
Tipo de malha adotada	Hexaédrica (reator) Tetraédrica (atmosfera entre reator e lente)
Modelo de Turbulência	Fluido estagnado
Modelo de Resolução da RTE	DOM
Discretização Angular	$N_\theta = 15$ x $N_\phi = 15$
Modelo Cinético	(CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017a) (Apêndice F)
Modo de simulação	Estacionário (RTE) Transiente (Conservação de massa e espécies)
Acoplamento Pressão-Velocidade	SIMPLE
Discretização Espacial	Gradiente: *Least Squares Cell Based* Pressão: PRESTO! Momento: *First Order Upwind* Energia cinética turbulenta: *First Order Upwind* Taxa de dissipação turbulenta: *First Order Upwind* Espécies: *Second Order Upwind* Energia: *First Order Upwind* Ordenadas Discretas: *First Order Upwind*
Formulação Transiente	*First Order Implicit*
Critérios de Convergência	$1 \cdot 10^{-6}$ (Equação de movimento e RTE) $1 \cdot 10^{-4}$ (Conservação de massa e espécies)
Time-step	1 s (Conservação de massa e espécies)

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

3.5.3 Sistema concentrador com lente linear

Para avaliar o desempenho da lente de Fresnel linear na desinfecção foi feita uma análise comparativa com a lente de PMMA existente no laboratório, uma lente PMMA-UV que possui uma maior transmitância no espectro UV e um concentrador parabólico composto (CPC). Além dessa análise, diferentes vazões de recirculação tiveram seu impacto na SODIS analisada.

As seis condições de simulação visando a análise comparativa do desempenho do concentrador solar acoplado à lente de Fresnel linear são apresentadas na Tabela 3.17 e na Tabela 3.18. As simulações de desinfecção foram conduzidas com as mesmas configurações descritas na etapa de reprodução dos resultados de García-Gil et al. (2019), com algumas diferenças nas condições de contorno que dizem respeito à radiação incidente e vazão de operação. A configuração geométrica do sistema foi aquela que promoveu a maior conversão na actinometria e para verificar o efeito da utilização de uma lente de Fresnel PMMA UV comercial, apenas o valor de radiação incidente resultante após a transmitância da lente foi inserido como condição de contorno na simulação.

Tabela 3.17 – Casos simulados para comparação entre o uso de concentradores com lentes de Fresnel PMMA, PPMA UV e concentrador parabólico composto (CPC).

Caso	Tipo de Concentrador	Vazão ($L \cdot min^{-1}$)	Volume do Tanque de Armazenamento (L)	Radiação Incidente ($W \cdot m^{-2}$)
1	Lente PMMA	12,12	1,0	35,0
2	Lente PMMA UV			35,0
3	CPC			35,0

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

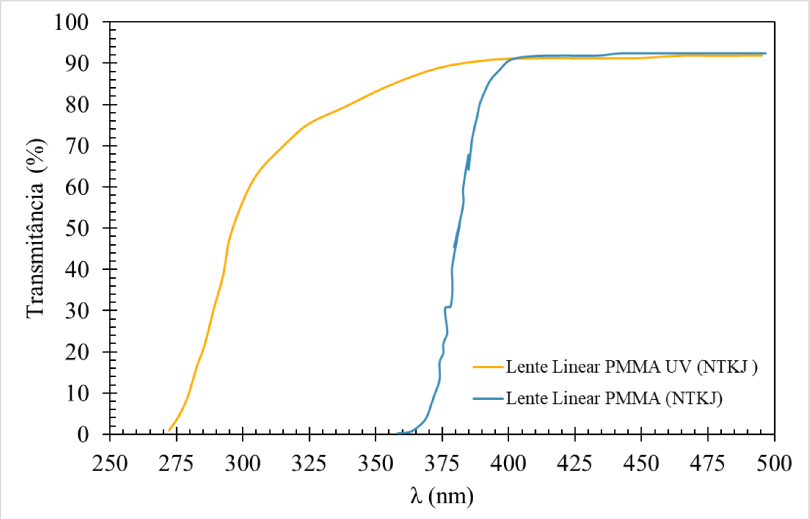
Tabela 3.18 – Casos simulados para análise determinística da vazão na desinfecção de *E. coli* com lente de Fresnel linear.

Caso	Tipo de Concentrador	Vazão ($L \cdot min^{-1}$)	Volume do Tanque de Armazenamento (L)	Radiação Incidente ($W \cdot m^{-2}$)
1	Lente PMMA UV	0,85	1,0	35,0
2	Lente PMMA UV	2,40	1,0	35,0
3	Lente PMMA UV	3,95	1,0	35,0

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Como referência, o espectro de transmitância da lente de Fresnel modelo PMMA-UV da mesma fabricante da lente disponível em laboratório foi utilizado. Esse espectro é apresentado na Figura 3.21 em comparação com o espectro da lente de Fresnel comum de PMMA. O valor de sua transmitância média na faixa UV foi calculado em cerca de 80%, ou seja, 42% maior que para a lente de Fresnel de PMMA comum. A utilização deste tipo de lente UV nesta etapa visa elucidar o comportamento da desinfecção mediante o uso de um concentrador específico para fins de concentração solar e demonstrar a viabilidade de se empregar a metodologia proposta na presente tese para o projeto de sistemas Fresnel com lentes de diferentes materiais.

Figura 3.21 – Espectro de transmitância de lentes de Fresnel lineares de diferentes tipos de materiais.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Outras três diferentes condições de vazão foram simuladas para investigar de forma determinística a influência da vazão na cinética da desinfecção neste sistema mediante o uso do modelo cinético de referência. Os valores de vazão utilizados foram retirados do planejamento delineado e apresentado na seção 3.4.2, enquanto a lente utilizada nessas simulações foi aquela que forneceu a melhor cinética na comparação entre diferentes materiais (PMMA e PMMA UV). Nesta análise, de forma similar à anterior, apenas uma condição de radiação UVA incidente foi utilizada.

Os detalhes dos parâmetros e demais configurações gerais implementadas nas simulações de desinfecção com lente Linear são apresentados na Tabela 3.19. Nela, os valores de radiação apresentados são os valores resultantes após a eliminação das parcelas de radiação absorvidas pelo PMMA em suas respectivas configurações, ou seja, são os valores implementados diretamente no simulador.

Tabela 3.19 – Condições de contorno e esquemas de resolução empregados nas simulações de desinfecção com lente de Fresnel linear.

Informação	Condição aplicada
Condições de contorno	Lente linear: *Semi-transparent:* Irradiação Direta = 15,7 $W \cdot m^{-2}$ (lente PMMA padrão), 32 $W \cdot m^{-2}$ (lente PMMA UV) Superfície Refletora: *Opaque:* Emissividade Interna e Externa = 0,15 (85% de reflexão para o alumínio anodizado) Paredes laterais: *Semi-transparent* Parede do reator tubular: *Semi-transparent* (*no-slip*) Entrada do reator: *Velocity inlet*: 0,39 m/s (12,12 L/min) Saída do reator: *Pressure-outlet:* 101325 Pa Frações mássicas iniciais das espécies modeladas: $H_2O_2 = 9{,}63 \cdot 10^{-17}$ (equivalente à concentração de 20 nM) SOD = $1{,}27 \cdot 10^{-10}$ (equivalente à concentração de 20 μM) CAT = $4{,}51 \cdot 10^{-9}$ (equivalente à concentração de 92 μM) Bactéria = $1{,}97 \cdot 10^{-7}$ (equivalente à concentração de 10^6 CFU/mL)
Aceleração gravitacional	9.81 m/s^2
Tipo de malha adotada	Hexaédrica (reator) Tetraédrica (atmosfera entre reator e refletor)
Modelo de Turbulência	k-ε *standard*
Modelo de Resolução da RTE	DOM
Discretização Angular	$N_\theta = 15$ x $N_\phi = 15$
Modelo Cinético	(CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017a) (Apêndice F)
Modo de simulação	Estacionário (Equação de Movimento e RTE) Transiente (Conservação de massa e espécies)
Acoplamento Pressão-Velocidade	SIMPLE
Discretização Espacial	Gradiente: *Least Squares Cell Based* Pressão: PRESTO! Momento: *First Order Upwind* Energia cinética turbulenta: *First Order Upwind* Taxa de dissipação turbulenta: *First Order Upwind* Espécies: *Second Order Upwind* Energia: *First Order Upwind* Ordenadas Discretas: *First Order Upwind*
Formulação Transiente	*First Order Implicit*
Critérios de Convergência	$1 \cdot 10^{-6}$ (Equação de movimento e RTE) $1 \cdot 10^{-4}$ (Conservação de massa e espécies)
Time-step size	1 s (Conservação de massa e espécies)

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos nas etapas de desenvolvimento dos modelos CFD, validações experimentais, verificação dos efeitos dos parâmetros de processo e análise numérica para predição da performance dos sistemas propostos no tratamento da água visando o consumo humano.

4.1 Estudo de Independência de Malha e Discretização Angular

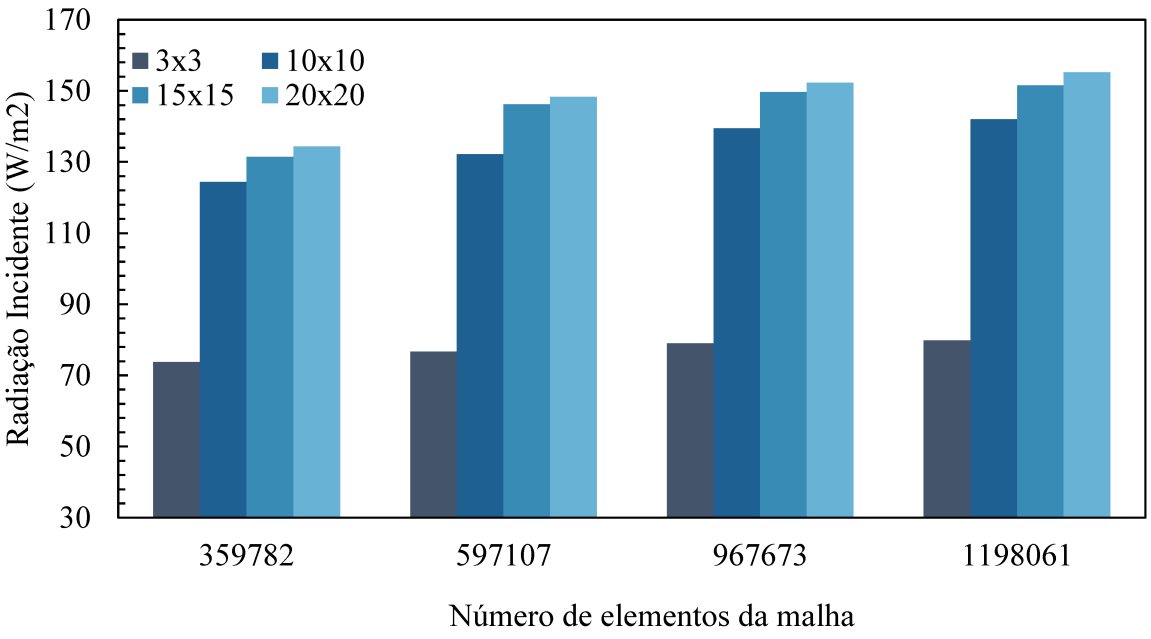
Os resultados dos estudos de independência de malha e discretização angular realizados para os dois sistemas concentradores investigados neste trabalho são apresentados nesta seção. Ao todo 32 simulações foram conduzidas, 16 para o sistema concentrador pontual e 16 para o sistema concentrador linear, com variações entre número de elementos da malha e combinação dos ângulos de controle N_θ x N_ϕ do modelo DOM. Estas análises buscavam encontrar o tamanho mínimo de elemento de malha a ser utilizado nas demais malhas dos sistemas concentradores bem como a melhor combinação de ângulos de controle.

4.1.1 Sistema concentrador pontual

Na Figura 4.1 e na Tabela 4.1 apresentam-se os resultados dos testes de independência de malha e de discretização angular do sistema concentrador com lente de Fresnel pontual. De forma geral, observaram-se tempos muito altos de convergência da solução do modelo DOM em malhas com grande quantidade de elementos e muitas subdivisões dos ângulos de controle como observado nas simulações 13, 14, 15, e 16. Com a combinação padrão de divisão dos ângulos de controle N_θ x N_ϕ = 3 x 3 indicada pelo guia teórico do programa Fluent® para refino de resultados em estudos convencionais os valores de radiação incidente no interior do reator foram bem inferiores à configuração de maior refino e discretização angular. Observa-se também que nesta combinação de subdivisões de ângulos de controle, a variação do tamanho de malha é pouco significativa para o resultado. Por outro lado, incrementos nesta combinação, para 10 x 10, são capazes de reduzir em mais de 30% o desvio do valor obtido em relação à malha mais refinada. A partir desta combinação o efeito do tamanho de malha passa a ser relevante, porém o efeito mais pronunciado nesta análise foi identificado para a discretização angular.

A combinação entre o número de elementos (discretização espacial) e o número de divisões dos ângulos de controle impactou consideravelmente o tempo de simulação e o tamanho dos arquivos de resultados gerados, demandando um excessivo custo computacional em termos de processamento e armazenamento das simulações. Dessa forma a presente análise teve como principal objetivo encontrar a malha e a combinação de ângulos que proporcionasse o melhor custo-benefício em termos de tempo de processamento, tamanho de arquivo de resultados gerado e proximidade do resultado de radiação incidente em relação à configuração mais refinada. Além dos valores médios de radiação incidente no volume do reator, também foram analisados os valores de radiação incidente no interior do reator por meio de contornos e linhas posicionadas no interior do reator em três diferentes posições.

Figura 4.1 – Efeito do tamanho de malha e da discretização angular na radiação média incidente dentro do fotorreator – sistema concentrador pontual.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

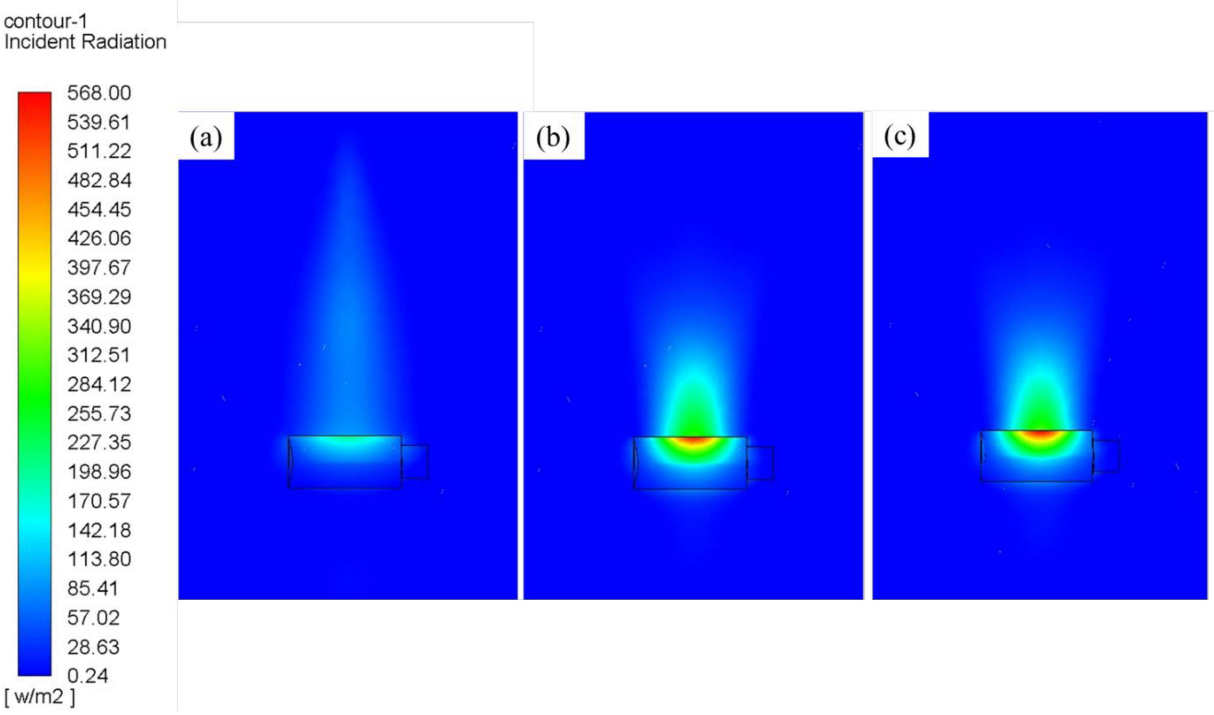
Tabela 4.1 – Planejamento do estudo de independência de malha e discretização angular – sistema concentrador pontual.

Simulação	Discretização Angular	Número de elementos	Tamanho máximo de elemento (mm)	Radiação Incidente ($W \cdot m^{-2}$)	Tempo de Simulação (s)	Desvio em relação ao maior refino (%)	Tamanho do Arquivo de Resultados (Gb)
1	3x3	359782	4,5	73,76	191	52,48	0,29
2	3x3	597107	3,6	76,63	279	50,63	0,47
3	3x3	967673	3,0	78,96	514	49,13	0,75
4	3x3	1198061	2,8	79,83	669	48,57	0,93
5	10x10	359782	4,5	124,34	1240	19,90	2,61
6	10x10	597107	3,6	132,16	2080	14,86	4,22
7	10x10	967673	3,0	139,46	3850	10,16	5,79
8	10x10	1198061	2,8	142,03	5169	8,50	6,68
9	15x15	359782	4,5	131,44	2696	15,33	8,26
10	15x15	597107	3,6	146,25	4464	5,78	9,37
11	15x15	967673	3,0	149,69	17507	3,57	10,24
12	15x15	1198061	2,8	151,53	29777	2,38	14,83
13	20x20	359782	4,5	134,32	7473	13,47	16,58
14	20x20	597107	3,6	148,3	22721	4,46	18,33
15	20x20	967673	3,0	152,25	58073	1,92	26,23
16	20x20	1198061	2,8	155,23	82209	0,00	32,43

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

De forma a verificar graficamente o efeito do refino da malha e dos ângulos de controle na resposta radiação incidente dentro do reator e no domínio externo, foram gerados contornos de radiação incidente com as simulações da Tabela 4.1. Em estudos envolvendo simulação numérica pelo método dos elementos finitos (CFD) e estudos de independência de malha, mais importante do que se avaliar a resposta através de um valor médio é a avaliação dos valores em determinados pontos do domínio, para observar se a resposta naquele ponto apresenta uma oscilação dependendo do número de elementos, esquema de malha e fator de crescimento aplicados. Na Figura 4.2 mostra-se o efeito do aumento do número de subdivisões no refino angular do domínio 3D estudado. Com baixos valores para N_θ e N_ϕ os raios de luz não têm seu trajeto corretamente definido e como resultado a radiação incidente no interior do reator é baixa.

Figura 4.2 – Efeito da discretização angular no cálculo do campo de radiações do sistema concentrador pontual. Malha de 359.782 elementos: (a) 3x3 – simulação 1; (b) 10x10 – simulação 5; (c) 15 x 15 – simulação 9.



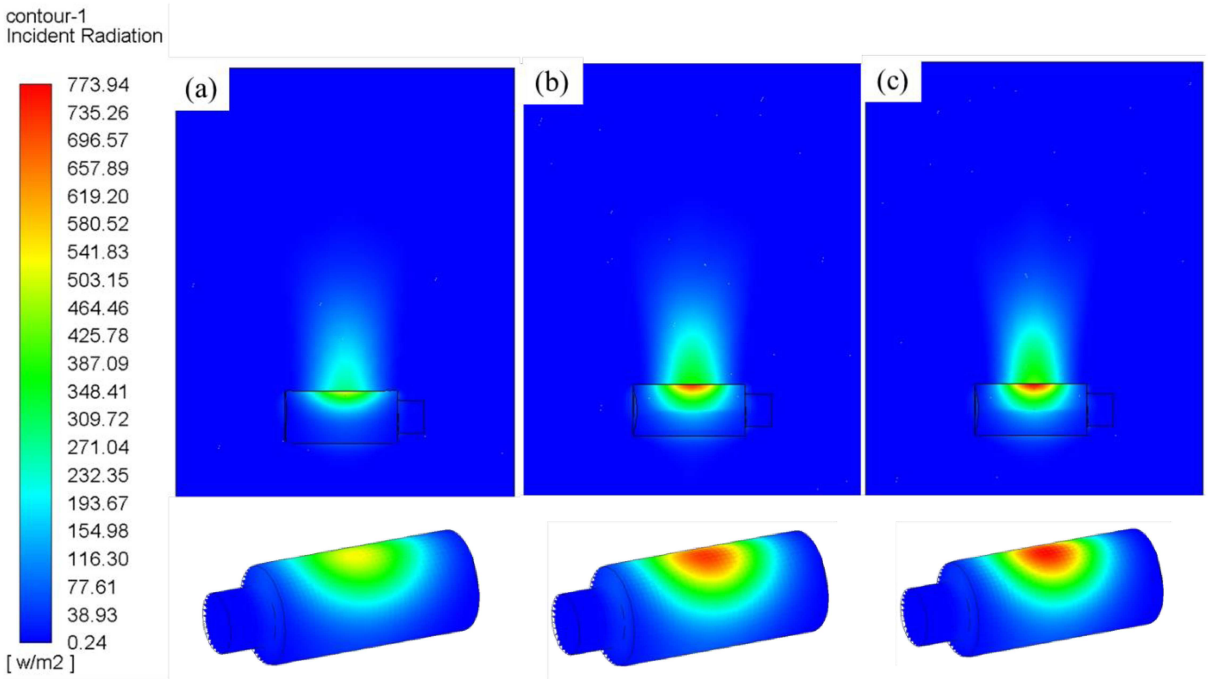
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Na Figura 4.3 apresenta-se o efeito do tamanho de malha (discretização espacial) no cálculo da radiação incidente no domínio. Conforme observado nos resultados anteriores, nota-se que a influência da combinação dos ângulos de controle é mais acentuada do que o efeito da quantidade de elementos no domínio, sendo que configurações com uma combinação de 10 x

10 já fornece valores de radiação mais factíveis com o fenômeno, porém foi identificada a necessidade de se trabalhar com elementos de malha menores, ou seja aumentando o tamanho da malha, para atingir resultados próximos da combinação mais refinada deste estudo de independência.

Dessa forma, levando em consideração os resultados de radiação incidente no interior do reator, os tempos de execução das simulações e o tamanho de arquivos de resultados gerados, os parâmetros da simulação 10 da Tabela 4.1 ($N_\theta = 15$, $N_\phi = 15$ e tamanho máximo de elemento de 3,6 mm) foram aplicados às demais simulações do estudo para o sistema concentrador pontual, ou seja, as malhas desenvolvidas para as demais simulações contaram com um número médio de elementos de malha de 597107. Cabe ressaltar que essa combinação corrobora com configurações implementadas em simulações de domínios tridimensionais de concentradores solares da literatura, como concentradores parabólicos e CPCs (CASADO et al., 2017; GARCÍA-GIL et al., 2019; MORENO-SANSEGUNDO; CASADO; MARUGÁN, 2020) de dimensões aproximadamente similares às da unidade pontual estudada neste trabalho.

Figura 4.3 – Efeito do tamanho de malha no cálculo do campo de radiações do sistema concentrador pontual com ângulos de controle 15x15. (a) 359.782 elementos; (b) 597.107 elementos; (c) 1.198.061 elementos.



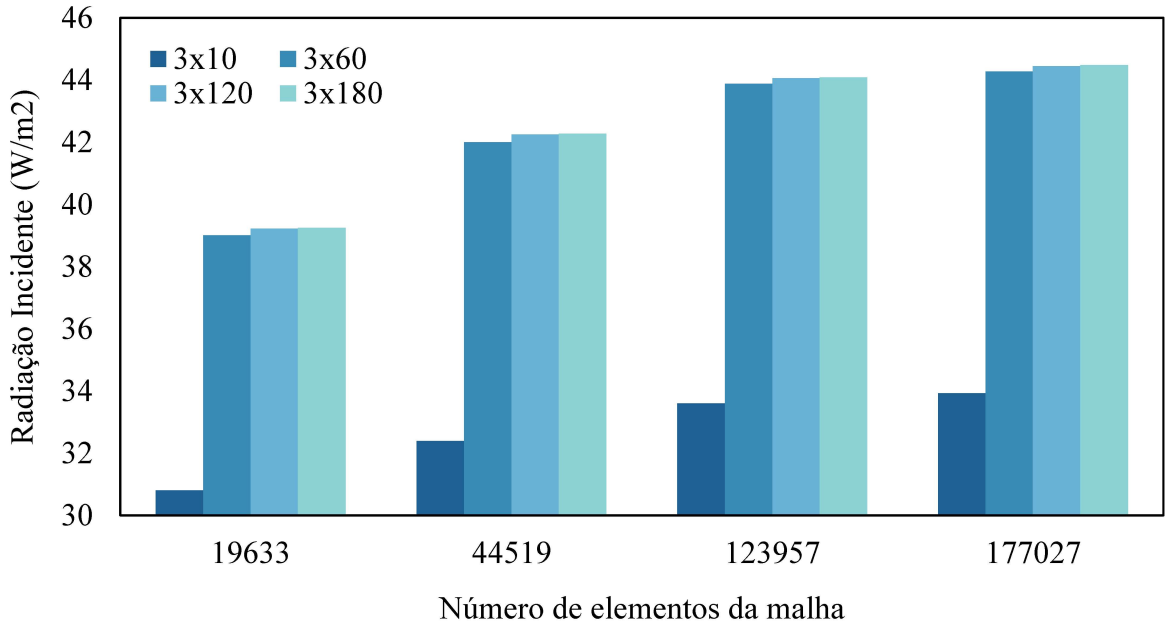
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

4.1.2 Sistema concentrador linear

Na Tabela 4.2 apresentam-se os resultados do estudo de independência de malha e discretização angular realizado com as malhas 2D do sistema concentrador solar com lente de Fresnel linear. Conforme esperado, os tempos de processamento das simulações de radiação neste sistema foram menores que os tempos do sistema concentrador pontual devido ao menor número de elementos que um sistema bidimensional apresenta e a necessidade de se discretizar apenas um dos ângulos de controle do modelo DOM. Os valores de desvio percentual apresentado na Tabela 4.2 são relativos à configuração mais refinada do estudo (N_θ = 3, N_ϕ =180 e 177.027 elementos).

Além disso, observando-se os grupos de simulações (1, 5, 9 e 13), (2, 6, 10 e 14), (3, 7, 11, e 15), e (4, 8, 12 e 16), nota-se que incrementos na quantidade de elementos da malha mantendo-se a configuração angular contante possuem pouco impacto quando comparado a incrementos no número de subdivisões do octante no ângulo ϕ de 10 para 60 divisões. Este comportamento pode ser notado na Figura 4.4. Observa-se também que combinações N_θ = 3 x N_ϕ = 60 já apresentam resultados satisfatórios em relação ao máximo valor médio observado.

Figura 4.4 – Efeito do tamanho de malha e da discretização angular na radiação média incidente dentro do fotorreator – sistema concentrador linear.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

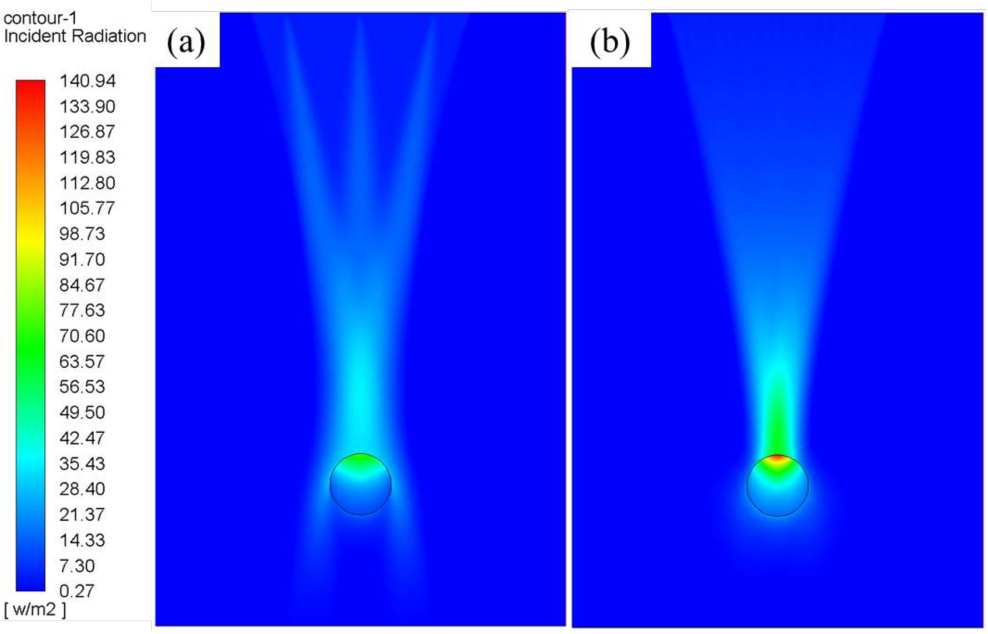
Tabela 4.2 – Planejamento do estudo de independência de malha e discretização angular – sistema concentrador linear.

Simulação	Discretização Angular	Número de elementos	Tamanho máximo do elemento (mm)	Radiação Incidente (W·m-2)	Tempo de Simulação (s)	Desvio em relação ao maior refino (%)
1	3x10	19.633	2,5	30,81	43	30,73
2	3x10	44.519	1,5	32,39	33	27,18
3	3x10	123.957	0,9	33,60	98	24,46
4	3x10	177.027	0,7	33,93	130	23,72
5	3x60	19.633	2,5	39,00	74	12,32
6	3x60	44.519	1,5	42,00	138	5,58
7	3x60	123.957	0,9	43,88	409	1,35
8	3x60	177.027	0,7	44,28	638	0,45
9	3x120	19.633	2,5	39,22	128	11,83
10	3x120	44.519	1,5	42,25	321	5,01
11	3x120	123.957	0,9	44,06	932	0,94
12	3x120	177.027	0,7	44,45	1.389	0,07
13	3x180	19.633	2,5	39,25	192	11,76
14	3x180	44.519	1,5	42,28	361	4,95
15	3x180	123.957	0,9	44,09	1.066	0,88
16	3x180	177.027	0,7	44,48	1.643	-

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

O impacto da escolha correta dos ângulos de controle do modelo DOM na radiação incidente no ponto focal onde o reator se encontra posicionado na simulação 8 pode ser observado na Figura 4.5. O incremento no número de divisões no ângulo azimutal foi suficiente para refinar a solução do traçado dos raios de luz a um valor satisfatório para o tamanho de malha analisado. Como observado anteriormente na Figura 4.4, a partir de 60 subdivisões o aumento do valor da radiação incidente média na área do fotorreator não é significativo. Nessa configuração os raios de luz já são melhor definidos desde a origem na lente de Fresnel e seguem o caminho ditado pela UDF implementada até convergirem para o ponto focal evitando assim o chamado "*ray effect*", quando são introduzidos erros numéricos ao aproximar a natureza angular contínua da propagação do feixe de radiação como incrementos angulares discretos com baixa resolução, podendo deslocar picos de fluxo de radiação e calor dentro da solução numérica (CRAIG et al., 2016).

Figura 4.5 – Efeito da discretização angular no cálculo do campo de radiações do sistema concentrador linear. Malha de 177.027 elementos (a) 3x10 – simulação 4 (b) 3x60 – simulação 8.



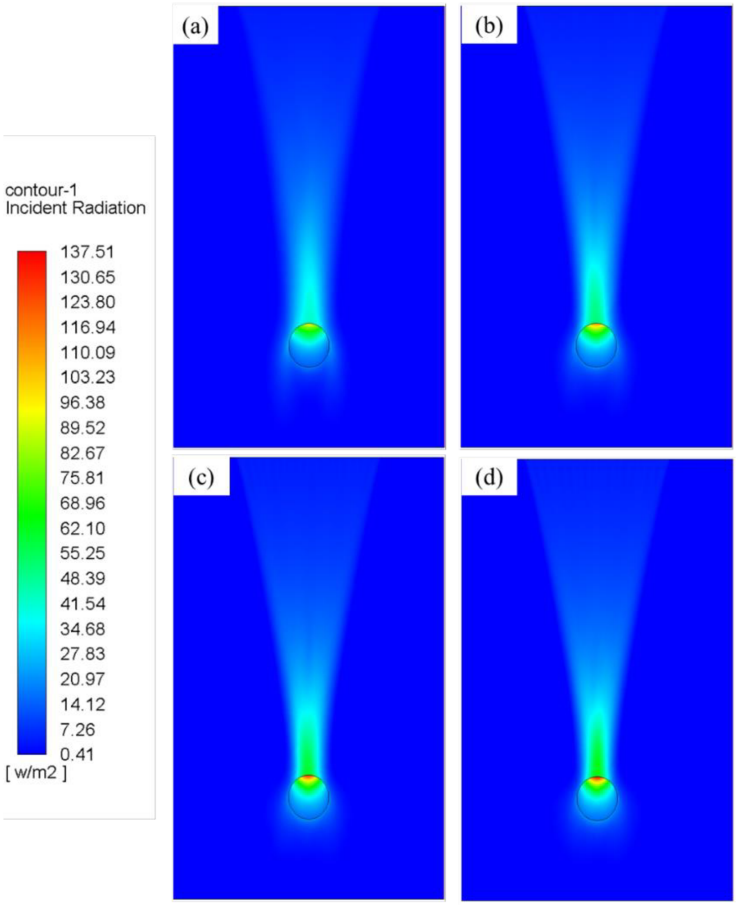
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

O efeito do tamanho da malha, por sua vez, é mais pronunciado nas redondezas do reator, como pode ser observado na Figura 4.6. A simulação 5 (Figura 4.6a) apresenta um erro relativo de 13,54% na predição da radiação incidente em relação à malha mais refinada desta configuração (Figura 4.6d). Esse efeito conhecido como "*false scattering*" é um erro numérico

que decorre da discretização espacial do domínio computacional. Quando a radiação se propaga em direções que não coincidem com os eixos da malha – por exemplo, em ângulos oblíquos – a avaliação da intensidade radiativa nas faces das células pode ser realizada com base em valores provenientes de pontos que não estão rigorosamente alinhados com a direção de propagação. Como consequência, ocorre uma difusão numérica artificial da radiação, que suaviza ou atenua os perfis de intensidade, mesmo na ausência de qualquer mecanismo físico responsável por tal efeito (CRAIG et al., 2016). Por se tratar de parâmetros inerentes à correta discretização do sistema, o efeito conjunto dos parâmetros aqui analisados é ainda mais pronunciado.

Observando-se as simulações 1 a 4 na Tabela 4.2, nota-se que, independentemente do tamanho da malha, todas as predições da radiação incidente no interior do reator apresentaram desvios significativos. Isso corrobora a importância da condução de estudos combinados de avaliação de ângulos de controle e tamanho de malha a partir da escolha em se trabalhar com o modelo de ordenadas discretas (DOM) para a modelagem de fotorreatores.

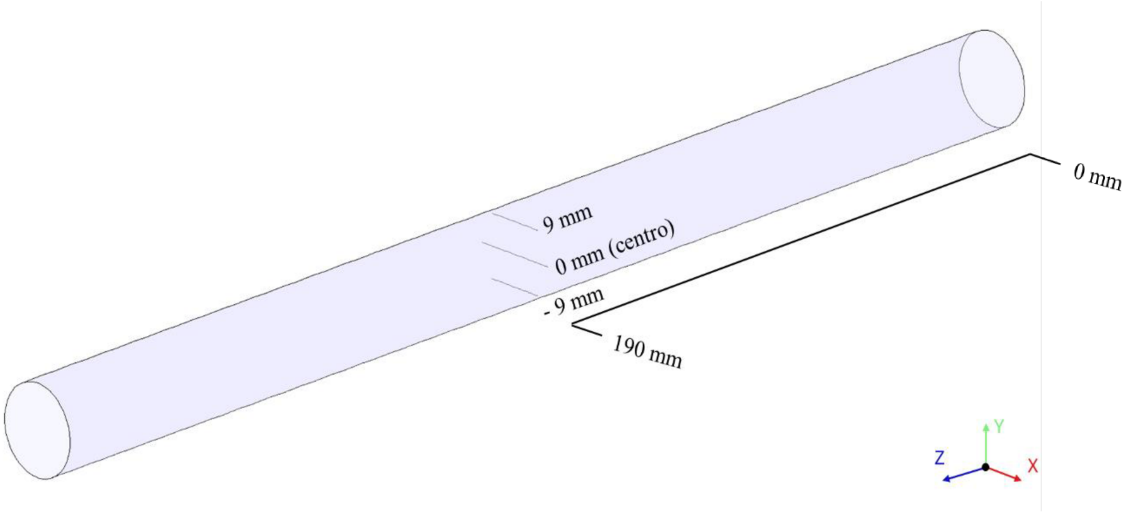
Figura 4.6 – Efeito do tamanho de malha no cálculo do campo de radiações do sistema concentrador linear com ângulos de controle 3x60: (a) 19.633 elementos; (b) 44.519 elementos; (c) 123.957 elementos; (d) 177.027 elementos.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

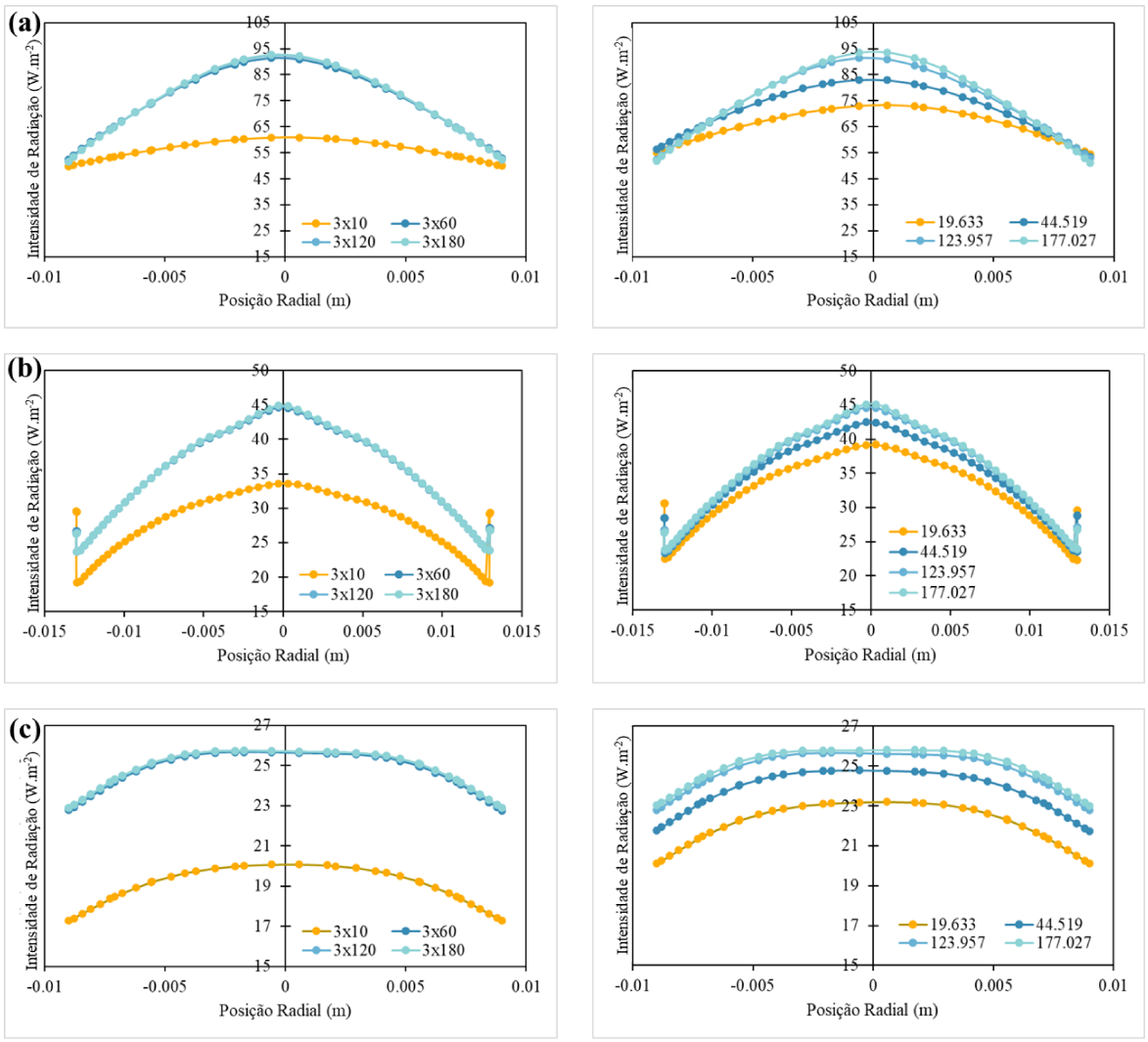
Em estudos envolvendo fluidodinâmica computacional é muito importante que não apenas os resultados médios de alguma superfície definida sejam analisados, como também os resultados em pontos representativos da geometria estudada para garantir a correta representatividade do fenômeno em todo o domínio. Para consolidar a análise a respeito das malhas obtidas, foram verificados os valores de radiação incidente em linhas posicionadas em três alturas na seção transversal do reator tubular (9 mm, centro e -9mm). Na Figura 4.7 e na Figura 4.8 mostram-se respectivamente a posição destas linhas no tubo e os valores obtidos no domínio. Observa-se que em todos os casos baixos valores de discretização dos ângulos de controle e de tamanhos de malha não propiciam resultados próximos às combinações mais refinadas, corroborando os valores médios observados nos contornos e na Tabela 4.2.

Figura 4.7 – Linhas de monitoramento posicionadas ao longo de uma seção transversal do reator tubular.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 4.8 – Radiação incidente em linhas de monitoramento posicionadas ao longo de uma seção transversal do reator tubular: a) linha de topo a 9 mm do centro, b) linha central, c) linha de fundo a 9 mm do centro.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Dentre todos os casos simulados, o caso 7 apresentou uma resposta satisfatória em termos de esforço computacional (relativo ao tempo de processamento) e um baixo desvio para os valores médios da radiação incidente na face que representa o volume do reator. O máximo espaçamento nos elementos da malha para esta configuração é de 0,9 mm, e esta proporção foi aplicada às demais malhas do estudo para a condução das simulações juntamente com os ângulos de controle $N_\theta = 3$ x $N_\phi = 60$.

O sistema concentrador linear também necessitou de uma análise específica de independência de malha para o domínio do reator tubular, simulado separadamente após a

condução das simulações bidimensionais para o cálculo do campo de radiação incidente. Os tamanhos de malha analisados no reator tubular dependem do número de subdivisões ao longo do comprimento do tubo. Para essa análise foi monitorada a concentração de Fe^{2+} após 5 min de irradiação do sistema. As concentrações de produto também foram analisadas em três linhas posicionadas na metade do comprimento do tubo conforme esquematizado na Figura 4.9. Devido a metodologia de desacoplamento das simulações de radiação em um domínio 2D e as simulações de transporte de momento e de espécies químicas em um domínio 3D, não se avaliou a combinação de ângulos de controle e apenas o tamanho da malha necessitou ser analisado nesta etapa. Os resultados de concentração média de produto no volume do reator após 5 minutos de reação são apresentados na Tabela 4.3.

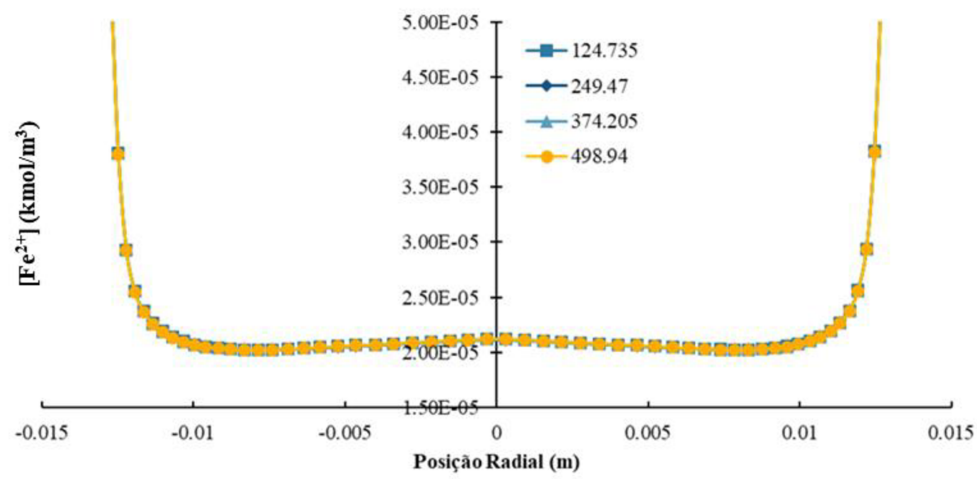
Os resultados do refino na direção Z do reator (direção do escoamento) mostraram que não há impacto em se utilizar malhas de menor resolução nesta direção para o modelo estudado. Além dos valores médios de concentração no volume do reator, observou-se que na linha central posicionada na seção transversal do reator (Figura 4.7) os valores locais possuem um desvio irrelevante na predição da concentração de Fe^{2+}, com os pontos praticamente se sobrepondo. Dessa forma, para a execução das simulações de transporte de momento e espécies químicas no domínio 3D após a importação do campo de radiações diretamente do domínio 2D, foram utilizadas malhas de 124.735 elementos.

Tabela 4.3 – Resultados das simulações de actinometria com ferrioxalato de potássio realizadas no sistema concentrador linear para 4 tamanhos de malha – Radiação incidente genérica igual a 10 $W \cdot m^{-2}$.

Simulação	**Número de Elementos**	**Subdivisões ao longo do comprimento**	**Concentração de Fe^{2+} após 5 min ($kmol \cdot m^{-3}$)**
1	124.735	95	1,662e-05
2	249.470	190	1,656e-05
3	374.205	285	1,653e-05
4	498.940	380	1,652e-05

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 4.9 – Concentração de Fe^{2+} ao longo da linha central do plano transversal situado no comprimento intermediário do reator tubular.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

4.2 Validação experimental dos modelos computacionais

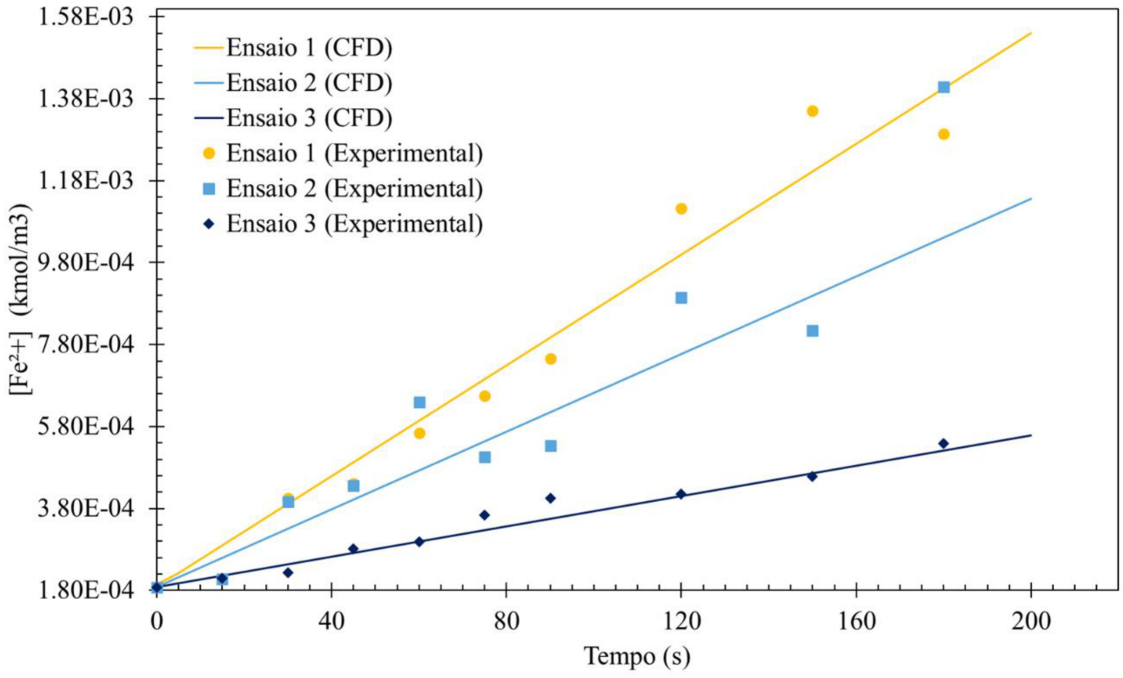
4.2.1 Sistema concentrador pontual

Na Figura 4.10 apresenta-se a comparação entre os resultados obtidos experimentalmente e os obtidos pelo modelo computacional. Os resultados das simulações correspondem aos valores de concentração molar de Fe^{2+} calculados através da média volumétrica no domínio computacional que representa o reator. Observa-se uma elevada precisão na reprodução dos resultados experimentais da concentração de Fe^{2+}, com uma cinética linear compatível com a natureza da actinometria. No Ensaio 3, os desvios entre os dados simulados e aqueles medidos experimentalmente permaneceram inferiores a 10%, indicando novamente uma boa capacidade preditiva do modelo. Mesmo nos Ensaios 1 e 2, em que há uma maior dispersão dos dados experimentais em relação aos dados simulados, o comportamento da cinética foi mantido.

Os desvios observados nos pontos dos Ensaios 1 e 2 podem estar relacionados a variabilidades operacionais durante a execução dos testes. Os experimentos foram realizados com três tamanhos de reatores diferentes e, devido ao pequeno volume dos reatores, não foi possível realizar amostragens durante o processo, sendo necessário preenchê-los completamente e vedá-los hermeticamente evitando a formação de bolhas. Essa configuração inviabilizou o uso de um único reator com coletas sucessivas, o que poderia ter minimizado essas variações observadas entre os testes.

Além disso, por se tratar de reatores independentes, ainda que cuidados tenham sido tomados para evitar exposição à luz natural, há possibilidade de interferência não controlada, especialmente no momento da transferência dos reatores para o local de análise química. Esse fator, associado à separação física entre os ensaios, pode ter contribuído para os desvios observados nos Ensaios 1 e 2, em comparação aos valores simulações. Ainda assim, os resultados experimentais obtidos indicam uma boa capacidade preditiva do modelo, permitindo sua utilização como ferramenta de suporte em análises mais complexas — como a investigação da influência de variáveis operacionais em respostas de interesse do processo (distribuição de radiação no interior do reator e formação de produtos).

Figura 4.10 – Resultados experimentais e numéricos dos ensaios de validação com actinometria para o sistema com lente de Fresnel pontual.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

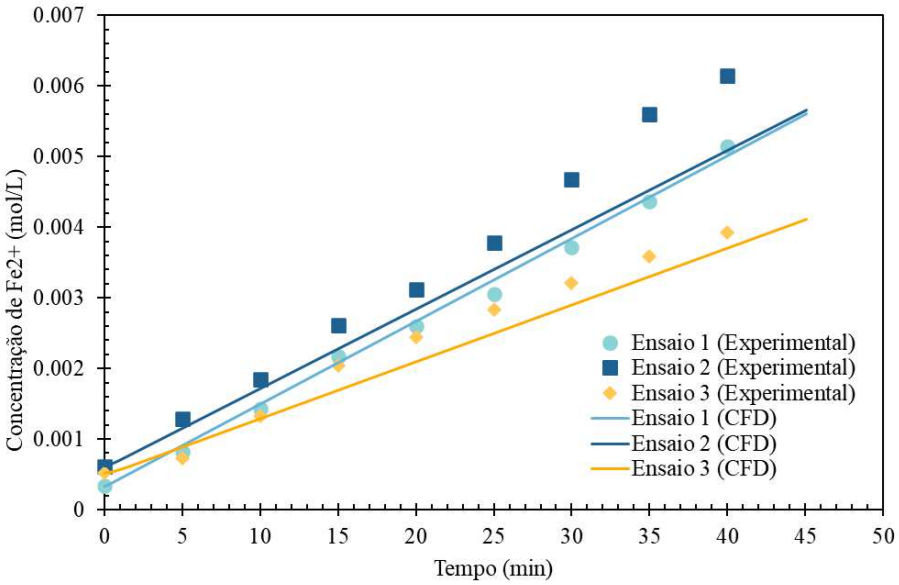
4.2.2 Sistema concentrador linear

Os resultados comparativos entre os testes de validação e as simulações conduzidas são apresentados nos gráficos da Figura 4.11. De forma geral observou-se uma boa capacidade preditiva do modelo implementado com relação a formação de íons Fe^{2+}, o que por sua vez está diretamente relacionado às simulações de irradiação utilizando as funções customizadas para

convergência dos raios de luz com o uso da lente de Fresnel linear. Uma limitação do modelo reside no fato de que sob condições atmosféricas os experimentos encontram-se sujeitos a variações como posição relativa da Terra e do Sol (variação de azimute e zênite), passagem de nuvens, fumaça, névoa, que fazem com que a radiação incidente na lente varie, causando subsequentes variações na taxa de reação no reator. Como o modelo considera uma média de radiação observada no período do experimento, desvios da média de radiação incidente passam a ser observados.

Como exemplos, os ensaios 2 e 3 foram iniciados às 11:00 h com uma radiação UVA incidente de 47,5 $W \cdot m^{-2}$ e 45,4 $W \cdot m^{-2}$, e ao longo do tempo esse valor foi recebendo incrementos devido a variação dos ângulos azímute e zênite até atingir um valor de 49,2 $W \cdot m^{-2}$ e 47,5 $W \cdot m^{-2}$, respectivamente, em seus dias de execução que compreenderam o período de 15/08/2024 a 03/09/2024. Portanto, para aplicações de investigação experimental com tempos curtos de exposição solar o modelo mostra uma capacidade de predição satisfatória da radiação incidente obtida no interior de fotorreatores tubulares através do uso de lentes de Fresnel lineares. Porém, para uma representação mais acurada de processos de longa exposição ao sol o modelo desenvolvido neste trabalho precisa ser aplicado para diferentes intervalos de tempo que permitam uma representação média da radiação incidente no período.

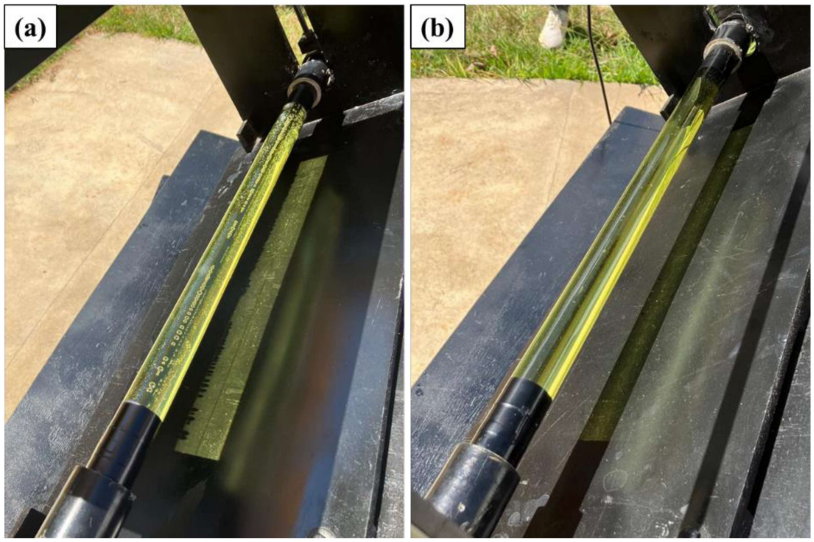
Figura 4.11 – Resultados experimental e numérico dos ensaios de validação com actinometria para o sistema com lente de Fresnel linear.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Outra dificuldade experimental constatada e apresentada na Figura 4.12 foi a presença de formação de bolhas no interior da tubulação, sobretudo em condições de baixa vazão (Ensaio 3). A formação de bolhas no sistema prejudica a conversão de produtos na reação ao formar uma zona morta no tubo, e pode estar associada a fatores como tipo de bombeamento utilizado (bomba peristáltica), nível de solução no tanque e formação de bolhas durante o carregamento que podem ficar adsorvidas na superfície do tanque. Com o objetivo de minimizar a formação de bolhas, o carregamento da solução no tanque foi realizado de forma lenta e controlada, evitando quedas bruscas que favorecessem a incorporação de ar. Após o preenchimento do tanque, foram aplicadas agitações manuais e leves impactos nas paredes externas, a fim de promover o desprendimento de bolhas eventualmente aderidas às superfícies internas.

Figura 4.12 – Formação e circulação de bolhas de ar dentro da solução actinométrica: a) identificação visual; b) remoção das bolhas mediante agitação e condicionamento do tanque antes do início das corridas experimentais.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Apesar das limitações previamente descritas, o modelo computacional desenvolvido apresentou bom desempenho, com predições dentro de uma margem de ±10%. Ressalta-se, no entanto, que para simulações envolvendo períodos prolongados de irradiação, torna-se necessário adaptar o modelo de modo a incorporar as variações da radiação solar incidente ao longo do dia em uma única simulação, ou, alternativamente, executar o modelo em múltiplos intervalos de tempo nos quais tais variações sejam suficientemente pequenas.

Contornos de radiação incidente, velocidade do escoamento, taxa de reação química e concentração de íons Fe^{2+} para cada um destes ensaios de validação do modelo são apresentados

na Figura 4.13, Figura 4.14, Figura 4.15. Dadas as diferentes configurações do reator tubular ao longo do feixe de luz concentrada pela lente de Fresnel, observa-se que em todos os casos simulados os maiores valores de radiação incidente no reator ficam próximos ao topo, por onde a luz proveniente da lente de Fresnel entra no volume do reator. Essa intensidade é maior na simulação com o reator posicionado no foco da lente (Ensaio 1), porém observa-se nas demais configurações da validação que uma distribuição menos heterogênea da radiação no interior do reator pode ser obtida posicionando-se o reator em pontos acima do ponto focal, em detrimento de redução da radiação média incidente no tubo. Os contornos de velocidade de escoamento por sua vez confirmam as características das diferentes vazões estudadas. No Ensaio 1, o escoamento turbulento com vazão de 2,4 $L \cdot min^{-1}$ apresenta uma menor região de desenvolvimento próxima à parede devido aos altos gradientes de momento impostos pelo escoamento, ao passo que em vazões mais baixas esta região acentua-se (Ensaios 2 e 3).

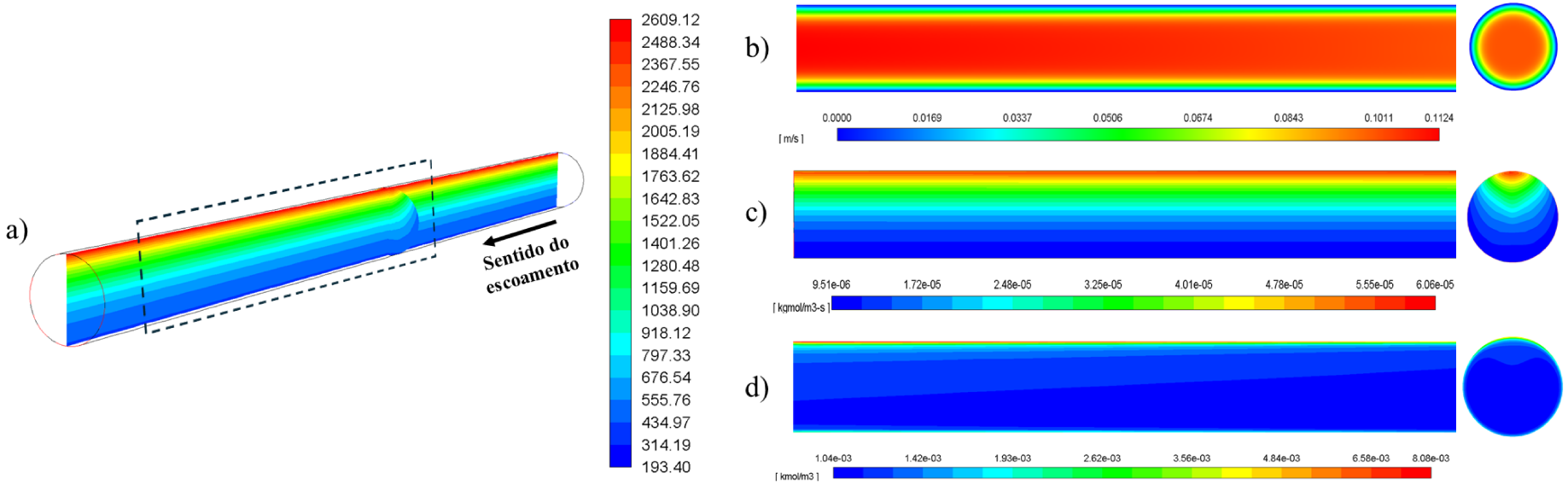
A velocidade do escoamento é diretamente relacionada ao tempo de residência no reator tubular, e este por sua vez pode intensificar ou reduzir a formação de produto no reator. Nota-se que nas regiões de estagnação do fluido próximas às paredes há uma maior formação de íons Fe^{2+} do que no centro do escoamento, principalmente no Ensaio 3, em que a mais baixa vazão foi utilizada (Figura 4.15b). Como pode ser observado na Figura 4.15d, há geração de Fe^{2+} próximo às paredes do tubo mesmo em regiões onde a radiação incidente é menor, por exemplo na parte inferior do tubo. Porém, é importante notar que, apesar de menor, a radiação incidente nessa região apresenta valores na faixa de 197 $W \cdot m^{-2}$ (Figura 4.15a), ou seja, aproximadamente 4 vezes a radiação incidente na lente de Fresnel. Esse fato, associado à baixa vazão de recirculação contribui para a taxa de reação apresentada na Figura 4.15c.

Por fim, os contornos de taxa de reação química estão diretamente relacionados ao campo de radiação obtido nas simulações, conforme esperado pela equação da cinética implementada na UDF que foi desenvolvida para este trabalho. Devido à alta concentração de reagente (íons Fe^{3+}), esta taxa sofre poucas alterações ao longo da simulação e experimentos, sendo basicamente influenciada pela radiação incidente no interior do reator.

Diante dos resultados obtidos pelas simulações e experimentos de actinometria no concentrador linear, foi observada a necessidade de se investigar os efeitos de cada uma das variáveis operacionais deste sistema. Através das simulações de validação pôde-se observar incialmente a influência da vazão de recirculação no perfil de escoamento da solução de ferrioxalato e consequentemente no transporte de espécies químicas, ao mesmo tempo que diferentes posicionamentos do reator em relação à lente podem aumentar ou reduzir o índice de uniformidade da radiação incidente no reator, influenciando assim a reação de redução dos íons

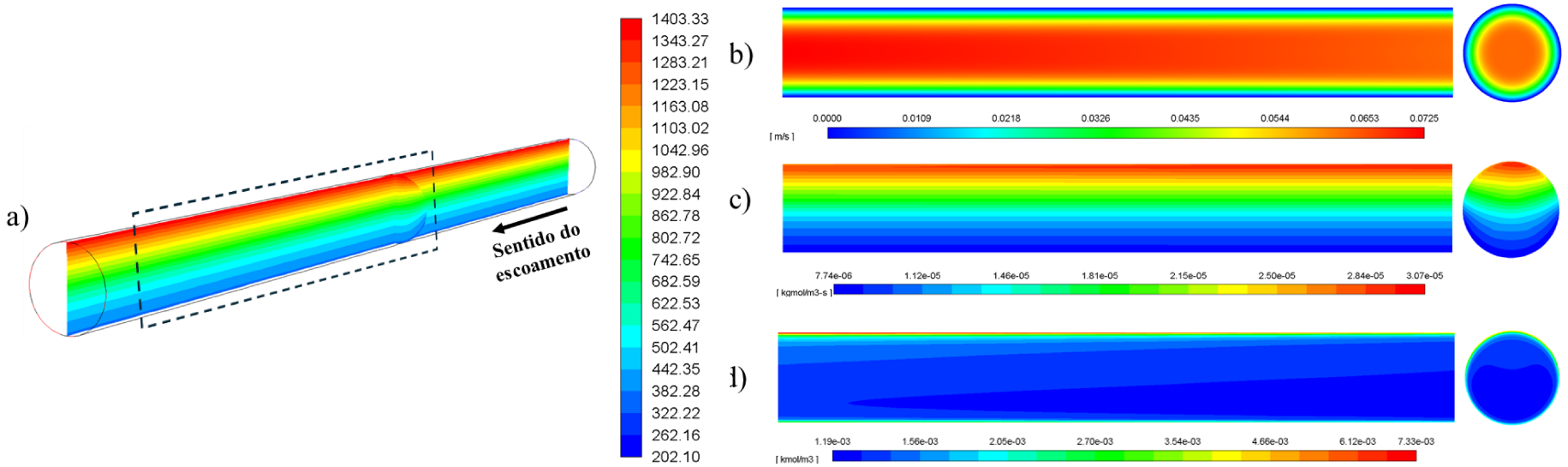
Fe^{2+}. Essas e outras análises foram conduzidas no planejamento composto central apresentado na próxima seção. Ressalta-se que o intuito da realização das análises de caracterização de ambos os sistemas concentradores com a reação de actinometria com ferrioxalato de potássio é fornecer uma noção da performance destes sistemas com lente de Fresnel em processos fotoxidativos que demandam o uso de radiação solar, através do uso de uma reação simples de 1ª ordem.

Figura 4.13 – Contornos obtidos para simulação do Ensaio 1: a) radiação incidente ($W \cdot m^{-2}$), b) velocidade ($m \cdot s^{-1}$), c) taxa de reação ($kgmol \cdot m^{-3}s^{-1}$), e d) concentração de íons Fe^{2+} ($kmol \cdot m^{-3}$)



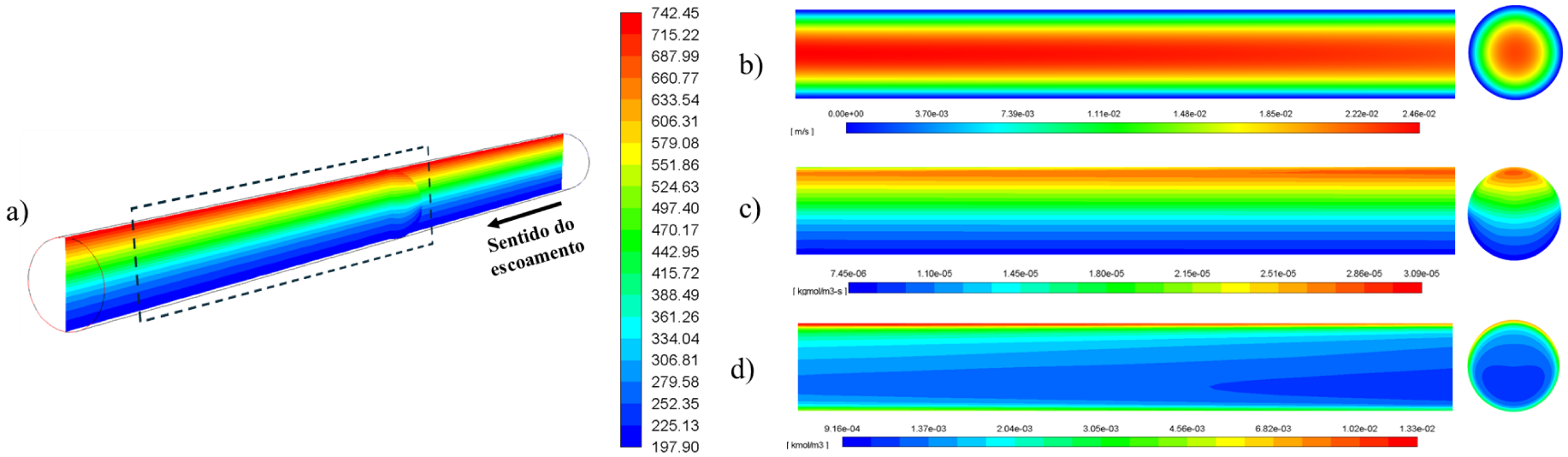
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 4.14 – Contornos obtidos para simulação do Ensaio 2: a) radiação incidente ($W \cdot m^{-2}$), b) velocidade ($m \cdot s^{-1}$), c) taxa de reação ($kgmol \cdot m^{-3}s^{-1}$), e d) concentração de íons Fe^{2+} ($kmol \cdot m^{-3}$)



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 4.15 – Contornos obtidos para simulação do Ensaio 3: a) radiação incidente ($W \cdot m^{-2}$), b) velocidade ($m \cdot s^{-1}$), c) taxa de reação ($kgmol \cdot m^{-3}s^{-1}$), e d) concentração de íons Fe^{2+} ($kmol \cdot m^{-3}$)



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

4.3 Efeitos das variáveis operacionais

Nesta seção são apresentados e discutidos os resultados dos estudos de efeitos das variáveis operacionais envolvidas em ambos os tipos de sistemas concentradores, com o objetivo de elucidar o comportamento das principais respostas associadas ao desempenho dos fotorreatores em função das variáveis geométricas e de processo.

4.3.1 Sistema concentrador pontual

As simulações CFD constituintes do planejamento fatorial 3^2 foram executadas seguindo-se a metodologia apresentada na seção 3.4.1 e os resultados obtidos são apresentados na Tabela 4.4. As respostas avaliadas e que estão relacionadas ao desempenho do sistema visando a desinfecção solar são o Fator de Concentração (*FC*), Índice de Uniformidade da Radiação Incidente (UI_{RAD}) e Concentração de Fe^{2+} (C_{Fe2+}). As variáveis analisadas neste sistema foram o volume do reator (V_R) e a posição do reator em relação à lente (D_L).

Tabela 4.4 – Resultados do planejamento fatorial 3^2 para a análise do fator de concentração (*FC*), índice de uniformidade da radiação (UI_{RAD}) e concentração de Fe^{2+} (C_{Fe2+}) para o sistema concentrador com lente de Fresnel pontual.

Simulação	V_R (mL)	D_L (cm)	*FC* (-)	UI_{RAD} (-)	C_{Fe2+} (kmol·m^{-3})
1	15	3,00	2,20	0,8454	5,58E-04
2	15	8,25	7,37	0,8366	1,32E-03
3	15	13,50	13,81	0,7290	2,30E-03
4	39	3,00	2,08	0,8501	5,63E-04
5	39	8,25	6,18	0,8287	1,14E-03
6	39	13,50	9,38	0,7102	1,64E-03
7	62	3,00	2,04	0,8579	5,37E-04
8	62	8,25	5,38	0,8162	1,01E-03
9	62	13,50	7,34	0,6949	1,54E-03

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

A partir dos resultados das simulações, foram realizadas regressões não-lineares com as respostas *FC*, UI_{RAD} e $C_{Fe^{2+}}$ em função de D_L e V_R. Empregou-se análise de variância (ANOVA) para avaliar a adequação dos ajustes e a significância dos fatores e, após eliminar variáveis e interações não significativas ($p < 0,05$), os modelos reduzidos são apresentados da Equação (4.1) à Equação (4.3). Os resíduos apresentaram distribuição normal e aleatória, indicando boa adequação dos modelos e as superfícies de resposta correspondentes encontram-se na Figura 4.16.

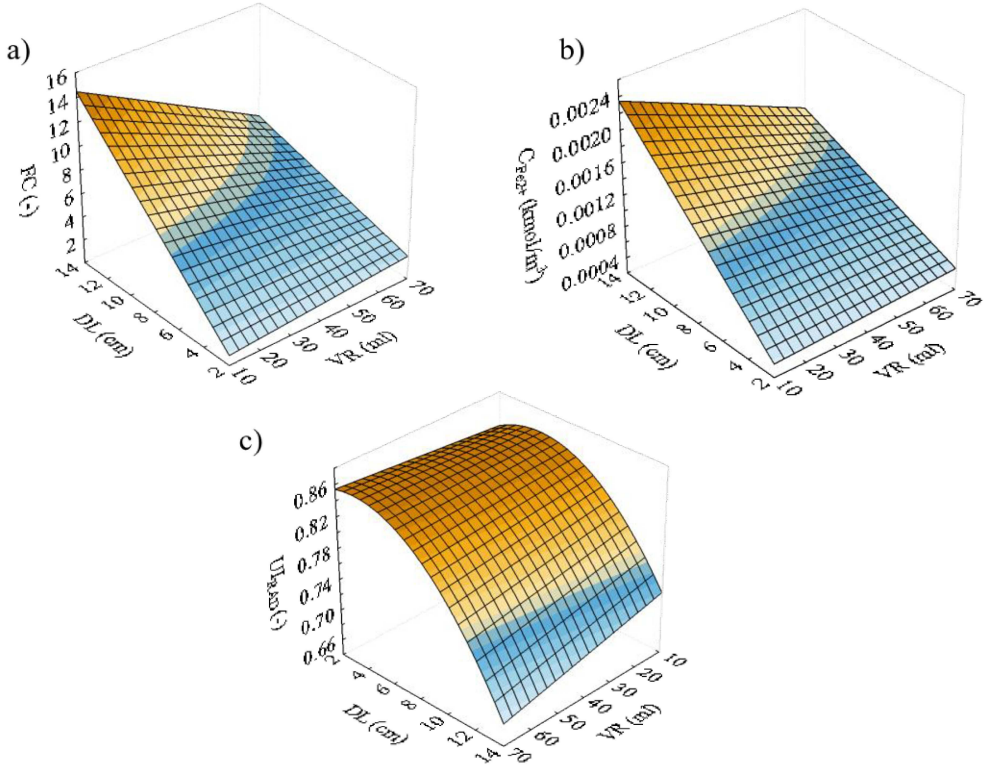
$$FC(-) = -1,43\,\overline{V_R} + 4,04\,\overline{D_L} - 1,58\,\overline{V_R}\,\overline{D_L} + 6,20 \qquad R^2 = 0,98756 \tag{4.1}$$

$$CF_e{}^{2+}\left(\frac{kmol}{m^3}\right) = -1,82 \cdot 10^{-4}\overline{V_R} + 6,37 \cdot 10^{-4}\,\overline{D_L} - 1,85 \cdot 10^{-4}\,\overline{V_R}\,\overline{D_L} + 1,179 \cdot 10^{-4} \qquad R^2 = 0,97977 \tag{4.2}$$

$$UI_{rad}(-) = -7 \cdot 10^{-3}\overline{V_R} + 0,0230\,\overline{D_L}^2 - 0,0698\,\overline{D_L} - 0,01165\overline{V_R}\,\overline{D_L} + 0,796556 \qquad R^2 = 0,9989 \tag{4.3}$$

Sendo $\overline{V_R}$ e $\overline{D_L}$ as variáveis codificadas ($\overline{V_R} = \frac{V_R - 39\ mL}{23\ mL}$ e $\overline{D_L} = \frac{D_L - 8,25\ cm}{5,25\ cm}$).

Figura 4.16 – Superfícies de resposta para o fator de concentração (*FC*), índice de uniformidade (UI_{RAD}) e concentração de produto (C_{Fe2+}) em função das variáveis independentes.

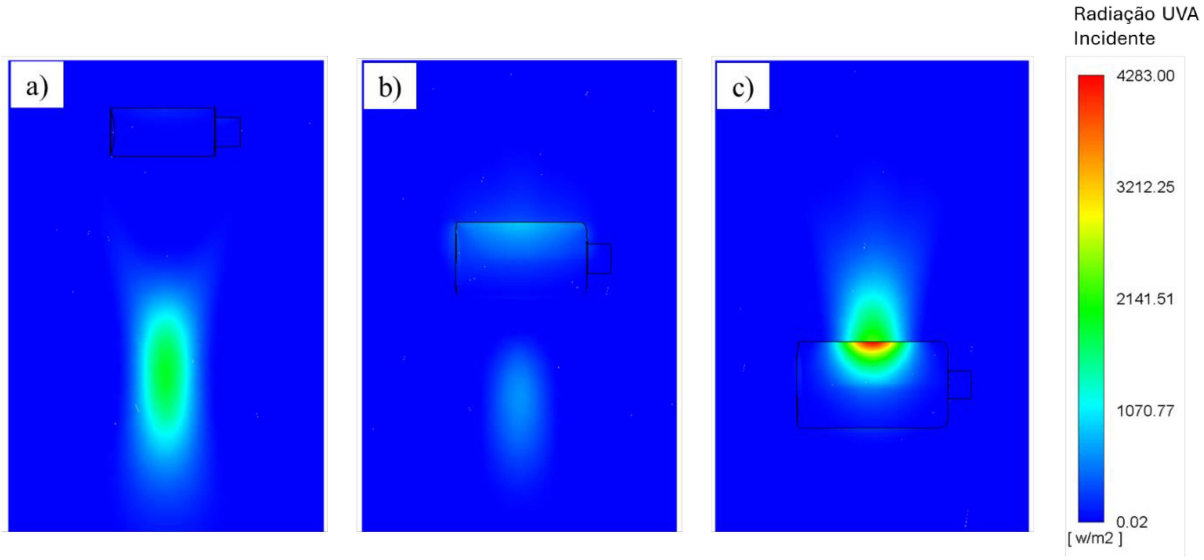


Fonte: elaborado pelo próprio autor.

De acordo com os resultados dos modelos, ambas as variáveis – a posição do reator (D_L) e o volume do reator (V_R) – influenciam a resposta FC por meio de efeitos lineares e quadráticos. O efeito mais pronunciado foi associado à variável D_L, que contribuiu positivamente para o aumento do fator de concentração da radiação no interior do reator, com magnitude aproximadamente quatro vezes superior à observada para V_R, cujo impacto foi negativo. A interação entre D_L e V_R também apresentou efeito negativo sobre a resposta, com intensidade semelhante à do volume isolado. Esses resultados indicam que, para a variável *FC*, o posicionamento do reator é o fator mais influente.

Os resultados da regressão podem ser exemplificados por meio dos contornos de radiação das simulações do planejamento experimental apresentadas na Figura 4.17. À medida que o reator se aproxima do ponto focal da lente, observa-se um aumento nos fatores de concentração, conforme esperado, em função da maior densidade energética resultante da redução da área de convergência dos raios de luz. Nesse ponto, o volume do reator passa a expressar uma influência mais significativa sobre a resposta *FC*, apresentando um efeito oposto ao promovido pela variável D_L. Volumes maiores atuam de forma antagonista ao efeito de focalização, ampliando os gradientes de radiação no interior do reator. Como ilustrado na Figura 4.17, essa condição contribui para a redução da radiação média e, por consequência, compromete o índice de uniformidade da radiação no reator.

Figura 4.17 – Contornos de radiação incidente ($W \cdot m^{-2}$) para os ensaios: a) 1; b) 5; c) 9 do planejamento fatorial para a lente de Fresnel pontual.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

No entanto, à medida que o reator é posicionado em direção ao ponto focal da lente, é observado um aumento acentuado da radiação incidente no interior do reator, comparado ao efeito gerado pela simples redução do seu volume. Conforme indicam os modelos de regressão, esses dois fatores afetam de maneira semelhante tanto a quantidade de produto formado ($C_{Fe^{2+}}$) quanto o índice de uniformidade da radiação (UI_{RAD}). No caso deste último, destaca-se um efeito quadrático associado à variável D_L, além de um efeito de interação mais expressivo entre D_L e V_R. À medida que o volume do reator aumenta, o caminho óptico interno se alonga, dificultando a penetração da luz. Consequentemente, intensificam-se os gradientes de radiação dentro do reator, o que prejudica a homogeneidade do campo de radiação e, por consequência, a uniformidade da reação ao longo do volume.

Resultados semelhantes foram observados em estudos sobre o efeito do tamanho de garrafas PET na eficiência da desinfecção por SODIS. Esses trabalhos demonstraram que o volume do reator (nesse caso a garrafa) interage com a intensidade de radiação incidente de forma que sob altas irradiâncias a taxa de reação se mostra praticamente independente do volume (entre 0,5 L e 1,5 L), no entanto, sob baixa radiação, foram observadas diferenças significativas em recipientes com diâmetros entre 5,5 cm e 10 cm (DESSIE et al., 2014; KEHOE et al., 2001).

No presente estudo, os resultados do planejamento experimental indicam um efeito linear significativo do volume do reator sobre a taxa de reação ($C_{Fe^{2+}}$) e sobre o índice de uniformidade da radiação (UI_{RAD}), embora esse efeito tenha sido inferior ao da variável D_L – sendo aproximadamente 3,5 vezes menor para $C_{Fe^{2+}}$ e 10 vezes menor para UI_{RAD}. Vale ressaltar que esses resultados foram obtidos para a faixa de deste trabalho (15 mL a 62 mL) e reforçam que, embora o volume do reator influencie as respostas, a distância focal ainda exerce um papel decisivo na intensidade e na distribuição da radiação no interior do sistema que resulta em maiores conversões da reação.

É importante destacar que altos valores do índice de uniformidade da radiação (UI_{RAD}) no interior do reator não implicam, necessariamente, em maior conversão da reação. No planejamento experimental realizado, os maiores valores de UI_{RAD} foram observados justamente sob condições de menor intensidade de radiação no reator. Para se alcançar simultaneamente uma condição de elevada radiação incidente (máximo FC) e alto índice de uniformidade, é necessário operar com pequenos volumes posicionados próximos ao ponto focal da lente.

No entanto, do ponto de vista da produtividade, especialmente em aplicações voltadas à desinfecção de água em sistemas batelada, essa estratégia pode não ser a mais adequada. Isso

se deve à necessidade de múltiplos ciclos para obtenção de volumes expressivos de água tratada, além de dificuldades associadas à manipulação e ao risco de recontaminação, à falta de padronização do processo e à elevada demanda por recipientes. Ainda que o presente estudo tenha sido conduzido com baixos volumes, espera-se que, ao se escalonar proporcionalmente as dimensões do sistema concentrador, as relações observadas sejam preservadas, dado o caráter fundamentalmente geométrico e óptico dos fenômenos envolvidos.

Um aspecto importante dos resultados do planejamento experimental foi a capacidade da lente de Fresnel pontual de fornecer fatores de concentração expressivos mesmo quando o reator se encontra em posições intermediárias em relação ao seu ponto focal. Nesses casos, os fatores de concentração registrados atingiram valores da ordem de cinco vezes a radiação efetiva transmitida pela lente, com índices de uniformidade igualmente elevados (cerca de 82%). Esse desempenho observado é promissor para aplicações em sistemas SODIS que operam com materiais mais simples.

Além das limitações mencionadas associadas ao uso de volumes reduzidos, é importante considerar que, na prática, os recipientes utilizados para armazenamento da água durante o processo de irradiação, geralmente fabricados em polímeros como o polietileno, podem sofrer degradação térmica quando posicionados diretamente no ponto focal da lente, em decorrência do aquecimento localizado nas paredes. Nesse cenário, uma posição intermediária se apresenta como alternativa, pois oferece um aumento substancial da radiação incidente e boa uniformidade na distribuição da luz ao longo do volume do reator (aproximadamente 83%), sem comprometer a integridade do recipiente (ÁLVAREZ-FERNÁNDEZ et al., 2024).

4.3.2 Sistema concentrador linear

O estudo de caracterização da unidade composta pelo sistema com a lente de Fresnel linear foi realizado seguindo um planejamento composto central constituído de 3 variáveis e com apenas uma réplica no ponto central, totalizando 16 simulações. Quanto às variáveis independentes, avaliou-se a posição do reator em relação à lente (D_L), vazão de recirculação (Q) e radiação solar incidente na unidade (I_S). Em relação às respostas monitoradas, foram determinadas a radiação incidente média no interior do reator (I_R) e concentração de produto formado (C_{Fe2+}). Também foram monitoradas de forma complementar outras duas respostas, o índice de uniformidade do campo de radiação no interior do reator (UI_{RAD}) e o índice de uniformidade da concentração de produto no interior do reator (UI_{Fe2+}). De posse dos resultados obtidos, foi realizada uma análise de efeitos e regressão não-linear para a obtenção de uma

equação para a resposta C_{Fe2+} como função das variáveis independentes significativas. Os resultados obtidos são apresentados na Tabela 4.5.

Tabela 4.5 – Resultados do PCC para o sistema concentrador linear.

Ensaio	D_L (cm)	Q (L·min^{-1})	I_s (total) (W·m^{-2})	I_R (W·m^{-2})	FC (-)	UI_{RAD} (-)	C_{Fe2+} (kmol·m^{-3})[1]	UI_{Fe2+} (-)
1	7,00	0,85	111,90	161,25	1,96	0,8275	1,24E-03	0,8212
2	7,00	0,85	290,61	418,83	1,96	0,8275	3,20E-03	0,8215
3	7,00	3,95	111,90	161,25	1,96	0,8275	1,06E-03	0,9550
4	7,00	3,95	290,61	418,83	1,96	0,8275	2,74E-03	0,9550
5	20,00	0,85	111,90	364,56	4,43	0,7787	2,78E-03	0,7615
6	20,00	0,85	290,61	946,90	4,43	0,7787	7,16E-03	0,7639
7	20,00	3,95	111,90	364,57	4,43	0,7787	2,39E-03	0,9362
8	20,00	3,95	290,61	946,90	4,43	0,7787	6,16E-03	0,9364
9	5,13	2,40	201,25	253,86	1,72	0,8269	1,77E-03	0,9326
10	21,87	2,40	201,25	643,52	4,35	0,7743	4,44E-03	0,8927
11	13,50	0,40	201,25	531,81	3,60	0,8298	4,11E-03	0,7180
12	13,50	4,40	201,25	531,81	3,60	0,8298	2,92E-03	0,9619
13	13,50	2,40	86,23	227,97	3,60	0,8298	1,58E-03	0,9290
14	13,50	2,40	316,27	835,65	3,60	0,8298	5,81E-03	0,9292
15	13,50	2,40	201,25	531,81	3,60	0,8298	3,70E-03	0,9291
16	13,50	2,40	201,25	531,81	3,60	0,8298	3,70E-03	0,9291

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Através dos resultados da Tabela 4.5 é possível observar que a lente de Fresnel linear utilizada proporcionou fatores de concentração (*FC*) de até 4,43 vezes a radiação solar incidente que é transmitida pela lente. Como nesse planejamento o volume do reator tubular não foi variável, o fator de concentração de radiação da unidade depende exclusivamente da posição do reator em relação à distância focal. A lente de Fresnel linear possui de forma geral uma capacidade de concentração de raios de luz menor que a pontual devido à sua configuração construtiva que distribui em vários planos os raios de luz colimados que chegam em sua superfície através de ranhuras retas na superfície da lente. A lente pontual, por sua vez, conta com uma estrutura de ranhuras circulares que fazem com que a radiação seja refratada em direção a um único ponto aumentando a densidade energética.

[1] Concentração avaliada em 45 min de operação, tempo escolhido de forma arbitrária.

De forma similar ao fator de concentração, o índice de uniformidade do campo de radiação no interior do reator (UI_{RAD}) também varia apenas com a posição do reator com base nas condições geométricas escolhidas. Os campos de radiação mais uniformes podem ser observados nos casos em que uma menor radiação solar incidente (I_S) ocorre ou para posições mínimas e intermediárias do reator (D_L) que geram também menores intensidades de radiação dentro do reator. Como observado no estudo com a lente pontual, a redução do volume pode ser uma alternativa viável para se aumentar a homogeneidade do campo de radiações dentro do reator mantendo-se altos fatores de concentração na região focal da lente. No caso do uso da lente de Fresnel linear isso é o equivalente a utilizar tubos com menores diâmetros, porém, o uso de tubos mais finos requer cuidado no dimensionamento pois podem levar a uma maior perda de carga, demandar mais tempo para atingir a conversão global desejada e gerar maiores custos de construção.

Na Tabela 4.6 são destacados os resultados para os pontos axiais e central do planejamento executado. Com eles, é possível avaliar a variação da concentração de produto com base na modificação do nível de uma variável e mantendo as demais em valores constantes.

Tabela 4.6 – Valores de concentração de produto obtidos nos pontos axiais e centrais do PCC.

Ensaio	D_L (cm)	Q (L·min^{-1})	I_s (W·m^{-2})	I_R (W·m^{-2})	C_{Fe2+} (kmol·m^{-3})[1]	UI_{Fe2+} (-)
9	5,13	2,40	201,25	253,86	1,77E-03	0,9326
10	21,87	2,40	201,25	643,52	4,44E-03	0,8927
11	13,50	0,40	201,25	531,81	4,11E-03	0,7180
12	13,50	4,40	201,25	531,81	2,92E-03	0,9619
13	13,50	2,40	86,23	227,97	1,58E-03	0,9290
14	13,50	2,40	316,27	835,65	5,81E-03	0,9292
15	13,50	2,40	201,25	531,81	3,70E-03	0,9291

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Tomando-se os valores de D_L da extremidade do planejamento (casos 9 e 10) verifica-se que as variáveis independentes foram mantidas em um mesmo nível intermediário, com exceção ao posicionamento do reator que passou de 5,13cm para 21,87cm. Essa variação culminou em um aumento de 151% na concentração de Fe^{2+} formado. Já um aumento de 4 L·min^{-1} na vazão de recirculação provocou uma redução de 29% nessa resposta (casos 11 e 12) enquanto o aumento da irradiância solar incrementou sucessivamente a concentração de

[1] Concentração avaliada em 45 min de operação, tempo escolhido de forma arbitrária.

produto em 134% (casos 13 e 15) e 57% (casos 14 e 15). Esses resultados sugerem que o posicionamento do reator e a irradiância solar possuem um grande efeito na geração de produto dentro do reator.

No entanto, a análise da dependência da concentração de produto em função das condições operacionais deve ser estendida para todos os ensaios do planejamento para verificação dos efeitos de interação entre as variáveis. Dessa forma, uma equação para predição da concentração de Fe^{2+} em função das variáveis independentes foi ajustada aos dados das simulações utilizando técnicas de regressão e, a partir dessa equação, os efeitos dessas variáveis puderam ser quantificados. Como resultado, na Equação (4.4) encontra-se o modelo reduzido de regressão (R^2 = 0,98853) que considera apenas variáveis significativas com nível de significância α de 0,05.

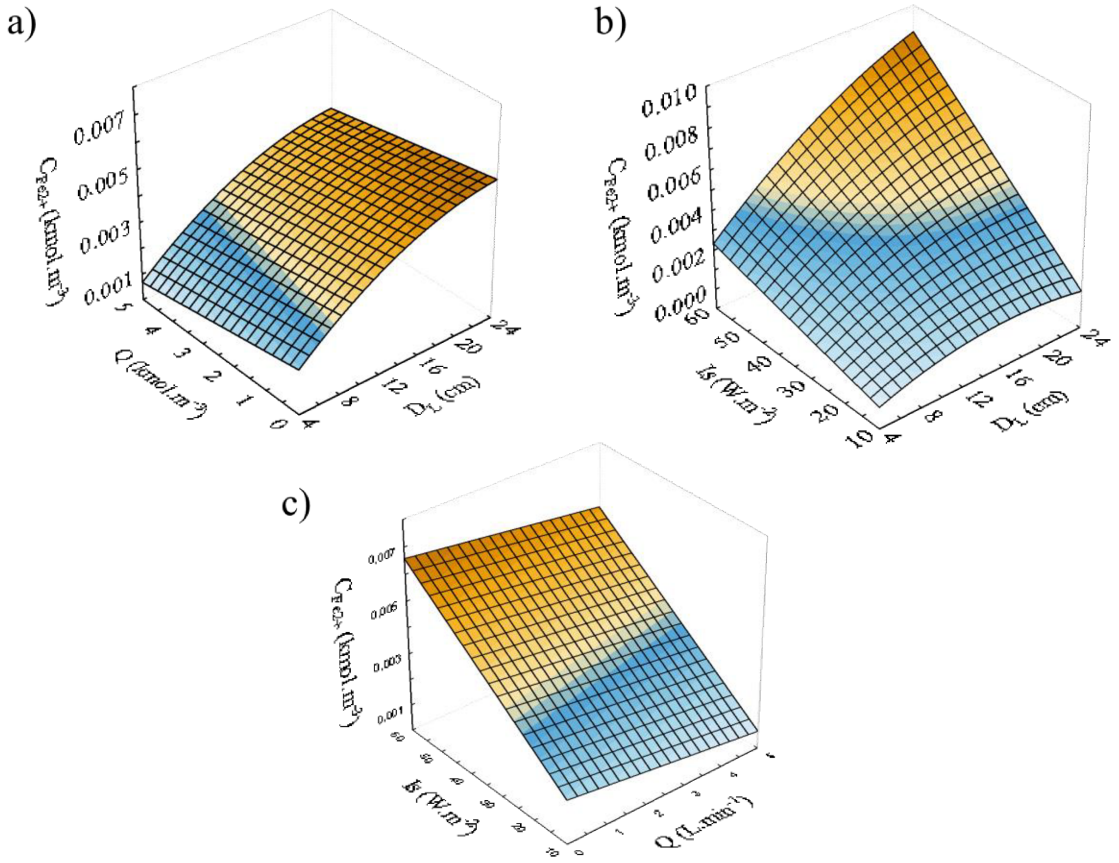
$$[F_e^{2+}] = -3{,}12 \cdot 10^{-4}\overline{D_L}^{\,2} + 1{,}21 \cdot 10^{-3}\overline{D_L} - 3{,}16 \cdot 10^{-4}\bar{Q} + 1{,}523 \cdot 10^{-3}\overline{I_S} + 5{,}65 \cdot 10^{-4}\overline{D_L}\,\overline{I_S} + 3{,}644 \cdot 10^{-3} \quad (4.4)$$

$$R^2 = 0{,}98853$$

Sendo $\overline{D_L}$, $\bar{Q}$ e $\overline{I_S}$ as variáveis codificadas $\left(\overline{D_L} = \frac{D_L - 13{,}50}{6{,}50};\ \bar{Q} = \frac{Q - 2{,}40}{1{,}55};\ \overline{I_S} = \frac{I_S - 201{,}25}{89{,}35}\right)$.

Baseando-se na equação apresentada, observa-se que todas as variáveis exerceram efeitos lineares significativos, e a variável posição do reator (D_L) apresentou um efeito quadrático também significativo, além de um efeito combinado de D_L e I_S que, conforme observado na análise dos casos 9 a 15, apresentam as maiores contribuições para o crescimento da radiação no interior do reator e consequentemente na formação de produtos da fotorreação. Apesar dos efeitos quadráticos, são os efeitos lineares de D_L e I_S que ditam o comportamento da resposta C_{Fe2+}. De forma a visualizar graficamente os efeitos descritos, as superfícies de resposta para avaliação da formação de produto da actinometria dentro do fotorreator são apresentadas na Figura 4.18.

Figura 4.18 – Superfícies de resposta para concentração de Fe^{2+} em função das variáveis independentes para níveis intermediários das terceiras variáveis: a) vazão de recirculação e posição do reator b) radiação solar incidente e posição do reator c) radiação solar incidente e vazão de recirculação.



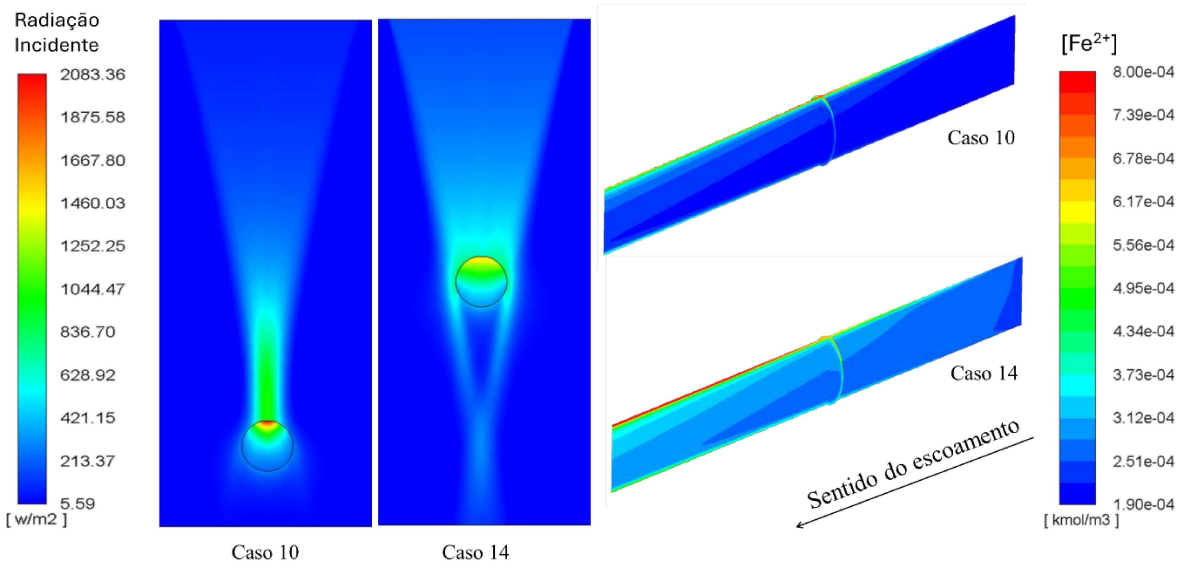
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Conforme o esperado, os maiores efeitos na concentração de produto estão relacionados com as variáveis que promovem diretamente o aumento da radiação no interior do reator, ou seja, D_L e I_S. Uma vez que a reação de actinometria utilizada na caracterização do reator utiliza os fótons como força motriz, o aumento das duas variáveis de fato iria aumentar a resposta obtida. Porém uma observação interessante na utilização da lente de Fresnel para promover a concentração da luz no tubo é que mesmo em níveis médios para a posição do reator (D_L), a depender dos níveis de radiação solar incidente no dia, esta configuração já pode oferecer uma performance satisfatória na fotorreação que for executada na unidade.

Por exemplo, ao se analisar os contornos de radiação incidente e concentração de produto para os casos 10 e 14 do planejamento (Figura 4.19), é possível observar que o posicionamento do tubo na altura intermediária do caminho óptico da lente sob uma condição

alta de radiação já fornece um campo de radiação mais uniforme e com um fator de concentração de 3,6 dentro do tubo levando a uma conversão superior ao caso 10, em que o tubo se encontra no foco da lente e o nível de radiação solar é médio. Esse fato é particularmente interessante dada a dificuldade de operação manual de um sistema operado com lentes de Fresnel, uma posição intermediária reduz a possibilidade do reator não se encontrar dentro do caminho dos raios de luz ao longo da movimentação do sol, ao passo que manter o reator na posição focal por longos períodos requer um acompanhamento com constante precisão na movimentação da unidade, ou com um sistema de rastreamento solar bastante acurado.

Figura 4.19 – Contornos de radiação incidente e concentração de Fe^{2+} para: Caso 10 (D_L=21,87cm, Q=2,4 L·min^{-1} e I_S=201,25 W·m^{-2}) e Caso 14 (D_L=13,5cm, Q=2,4 L·min^{-1} e I_S=201,25 W·m^{-2}).



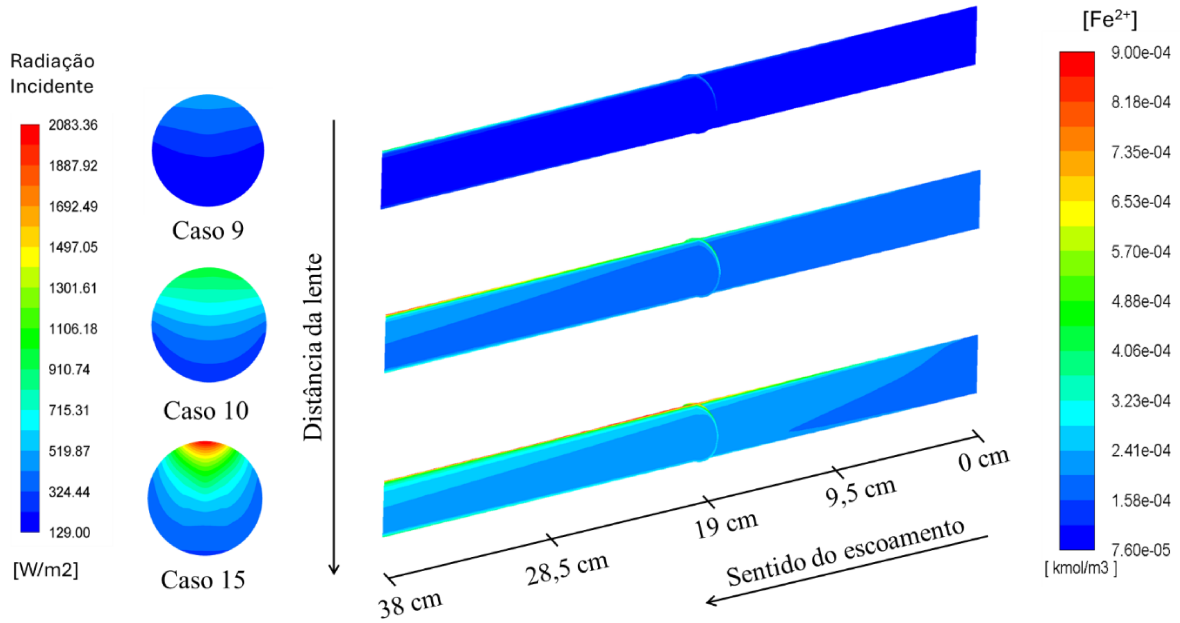
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Mesmo com o tubo posicionado nos valores mínimos de D_L, ainda é possível obter um fator de concentração de aproximadamente 2 vezes a radiação transmitida pela lente. Por exemplo, considerando a irradiância solar média utilizada no planejamento (201,25 W·m^{-2}), que inclui os fótons na faixa de comprimento de onda relevante para a actinometria, e levando em conta que 74% dessa radiação é efetivamente transmitida ao sistema (após perdas por absorção no PMMA e no borossilicato), restam cerca de 148 W·m^{-2}. Com um fator de concentração FC_{RAD} = 2, essa radiação é concentrada no reator, resultando em uma intensidade média de 296 W·m^{-2} dentro do tubo. Isso representa um aumento de 47% na disponibilidade de fótons para a

reação em relação à radiação solar incidente na lente e considerando-se uma média volumétrica da radiação no tubo.

Na Figura 4.20 são apresentados os contornos de radiação incidente e concentração de Fe^{2+} para três casos do planejamento que possuem os mesmos níveis intermediários de vazão de recirculação (Q) e irradiância solar (I_S). Como pode-se observar, a intensidade de radiação no reator atinge níveis extremamente elevados à medida que o tubo é deslocado em direção ao foco. Os valores mais intensos se concentram próximos à parte superior da parede do reator onde parte dos raios sofre reflexão na parede do reator e outra parcela é transmitida para o interior do reator devido ao efeito de espalhamento ao longo do caminho óptico do reator (diâmetro do tubo). Ao se observar os contornos de radiação incidente na seção transversal do reator é possível notar valores máximos de aproximadamente 485 $W \cdot m^{-2}$, 975 $W \cdot m^{-2}$ e 2083 $W \cdot m^{-2}$ para os casos 9, 10 e 15, respectivamente. Nessas regiões a taxa de reação é máxima e a parcela de radiação que as espécies químicas recebem se torna maior, com a concentração do produto Fe^{2+} atingindo maiores níveis desde os primeiros 9,5cm de comprimento do tubo.

Figura 4.20 – Contornos de radiação incidente e concentração de Fe^{2+} para: Caso 9 (D_L=5,13cm; Q=2,40 $L \cdot min^{-1}$; I_S=201,25 $W \cdot m^{-2}$), Caso 10 (D_L=21,87cm; Q=2,40 $L \cdot min^{-1}$; I_S=201,25 $W \cdot m^{-2}$) e Caso 15 (D_L=13,50cm; Q=2,40 $L \cdot min^{-1}$; I_S=201,25 $W \cdot m^{-2}$)



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Como pode ser observado, as maiores radiações ocorrem na parte superior da parede do tubo. Devido à presença de recirculação, faz-se necessário analisar o padrão do escoamento sob

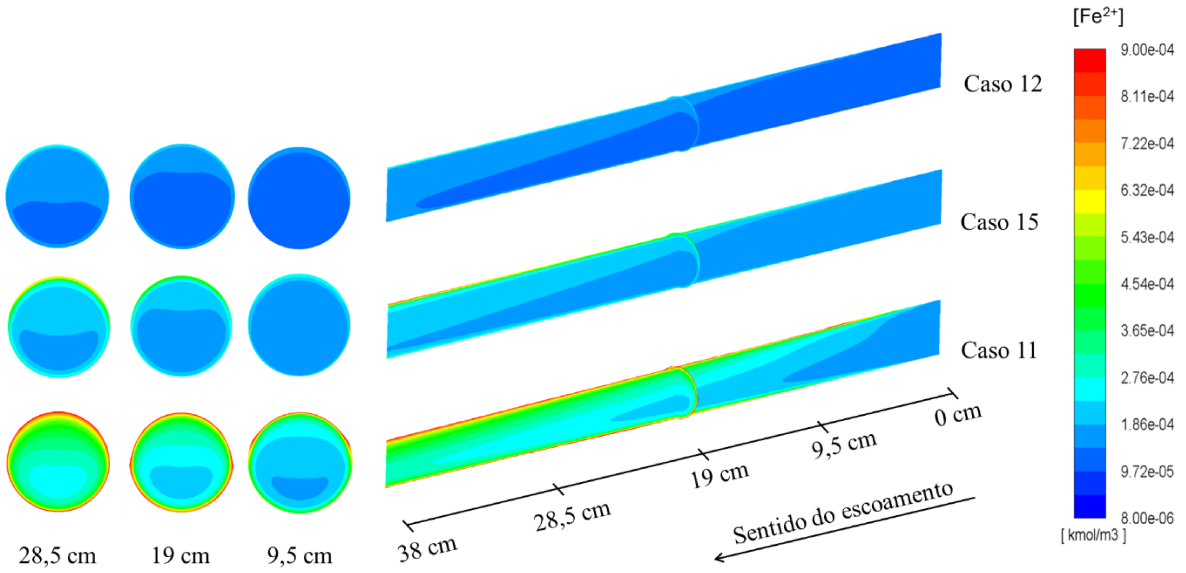
os diferentes níveis de vazão, principalmente nas regiões próximas às paredes do tubo. No planejamento utilizado, as seguintes taxas de vazão foram estudadas de acordo com os limites operacionais da bomba utilizada: 0,4 $L \cdot min^{-1}$, 0,85 $L \cdot min^{-1}$, 2,40 $L \cdot min^{-1}$, 3,95 $L \cdot min^{-1}$ e 4,40 $L \cdot min^{-1}$. Desses valores, os dois primeiros podem ter o escoamento classificado como laminar, com baixo Reynolds, ao passo que os três últimos apresentam escoamentos turbulentos dentro do reator.

O efeito linear da variável vazão (Q) calculado para a equação de regressão da concentração de Fe^{2+} [(Equação (4.4)] é uma ordem de grandeza menor que os respectivos efeitos da variável posição do reator (D_L) e irradiância solar (I_S). Sua pequena contribuição frente ao efeito de intensificação do campo de radiação no interior do reator pode ser identificada visualmente nas superfícies de resposta então apresentadas na Figura 4.18, levando à conclusão de que, para os níveis considerados no planejamento proposto, a variável vazão possui pouca influência na formação de produtos.

Como é possível observar nos contornos de simulação na Figura 4.21, sob baixas vazões de recirculação (caso 11) a formação de produto já atinge altos níveis a partir dos primeiros 9,5 centímetros do reator tubular e a reação se desenvolve principalmente na camada limite que adquire diversas espessuras de acordo com o tipo do escoamento. Em baixas vazões, as espécies químicas presentes na solução se deslocam mais lentamente ao longo do comprimento do tubo, com altos tempos de residência e, portanto, adquirem uma dose mais elevada de radiação o que eleva a conversão.

Destaca-se ainda que apesar da radiação incidir com maior intensidade na parte superior do tubo vindo da lente, todo o reator possui um gradiente de radiação que alimenta a reação de conversão dos íons Fe^{3+}. Esse fato associado ao efeito das forças viscosas no escoamento próximo à parede do reator faz com que também haja um gradiente de concentração na parte inferior do tubo, ainda que de menor intensidade que na parte superior.

Figura 4.21 – Contornos de radiação incidente e concentração de Fe^{2+} para: Caso 11 (D_L=13.50cm; Q=0,4 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}), Caso 12 (D_L=13,50cm; Q= 4,40 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}) e Caso 15 (D_L=13,50cm; Q=2,40 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2})



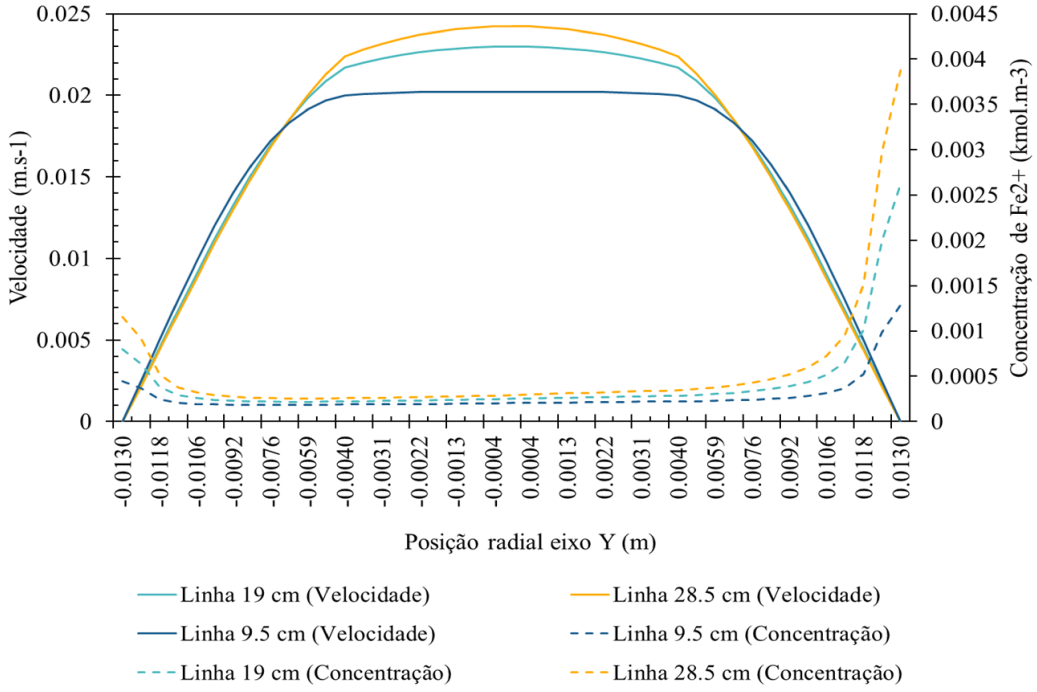
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Para demonstrar a relação entre o comportamento dos escoamentos laminar e turbulento e a formação de produtos, na Figura 4.22 e na Figura 4.23 são apresentadas as velocidades e as concentrações de Fe^{2+} ao longo do comprimento radial do reator em linhas transversais posicionadas nos comprimentos 9,5cm, 19cm, e 28,5cm. Observando-se os perfis de velocidade é possível notar o comportamento típico do escoamento no interior tubo, com o crescimento da camada limite e a formação de um perfil de velocidade desenvolvido na posição 28,5 cm, sendo que para o escoamento laminar (Caso 11) essas características são mais proeminentes que para o escoamento turbulento (Caso 12), caracterizado por velocidades semelhantes na região central do eixo radial e uma queda abrupta de velocidade próximo à parede devido aos fortes efeitos das forças viscosas.

Os resultados indicam, portanto, que uma possível configuração ideal reside na operação com tubos de menor diâmetro, posicionados na linha focal da lente e com baixas vazões de operação, porém alguns desafios como elevada perda de carga, resistência do tubo à pressão de operação e aumento de temperatura precisam ser levados em consideração dependendo do tipo de processo que se deseja conduzir com essa unidade (desinfecção, fotocatálise etc.).

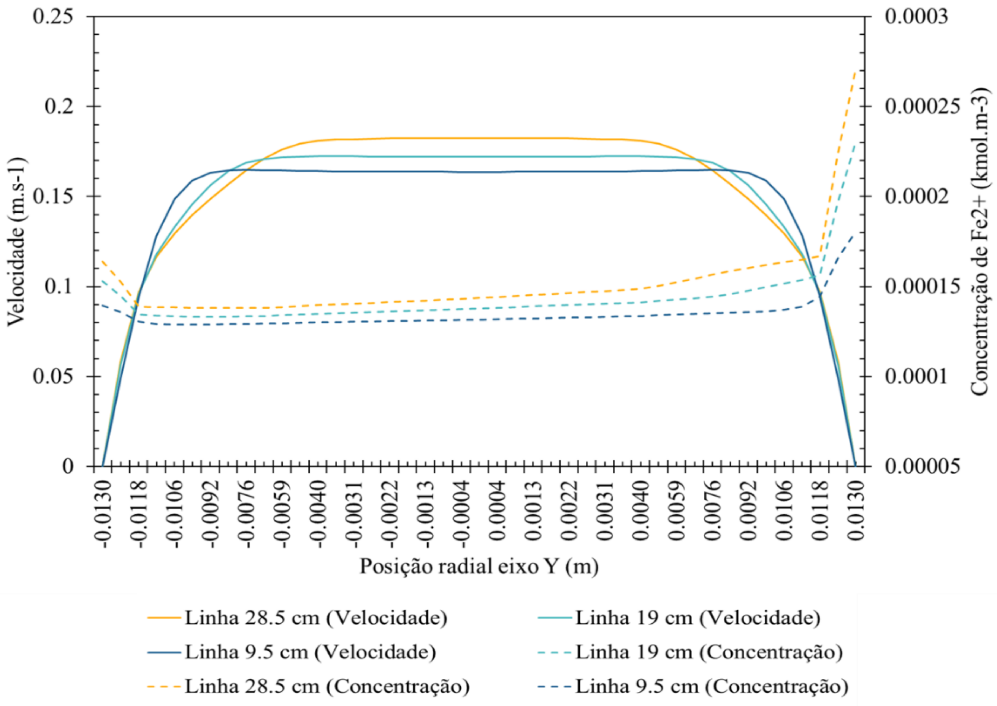
No escoamento laminar característico do Caso 11 (Figura 4.22), observa-se que a reação ocorre de forma mais acentuada na camada limite viscosa em comparação com o escoamento turbulento do Caso 12 (Figura 4.23) e à medida que se aproxima do centro do escoamento as concentrações de produto da fotorreação são rapidamente diluídas como é possível notar nos contornos da Figura 4.21 em que os gradientes de concentração no centro do tubo para os Casos 12 e 15 apresentam apenas dois níveis em comparação com os diversos níveis no gradiente observado no Caso 11. Dessa forma, acredita-se que o baixo efeito da vazão de recirculação na resposta concentração C_{Fe2+} decorra da combinação entre a pequena faixa de vazões analisada e a boa diluição de reagentes e produtos causada pelos escoamentos turbulentos (vazões maiores que 0,85 L·min^{-1} no planejamento), evitando a depleção total da concentração de reagentes no topo do reator tubular durante sua circulação no reator tubular.

Figura 4.22 – Velocidades de escoamento e concentração de Fe^{2+} *versus* posição radial nas linhas transversais ao longo do reator para o Caso 11 (D_L=13.50cm; Q=0,4 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}). Eixo Y corresponde ao eixo vertical em direção à lente de Fresnel.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 4.23 – Velocidades de escoamento e concentração de Fe^{2+} *versus* posição radial nas linhas transversais ao longo do reator para o Caso 12 (D_L=13,50cm; Q= 4,40 L·min^{-1}; I_S=201,25 W·m^{-2}). Eixo Y corresponde ao eixo vertical em direção à lente de Fresnel.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

De maneira geral pode-se concluir que tanto o sistema concentrador com lente de Fresnel pontual quanto o linear desenvolvidos neste trabalho apresentaram grande potencial de aplicação em processos de desinfecção suportados por radiação solar, ou de qualquer processo fotoxidativo que demande altas doses de radiação como agente motor. É importante ressaltar que toda a análise de caracterização do sistema tomou por base a reação de actinometria com ferrioxalato de potássio, mas espera-se que os efeitos aqui observados e quantificados se apliquem a outras cinéticas que tenham o termo de radiação modelado de forma explícita tal qual o modelo aqui utilizado.

Uma vez caracterizados, os sistemas podem ser estudados com a aplicação específica para a desinfecção solar de água contaminada. A cinética de desinfecção bacteriana estudada de forma numérica nestes sistemas concentradores apresenta um grau de complexidade muito maior que a cinética de actinometria, porém, como é apresentado na seção a seguir, os comportamentos identificados nas diferentes operações com os concentradores tipo Fresnel tendem a ser mantidos.

4.4 Cinética de inativação bacteriana

Nessa seção são apresentados os resultados da reprodução do modelo computacional de García-Gil et al. (2019) que aplica a cinética mecanicista da desinfecção solar da água contaminada por *E. coli* baseada na modelagem das espécies de oxigênio reativas (ROS) desenvolvida por Castro-Alférez et al. (2017a). Em seguida são apresentados e discutidos os resultados da aplicação de tal modelo nos sistemas concentradores Fresnel estudados, avaliando-se sua performance frente a algumas condições operacionais relevantes para a SODIS e entendendo como ocorre a cinética de desinfecção nesses sistemas com base no modelo utilizado.

4.4.1 Reprodução do modelo computacional de García-Gil et al. (2019)

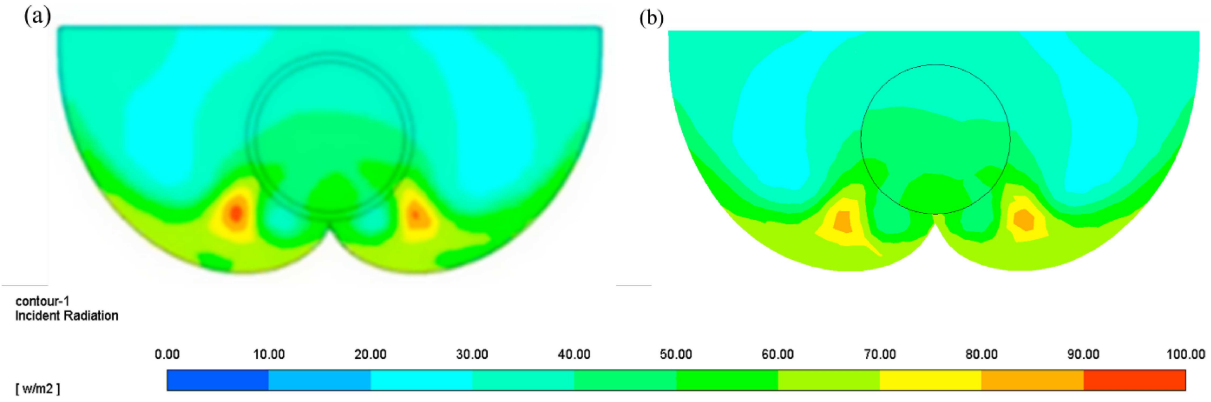
Para verificar a adequação da UDF de cinética de desinfecção desenvolvida e apresentada no Apêndice A.6 foram comparados os resultados de radiação incidente e concentração de bactéria em relação ao tempo de simulação entre o modelo desenvolvido e o apresentado pelos autores. Devido ao impacto da radiação do perfil de escoamento na cinética de reação foi necessário dividir a reprodução do modelo em duas etapas sendo a primeira a reprodução dos campos de radiação e velocidades, e a segunda a cinética em si. Vale a pena reforçar que os valores de radiação incidente na unidade de tratamento são constantes ao longo de todo o processo de desinfecção, fato pelo qual o campo de radiações foi simulado em estado estacionário e a influência negligenciável da concentração de microrganismos no escoamento fez com que a física pudesse ser totalmente desacoplada através da simulação individual do transporte de movimento, transporte de radiação e transporte de massa, de forma similar à metodologia aplicada nas simulações de actinometria.

Como é possível observar na Figura 4.24 e Figura 4.25,contornos de radiação e velocidade similares aos verificados pelos autores foram obtidos no mesmo plano analisado, para uma radiação UVA incidente de 16,4 $W \cdot m^{-2}$ na área de coleta do reator. Ao se analisar a radiação média no interior do reator para uma radiação UVA incidente de 18,6 $W \cdot m^{-2}$, o valor obtido de 49,84 $W \cdot m^{-2}$ é bastante próximo dos 50,09 $W \cdot m^{-2}$ observado pelos autores (0,5% de diferença), para uma simulação com os mesmos parâmetros de entrada.

O modelo de concentrador parabólico composto empregado pelos autores apresenta dois pontos focais para uma radiação incidente perpendicular à área de coleta, e dessa forma distribui de forma homogênea a radiação concentrada ao longo do reator tubular. No contorno obtido

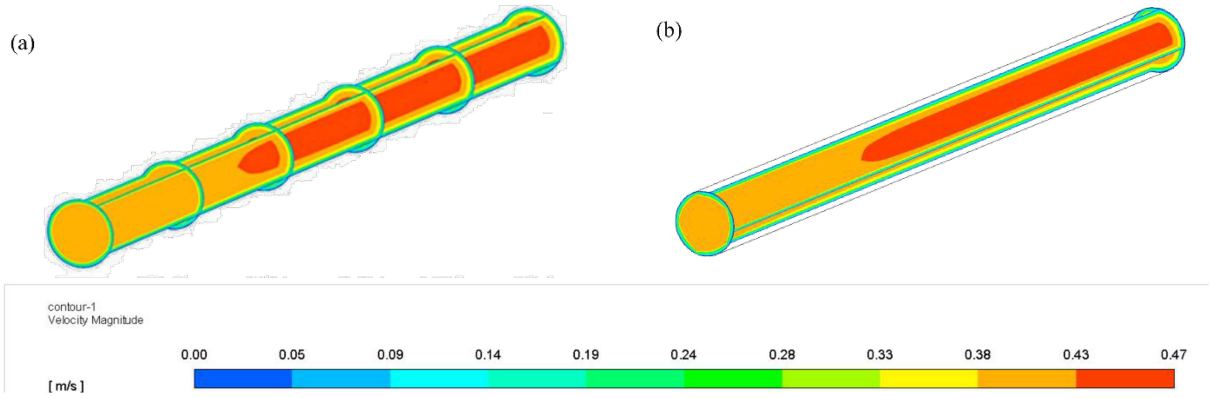
através da reprodução do modelo (Figura 4.24b) pode-se observar a predominância de contornos na faixa entre 40 $W \cdot m^{-2}$ e 60 $W \cdot m^{-2}$, o que resultou na radiação média de 49,84 $W \cdot m^{-2}$ obtida ao longo do reator. Já o perfil de velocidades obtidos na reprodução do modelo (Figura 4.25b) apresentou o mesmo comportamento para o desenvolvimento do escoamento na vazão de 12,12 $L \cdot min^{-1}$ empregada pelos autores.

Figura 4.24 – Contornos de radiação incidente: a) Resultado reportado por García-Gil et al. (2019); b) resultado obtido na reprodução do modelo



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 4.25 – Contornos de velocidade: a) Resultado reportado por García-Gil et al. (2019); b) resultado obtido na reprodução do modelo

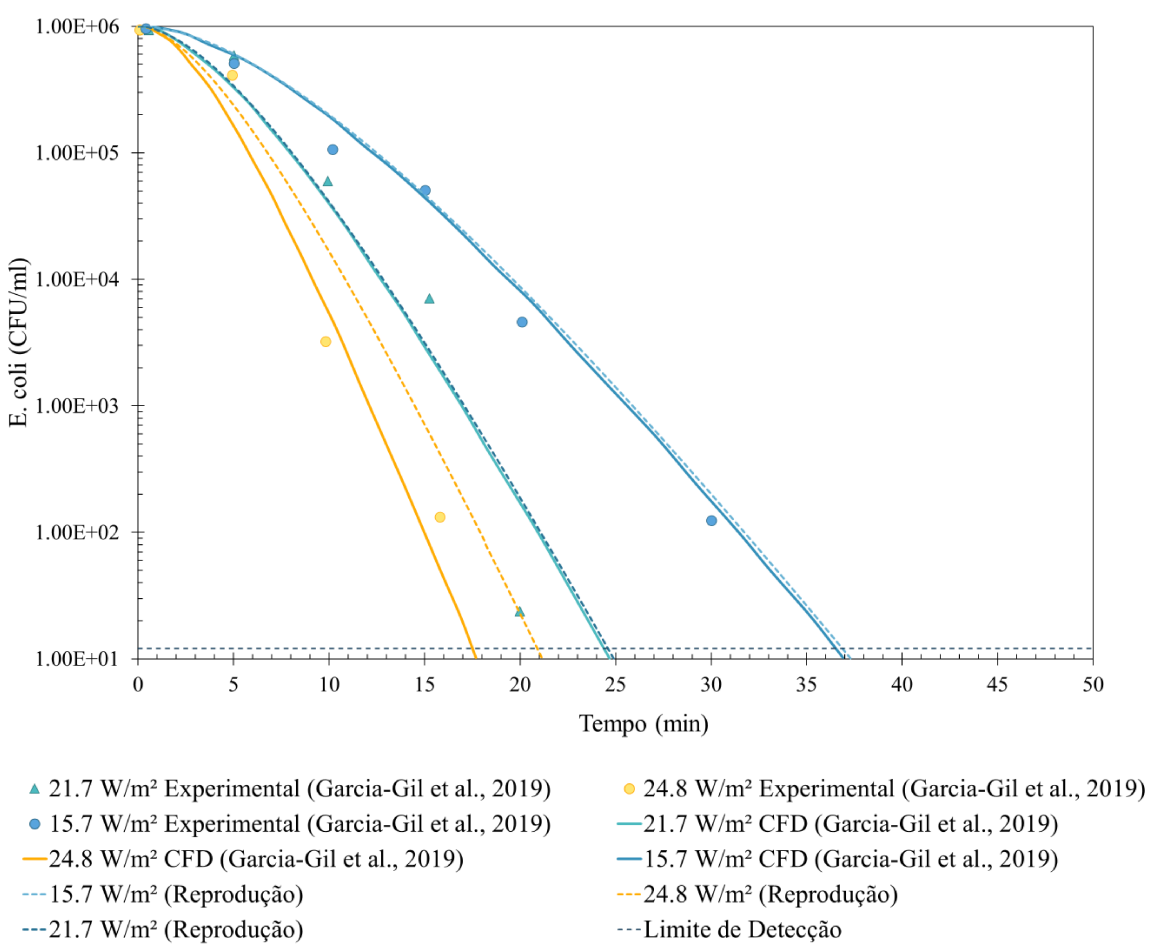


Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Com relação à cinética de desinfecção, os resultados obtidos revelaram-se também muito similares aos obtidos por García-Gil et al. (2019), com um pequeno desvio observado apenas para a maior intensidade de radiação incidente simulada. O gráfico apresentado na Figura 4.26 mostra um compilado dos resultados obtidos nas simulações de reprodução do

modelo cinético em comparação com os resultados reportados por García-Gil et al. (2019). De maneira geral, os tempos de desinfecção até atingir o limite de detecção de bactérias viáveis definido pelos autores (12,24 $CFU.mL^{-1}$) foram exatamente iguais e o único desvio considerável observado foi para a cinética de desinfecção sob 24,8 $W \cdot m^{-2}$ de radiação incidente. Entretanto, a diferença de tempo para se atingir o limite de detecção foi de aproximadamente 3 minutos em relação ao resultado numérico dos autores. Esse desvio pode estar atrelado à diferença entre os tamanhos de malha desta reprodução em relação ao trabalho dos autores combinada com a maior intensidade luminosa no interior do reator e que gera maiores taxas de reação dificultando a convergência do modelo e aumentando o erro numérico associado. Porém, é interessante observar que os resultados da simulação de reprodução ainda apresentam uma boa representatividade dos dados experimentais dos autores.

Figura 4.26 – Curva de desinfecção de *E.coli* para diferentes radiações incidentes no CPC de García-Gil et al. (2019).



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Um ponto importante na consideração desse modelo são as limitações associadas à sua aplicação. O modelo foi originalmente desenvolvido por Castro-Alférez et al. (2017a) estimando-se todas as constantes *k* com experimentos sob radiações UVA incidentes na faixa de 25 $W \cdot m^{-2}$ a 50 $W \cdot m^{-2}$, em um reator batelada agitado de 700 mL. García-Gil et al. (2019) expandiram esse range de aplicação ao utilizar o modelo no sistema CPC e validá-lo sob intensidades de radiação mais elevadas dentro do reator. Outro ponto importante é que o modelo utilizado tanto no trabalho de referência quanto nesta tese considera uma matriz de água ideal, ou seja, com ausência de sólidos suspensos e baixa turbidez e não leva em conta o efeito sinérgico entre a atividade das espécies ROS no interior da célula e temperaturas acima de 40°C na água resultante pela concentração de luz. Sabe-se que o efeito sinérgico da combinação destes dois fenômenos é responsável por reduzir ainda mais o tempo de exposição necessário para desinfecção da água, porém as vazões e tempos de exposição empregados pelos autores não permitiram o aumento da temperatura de forma considerável na água. Tais ponderações também foram feitas ao se considerar a aplicação deste modelo nos ensaios numéricos com as lentes de Fresnel neste presente estudo.

Apesar das pequenas diferenças notadas na modelagem de reprodução com o trabalho de referência e das limitações existentes no modelo, pôde-se concluir que o modelo cinético de Castro-Alférez et al. (2017a) foi implementado com sucesso e apresenta um potencial de aplicação nos sistemas concentradores com lentes de Fresnel para predizer a performance de desinfecção de águas contaminas com *E. coli*. Apesar de considerar características ópticas ideais em uma amostra de água contaminada (ou seja, baixa turbidez e presença de outras partículas orgânicas além da bactéria), o modelo é capaz de predizer com bastante eficiência a performance de desinfecção e possibilita a investigação de variações de reatores com características similares aos acima mencionados.

4.4.2 Desempenho do sistema concentrador com lente de Fresnel pontual na desinfecção de *E.coli*

Para verificar o desempenho do sistema concentrador com lente de Fresnel pontual na desinfecção solar da água, o caso 3 do planejamento fatorial que forneceu a maior conversão na reação de actinometria foi selecionado: Volume (V_R) = 15 mL e Posição (D_L) = 13,50 cm. Esse caso foi simulado com a substituição da reação de actinometria pela cinética de desinfecção (Apêndice F) e foram monitoradas as cinéticas das 4 principais espécies químicas

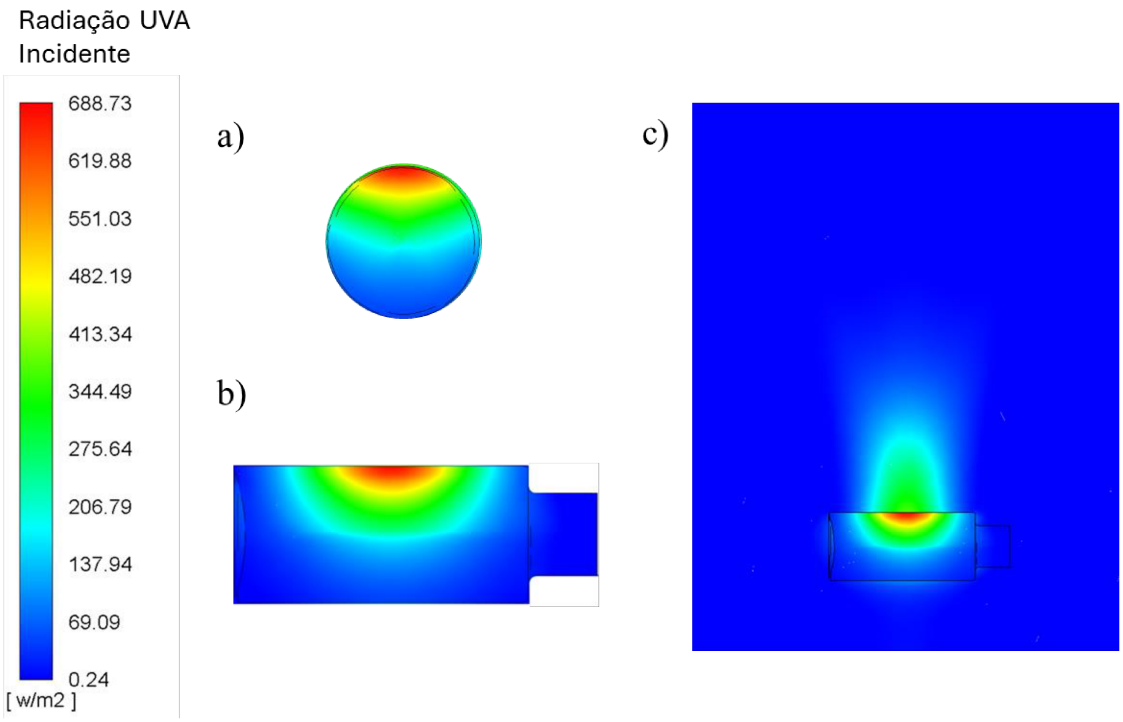
envolvidas na reação: bactéria, catalase (CAT), superóxido dismutase (SOD) e peróxido de hidrogênio (H_2O_2).

Em relação ao comportamento numérico da simulação, observou-se uma dificuldade na convergência do modelo para esse sistema, o que resultou na necessidade de se reduzir inicialmente o passo de tempo do cálculo para 0,01 segundo, e foi aumentado gradativamente à medida que a solução das equações de transporte de massa e reações iam convergindo. Acredita-se que essa dificuldade se dá principalmente pelos maiores gradientes de radiação dentro do reator através do uso da lente de Fresnel, pela situação de fluido estagnado nesse sistema batelada e devido à maior complexidade do mecanismo de desinfecção em relação à reação de primeira ordem estudada previamente nos ensaios com actinometria.

A simulação da desinfecção sem a lente de Fresnel, na qual o mesmo valor de radiação foi distribuído igualmente ao longo do reator, não apresentou tal dificuldade de convergência. Isso é um indicativo de que os altos gradientes de radiação gerados dentro do reator quando do uso da lente de Fresnel demandam um maior cuidado na modelagem de cinéticas complexas, em que a taxa de uma reação depende da concentração de uma espécie que está sendo consumida em duas ou mais reações simultaneamente.

Na Figura 4.27 mostram-se os contornos de radiação UVA na simulação realizada. Para esta simulação foi observado o mesmo perfil de concentração de luz que o apresentado anteriormente na Figura 4.17 para o posicionamento do reator no ponto focal, porém neste caso apenas a parcela UVA transmitida pela lente foi simulada devido a sua relevância para o modelo cinético utilizado. Conforme observado na seção 4.3.1, na região focal da lente um intenso gradiente de radiação é gerado dentro do reator, e este gradiente tende a aumentar com o aumento do volume do frasco. Por sua vez, a presença de zonas com baixa radiação dentro do reator (valores próximos de 10 $W \cdot m^{-2}$) pode apresentar um impacto significativo na cinética de desinfecção estudada e para entender melhor a dinâmica da redução de bactérias dentro do frasco foram analisadas também as variações temporais da concentração de bactéria, catalase, superóxido dismutase e peróxido de hidrogênio e os respectivos contornos de simulação.

Figura 4.27 – Contornos de radiação UVA incidente no reator (frasco) na simulação com a lente de Fresnel pontual



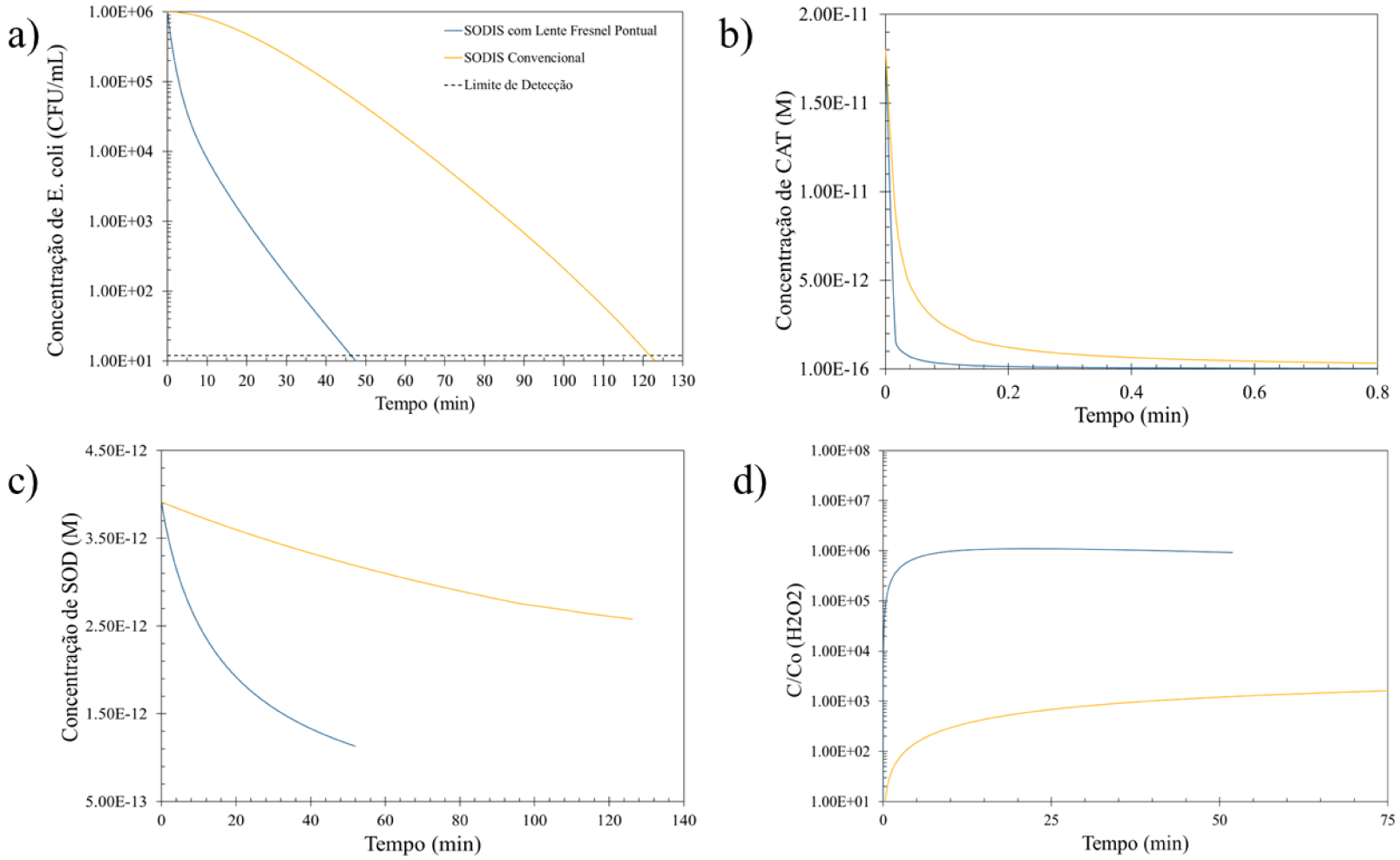
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Na Figura 4.28 apresentam-se os resultados obtidos na simulação da desinfecção da água contida no frasco de 15 mL com e sem o auxílio da lente de Fresnel pontual. É possível observar na Figura 4.28a que a introdução da lente de Fresnel pontual promoveu uma aceleração considerável na inativação da *E. coli* em comparação à configuração SODIS convencional. A curva associada à lente apresenta uma redução mais rápida na concentração bacteriana logo nos primeiros minutos, que pode ser explicada pela rápida desativação da enzima catalase enquanto a superóxido dismutase é relativamente mais estável (Figura 4.28b e Figura 4.28c). Ambos os comportamentos apresentam um alinhamento com as equações de fotoinativação e os resultados experimentais utilizados no desenvolvimento do modelo (CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017a). A redução acentuada da catalase compromete a regulação da concentração de H_2O_2 dentro da célula permitindo seu acúmulo progressivo como demonstrado no gráfico da Figura 4.28d.

O acúmulo de peróxido de hidrogênio é mais pronunciado na simulação com a lente. Essa tendência também era esperada, já que a degradação da catalase compromete a remoção do peróxido, fazendo com que ele atue como precursor em reações de Fenton que geram o radical hidroxila (OH^-). A lente intensifica essa dinâmica ao aumentar a taxa volumétrica local de absorção de fótons, e^a_{CAT}, na Equação (2.6). Com mais ROS presentes na célula, especialmente OH^- e H_2O_2, a taxa de dano estrutural à célula aumenta. Esse ciclo de inativação

enzimática e geração de oxidantes é capturado com consistência pelo modelo em ambas as simulações.

Figura 4.28 – Cinética de desinfecção de água contaminada por *E.coli* para irradiação com e sem lente de Fresnel: a) concentração de *E.coli;* b) concentração de catalase; c) concentração de superóxido dismutase; d) acúmulo de peróxido de hidrogênio.



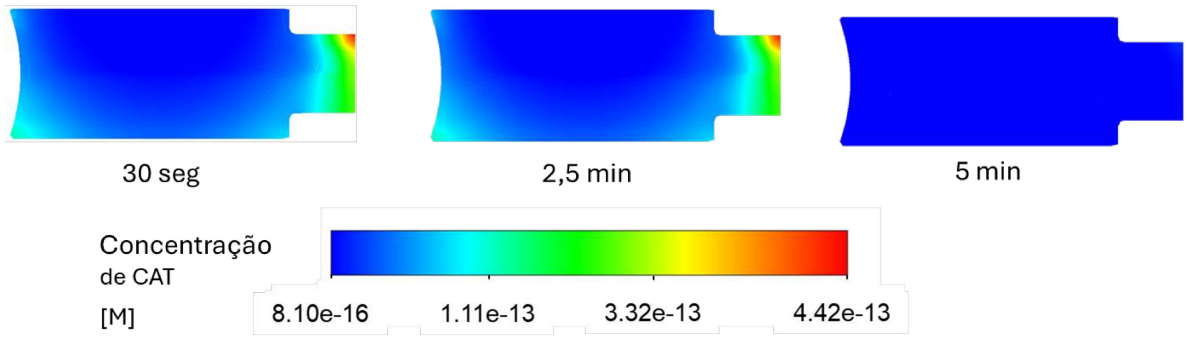
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Entretanto, percebe-se uma diferença no comportamento geral da curva de cinética com a lente de Fresnel em relação à SODIS convencional. É possível observar a redução da taxa de reação de desinfecção ainda a partir dos primeiros 2 minutos de simulação (Figura 4.28a). Como o modelo utilizado não contempla taxas de recrescimento bacteriano, uma possível justificativa para esse comportamento em forma de "cauda" reside na distribuição heterogênea de luz dentro do reator associada à rápida inativação da catalase nos pontos de maior radiação do gradiente gerado.

Para dar suporte a essa análise, da Figura 4.29 à Figura 4.32 são apresentados os contornos de concentração das quatro principais espécies envolvidas no modelo cinético em três instantes diferentes. Ao se observar esses contornos e comparar com a radiação apresentada na Figura 4.27 é possível notar que nas regiões periféricas do reator há uma maior concentração das espécies porém, devido à sua alta sensibilidade, a catalase apresenta um gradiente de concentração mais intenso com um alto índice de inativação no centro do frasco, ao passo que em regiões próximas à tampa do reator e que recebem menos luz (valores próximos da radiação transmitida pela lente de 10 $W \cdot m^{-2}$) certos níveis de catalase ainda se fazem presentes, levando a uma taxa de desinfecção bacteriana menor.

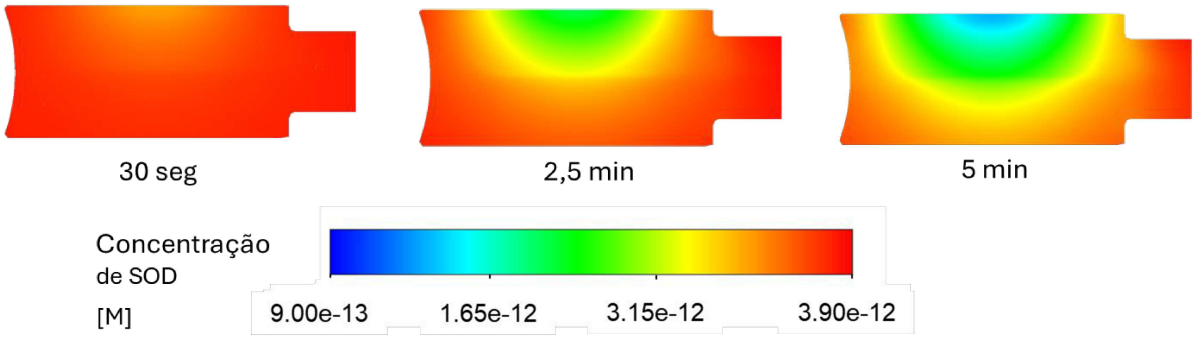
A configuração do reator também contribui para a manutenção da heterogeneidade na concentração de bactérias na água. O frasco utilizado foi modelado completamente cheio com o fluido permanecendo estagnado em seu interior e como forma de simplificação do modelo de radiação a temperatura do sistema foi suprimida dos cálculos, portanto um movimento de convecção natural através do aumento de temperatura não é representado, o que impede a homogeneização das zonas de exposição. Essa distribuição desigual cria cinéticas locais distintas, com trechos do sistema atingindo rapidamente níveis críticos de espécies reativas de oxigênio (ROS) e outros operando sob condições subótimas. A curva global (Figura 4.28a) é, portanto, a soma dessas cinéticas regionais, manifestando-se como uma cauda prolongada na curva de desinfecção até que toda a população de *E. coli* seja exposta a doses de radiação eficazes.

Figura 4.29 – Contornos de concentração de catalase em três diferentes instantes da simulação com a lente de Fresnel.



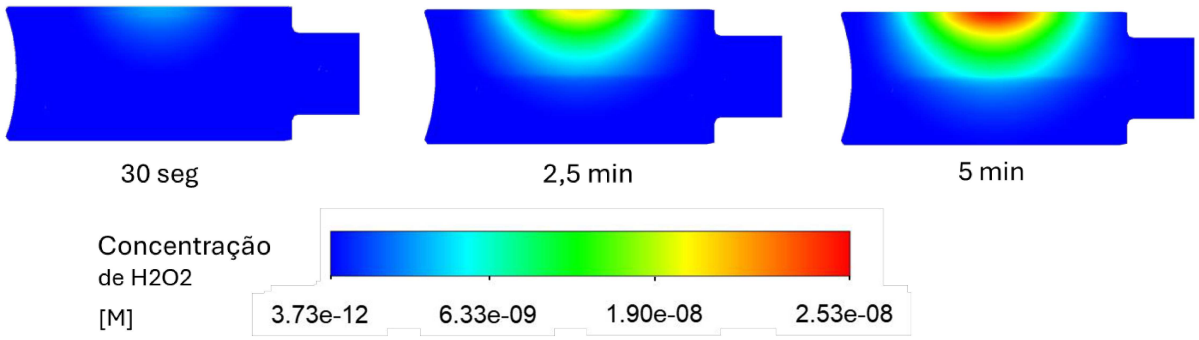
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 4.30 – Contornos de concentração de superóxido dismutase em três diferentes instantes da simulação com a lente de Fresnel.



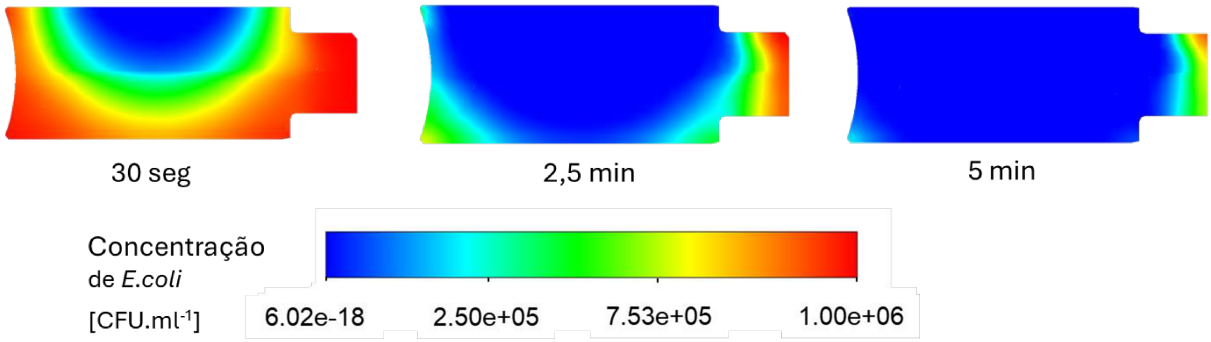
Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 4.31 – Contornos de concentração de peróxido de hidrogênio em três diferentes instantes da simulação com a lente de Fresnel.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 4.32 – Contornos de concentração de *E. coli* em três diferentes instantes da simulação com a lente de Fresnel.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Apesar da diferença entre as cinéticas, com a desinfecção apresentando um grau de complexidade maior que a actinometria, os resultados aqui discutidos corroboram o que foi evidenciado no planejamento fatorial apresentado na seção 4.3. A operação com lentes de Fresnel pontuais mostra alto potencial de intensificação do processo SODIS, especialmente pela capacidade de concentrar a irradiância UVA em regiões específicas do reator. No entanto, esse ganho de intensidade óptica pode vir acompanhado de uma redução da uniformidade da distribuição de luz no interior do frasco, como mostrado através do índice de uniformidade na seção 4.3.1, especialmente quando o volume do reator é aumentado. Esses efeitos opostos exigem cautela: enquanto a aproximação do frasco da região focal aumenta a irradiância útil, o volume adicional dificulta a propagação uniforme da radiação, podendo comprometer a eficiência cinética global do ponto de vista do modelo de desinfecção baseado na geração de ROS e inibição da catalase e superóxido dismutase, que não considera o efeito sinérgico do aumento da temperatura.

Além disso, deve-se considerar que o efeito térmico local devido à concentração de raios realizada pela lente pode causar aumento de temperatura na parede do reator, que pode ser um frasco de vidro ou uma garrafa plástica. Esse aquecimento localizado não apenas impacta a cinética microbiológica potencializando a sinergia UV, mas também pode atingir níveis críticos de temperatura capazes de danificar o material do reator. Assim, o posicionamento ideal do reator ao longo do comprimento focal da lente deve ser definido com base nos níveis de radiação solar e nebulosidade, dado que posições intermediárias podem representar um ponto de equilíbrio entre intensidade e distribuição da luz e do calor. Esse controle operacional é essencial para garantir tanto a eficácia da desinfecção quanto a integridade física do sistema.

Embora existam poucos estudos dedicados a caracterizar os efeitos ópticos e térmicos de lentes de Fresnel aplicadas à desinfecção solar (SODIS), alguns trabalhos experimentais como o conduzido por Awad (2012) oferecem observações que podem ser comparadas aos resultados obtidos neste estudo por meio de simulações CFD. Ainda que a escala dos sistemas seja distinta, com a autora utilizando garrafas PET de até 2 L sob uma lente de grandes dimensões (0,9m x 0,6m) irradiada por radiação solar superior a $10 W \cdot m^{-2}$, enquanto este trabalho considera um frasco de 15 mL posicionado sob foco pontual de 13,5 cm × 13,5 cm e radiação de $10\ W \cdot m^{-2}$, observa-se convergência qualitativa em fenômenos cinéticos e espaciais. Em ambos os sistemas, a aplicação de radiação solar concentrada sobre fluido estagnado revela desafios associados à distribuição não uniforme da irradiância. Os contornos simulados aqui mostram acúmulo de irradiância superior a $600\ W \cdot m^{-2}$ na zona inferior do frasco, promovendo inativação acelerada de *E. coli*, ao passo que regiões próximas à tampa opaca mantêm concentrações residuais mais altas por mais tempo, comportamento que se manifesta como uma "cauda" na curva de cinética da Figura 4.28a. Esse comportamento é compatível com os dados de Awad (2012), que apontam uma desinfecção acelerada (redução de 5 log em aproximadamente 23 min) associada ao rápido aquecimento e intensificação da luz solar.

No entanto, enquanto Awad (2012) observa que volumes maiores retardam o aquecimento do sistema e, consequentemente, a cinética de desinfecção, o modelo apresentado neste estudo não considera diretamente os efeitos térmicos — sendo focado apenas nos mecanismos fotoquímicos de geração de espécies reativas de oxigênio. Essa distinção permite isolar o papel da irradiância na degradação enzimática e na inativação bacteriana, mas ressalta a necessidade de incorporar dependências térmicas em etapas futuras de modelagem de SODIS auxiliada por lentes de Fresnel pontuais em sistemas batelada, caso se deseje reproduzir a sinergia UV-temperatura descrita em experimentos reais. Sabe-se que o aumento da temperatura da água, mesmo que moderado (30 a 55 °C), decorrente da absorção da radiação pelas superfícies da garrafa e seu entorno, desestabiliza a membrana, altera proteínas celulares e reduz a atividade enzimática protetora (CAT e SOD), tornando as células mais vulneráveis à ação das espécies reativas de oxigênio geradas pela luz UV (CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017b). No entanto, no que tange à fluidodinâmica computacional, sua modelagem requer maiores esforços computacionais relacionados ao caráter transiente do aquecimento do fluido e à implementação de modelos de reação que contabilizem o efeito da temperatura.

4.4.3 Desempenho do sistema concentrador com lente de Fresnel linear na desinfecção de *E.coli*

Como observado na seção anterior, a lente de Fresnel pontual possui um alto poder de concentração de luz no ponto focal e pode contribuir bastante para a intensificação do processo SODIS. No entanto, o tratamento de grandes volumes com esse tipo de lente apresenta como desafio a garantia de um campo uniforme de radiação ao longo do volume e naturalmente há uma limitação de volume por batelada. Para tentar sobrepor essa limitação lentes de Fresnel lineares acopladas a reatores tubulares podem ser uma interessante opção ao se conjugar um sistema de recirculação e tanque de armazenamento.

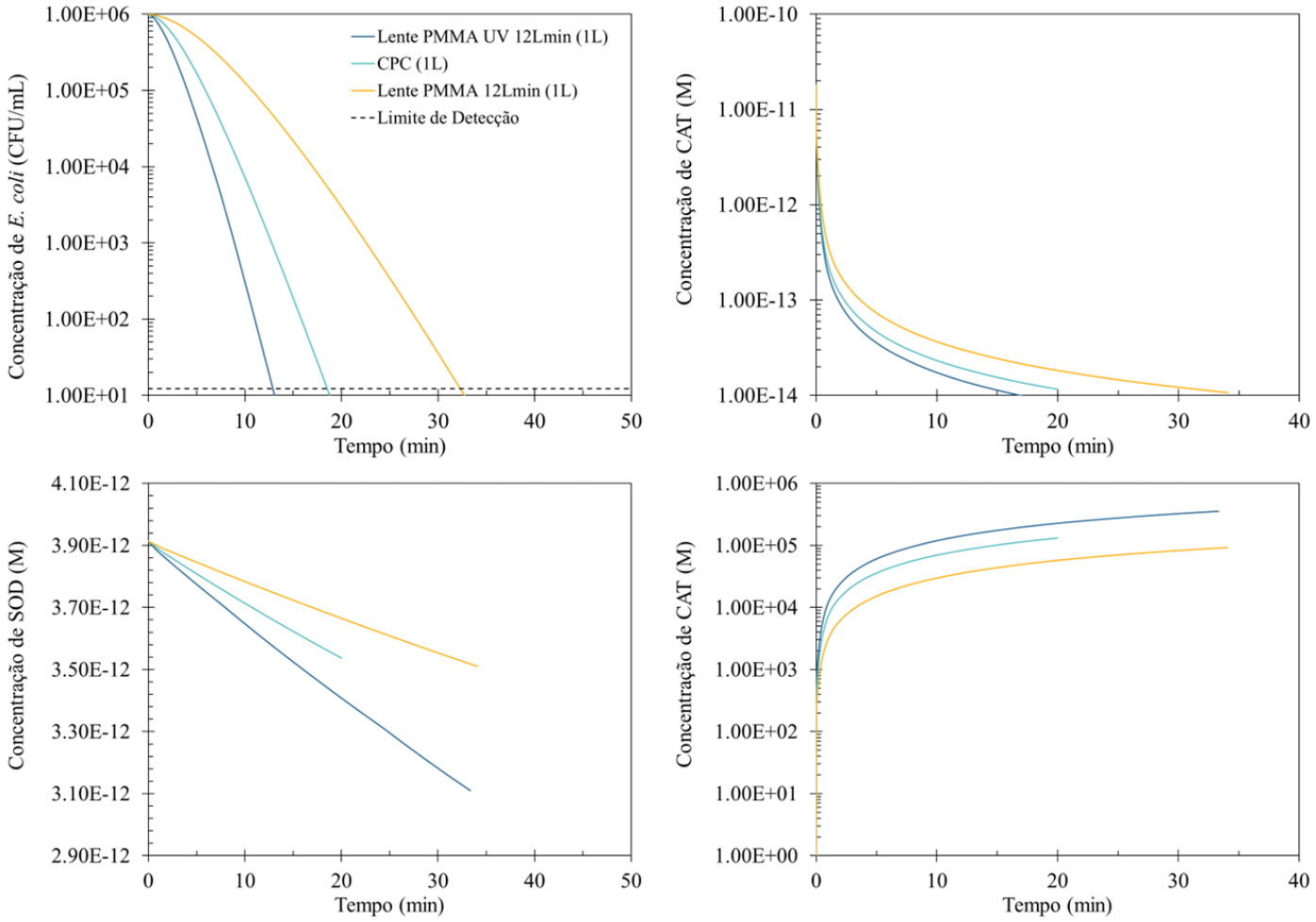
Dessa forma, para verificar o desempenho do sistema concentrador com lente de Fresnel linear na desinfecção solar da água, o nível mais alto da variável posição do reator (D_L) do planejamento composto central realizado (seção 4.3.2) foi selecionado devido à sua capacidade de fornecer a maior radiação média dentro do reator e, portanto, conversão, nas simulações e experimentos de actinometria realizados. Para essas simulações de desinfecção foi selecionada uma radiação UVA incidente de 35 $W \cdot m^{-2}$, maior que nas simulações com a lente pontual uma vez que nos experimentos de actinometria não se observaram aumentos significativos na temperatura da água devido à recirculação de água na unidade que possam levar à interação sinérgica da temperatura com a radiação UV na SODIS. O efeito decorrente do uso de uma lente linear constituída de PMMA-UV foi investigado adicionalmente e comparações com um concentrador parabólico composto (CPC) e diferentes vazões de recirculação também foram realizadas. Para diminuir o tempo de processamento das simulações o volume total tratado foi de 1L.

Os resultados obtidos para o sistema com lente de Fresnel linear em presença de recirculação da água confirmam a intensificação da cinética de desinfecção em comparação com o sistema batelada de lente de Fresnel pontual analisado anteriormente. As curvas de concentração de CAT, SOD e H_2O_2 (Figura 4.33b, Figura 4.33c e Figura 4.33d) reiteram a relação direta entre irradiância UVA, degradação enzimática e acúmulo de espécies reativas de oxigênio no modelo adotado. A lente PMMA-UV se destacou com maior taxa de inativação enzimática e geração de H_2O_2, impulsionando a eficiência microbiológica do sistema; ao passo que o CPC apresentou desempenho intermediário compatível com sua irradiância homogeneamente distribuída no reator, mas de menor intensidade que a lente PMMA-UV, enquanto a lente PMMA comum teve efeito limitado devido à baixa transmitância espectral. Esses comportamentos podem ser observados também nos contornos de radiação e

concentração de bactéria para um determinado instante de tempo da reação e apresentados na Figura 4.34.

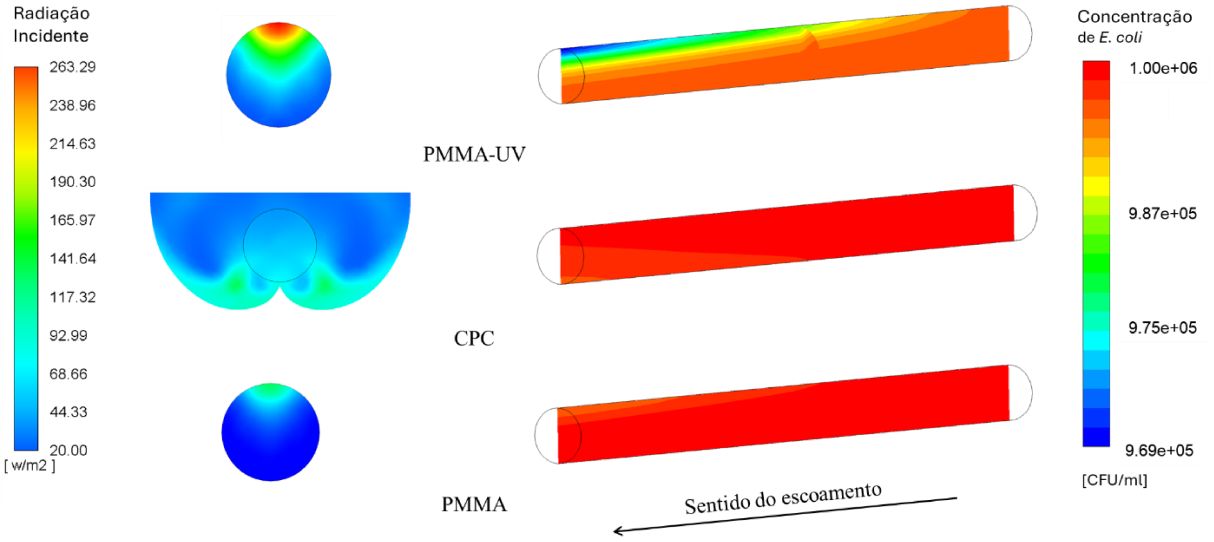
Conforme pode ser observado na Figura 4.33, a lente PMMA-UV proporcionou a inativação mais rápida da população de *E. coli*, levando a uma redução de 5 log em menos de 15 minutos. A lente PMMA comum por sua vez apresentou desempenho inferior devido à sua menor transmitância de fótons na faixa UVA, o que limitou a geração de espécies reativas de oxigênio (ROS). Já o concentrador parabólico composto (CPC) demonstrou uma eficiência intermediária e um desempenho compatível com o que foi obtido por García-Gil et al. (2019), especialmente em relação à uniformidade da distribuição da luz dentro do reator. Pode-se destacar também que para as condições simuladas com a lente de Fresnel PMMA-UV não houve o mesmo comportamento de cauda na cinética de inativação da *E. coli* que antes fora observado na simulação do sistema batelada com lente pontual. Essa constatação corrobora a premissa de que a utilização de recirculação promove uma renovação contínua das espécies na zona de radiação mais intensa do reator e reduz o tempo de permanência de microrganismos em regiões de baixa exposição luminosa.

Figura 4.33 – Cinética de desinfecção de água contaminada por *E.coli* para irradiação com diferentes tipos de concentrador solar sob irradiação de 35W·m^{-2} e vazão de recirculação de 12,12 L·min^{-1}: a) concentração de *E.coli;* b) concentração de catalase; c) concentração de superóxido dismutase; d) acúmulo de peróxido de hidrogênio.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

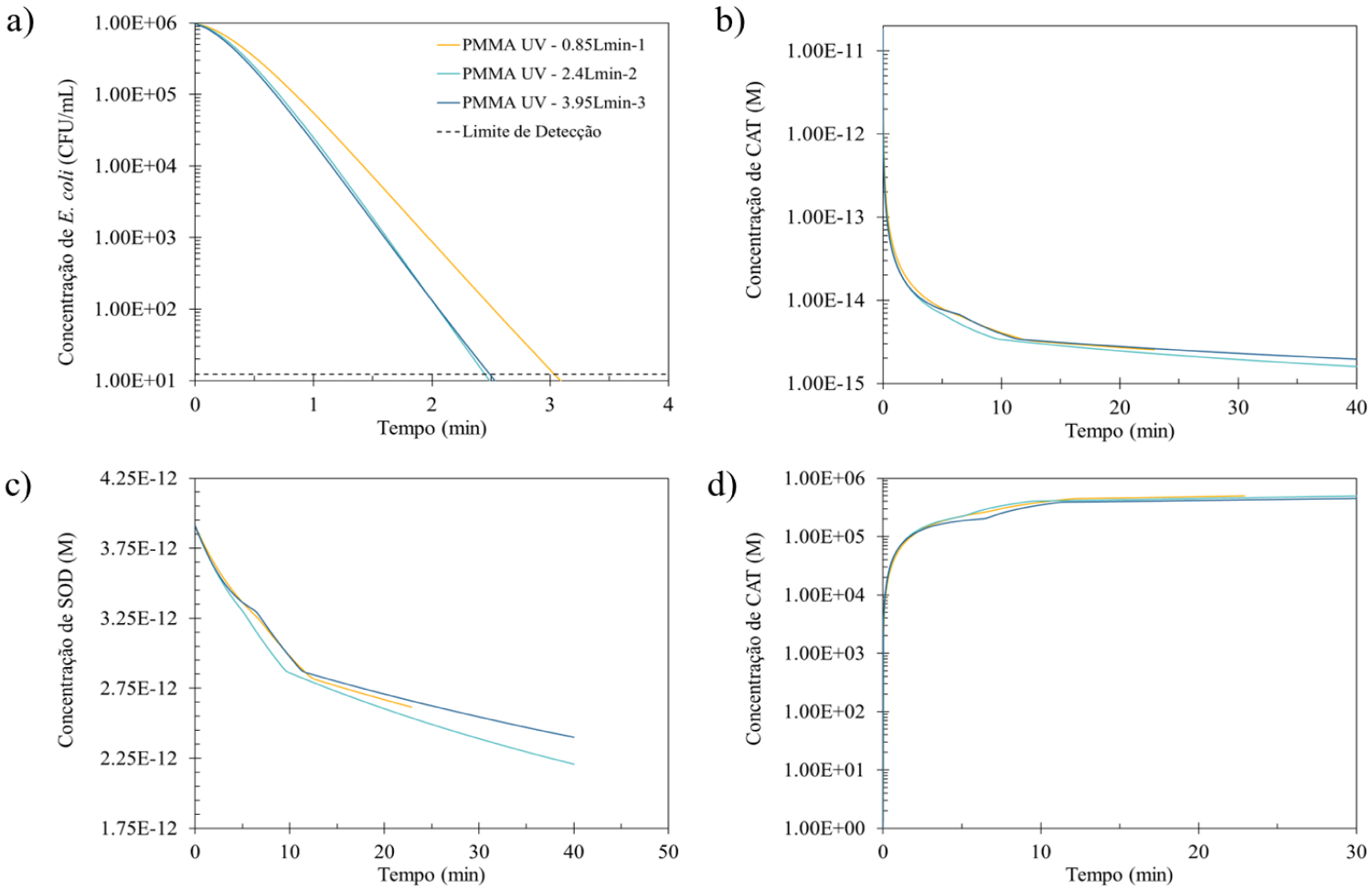
Figura 4.34 – Contornos de radiação incidente e concentração de *E. coli* nos primeiros 5 minutos de irradiação: Lente PMMA-UV, CPC, Lente PMMA.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Com base nos resultados apresentados na Figura 4.35 referentes às simulações com diferentes vazões de recirculação no sistema com lente de Fresnel PMMA-UV, é possível observar que os perfis de inativação da *E. coli* e degradação enzimática se mantêm bastante semelhantes entre os cenários testados. A eficiência de desinfecção não apresentou sensibilidade relevante à variação da vazão dentro da faixa estudada, corroborando os resultados obtidos previamente via actinometria durante o planejamento composto central apresentado na seção 4.3.2. Isso indica que, para valores entre 0,85 $L \cdot min^{-1}$ e 3,95 $L \cdot min^{-1}$, o sistema opera em uma zona de estabilidade, onde o tempo total de exposição acumulada é aproximadamente equivalente.

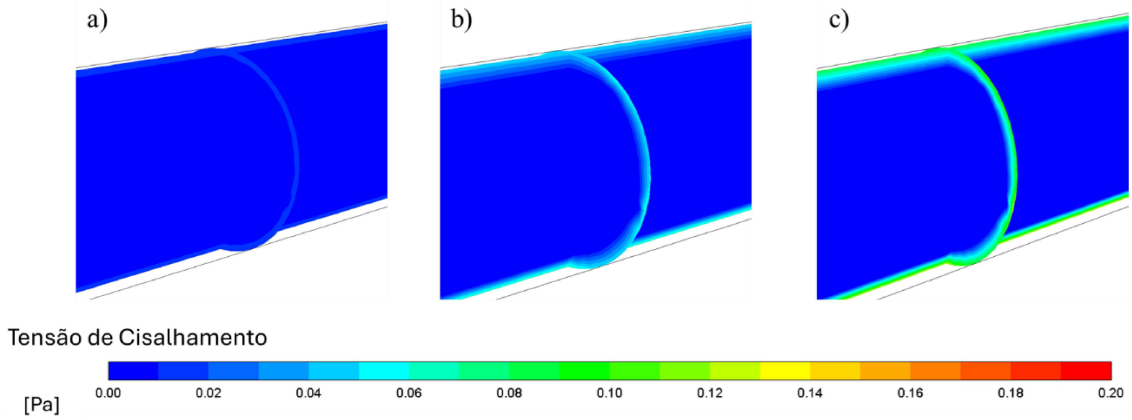
Figura 4.35 – Cinética de desinfecção de água contaminada por *E.coli* com lente de Fresnel linear UV sob irradiação de 35 $W \cdot m^{-2}$ e diferentes vazões de operação: a) concentração de *E.coli;* b) concentração de catalase; c) concentração de superóxido dismutase; d) acúmulo de peróxido de hidrogênio.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Apesar da eficiência de desinfecção final ter se mantido semelhante para todas as vazões estudadas, observa-se que as vazões média e alta apresentaram um tempo ligeiramente menor para atingir a redução de 5 log. Esse comportamento pode estar relacionado ao aumento da turbulência e à melhora na mistura local do fluido, que favorecem a renovação das espécies na zona de maior radiação. A análise da Figura 4.36 mostra que o aumento da vazão intensifica a tensão de cisalhamento na parede do reator favorecendo o transporte convectivo de bactérias na zona de maior radiação. Na vazão mais baixa, predominam zonas de estagnação ao longo das paredes do reator, com menor renovação local de espécies. Já a vazão mais alta exibe perfil turbulento bem desenvolvido, com tensão de cisalhamento elevada e circulação eficiente das espécies, o que pode explicar a leve redução no tempo total de inativação observada.

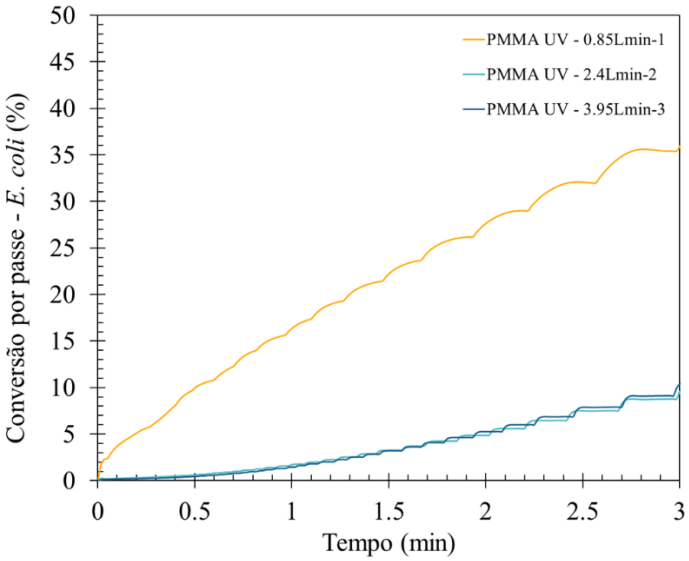
Figura 4.36 – Contornos de tensão de cisalhamento na parede do reator tubular: a) vazão baixa, b) vazão média, c) vazão alta.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Por outro lado, o gráfico de conversão por passe (Figura 4.37) mostra que vazões mais baixas proporcionam maiores taxas de conversão por unidade de volume a cada passe no reator. Este comportamento decorre diretamente do maior tempo de residência das bactérias na zona de maior radiação. Em vazões elevadas, o tempo de exposição por passe é reduzido, o que limita a formação de espécies reativas e a degradação enzimática imediata. No entanto, como o sistema opera em recirculação e o volume total do tanque simulado é pequeno (1 L), as repetições sucessivas de irradiação compensam essa limitação. Esse fato somado ao efeito da turbulência e tensão de cisalhamento descrito anteriormente revela um equilíbrio dinâmico entre eficiência instantânea e desempenho acumulado nesta unidade concentradora com lente de Fresnel linear.

Figura 4.37 – Conversão por passe no reator de acordo com a vazão de recirculação.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

A conversão por passe destaca o efeito imediato de uma única passagem pelo reator, favorecendo vazões menores que aumentam o tempo de residência das bactérias que escoam em regiões próximas do foco maximizando a desinfecção. Por outro lado, a análise dos contornos de tensão de cisalhamento evidencia o efeito da turbulência, em que vazões maiores promovem uma mistura eficiente e transporte convectivo aprimorado das espécies próximo à parede e na região do foco, possibilitando que mais bactérias recebam doses de radiação a cada passe e evitando a saturação de uma determinada região do escoamento. Dessa forma, enquanto vazões baixas garantem maior eficácia por passe, vazões mais altas e escoamentos turbulentos otimizam a circulação e a mistura das espécies, resultando em um desempenho final semelhante ou até mesmo levemente superior.

É fundamental destacar que essas observações são realizadas exclusivamente para a faixa de vazões analisadas (0,85 $L \cdot min^{-1}$ a 3,95 $L \cdot min^{-1}$). Como pode ser observado na Figura 4.33, o tempo para se atingir uma redução de 5 log na concentração de *E. coli* com a lente PMMA-UV para um mesmo volume de água (1L) e vazão de 12,12 $L \cdot min^{-1}$ é de aproximadamente 13 minutos, bastante superior aos observados com as três vazões analisadas. Isso evidencia a importância de um correto dimensionamento da vazão em novos tipos de unidade de tratamento solar de água que fazem uso de concentradores e bombas para recirculação.

Adicionalmente, é importante ressaltar que o modelo computacional adotado não contempla mecanismos de recrescimento bacteriano no tanque de armazenamento, fator que

pode possivelmente ser irrelevante nas condições simuladas deste trabalho, com um baixo tempo espacial do fluido no tanque (2,98 segundos) e, portanto, à elevada frequência de recirculação. Esse cenário simplificado é coerente com o objetivo de isolar o impacto da radiação UVA sobre os mecanismos fotoquímicos de inativação. Entretanto, é importante destacar que, caso o volume do reservatório fosse ampliado, o tempo entre cada ciclo de irradiação aumentaria e a taxa de recrescimento bacteriano poderia se tornar significativa, e impactar diretamente a eficiência do sistema. Nessa situação, a capacidade do sistema de compensar conversões mais baixas por passe dependeria do equilíbrio entre tempo de residência no reator tubular, número de passes (irradiações sucessivas em série) e controle da proliferação microbiana, exigindo ajustes no modelo e no design do sistema.

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Com base nos objetivos principais deste trabalho e resultados obtidos, as principais conclusões podem ser levantadas.

5.1 Conclusões

Levando em consideração os objetivos principais deste trabalho de projetar e estudar unidades de tratamento de água utilizando concentradores solares do tipo lentes de Fresnel, as principais conclusões são apresentadas a seguir.

- Duas unidades de tratamento utilizando lentes de Fresnel do tipo pontual e linear foram desenvolvidas e construídas na Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia. Os respectivos modelos computacionais representativos destas unidades foram desenvolvidos e uma nova abordagem híbrida para reduzir o esforço computacional das simulações de radiação foi criada.
- A comparação entre o desempenho das simulações com esta abordagem aplicada para a lente linear, em relação à abordagem convencional com a lente pontual, indica que o método de importação do campo de radiação 2D para um domínio 3D pode reduzir consideravelmente o tempo de simulação e o tamanho dos arquivos gerados: tempo máximo de simulação de 22 horas na configuração mais refinada para a lente pontual, *versus* 27 minutos de simulação na configuração mais refinada para a lente linear.
- O método híbrido de simulação desenvolvido neste trabalho é válido considerando-se que a seção transversal da malha computacional do domínio 3D deve ser idêntica à do domínio 2D ao longo de todo o comprimento do reator, a resposta a ser importada não muda ao longo do comprimento do reator e não varia com o tempo. Tais condições são geralmente características de unidades com fotorreatores e o método desenvolvido apresenta grande potencial de viabilização de estudos numéricos que envolvam a simulação de campos de radiação em tais equipamentos.
- Um estudo detalhado de independência de malha e discretização angular foi conduzido nos dois modelos criados, variando-se a quantidade de elementos de malha e número divisões dos ângulos de controle do modelo de ordenadas discretas utilizado para resolução da equação de energia. Para o modelo 3D relativo à lente de Fresnel pontual, 3,6 mm foi o máximo tamanho de elemento da malha calculado como ideal e a combinação de divisões $N_\theta = 15$ x $N_\phi = 15$ apresentou o melhor custo-benefício. Já para

o modelo 2D, utilizado para o cálculo da radiação concentrada pela lente linear, o máximo tamanho de elemento permitido pelo estudo foi de 0,9 mm com uma combinação de divisões $N_\theta = 3$ x $N_\phi = 6$, enquanto o domínio 3D relativo ao tubo no qual a radiação foi importada permitiu a utilização de um mínimo de 124735 elementos. Tais configurações eliminaram os efeitos de *"false scattering"* e "*ray effect"* nos resultados das simulações de radiação dos sistemas estudados nessa tese.

- Os modelos computacionais desenvolvidos para simulação das unidades de tratamento foram validados com experimentos de actinometria com ferrioxalato de potássio. Os resultados obtidos indicam uma boa capacidade preditiva dos modelos em relação aos campos de radiação e velocidade nos reatores analisados, com erros de até 10% na concentração final de Fe^{2+}, produto da actinometria. Dessa forma, foi possível conduzir uma análise de efeitos das variáveis operacionais destas unidades através do uso destes modelos utilizando-se a reação de actinometria com ferrioxalato de potássio como representativa de reações fotoativadas que podem ser conduzidas nestes sistemas concentradores.
- O planejamento fatorial conduzido para o sistema concentrador com lente pontual permitiu avaliar sistematicamente os efeitos da variável volume do reator (V_R) e posição do reator (D_L) sobre a eficiência óptica e conversão da reação de actinometria. Observou-se que menores volumes posicionados no foco fornecem maiores intensidades de radiação no reator conforme o esperado, porém à medida que se aumenta o volume uma menor uniformidade no campo de radiação dentro do reator é obtida o que pode impactar a conversão de reações como a desinfecção solar da água, por exemplo. Dessa forma, os maiores efeitos na concentração de produto e fator de concentração de radiação foram observados na variável D_L.
- Os efeitos da variável vazão (Q), posição do reator (D_L) e irradiação solar (I_S) na concentração de produto da actinometria foram avaliados através de um PCC realizado com 16 simulações. Os resultados indicaram uma pequena contribuição da vazão de recirculação dentro da faixa analisada (0,4 $L \cdot min^{-1}$ a 3,95 $L \cdot min^{-1}$) e uma forte dependência da resposta em relação ao posicionamento do reator e à irradiação solar, em que um posicionamento próximo da linha focal e maiores intensidades de radiação incidente na unidade promovem uma maior formação de produtos conforme o esperado teoricamente pela óptica promovida pelas lentes de Fresnel.

- Através da realização do PCC para a lente de Fresnel linear conclui-se que mesmo para posições intermediárias do reator no caminho óptico da lente, a depender da intensidade de radiação solar no momento da operação, taxas de reação com uma ordem de grandeza ligeiramente menor que a do posicionamento do reator no foco ainda são observadas. Ademais, posicionamentos intermediários podem evitar a perda do foco devido a imprecisões na movimentação da lente e rastreio do sol e podem ser uma opção dependendo do tipo de reação conduzida na unidade.
- O modelo cinético de inativação de *E.coli* de águas contaminadas com base na geração de espécies reativas de oxigênio (ROS) e desativação de enzimas de proteção dentro da célula foi implementado com sucesso e simulações de reprodução do trabalho de García-Gil et al. (2019) confirmaram a viabilidade de aplicação da UDF desta reação nos modelos computacionais com lente de Fresnel, possibilitando a investigação numérica de tais concentradores alternativos.
- As simulações de desinfecção de *E. coli* conduzidas no modelo computacional da lente pontual mostraram o potencial de intensificação da desinfecção solar da água SODIS através do uso deste tipo de concentrador sob o ponto de vista do modelo mecanicista utilizado. De acordo com as simulações com e sem lente, pode-se esperar a uma redução de pelo menos 50% no tempo total de desinfecção para se atingir o limite de detecção de unidades formadoras de colônia na água. Destaca-se que, como o modelo utilizado não considera os efeitos sinérgicos entre o aumento de temperatura e a radiação incidente na célula, esse tempo tende a ser ainda menor principalmente em sistemas com lente de Fresnel pontual que possem naturalmente essa capacidade de aquecimento devido ao seu alto potencial concentrador.
- Os resultados de cinética com a lente pontual ainda indicaram que há uma relação direta entre o comportamento da curva cinética e a distribuição heterogênea de radiação no interior do reator, sendo que em regiões mais periféricas do frasco de água a taxa de reação de desinfecção é menor, o que causa um comportamento de cauda na curva de desinfecção mediante o uso do modelo cinético empregado nesta tese que desconsidera os efeitos térmicos e taxas de recrescimento bacteriano.
- As simulações de desinfecção com a lente de Fresnel linear indicam que a unidade projetada apresenta um grande potencial de aplicação na SODIS. Um tempo de desinfecção de 1L de água de aproximadamente 13 minutos foi obtido modelando-se uma lente de Fresnel PMMA UV sob irradiação UVA de 35 $W \cdot m^{-2}$, tempo este menor

que o demandado por um concentrador parabólico composto (18 minutos) e uma lente de Fresnel PMMA convencional (32 minutos). Entretanto, destaca-se que em ambos os casos as lentes de Fresnel foram capazes de reduzir a duração do processo de desinfecção consideravelmente em relação ao tempo da SODIS convencional, estimado em mais de 2 horas para um volume de 1 L de acordo com a literatura.

- Os resultados das simulações de diferentes vazões no sistema concentrador acoplado a uma lente de Fresnel PMMA UV confirmaram as observações realizadas no planejamento composto central com actinometria de que o efeito da vazão dentro da faixa analisada neste estudo é pequeno comparado aos efeitos do posicionamento do reator e da irradiação solar, apresentando tempos totais de desinfecção muito próximos entre si.
- Os resultados também indicaram uma maior conversão por passe no reator para operações de baixa vazão, que podem estar relacionadas ao maior tempo de residência das bactérias no reator e a uma maior dose de radiação acumulada. Entretanto esse comportamento contrastou com a predição de um tempo global de desinfecção ligeiramente menor (30 segundos) para as vazões média e alta, que pode estar relacionado à turbulência desses regimes de escoamento e a maiores tensões de cisalhamento próximos à parede do reator, principalmente na região focal da lente, promovendo uma maior mistura no tubo e fazendo com que mais bactérias estejam expostas aos altos índices de radiação gerados pela lente de Fresnel.

Com base nos resultados obtidos e apresentados neste trabalho pode-se concluir que as lentes de Fresnel, pontual e linear, apresentam um relevante potencial de aplicação em processos de tratamento solar da água, promovendo um aumento substancial de radiação nos fotorreatores e consequentemente a disponibilidade de fótons para as reações fotoativadas. A metodologia numérica implementada através dos modelos computacionais mostra que a fluidodinâmica computacional pode ser utilizada para a predição do desempenho de tais unidades e guiar projetos e pesquisas que envolvem fotorreatores solares e concentradores alternativos como as lentes de Fresnel.

5.2 Sugestões para trabalhos futuros

A partir dos resultados observados nesta tese podem-se elaborar as sugestões para trabalhos futuros descritas a seguir:

- Investigação numérica e experimental de outras condições de operação com o sistema concentrador Fresnel pontual, utilizando-se maiores recipientes de água, lentes de maiores dimensões, e radiação solar natural, por exemplo.
- Investigar o efeito do aumento de temperatura promovido pelas lentes de Fresnel pontuais na SODIS, fazendo proveito da interação sinérgica entre temperatura e radiação UVA no processo.
- Estudar experimentalmente a desinfecção com a lente de Fresnel linear em volumes maiores que 1 L para levar em conta o impacto dos mecanismos de reparação e recrescimento celular das bactérias quando não estão sendo irradiadas.
- Ampliar o número de passes adicionando tubos e lentes lineares em série para viabilizar o tratamento de grandes volumes de água e verificar a viabilidade da implementação de um sistema de rastreamento solar autônomo para ampliar o intervalo de exposição solar diário.
- Investigar o potencial de desinfecção de diferentes microrganismos patogênicos que podem estar presentes na água, por exemplo, protozoários e vírus.
- Analisar o efeito das lentes de Fresnel pontual e linear no tratamento de águas contaminadas com diferentes características: turbidez, sólidos suspensos, e pH.
- Investigar a utilização dos sistemas concentradores Fresnel apresentados neste trabalho em outros tipos de processos oxidativos avançados além da desinfecção solar, como tratamento de efluentes contaminados com corantes industriais, fármacos, fotocatálise solar, ou mesmo em processos de conversão e armazenamento de energia e produção de hidrogênio.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABRAHAM, J. P.; PLOURDE, B. D.; MINKOWYCZ, W. J. Continuous flow solar thermal pasteurization of drinking water: Methods, devices, microbiology, and analysis. *Renewable Energy*, [s.l.], v. 81, p. 795–803, 2015. ISSN: 18790682, DOI: 10.1016/j.renene.2015.03.086.

ALFÉREZ, M. C.; IBÁÑEZ, P. F.; AGUADO, MARÍA INMACULADA POLO LÓPEZ, J. M. Kinetic Modelling of the Escherichia Coli. [s.l.]: [s.n.], 2014. ISBN: 9788478347780.

ALMAJALI, T. A. H. et al. Exploring the Future of Solar Stills: Recent Breakthroughs in Performance Enhancement. *Separation & Purification Reviews*, [s.l.], v. 54, nº 2, p. 105–127, 2025. DOI: 10.1080/15422119.2024.2366879.

ÁLVAREZ-FERNÁNDEZ, C. et al. Evaluation of microplastics release from solar water disinfection polyethylene terephthalate and polypropylene containers. *Journal of Hazardous Materials*, [s.l.], v. 465, 2024. ISSN: 18733336, DOI: 10.1016/j.jhazmat.2023.133179.

AMIN, M. T.; HAN, M. Y. Roof-harvested rainwater for potable purposes: Application of solar collector disinfection (SOCO-DIS). *Water Research*, [s.l.], v. 43, nº 20, p. 5225–5235, 2009. ISSN: 00431354, DOI: 10.1016/j.watres.2009.08.041.

AMOS, S. A.; DAVEY, K. R.; THOMAS, C. J. A comparison of predictive models for the combined effect of UV dose and solids concentration on disinfection kinetics of Escherichia coli for potable water production. *Process Safety and Environmental Protection*, [s.l.], v. 79, nº 3, p. 174–182, 2001. ISSN: 09575820, DOI: 10.1205/09575820150511957.

ANSYS. ANSYS Fluent Theory Guide V. 14.5. *ANSYS Inc*, [s.l.], 2012.

AWAD, C. Enhancing the Solar Water Disinfection (SODIS) Method Using a Fresnel Lens. - UC Riverside, 2012.

BAIRD, R. et al. Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater. *American Public Health Association*, [s.l.], v. 23, 2017. DOI: https://doi.org/10.2105/SMWW.2882.219.

BANDALA, E. R.; ESTRADA, C. Comparison of solar collection geometries for application to photocatalytic degradation of organic contaminants. *Journal of Solar Energy Engineering, Transactions of the ASME*, [s.l.], v. 129, nº 1, p. 22–26, 2007. ISSN: 01996231, DOI: 10.1115/1.2390986.

BIRD, R. E.; HULSTROM, R. L.; LEWIS, L. J. TERRESTRIAL SOLAR SPECTRAL DATA SETS. Em: *Solar Energy*. [s.l.]: [s.n.], 1983.

BISCAYNE NATIONAL PARK; CAPE HATTERAS NATIONAL SEASHORE. Fresnel Lens. 2024. Disponível em: <https://www.nps.gov/articles/fresnel-lens.htm>. Acesso em: 15/fev./25.

BORDE, P. et al. Community challenges when using large plastic bottles for Solar Energy Disinfection of Water (SODIS). *BMC Public Health*, [s.l.], v. 16, nº 1, p. 1–8, 2016. ISSN: 14712458, DOI: 10.1186/s12889-016-3535-6.

BRAUN, A. M.; OLIVEROS, E.; MAURETTE, M. T. Photochemical Technology. *Wiley*, [s.l.], 1991. ISBN: 9780471926528.

BURCH, J.; THOMAS, K. E. An overview of water disinfection in developing countries and the potential for solar thermal water pasteurization. United States: [s.n.], 1998. Disponível em: <https://www.osti.gov/biblio/567490>. DOI: 10.2172/567490.

BUXTON, G. V et al. Critical Review of rate constants for reactions of hydrated electrons, hydrogen atoms and hydroxyl radicals (·OH/·O− in Aqueous Solution. *Journal of Physical and*

Chemical Reference Data, [s.l.], v. 17, nº 2, p. 513–886, 1988. ISSN: 0047-2689, DOI: 10.1063/1.555805.

CARVALHO, M. G.; FARIAS, T.; FONTES, P. Predicting Radiative Heat Transfer in Absorbing, Emitting, and Scattering Media Using the Discrete Transfer Method. *Fundamentals of Radiation Heat Transfer*, [s.l.], p. 17–26, 1991.

CASADO, C. Aplicación de técnicas de fluidodinámica computacional al modelado y simulacion de reactores fotocatalíticos a partir de parametros cinéticos intrínsecos. - URJC, 2017.

CASADO, C., MARÚGAN, J., TIMMERS, R., MUÑOZ, M., VAN GRIEKEN, R. Comprehensive multiphysics modeling of photocatalytic processes by computational fluid dynamics based on intrinsic kinetic parameters determined in a differential photoreactor. *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 310, p. 368–380, 2017. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2016.07.081.

CASADO, C.; YUNTA, V.; MARUGÁN, J. Evaluation of new photochemical systems for water disinfection by the integration of particle tracking into kinetic models for microbial inactivation. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, [s.l.], v. 11, nº 5, 2023. ISSN: 22133437, DOI: 10.1016/j.jece.2023.110574.

CASSANO, A. E. et al. Photoreactor Analysis and Design: Fundamentals and Applications. Em: *Ind. Eng. Chem. Res*. [s.l.]: [s.n.], 1995. Disponível em: <https://pubs.acs.org/sharingguidelines>.

CASTRO-ALFÉREZ, M. et al. Mechanistic model of the Escherichia coli inactivation by solar disinfection based on the photo-generation of internal ROS and the photo-inactivation of enzymes: CAT and SOD. *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 318, p. 214–223, 2017a. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2016.06.093.

CASTRO-ALFÉREZ, M.; POLO-LÓPEZ, M. I.; MARÚGAN, J.; FERNÁNDEZ-IBÁÑEZ, P. Mechanistic modeling of UV and mild-heat synergistic effect on solar water disinfection. *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 316, p. 111–120, 2017b. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2017.01.026.

CHAÚQUE, B. J. M. et al. Why do low-cost point-of-use water treatment technologies succeed or fail in combating waterborne diseases in the field? A systematic review. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, [s.l.], v. 11, nº 5, 2023. ISSN: 22133437, DOI: 10.1016/j.jece.2023.110575.

CHENG, P. Two-Dimensional Radiating Gas Flow by a Moment Method. *AIAA Journal*, [s.l.], p. 1662–1664, 1964.

CHOONG, W. S.; HO, Z. Y.; BAHAR, R. Solar Desalination Using Fresnel Lens as Concentrated Solar Power Device: An Experimental Study in Tropical Climate. *Frontiers in Energy Research*, [s.l.], v. 8, 2020. ISSN: 2296598X, DOI: 10.3389/fenrg.2020.565542.

CHUI, E. H.; RAITHBY, G. D. Computation of Radiant Heat Transfer on a Non-Orthogonal Mesh Using the Finite-Volume Method. *Numerical Heat Transfer*, [s.l.], p. 269–288, 1993.

CRAIG, K. J. et al. Finite-volume ray tracing using Computational Fluid Dynamics in linear focus CSP applications. *Applied Energy*, [s.l.], v. 183, p. 241–256, 2016. ISSN: 03062619, DOI: 10.1016/j.apenergy.2016.08.154.

DALRYMPLE, O. K. et al. Applied Catalysis B : Environmental A review of the mechanisms and modeling of photocatalytic disinfection. *"Applied Catalysis B, Environmental"*, [s.l.], v. 98, nº 1–2, p. 27–38, 2010. ISSN: 0926-3373, DOI: 10.1016/j.apcatb.2010.05.001.

D'ARC DE FÁTIMA PALHARES, D. et al. Numerical-experimental evaluation of FRESNEL lens heating dynamics. *Heat and Mass Transfer/Waerme- und Stoffuebertragung*, [s.l.], v. 56, nº 12, p. 3147–3166, 2020. ISSN: 14321181, DOI: 10.1007/s00231-020-02924-8.

DESSIE, A. et al. Solar disinfection: an approach for low-cost household water treatment technology in Southwestern Ethiopia. [s.l.]: [s.n.], 2014. Disponível em: <http://www.ijehse.com/content/12/1/25>.

EGGER, J. R. Use of Fresnel lenses in optical systems: some advantages and limitations. *Optical Systems in Engineering*, [s.l.], 1979.

ESPINOZA, J. C. et al. The new record of drought and warmth in the Amazon in 2023 related to regional and global climatic features. *Scientific Reports*, [s.l.], v. 14, nº 1, 2024. ISSN: 20452322, DOI: 10.1038/s41598-024-58782-5.

FALSANISI, D. et al. Effect of Suspended Particles on Disinfection of a Physicochemical Municipal Wastewater with Peracetic Acid. [s.l.]: [s.n.], 2008. Disponível em: <https://iwaponline.com/wqrj/article-pdf/43/1/47/229446/wqrjc0430047.pdf>.

FENDRICH, M. A. et al. Solar concentration for wastewaters remediation: A review of materials and technologies. *Applied Sciences (Switzerland)*, [s.l.], v. 9, nº 1, 2018. ISBN: 3904612816, ISSN: 20763417, DOI: 10.3390/app9010118.

FREITAS, F. G.; MAGNABOSCO, A. L. Futuro em risco Efeitos da falta de saneamento na vida de grávidas, crianças e adolescentes. [s.l.]: [s.n.], 2024.

GARCÍA-GIL, Á. et al. Novel procedure for the numerical simulation of solar water disinfection processes in flow reactors. *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 376, nº October 2018, p. 120194, 2019. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2018.10.131.

GARCÍA-GIL, Á.; ABELEDO-LAMEIRO, M. J. et al. Kinetic modeling of the synergistic thermal and spectral actions on the inactivation of Cryptosporidium parvum in water by sunlight. *Water Research*, [s.l.], v. 185, 2020. ISSN: 18792448, DOI: 10.1016/j.watres.2020.116226.

GARCÍA-GIL, Á.; MARTÍNEZ, A. et al. Kinetic modeling of the synergistic thermal and spectral actions on the inactivation of viruses in water by sunlight. *Water Research*, [s.l.], v. 183, p. 116074, 2020. ISSN: 00431354, DOI: 10.1016/j.watres.2020.116074.

GARCÍA-GIL, Á.; VALVERDE, R. et al. Solar water disinfection in high-volume containers: Are naturally occurring substances attenuating factors of radiation? *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 399, nº May, p. 125852, 2020. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2020.125852.

GENG, J. et al. A Numerical Case Study of Particle Flow and Solar Radiation Transfer in a Compound Parabolic Concentrator (CPC) Photocatalytic Reactor for Hydrogen Production. *Catalysts*, [s.l.], v. 14, nº 4, 2024. ISSN: 20734344, DOI: 10.3390/catal14040237.

GOLLI, A. EL et al. Parabolic trough concentrator design, characterization, and application: solar wastewater purification targeting textile industry dyes and pharmaceuticals—techno-economic study. *Euro-Mediterranean Journal for Environmental Integration*, [s.l.], 2024. ISSN: 23657448, DOI: 10.1007/s41207-024-00531-1.

GÓMEZ-COUSO, H. et al. Speeding up the solar water disinfection process (SODIS) against Cryptosporidium parvum by using 2.5l static solar reactors fitted with compound parabolic concentrators (CPCs). *Acta Tropica*, [s.l.], v. 124, nº 3, p. 235–242, 2012. ISSN: 0001706X, DOI: 10.1016/j.actatropica.2012.08.018.

GUEYMARD, C. SMARTS2, A Simple Model of the Atmospheric Radiative Transfer of Sunshine: Algorithms and performance assessment Simple Model for the Atmospheric Radiative Transfer of Sunshine (SMARTS2) Algorithms and performance assessment. [s.l.]: [s.n.], 1995.

GUTIÉRREZ-ALFARO, S. et al. Accelerating the process of solar disinfection (SODIS) by using polymer bags. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, [s.l.], v. 92, nº 2, p. 298–304, 2017. DOI: https://doi.org/10.1002/jctb.5005.

HENRIKSEN, T. et al. ULTRAVIOLET-RADIATION and SKIN CANCER. EFFECT OF AN OZONE LAYER DEPLETION. *Photochemistry and Photobiology*, [s.l.], v. 51, nº 5, p. 579–582, 1990. DOI: https://doi.org/10.1111/j.1751-1097.1990.tb01968.x.

JENSEN, J. N. Disinfection model based on excess inactivation sites: Implications for linear disinfection curves and the Chick-Watson dilution coefficient. *Environmental Science and Technology*, [s.l.], v. 44, nº 21, p. 8162–8168, 2010. ISSN: 0013936X, DOI: 10.1021/es101818z.

KADDOURA, M. F.; ZEAITER, J. Application of thermal energy storage with point focus Fresnel lens concentrator: Numerical and experimental analysis. *Journal of Energy Storage*, [s.l.], v. 26, nº September, p. 101008, 2019. ISSN: 2352152X, DOI: 10.1016/j.est.2019.101008.

KEHOE, S. C. et al. EFFECT OF AGITATION, TURBIDITY, ALUMINIUM FOIL REFLECTORS AND CONTAINER VOLUME ON THE INACTIVATION EFFICIENCY OF BATCH-PROCESS SOLAR DISINFECTORS. Em: *Wat. Res*. [s.l.]: [s.n.], 2001.

LUZI, S. et al. Solar Water Disinfection - A guide for the application of SODIS. [s.l.]: [s.n.], 2016. ISBN: 9783906484594.

MARTÍNEZ-GARCÍA, A. et al. Assessment of a pilot solar V-trough reactor for solar water disinfection. *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 399, nº March, p. 125719, 2020. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2020.125719.

MARTINS, M. P. B. et al. Solar Pyrolysis of Spirulina platensis Assisted by Fresnel Lens Using Hydrocalumite-Type Precursors. *Energies*, [s.l.], v. 15, nº 20, 2022. ISSN: 19961073, DOI: 10.3390/en15207590.

MCCLELLAN, J. N. Modeling Chlorine Decay and Chlorination By-product Formation in Water Treatment and Distribution. - University of Massachusetts, 2000.

MCGUIGAN, K. G. et al. Solar water disinfection (SODIS): A review from bench-top to roof-top. *Journal of Hazardous Materials*, [s.l.], v. 235–236, p. 29–46, 2012. ISSN: 03043894, DOI: 10.1016/j.jhazmat.2012.07.053.

MEGERSA, M. et al. The use of indigenous plant species for drinking water treatment in developing countries: a review. *Journal of Biodiversity and Environmental Sciences*, [s.l.], v. 5, nº 3, p. 269–281, 2014. ISBN: 0000000000000.

MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA Journal*, [s.l.], v. 32, nº 8, p. 1598–1605, 1994. ISSN: 00011452, DOI: 10.2514/3.12149.

MOGHIMI, M. A.; CRAIG, K. J.; MEYER, J. P. A novel computational approach to combine the optical and thermal modelling of Linear Fresnel Collectors using the finite volume method. *Solar Energy*, [s.l.], v. 116, p. 407–427, 2015. ISSN: 0038092X, DOI: 10.1016/j.solener.2015.04.014.

MORENO, J.; CASADO, C.; MARUGÁN, J. Improved discrete ordinate method for accurate simulation radiation transport using solar and LED light sources. *Chemical Engineering Science*, [s.l.], v. 205, p. 151–164, 2019. ISSN: 00092509, DOI: 10.1016/j.ces.2019.04.034.

MORENO-SANSEGUNDO, J. et al. SODIS potential: A novel parameter to assess the suitability of solar water disinfection worldwide. *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 419, 2021. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2021.129889.

MORENO-SANSEGUNDO, J.; CASADO, C.; MARUGÁN, J. Enhanced numerical simulation of photocatalytic reactors with an improved solver for the radiative transfer equation. *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 388, nº January, p. 124183, 2020. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2020.124183.

MORTAZAVI, S. M.; MALEKI, A. A review of solar compound parabolic collectors in water desalination systems. *International Journal of Modelling and Simulation*, [s.l.], v. 00, nº 00, p. 1–16, 2019. ISSN: 19257082, DOI: 10.1080/02286203.2019.1626539.

N. G. SHAH. A New Method of Computation of Radiant Heat Transfer in Combustion Chambers. - Imperial College of Science and Technology, 1979.

NAGHAVI, M. R.; JALALI, A.; RAISEE, M. Uncertainty quantification and sensitivity analysis of an ultraviolet water disinfection photo-reactor. *Chemical Engineering Science*, [s.l.], v. 245, 2021. ISSN: 00092509, DOI: 10.1016/j.ces.2021.116830.

NAKADA, L. Y. K.; URBAN, R. C. Priority areas for the use of solar water disinfection (SODIS) in Brazil: a spatial approach. *Journal of Water Sanitation and Hygiene for Development*, [s.l.], v. 14, nº 10, p. 950–962, 2024. ISSN: 24089362, DOI: 10.2166/washdev.2024.129.

NICODEM, D. E.; AQUILERA, O. M. V. STANDARDIZATION OF THE POTASSIUM FERRIOXALATE ACTINOMETER OVER THE TEMPERATURE RANGE 5-80 "C. Em: *Journal of Photochemistry*. [s.l.]: [s.n.], 1983.

PALHARES, D. D. de F. Decomposição térmica de cascas de ovos para produção de cal a partir da concentração solar com lentes de Fresnel. - Universidade Federal de Uberlândia, 2022.

PERALTA MUNIZ MOREIRA, R.; LI PUMA, G. Multiphysics Computational Fluid-Dynamics (CFD) Modeling of Annular Photocatalytic Reactors by the Discrete Ordinates Method (DOM) and the Six-Flux Model (SFM) and Evaluation of the Contaminant Intrinsic Kinetics Constants. *Catalysis Today*, [s.l.], v. 361, p. 77–84, 2021. ISSN: 09205861, DOI: 10.1016/j.cattod.2020.01.012.

PRADO, G. O. Concepção e Avaliação de Concentradores Solares do Tipo Disco e Lente de Fresnel para Dessalinização de Água. [s.l.], p. 179, 2015a.

PRADO, G. O.; VIEIRA, L. G. M.; DAMASCENO, J. J. R. Solar dish concentrator for desalting water. *Solar Energy*, [s.l.], v. 136, p. 659–667, 2016. ISSN: 0038092X, DOI: 10.1016/j.solener.2016.07.039.

QI, N. et al. CFD modelling of hydrodynamics and degradation kinetics in an annular slurry photocatalytic reactor for wastewater treatment. *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 172, nº 1, p. 84–95, 2011. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2011.05.068.

RAITHBY, G. D.; CHUI, E. H. A Finite-Volume Method for Predicting a Radiant Heat Transfer in Enclosures with Participating Media. *J. Heat Transfer.*, [s.l.], p. 415–423, 1990.

RASHEED, F. A.; ALKARADAGHI, K.; AL-ANSARI, N. The Potential of Moringa oleifera Seed in Water Coagulation-Flocculation Technique to Reduce Water Turbidity. *Water, Air, and Soil Pollution*, [s.l.], v. 234, nº 4, 2023. ISSN: 15732932, DOI: 10.1007/s11270-023-06238-3.

RATAJCZAK, J. Spectral distributions of halogen and xenon lamps. *Wydawnictwo PAK*, [s.l.], v. 59, p. 1029–1031, 2013.

SANSOM, C. et al. Concentrating Fresnel lens technology for thermal desalination. Em: *AIP Conference Proceedings*. [s.l.]: American Institute of Physics Inc., 2019. ISBN: 9780735418660, ISSN: 15517616, DOI: 10.1063/1.5117767.

SIEGEL, R.; HOWELL, J. R. Thermal Radiation Heat Transfer. Washington DC.: [s.n.], 1992.

SIERRA, C.; AZQUEZ, A. J. V. ´. High solar energy concentration with a Fresnel lens. *Journal of Material Science*, [s.l.], v. 40, p. 1339–1343, 2005.

SILVARES, A. F. de M. Desenvolvimento experimental e simulação matemática do processo de pré-polimerização fotoiniciada do metacrilato de metila (MMA). - Universidade de São Paulo, 2006.

SNISA. Abastecimento de Água. 2022. Disponível em: <https://www.gov.br/cidades/pt-br/acesso-a-informacao/acoes-e-programas/saneamento/snis/painel/ab>. Acesso em: 08/out./24.

SOBHANI, H.; SHOKOUHMAND, H. Effects of number of low-pressure ultraviolet lamps on disinfection performance of a water reactor. *Journal of Water Process Engineering*, [s.l.], v. 20, p. 97–105, 2017. ISSN: 22147144, DOI: 10.1016/j.jwpe.2017.08.021.

SONG, J. J. X.; OGUMA, K.; TAKIZAWA, S. Inactivation kinetics of 280 nm UV-LEDs against Mycobacterium abscessus in water. *Scientific Reports*, [s.l.], v. 13, nº 1, 2023. ISSN: 20452322, DOI: 10.1038/s41598-023-29338-w.

TAO, Z. et al. Kinetic studies on enzyme-catalyzed reactions: Oxidation of glucose, decomposition of hydrogen peroxide and their combination. *Biophysical Journal*, [s.l.], v. 96, nº 7, p. 2977–2988, 2009. ISSN: 15420086, DOI: 10.1016/j.bpj.2008.11.071.

VIVAR, M. et al. Separating the UV and thermal components during real-time solar disinfection experiments: The effect of temperature. *Solar Energy*, [s.l.], v. 146, p. 334–341, 2017. ISSN: 0038092X, DOI: 10.1016/j.solener.2017.02.053.

WHO. EVALUATING HOUSEHOLD WATER TREATMENT OPTIONS: Health-based targets and microbiological performance specifications. WHO (Org.). Em: *1*. Geneva: WHO, 2011.

XIA, Y. et al. Solar disinfection of fungal spores in water: Kinetics, influencing factors, mechanisms and regrowth. *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 428, 2022. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2021.132065.

XIE, W. T. et al. Concentrated solar energy applications using Fresnel lenses: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, [s.l.], v. 15, nº 6, p. 2588–2606, 2011. ISSN: 13640321, DOI: 10.1016/j.rser.2011.03.031.

XIE, W. T.; DAI, Y. J.; WANG, R. Z. Numerical and experimental analysis of a point focus solar collector using high concentration imaging PMMA Fresnel lens. *Energy Conversion and Management*, [s.l.], v. 52, nº 6, p. 2417–2426, 2011. ISSN: 01968904, DOI: 10.1016/j.enconman.2010.12.048.

ZALAZAR, C. S. et al. The extended use of actinometry in the interpretation of photochemical reaction engineering data. *Chemical Engineering Journal*, [s.l.], v. 109, nº 1, p. 67–81, 2005. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2005.03.011.

ZHAO J. M. AND LIU, L. H. Radiative Transfer Equation and Solutions. Em: KULACKI, F. A. (Org.). *Handbook of Thermal Science and Engineering*. Cham: Springer International Publishing, 2017. p. 1–46. ISBN: 978-3-319-32003-8, DOI: 10.1007/978-3-319-32003-8_56-1.

APÊNDICE A – UDF PARA OBTENÇÃO DAS COORDENADAS DOS CENTROIDES DE CADA ELEMENTO DE CONTROLE DO DOMÍNIO

```
#include "udf.h"
#include <stdio.h>

DEFINE_ON_DEMAND(getCellCentroids)
{
  Domain *domain;
  Thread *thread;
  cell_t cell;
  real centroid[ND_ND];
  int id;
  FILE *file;

  /* Especificar o caminho e o nome do arquivo de saída CSV */
  const char *filename = "cell_centroids.csv";

  /* Get the domain pointer */
  domain = Get_Domain(1);  /* Considerando que o domínio 3D tem a ID 1 */

  /* Abre o arquivo CSV para escrever as coordenadas */
  file = fopen(filename, "w");
  if (file == NULL)
  {
    Message("Erro ao abrir o arquivo.\n");
    return;
  }

  /* Percorre todas as threads do domínio */
  thread_loop_c(thread, domain)
  {
    /* Percorre todas as células da thread */
    begin_c_loop(cell, thread)
```

```
            {
              /* Acessa as coordenadas do centroide da célula */
              C_CENTROID(centroid, cell, thread);

              /* Pega a ID da célula */
              id = C_UDMI(cell, thread, 0);  /* Armazena o ID do centroide com uma user-defined memory */

              /* Escreve as coordenadas do centroide no arquivo CSV */
              fprintf(file, "%d, %lf, %lf, %lf\n", id, centroid[0], centroid[1], centroid[2]);
            }
            end_c_loop(cell, thread)
          }

          /* Fecha o arquivo CSV */
          fclose(file);

          Message("As coordenadas dos centroides das células foram salvas em '%s'.\n", filename);
}
```

APÊNDICE B – UDF PARA SIMULAÇÃO DO PERFIL DE DIREÇÃO DOS RAIOS DE LUZ (SISTEMAS LENTE LINEAR E PONTUAL)

```
#include "udf.h"

DEFINE_PROFILE(Irradiation_ni, thread, position)

{
        face_t f;

        real x[3]; /* Vetor de coordenadas do centróide da face do elemento (1-direção X; 2-direção Y;3-direção Z)*/
        real B_n[3]; /* Vetor de direção do raio de luz */
        real T_n[3]; /* Vetor de coordenadas do ponto focal */

        T_n[0]=0;  /* Coordenada x do ponto focal*/
        T_n[1]=0;  /* Coordenada y do ponto focal*/
        T_n[2]=0;  /* Coordenada z do ponto focal*/


        begin_f_loop(f, thread)
                {
                        F_CENTROID(x, f, thread);
                        B_n[0] = T_n[0]-x[0];
                        B_n[1] = T_n[1]-x[1];
                        B_n[2] = T_n[2]-x[2];
                        F_PROFILE(f, thread, position) = B_n[2];
                }
   end_f_loop(f, thread) }
```

APÊNDICE C – UDF PARA IMPORTAÇÃO DE CAMPO DE RADIAÇÃO INCIDENTE 2D EM GEOMETRIA 3D (SISTEMA LENTE LINEAR)

```
#include "udf.h"
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <string.h>

DEFINE_ON_DEMAND (radiation_initialize)
{
   Thread *t;
   cell_t c;
   real xc[ND_ND];
   Domain *domain;
   char file_path[] = "C:XXXX\\YYYY.csv"; /*caminho do arquivo csv que contém as coordenadas xyz, e respectiva radiação incidente (W/m2) de cada centroide de elemento*/
   FILE *csv_file;
   char line[1024];
   char *token;
   real x_target, y_target, z_target, intensity_target;

   char udm_name[256] = "Radiation Intensity";

   domain = Get_Domain(1); /* Especificar o correto ID do domínio - neste caso 1 (volume do reator tubular)*/

   if (domain == NULL)
   {
      Message("Erro ao obter o ponteiro.\n");
      return;
   }

   csv_file = fopen(file_path, "r");
   if (csv_file == NULL)
```

```
{
   Message("Erro ao abrir o arquivo CSV. Por favor cheque o caminho do arquivo.\n");
   return;
}

Message("Lendo o arquivo CSV...\n");

fgets(line, sizeof(line), csv_file);

while (fgets(line, sizeof(line), csv_file))
{
   token = strtok(line, ",");
   if (token == NULL)
      break;
   x_target = atof(token);

   token = strtok(NULL, ",");
   if (token == NULL)
      break;
   y_target = atof(token);

   token = strtok(NULL, ",");
   if (token == NULL)
      break;
   z_target = atof(token);

   token = strtok(NULL, ",");
   if (token == NULL)
      break;
   intensity_target = atof(token);

   /* Percorre todas as threads do domínio */
   thread_loop_c(t, domain)
```

```
    {
      /* Percorre as células da thread atual */
      begin_c_loop(c, t)
      {
        C_CENTROID(xc, c, t);

        if (fabs(xc[0] - x_target) < 1e-4 && fabs(xc[1] - y_target) < 1e-4 && fabs(xc[2] - z_target) < 1e-4)
        {
          /* Atribui o valor da radiação incidente à UDM (user-defined memory) usando um nome definido*/
          C_UDMI(c, t, 0) = intensity_target;
        }
      }
      end_c_loop(c, t)
    }

    Message("Atribuindo a radiação incidente ao ponto (%f, %f, %f)\n", x_target, y_target, z_target);
  }

  fclose(csv_file);

  Message("Execução da UDF terminou.\n");
}
```

APÊNDICE D – UDF PARA RECIRCULAÇÃO DAS ESPÉCIES QUÍMICAS (SISTEMA LENTE LINEAR)

```
#include "udf.h"
#include "unsteady.h"
static int last_ts = -1;


DEFINE_ADJUST(diluicao, domain)
{
    face_t f; /*Definição de variáveis, número de espécies = 2*/
    real mfrac_in[2]= {0.0, 0.0};
    real mfrac_out[2]= {0.0, 0.0};
    real mfrac[2]= {0.0, 0.0};
    int nfaces_in = 1188;
    int nfaces_out = 1188;
    int ID1 = 6;
    int ID2 = 5;
    int i;
    int a;
    real time_prev, time_cur;
    real tao = 406; /*definição do tempo espacial em segundos*/


    Thread *thread1 = Lookup_Thread(domain, ID1); /*identificação e atribuição dos IDs das faces de entrada e saída do tubo*/
    Thread *thread2 = Lookup_Thread(domain, ID2);
    time_prev = PREVIOUS_TIME;
    time_cur = CURRENT_TIME;
    Message("time_prev: %f\n", time_prev);
    Message("time_cur: %f\n", time_cur);
    Message("time2: %i\n", last_ts);

      /*Cálculo da concentração média de cada espécie na saída do reator*/
```

```
begin_f_loop(f, thread1)
    {
    mfrac_in[0] = mfrac_in[0] + F_YI(f,thread1,0);
    mfrac_in[1] = mfrac_in[1] + F_YI(f,thread1,1);

    }
end_f_loop(f,thread1)

    mfrac_in[0] = mfrac_in[0]/nfaces_in;
    mfrac_in[1] = mfrac_in[1]/nfaces_in;


    Message("YFeIII_Inlet: %E\n", mfrac_in[0]);
    Message("YFeII_Inlet: %E\n", mfrac_in[1]);



begin_f_loop(f, thread2)
    {
    mfrac_out[0] = mfrac_out[0] + F_YI(f,thread2,0);
    mfrac_out[1] = mfrac_out[1] + F_YI(f,thread2,1);

    }
end_f_loop(f,thread2)


    mfrac_out[0] = mfrac_out[0]/nfaces_out;
    mfrac_out[1] = mfrac_out[1]/nfaces_out;



    Message("YFeIII_Outlet: %E\n", mfrac_out[0]);
    Message("YFeII_Outlet: %E\n", mfrac_out[1]);
```

```
        /*Cálculo da concentração de entrada das espécies após a mistura no tanque de armazenamento*/
   if(time_cur>last_ts)
   {
      mfrac[0] = (mfrac_out[0] * (time_cur-time_prev) + tao * mfrac_in[0]) / (time_cur-time_prev+tao);
      mfrac[1] = (mfrac_out[1] * (time_cur-time_prev) + tao * mfrac_in[1]) / (time_cur-time_prev+tao);



      Message("Y_FeIII_Diluido: %E\n", mfrac[0]);
      Message("Y_FeII_Diluido: %E\n", mfrac[1]);



        /*Armazenamento das concentrações calculadas nas UDMIs*/
      begin_f_loop(f, thread1)
      {
        F_UDMI(f,thread1,0) = mfrac[0];/*índices do mfrac são diferentes do indice do F_UDMI*/
        F_UDMI(f,thread1,1) = mfrac[1];
      }
      end_f_loop(f,thread1)
      last_ts = time_cur;
}
}
```

```
#include "udf.h"
#include "unsteady.h"

DEFINE_PROFILE(dilutedFeIII,thread1,i) /*macro para definição das condições de contorno na entrada do reator tubular*/
{
   face_t f;
   int time;
   time = CURRENT_TIME;

   if(time==1)
   {
      begin_f_loop(f, thread1)
      {
         F_PROFILE(f,thread1,i) = 0.00223347;
      }
      end_f_loop(f,thread1)
   }
   else
   {
      begin_f_loop(f,thread1)
      {
      F_PROFILE(f,thread1,i) = F_UDMI(f,thread1,0);
      }
      end_f_loop(f,thread1)
   }
}

DEFINE_PROFILE(dilutedFeII,thread1,i) /*Para cada espécie uma macro igual a esta deve ser desenvolvida, indicando os valores para um tempo de simulação = 1s, ou seja, no início da simulação*/
{
   face_t f;
```

```
    int time;
    time = CURRENT_TIME;

    if(time==1)
    {
        begin_f_loop(f, thread1)
        {
            F_PROFILE(f,thread1,i) = 0.;
        }
        end_f_loop(f,thread1)
    }
    else
    {
        begin_f_loop(f,thread1)
        {
        F_PROFILE(f,thread1,i) = F_UDMI(f,thread1,1);
        }
        end_f_loop(f,thread1)
    }
}
```

APÊNDICE E – UDF PARA MODELAGEM DA CINÉTICA DA ACTINOMETRIA COM FERRIOXALATO DE POTÁSSIO

```
#include"udf.h"
#include"sg_disco.h"
#include <math.h>
#define C_DO_IRRAD(c,t,nb)C_STORAGE_R_XV(c,t,SV_DO_IRRAD,nb)

real Na = 6.022e23; /*Avogadro's Number (Photon Einstein-1)*/

real Ep_uva = 6.626e-34*2.998e8/360e-9; /*% Photon energy = h.c/lambda_average (J photon-1)-uva e uv-vis 320 a 400*/
real Ep_vis1 = 6.626e-34*2.998e8/418e-9; /*% Photon energy = h.c/lambda_average (J photon-1)-uva e uv-vis 400 a 436*/
real Ep_vis2 = 6.626e-34*2.998e8/475e-9; /*% Photon energy = h.c/lambda_average (J photon-1)-uva e uv-vis 436 a 550*/

real uva = 0.16;
real vis1 = 0.13;
real vis2 = 0.71;

real phi_uva = 1.2;
real phi_vis1 = 1.04;
real phi_vis2 = 0.54;

real alpha_uva = 2145.0; /* cm2/mol */
real alpha_vis1 = 199.12; /* cm2/mol */
real alpha_vis2 = 1.02; /* cm2/mol */

real yFe3 = 0.; /* concentração de íons Fe3+ em termos de fração mássica */
real IncRad = 0.; /* W/m2 */

real G_uva; /* radiação em einstein.cm-2.s-1  */
real G_vis1; /* radiação em einstein.cm-2.s-1  */
```

```
real G_vis2; /* radiação em einstein.cm-2.s-1  */

real FeIII;

DEFINE_VR_RATE(cinetica,c,t,r,wk,yk,rr,rr_t)
{
        IncRad = C_UDMI(c, t, 0)/10000; /*Acesso a radiação incidente calculada cm2*/
   G_uva = ((uva*IncRad)/(Ep_uva*Na));
        G_vis1 = ((vis1*IncRad)/(Ep_vis1*Na));
        G_vis2 = ((vis2*IncRad)/(Ep_vis2*Na));

        yFe3 = yk [0];
        FeIII = yFe3*7870/55.845; /* kmol/m3 */

*rr =
(2*phi_uva*alpha_uva*(FeIII)*G_uva+2*phi_vis1*alpha_vis1*(FeIII)*G_vis1+2*phi_vis2*
alpha_vis2*(FeIII)*G_vis2)*(5/0.2); /*Cinética de Silvares, 2006 adaptada – termo (5/0.2)
utilizado para contabilizar apenas o volume da solução irradiada (0,2L)*/
        *rr_t = *rr; /*Velocidade de reação se o escoamento é turbulento*/
```

APÊNDICE F – UDF PARA MODELAGEM DA CINÉTICA DA DESINFECÇÃO DE *E.COLI* (CASTRO-ALFÉREZ et al., 2017a;GARCÍA-GIL et al., 2019)

```
#include "udf.h"
#include "sg_disco.h"

#define C_DO_IRRAD(c,t,nb) C_STORAGE_R_XV(c,t,SV_DO_IRRAD,nb)

real k3 = 1E9;          /* M-1*s-1 */
real k6 = 2.7E7;        /* M-1*s-1 */
real k8 = 9E5;          /* M-1*s-1 */
real k9 = 1.5E7;        /* cm3*Einstein-1*/
real k10 = 1.56E6;      /* cm3*Einstein-1 */
real k11 = 2.04E4;      /* s-1 */
real k12 = 1.36E5;      /* s-1 */
real k13 = 8.03E15;     /* M-2*s-1 */
real g1 = 5.4E-6;       /* M*s-1 */
real g2 = 1.14E5;       /* M*cm3/einstein */
real g3 = 1.4E-3;       /* s-1 */
real kSOD = 800;        /* M-1*cm-1 */
real kCAT = 267718;     /* M-1*cm-1 */
real kNADH = 6220;      /* M-1*cm-1 at 340 nm */

real IncRad = 0.;       /* W/m2 */
real NADH = 2.5E-4;     /* M */

/*
CAT_0 = 9.2E-5 M
SOD_0 = 2E-5 M
H2O2_0 = 2E-8 M
B_0 = 1.66E-15 M
M=mol/Lcell */

real b;
real H202;
real SOD;
real CAT;
real yb;
real yH2O2;
real ySOD;
real yCAT;
real RV;
real coeff_NADH;

DEFINE_VR_RATE(cinetica, c, t, r, wk, yk, rr, rr_t)
{
   real temp1;

   ySOD = yk[2];
```

```
yCAT = yk[4];
yb = yk[6];
yH2O2 = yk[0];

IncRad = C_UDMI(c, t, 0); /*W/m2*/

b = yb * 998.2 / 1.1824E11;    /* kmol/m3 */
RV = 1.96E-16*1.9637E-7*998.2/1.1824E11*6.023E23;    /* Lcell/Ltotal */
H202 = yH2O2 * 998.2 / 18.0152 / RV;    /* mol/Lcell */
SOD = ySOD * 998.2 / 32500 / RV;    /* mol/Lcell */
CAT = yCAT * 998.2 / 250000 / RV;    /* mol/Lcell */

coeff_NADH = kNADH * NADH;    /* (1/cm) */

temp1 = (g1 + g2 * IncRad * 2.84E-10* coeff_NADH) / (k3 * SOD + k12); /*2.84e-10 é
utilizado para converter a radiação para fótons*/

if (!strcmp(r->name, "reaction-4"))
        {

        *rr = (k13*((2*g3*H202)/(k6*H202+k11))*temp1*b*(1/0.2));  /*Kmol/m3 s*/

        *rr_t = *rr;

        }

        else if (!strcmp(r->name, "reaction-3"))
        {

        *rr          =          ((0.5*k3*SOD*temp1)-((g3*k6*pow(H202,2.0))/(k11+k6*H202))-
((g3+k8*CAT)*H202))*RV; /*Kmol/m3 s*/

        *rr_t = *rr;

        }

        else if (!strcmp(r->name, "reaction-1"))
        {

        *rr = (k9*kCAT*IncRad*2.92E-10*pow(CAT,2.0))*RV;          /*Kmol/m3          s*/
/*2.92e-10 é utilizado para converter a radiação para fótons*/

        *rr_t = *rr;

        }

        else if (!strcmp(r->name, "reaction-2"))
        {
```

```
        *rr = (k10*kSOD*IncRad*2.92E-10*pow(SOD,2.0))*RV;        /*Kmol/m3        s*/
/*2.92e-10 é utilizado para converter a radiação para fótons*/

        *rr_t = *rr;

        }

   *rr_t = *rr;
        }
```