



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL
CURSO DE MESTRADO EM ENGENHARIA CIVIL

KESLEY ANTÔNIO SANTOS

**FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL ACOPLADA AO MÉTODO DOS
ELEMENTOS DISCRETOS PARA MODELAGEM DE WETLAND CONSTRUÍDO
SUBSUPERFICIAL HORIZONTAL**

Belo Horizonte, 2022

**FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL ACOPLADA AO MÉTODO DOS
ELEMENTOS DISCRETOS PARA MODELAGEM DE WETLAND CONSTRUÍDO
SUBSUPERFICIAL HORIZONTAL**

**Dissertação apresentada ao Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Civil do Centro
Federal de Educação Tecnológica de Minas
Gerais como requisito parcial para obtenção do
título de Mestre em Engenharia Civil.**

Orientador: Dr. Lineker Max Goulart Coelho

Coorientador: Dra. Hersília Andrade e Santos

Belo Horizonte, 2022

Santos, Kesley Antônio
S237f Fluidodinâmica computacional acoplada ao método dos elementos discretos para modelagem de Wetland construído subsuperficial horizontal / Kesley Antônio Santos. – 2022.
116 f. : il., gráfs, tabs., fotos.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Civil.
Orientador: Lineker Max Goulart Coelho.
Coorientadora: Hersília Andrade e Santos.
Bibliografia: f. 107-116.
Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Departamento de Engenharia Civil.

1. Pântanos construídos – Teses. 2. Fluidodinâmica computacional – Teses. 3. Método dos elementos discretos – Teses. 4. Simulação (Computadores) – Teses. 5. OpenFOAN (Programa de computador) – Modelos matemáticos – Teses. 6. LIGGGHTS (Software) – Modelos matemáticos – Teses. 7. CFDEMcoupling (Software) – Modelos matemáticos – Teses. I. Coelho, Lineker Max Goulart. II. Santos, Hersília Andrade e. III. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. Departamento de Engenharia Civil. IV. Título.

CDD 622.5

Dedico este trabalho ao meu pai, Olacir de Souza Santos,
in memoriam.

RESUMO

A fluidodinâmica computacional (CFD) é uma ferramenta que pode auxiliar nos estudos dos processos envolvidos no interior de *wetlands* construídos (WCs). No entanto, os métodos utilizados até então sacrificam detalhes importantes para uma análise aprofundada da hidrodinâmica desse sistema de tratamento de esgoto. O método dos elementos discretos (DEM) é uma abordagem aprimorada para modelagem do meio poroso e ainda não foi testado para WCs. Nesse trabalho a metodologia CFD-DEM foi introduzida e validada com dados experimentais de dois estudos de caso de WCs e compararam-se os resultados com a modelagem clássica do meio poroso de Darcy-Forchheimer. O modelo CFD-DEM demonstrou sua superioridade pelos índices estatísticos de Willmot (IC) e Pielke (D_{PIELKE}), sendo que os IC calculados o acoplamento foi de 0,89 e 0,87 ante 0,29 e 0,00 do modelo clássico. O modelo CFD-DEM obteve boa concordância com o teste de traçadores onde os tempos de detenção médio simulados foram de 2,18d e 4,45d ante 1,83d e 4,55d do experimental, respectivamente. O modelo proposto conseguiu classificar com precisão a eficiência hidráulica dos leitos. Além disso, no pós-processamento dos dados, o modelo CFD-DEM foi capaz de identificar anomalias no escoamento e aspectos que modelagem clássica não foi capaz de simular. A aplicação do acoplamento entre CFD e DEM será útil para o desenvolvimento de modelos capazes de realizar análises mais complexas da hidrodinâmica de WCs.

Palavras-chave: *Wetlands* construídos; Fluidodinâmica Computacional; Método dos Elementos Discretos; Modelagem computacional; Simulação; *OpenFOAM*®; *LIGGGHTS*®; *CFDEM@coupling*

ABSTRACT

Computational fluid dynamics (CFD) is a tool that can assist in studies of the processes involved in the interior of constructed wetlands (CWs). However, the approaches used so far sacrifice important details for an in-depth analysis of the hydrodynamics of this wastewater treatment system. The Discrete Element Method (DEM) is a sophisticated approach to modeling porous media and has not yet been tested for WCs. In this work, the CFD-DEM was introduced and validated with experimental data from two case studies of CWs and the results were compared with the classic porous medium modeling through Darcy-Forchheimer equation. The CFD-DEM model demonstrated its dexterity by the statistical indices of Willmot (IC) and Pielke (D_{PIELKE}). The IC for the coupling simulations was 0.89 and 0.87 against 0.29 and 0.00 of the classic modeling. The CFD-DEM model obtained good agreement with the tracer test where the simulated mean retention time were 2.18d and 4.45d compared to 1.83d and 4.55d for the experimental beds, respectively. The proposed model was able to accurately classify the hydraulic efficiency of the beds. In addition, in the post-processing data, the CFD-DEM model was able to identify anomalies in the flow and aspects that classical modeling was not able to simulate. The application of the coupling between CFD and DEM will be useful for the development of models capable of performing more complex analyses.

Key-words: Constructed Wetlands; Computational Fluid Dynamics; Discrete Element Method; Computational Modeling; Simulation; OpenFOAM®; LIGGGHTS®; CFDEM@coupling

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pela saúde e determinação para o cumprimento dessa etapa importante da minha carreira e por ter colocado pessoas importantes nessa caminhada. Um deles é o professor Dr. Lineker Max Goulart Coelho, exemplo de profissional no qual me espelharei daqui para frente. Sou grato pela maneira em que me orientou e pelos conhecimentos transmitidos durante esse trabalho. Agradeço também pela co-orientação da professora Dr^a. Hersília, pela sua contribuição durante as simulações e por seus comentários na redação do texto.

Aos membros da banca de qualificação e defesa, a Professora Karina Querne de Carvalho, a Professora Dr^a. Daniela Guzzon Sanagiotto e ao Professor Dr. Rogério Cabral de Azevedo por contribuírem para a melhoria do trabalho.

Aos demais professores e colegas do PPGEC, em especial a professora Dr^a Flávia Spitale e aos colegas Leo Maia e Laisa Carneiro pelo trabalho que desenvolvemos e Karina Vilaça pela amizade.

Ao CEFET-MG e a CAPES pelo suporte financeiro e manutenção do programa.

Agradeço aos meus pais e irmãos por torcerem por mim, principalmente ao meu pai, Olacir (*in memoriam*), que sempre me incentivou nos estudos e que infelizmente não poderá presenciar fisicamente na conclusão desse grau da minha formação.

Agradeço aos meus familiares que me apoiaram no desenvolvimento desse trabalho, em especial à tia Neuzi Santos por ter me abrigado em sua residência durante minha estadia em Belo Horizonte.

Por fim, agradeço a minha esposa, Jaqueline, por sempre acreditar em mim, por todo seu incentivo e por ter me acompanhado durante todos os períodos críticos. Peço perdão pelas noites em que te incomodei durante as simulações. Te amo.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Classificação dos <i>Wetlands</i> Construídos.....	23
Figura 2. Esquema de um <i>wetland</i> construído superficial.....	24
Figura 3. Esquema de um <i>wetland</i> construído subsuperficial horizontal.....	26
Figura 4. Esquema de um <i>wetland</i> construído subsuperficial vertical.....	28
Figura 5. Agentes responsáveis pelo tratamento de esgoto nos <i>wetlands</i> construídos.....	29
Figura 6. (a) <i>Phragmites australis</i> (b) <i>Typha spp.</i> (c) <i>Juncus spp.</i>	32
Figura 7. Curvas DTR para os modelos de escoamento ideal e escoamento não-ideal.....	34
Figura 8. Resposta do <i>wetland</i> construído horizontal ao processo de colmatção.....	36
Figura 9. Progressão dos estágios de acumulação de sólidos em <i>wetlands</i> construídos subsuperficiais horizontais.....	36
Figura 10. Fatores envolvidos no processo de colmatção.....	37
Figura 11. A interconectividade dos três elementos principais de uma análise CFD.....	42
Figura 12. Fluxograma de uma simulação DEM.....	44
Figura 13. Rotina de acoplamento entre CFD-DEM.....	46
Figura 14. Enquadramento metodológico da pesquisa.....	48
Figura 15. Fluxograma dos métodos de procedimentos.....	49
Figura 16. Representação esquemática do WC estudado por (a) Bandeiras (2009) e (b) Gikas <i>et al.</i> (2017).....	51
Figura 17. Esquema do algoritmo PISO.....	54
Figura 18. Fluxograma da simulação.....	55
Figura 19. Comparação entre os leitos experimentais de (a) Bandeiras (2009) (a) e (c) Gikas <i>et al.</i> (2017) (b) e a geometria tridimensional de (b) Bandeiras (2009) e (d) Gikas <i>et al.</i> (2017).....	56
Figura 20. Indicação do ponto central para o estudo de caso de (a) Bandeiras (2009) e de (b) Gikas <i>et al.</i> (2017).....	59
Figura 21. Pressão em ponto central para diferentes malhas para os estudos de caso de Bandeiras (2009).....	86
Figura 22. Pressão em ponto central para diferentes malhas para os estudos de caso de Gikas <i>et al.</i> (2017).....	86
Figura 23. Malha de volumes finitos para os estudos de caso de (a) Bandeiras (2009) e (b) Gikas <i>et al.</i> (2017).....	86

Figura 24. Curva de concentração-tempo do experimento e das simulações CFD-DEM e Darcy-Forchheimer para o estudo de caso de (a) Bandeiras (2009) e (b) Gikas et al. (2017)..	87
Figura 25. Mapa de cores para pressão em isométrico, perfil transversal e longitudinal para os estudos de caso Bandeiras (2009) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer.....	94
Figura 26. Mapa de cores para pressão em isométrico, perfil transversal e longitudinal para os estudos de caso de Gikas et al. (2017) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer.....	95
Figura 27. Mapa de cores para velocidade em isométrico, perfil transversal e longitudinal para os estudos de caso Bandeiras (2009) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer.....	97
Figura 28. Mapa de cores para velocidade em isométrico, perfil transversal e longitudinal para os estudos de caso Gikas <i>et al.</i> (2017) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer.....	98
Figura 29. Distribuição de zonas ativas/mortas para a configuração Entrada-Topo Saída-Fundo.....	99
Figura 30. Vetores de velocidade em isométrico, perfil transversal e corte longitudinal para os estudos de caso Bandeiras (2009) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer.....	100
Figura 31. Vetores de velocidade em isométrico, perfil transversal e cortes longitudinais para os estudos de caso Gikas <i>et al.</i> (2017) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer.....	101

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Energia requerida para diferentes tipos de sistemas de tratamento de esgoto.....	22
Tabela 2. Características dos <i>Wetlands</i> Construídos em escala de laboratório.....	50
Tabela 3. Variação do número de dispersão para os diferentes graus de dispersão.....	53
Tabela 4. Detalhes das malhas testadas para os estudos de caso.....	58
Tabela 5. Propriedades das partículas.....	60
Tabela 6. Erros e índices estatísticos para o IP02 de Bandeiras (2009) e para o WC de Gikas <i>et al</i> (2017).....	90
Tabela 7. Parâmetros hidrodinâmicos dos traçadores experimentais e sintéticos baseados nos estudos de Bandeiras (2009) e de Gikas <i>et al.</i> (2017).....	91

LISTA DE QUADROS

Quadro 1. Comparação entre os modelos caixa-preta para CWs, suas principais características e limitações.....	39
Quadro 2. Resumo das condições de contorno.....	57
Quadro 3. Parâmetros principais da simulação.....	57
Quadro 4. Configurações do roteiro de entrada.....	60
Quadro 5. Configurações do acoplamento CFD-DEM.....	61

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ASCE	<i>American Society of Civil Engineers</i>
ASM	<i>Activated Sludge Model</i>
CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
CEFET-MG	Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CSTR	<i>Continuous Stirred Tank Reactor</i>
DECA	Departamento de Engenharia Civil e Arquitectura
DEM	<i>Discrete Element Method</i>
DTR	Distribuição do tempo de residência
IC	Índice de Concordância de Willmot
IWA	<i>International Water Association</i>
JCR	<i>Journal Citation Report</i>
LAMMPS	<i>Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator</i>
LC-HRMS/MS	<i>Liquid chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry</i>
LIGGGHTS	<i>LAMMPS improved for general granular and granular heat transfer simulations</i>
MAE	Média dos erros absolutos
ME	Média dos erros
MSE	Média quadrática dos erros
OpenFOAM®	<i>Open Field Operation And Manipulation</i>
PFR	<i>Plug Flow Reactor</i>
PISO	<i>Pressure Implicit with Splitting of Operators</i>
RMSE	Raiz da média quadrática dos erros
RSM	<i>Regional Simulation Model</i>
SNIS	Sistema Nacional de Informação sobre Saneamento
SST	Sólidos suspensos totais
TES	Tanques-em-série
UBI	Universidade de Beira Interior
UNICEF	Fundo das Nações Unidas para a Infância
USDA	<i>United States Department of Agriculture</i>

USEPA	<i>United States Environmental Protection Agency</i>
VART	<i>Variable Residence Time</i>
VBA	<i>Visual Basic for Applications</i>
WCs	<i>Wetlands Construídos</i>
WCS	<i>Wetland Construído Superficial</i>
WCSH	<i>Wetland Construído Subsuperficial Horizontal</i>
WCSV	<i>Wetland Construído Subsuperficial Vertical</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

a_i^t	Vetor de aceleração no tempo (m^2/s)
B	Largura do leito (m)
CO_2	Dióxido de carbono
$C(t)$	Concentração do traçador no tempo (mg/l)
d	Número de dispersões
d_p	Diâmetro das partículas (m)
f	Termo geral para momento explícito
F_d	Forças do fluido agindo nas partículas (N)
F_i^n	Vetor da força normal (N)
F_i^t	Vetor da força resultante (N)
$F_{p,b}$	Outras forças (N), como as forças da gravidade, eletrostática e magnética que são aglomeradas nesse termo
$F_{p,f}$	Força de arraste exercida pelo fluido na partícula (N)
$F_{p,n}$	Força normal de contato das partículas (N)
$F_{p,t}$	Força tangencial de contato das partículas (N)
$F_{p,p}$	Força da pressão agindo na partículas (N)
$F_{p,v}$	Força viscosa agindo na partícula (N)
g	Vetor da gravidade (m/s^2)
H_2O_2	Peróxido de oxigênio
h	Altura do leito (m)
I_p	Matriz identidade da partícula
k	Permeabilidade do meio poroso (m/s)
K^n	Rigidez do contato
L	Comprimento do leito (m)
m	Massa do traçador utilizado pelo experimento (kg)
m_i	Matriz de inércia (kg)
m_p	Massa das partículas (kg)
n_i	Vetor normal
N	Número de tanques-em-série
p	Pressão (Pa)
P_{is}	Valor simulado

P_{io}	Valor observado
Q	Vazão efetiva (m^3/s)
$r_{p,c}$	Raio de contato da partícula (m)
Re_p	Número de Reynolds para escoamento granular
t	Tempo (s)
T	Valor do escalar passivo
t_{in}	Tempo de inserção do traçador no experimento (s)
t_m	Tempo de residência médio (d)
t_p	Tempo de pico do traçador (s)
$T_{p,r}$	Torque relativo das partículas (N.m)
u	Velocidade (m/s)
U	Velocidade do fluido (m/s)
U^n	Superposição entre as partículas
u_l	Velocidade do escoamento (m/s)
V_{cell}	Volume da célula CFD (m^3)
$v_i^{t+\Delta t/2}$	Velocidade em m/s no $t+\Delta t/2$ (s)
$v_i^{t-\Delta t/2}$	Velocidade em m/s no $t-\Delta t/2$ (s)
V_{med}	Velocidade média teórica (m/s)
α	Fração volumétrica
ε	Porosidade drenável do leito
θ	Tempo adimensional
μ	Viscosidade cinemática (m^2/s)
λ	Eficiência hidráulica
ρ	Densidade do fluido (kg/m^3)
σ_s	Desvio simulado
σ_o	Desvio observado
σ^2	Desvio da distribuição do tempo de residência
σ_θ^2	Desvio adimensional da distribuição do tempo de residência
τ	Tempo de detenção médio teórico
ν	Coefficiente de viscosidade cinemática (m^2/s)
Φ	Porosidade do material filtrante.
χ_p	Posição das partículas (x,y,z)
ω_p	Velocidade angular da partícula (rad/s)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	17
1.1	JUSTIFICATIVA.....	18
1.2	PERGUNTA DE PESQUISA.....	20
1.3	OBJETIVOS.....	20
1.3.1	Objetivo geral.....	20
1.3.2	Objetivos específicos.....	20
2	REVISÃO DA LITERATURA.....	21
2.1	<i>WETLANDS</i> CONSTRUÍDOS.....	21
2.1.1	Classificação.....	23
2.1.1.1	<i>Wetland</i> construído superficial.....	24
2.1.1.2	<i>Wetland</i> construído subsuperficial horizontal.....	25
2.1.1.3	<i>Wetland</i> construído subsuperficial vertical.....	27
2.1.2	Elementos atuantes e seus mecanismos de remoção de poluentes.....	29
2.1.2.1	Material filtrante.....	30
2.1.2.2	Macrófitas.....	30
2.1.2.3	Microrganismos.....	32
2.1.3	Hidrodinâmica de <i>wetlands</i> construídos.....	33
2.1.3.1	Colmatação em <i>wetlands</i> construídos.....	35
2.1.4	Modelos de simulação computacional aplicados em <i>Wetlands</i> Construídos..	38
2.1.4.1	Modelos caixas-pretas.....	39

2.1.4.2	Modelos baseados em processos.....	40
2.1.4.3	Modelagem computacional da colmatação em <i>wetlands</i> construídos.....	40
2.2	FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.....	41
2.2.1	Modelagem clássica do meio poroso.....	43
2.3	MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS.....	43
2.4	ACOPLAMENTO CFD-DEM.....	45
3.	MATERIAIS E MÉTODOS.....	47
3.1.	ANÁLISE DO ESTADO DA ARTE.....	49
3.2.	DESCRIÇÃO DOS ESTUDOS DE CASO.....	49
3.2.1.	Ensaio com traçadores e parâmetros hidrodinâmicos.....	51
3.3.	MODELAGEM COMPUTACIONAL.....	54
3.3.1.	Modelagem da geometria tridimensional.....	56
3.3.2	Componente CFD.....	56
3.3.1.1.	Malha de volumes finitos.....	58
3.3.1.2.	Convergência.....	59
3.3.3.	Componente DEM.....	59
3.3.4.	CFD-DEM.....	61
3.3.5.	Darcy-Forchheimer.....	61
3.3.6.	Traçador sintético e coleta de dados.....	62
3.4.	PARÂMETRO ESTATÍSTICOS.....	63
3.5.	PÓS-PROCESSAMENTO.....	65

4.	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	65
4.1.	MODELAGEM DE WETLANDS CONSTRUÍDOS POR MEIO DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL: UMA REVISÃO CRÍTICA.....	65
4.2.	SENSIBILIDADE DA MALHA E CONVERGÊNCIA.....	86
4.3.	CURVA CONCENTRAÇÃO-TEMPO.....	87
2.4.1	Comparação entre o traçador experimental e CFD-DEM.....	87
2.4.2	Comparação entre o traçador experimental e Darcy-Forchheimer.....	89
4.4.	PARÂMETROS ESTATÍSTICOS.....	89
4.5.	PARÂMETROS HIDRODINÂMICOS.....	91
4.6.	PÓS-PROCESSAMENTO.....	93
4.7.	RESTRICÇÕES E LIMITAÇÕES DO MODELO.....	102
5.	CONCLUSÕES.....	104
	REFERÊNCIAS.....	105

1 INTRODUÇÃO

No Brasil, apenas 52,36% da população tem acesso à coleta de esgoto, e somente 46% do esgoto coletado é tratado (SISTEMA NACIONAL DE INFORMAÇÕES SOBRE SANEAMENTO - SNIS, 2019). O cenário se torna mais problemático nas zonas rurais, onde de cada 10 pessoas que não têm acesso a serviços básicos, como a água tratada e saneamento, 7 vivem na zona rural (FUNDO DAS NAÇÕES UNIDAS PARA A INFÂNCIA - UNICEF, 2019).

A falta de saneamento implica diretamente na saúde e na qualidade de vida da população, além de resultar em perdas econômicas. Segundo levantamento do Instituto Trata Brasil, os impactos econômicos da expansão do saneamento no Brasil até 2036 podem gerar um superávit de 1,125 trilhões de reais, devido a fatores como, redução de custos com saúde, aumento na produtividade de trabalho, valorização imobiliária, expansão do turismo, aumento da arrecadação de impostos sobre o consumo dos serviços de saneamento, além da renda gerada pelo investimento na infraestrutura e expansão das operações (INSTITUTO TRATA BRASIL, 2018).

A ecotecnologia denominada *Wetlands* Construídos (WCs) têm se destacado como boa opção para tratamento de esgoto em pequenas cidades e vilarejos na França e pode ser uma alternativa para o interior do Brasil (MACHADO *et al.*, 2017; MOLLE *et al.*, 2005; SEZERINO *et al.*, 2015; SUBTIL; SANCHEZ; CAVALHERO, 2016). Esse sistema alternativo de tratamento de efluentes simula os mecanismos físicos, químicos e biológicos do ecossistema de áreas alagadas naturais, como brejos e planícies alagadas. Nele o efluente é filtrado em um leito de material granular, plantado com macrófitas, espécies endêmicas desse ecossistema (KNOWLES *et al.*, 2011; DE MATOS; VON SPERLING; DE MATOS, 2018).

As potencialidades dos WCs advêm de suas peculiaridades, como promover beleza paisagística, não liberar odores indesejados, além do baixo custo de implantação, operação e manutenção se comparado a sistemas convencionais. Sua flexibilidade é destacável, tanto em termos da origem da água residuária quanto ao número de habitantes, sendo possível tratar esgoto de residências unifamiliares, municípios de pequeno porte e efluentes industriais (LANGERGRABER, G; HABERL, 2001; SUBTIL *et al.*, 2018).

No entanto, como qualquer outro sistema de tratamento de efluentes, os WCs possuem limitações, como a demanda maior de área para implementação e por estarem sujeitos a fatores climáticos e ambientais. Outro fator limitante é a possibilidade de ocorrência de

processos deletérios ao regime de funcionamento, como a colmatção do meio poroso, zonas mortas, além de anomalias no escoamento, como curtos-circuitos e zonas de recirculação interna. Por ser um sistema complexo, a dinâmica interna e operacional ainda não foi bem esclarecida, levando a critérios imprecisos de projeto e operação. (SCHOLZ; LEE, 2005; SUNDARAVADIVEL; VIGNESWARAN, 2001; VYMAZAL, 2018)

1.1 JUSTIFICATIVA

A eficiência na remoção de poluentes está intimamente relacionada com a hidrodinâmica do sistema. Pesquisas indicam que uma hidrodinâmica inadequada, geralmente é identificada como o principal contribuinte para problemas operacionais em WCs, podendo intensificar o efeito da colmatção e anomalias no escoamento, como zonas mortas e caminhos preferenciais (REED, 1995; VYMAZAL, 2013b).

O aumento da aplicação de WCs para o tratamento de esgoto em diversos países tem motivado a busca por modelos que auxiliem no dimensionamento e no melhor entendimento da dinâmica envolvida no interior do leito (DEFO, CELESTIN *et al.*, 2017). No entanto, grande parte dos modelos desenvolvidos utilizam abordagens focadas no tratamento de esgoto, como modelos biocinéticos e modelos baseados em processos (MEYER *et al.*, 2015), e adotam abordagens simplificadas para os processos hidrodinâmicos (YUAN *et al.*, 2020), como os modelos FITOVERT (GIRALDI; DE MICHELI VITTURI; IANNELLI, 2010) e HYDRUS/CW2D (LANGERGRABER, G; ŠIMŮNEK, 2005). Alguns modelos nem mesmo consideram o comportamento hidráulico, tais como: *Activate Sludge Model* (ASM) (HENZE *et al.*, 2000) e *Constructed wetland Two-Dimensional* (CW2D).

A Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) é uma ferramenta que vem auxiliando em estudos da dinâmica interna em WC's (RENGERS *et al.*, 2016). Os modelos mais avançados, até então, adotam as equações derivadas da Lei de Darcy para modelagem do meio poroso, as quais apenas atenuam a derivativa de tempo na equação de Navier-Stokes, como os modelos PHWAT (BROVELLI *et al.*, 2007), BIO_PORE (SAMSÓ; GARCIA, 2013) e Wang-Scholz-Model (SANI *et al.*, 2013). A abordagem de meio poroso homogêneo tem como vantagem a redução dos recursos computacionais, porém, omite detalhes importantes para estudo dos fenômenos que ocorrem internamente nos WCs. Essa limitação impossibilita o detalhamento dos parâmetros hidrodinâmicos e análises aprofundadas do comportamento hidráulico no interior dos WCs. (TONG *et al.*, 2020).

Ressalta-se que o Método dos Elementos Discretos (*Discrete Element Method* – DEM) é mais preciso e se mostra superior aos métodos utilizados até então para modelagem de meios granulares (TONG *et al.*, 2020). Essa abordagem possibilita modelar o meio poroso na escala das partículas e permite incorporar um grande número de elementos de diferentes tamanhos à simulação (FERELLEC; MCDOWELL, 2010).

O DEM acoplado ao CFD tem a possibilidade de representar melhor o comportamento hidráulico dos WCs, se comparado com as abordagens adotadas até então. O acoplamento entre CFD-DEM é uma ferramenta robusta para estudo em escoamento em meio granular e adota abordagem Euler-Lagrangiana para simulações de sistemas que envolvem a interação entre fluidos e partículas sólidas (GOLSHAN *et al.*, 2020). O componente CFD simula o escoamento de um fluido contínuo resolvendo as equações de Navier-Stokes, com base no conceito de média local, além de calcular as forças agindo nas partículas, as quais são compartilhadas com o componente DEM. Esse, por sua vez, descreve o comportamento de meios granulares na escala das partículas, por meio de um esquema numérico que rastreia a posição e interação entre as partículas, a velocidade e aceleração das partículas sólidas utilizando as Leis de Newton, bem como as forças relacionadas ao escoamento dos fluidos obtidas do modelo CFD (RADJAÏ; DUBOIS, 2011).

Uma busca na literatura não detectou qualquer referência à abordagem CFD-DEM em *wetlands* construídos indicando o ineditismo dessa abordagem. Uma análise sistemática do estado da arte foi feita em relação aos modelos com a aplicação apenas do CFD em WCs, e foram encontradas diversas lacunas que foram abordadas pela presente pesquisa, como a utilização de abordagens ultrapassadas para modelagem do meio poroso baseadas na Lei de Darcy. Essa limitação dificulta a modelagem do processo de colmatação, tornando-o dependente de calibração experimental. Ainda, muitos modelos negligenciam o papel das plantas na hidrodinâmica.

Nesse contexto, o presente estudo introduz a abordagem CFD-DEM para o estudo da hidrodinâmica de WCs. A modelagem foi desenvolvida por meio do software *CFDEM@coupling* e validada por meio de dados de traçador de dois *wetlands* construídos em escala piloto em ambiente de laboratório. Além disso, foi realizada comparação entre os métodos de simulação CFD-DEM e CFD adotando Darcy-Forchheimer. Ao final, espera-se que a abordagem CFD-DEM represente de modo mais adequado o comportamento hidrodinâmico de WC's em detrimento da modelagem clássica do meio poroso.

1.2 PERGUNTA DE PESQUISA

A utilização de um modelo hidrodinâmico acoplado a um modelo de elementos discretos contribui para representação do comportamento hidráulico de um *wetland* construído (WCs), no que tange a detecção de anomalias no escoamento, em relação ao modelo de meio poroso homogêneo?

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo geral

O objetivo desta pesquisa é validar experimentalmente um modelo numérico utilizando a fluidodinâmica computacional (CFD) acoplado a um método baseado no método dos elementos discretos (DEM) para estudo da hidrodinâmica de *wetlands* construídos de escoamento subsuperficial horizontal.

1.3.2 Objetivos específicos

Para alcançar o objetivo geral desta pesquisa, foram estabelecidos os seguintes objetivos específicos:

- Investigar o estado da arte sobre o uso da CFD em WCs em busca de lacunas na ciência;
- Desenvolver uma abordagem que permita analisar a hidrodinâmica de modelo CFD-DEM em WCs;
- Validar o modelo com dados experimentais de WCs em escala piloto em ambiente de laboratório;
- Comparar simulações hidráulicas de WCs considerando representação detalhada e simplificada do meio poroso.

2 REVISÃO DA LITERATURA

2.1 WETLANDS CONSTRUÍDOS

O *Wetland*, também chamado de zona alagada, área úmida, planície alagada, pântano ou brejo, é uma área de transição entre o ecossistema aquático e terrestre caracterizado pela saturação de água no solo, seja permanentemente ou durante o período de chuvoso. No Brasil, esse ecossistema é representado no Pantanal com área de 140.000 km² (SILVA; ABDON, 1998; USEPA, 2000).

O *Wetland* é um dos ecossistemas com maior atividade biológica no planeta, por haver abundância de água, elemento essencial para diversas formas de atividade biológica. Além disso, as plantas se adaptaram muito bem a abundância periódica de água e escassez de outros elementos químicos essenciais, como o oxigênio (COOPER *et al.*, 1996).

Devido à alta taxa de atividade biológica, esse ecossistema pode transformar os poluentes presentes nos esgotos em subprodutos menos ofensivos ou nutrientes essenciais, uma característica importante para o tratamento de esgotos. Por esse motivo foram desenvolvidos sistemas artificiais que buscavam imitar o comportamento de um *wetland* natural com o objetivo de tratar esgotos. Esse sistema artificial é também denominado de filtro plantado com macrófitas, zona alagada construída, zonas de raízes, banhados artificiais, filtros biológicos plantados, biofiltros, leitos cultivados, fitorrestauração, fitorremediação, jardins filtrantes, sistemas alagados construídos ou simplesmente *wetland* construído, e consiste em uma ecotecnologia de tratamento de esgoto que foi projetado de maneira a otimizar os processos encontrados neste ecossistema (KADLEC *et al.*, 2000; SUBTIL *et al.*, 2018).

De fato, zonas alagadas naturais foram utilizadas como local de despejo de esgotos desde que se implementaram os primeiros sistemas de coleta de efluentes sanitários há mais de cem anos. O pântano de *Great Meadows*, localizado no estado de Massachusetts nos Estados Unidos, começou a receber despejo de esgotos em 1912. Já os WCs possuem histórico mais recente, em 1952 se iniciou a propagação desta tecnologia de tratamento originada no Instituto Max Planck na Alemanha Oriental. A implantação no ocidente foi iniciada nos anos 70 e acelerou a partir de 1985, impulsionada pela simplicidade e possibilidade de construção, utilizando materiais e mão-de-obra locais, aliadas à simplicidade de operação e bom desempenho na remoção de poluentes (KADLEC; WALLACE, 2008).

As primeiras aplicações dessa tecnologia foram feitas no tratamento de esgotos sanitários de origem domésticas e municipais. No entanto, uma gama de novas aplicações foram

desenvolvidas, como tratamento de lodos de estações de tratamento, águas cinzas, escoamento de águas pluviais e águas residuárias da agropecuária, indústria e mineração (BRIX; SCHIERUP, 1988; KIVAISI, 2001).

É importante ressaltar que os WCs são uma tecnologia de tratamento eficiente na remoção de poluentes e uma das mais econômicas se comparadas com outros sistemas de tratamento de esgotos sanitário. Isto se deve ao fato deste tipo de sistema demandar menos recursos na implantação, operação, manutenção, dispensar produtos químicos e ser operado sem o uso de bombas hidráulicas, ou seja, requer menos energia que outros tipos de tratamento, conforme apresentado na Tabela 1. Além disso, é esteticamente agradável e não produz maus odores, ruídos e vibrações, e como resultado, não provoca desvalorização imobiliária como ocorre em regiões com implantação de sistemas de tratamento convencionais (KADLEC; WALLACE, 2008).

Tabela 1. Energia requerida para diferentes tipos de sistemas de tratamento de esgoto

Sistema	Carregamento hidráulico (m³/d)	Energia utilizada (kWh/m³)
<i>Wetlands</i> construídos de fluxo superficial	—	<0,1
<i>Wetlands</i> construídos de fluxo subsuperficial	—	<0,1
Lagoa facultativa + Infiltração rápida	3786	0,11
Lagoa facultativa + Lançamento no solo	3786	0,16
<i>Wetlands</i> construídos subsuperficial aerado	5500	0,16
<i>Wetlands</i> construídos regime de bateladas	1000	0,18
Vala de oxidação carrossel	3786	0,51
Filtro biológico + remoção de nitrogênio	3786	0,61
Lodo ativado + Nitrificação	3786	0,76
Estação de aeração prolongada	3786	1,06
Reator de bateada sequencial	303	1,13
<i>Living Machine</i>	3786	1,51

Fonte: Kadlec e Wallace, 2008 (adaptado)

Entretanto, como qualquer outro sistema de tratamento de efluentes, os WCs possuem limitações, como demanda de área para implementação e o fato de estarem sujeitos a fatores climáticos e ambientais, como tempestades, inundações e vendavais (SUNDARAVADIVEL; VIGNESWARAN, 2001).

Outro fator limitador é a possibilidade de ocorrência de processos deletérios ao regime de funcionamento, como a colmatação do meio poroso, zonas mortas, além de problemas no escoamento, como curtos-circuitos e zonas de recirculação interna. Também, por ser um

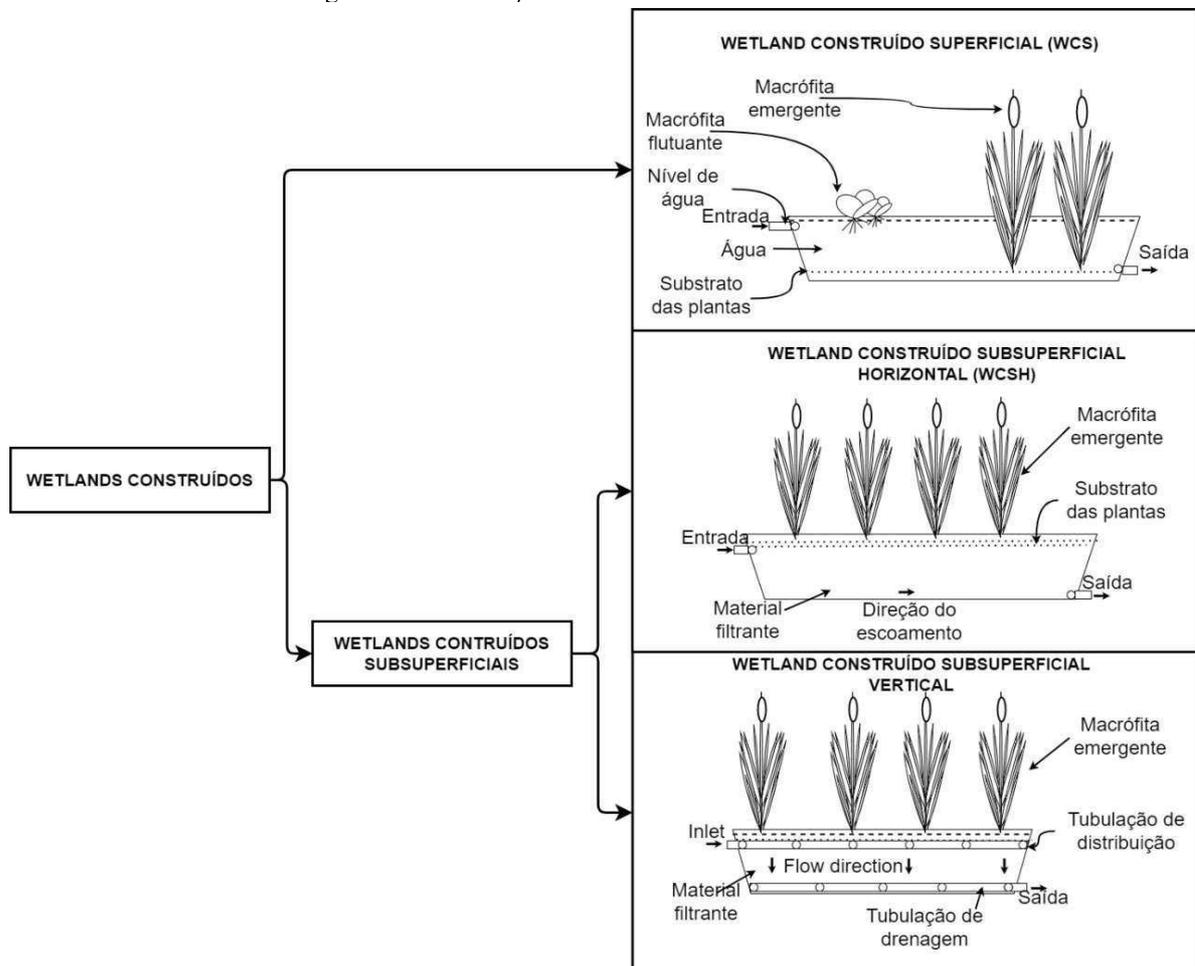
sistema complexo, a dinâmica interna e operacional ainda é uma incógnita, levando a critérios imprecisos de projeto e operação, o que contribui para redução da disseminação da tecnologia (SCHOLZ; LEE, 2005; VYMAZAL, 2018).

2.1.1 Classificação

Há diversas configurações de *wetlands* construídos e cada uma delas possui particularidades em termos de configuração no layout, espécies de plantas utilizadas e, principalmente, no padrão de escoamento.

Assim, os WCs são classificados de acordo com o nível d'água e a direção principal do escoamento. Há WCs nos quais o afluyente a ser tratado flui livremente na superfície do leito, denominados de *wetlands* construídos superficiais (WCS). Nos *wetlands* construídos subsuperficiais, o escoamento ocorre abaixo da superfície do leito plantado, e pode ser subdividido de acordo com a direção do escoamento em *wetland* construído subsuperficial horizontal (WCSH) e *wetland* construído subsuperficial vertical (WCSV), conforme ilustrado na Figura 1 (USEPA, 2000).

Figura 1. Classificação dos *Wetlands* Construídos

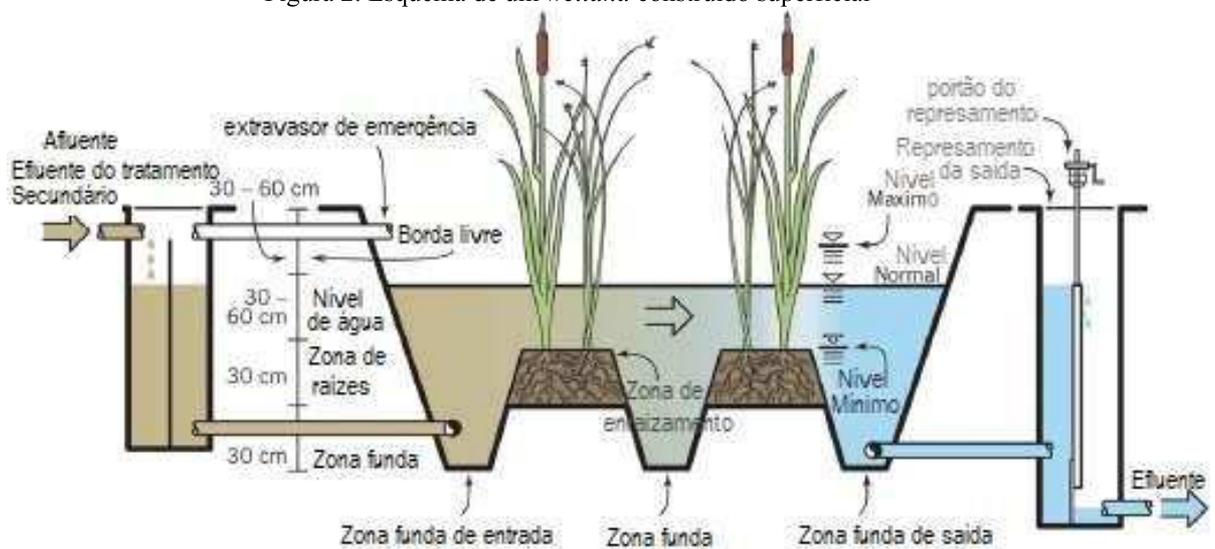


Fonte: O autor

2.1.1.1 Wetland construído superficial

O *Wetland* construído superficial (WCS) (Figura 2) é a configuração que mais se assemelha ao ecossistema em sua forma natural. Nele o efluente a ser tratado é distribuído homogeneamente na superfície do leito, escoando horizontal e superficialmente, com profundidade entre 0,15 m a 0,6 m em baixa velocidade. O efluente tratado é coletado por tubulações de drenagem situadas ao fundo do leito. Diversas espécies de macrófitas, tanto flutuantes, submersas, quanto emergentes podem ser aplicadas nesta configuração de *wetland* (COOPER *et al.*, 1996).

Figura 2. Esquema de um *wetland* construído superficial



Fonte: Dotro *et al.* (2017)

O gênero de macrófita mais comum nesse tipo de sistema é a *Eichornia*, popularmente conhecido como aguapé. Este tipo de macrófita flutuante, possui propriedades cumulativas de biomassa, é capaz de acelerar a ciclagem de nutrientes, além de ser resistente a águas altamente poluídas e com grandes variações de nutrientes, substâncias tóxicas, metais pesados e variações de temperatura e pH (SUBTIL *et al.*, 2018; WALLACE; KNIGHT, 2006)..

Em um WCS o afluente é tratado por diversos mecanismos de remoção de poluentes, como sedimentação física, fotodegradação, absorção de nutrientes pelas plantas e degradação pelos micro-organismos. Este tipo de configuração promove ambos os processos aeróbios e anaeróbios, além das reações redox, como nitrificação e desnitrificação, nas quais a carga de matéria orgânica do afluente determina qual é o processo dominante. A camada de enraizamento geralmente domina os processos anaeróbios e as camadas mais profundas podem variar do anaeróbio ao aeróbio, de acordo com a profundidade e distância do ponto de

entrada. A camada superior deve ser projetada como aeróbia para prevenir liberação de odores indesejados e promover remoção de organismos patogênicos. Áreas expostas ao sol favorecem a fotodegradação pela radiação ultravioleta, promovendo remoção de patogênicos como fungos, bactérias e vírus (KADLEC; WALLACE, 2008).

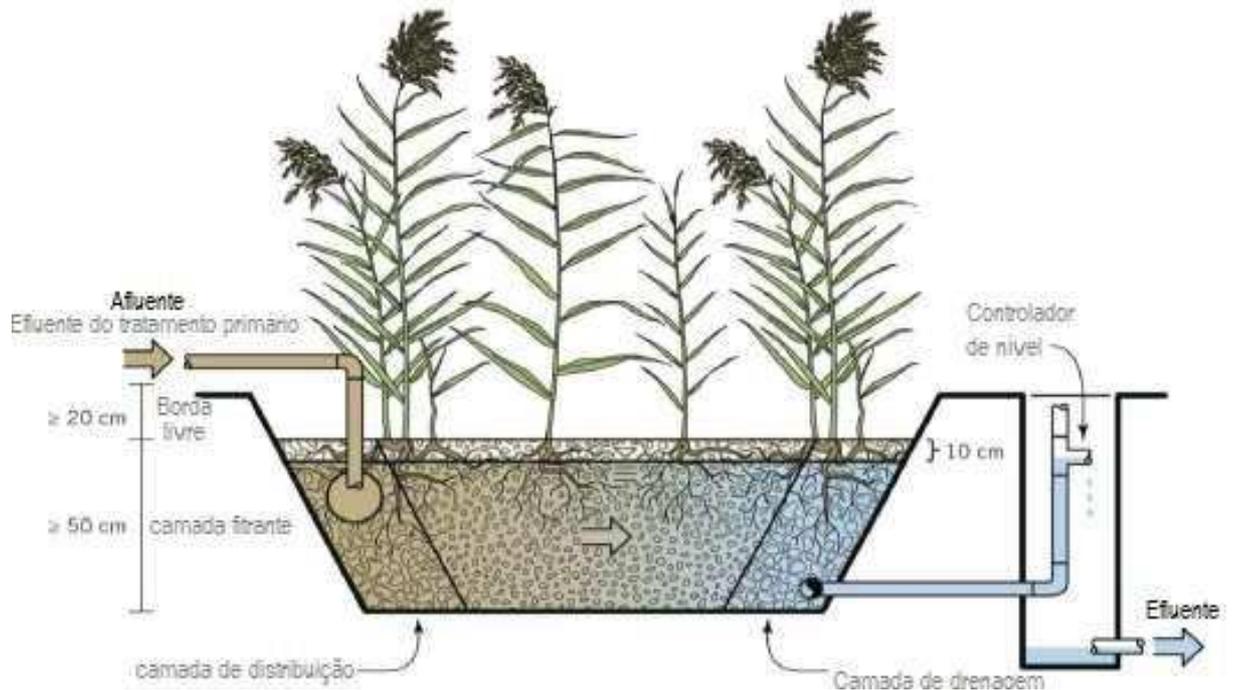
Os fatores climáticos, hidráulicos e hidrológicos são aspectos importantes a serem considerados neste tipo de WC. A grande área superficial aumenta a influência da precipitação do sistema e da evapotranspiração o que aliada a baixa velocidade potencializa a formação de indesejados curtos-circuitos. Em climas frios, os WCS devem ser protegidos do congelamento no inverno, e deve-se atentar a perda de volume de água por evapotranspiração no verão de regiões tropicais que tende a concentrar os poluentes no efluente podendo exceder os limites de lançamento permitidos pelos órgãos regulamentadores (USEPA, 2000).

Devido a potencialidade de exposição a contaminantes, os WCS raramente são utilizados como tratamento secundário de esgoto doméstico, sendo mais comum como tratamento terciário, com foco na remoção de nutrientes, especialmente fósforo. Deste modo, é necessária uma etapa prévia para remoção de matéria orgânica e sólidos suspensos (SST). As aplicações mais comuns, geralmente, envolvem grandes vazões e baixas concentrações de poluentes, como tratamento de escoamento de água de agricultura, mineração e drenagem urbana (PHILIPPI; SEZERINO, 2004).

2.1.1.2 Wetland construído subsuperficial horizontal

No *wetland* construído de fluxo subsuperficial horizontal (WCSH) (Figura 3) a água residuária escoar pela zona de entrada, abaixo da superfície plantada, e percola horizontalmente pelo meio suporte e é coletada na zona de saída, na qual é instalado um controlador de nível que regula a saturação do fundo. Nas zonas de entrada e saída, geralmente se utiliza material granular de maior diâmetro, e no meio suporte é utilizada brita ou cascalho (VON SPERLING; SEZERINO, 2018).

Figura 3. Esquema de um *wetland* construído subsuperficial horizontal



Fonte: Dotro *et al.* (2017)

A capacidade de controlar o nível de água é importante para a operação dessa configuração, pois evita problemas operacionais, como transbordamento da zona de entrada, além de manter o regime hidráulico e as necessidades hidrológicas das espécies de macrófitas (COOPER *et al.*, 1996).

As espécies de macrófitas adotadas dependem do clima e regulações locais. Na Europa, é comum utilizar *Phragmites sp.*, que é considerada planta invasora nos EUA. Conseqüentemente, utilizam-se outras espécies, tais quais *Sagittaria latifolia*, *Schoenoplectus validus*, *Schoenoplectus acutus* e *Iris pseudacorus*. No Brasil, as espécies *Typha sp.* (Taboa) e *Eleocharis sp.* (Junco) são mais utilizadas devido a suas boas propriedades de assimilação de nutrientes e metais pesados, acumulação de matéria orgânica e grande produção de biomassa, além de serem adaptáveis a diversos climas e tolerantes a solos salinos e ricos em matéria orgânica. (MACHADO *et al.*, 2017; SUBTIL *et al.*, 2018)

O papel das macrófitas nessa configuração é basicamente relacionado aos processos físicos, pois fornece uma superfície de contato para os micro-organismos e proporciona melhor filtração dos sólidos suspensos. A absorção de nutrientes pelas plantas e a transferência de oxigênio são mínimas se comparadas com a demanda de oxigênio e a quantidade de nutrientes presentes nos esgoto (BRASIL, M. S.; DE MATOS; SORAES, 2006).

O WCSH é capaz de remover boa parte da DBO e dos sólidos suspensos totais (SST) do esgoto por meio das reações redox favoráveis no ambiente anaeróbico e anóxico, dominante nessa configuração. Esse ambiente, causado pela saturação do meio filtrante, limita a transferência de oxigênio, condição favorável para ocorrência da desnitrificação. No entanto, esse sistema possui restrições para remoção de fósforo e oxidação do nitrogênio (SEZERINO *et al.*, 2018).

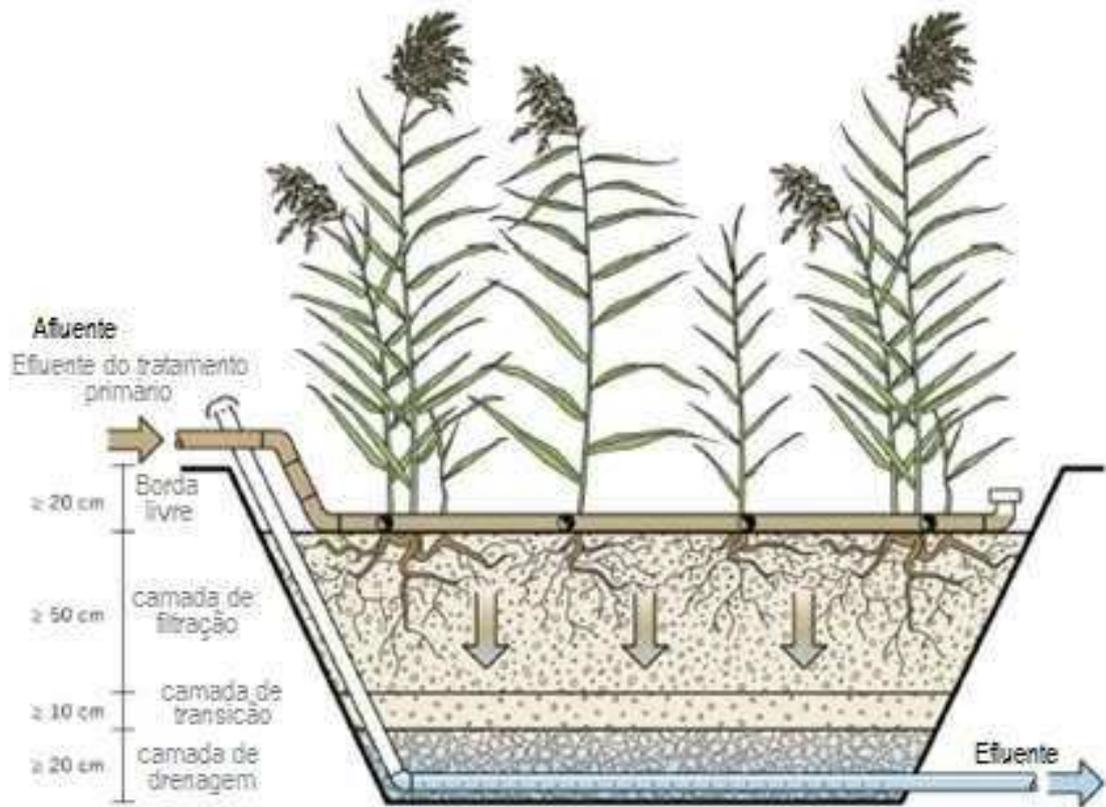
Os WCSH são utilizados para tratamento secundário e terciário de esgoto doméstico e de uma variedade de efluentes industriais. O risco de contaminação humana e animal é minimizado, pois o escoamento não é exposto durante o processo de tratamento, além de evitar a proliferação de insetos e minimizar a geração de odores indesejados. Se aplicados no tratamento de esgotos sanitários é recomendado tratamento prévio com foco na remoção de partículas grosseiras e sólidos sedimentáveis com o objetivo de atenuar a colmatação do material suporte (KIVAISI, 2001).

A propósito, a colmatação do material suporte é o principal problema operacional nessa modalidade de WC. Isso ocorre quando o material poroso é preenchido com sólidos, diminuindo a área e o tempo de contato entre o efluente a ser tratado e o biofilme. Esse entrave pode ser minimizado com utilização de material granular apropriado e lavado, para remoção de partículas finas, além do monitoramento da taxa de carregamento, garantindo que a vazão à montante seja aplicada de acordo com a faixa projetada (PHILIPPI; SEZERINO, 2004).

2.1.1.3 Wetland construído subsuperficial vertical

No *Wetland* construído subsuperficial vertical (WCSV) (Figura 4) o esgoto é aplicado com fluxo intermitente e distribuído uniformemente na subsuperfície, abaixo do leito plantado, e percola verticalmente no material granular, sendo coletado por um conjunto de tubulações de drenagem no fundo do sistema. A diferença entre o WCSV e o WCSH não é apenas a direção do fluxo, mas também as reações *redox* que ocorrem no reator (IWA, 2000).

Figura 4. Esquema de um *wetland* construído subsuperficial vertical



Fonte: Dotro *et al.* (2017)

O fluxo intermitente propicia o arraste de oxigênio para o sistema favorecendo o processo aeróbio na oxidação da matéria orgânica, principalmente do carbono orgânico. Além disso, ocorre também a nitrificação, a primeira etapa da transformação de poluentes nitrogenados, que converte o nitrogênio e a amônia em nitrato. Por conseguinte, essa modalidade é recomendada tanto como tratamento secundário quanto terciário de esgoto doméstico. Salienta-se que a habilidade do WCSV em oxidar a amônia permite que essa modalidade seja aplicada em efluentes com concentração elevada deste poluente, como é o caso de percolato de aterros sanitários e efluente de indústria de processamento de alimentos (MAIGA; VON SPERLING; MIHELICIC, 2017).

Assim como no WCSH, o principal problema operacional no WCSV é a colmatação do material filtrante. No entanto, a escolha do material granular ideal para o fluxo descontínuo, permite a mineralização dos detritos que obstruem o filtro, minimizando esse problema (PHILIPPI; SEZERINO, 2004).

2.1.2 Elementos atuantes e seus mecanismos de remoção de poluentes

A tecnologia de tratamento *wetland* construído, apesar de fácil construção, apresenta mecanismos de remoção complexos, tendo em vista a variedade de processos internos de remoção de poluentes, divididos entre físicos, químicos e biológicos. Diferentemente de outros sistemas de tratamento que possuem unidades operacionais separadas projetada para um propósito específico, em WCs os diversos mecanismos de remoção ocorrem simultaneamente em apenas um reator (PHILIPPI; SEZERINO, 2004).

O sistema WC trata a água residuária simulando os mecanismos físicos, químicos e biológicos de áreas alagadas naturais na remoção dos poluentes, tais como a relação entre seus componentes e os microrganismos (DE MATOS, MATEUS PIMENTEL *et al.*, 2018; KNOWLES, PAUL *et al.*, 2011).

Os componentes responsáveis pelo processo de tratamento de um *wetland* construído são: o material filtrante (quando houver), as macrófitas e os microrganismos. Na Figura 5 são ilustrados os principais elementos atuantes e nos WCs

Figura 5. Agentes responsáveis pelo tratamento de esgoto nos *wetlands* construídos



2.1.2.1 Material filtrante

O material filtrante, geralmente composto por pedregulhos, é um elemento essencial para os *wetlands* construídos subsuperficiais por apresentar várias funcionalidades no processo de tratamento da água residuária e também atuar como elemento de sustentação das macrófitas. É o elemento encarregado pelo processo físico de filtração dos sólidos suspensos presentes nos esgotos, além de estar associado aos fenômenos químicos e bioquímicos responsáveis pela melhoria do efluente tratado (GHERAIRI *et al.*, 2015; SEZERINO *et al.*, 2018).

A filtração física também desempenha papel importante na remoção de patógenos por permitir a fixação de protozoários, de bactérias e de ovos de helmintos. Além disso, a matéria orgânica particulada retida na entrada do leito é hidrolisada em uma primeira etapa e gera uma carga adicional de componentes mais simples que serão hidrolisados ou degradados posteriormente. Esse fenômeno contribui para o crescimento do biofilme e está relacionado à colmatação do leito, que é um dos principais problemas operacionais dos *wetlands* construídos (SUNDARAVADIVEL; VIGNESWARAN, 2001).

A adsorção química é outro processo importante na remoção de poluentes, e está intimamente relacionada ao material filtrante. A remoção de compostos inorgânicos, tais como nitrogênio amoniacal e ortofosfato, é feita pelo processo de adsorção. A escolha do material filtrante deve conciliar a condutividade hidráulica bem como potencial reativo de adsorção. Entretanto, a prática mais comum é a escolha de areia grossa e brita, que possuem baixo potencial de adsorção, mas permitem maior longevidade do sistema, no que se refere a colmatação (MAIGA; VON SPERLING; MIHELICIC, 2017).

2.1.2.2 Macrófitas

As macrófitas são plantas aquáticas vasculares que flutuam ou permanecem total ou parcialmente submersas em ambientes de águas doces ou salobras. Elas possuem muita relevância no equilíbrio ecológico em *wetlands* naturais e um importante papel no tratamento de esgoto e operação hidráulica em *wetlands* construídos (SHELEF; GROSS; RACHMILEVITCH, 2013). Vários estudos (KYAMBADDE *et al.*, 2004; YANG, Q. *et al.*, 2007) avaliaram o desempenho de tratamento em *wetland* construídos plantados e não-plantados e concluíram a superioridade dos sistemas plantados (IWA, 2000). Isso devido à contribuição das macrófitas em diversos aspectos, tais como: (BRASIL; DE MATOS; SORAES, 2006)

- melhoria na capacidade de remoção de poluentes e patógenos pelos processos de filtração e adsorção de nutrientes;
- retirada e armazenamento de nutrientes para o crescimento da biomassa vegetal;
- aumento da área superficial com suas raízes servindo de meio suporte para microrganismos;
- liberação de oxigênio no sistema;
- promoção da evapotranspiração
- aumento da resistência ao fluxo;
- produção de excreções radiculares de substâncias antibacterianas e;
- embelezamento paisagístico.

No entanto, as plantas demandam manutenção adequada para garantir eficiência do sistema, como cortes periódicos, remoção de ervas daninhas e folhagem desprendidas. As macrófitas emergentes armazenam nitrogênio em seu tecido e estima-se que a assimilação vegetal resulte em 10% de nitrogênio removido nos WCs (LIU *et al.*, 2014). Assim como o nitrogênio, o fósforo é incorporado na biomassa da planta, porém, caso a planta não seja cortada estes nutrientes podem ser liberados novamente no efluente durante a decomposição dos detritos (DOTRO *et al.*, 2017; VYMAZAL, 2007).

As espécies mais empregadas nos WCs são *Phragmites australis*, *Typha spp.* e *Juncus spp.*, popularmente conhecidas como caniço, taboa e junco, respectivamente (Figura 6) (MACHADO *et al.*, 2017). Ao escolher a espécie a ser utilizada deve-se considerar a adaptabilidade da espécie às condições climáticas e as características da água residuária a ser tratada, como concentrações elevadas de matéria orgânica, nutrientes ou outros poluentes específicos do efluente a ser tratado (BRIX, 1997).

Figura 6. (a) *Phragmites australis* (b) *Typha spp.* (c) *Juncus spp.*.



(a)



(b)



(c)

Fonte: *National Resources Conservation Service (USDA, 2003)*

2.1.2.3 Microrganismos

Os microrganismos são os principais agentes de remoção de compostos biodegradáveis do esgoto. São eles os responsáveis pela mineralização da matéria orgânica e fósforo orgânico e pela conversão das variadas formas do nitrogênio. Os WCs proporciona um ambiente adequado para o habitat de diversos grupos de microrganismos (IWA, 2000).

As bactérias e fungos são os primeiros organismos a colonizar e iniciar a sequência de decomposição de sólidos nos esgotos. Estes seres microscópicos utilizam o carbono disponível como fonte de energia e mediante o metabolismo microbiano desintegram os

detritos em partículas cada vez menores até que a estrutura original não seja mais reconhecida e as moléculas orgânicas complexas sejam convertidas em CO₂, H₂O₂ e componentes minerais menos nocivos ao ambiente (SHUTES, 2001; SUBTIL *et al.*, 2018).

A predominância de determinada comunidade microbiana está ligada às condições ambientais, como temperatura, potencial *redox*, pH e principalmente a disponibilidade de oxigênio e carbono. O material filtrante serve como meio de aderência destas comunidades microbianas formando uma camada espessa e volumosa que interage com o esgoto. E esta camada, chamada de biofilme, é responsável pela colmatação biológica nos *wetlands* construídos (DOTRO *et al.*, 2017; SEZERINO *et al.*, 2018).

O gradiente de oxigênio dissolvido no meio varia tanto entre os diferentes tipos de *wetlands*, quanto nas zonas de um mesmo *wetland*. Esta variação promove a coexistência de condições aeróbias, anóxicas e anaeróbias em um mesmo reator, com a predominância de uma delas.

Em geral, o oxigênio dissolvido que entra no sistema é extinguido gradualmente. Assim sendo, na entrada do sistema predominam comunidades microbianas aeróbias, que são responsáveis pela oxidação da matéria orgânica e pela nitrificação do nitrogênio amoniacal. Na zona anóxica ocorre a desnitrificação e nas regiões anaeróbias são formados os ácidos orgânicos e há redução de sulfatos (MULAMOOTTIL; MCBEAN; ROVERS, 1999).

Algumas comunidades microbianas, como nemátodos, rotíferos e protozoários, são conhecidas como predadores de microrganismo patogênicos. É o caso do protozoário ciliado *Paramecium*, para o qual é estimado que cada organismo desta espécie consome mais de 100 *E. coli* por hora (MAIGA; VON SPERLING; MIHELICIC, 2017).

2.1.3 Hidrodinâmica de *wetlands* construídos

O desempenho de *wetlands* construídos na remoção de poluentes está intimamente relacionado à hidrodinâmica de seu interior. A compreensão do movimento do fluido e o efeito dos elementos que compõem os WCs são importantes para desvendar seus processos internos e a dinâmica de remoção de poluentes. Outros fatores também são importantes para o desempenho do reator, como o dimensionamento das configurações geométricas e da dinâmica operacional (COTA, 2011).

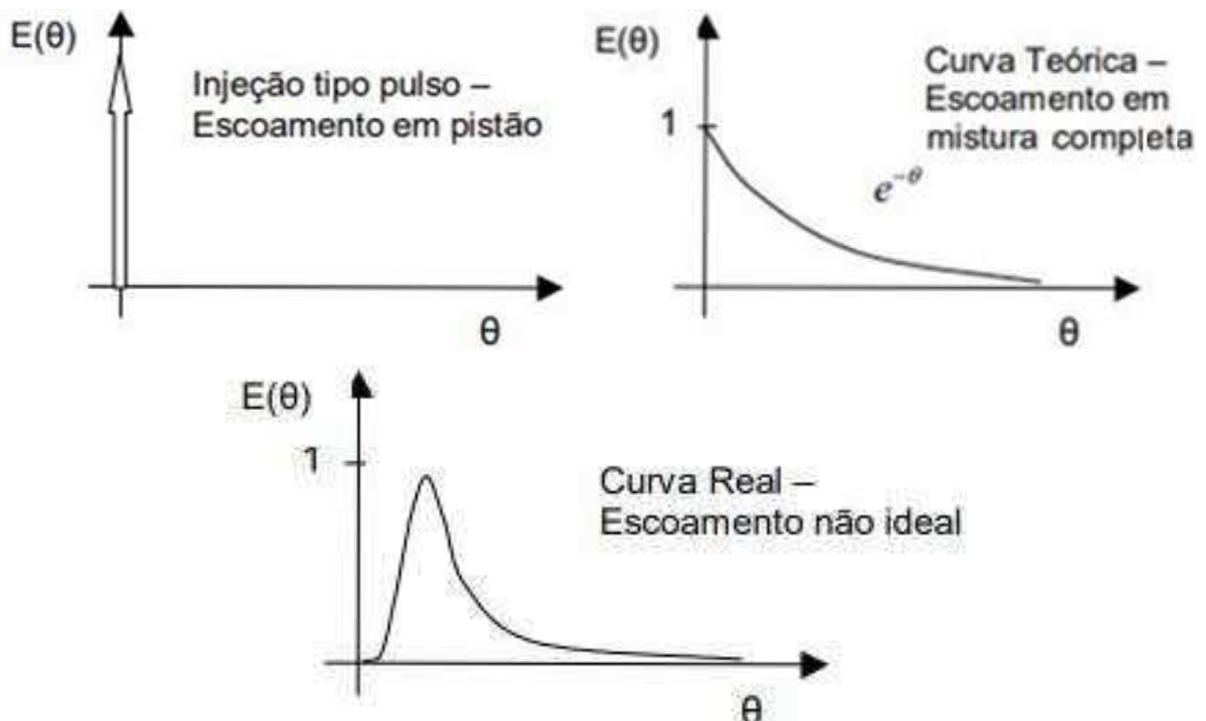
Além disso, na perspectiva do projeto e operação dos WCs, é importante o conhecimento de alguns parâmetros hidráulicos, como a distribuição do tempo de residência (DTR), a

intensidade de mistura do efluente e o volume do leito que foi efetivamente aproveitado (FILHO *et al.*, 2018).

O tempo de contato do efluente com os elementos do leito é chamado de tempo de residência. Quanto maior o tempo de residência maior será o tempo do contato do efluente com o meio e conseqüentemente melhor eficiência de remoção de poluentes (DE PAOLI, 2010).

Ainda, a distribuição do tempo de residência (DTR) no reator determina o desempenho de equipamentos e investiga a maneira como o fluido escoo pelo dispositivo, caracterizando os tipos de escoamento. São dois modelos ideais de escoamento, o modelo de mistura completa (CSTR) e o modelo de fluxo em pistão (PFR) (LEVENSPIEL, 2000). No modelo de fluxo em pistão, as moléculas do fluido atravessam o sistema alinhadamente com a mesma velocidade, portanto, não há mistura por dispersão axial. Em relação à mistura completa, a composição do fluido é homogênea devido à completa mistura das moléculas do fluido. Na Figura 7 é apresentada a comparação entre as curvas DTR para os modelos de escoamento ideais com uma situação não-ideal (DANCKWERTS, 1953).

Figura 7. Curvas DTR para os modelos de escoamento ideal e escoamento não-ideal



Legenda: $E(\theta)$ - função normalizada de distribuição de tempos de residência

θ – tempo adimensional

Fonte: Sasaki (2005)

Esses modelos são considerados ideais, pois é improvável obter dispersão total ou ausência da mistura em um reator na prática. Portanto, há outros dois modelos intermediários

aos dois extremos idealizados: modelo de mistura completa em série e modelo de fluxo disperso (VON SPERLING, 1996).

No modelo de mistura completa em série, também conhecido como tanques em série (TES), o fluxo pode se aproximar do modelo mistura completa ou do fluxo em pistão dependendo do número de unidades identificadas (N). Quanto menor o número de reatores, mais o modelo se aproxima do fluxo em pistão. No modelo de fluxo disperso, quanto mais dispersões forem identificadas no reator (d), mais ele se comporta como mistura completa (DE PAOLI, 2010).

O teste com traçadores é a principal ferramenta experimental para obtenção desses valores em WCs. Esse teste consiste na injeção de uma substância inerte na entrada do sistema, e em seguida, são determinadas as concentrações da substância na saída do leito a intervalos pré-definidos (ALVARENGA *et al.*, 2013).

Em relação aos modelos de fluxo, pesquisas com traçadores em WCs indicaram que os modelos que mais se aproximam das curvas são os de modelos tanques em série e fluxo em pistão (RÍOS *et al.*, 2009).

Apenas pelo monitoramento da DTR é possível identificar alguns processos deletérios em WCs, tais como (DE MATOS, MATEUS PIMENTEL *et al.*, 2015):

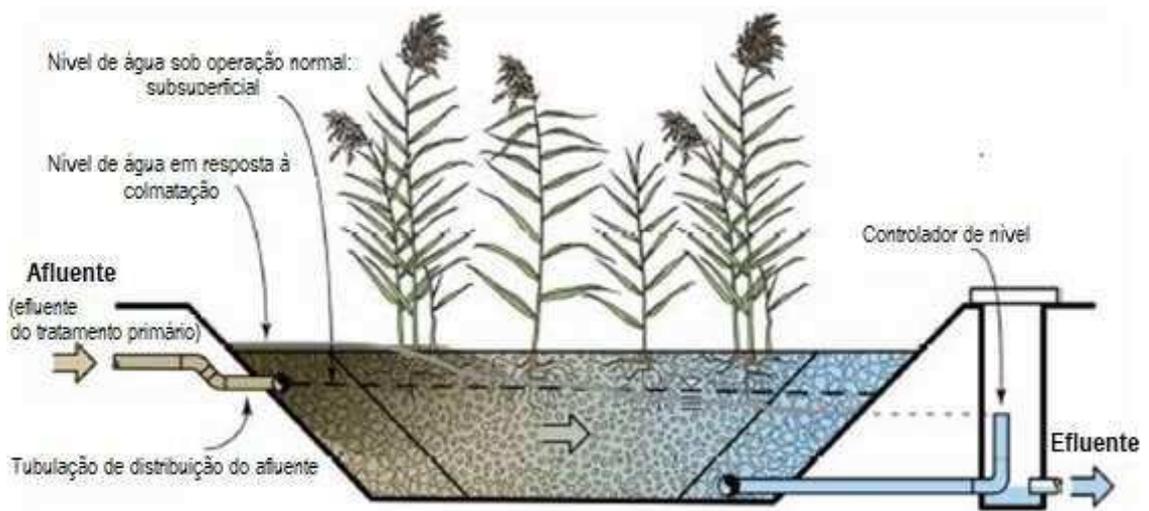
- zonas mortas – regiões isoladas ou inacessíveis dentro do sistema que não foram efetivamente aproveitadas;
- curtos-circuitos - causam o escoamento de grandes percentuais do volume do fluido em tempo menor que o restante, portanto, o líquido não percorre todo o interior do reator;
- recirculação interna – movimentação contrária ao escoamento de parcelas do fluido em relação ao escoamento principal.
- colmatação – redução da porosidade do leito causado pelo entupimento dos poros.

2.1.3.1 Colmatação em *wetlands* construídos

É amplamente reportado entre os pesquisadores que a colmatação é o principal problema operacional em *wetlands* construídos (BLAZEJEWSKI; MURAT-BLAZEJEWAKA, 1997; KNOWLES, P. R.; GRIFFIN; DAVIES, 2010). A colmatação é a redução da porosidade do material filtrante, diminuindo substancialmente a performance de tratamento e a vida útil do sistema (KNOWLES *et al.*, 2011).

Esse processo deletério causa redução da condutividade hidráulica do sistema, ocasionando diversos problemas no fluxo, e em casos severos pode gerar até mesmo o transbordamento do fluido na superfície do leito, conforme ilustrado na Figura 8.

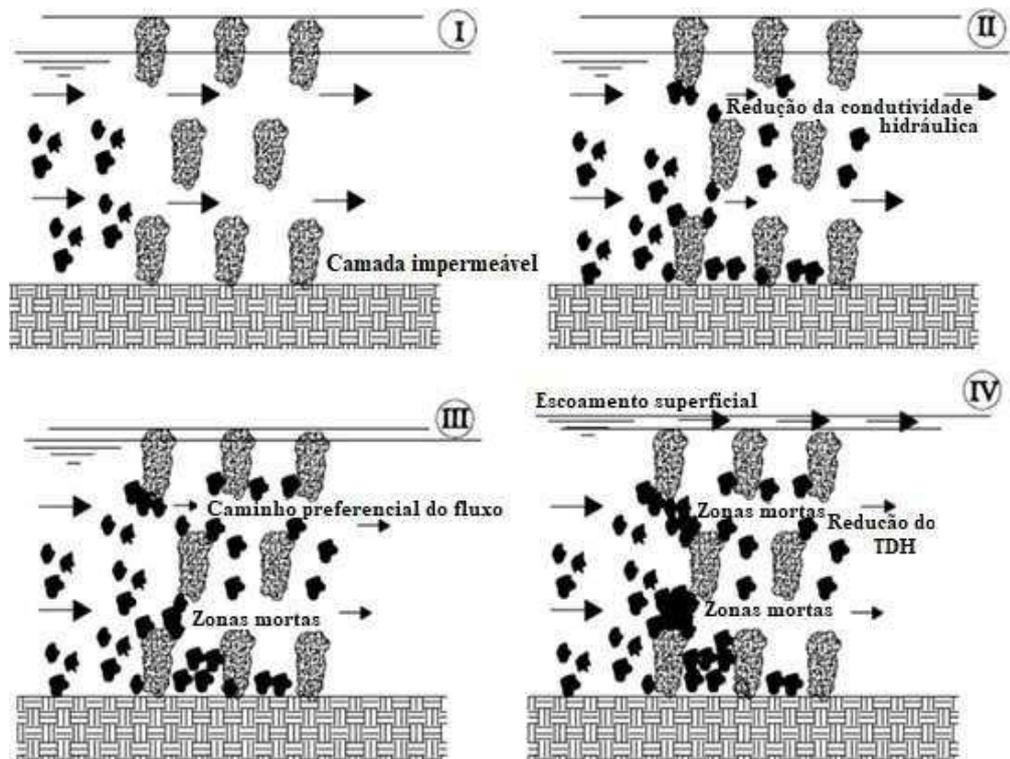
Figura 8. Resposta do *wetland* construído horizontal ao processo de colmatção



Fonte: Dotro *et al.* (2017)

A colmatção pode ser subdividida em duas categorias: física e biológica (PEDESCOLL *et al.*, 2011). A colmatção física é causada pelo preenchimento e oclusão dos poros intersticiais do material filtrante durante a filtração da carga de sólidos do esgoto. Conseqüentemente, ocorre aumento da velocidade do escoamento, o decréscimo no DTR, curtos-circuitos e zonas mortas, conforme ilustrado na Figura 9 (KNOWLES *et al.*, 2011).

Figura 9. Progressão dos estágios de acumulação de sólidos em *wetlands* construídos subsuperficiais horizontais

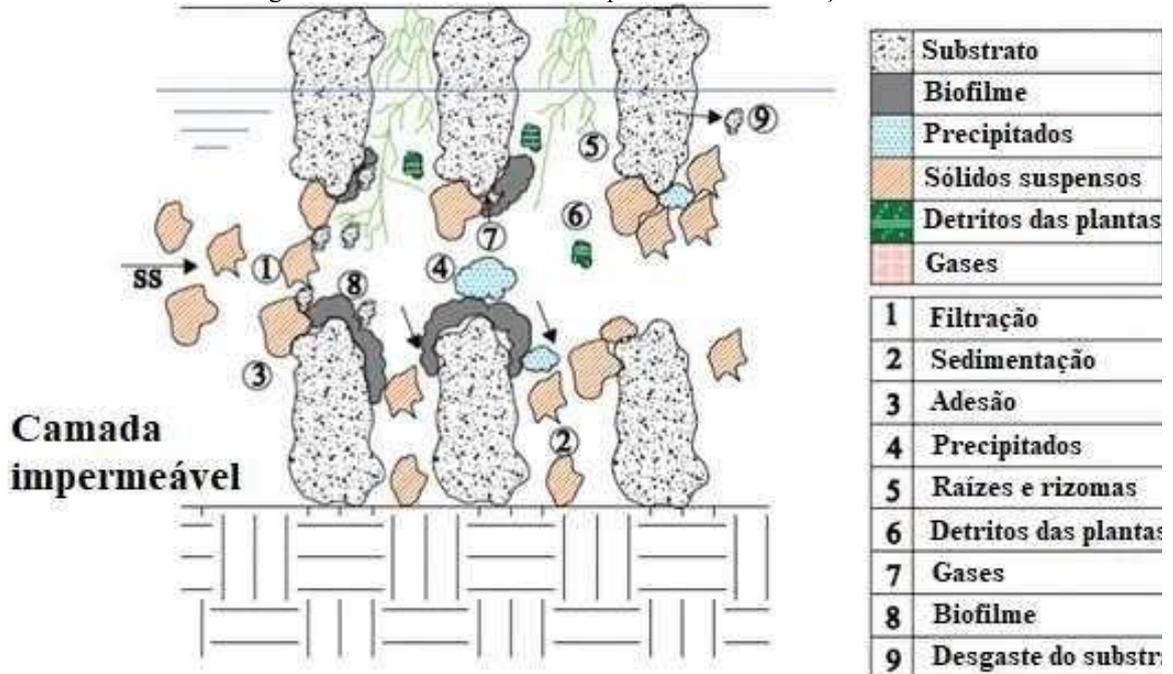


Fonte: Matos; Von Sperling e de Matos (2018)

A colmatção biológica é a redução dos poros do leito causado pelos processos induzidos pelos microrganismos. As bactérias produzem uma camada ao redor das partículas do leito, denominado biofilme, podendo obstruir uma fração dos poros, causando zonas-mortas. Ainda, durante o processo de metabolismo bacteriano são geradas precipitações minerais que também podem bloquear os poros do leito (SAMSÓ *et al.*, 2016).

Os fatores que provocam a colmatção dos *wetlands* construídos são relacionados com os sólidos suspensos presentes nos esgotos; crescimento do biofilme, precipitados minerais e gases liberados durante o metabolismo bacteriano; uso de determinados substratos como material filtrante, raízes e detritos das plantas. Na Figura 10 foram resumidos os fatores envolvidos no processo de colmatção (MATOS; VON SPERLING; DE MATOS, 2018).

Figura 10. Fatores envolvidos no processo de colmatção



Fonte: Matos; Von Sperling e de Matos (2018)

Alguns pesquisadores afirmam que as macrófitas acabam por extinguir os problemas ocasionados pela diminuição da distribuição do tempo de residência (DTR) pelas raízes das plantas. Por exemplo, a retenção de água pelas plantas, evapotranspiração e o efeito alavanca fazem com que os sistemas plantados tenham DTR substancialmente maior que nos sistemas não-plantados (CHAZARENC *et al.*, 2007). O efeito alavanca é a oscilação induzida pelo vento de brotos e caules emergentes que perturbam a camada superficial e criam macroporos até a subsuperfície. (BRASIL; DE MATOS, 2008; BRIX, 1994)

Outros pesquisadores afirmam que o crescimento das raízes afeta negativamente a condutividade hidráulica por ocuparem os poros do material filtrante, além de eliminarem detritos no leito auxiliando no processo de colmatção. Os rizomas das macrófitas ocupam de um terço a um quarto do volume dos poros na região das raízes, diminuindo a condutividade hidráulica do meio (IWA, 2000). A região das raízes de *wetlands* plantados com espécie *Phragmites australis* possui metade da condutividade hidráulica dos pedregulhos tipicamente utilizados como material filtrante em *wetlands* construídos (BAIRD; SURRIDGE; MONEY, 2004).

Diferentemente das plantas, a influência do material filtrante no processo de colmatção é concordante entre os pesquisadores. Originalmente, eram propostos solos e areias como material filtrante para os WCs devido a maior área específica disponível para fixação do biofilme e o melhor bloqueio de sólidos suspensos pelos poros menores. No entanto, foi

constatada a rápida colmatação do leito, modificando o entendimento do material filtrante nos WCs. (BRIX; SCHIERUP, 1988)

Atualmente é aconselhada a adoção de elementos com granulometrias mais grosseiras como material filtrante. Foi verificado que o emprego de pedregulhos nos WCs não afeta a habilidade de remoção de poluentes a ponto de não atingir os requerimentos pelos protocolos de lançamento dos corpos hídricos (GRIFFIN; WILSON; COOPER, 2008).

A distribuição e formato das partículas também influenciam na colmatação. Partículas angulares reduzem a porosidade e aumentam a superfície específica disponível para crescimento do biofilme e conseqüentemente intensificam a colmatação (HYÁNKOVÁ *et al.*, 2006). O material utilizado deve ser limpo, isento de solos e finos, e deve possuir granulometria uniforme, devido a possibilidade dos grãos menores ocuparem os espaços vazios dos grãos maiores e causar a colmatação rapidamente. Em um WCSH é aconselhada a adoção de grãos de maior diâmetro na zona de entrada e saída do leito para minimizar problemas causados pela colmatação (VON SPERLING; SEZERINO, 2018).

2.2 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

A fluidodinâmica computacional (em inglês: CFD – *Computational Fluid Dynamics*) é uma ferramenta de simulação e modelagem de cenários envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor, transferência de massa, reações químicas, movimentos mecânicos e interação entre sólidos e líquidos. Pode ser aplicada em uma variedade de áreas de estudo, desde a indústria aeroespacial, indústria automotiva a estudos relacionados às mudanças climáticas (ISLABÃO; PINTO; VIANNA JÚNIOR, 2010).

Em relação ao escoamento de fluidos, as equações relacionam a velocidade, pressão, temperatura e densidade do líquido por meio de modelos matemáticos, métodos numéricos e ferramentas de *softwares* (*solvers*, e utilitários para pré e pós-processamento). Na Equação 1 é representada a equação de Navier-Stokes, uma das equações mais utilizadas na fluidodinâmica computacional. Esta equação descreve o movimento dos fluidos, seja ele líquido ou gasoso, relacionando a velocidade, pressão e propriedades do fluido (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot \phi U - \nabla \cdot \mu \nabla U = - \nabla p \quad (1)$$

Em que:

ρ : densidade do fluido (kg/m³);

U : velocidade do fluido (m/s);

t : tempo (s);

∇ : divergente;

μ : viscosidade cinemática (m²/s);

p : pressão (Pa).

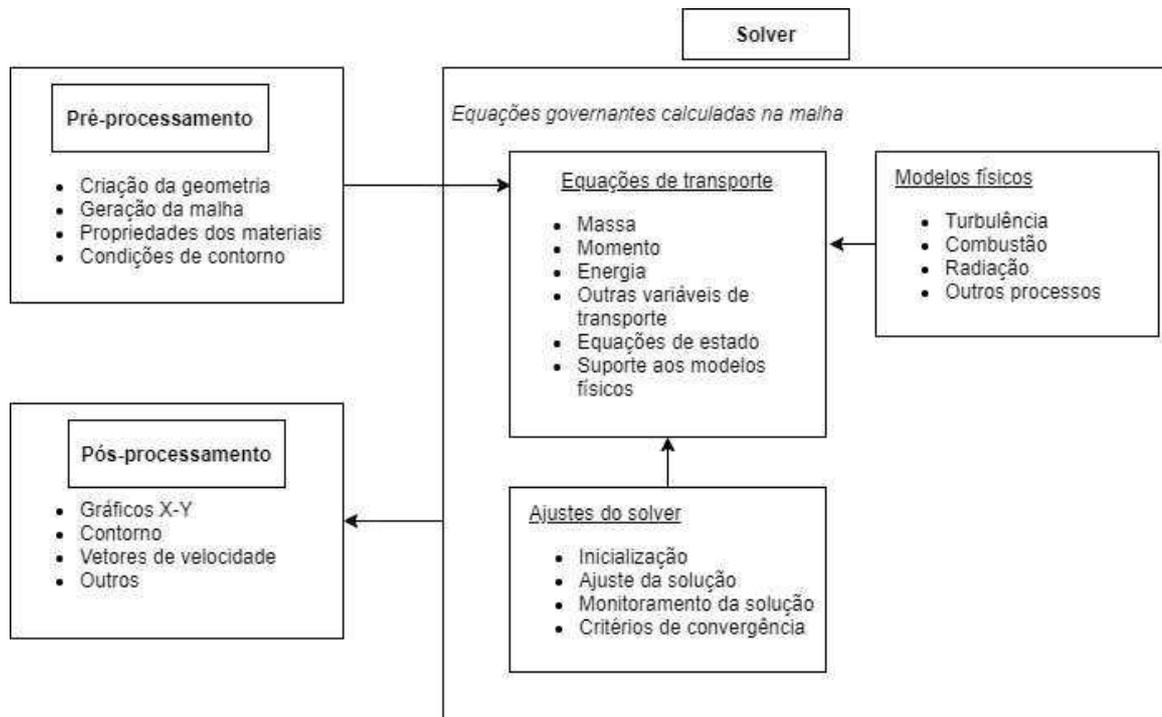
Devido à complexidade das equações envolvidas na dinâmica dos fluidos, a resolução de problemas geralmente envolve cálculo computacional. As vantagens do uso de modelos CFD por cientistas e engenheiros de processo é a possibilidade do estudo de sistemas complexos e integrados sem a necessidade de experimentos extensivos ou apenas necessidade de experimentos laboratoriais complementares aos modelos. (TU; YEOH; LIU, 2018)

O pré-processamento consiste na definição e criação da geometria, a geração da malha, definição das propriedades dos materiais e limitação das condições de contorno. O mecanismo de resolução consiste na aplicação das equações para resolução do problema e o pós-processamento é a organização dos resultados em gráficos e outras ferramentas para análise posterior. (TU; YEOH; LIU, 2018)

A necessidade de dividir a geometria em uma malha de volumes finitos é devido às complexas equações utilizadas para o cálculo da dinâmica dos fluidos. Esta divisão em pequenas células com formato geométrico conhecido facilita na computação do resultado. As propriedades dos materiais também devem ser definidas durante o pré-processamento, pois influenciam nas definições das etapas seguintes (CEBECI *et al.*, 2005).

Na Figura 11 foram resumidos os principais elementos de uma modelagem CFD.

Figura 11. A interconectividade dos três elementos principais de uma análise CFD



Fonte: Tu *et al.* (2018)

A escolha do *solver* está relacionada aos tipos de fluidos que serão abordados pelo problema, quais parâmetros serão calculados, a complexidade do problema e a acurácia necessária para a resolução do problema. Fluidos incompressíveis são calculados de forma diferente de compressíveis, e a maneira de se calcular deve ser definida durante essa etapa. O ajuste inadequado das configurações do *solver* pode levar a resultados imprecisos, principalmente em problemas complexos ou que necessitam de acurácia elevada (ROACHE, 1998).

2.2.1 Modelagem clássica do meio poroso

As abordagens clássicas para modelagem do meio poroso baseiam-se na Lei de Darcy (DARCY, 1856). Dessas destaca-se a abordagem baseada na equação de Darcy-Forchheimer (FORCHHEIMER, 1901) que relaciona a queda da pressão com a fricção ao longo do meio e a velocidade do fluxo. A equação é composta por duas partes, (1) o termo da perda da viscosidade e o (2) termo da perda inercial, causando a queda na pressão, as quais são proporcionais à velocidade e à velocidade ao quadrado, respectivamente. Esses termos são aglutinados em um termo atenuante (Sm), conforme a Equação (2), e é adicionada à Equação de Navier-Stokes (Equação 1) (DE LEMOS, 2012).

$$S_m = \mu D L u + \frac{\rho}{2} F L u^2 \quad (2)$$

Em que:

S_m : Termo atenuante (Pa)

μ : viscosidade dinâmica do fluido (kg/(m.s));

L : comprimento do meio poroso (m);

u : velocidade do fluido, em (m/s);

ρ : densidade do fluido, em (kg/m³);

D : coeficiente de Darcy;

F : coeficiente de Forchheimer.

O coeficiente de Darcy (D), ou coeficiente de arraste viscoso, considera a queda de pressão linear. Já o coeficiente de Forchheimer (F), ou coeficiente de arraste inercial, considera a diferença exponencial na pressão. Esses coeficientes são determinados por meio de equações empíricas ou estudos experimentais.

2.2.2 Modelos de simulação computacional aplicados em *Wetlands* Construídos

Os modelos de simulação computacionais aplicados em WCs são ferramentas capazes de detalhar a dinâmica interna, além de auxiliarem no dimensionamento do sistema (RENGERS *et al.*, 2016). Os modelos que foram elaborados para esse sistema de tratamento podem ser agrupados em dois tipos, de acordo com o nível de complexidade que foram empregados em seu desenvolvimento: modelos caixas-pretas e modelos baseados em processos.

2.2.2.1 Modelos caixas-pretas

Os modelos caixas-pretas são aqueles que não consideram a complexidade de processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem no interior do leito. São abordagens simplesmente empíricas ou estatísticas voltadas a regressões matemáticas, nas quais predizem a concentração de poluentes na saída baseadas no fluxo de entrada, negligenciando totalmente a dinâmica interna do sistema. Estes modelos ainda podem ser agrupados de acordo com a equação adotada. Destacam-se os modelos de primeira ordem, modelos monódicos, *Time-dependent retardation model*, modelos de tanques-em-série e redes neurais artificiais (DEFO, CÉLESTIN *et al.*, 2017). No Quadro 1 são apresentadas as principais características dos modelos caixas-pretas e suas limitações.

Quadro 1. Comparação entre os modelos caixa-preta para CWs, suas principais características e limitações.

Modelo	Característica principal	Limitações
Modelos regressivos	Lida com análises empíricas da relação entre as concentrações de entrada e saída dos <i>wetlands</i> .	Foco nos dados de entrada/saída ao invés de dados dos processos internos; simplificação
Modelos de primeira-ordem	Abordagem determinística não-linear	Incapaz de modelar eventos imprevistos, flutuações no fluxo e concentração de poluentes na entrada ou mudanças no armazenamento interno.
Modelos monódicos	Representa reações de taxa de primeira ordem para concentrações relativamente baixas, mas reações de taxa de ordem zero para altas concentrações.	Evita a decomposição total dos poluentes (baixa taxa de reação para baixas concentrações)
Modelo <i>time-dependent retardation</i>	Simula a queda na taxa de remoção com o passar do tempo; substâncias facilmente biodegradáveis são removidas primeiro e rapidamente. Soluções com menos constituintes biodegradáveis e menor cinética de remoção; parâmetros mais consistentes para dados de remoção de DQO por meio de diferentes profundidades e carregamento em WCs	Requer estudos com traçador para computar as taxas de remoção constantes.
Modelo tanques-em-série	Caracteriza o movimento dos poluentes enquanto ele atravessa o <i>wetland</i> e sua descarga na saída; extremamente sensível a altos níveis de redução de poluentes por meio do TDH	Foco maior nos dados de entrada e saída do que nos processos internos.
Redes neurais artificiais	Simula a estrutura e/ou aspecto funcional da rede neural biológica.	Baixo coeficiente de regressão para remoção de NH ₃ .

Fonte: Adaptado de Defo *et al.* (2017)

Os modelos de primeira ordem são os mais utilizados da categoria caixa-preta, principalmente no dimensionamento dos reatores. Apesar de serem simplistas e possuírem limitações, os modelos caixa-preta também são utilizados pelos modelos baseados em processos para simular a remoção de um único poluente (GARCIA *et al.*, 2010).

2.2.2.2 Modelos baseados em processos

Os modelos baseados em processos ampliaram o conhecimento quanto aos processos envolvidos na remoção de poluentes dentro dos WCs. Esses modelos utilizam da equação de Richards ou abordagem simplificada para descrever vários dos processos envolvidos em WCs, além das equações biocinéticas que simulam a operação dos WCs por meio da junção do fluxo de água e modelos de transportes. Os modelos baseados em processos podem ser classificados em três grupos, de acordo com suas complexidades, limitações e campo de aplicação (MEYER *et al.*, 2015):

- a) Grupo 1: São os modelos mais avançados, baseados no modelo biocinético denominado Modelo de Lodo Ativado (*Activated Sludge Model*, ASM) desenvolvido pela *International Water Association* (IWA).
- b) Grupo 2: Modelos baseados em processos fundamentados em modelos cinéticos simplificados com a função de detectar a remoção de um poluente específico ou de uma família de componentes.
- c) Grupo 3: Modelos com o objetivo de auxiliar no dimensionamento dos WCs.

2.2.2.3 Modelagem computacional da colmatação em *wetlands* construídos

O estudo acerca dos fatores que influenciam a colmatação de *wetlands* construídos pode ser melhorado por meio da modelagem matemática computacional. Vários modelos foram desenvolvidos considerando o efeito da colmatação, porém nenhum ainda se provou útil em sua prevenção em um *wetland* construído em escala operacional. Geralmente, esses modelos são divididos em duas escalas de complexidade: (NIVALA *et al.*, 2012)

- 1) Modelos baseados exclusivamente no carregamento de sólidos suspensos (colmatação física); e
- 2) Modelos que incluem fatores mais complexos, como o crescimento do biofilme e precipitações químicas (colmatação biológica).

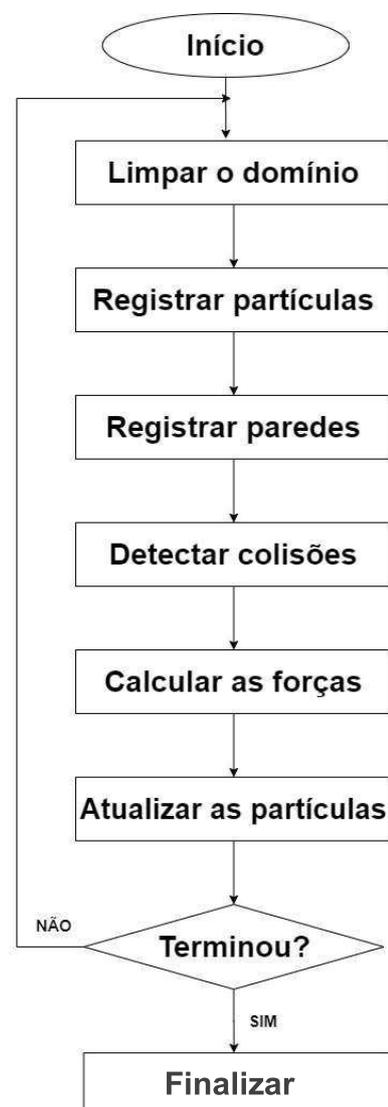
Os modelos do primeiro grupo utilizam equações que assumem que os poros do leito diminuem progressivamente devido ao volume de sólidos suspensos acumulados no sistema, como os modelos propostos por Hua; Zhu e Zhang (2010) e Langergraber *et al.* (2003). Os modelos do segundo grupo são mais complexos e contam com a influência de diversos fatores que contribuem para a colmatação. O modelo desenvolvido por Giraldi *et al.* (2010), chamado de FITOVERT, conta com expressões analíticas para o fluxo hidráulico, transporte de massa dos sólidos suspensos e dissolvidos e os efeitos da colmatação física e biológica na condutividade do leito.

2.3 MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS

O método dos elementos discretos (em inglês: DEM - *Discrete Element Method*) foi desenvolvido por Cundall e Strack (1979). Esse método descreve o comportamento mecânico de partículas granulares. O método compreende o uso de um esquema numérico no qual rastreia-se a posição, calcula-se a interação entre as partículas, as velocidades e aceleração das partículas. (RADJAÏ; DUBOIS, 2011)

O esquema numérico de uma simulação DEM inclui limpar o domínio da simulação, registrar as partículas e as paredes da simulação, detectar contato, calcular a força e atualizar a posição das partículas. Na Figura 12 é ilustrado o fluxograma desse esquema. As equações principais desse método envolvem a alternância entre a segunda lei de Newton e a força-deslocamento dos contatos, as quais fornecem a aceleração resultante da partícula sob as forças que atuam sobre ela, como a força gravitacional e forças externas fornecidas nas condições de contorno. O esquema é repetido até que seja atingido o equilíbrio do sistema (SANCHES; CARRION; LIMA, 2018; SHIGETO; SAKAI, 2011).

Figura 12. Fluxograma de uma simulação DEM



Fonte: Shigeto e Sakai (2011)

Primeiramente, são calculadas as forças de contato entre as partículas, conforme a Equação (3).

$$F_i^n = K^n U^n n_i \quad (3)$$

Em que:

F_i^n : o vetor da força normal (N);

K^n : a rigidez do contato (N/m);

U^n : Superposição entre as partículas;

n_i : o vetor normal.

Em seguida, pela segunda Lei de Newton, são determinadas as velocidades e acelerações das partículas, por meio da Equação (4).

$$m_i a_i^t = F_i^t \quad (4)$$

Em que:

m_i : a matriz de inércia (kg);

a_i^t : o vetor de aceleração no tempo (m^2/s);

F_i^t : o vetor da força resultante (N).

A relação entre o vetor de velocidade e a aceleração é calculada por meio do método de integração, também chamado de integração no tempo de Verlet, representado na Equação (5), conforme Cundall e Strack (1979).

$$a_i^t = \frac{1}{\Delta t} \left(v_i^{t+\frac{\Delta t}{2}} - v_i^{t-\frac{\Delta t}{2}} \right) \quad (5)$$

Sendo:

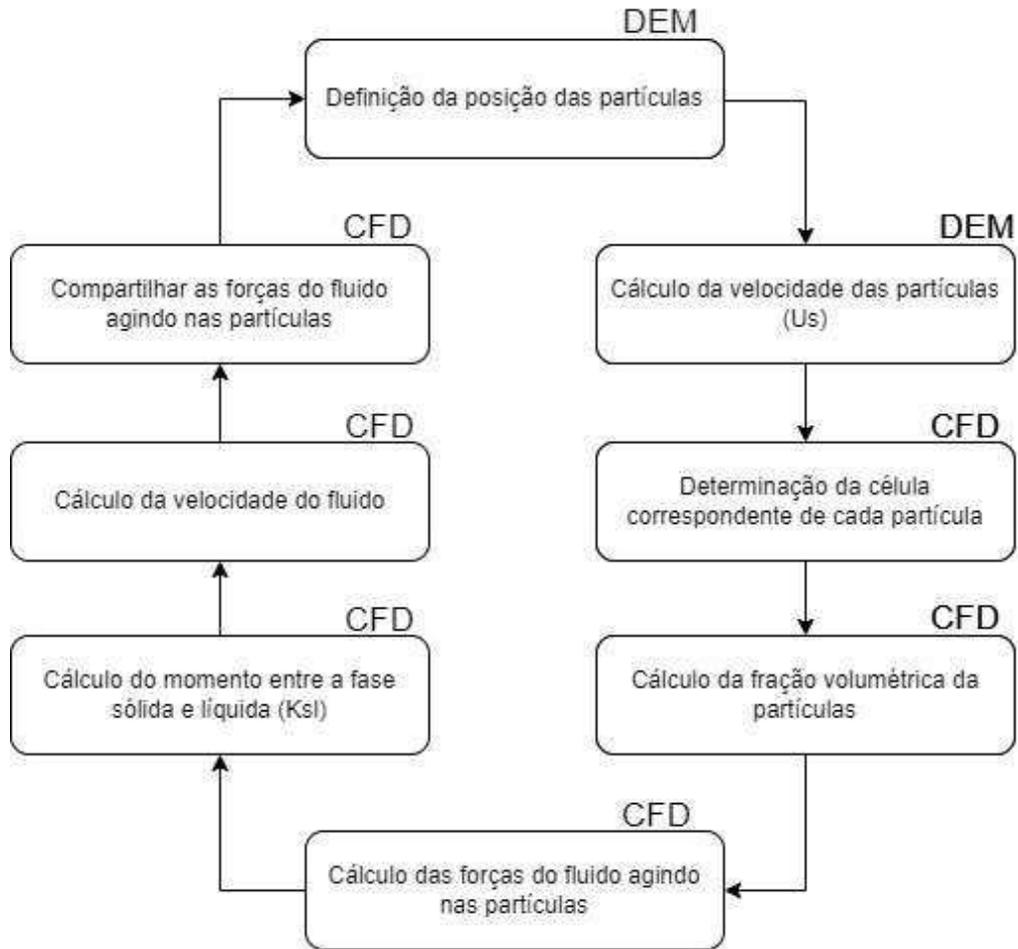
$v_i^{t+\Delta t/2}$ e $v_i^{t-\Delta t/2}$: velocidade em m/s no $t+\Delta t/2$ (s) e $t-\Delta t/2$ (s), respectivamente.

Grande parte dos códigos DEM adotam as partículas em formatos esféricos para facilitar a detecção de contatos, pois isso faz com que exista apenas um tipo de contato possível e permite adotar apenas o raio para representação geométrica. (NEVES, 2009).

2.4 ACOPLAMENTO CFD-DEM

A abordagem de acoplamento entre CFD-DEM é uma ferramenta robusta para modelagem de sistema que envolve fluxo em meio granular. A rotina de acoplamento intercala os componentes DEM e CFD (GONIVA *et al.*, 2012) conforme a Figura 13.

Figura 13. Rotina de acoplamento entre CFD-DEM



Fonte: O autor

A fase fluida, calculada pelo componente CFD, é descrita pelas equações de Navier-Stokes com uma fase sólida presente (Equação (6) onde é inserido o momento implícito entre a fase sólida e líquida (K_{sl}) (Equação (7)).

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l u_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l u_l u_l) = -\alpha_l \nabla p - K_{sl}(u_l - u_s) + \nabla \cdot (\alpha_l \tau) + \alpha_l \rho_l g + f \quad (6)$$

$$K_{sl} = \frac{\alpha_l \cdot \left| \sum_i F_d \right|}{V_{cell} \cdot |u_l - u_s|} \quad (7)$$

Sendo:

“ l ” subscrito: se refere ao líquido;“ s ” subscrito: se refere ao sólido; α : fração volumétrica; u : velocidade (m/s); ρ : densidade (kg/m³); t : tempo (s); g : vetor da gravidade (m/s²); f : termo geral para momento explícito τ : Tensor de tensão do líquido; F_d : as forças do fluido agindo nas partículas (N); V_{cell} : volume da célula CFD (m³)

Na fase particulada o movimento das partículas é governado pelas Leis de Newton na forma Lagrangiana, que rastreia a posição das partículas e calcula sua trajetória baseando-se no balanço entre força e torque. É calculada pelo componente DEM conforme as Equações (8) e (9) (GONIVA *et al.*, 2012).

$$m_p \ddot{\chi}_p = F_{p,n} + F_{p,t} + F_{p,f} + F_{p,p} + F_{p,v} + F_{p,b} \quad (8)$$

$$I_p \frac{d\omega_p}{dt} = r_{p,c} \times F_{p,t} + T_{p,r} \quad (9)$$

Sendo:

m_p : massa das partículas (kg);

χ_p : posição das partículas (x,y,z);

$F_{p,n}$: força normal de contato das partículas (N);

$F_{p,t}$: força tangencial de contato das partículas (N);

$F_{p,f}$: força de arraste exercida pelo fluido na partícula (N);

$F_{p,p}$: força da pressão agindo na partículas (N);

$F_{p,v}$: força viscosa agindo na partícula (N);

$F_{p,b}$: outras forças (N), como as forças da gravidade, eletrostática e magnética que são aglomeradas nesse termo;

I_p : matriz identidade da partícula;

ω_p : velocidade angular da partícula (rad/s);

$r_{p,c}$: raio de contato da partícula (m);

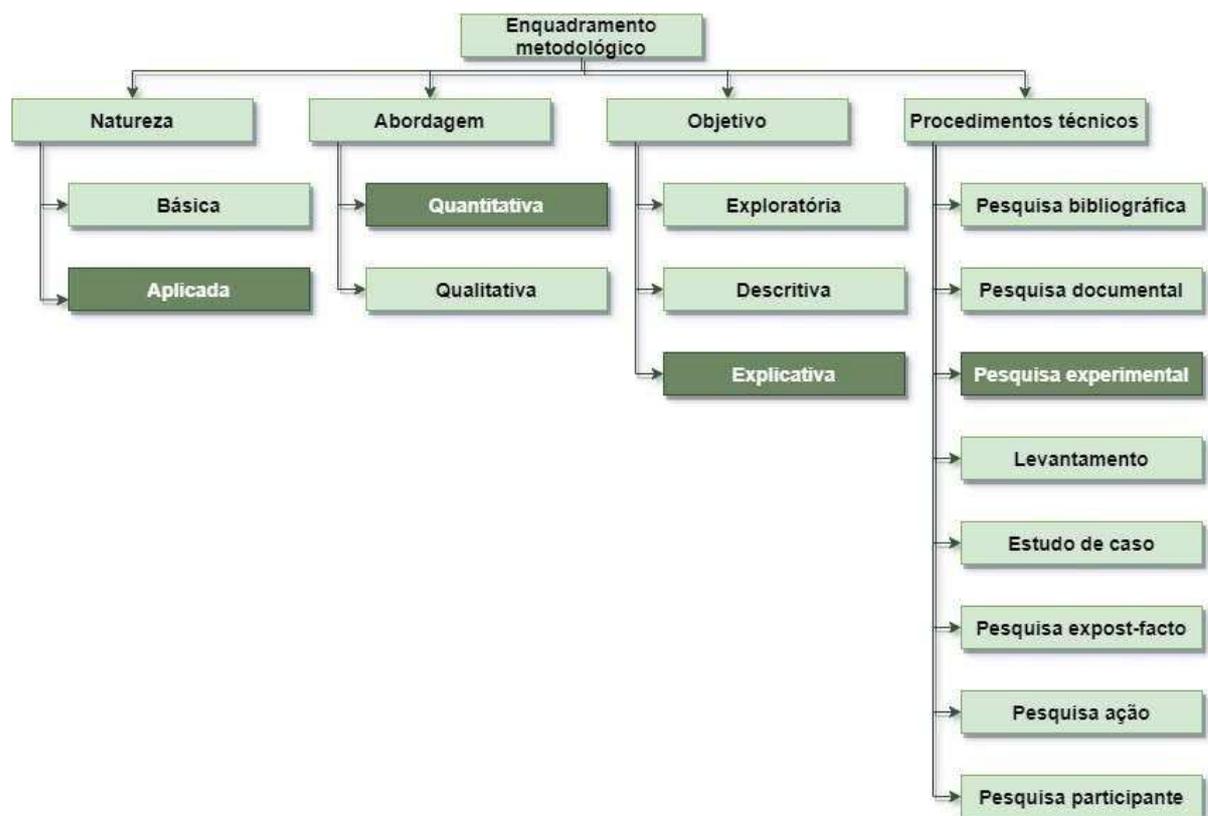
$T_{p,r}$ é o torque relativo das partículas (N.m)

3. MATERIAIS E MÉTODOS

Neste trabalho foi proposto o desenvolvimento de um modelo de simulação utilizando a Fluidodinâmica Computacional (CFD) acoplada ao Método dos Elementos Discretos (DEM) de um *Wetland* Construído Subsuperficial Horizontal (WCSH), com softwares de fonte aberta para avaliar a hidrodinâmica do WCSH.

A natureza da pesquisa é considerada aplicada, pois tem como objetivo gerar conhecimentos para aplicabilidade do modelo em problemas específicos. Quanto a forma de abordagem é considerada quantitativa, pois traduz a otimização do sistema em recursos quantificáveis. Do ponto de vista dos objetivos é considerada explicativa, pois identifica fatores e está relacionada aos procedimentos técnicos de uma pesquisa experimental (SILVA; MENEZES, 2001). Na Figura 14 está representada esquematicamente a classificação desta pesquisa.

Figura 14. Enquadramento metodológico da pesquisa

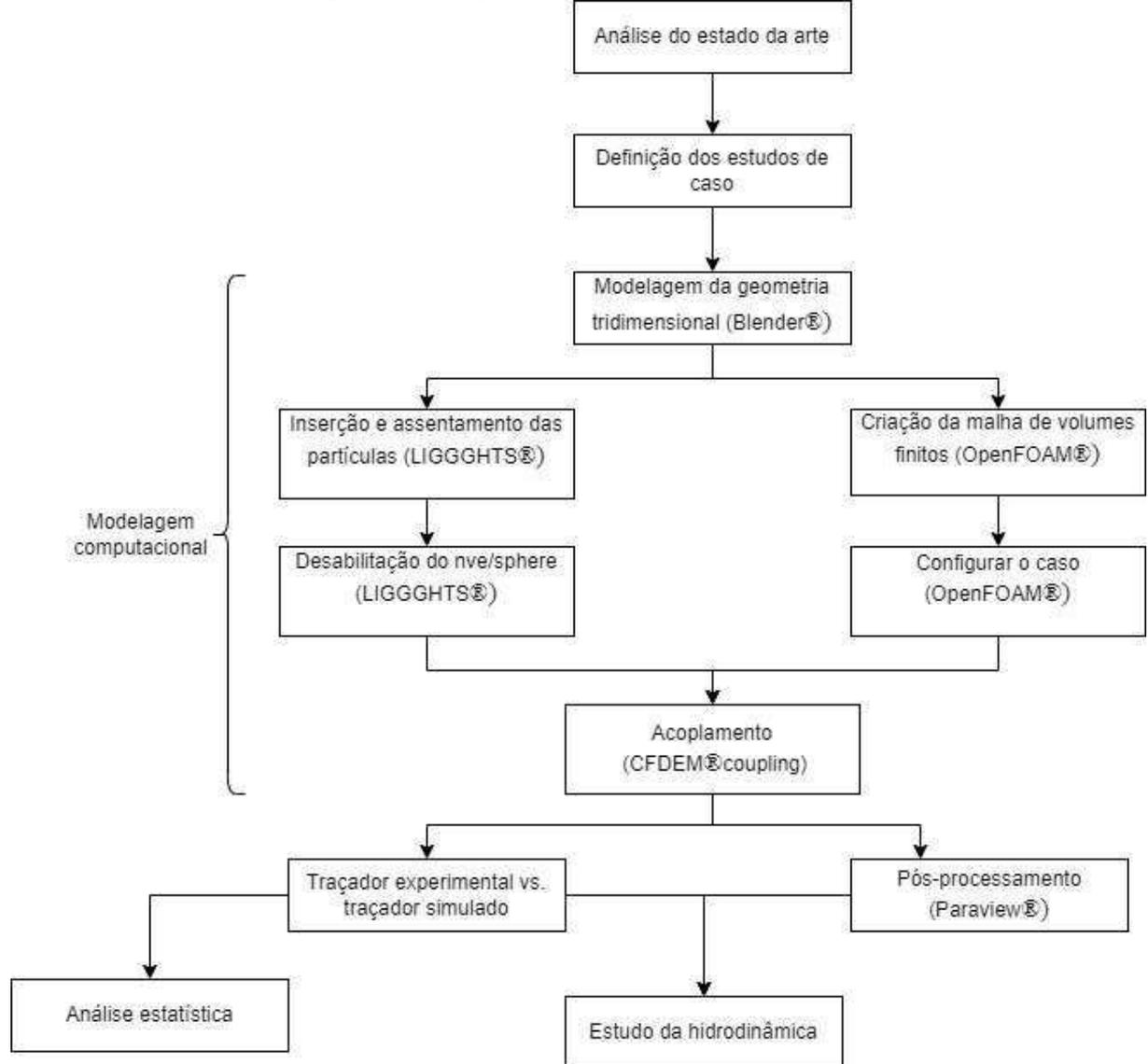


Fonte: O autor

Na Figura 15 está ilustrado o fluxograma dos métodos de procedimentos. Resumidamente, foram definidos dois casos em WCs em escala de laboratório, nos quais foram realizados

testes para validação inicial do modelo por meio da comparação do teste de traçador e, por fim, uma análise do pós-processamento das simulações.

Figura 15. Fluxograma dos métodos de procedimentos



Fonte: O autor

3.1. ANÁLISE DO ESTADO DA ARTE

A análise do estado da arte sobre modelos CFD de WCs foi apresentado em forma de artigo, onde foi realizada análise sistemática do estado da arte sobre modelos CFD para WCs com objetivo de buscar lacunas de pesquisa sobre o tema. O texto apresentado no item 4.1 foi traduzido e adequado para a dissertação, sendo o texto original enviado em inglês como artigo científico para a revista *International Journal of Environmental Science and Technology* em maio de 2022. Uma busca na literatura não identificou qualquer referência sobre acoplamento CFD-DEM para WCs.

3.2. DESCRIÇÃO DOS ESTUDOS DE CASO

A validação do modelo numérico foi realizada utilizando dados experimentais de *wetlands* construídos em dois estudos de caso. Os experimentos adotados para validação do modelo foram conduzidos por Bandeiras (2009) no Laboratório de Saneamento Ambiental (LSA) do Departamento de Engenharia Civil e Arquitetura (DECA) da Universidade da Beira Interior (UBI) em Portugal e por Gikas *et al.* (2017), realizado no Laboratório de Engenharia Ecológica e Tecnologia do Departamento de Engenharia Ambiental da Universidade Demócrito de Trácia, na Grécia. Ambos foram escolhidos, principalmente, devido às dimensões reduzidas, e no caso de Bandeiras (2009) as partículas serem em formato esférico e ser não vegetado, assim como as partículas da simulação.

O WC de Bandeiras (2009) foi construído em acrílico, com 2 m de comprimento, 0,80 m de largura e 0,70 m de altura, preenchido com argila expandida (diâmetro na faixa de 4-8 mm) a 0,50 m. Gikas *et al.* (2017) estudaram um WC construído em um tanque de 3,0 m de comprimento, 0,75 m de largura e preenchido com cascalho médio ($D_{50}=15.0\text{mm}$, diâmetro entre 4~25mm) a 0,45m de altura.

Na Tabela 2 estão resumidas as características dos WCs em escala de laboratório em estudo.

Tabela 2. Características dos *Wetlands* Construídos

Características	Bandeiras (2009)	Gikas <i>et al.</i> (2017)
Formato	Retangular	Retangular
Água residuária tratada	Esgoto sintético	Esgoto sintético
Vegetação	Não vegetado	<i>Typha latifolia</i>
Comprimento útil (m)	1,90	3,00
Largura (m)	0,80	0,75
Nível de água (m)	0,20	0,45
Altura do meio de enchimento (m)	0,50	0,45
Porosidade do leito	0,45	0,32
Área útil (m ²)	0,68	0,72
Volume útil (m ³)	0,136	0,324
Declive (%)	1	0
Diâmetro médio do material de enchimento (mm)	4 – 8	4 – 25
Vazão do escoamento (m ³ /d)	0,024	0,090

Fonte: O autor

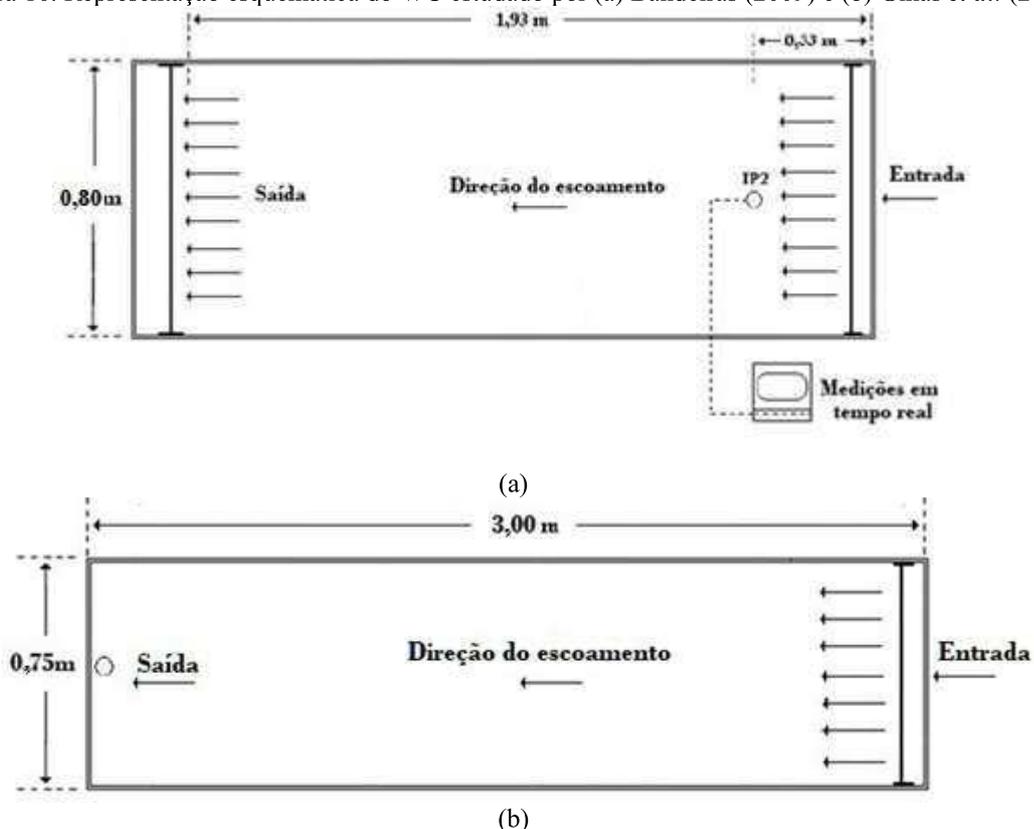
O WCSH de Bandeiras (2005) foi utilizado em pesquisas dedicadas a estudar a influência das condições de alimentação na remoção de poluentes (RENKER; ALBUQUERQUE, 2007), validar um modelo numérico que descreve a dispersão longitudinal (ARAÚJO; SOUSA; ALBUQUERQUE, 2008), estudar a relação entre o regime de escoamento e o transporte de poluentes (ALBUQUERQUE, ANTONIO; BANDEIRAS, 2007).

O WC de Gikas *et al.* (2017) foi utilizado para avaliação dos efeitos de diferentes parâmetros na remoção de poluentes, tais como: temperatura, tempo de residência e meio poroso (AKRATOS; TSIHRINTZIS, 2007); uso de neozilite (STEFANAKIS *et al.*, 2009); influência do nível de água e recirculação (STEFANAKIS; TSIHRINTZIS, 2009), alimentação por batelada (STEFANAKIS; AKRATOS; TSIHRINTZIS, 2011), evapotranspiração (PAPAEVANGELOU; GIKAS; TSIHRINTZIS, 2012), parâmetros de dimensionamento, e remoção específica do cromo (PAPAEVANGELOU; GIKAS; TSIHRINTZIS, 2017).

3.2.1. Ensaio com traçadores e parâmetros hidrodinâmicos

Para obter informações sobre o regime hidráulico e a eficiência hidráulica dos sistemas ambos estudos adotaram testes com traçadores. Bandeiras (2009) utilizou uma injeção discreta de um pequeno volume de solução de cloreto de sódio (100 g/L) e aferiu a condutividade elétrica em pontos de amostragem internos ao longo do leito, dispostos conforme a Figura 16a, e em seguida, os valores foram convertidos para concentração (em mg/L). Gikas *et al.* (2017) injetou uma solução com brometo de potássio (75,33 mg/L) e mediu sua concentração na tubulação de saída Figura 16b.

Figura 16. Representação esquemática do WC estudado por (a) Bandeiras (2009) e (b) Gikas *et al.* (2017)



Fonte: adaptado de Bandeiras (2009) e Gikas *et al.* (2017)

Cabe salientar que, para o estudo de Bandejas (2009), foram aferidas concentrações em outros pontos pelo leito, porém, nesse estudo foram utilizados os dados referentes ao ponto mais próximo da entrada, visto o gasto computacional necessário para simular os pontos mais distantes da entrada.

O teste com traçador é a principal ferramenta experimental para obtenção da distribuição do tempo de residência em WCs. Esse teste consiste na injeção de uma substância inerte na entrada do sistema, e em seguida, são aferidas as concentrações na saída do leito ($C(t)$, em mg/l) em intervalos regulares (t , em s). A função da distribuição do tempo de residência (Equação (10), $E(t)$, indica quantitativamente quanto tempo as moléculas do fluido permaneceram no interior do reator (ALVARENGA *et al.*, 2013; STEPHENSON; SHERIDAN, 2021).

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt} \quad (10)$$

O monitoramento da curva concentração-tempo do teste com traçadores permite analisar vários aspectos do comportamento hidrodinâmico do sistema. Nesse estudo foi utilizado o método dos momentos para análise da resposta do teste com traçadores. Nesse método é necessário determinar os dois momentos da curva concentração-tempo no teste com traçador (METCALF, 2003).

Momento 1: o tempo de detenção hidráulica médio (M_1 ou t_m), conforme a Equação (11), que indica o tempo médio que as partículas do traçador permanecem no sistema;

Momento 2: a variância (M_2 ou σ^2), conforme a Equação (12).

$$M_1 = t_m = \frac{\int_0^{\infty} tE(t) dt}{\int_0^{\infty} E(t) dt} \quad (11)$$

$$M_2 = \sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t) dt \quad (12)$$

O tempo de contato do efluente com os elementos do leito é chamado de tempo de residência, e em sistemas de tratamento de esgoto, quanto maior o tempo de residência, maior será o tempo do contato do efluente com o meio e conseqüentemente melhor será a eficiência de remoção de poluentes (DANCKWERTS, 1953; LEVENSPIEL, 2000).

Outra abordagem utilizada para interpretação e análise da distribuição do tempo de residência é a definição do modelo de escoamento ideal a qual o reator se aproxima. Há dois

modelos de escoamento ideal: o reator de fluxo em pistão (em inglês: *Plug Flow Reactor*) e o reator de mistura completa (em inglês: *Continuous Stirred Tank Reactor*, CSTR). No reator com fluxo em pistão as moléculas do fluido atravessam o sistema alinhadamente e com a mesma velocidade, portanto, não há mistura por dispersão axial. Já no escoamento de mistura completa, a composição do fluido é homogênea devido a completa mistura das moléculas da massa líquida (DANCKWERTS, 1953; LEVENSPIEL, 2000).

Para determinar o modelo de escoamento ideal foi utilizado o modelo de tanque-em-série e calculado o índice de dispersões (d). No modelo de tanque-em-série é calculado quantos reatores em série (N) (Equação (13) de tamanhos iguais e agitados continuamente forneceriam a mesma curva resposta do experimento. Caso $N=1$, indica alto grau de mistura e considera-se que o leito se comporta como CSTR. Ao N tender ao infinito, o grau de mistura tende a zero e o comportamento se aproxima do modelo de fluxo em pistão (STEPHENSON; SHERIDAN, 2021). O modelo ideal de fluxo em pistão é preferível para sistemas de tratamento de esgoto, pois considera que todas moléculas do fluido escoam na mesma velocidade e chegam à saída ao mesmo tempo (BODIN *et al.*, 2013).

Para valores de N superiores a 4 a curva torna-se cada vez mais simétrica e semelhante a uma distribuição normal, indicando que o escoamento se aproxima do fluxo em pistão. Valores de N inferiores a 4 indicam que o escoamento se afasta do fluxo em pistão, apresentando condições de mistura. A Equação (13) foi obtida por meio do estudo de Levenspiel (2000), calculada conforme o número de dispersão (d).

$$N = \frac{1}{2d - 2d^2 \left(1 - \exp\left(-\frac{1}{d}\right)\right)} \quad (13)$$

O número de dispersão (d) também está relacionado ao modelo de fluxo ideal. Arceivala (1981) propôs uma solução para obtenção de d (Equação (14) por iteração, ao relacionar o comprimento do leito (L , em m) o valor da velocidade média teórica (v_{med}), calculada pela Equação (15).

$$d = \frac{v_{med} \cdot t_m - L}{2 \cdot L} \quad (14)$$

$$v_{med} = \frac{\int \frac{c(t)}{t}}{\int c(t)} \quad (15)$$

Foram utilizados os valores indicados na Tabela 3 para classificação do grau de dispersão quanto ao valor de d .

Tabela 3. Variação do número de dispersão para os diferentes graus de dispersão

Grau de dispersão	d
Fluxo pistão	0
Pequena dispersão	0,000 a 0,002
Dispersão intermediária	0,002 a 0,025
Forte dispersão	0,025 a 0,200
Mistura completa	Tende ao infinito

Fonte: Santamaria *et al.* (1999)

Também foram definidos o tempo de detenção hidráulica teórico (τ) e a eficiência hidráulica (λ) para diagnosticar as condições hidrodinâmicas do sistema:

O tempo de detenção hidráulica teórico (τ) foi calculado, conforme a vazão do sistema, dimensões e porosidade, pela Equação (16).

$$\tau = \frac{L \cdot B \cdot h \cdot \varepsilon}{Q} \quad (16)$$

Em que L , B e h (em m) são o comprimento, largura e altura, respectivamente, em m, ε é a porosidade drenável do leito e Q é a vazão de projeto (m^3/s).

O cálculo da eficiência hidráulica (λ), proposto por Persson *et al.* (1999) avalia não apenas o volume efetivamente utilizado, mas também a resposta da curva do traçador. Na Equação (17) são relacionados o tempo em que ocorreu o pico na concentração do traçador (t_p) e o τ .

$$\lambda = \frac{t_p}{\tau} \quad (17)$$

3.3. MODELAGEM COMPUTACIONAL

Foi utilizado o *software* CFDEM@coupling para acoplamento entre o CFD e DEM. O código foi escrito por Goniva *et al.* (2012) baseado nos códigos abertos OpenFOAM (*Open Source Field Operation and Manipulation*) e no código LIGGGHTS (*LAMMPS improved for general granular and granular heat transfer simulations*) que, por sua vez, é uma melhoria do código LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*).

A fase fluida é descrita pelas equações de Navier-Stokes na forma Euleriana, no OpenFOAM por meio do algoritmo de resolução PISO (*Pressure-Implicit with Splitting of Operators*), detalhado na Figura 17. O movimento das partículas é governado pelas Leis de Newton na forma Lagrangiana calculados pelo LIGGGHTS. O código do CFDEM@coupling adiciona uma fração volumétrica na equação de Navier-Stokes e troca as informações acerca da interação entre o fluido e as partículas.

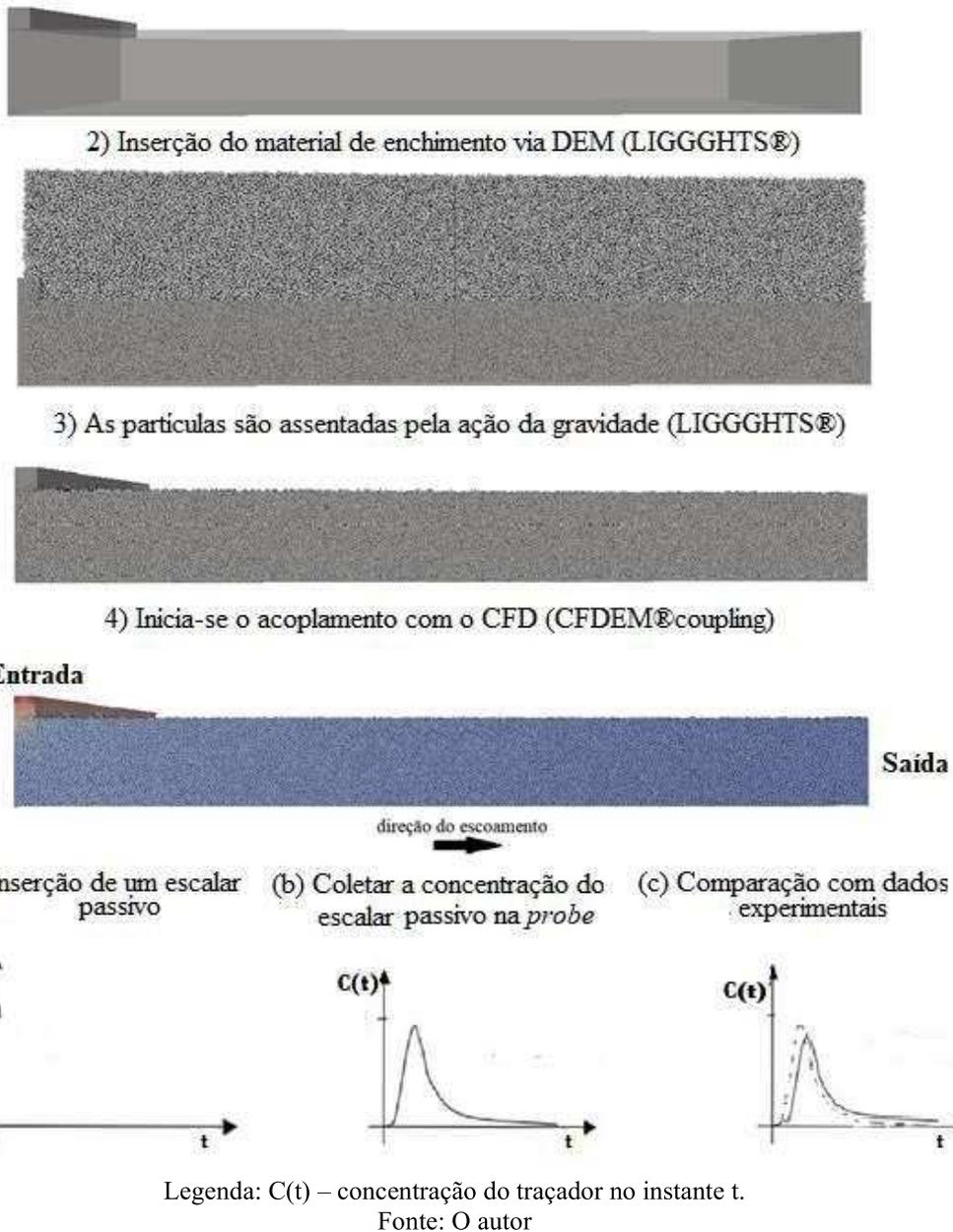
Figura 17. Esquema do algoritmo PISO



Fonte: Mughal (2016)

O componente DEM foi responsável por modelar o meio poroso, visto a habilidade dessa abordagem em simular de maneira realística os processos relacionados com o meio granular na escala das partículas, e em seguida foi liberado o escoamento do fluido, calculado pelo componente CFD (ZHAO; SHAN, 2013). Na Figura 18 está ilustrado o fluxograma da simulação. Primeiramente, foi modelada a geometria virtual, em seguida modelou-se o meio poroso por meio do DEM. As partículas foram inseridas e assentadas pela ação da gravidade. Por último, acoplou-se o meio poroso do DEM com o CFD, onde foram inseridos um escalar passivo como traçador sintético para posterior comparação com os traçadores experimentais.

Figura 18. Fluxograma da simulação
1) Modelagem da geometria virtual no Blender®

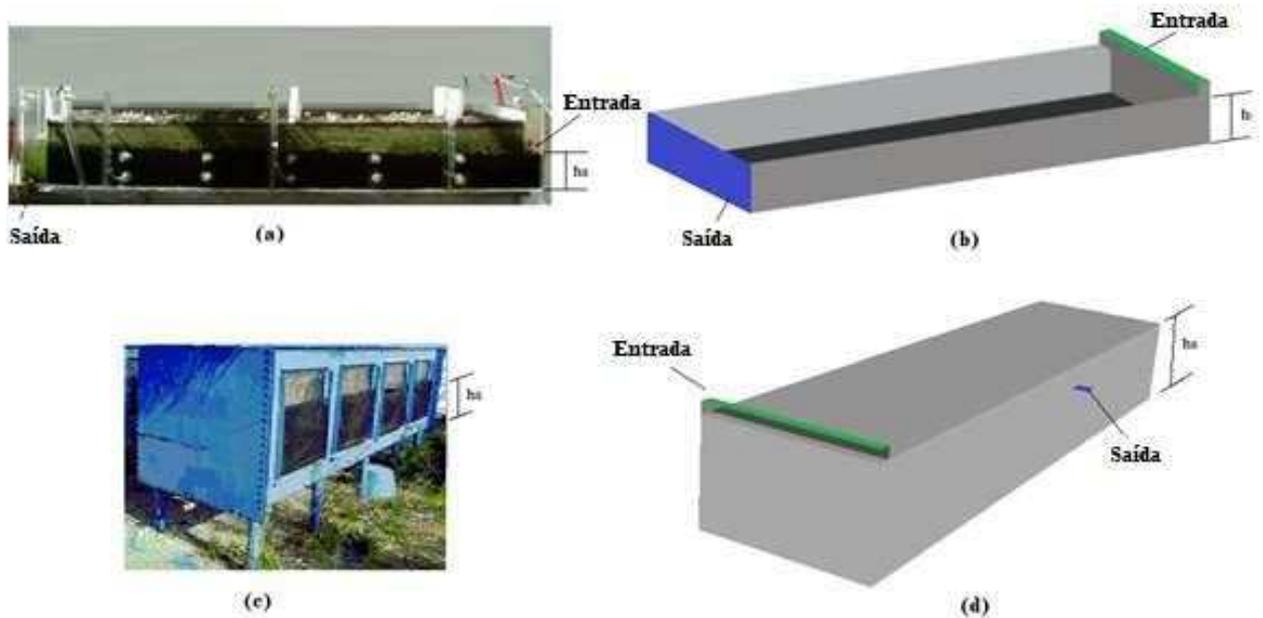


3.3.1. Modelagem da geometria tridimensional

O *software Blender*® foi escolhido para modelagem dos leitos, pois, além de ser uma plataforma aberta, possibilita a exportação da geometria 3D em formato estereolitográfico, o qual é suportado pelos *softwares* utilizados no modelo.

As simulações compreenderam apenas a altura útil dos leitos. Foram adotadas algumas simplificações nas configurações da entrada e saída., conforme a Figura 19, onde foram comparados os leitos utilizados nos experimentos e as geometrias utilizada nas simulações.

Figura 19. Comparação entre os leitos experimentais de (a) Bandeiras (2009) (a) e (c) Gikas *et al.* (2017) (b) e a geometria tridimensional de (b) Bandeiras (2009) e (d) Gikas *et al.* (2017)



Legenda: H_s – Altura útil

Fonte: (a) Bandeiras (2009); (b) O autor; (c) Gikas *et al.* (2017); (d) O autor

3.3.2. Componente CFD

Dentre os solvers disponíveis pelo *software* CFDEM®coupling, foi adotado o *cfemSolverPisoScalar*, onde o componente CFD baseia-se no solver *pisoFoam* do OpenFOAM®, que considera o escoamento de fluidos incompressíveis em regime transiente e utiliza o algoritmo de resolução PISO (*Pressure-Implicit with Splitting of Operators*). Goniva *et al.* (2012) habilitaram a abordagem lagrangiana ao solver CFD e acrescentaram uma equação de transporte escalar.

Foram definidas as condições de contorno, nas quais foram estabelecidos os pontos de entrada e saída do fluxo, a condição da superfície e das paredes. Para a entrada do escoamento foi empregado o tipo *massFlowInlet* em que a velocidade é calculada conforme a vazão volumétrica, cujo valor adotado consta na Tabela 2. No Quadro 2 foram resumidas as condições de contorno da simulação computacional.

Quadro 2. Resumo das condições de contorno

Condições de contorno		Definições
Entrada	<i>Inlet</i>	velocidade= <i>massFlowInlet</i> ; pressão= <i>zeroGradient</i>
Saída	<i>Outlet</i>	velocidade= <i>ZeroGradient</i> ; pressão=0
Superfície	<i>Top</i>	<i>Wall (slip)</i>
Paredes	<i>Boundaries</i>	<i>Wall (no-slip)</i>

Fonte: O autor

Os passos de tempo das simulações foram definidos de modo que o número de Courant máximo não ultrapassasse 1. O número de Courant relaciona a velocidade do escoamento, o tamanho da célula CFD e o passo de tempo e é um coeficiente que indica o quanto a informação se propaga pela célula CFD. Caso esse valor ultrapasse 1, indica que a informação se propagou por mais de uma célula da malha em cada passo de tempo, tornando a solução imprecisa, o que pode dificultar a convergência dos resultados (COURANT; FRIEDRICHS; LEWY, 1928). Sendo assim o passo de tempo adotado foi 120 s para a simulação de Bandeiras e 45 s para a simulação de Gikas *et al.* (2017). Outros parâmetros da simulação estão dispostos no Quadro 3.

Quadro 3. Parâmetros principais da simulação

Categoria	Tempo	Transiente
	Fluxo	Incompressível
Regime de turbulência	Turbulência	Laminar
Propriedades de transporte	Modelo de transporte	Newtoniano
	Viscosidade cinemática (ν)	$1,0e^{-6}$ m ² /s
Esquemas de processamento	Solver p	PCG
	Solver U	PBiCG
	Esquema de interpolação	Linear
	Esquema gradiente normal a superfície	Limited corrected 0.333
	Esquema gradiente	Gauss Linear
	Esquema divergente	Gauss Linear
	Esquema laplaciano	Gauss Linear <i>limited</i>
	Esquema do tempo	Euler
	Tolerância	1e-05
	Tolerância relativa p	0,01

Fonte: O autor

Há três regimes de turbulência, definidos conforme o número de Reynolds, laminar ($Re_p < 0,4$), intermediário ($0,4 < Re_p < 500$) e turbulento ($Re_p > 500$). Em escoamento em meio granular o número de Reynolds é calculado conforme a Equação (18) (BONADONNA; ERNST; SPARKS, 1998).

$$\Re_p = \frac{u_l d_p}{\nu} \quad (18)$$

Em que:

Re_p – Número de Reynolds para escoamento granular

u_l – Velocidade do escoamento (m/s)

d_p – Diâmetro das partículas (m)

ν – coeficiente de viscosidade cinemática (m²/s).

Os Re_p calculados foram 0,06 e 0,21 para os estudos de Bandeiras (2009) e Gikas *et al.* (2017), respectivamente, atestando o regime dos WCs como laminar.

3.3.2.1. Malha de volumes finitos

Um ponto chave para a modelagem CFD-DEM é a análise da sensibilidade da malha. Em modelos CFD-DEM o tamanho da célula CFD deve ser definido conforme o diâmetro das partículas do DEM. Conforme Peng *et al.* (2014), o tamanho da célula da malha CFD deve estar compreendido entre 2 a 4 vezes maior que o diâmetro das partículas devido à natureza do algoritmo no cálculo da porosidade e força de arraste. Porém, células muito grandes podem diminuir a acurácia das simulações CFD. Foi aplicado um refinamento na malha na zona de entrada e saída de modo a garantir melhor detalhamento nessas áreas.

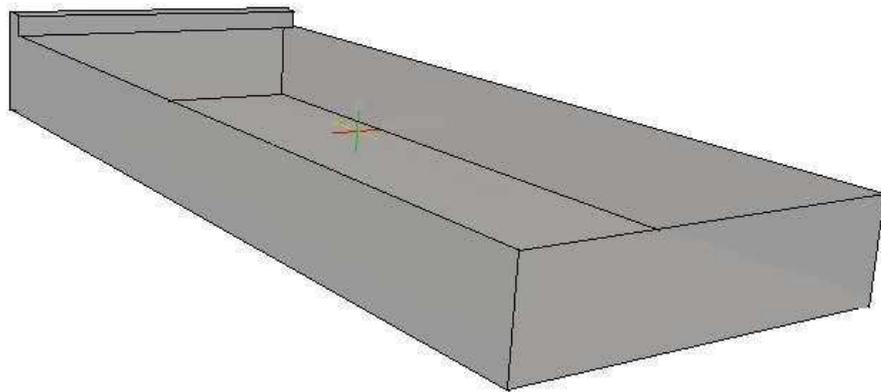
Assim sendo, o monitoramento da sensibilidade da malha para os diferentes estudos de caso foi realizado em três tamanhos diferentes, conforme o diâmetro das partículas. Utilizou-se a pressão em um ponto central do leito como critério de convergência, conforme ilustrado na Figura 20. A malha foi considerada convergida se a diferença entre a pressão no ponto for menor que 5%. Na Tabela 4 estão representados os detalhes das malhas testadas para os diferentes estudos de caso.

Tabela 4. Detalhes das malhas testadas para os estudos de caso

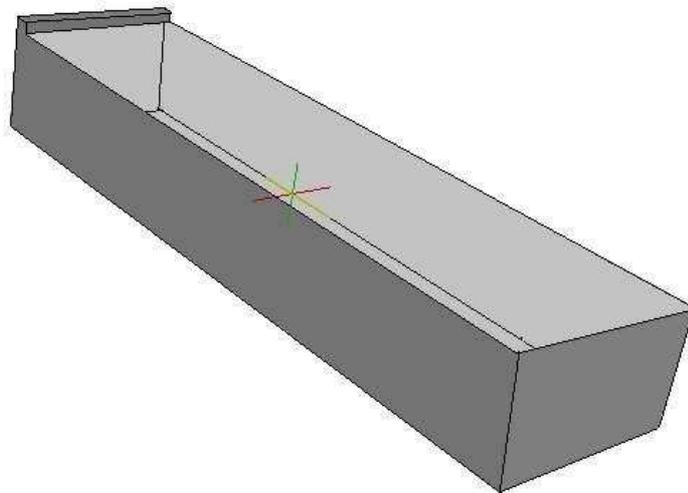
	Bandeiras (2009)		Gikas <i>et al.</i> (2017)	
	Tamanho médio da célula (m)	Número de volumes finitos	Tamanho médio da célula	Número de volumes finitos
Malha# 1	0,016	84664	0,050	47833
Malha# 2	0,024	23133	0,075	15456
Malha# 3	0,032	10525	0,100	6502

Fonte: O autor

Figura 20. Indicação do ponto central para o estudo de caso de (a) Bandeiras (2009) e de (b) Gikas *et al.* (2017)



(a)



(b)

Fonte: O autor

3.3.2.2. Convergência

Os resíduos numéricos foram monitorados para garantir a convergência das simulações. Neste trabalho a tolerância dos resíduos empregada foi na ordem de 10^{-5} , conforme aconselhado por Tu *et al.* (2018) para estudos acadêmicos.

3.3.3. **Componente DEM**

A modelagem DEM é realizada por meio do ajuste do roteiro de entrada. O roteiro de entrada é subdividido em inicialização; definição das características das partículas e da inserção; configuração dos parâmetros da simulação e das opções de saída, e no caso de utilizar acoplagem com o CFD é necessária inserção de comandos específicos (GONIVA *et al.*, 2012).

No Quadro 4 estão representadas as configurações principais da simulação.

Quadro 4. Configurações do roteiro de entrada

Etapa	Configuração	Valor
Inicialização	Estilo da partícula	Granular
	Definição do contorno	<i>fixed</i>
Parâmetros da simulação	Modelo de contato	<i>Hertz tangential history</i>
	Passo de tempo	1e-06 s

Fonte: O autor

Uma etapa importante para qualidade dos resultados é a definição correta das propriedades das partículas. Devido à ausência de maiores especificações sobre a granulometria do material de enchimento pelos estudos de caso, foi definida granulometria baseando-se na faixa granulométrica do tipo de agregado utilizado nos ensaios experimentais. Tendo em vista a economia computacional, foram adicionadas maiores proporções das partículas de maior diâmetro da faixa indicada pelos estudos, visto que o gasto computacional do componente DEM está diretamente relacionado com o número de partículas geradas na simulação (LU; ZHANG; JIAN, 2017).

No estudo de caso de Bandejas (2009) adicionou-se 1% de 4 mm de diâmetro, 1% de partículas de 5 mm de diâmetro, 30% de partículas de 6 mm de diâmetro, 38% de partículas de 7 mm e 30% de partículas de 8 mm de diâmetro. No estudo de caso de Gikas *et al.* (2017) adotou-se, em massa, 1% das partículas de 5 mm de diâmetro, 1% de 10 mm, 43% de 75 mm, 22% de 20 mm e 33% de 25 mm.

Na simulação baseada no estudo de Bandejas (2009) adotou-se 1700 kg/m³ para a densidade da argila expandida, conforme especificação do fabricante. Já para a densidade da brita utilizada no estudo de Gikas *et al.* (2017) foi considerada a densidade do granito, 2600 kg/m³ (OLHOEFT; JOHNSON, 1989).

Em relação aos coeficientes de fricção, não há estudos relativos à fricção da argila expandida. Por isso, adotou-se os valores para rochas naturais. O coeficiente de fricção rocha-rocha adotado foi 0,808 (DIETERICH, 1972).

Na Tabela 5 são apresentadas resumidamente as propriedades das partículas adotadas no estudo, alguns valores foram adotados como o padrão do *software*.

Tabela 5. Propriedades das partículas

Característica	Bandeiras (2009)	Gikas <i>et al.</i> (2017)
Diâmetro das partículas do material de enchimento (m)	0,004~0,008	0,005~0,025
Densidade das partículas do material de enchimento (kg/m ³)	1700	2600
Coeficiente de fricção entre o material de enchimento (-)	0,808	0,808
Módulo de Young (N/m ²)	5×10 ⁶	5×10 ⁶
Coeficiente de Poisson (-)	0,33	0,33
Coeficiente de restituição (-)	0,30	0,30
Coeficiente de resistência ao rolamento (-)	0,71	0,71

Fonte: O autor

As partículas do leito foram inseridas e assentadas simplesmente sob a aceleração da gravidade. Após o assentamento das partículas, a função *nve/sphere* foi desabilitada para economizar o gasto computacional. Esse comando atualiza a posição, a velocidade e a velocidade angular das partículas, e como as posições das partículas já haviam sido estabelecidas a desabilitação desse comando evita recálculos desnecessários. Posteriormente o passo de tempo foi modificado para o mesmo valor do passo de tempo do componente CFD.

3.3.4. CFD-DEM

Para permitir que o CFDEM®*coupling* troque as informações entre os métodos de simulação, é necessário inserir um comando no roteiro de entrada do componente DEM que autoriza o acoplamento no CFDEM®*coupling*. No componente CFD é necessário inserir alguns parâmetros no diretório *constant* para o *software* acoplar os modelos, como apresentar o sub-modelo e o modelo de força. No Quadro 5 estão dispostas as configurações principais para o acoplamento.

Quadro 5. Configurações do acoplamento CFD-DEM

Configuração	Valor
Passo de tempo DEM (antes do assentamento das partículas)	1×10^{-6}
Passo de tempo DEM (após o assentamento das partículas)	Δt do CFD
Intervalor de acoplamento	1
Sub-modelo	Bfull
<i>VoidFractionModel</i>	<i>Diveded</i>
<i>AverageingModel</i>	<i>Dense</i>
Modelo de força	Archimedes

Fonte: O autor

O sub-modelo Bfull foi adotado por ser o mais preciso, segundo Zhou *et al.* (2010). Esse sub-modelo requer o modelo de força gradPForce, o qual calcula a força baseada no gradiente de pressão. O modelo de força é responsável pelo cálculo das forças agindo em cada partícula do DEM e em cada célula do CFD. Devido ao regime granular ser denso, foi adotado o *AverageingModel* como *dense*. O *VoidfractionModel divided* foi adotado devido as partículas serem menores que a malha CFD (GONIVA *et al.*, 2012).

3.3.5. Darcy-Forchheimer

O coeficiente de Darcy (D), ou coeficiente de arraste viscoso, é o termo da perda da viscosidade e considera a queda de pressão linear proporcional à velocidade do fluxo e à fricção ao longo do meio e foi calculado pela Equação (19).

$$D = \frac{1}{k} \quad (19)$$

A permeabilidade do meio poroso (k em m/s) foi calculada pela Equação (20, baseada nas equações de Ergun para leitos recheados (ERGUN, 1952), levando em conta o diâmetro das partículas (d , em m) e a porosidade do material filtrante (ϕ).

$$k = \frac{d}{150} \frac{\phi^3}{(1-\phi)^2} \quad (20)$$

O coeficiente de Forchheimer (F), ou coeficiente de arraste inercial, é o termo da perda inercial e considera a diferença exponencial na pressão conforme o quadrado da velocidade e também foi calculado baseado nas equações de Ergun (Equação (21).

$$F = \frac{3,5}{d} \frac{(1-\phi)}{\phi^3} \quad (21)$$

Os coeficientes foram calculados conforme os valores do diâmetro e porosidade fornecidos pelos autores dispostos na Tabela 1. Os coeficientes de D e F calculados foram, respectivamente 7780349,79 e 2640,60 para o estudo de caso de Bandeiras (2009) e 3386718,75 e 2905,27 para o estudo de Gikas *et al.* (2017), conforme a Equação (20 e Equação (21 Foi utilizado o *solver* pimpleFoam no *software* OpenFOAM® com os mesmos parâmetros da simulação CFD-DEM.

3.3.6. Simulação do traçador e coleta de dados

Para simular o teste com traçador nos modelos computacionais foi utilizada inserção de um traçador simulado por meio de um escalar passivo. Um escalar passivo é um contaminante difusivo inserido em pequenas concentrações, que não causa perturbações na dinâmica do escoamento. Foi utilizada uma equação de convecção-difusão (Equação (22) para determinar o transporte de massa no interior do WC. Essa equação relaciona o valor do escalar passivo (T), calculado conforme a Equação (23, com a difusividade molecular efetiva (α_{eff}). Foi adotado α_{eff} do cloreto de sódio 1×10^{-9} m²/s para ambas as simulações.

$$\frac{\partial T}{\partial t} + U_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad (22)$$

$$T = \frac{m}{Q \cdot t_i} \quad (23)$$

Em que:

T : valor do escalar passivo;

m : massa do traçador utilizado pelo experimento (kg);

Q : vazão efetiva (m³/s);

t_i : tempo de inserção do traçador no experimento (s).

Assim sendo, o valor de T foi de 1,360 para Bandejas (2009) e 0,075 para Gikas *et al.* (2017). A concentração do traçador simulado foi medida por meio da função *probe*. Essa função coleta os dados pré-definidos em cada passo de tempo em determinado ponto do domínio da simulação. Além do valor do escalar passivo, também foi coletado o valor da velocidade e da pressão em cada *probe*.

3.4. PARÂMETRO ESTATÍSTICOS

Uma análise de erros da curva de TDH do traçador simulado em comparação com o traçador experimental foi realizada com base nas métricas estatísticas descritas por Fox (1981), Willmott (1982), Anthes (1983), Anthes *et al.* (1989), Pielke (2013) e Wilks (2011). Definiu-se a variância (s^2), o desvio (σ), o Erro Médio (ME), o Erro Absoluto Médio (MAE), o Erro Quadrático Médio (MSE), a Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE), o $RMSE_{bias}$, o Índice de Concordância (IC) e o índice de destreza de Pielke (D_{PIELKE}). As curvas foram comparadas até o limite onde foram realizadas as medições experimentais, ou seja, 112h para o estudo de caso de Bandejas (2009) e 197h para Gikas *et al.* (2017).

O desvio padrão é a raiz quadrada da variância (Equação (24)), que por sua vez é o erro que seria cometido se todas as ocorrências fossem substituídas pela média.

$$\sigma(x) = \sqrt{s^2} = \frac{1}{N} \sum \left[(x - \bar{x})^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (24)$$

O ME (Equação (25)) indica a tendência do modelo em subestimar ou superestimar o valor da concentração da simulação em relação ao experimental.

$$ME = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (P_{is} - P_{io}) \quad (25)$$

Em que P_{is} é o valor simulado e P_{io} é a o valor observado. Devido a limitação do ME de ser afetado por erros negativos que cancelam os erros positivos, também foi calculado o MAE (Equação (26), pois além de contornar esse problema, é menos afetado por pontos singulares e pode indicar a destreza de modelos numéricos em reproduzir a realidade (FOX, 1981).

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |P_{is} - P_{io}| \quad (26)$$

O MSE (Equação (27), que apesar de ser afetado por pontos singulares, é comumente utilizado para medir a acurácia de simulações numéricas.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (P_{is} - P_{io})^2 \quad (27)$$

Também foi calculado a RMSE (Equação (28), que modifica o MSE para a mesma dimensão da variável analisada.

$$RMSE = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (P_{is} - P_{io})^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (28)$$

O $RMSE_{bias}$ (Equação 29) remove do RMSE um bias constante relativo à tendência do modelo.

$$RMSE_{bias} = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [(P_{is} - \bar{P}_{is}) - (P_{io} - \bar{P}_{io})]^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (29)$$

O IC e o D_{PIELKE} são índices para comparação de simulações de um mesmo caso. O IC (Equação (30) foi proposto por Wilmot (1982), em que $IC=1$ indica a concordância perfeita entre o campo simulado e o observado. A simulação que obtiver o maior valor de IC representa melhor o campo observado.

$$IC = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (P_{is} - P_{io})^2}{\sum_{i=1}^N (|P_{is} - \bar{P}_{io}| + |P_{io} - \bar{P}_{io}|)^2} \quad (30)$$

O D_{PIELKE} é um índice proposto por Pielke (2013) que demonstra a destreza de um modelo baseado nos seguintes critérios:

- 1) σ_s / σ_o próximo de 1;
- 2) $RMSE < \sigma_o$;
- 3) $RMSE_{bias} < \sigma_o$;

A Equação (31) converte os critérios em um único índice.

$$D_{PIELKE} = \left| 1 - \frac{\sigma_s}{\sigma_o} \right| + \frac{RMSE}{\sigma_o} + \frac{RMSE_{bias}}{\sigma_o} \quad (31)$$

Segundo Pielke (2013) a destreza da simulação é comprovada se o $D_{PIELKE} < 2$, se $D_{PIELKE} = 0$ a simulação conseguiu representar perfeitamente a realidade. Ao se comparar diversas simulações de um mesmo caso, a simulação com menor valor de D_{PIELKE} é a mais representativa.

3.5. PÓS-PROCESSAMENTO

Para o pós-processamento, os resultados das simulações foram compilados em forma de mapa de cores para a pressão e a velocidade e os vetores de velocidade. Foi utilizado o *software* de pós-processamento *ParaView*.

O mapa de cores de pressão e velocidade e os vetores de velocidade podem apresentar visualmente a ocorrência dos processos deletérios, tais como caminhos preferenciais e zonas mortas, além de demonstrar os fenômenos que ocorrem no interior do leito (FIOREZE; MANCUSO, 2019; RENGERS *et al.*, 2016)

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados e discussão foram subdivididos, onde primeiramente foi apresentado a análise do estado da arte em forma de artigo, em seguida os resultados da sensibilidade da malha, as comparações entre a curva de concentração-tempo das simulações e os experimentos, a análise dos parâmetros hidrodinâmicos e finalmente as imagens do pós-processamento e a discussão das limitações do modelo.

4.1. MODELAGEM DE WETLANDS CONSTRUÍDOS POR MEIO DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL: UMA REVISÃO CRÍTICA

¹ Kesley Santos, Lineker Coelho, Hersília Santos¹, Rogerio de Azevedo

¹Departamento de Engenharia Civil, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas, Av. Amazonas, 7675, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

Resumo

A dinâmica de fluidos computacional (CFD) é uma ferramenta poderosa para descrever os processos físico-químicos envolvidos no fluxo de fluidos. O desempenho de remoção de poluentes em *Wetlands* construídos (CWs) correlaciona-se com a hidrodinâmica no interior do leito. Assim sendo, vários modelos computacionais foram desenvolvidos para analisar a hidráulica envolvida no interior do leito e as causas das anomalias de fluxo. Portanto, este trabalho tem como objetivo investigar modelos de simulação CW usando a abordagem CFD para distinguir possíveis lacunas nesses estudos por meio de

uma revisão sistemática da literatura. O portfólio foi explorado com foco em sete lentes de pesquisa: (1) classificação do CW, (2) software, (3) dimensão do pós-processamento dos dados, (4) propósito do modelo, (5) abordagem de modelagem para o meio poroso e (6) para simulação do processo de colmatção e (7) influência das plantas no modelo. Ao todo, este trabalho conclui que as abordagens empregadas para modelagem do meio poroso estão desatualizadas. Consequentemente, a simulação do processo de colmatção torna-se dependente de dados experimentais para calibrar a mudança na condutividade hidráulica ao longo do tempo. Além disso, vários modelos negligenciam o papel das plantas na hidrodinâmica, o que pode descaracterizar o modelo. Assim, para obter uma análise mais ampla, é aconselhável em pesquisas futuras adotar abordagens sofisticadas para representação de meios porosos e incorporar plantas nos modelos.

Palavras-chave: Dinâmica de Fluidos Computacional; *Wetlands* construídos; Modelagem; Simulação.

Abstract

Computational fluid dynamics (CFD) is a powerful tool for describing the physio-chemical processes involved in fluid flow. The pollutant removal performance in constructed wetlands (WCs) correlates with the hydrodynamics within the bed. Hence, several computational models were developed to analyze the hydraulics involved inside the bed and the causes of flow anomalies. Therefore, this work aims to investigate WC simulation models using the CFD approach to distinguish potential gaps in these studies through a systemic literature review. The portfolio was explored focusing on seven research lenses: (1) CW classification, (2) software, (3) dimension of post-processed data, (4) model purpose, (5) porous media modeling approach, and (6) simulation method of the clogging process and (7) influence of plants in the model. Altogether, this work concludes that the approaches employed for modeling the porous medium are outdated. Consequently, the simulation of the clogging becomes dependent on experimental data to calibrate the change in hydraulic conductivity over time. Furthermore, several models neglect the role of plants in hydrodynamics, which can mischaracterize the model. Accordingly, to get a broader analysis it is advisable in future research to adopt sophisticated approaches for porous medium representation and to incorporate plants in the models.

Keywords: Computational Fluid Dynamics; Constructed wetlands; Modeling; Simulation.

1. INTRODUÇÃO

Wetland construído (WCs) é uma ecotecnologia de tratamento de águas residuárias amplamente operada em vilarejos na Europa e pode auxiliar na deficiência de saneamento em áreas rurais em países em desenvolvimento [1, 2]. Trata-se de um sistema que simula o comportamento de áreas úmidas naturais para tratamento de águas residuárias por meio da interação entre o meio poroso, microrganismos e macrófitas (plantas endêmicas de áreas alagadas) [3].

No entanto, os WCs apresentam algumas limitações, como a maior área de construção que os sistemas convencionais de tratamento de efluentes, a exposição do leito a fatores meteorológicos e climáticos, também a ocorrência de processos deletérios no regime de operação, como a colmatação do leito, zonas mortas, curto-circuitos, e zonas de recirculação interna [4]. A colmatação é o principal problema operacional dos WCs subsuperficiais, pois reduz o volume de poros no material filtrante, modificando a condutividade hidráulica devido ao acúmulo de sólidos suspensos e crescimento de biofilme induzido pela atividade microbiana [5].

Os fatores causadores da colmatação ainda não foram bem esclarecidos, principalmente sobre a influência das macrófitas. Alguns pesquisadores atestam que a presença de plantas tem efeito positivo, reduzindo o entupimento [6, 7]. Em contrapartida, outros argumentam que as raízes das plantas corroboram para o entupimento do material filtrante, perturbando a

hidrodinâmica em WCs [8]. Estudos experimentais, como testes de traçadores, tentam compreender o efeito hidrodinâmico no interior do leito. No entanto, esses experimentos não limitados no esclarecer o interior do WC, visto ilustrar os processos internos por meio de dados de entrada e saída.

A modelagem computacional pode elucidar essas controvérsias, uma vez que os dados de pós-processamento podem retratar e exibir os eventos internos. Vários modelos foram desenvolvidos com foco no comportamento hidráulico do sistema. De fato, uma hidrodinâmica adequada é o principal elemento para o desempenho da remoção de poluentes [9, 10]. A fluidodinâmica computacional (CFD) é uma ferramenta promissora para modelagem hidráulica e pode explicar os fenômenos internos de WCs [11]. Por outro lado, os CWs avaliam inúmeros processos físico-químicos, como plantas, meios porosos, entupimento, evapotranspiração, atividades de microrganismos, entre outros. Assim, incluir todos esses elementos e fenômenos em um modelo é computacionalmente oneroso [12].

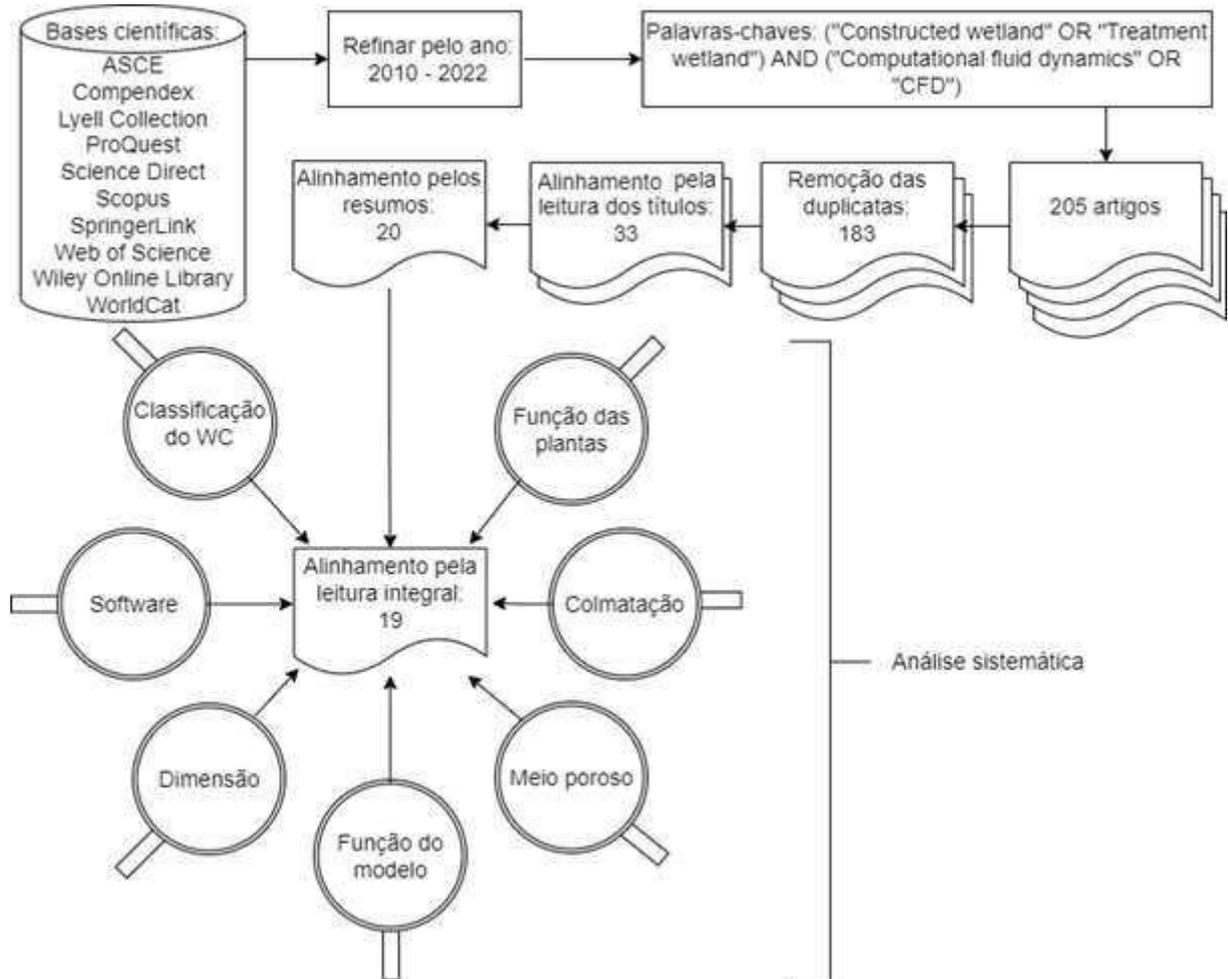
Além disso, várias estratégias para modelar WCs usando CFD foram desenvolvidas, adotando diferentes hipóteses, suposições e simplificações. Alguns usaram abordagens simplificadas conforme dados de entrada e saída, os chamados modelos caixa-preta. Em contraste, outros consideraram a complexidade dos eventos físicos, químicos e biológicos dentro do leito, os chamados modelos baseados em processos [13]. No entanto, mesmo esses modelos baseados em processos abreviam e negligenciam alguns processos hidráulicos importantes envolvidos nos WCs

Considerando a importância da hidrodinâmica na operação dos WCs e a ampla gama de simulações computacionais desenvolvidas, este trabalho teve como objetivo analisar os modelos CFD para Wetlands Construídos e identificar lacunas de pesquisa por meio de uma revisão sistemática para auxiliar a evolução de novos modelos CFD

2. MATERIAIS E MÉTODOS

A metodologia de seleção do referencial bibliográfico consistiu em três etapas principais: seleção do portfólio, análise bibliométrica e análise sistêmica. Esse método de revisão analisa os estudos por meio de "lentes de pesquisa", o que significa que os sujeitos focam durante a leitura do artigo [14]. Na Fig. 1 estão apresentados os critérios e procedimentos para seleção de portfólios que compõem as bases científicas e as palavras-chave aplicadas, o alinhamento pelos títulos, resumo, também a leitura do artigo na íntegra com foco nas lentes da pesquisa, ou seja, a análise sistemática.

Fig.1 Procedimento para seleção do portfólio e análise sistemática



Foi realizada uma análise bibliométrica para estimar a relevância científica do portfólio para os artigos e seus respectivos periódicos. Os artigos foram ordenados de acordo com as citações pela plataforma Google Scholar, e os periódicos por dois índices de relevância, o índice h5 do Google Scholar e o Journal Citation Report, do Clarivate's Analytics.

Na Tabela 1 estão resumidas as questões de interesse durante o processo de revisão, aqui denominadas "lentes da pesquisa".

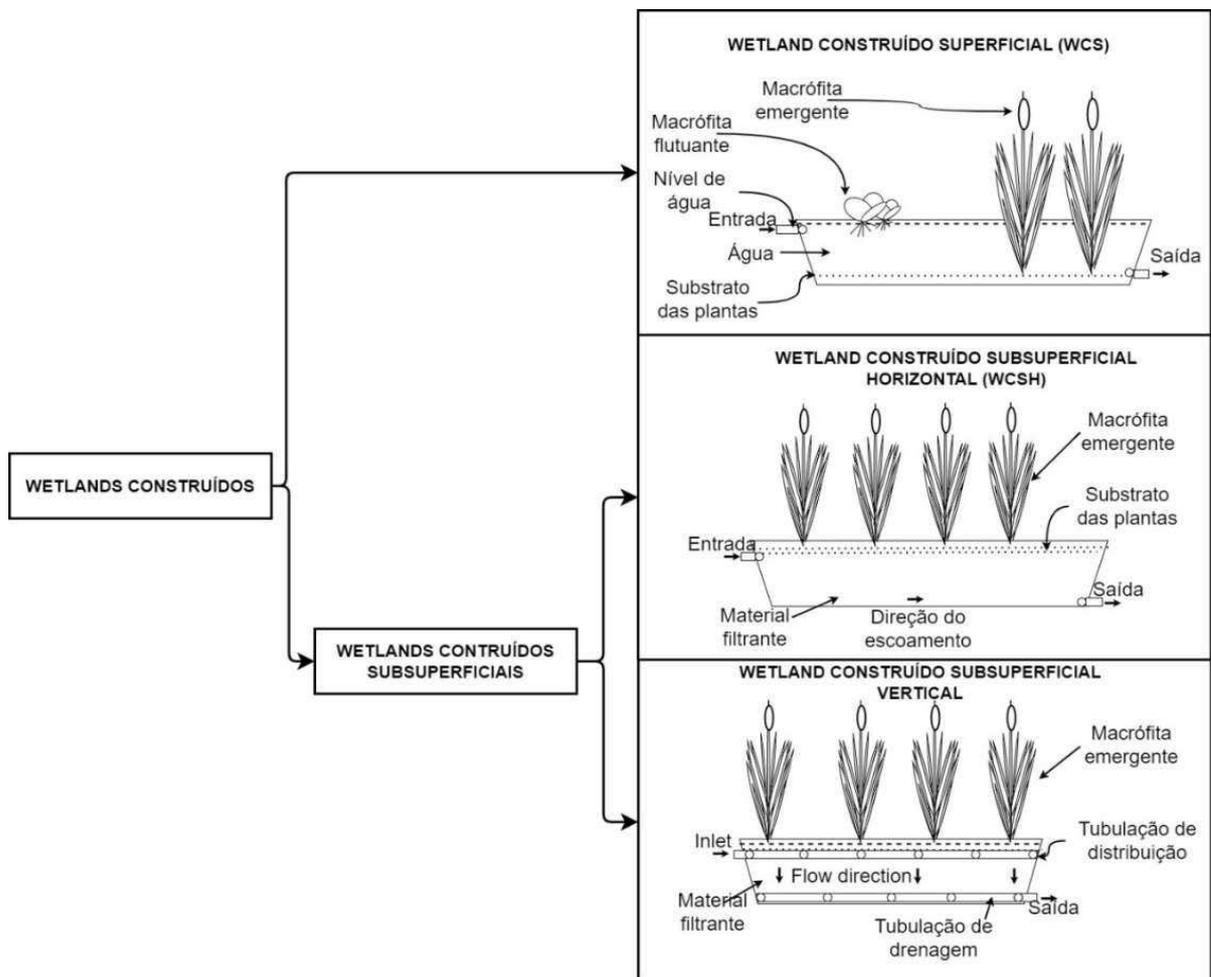
Table 1 Research lenses and their objectives

Lente	Objetivo da lente
Classificação do WC	Indicar a classificação do fluxo de água e a direção do fluxo
Software	Indicar o software utilizado
Dimensão	Identificar em qual dimensão a simulação foi desenvolvida
Objetivo da simulação	Indicar a finalidade da simulação
Meio poroso	Indicar a metodologia para modelagem do meio poroso
Colmatação	Indicar se foi considerada a colmatação e qual o método de análise
Influência das plantas	Indicar se a simulação considerou a influência das macrófitas

2.1 Classificação do WC

Em CWs, a classificação dos diferentes tipos de configuração está relacionada, principalmente ao fluxo. Além disso, em WCs a configuração do fluxo é de extrema importância podendo modificar o regime de funcionamento e a aplicação do sistema [7], portanto é imperativo indicar em qual configuração o modelo foi aplicado. Os WCs são classificados em três grupos, de acordo com o nível por onde o escoamento ocorre e quanto de sua direção, conforme ilustrado na Fig.2.

Fig. 2 Classificação de *wetlands* construídos



Em WCS, o fluxo ocorre na superfície do leito. Não há material filtrante, e as plantas predominantes são as macrófitas emergentes e flutuantes. Esta classificação se aplica ao tratamento terciário ou polimento no tratamento secundário. Devido à potencial contaminação humana, não é recomendado para tratamento secundário de esgoto (KADLEC; WALLACE, 2008). Devido não haver o material de enchimento, simulações com essa configuração são mais fáceis de simular.

Em WCs subsuperficiais, o fluxo ocorre abaixo do substrato vegetal. É dividido em *wetlands* construídos de fluxo horizontal (WCSH) e *wetlands* construídos de fluxo vertical (WCSV). Considerando WCSH é aconselhado como tratamento secundário em residências unifamiliares, pequenas comunidades e efluentes industriais. O WCSV, cujo esgoto flui verticalmente, possui a capacidade de oxidação de amônia, podendo fazer parte do sistema de tratamento de lixiviado de aterros sanitário, além de tratar esgoto bruto no sistema francês [15]. Devido à presença de meio poroso, vários fenômenos estão envolvidos tornando complexo o processo de modelagem

2.2. Software

A taxa de licença para acessar o software comercial é um obstáculo ao emprego de modelos numéricos para estudar a hidrodinâmica WCs utilizando o CFD. Os modelos de código aberto fazem parte de um movimento crescente de ciência aberta que torna o conhecimento acessível, no entanto, tanto o software comercial quanto o gratuito apresentam limitações. Enquanto o software comercial tem uma interface gráfica que melhora o processo de aprendizagem e a aplicação, o software de código aberto é mais difícil de aprender. Por outro lado, o software de código aberto permite uma rede colaborativa que permite melhorias no código, enquanto o software comercial restringe a aplicação ao código disponível [16].

2.3. Dimensão

Modelos CFD permitem simular WCs em três dimensões. Os modelos mais antigos simulavam o sistema apenas em uma dimensão (1D) com base na abordagem caixa-preta, por meio de regressões matemáticas para determinar o desempenho do sistema de acordo com a condição do afluente. Com o aprimoramento dos estudos, foram desenvolvidos modelos baseados em processos para descrever o regime de funcionamento do WC bidimensional (2D) e tridimensional (3D).

2.4. Função do modelo

Geralmente, o objetivo dos modelos CFD é caracterizar a hidrodinâmica do sistema. No entanto, é possível descrever vários fenômenos envolvidos, como adsorção, oxidação, assimilação vegetal, transformação, degradação de matéria orgânica e entupimento de meios porosos. Alguns modelos focaram em alguns processos e negligenciaram um componente ou simplificaram outros para economizar consumo computacional [11, 17].

2.5. Meio poroso

Normalmente, o código CFD usa a Lei de Darcy ou derivações para modelar escoamento granular. Essas abordagens adicionam um termo atenuante na derivativa do tempo na equação de Navier-Stokes por meio de coeficientes que relacionam a queda na pressão e a velocidade do escoamento ao atrito ao longo do caminho. Essa lente indica se o modelo adotou as abordagens clássicas, baseadas na Lei de Darcy, ou outros métodos sofisticados [18].

2.6. Colmatação

A colmatação é o principal problema operacional em *wetlands* construídos subsuperficiais. Este processo é uma redução contínua da condutividade hidráulica do material filtrante como resultado do acúmulo de sólidos em suspensão e do crescimento de biofilme devido à atividade microbiana [19].

A modelagem da colmatação é complexa porque ocorre no interior do meio poroso, que já possui suas peculiaridades para modelar, conforme citado anteriormente. Além disso, esse fenômeno tem vários elementos envolvidos, como a quantidade de matéria orgânica e sólidos em suspensão no efluente. Portanto, a função dessa lente é identificar qual as suposições e simplificações foram adotadas em relação à colmatação.

2.7. Função das plantas

As plantas são um componente essencial em WCs e desempenham um papel crucial no tratamento de efluentes, principalmente na remoção de micronutrientes. Além dos benefícios estéticos ao sistema, as macrófitas controlam a emissão de odores e a reprodução de insetos, atenuam a incidência de luz solar e a velocidade do vento, previnem a erosão superficial em WCs subsuperficiais, promovem a perda de água por evapotranspiração, proporcionam uma superfície para fixação de microrganismos, captura e armazenamento de nutrientes (SHELEF; GROSS; RACHMILEVITCH, 2013; VYMAZAL, 2013a).

No entanto, não há consenso entre os pesquisadores quanto à influência das plantas no processo de colmatação. Algumas pesquisas afirmam que as plantas previnem os efeitos de entupimento (DE MATOS, MATEUS PIMENTEL *et al.*, 2018). Outros pesquisadores afirmam que o crescimento da raiz suporta o entupimento do leito e afeta negativamente a condutividade hidráulica do meio poroso [8, 21].

Infelizmente, a maioria dos estudos restringe a influência da planta comparando os impactos do sistema plantado com um sistema não plantado (DEFO, CÉLESTIN *et al.*, 2017). Além disso, muitos estudos de modelos e simulações de CWs configuraram mal o sistema ao se absterem completamente das plantas.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1. SELEÇÃO DO PORTFÓLIO

Os artigos do portfólio são apresentados na Tabela 2 em ordem cronológica. A seleção sistemática do portfólio detectou 19 artigos publicados a partir de 2010, e a cada ano, pelo menos 1 artigo é publicado dentro do tema CFD e CWs. A maioria dos artigos foi publicada por diferentes autores, exceto R. Paudel que é autor de 2 artigos no portfólio.

Tabela 2 Portfólio bibliográfico

#	Autores	Artigos
#1	GALVÃO <i>et al.</i> [22]	Simulating flows in horizontal subsurface flow constructed wetlands operating in Portugal. <i>Ecological Engineering</i> , v. 36, n. 4, p. 596-600, 2010.
#2	MIN; WISE (MIN; WISE, 2010)	Depth-averaged, spatially distributed flow dynamic and solute transport modeling of a large-scaled, subtropical constructed wetland. <i>Hydrological processes</i> , v. 24, n. 19, p. 2724-2737, 2010.
#3	WANG <i>et al.</i> (WANG, JUN <i>et al.</i> , 2011)	Numerical analysis of the performance of horizontal and wavy subsurface flow constructed wetlands. <i>Journal of Hydrodynamics</i> , v. 23, n. 3, p. 339-347, 2011.
#4	ZAHRAEIFARD; DENG (ZAHRAEIFARD; DENG, 2011)	Hydraulic residence time computation for constructed wetland design. <i>Ecological Engineering</i> , v. 37, n. 12, p. 2087-2091, 2011.
#5	PAUDEL <i>et al.</i> (PAUDEL <i>et al.</i> , 2013)	Effects of hydraulic resistance by vegetation on stage dynamics of a stormwater treatment wetland. <i>Journal of Hydrology</i> , v. 484, p. 74-85, 2013.
#6	RANIERI <i>et al.</i> [27]	A comparison between model and experimental hydraulic performances in a pilot-scale horizontal subsurface flow constructed wetland. <i>Ecological Engineering</i> , v. 60, p. 45-49, 2013
#7	MORVANNOU <i>et al.</i> [28]	Characterizing hydraulic properties of filter material of a vertical flow constructed wetland. <i>Ecological Engineering</i> , v. 60, p. 325-335, 2013.
#8	HAN <i>et al.</i> [29]	Assessment of Suspended Solid Removal in a Surface Flow Constructed Wetland Using a Three-Dimensional Numerical Model. <i>Water Resources Management</i> , v. 28, n. 10, p. 3111-3125, 2014.
#9	RAJABZADEH <i>et al.</i> [30]	Multiphysics modelling of flow dynamics, biofilm development and wastewater treatment in a subsurface vertical flow constructed wetland mesocosm. <i>Ecological Engineering</i> , v. 74, p. 107-116, 2015.
#10	CHANG <i>et al.</i> [31]	Flow uniformity and hydraulic efficiency improvement of deep-water

		constructed wetlands. <i>Ecological Engineering</i> , v. 92, p. 28-36, 2016.
#11	KADAVERUGU [32]	Modeling of subsurface horizontal flow constructed wetlands using OpenFOAM®. <i>Modeling Earth Systems and Environment</i> , v. 2, n. 2, 2016.

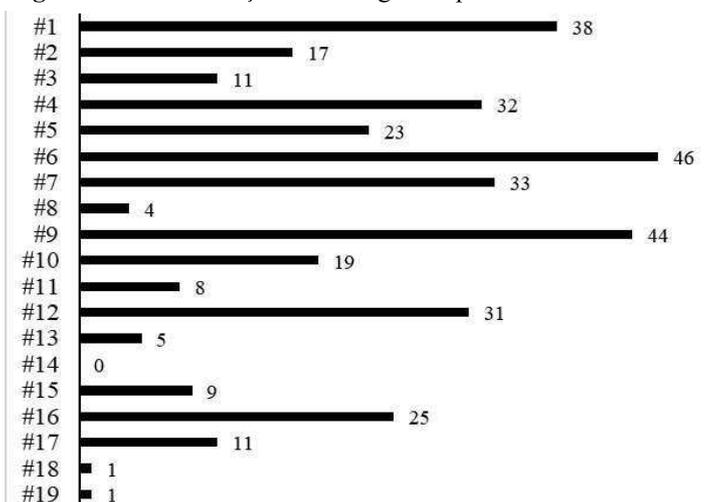
Tabela 2 (continuação)

#12	RENGERS <i>et al.</i> [33]	Hydraulic performance of a modified constructed wetland system through a CFD-based approach. <i>Journal of Hydro-Environment Research</i> , v. 12, p. 91–104, 2016.
#13	PAUDEL; JAWITZ [34]	Spatially distributed hydrodynamic modeling of phosphorus transport and transformation in a cell-network treatment wetland. <i>Journal of Hydrologic Engineering</i> , 721-734, v. 22, n. 1, 2016.
#14	NASCIMENTO <i>et al.</i> [35]	Improved efficiency of constructed wetlands for oily water treatment with aid of microbubbles. <i>Chemical Engineering Transactions</i> , v. 57, p. 535–540, 2017.
#15	YANG <i>et al.</i> [36]	Effects of clogging on hydraulic behavior in a vertical-flow constructed wetland system: A modelling approach. <i>Ecological Engineering</i> , v. 109, p. 41–47, 2017.
#16	HUA <i>et al.</i> [37]	Influence of clogging and resting processes on flow patterns in vertical flow constructed wetlands. <i>Science of The Total Environment</i> , v. 621, p. 1142–1150, 2018.
#17	IOREZE; MANCUSO [38]	MODFLOW and MODPATH for hydrodynamic simulation of porous media in horizontal subsurface flow constructed wetlands: A tool for design criteria. <i>Ecological Engineering</i> , v. 130, 2019.
#18	MAURER <i>et al.</i> [39]	Distribution and degradation trend of micropollutants in a surface flow treatment wetland revealed by 3D numerical modelling combined with LC-MS/MS. <i>Water Research</i> , v. 190, 2020
#19	WANG <i>et al.</i> [40]	Simulation and optimization of hydraulic performance of small baffled subsurface flow constructed wetland. <i>Water Science & Technology</i> , v. 84, n.3, 2021

3.2. ANÁLISE BIBLIOMÉTRICA

Na Fig. 3 está retratada a relevância dos artigos no portfólio, considerando o número de citações na plataforma Google Acadêmico.

Fig. 3 Número de citações dos artigos do portfólio



A Tabela 3 mostra o número de artigos por periódico e respectivos índices de relevância.

Tabela 3 Periódicos do portfólio e índices de relevância

Periódicos	Artigos no portfólio	h5	JCR
Chemical Engineering Transaction	1	25	n/a
Ecological Engineering	7	61	4.035
Hydrological processes	1	52	3.565
Journal of Hydrodynamics	1	28	2.590
Journal of Hydro-Environment Research	1	24	2.470
Journal of Hydrologic Engineering	1	26	2.064
Journal of hydrology	1	83	5.722
Modeling Earth System and Environment	1	38	n/a
Science of Total Environment	1	180	7.963
Water Research	1	134	11.266
Water Resource Management	1	48	3.517
Water Science & Technology	1	44	1.915

Examinando os periódicos pelo índice h5 do *Google Scholar*, *Science of Total Environment* lidera o ranking na categoria *ENVIRONMENTAL SCIENCE* com h5 de 180. Além disso, *Water Research* lidera na categoria *WATER SUPPLY & TREATMENT* com h5 de 134. *Ecological Engineering*, a revista mais representativa do portfólio, ocupa a sexta posição no ranking *WATER SUPPLY & TREATMENT*.

Em relação ao índice JCR da *Clarivate's Analytics*, a revista *Water Research* destaca-se com um índice de 11.266, ocupando o 2º lugar na categoria *WATER RESOURCES* entre 98 periódicos e 3º entre 54 revistas do ranking *ENGINEERING, ENVIRONMENTAL*.

3.3. ANÁLISE SISTEMÁTICA

Na Tabela 4 estão resumidos os resultados da revisão sistemática.

Tabela 4 Revisão dos modelos CFD de *Wetlands* Construídos

#	Config.	Objetivo do modelo	Software	Meio Poroso	Colmatação	Influência das plantas	Dim.
#1	WCSH	Descrever o comportamento hidráulico de um WCSH.	CWFlow (Algoritmo PIKAIA no Excel/VBA)	Lei de Darcy	Calibrado com dados experimentais	Sim	1D
#2	WCS	Avaliar o efeito da batimetria, concentração de vegetação na remoção de cloreto em wetland de fluxo superficial	MIKE 21	Não se aplica	Não se aplica	Sim. Coeficiente de resistência fixo	2D
#3	WCSH	Avaliar a influência do comportamento hidráulico (substrato das plantas e raízes) na remoção de fósforo total		Equação de Richards	Não	Não	3D
#4	WCS	Determinar o tempo de residência hidráulico para o dimensionamento de WCs.	VART model	Não se aplica	Não se aplica	Não	1D
#5	WCS	Avaliar a hidrodinâmica de um wetland de fluxo superficial	Regional Simulation Model (RSM)	Não se aplica	Não se aplica	Sim. Inserir diferentes coeficiente de resistência ao fluxo em locais com maior vegetação	2D
#6	WCSH	Avaliar a influência da presença das plantas e os efeitos da colmatação	Comsol Multiphysics	Lei de Darcy	Calibrado com dados experimentais	Sim. Comparou-se os resultados entre o leito plantado com um não-plantado	2D
#7	WCSV	Avaliar o método apropriado para determinação dos parâmetros hidráulicos em WCSV do sistema francês	HYDRUS-1D	Calibrado com experimentos	Calibrado com experimentos	Não	1D
#8	WCS	Desenvolver um método de simulação para estudar o comportamento dos sólidos suspensos	ANSYS Fluent	Não se aplica	Não se aplica	Não	3D
#9	WCSV	Avaliar o efeito da influência do crescimento do biofilme	COMSOL Multiphysics	Equação de Brinkman	Modelo biocinético para variação na porosidade ao longo do leito.	Não	2D
#10	WCS	Avaliar a influência das características geométricas e chicanas na eficiência hidráulica	TABS-2	Não se aplica	Não se aplica	Não	2D
#1	WCSH	Investigar os parâmetros principais que	OpenFOAM®	Equação de	Não	Não	3D

1		influenciam na eficiência hidráulica		Richards			
Tabela 4 (continuação)							
#	Config.	Objetivo do modelo	Software	Meio Poroso	Colmatação	Influência das plantas	Dim.
#1 2	WCSH	Estudar a influência dos parâmetros geométricos e padrão de fluxo na hidrodinâmica de WCs	ANSYS CFX	Equação de Darcy-Forchheimer	Calibração com dados experimentais	Não	3D
#1 3	WCS	Desenvolver um modelo capaz de explorar as implicações para eficiência de remoção de fósforo	Regional Model Simulation	Não se aplica	Não se aplica	Modificando o coeficiente de resistência por meio de imagens de satélite	2D
#1 4	WCSH	Determinar a remoção de óleo sintético no efluente	ANSYS 15.0	Não especificou	Não	Não	3D
#1 5	WCSV	Avaliar a mudança no campo de fluxo com o decrescimento da porosidade experimental	ANSYS Fluent 6.3	Equação de Darcy-Forchheimer	Calibração com dados experimentais	Não	2D
#1 6	WCSV	Explorar o efeito do crescimento do biofilme nas características hidráulicas de WCs	COMSOL Multiphysics®	Equação de Brinkman	Colmatação biológica por meio de modelos biocinéticos; calibrado com dados experimentais.	Não	2D
#1 7	WCSH	Analisar a hidrodinâmica de diferentes cenários com diferentes materiais de enchimento	MODFLOW/ MODPATH	Lei de Darcy	Não	Não	3D
18	WCS	Desenvolver um modelo capaz de detalhar as velocidades de escoamento em WCS e analisar a influência da velocidade na remoção de micropoluentes	OpenFOAM®	Não se aplica	Não se aplica	Não	3D
#1 9	WCSH	Analisar a influência de chincanas e camadas de substratos no padrão de fluxo e eficiência hidráulica para melhoria do dimensionamento e otimização de WCSH.	ANSYS Fluent	Darcy-Forchheimer	Não	Não	2D

Legenda: WCS – *Wetland* construído superficial; WCSH – *Wetland* construído subsuperficial Horizontal; WCSV – *Wetland* construído subsuperficial Vertical.

3.3.1. Lente 1: Classificação

Como dito anteriormente, a complexidade para modelagem de WCs está relacionado a classificação do WC. O WCS (*wetland* construído superficial) não possui meio poroso tornando essa configuração mais simples de modelar. Simulações de *Wetlands* Construídos Subsuperficiais contam com escoamento em meio granular, necessitando de equações empíricas e estudos experimentais para calibrar os coeficientes.

A observação dos artigos por essa lente corrobora essas afirmações. O portfólio cobriu todas as configurações da WCs. Apesar disso, foi possível verificar que o WCSH (*wetland* construído subsuperficial horizontal) foi modelado em 8 artigos (#1, #3, #6, #11, #12, #14, #17 e #19); WCS é o assunto em 7 artigos (#2, #4, #5, #8, #10, #13 e #18), seguido de WCSV (*wetland* construído subsuperficial vertical) com 4 artigos (#7, #9, #15 e #16.).

Além disso, analisando a cronologia do portfólio, notamos que nos períodos mais antigos do portfólio prevalecem a configuração WCS e com o passar do tempo, as configurações subsuperficiais tornam-se mais frequentes. Este fato pode ser atribuído ao desenvolvimento de computadores e *softwares* mais poderosos e o avanço da ciência nessa temática.

3.3.2. Lente 2: Software

Vários *softwares* são representados no portfólio: Comsol Multiphysics ® (#6, #9 e #16), *Regional Simulation Model* (RSM) (#5 e #13) ANSYS Fluent (#8 e #15), ANSYS CFX (#12), ANSYS 15.0 (#14), OpenFOAM ® (#11 e #17), CWFlow (#1), MIKE21 (#2), modelo VART (#4) e TABS-2 (#10). Destes, Comsol Multiphysics, ANSYS, MIKE21 e MODFLOW são softwares comerciais e RSM, HYDRUS-1D, OpenFOAM ®, CWflow e TABS-2 são softwares de código aberto.

A plataforma ANSYS INC fornece alguns softwares para modelagem de CFD, incluindo CFX e Fluent. Dentro do portfólio, cinco artigos utilizaram o software ANSYS e três COMSOL Multiphysics®. Ambos são softwares comerciais validados, comprovadamente precisos e amplamente utilizados em indústrias e estudos de CFD. Apesar de possuir uma interface que auxilia na modelagem, softwares comerciais como esses não permitem modificações no código, tornando complexo o processo evolutivo de desenvolvimento de software.

Com relação ao software de código aberto, RSM e TABS-2 são limitados ao WCS; o modelo VART é um modelo acadêmico para simular o transporte em cursos d'água [40]. OpenFOAM ® é um software de código aberto com uma ampla base de usuários e pode

modelar diversas áreas de estudo: aerodinâmica, hidrodinâmica e multifísica. Entre os softwares de código aberto, o OpenFOAM® é o que apresenta mais possibilidades de edição do modelo para melhorar a pesquisa em WCs utilizando modelos CFD.

3.3.3. Lente 3: Dimensão

As simulações 2D prevaleceram no portfólio com 9 artigos (#2, #5, #6, #9, #10, #13, #15, #16 e #19) seguidos de 7 artigos para modelos 3D (#3, # 8, #11, #12, #14, #17 e #18) e modelos unidimensionais em apenas 3 artigos (#1, #4 e #7)

Diante do exposto, os modelos mais recentes tendem a preferir representações 3D. As simulações tridimensionais fornecem melhor visualização da hidrodinâmica do interior dos WCs, permitem investigação do comportamento longitudinal e transversal, e também identificam anomalias no escoamento que as representações bidimensionais não conseguem identificar. O portfólio não identifica representações 1D desde 2013. Além disso, devido às grandes áreas utilizadas, os WCS são modelados em 2D para a economia computacional. Correspondentemente, apenas dois artigos modelaram WCS em 3D.

3.3.4. Lente 4: Função do modelo

Esta lente comprovou a versatilidade do CFD para o modelar WCs. O propósito mais comum da modelagem CFD no portfólio é avaliar o comportamento hidráulico e a hidrodinâmica de WCs (#1, #3, #4, #5, #7, #10, #11 e #12). Alguns realizaram investigações extensas, como Wang *et al.* [24] (#3), que estudou a influência de plantas no comportamento hidráulico de WCSH. Chang *et al.* [30] (#10) modificou as características geométricas, como a adição de defletores, para avaliar as principais causas da eficiência hidráulica em 96 estudos de caso.

Dentre os artigos do portfólio, cinco modelos acoplaram o modelo hidrodinâmico a um método para estimar a remoção de poluentes específicos, como cloretos (#2), fósforo (#3 e #13), óleo sintético (#14) e diversos micropoluentes (#18). Dentre eles, três dizem respeito apenas ao WCS e sugerem que, apesar de a hidrodinâmica ser menos complexa para esta configuração, o acoplamento de análises de remoção de poluentes torna o modelo mais robusto.

Avaliar a influência da colmatação é o objetivo de 4 modelos (#6, #9, #15 e #16). A colmatação é um processo essencial em estudos hidrodinâmicos em subsuperfície CW, e

explorar formas de modelar esse fenômeno é vital para o desenvolvimento de modelos CFD para WCs.

3.3.5. Lente 5: Meio poroso

As abordagens empregadas no portfólio para modelagem do meio poroso foram Darcy (#1, #6 e #17), Darcy-Forchheimer (#12, #15 e #19), Brinkman (#9 e #16) e Richards (#3 e #11). Essas equações são clássicas e todas descrevem o fluxo de meios porosos e são derivadas da Lei de Darcy.

A Lei de Darcy foi proposta em 1856 após uma série de experimentos em leitos filtrantes e descreveu o escoamento em meios porosos [42]. Nos modelos CFD, esta equação emprega um coeficiente de atenuação na equação de Navier-Stokes, a principal equação que descreve o escoamento nos modelos CFD. O coeficiente de Darcy, também chamado de coeficiente de arrasto viscoso, considera a queda de pressão proporcional à velocidade devido ao atrito entre o fluido ao longo do caminho. Esta abordagem é restrita ao fluxo laminar, cujo número de Reynolds é suficientemente baixo.

Forchheimer estendeu a Lei de Darcy para prever a queda de pressão para escoamento em velocidades mais altas com o coeficiente de arrasto inercial. À medida que o número de Reynolds aumenta, a magnitude da queda de pressão é maior do que a prevista pela Lei de Darcy. O coeficiente de Forchheimer assume a queda exponencial da pressão proporcional ao quadrado da velocidade, considerando o atrito entre as moléculas do fluido [43].

Brinkman, assim como Forchheimer, observou que a relação entre a velocidade e o gradiente de queda de pressão deixa de ser linear se a velocidade do fluxo ou o tamanho das partículas aumentarem. Além disso, seu estudo observou a ausência de forças gravitacionais da Lei de Darcy e, portanto, propôs uma extensão para acrescentá-las [44].

As abordagens mencionadas acima consideram o escoamento em meios porosos saturados, e Richards se interessou pelo influxo em meios parcialmente saturados. Richards combina a Lei de Darcy com a equação da continuidade, obtida pelo balanço de massa dos líquidos dos poros dada a incompressibilidade do líquido [45].

Apesar de validadas para estudos em meios porosos, essas abordagens sacrificam detalhes importantes para o estudo da hidrodinâmica envolvida no interior do leito. Tong *et al.* [46] apresentam algumas abordagens mais robustas para modelos o meio poroso usado em leitos recheados que podem ser muito úteis para modelos de WCs, incluindo o método de Monte

Carlo, Método dos Elementos Discretos (DEM) e método de representação através da dinâmica de corpo rígido.

3.3.6. Lente 6: Colmatação

A análise do portfólio sob essa lente mostrou que a modelagem da colmatação ainda depende de dados experimentais. Seis artigos calibraram os modelos por meio de experimentos no portfólio (#1, #6, #7, #12, #15 e #16). Uma exceção é um modelo desenvolvido por Rajabzadeh *et al.* [30] (#9) que desenvolveu um modelo biocinético para simular o crescimento de biofilme que poderia ser adaptado a modelos futuros para simular a colmatação biológica sem dados experimentais. Além disso, três artigos que modelaram WCs subsuperficiais negligenciam o processo de colmatação (#3, #11 e #14).

No portfólio, a modelagem da colmatação refere-se à abordagem utilizada para modelagem do meio poroso, onde a permeabilidade do leito é medida experimentalmente ao longo do tempo para ajustar a equação do coeficiente de acordo com a redução dos poros. Conseqüentemente, a modelagem simplificada do meio poroso apresenta-se como o principal obstáculo para desenvolvimento de um modelo referente a esse processo deletério.

Han *et al.* [29] (#8) apresentaram um método para modelagem de sólidos suspensos em WCS baseado em uma abordagem Euler-Lagrangiana. Esse procedimento poderia ser adaptado para simular o acúmulo de sólidos no leito, também chamado de colmatação física.

3.3.7. Lente 7: Função das plantas

A maioria dos artigos do portfólio não considerou a influência das plantas na hidrodinâmica dos WCs. Apenas 5 artigos consideraram sua presença (#1, #2, #5, #6 e #13). Dentre eles, Ranieri *et al.* [27] (#6) incorporaram as plantas, comparando os resultados do leito plantado com um leito de referência sem macrófitas. Galvão *et al.* [22] (#1) incluiu plantas, embora seja impossível analisar sua influência em outros processos, uma vez que este estudo não incluiu um leito não plantado. Min and Wise [23] (#2) and Paudel *et al.* [26] (#5) incluíram plantas no coeficiente de resistência ao escoamento em WCS, porém o índice de rugosidade foi mantido fixo. Paudel and Jawitz [34] (#13) modificaram o coeficiente de resistência ao fluxo de acordo com a densidade e tipo de planta predominante em uma célula.

Certamente, as plantas têm uma influência maior na hidrodinâmica de WCS do que nas outras configurações, pois as macrófitas são o principal elemento que afeta a resistência do fluxo.

4. CONCLUSÃO

A presente pesquisa avaliou os modelos CFD aplicados em *wetlands* construídos por meio de uma revisão sistêmica que identificou diversas lacunas científicas. Foram 7 lentes de pesquisa adotadas: (1) classificação do CW, (2) software, (3) dimensão do pós-processamento dos dados, (4) propósito do modelo, (5) abordagem de modelagem para o meio poroso e (6) para simulação do processo de colmatção e (7) influência das plantas no modelo. A principal lacuna no desenvolvimento de modelos usando dinâmica de fluidos computacional é a adoção de abordagens simplificadas para modelagem do meio poroso, baseadas na Lei de Darcy. Essas abordagens desenvolvidas há muitas décadas estão desatualizadas e difíceis de simular processos importantes como a colmatção do meio poroso. Várias abordagens de modelagem de escoamento granular foram desenvolvidas, como método de Monte Carlo, Método dos Elementos Discretos (DEM) e método de representação através da dinâmica de corpo rígido. Essas abordagens, acopladas ao CFD, podem auxiliar no desenvolvimento de modelos que possam simular o processo de colmatção. No portfólio foi apresentado um modelo onde é possível a modelagem da colmatção biológica por meio de modelos biocinéticos.

Além disso, a inserção de modelos de remoção de poluentes torna os modelos mais robustos, principalmente em WCS. O papel das plantas é negligenciado em vários modelos apesar da importante influência na hidrodinâmica e remoção de poluentes em WCs, e essa ausência pode desconfigurar os modelos.

Ainda, notou-se que os estudos recentes preferem desenvolver modelos 3D pois essa representação facilita a identificação de processos deletérios que os modelos 2D não conseguem perceber. De fato, os modelos 1D não são usados desde 2013 no portfólio. Além disso, as configurações de WCs subsuperficiais prevalecem como objeto de estudo em estudos mais recentes.

Outro fator importante apresentado por este artigo é o *software* utilizado nas simulações. A maioria dos estudos utilizou *software* comercial, dificultando o processo evolutivo de

desenvolvimento de *software*. Aconselhamos o uso de *software* de código aberto, pois permite modificações do código e avanço na ciência.

Por fim, em termos de perspectivas, abordagens mais avançadas para modelar meios porosos, a adoção de *softwares* de código aberto que permitem modificações de código e a inclusão de plantas nos modelos são aspectos importantes a serem abordados em estudos futuros.

Agradecimentos Os autores agradecem ao Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (CEFET-MG) e CAPES pelo apoio.

Conflito de interesses Os autores não têm interesses financeiros ou não financeiros relevantes a divulgar. Os autores não têm interesses concorrentes para declarar que são relevantes para o conteúdo deste artigo. Todos os autores certificam que não têm afiliações ou envolvimento em qualquer organização ou entidade com qualquer interesse financeiro ou não financeiro no assunto ou materiais discutidos neste manuscrito. Os autores não têm interesses financeiros ou de propriedade em nenhum material discutido neste artigo.

REFERÊNCIAS

- [1] Molle P, Liénard A, Boutin C, Merlin G, Iwema A (2005) How to treat raw sewage with constructed wetlands: an overview of the French systems. *Water Sci Technol* 1;51(9):11–21. <https://doi.org/10.2166/wst.2005.0277>
- [2] Sezerino PH, Bento AP, Decezaro ST, Magri ME, Philippi LS (2015) Experiências brasileiras com wetlands construídos aplicados ao tratamento de águas residuárias: parâmetros de projeto para sistemas horizontais. *Eng Sanitária e Ambient* 20(1):151–158. <https://doi.org/10.1590/S1413-41522015020000096615>
- [3] Rodriguez-Dominguez MA, Konnerup D, Brix H, Arias CA (2020) Constructed Wetlands in Latin America and the Caribbean: A Review of Experiences during the Last Decade. *Water* 12(6) 1744. [10.3390/w12061744](https://doi.org/10.3390/w12061744)
- [4] Kadlec RH, Wallace S (2008) *Treatment Wetlands*. 2nd ed. Treatment Wetlands. CRC Press, Boca Raton-FL.
- [5] Matos MP, von Sperling M, de Matos AT (2018) Clogging in horizontal subsurface flow constructed wetlands: influencing factors, research methods, and remediation techniques. *Reviews in Environmental Science and Biotechnology* 17: 87–107. <https://doi.org/10.1007/s11157-018-9458-1>
- [6] Brasil MS, de Matos AT, Soraes AA (2006) Plantio e desempenho fenológico da Taboa (*Typha* sp.) utilizada no tratamento de esgoto doméstico em sistema alagado construído. *Eng Sanit e Ambient*. 12(3): 266-272. <https://doi.org/10.1590/S1413-41522007000300006>
- [7] Brix H (1994) Functions of macrophytes in constructed wetlands. *Water Sci Technol* 29(4):71–78. <https://doi.org/10.2166/wst.1994.0160>.
- [8] Baird AJ, Surridge BWJ, Money RP (2004) An assessment of the piezometer method for measuring the hydraulic conductivity of a *Cladium mariscus*—*Phragmites australis* root mat in a Norfolk (UK) fen. *Hydrol Process* 18(2):275–291. <https://doi.org/10.1002/hyp.1375>.
- [9] Vymazal J (2013) Plants in constructed, restored and created wetlands. *Ecol Eng* 61:501-504. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2013.10.035>
- [10] Fan L, Hai R, Lu Z (2009) CFD study on the hydraulic performance of subsurface flow constructed wetland: Effect of distribution and catchment area. *Korean J Chem Eng* 26(5):1272–1278. <https://doi.org/10.1007/s11814-009-0222-7>
- [11] Langergraber G (2008) Modeling of Processes in Subsurface Flow Constructed Wetlands: A Review. *Vadose Zo J*. 7 (2): 830-842. <https://doi.org/10.2136/vzj2007.0054>
- [12] Yuan C, Huang T, Zhao X, Zhao Y (2020) Numerical Models of Subsurface Flow Constructed Wetlands: Review and Future Development. *Sustainability* 12(8):3498. <https://doi.org/10.3390/su12083498>
- [13] Defo C, Kaur R, Bharadwaj A, Lal K, Kumar P (2017) Modelling approaches for simulating wetland pollutant dynamics. *Crit Rev Environ Sci Technol* 47(15):1371–1408. <https://doi.org/10.1080/10643389.2017.1350126>
- [14] Ensslin L, Ensslin SR, Lacerda RD, Tasca JE (2010) ProKnow-C, knowledge development process-constructivist. *Processo técnico com patente de registro pendente junto ao INPI*. *Brasil* 10(4):2015.
- [15] Fonder N, Headley T (2010) Systematic Classification, Nomenclature and Reporting for Constructed Treatment Wetlands. In: Vymazal J (ed) *Water and Nutrient Management in Natural and Constructed Wetlands* Springer, Dordrecht. pp. 191–219. https://doi.org/10.1007/978-90-481-9585-5_15
- [16] Albagli S, Clinio A, Raychtock S (2014) Open Science: interpretive trends and types of action. *Liinc em Rev*. 10(2). <https://doi.org/10.18617/liinc.v10i2.749>

- [17] Meyer D, Chazarenc F, Claveau-Mallet D, Dittmer U, Forquet N, Molle P, Morvannou A, Tamás, P, Petitjean A, Rizzo A, Campà R, Scholz M, Soric A, Langergraber G (2015) Modelling constructed wetlands: Scopes and aims – a comparative review. *Ecol Eng* 80:205–213. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2014.10.031>
- [18] De Lemos MJS (2012) *Turbulence in porous media: modeling and applications*. Elsevier.
- [19] Knowles PR, Griffin P, Davies PA (2010) Complementary methods to investigate the development of clogging within a horizontal subsurface flow tertiary treatment wetland. *Water Res* 44(1):320–30. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2009.09.028>
- [20] Shelef O, Gross A, Rachmilevitch S (2013) Role of Plants in a Constructed Wetland: Current and New Perspectives. *Water* 5(2):405-419. <https://doi.org/10.3390/w5020405>
- [21] Chazarenc F, Maltais-Landry G, Troesch S, Comeau Y, Brisson J. Effect of loading rate on performance of constructed wetlands treating an anaerobic supernatant. *Water Sci Technol.* 56(3):23–29. <https://doi.org/10.2166/wst.2007.500>
- [22] Galvão AF, Matos JS, Ferreira FS, Correia FN (2010) Simulating flows in horizontal subsurface flow constructed wetlands operating in Portugal. *Ecol Eng* 36(4):596–600. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2009.11.014>
- [23] Min J-H, Wise WR (2010) Depth-averaged, spatially distributed flow dynamic and solute transport modelling of a large-scaled, subtropical constructed wetland. *Hydrol Process* 24(19):2724–2737. <https://doi.org/10.1002/hyp.7686>
- [24] Wang J, Huang SL, He C Da, Ng CO (2011) Numerical analysis of the performance of horizontal and wavy subsurface flow constructed wetlands. *J Hydrodyn.* 23(3):339–347. [https://doi.org/10.1016/S1001-6058\(10\)60121-7](https://doi.org/10.1016/S1001-6058(10)60121-7)
- [25] Zahraeifard V, Deng Z (2011) Hydraulic residence time computation for constructed wetland design. *Ecol Eng* 37(12):2087–2091. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2011.08.011>
- [26] Paudel R, Grace K, Galloway S, Zamorano M (2013) Effects of hydraulic resistance by vegetation on stage dynamics of a stormwater treatment wetland. *J Hydrol* 484:74–85. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2013.01.031>
- [27] Ranieri E, Gorgoglione A, Solimeno A (2013) A comparison between model and experimental hydraulic performances in a pilot-scale horizontal subsurface flow constructed wetland. *Ecol Eng* 60:45–49. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2013.07.037>
- [28] Morvannou A, Forquet N, Vanclooster M, Engineering PM (2013) Characterizing hydraulic properties of filter material of a vertical flow constructed wetland. *Ecol Eng* 60:325–335. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2013.06.042>
- [29] Han SS, Chen Z, Zhou FY, Lu XQ (2014) Assessment of Suspended Solid Removal in a Surface Flow Constructed Wetland Using a Three-Dimensional Numerical Model. *Water Resour Manag* 28(10):3111–3125. <https://doi.org/10.1007/s11269-014-0658-3>
- [30] A. Rajabzadeh, Legge R, Weber K (2015) “Multiphysics modelling of flow dynamics, biofilm development and wastewater treatment in a subsurface vertical flow constructed wetland mesocosm. *Ecol Eng* 74:107-116. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2014.09.122>
- [31] Chang TJ, Chang YS, Lee WT, Shih SS (2016) Flow uniformity and hydraulic efficiency improvement of deep-water constructed wetlands. *Ecol Eng* 92:28–36. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2016.03.028>
- [32] Kadaverugu R (2016) Modeling of subsurface horizontal flow constructed wetlands using OpenFOAM®. *Model Earth Syst Environ* 55(2). <https://doi.org/10.1007/s40808-016-0111-0>

- [33] Rengers EE, da Silva JB, Paulo PL, Janzen JG (2016) Hydraulic performance of a modified constructed wetland system through a CFD-based approach. *J Hydro-Environment Res* 12:91–104. <https://doi.org/10.1016/j.jher.2016.04.002>
- [34] Paudel R, Jawitz JW (2017) Spatially distributed hydrodynamic modeling of phosphorus transport and transformation in a cell-network treatment wetland. *J Hydrol Eng* 22(1). [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)HE.1943-5584.0001403](https://doi.org/10.1061/(ASCE)HE.1943-5584.0001403)
- [35] Nascimento LA, Da Rocha Silva NMPE, Dos Santos KAL, Sarubbo LA, Dos Santos VA, Benachour M (2017) Improved efficiency of constructed wetlands for oily water treatment with aid of microbubbles. *Chem Eng Trans* 57:535–540. <https://doi.org/10.3303/CET1757090>
- [36] Yang M, Lu M, Bian H, Sheng L, He C (2017) Effects of clogging on hydraulic behavior in a vertical-flow constructed wetland system: A modelling approach. *Ecol Eng* 109:41–47. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2017.09.010>
- [37] Hua G, Kong J, Ji Y, Li M (2018) Influence of clogging and resting processes on flow patterns in vertical flow constructed wetlands. *Sci Total Environ* 621:1142–1150. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.10.113>
- [38] Fioreze M, Mancuso MA (2019) MODFLOW and MODPATH for hydrodynamic simulation of porous media in horizontal subsurface flow constructed wetlands: A tool for design criteria. *Ecol Eng* 130:45–52. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2019.01.012>
- [39] Maurer L, Villette C, Reiminger N, Jurado X, Laurent J, Nuel M, Mosé R, Wanko A, Heintsz J (2020) Distribution and degradation trend of micropollutants in a surface flow treatment wetland revealed by 3D numerical modelling combined with LC-MS/MS. *Water Res* 190:116672. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116672>
- [40] Wang R, Xu L, Xu X, Xu Z, Cong X (2021) Simulation and optimization of hydraulic performance of small baffled subsurface flow constructed wetland. *Water Sci Technol* 84(3):632–643. <https://doi.org/10.2166/wst.2021.249>
- [41] Deng Z, Jung H (2009) Variable residence time-based model for solute transport in streams. *Water Resour Res* 45(3). <https://doi.org/10.1029/2008WR007000>
- [42] Darcy H (1856) *Les fontaines publiques de la ville de Dijon: exposition et application*. Victor Dalmont, Paris.
- [43] Forchheimer P (1901) Wasserbewegung durch boden. *Z Ver Deutsch, Ing.* 1901;45:1782–1788.
- [44] Brinkman HC (1949) A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles. *Appl. Sci. Res.* 27(1). <https://doi.org/10.1007/BF02120313>
- [45] Richards LA (1931) Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics* 1(5):318–333. <https://doi.org/10.1063/1.1745010>.
- [46] Tong K, Yang L, Du X, Yang Y (2020) Review of modeling and simulation strategies for unstructured packing bed photoreactors with CFD method. *Renew Sustain Energy Rev* 2020;131:109986. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.109986>

4.2. SENSIBILIDADE DA MALHA E CONVERGÊNCIA

Nas Figura 21 e Figura 22 estão representados os gráficos com os valores de pressão no ponto central para as diferentes malhas que foram testadas para o estudo de caso de Bandeiras (2009) e Gikas *et al.* (2017), respectivamente. E na Figura 23 estão ilustradas as malhas de volumes finitos para os estudos de caso.

Figura 21. Pressão no ponto central para diferentes malhas para os estudos de caso de Bandeiras (2009)

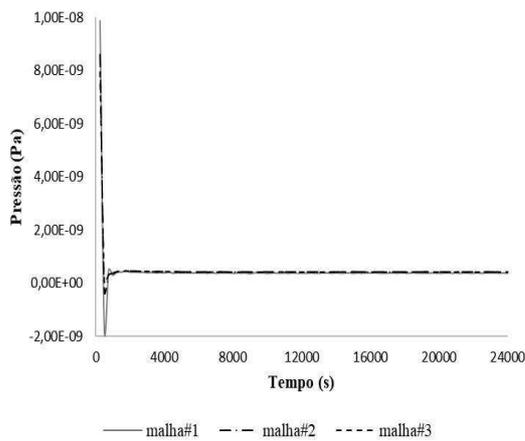
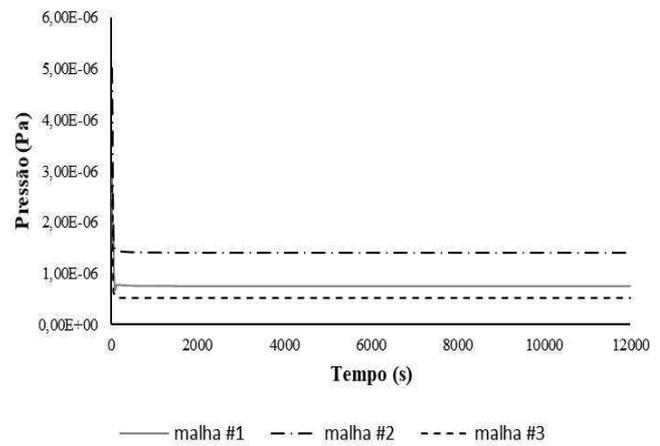
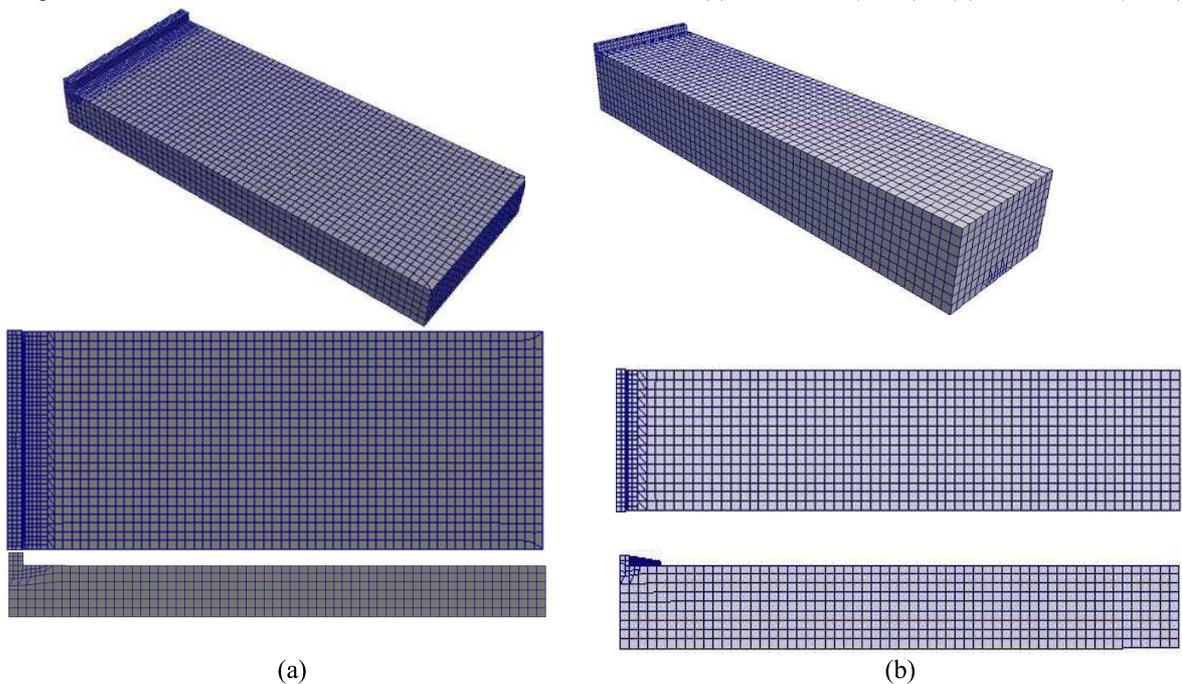


Figura 22. Pressão no ponto central para diferentes malhas para os estudos de caso de Gikas *et al.* (2017)



Legenda: malha#1 – mais refinada; malha#2 – intermediária; malha#3- malha menos refinada
Fonte: O autor

Figura 23. Malha de volumes finitos para os estudos de caso de (a) Bandeiras (2009) e (b) Gikas *et al.* (2017)



Fonte: O autor

Tendo em vista os resultados para a pressão no ponto central, conforme a Figura 21, para o estudo de caso de Bandeiras (2009) foi adotada malha menos refinada, visto que a diferença

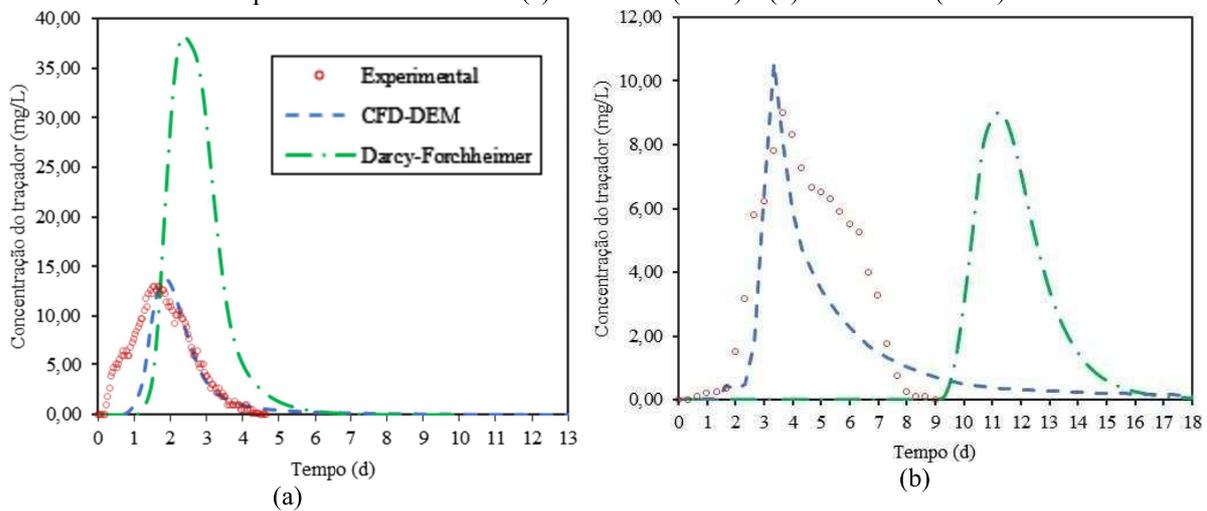
entre a malha #3 para a malha #1 e para a malha #2 é de apenas 2,45% e 0,8% para, respectivamente.

Para a *wetland* relativa ao estudo de Gikas *et al.* (2017), por sua vez, adotou-se a malha mais refinada, pois a relação dos valores de pressão entre a malha#1 e a malha#2 foi superior a 5%, conforme ilustrado na Figura 22.

4.3. CURVA CONCENTRAÇÃO-TEMPO

Na Figura 24 estão representadas as curvas de concentração-tempo obtidas pelo monitoramento dos traçadores experimentais e simulados, baseados no estudo de Bandeiras (2009) e Gikas *et al.* (2017), onde foram realizadas a injeção tipo pulso.

Figura 24. Curva de concentração-tempo do experimento e das simulações CFD-DEM e Darcy-Forchheimer para o estudo de caso de (a) Bandeiras (2009) e (b) Gikas et al. (2017)



Fonte: O autor

4.3.1. Comparação entre o traçador experimental e CFD-DEM

Comparando-se as curvas concentração-tempo do método CFD-DEM com os dados experimentais, percebe-se a concordância satisfatória entre elas. Para ambas simulações o traçador simulado no modelo CFD-DEM conseguiu indicar com precisão o pico de concentração em relação ao experimental.

Na simulação baseada no estudo de Bandeiras (2009) (Figura 24a) o pico da concentração experimental ocorreu com 12,97 mg/L após 1,71d do lançamento do traçador ante 13,69 mg/L a 1,83d da simulação CFD-DEM, ou seja, uma diferença de apenas 0,72 mg/L e 3h. O restante da curva se adequou aos dados experimentais com exatidão. No estudo de Gikas *et al.* (2017) (Figura 24b), por sua vez, o pico do traçador simulado ocorreu com um valor de 10,58 mg/L após 3,33 d da injeção ante 9,00 mg/L após 3,67d no estudo experimental. Cabe salientar que,

no estudo de Gikas *et al.* (2017) as medições foram realizadas a cada 0,33d, ou seja, a diferença é de apenas uma medição. Essa constatação indica que a velocidade de escoamento do experimento e das simulações utilizando essa abordagem foram concordantes.

No estudo de Bandeiras (2009) ocorreu uma discordância no início das curvas, onde o traçador do experimento foi detectado após 0,29d após sua inserção e na simulação após 0,62d de tempo de escoamento. Além disso, ocorreu o efeito de cauda longa, onde pequenas concentrações do traçador simulado foram detectadas por longo período após o traçador salino não ter sido detectado pelo equipamento de medição. Essas constatações indicam que a dispersão do traçador simulado é menor que o experimental na primeira metade da curva, porém se adequa após o pico. Ainda, esse alongamento acentuado com pequenas concentrações ao final da curva pode indicar baixa precisão do equipamento de medição do experimento, inadequação entre a maneira que o traçador foi inserido no experimento e na simulação ou até mesmo um possível erro numérico ao final da curva.

No entanto, no estudo experimental de Bandeiras (2009), também foi identificado um retardamento da saída do traçador, onde foi recuperado apenas 56% da substância. O autor atribui esse fato ao transporte das moléculas do traçador em zonas com pouca dinâmica de escoamento que, posteriormente pode ter evoluído para zonas mortas retendo a substância no interior dessas zonas, assim como relatado nos estudos de Santamaría (1999), Martinez e Wise (2003) e Albuquerque (2004). O efeito de cauda longa na simulação CFD-DEM pode corroborar essa afirmação, o traçador da simulação pode ter passado por essas zonas de estagnação e devido a incapacidade do modelo em simular a evolução das zonas de estagnação em zonas mortas causada pela colmatação, o traçador foi sendo liberado lentamente, estendendo a curva conforme observado.

No estudo de caso de Gikas *et al.* (2017), por sua vez, o início da detecção dos traçadores simulados para a abordagem CFD-DEM e experimental se conciliaram, sendo que ambos começaram a ser detectados após 0,66d do lançamento dos traçadores, além disso a primeira metade da curva se adequou bem ao experimental. Nesse estudo de caso, também ocorreu o efeito cauda longa no traçador da simulação, reforçando a possibilidade de inadequação da maneira que o traçador foi inserido ou o erro numérico ao final das curvas.

4.3.2. Comparação entre o traçador experimental e Darcy-Forchheimer

Comparando-se as curvas do experimento com o modelo de meio poroso homogêneo de Darcy-Forchheimer, percebe-se que há várias incongruências entre a simulação e o

experimental. Para o estudo de caso baseado em Bandejas (2009), o início das curvas do traçador simulado foi detectado 1,08d após o lançamento e o pico ocorreu após 2,38d com um valor de 38,22 mg/L, concentração muito superior e defasada em relação ao dado experimental, onde o pico ocorreu a 12,97 mg/L após 1,71d do lançamento do traçador. Essas incongruências demonstram que os coeficientes D e F não conseguiram representar o comportamento para os WCs em estudo. No estudo de Gikas *et al.* (2017) o início da detecção do traçador sintético só ocorreu várias horas após o traçador do experimento já ter sido totalmente extinguido, indicando que a velocidade da simulação para essa abordagem foi muito inferior a velocidade do experimento, sendo necessário a calibração dos coeficientes para melhor adequação das curvas. Nessa abordagem também ocorreu o fenômeno de cauda longa.

Analisando a distribuição das curvas de concentração do traçador, percebe-se que a abordagem CFD-DEM possui capacidade de indicar melhor o comportamento do traçador no interior do leito em detrimento da abordagem de meio poroso homogêneo utilizando as equações de Darcy-Forchheimer. Nota-se que para ambas as curvas concentração-tempo utilizando a abordagem clássica o formato é simétrico, semelhante à distribuição normal. Já a abordagem proposta, principalmente para o estudo de caso de Gikas *et al.* (2017), o formato se torna assimétrico, assim como no experimento, indicando que a abordagem CFD-DEM é capaz de simular o escoamento melhor que a abordagem de Darcy-Forchheimer. Isso se dá devido a maneira com que o acoplamento entre os códigos insere fisicamente as partículas, simulando melhor o escoamento em meio granular, podendo simular pequenos distúrbios que também são detectados no experimento. A abordagem clássica, por sua vez, apenas atenua a velocidade do escoamento.

4.4. PARÂMETROS ESTATÍSTICOS

Na Tabela 6 estão dispostos os resultados dos índices de acurácia e erros calculados para ambos os estudos e os diferentes métodos de simulação.

Tabela 6. Erros e índices estatísticos para o IP02 de Bandeiras (2009) e para o WC de Gikas *et al.* (2017)

Índices e erros	Bandeiras (2009)			Gikas <i>et al.</i> (2017)		
	Exp	CFD-DEM	Darcy-Forchheimer	Exp	CFD-DEM	Darcy-Forchheimer
Desvio	4,34	4,47	14,29	2,46	1,88	2,43
ME		-1,25	7,88	–	-1,09	-3,44
MAE		1,84	11,61	–	1,59	3,44
MSE		8,12	237,05	–	4,14	21,31
RMSE		1,84	11,61	–	1,59	3,44
RMSE _{bias}		2,56	13,23	–	1,71	3,08
IC		0,89	0,29	–	0,87	0,00
D _{PIELKE}		1,04	8,00	–	1,22	3,11

Legenda: ME – Erro médio; MAE – Erro médio absoluto; MSE – Erro Quadrático médio; RMSE – Raiz do Erro Quadrático Médio; IC – Índice de concordância; D_{PIELKE} – Índice de destreza de Pielke

Fonte: O autor

Conforme a Tabela 6, o desvio da simulação CFD-DEM para o estudo de caso de Bandeiras (2009) se aproximou do desvio do experimento, enquanto o desvio da simulação clássica foi 3 vezes maior que o experimental. Já o estudo de caso de Gikas *et al.* (2017) o desvio da simulação utilizando as equações de Darcy-Forchheimer se aproximou do experimento, porém a diferença entre os desvios da abordagem CFD-DEM e do experimento foi de apenas 0,58.

Em relação aos índices de erros, os valores foram substancialmente menores para as simulações utilizando o acoplamento entre CFD-DEM em relação as simulações utilizando as equações de Darcy-Forchheimer. O erro quadrático médio (MSE) para a abordagem clássica foi 29 vezes maior que a abordagem proposta para o estudo de caso de Bandeiras (2009) e 5 vezes para o estudo de caso de Gikas *et al.* (2017). A média de erros (ME) foi 6 vezes menor para a abordagem proposta para o estudo de caso de Bandeiras (2009) e 3 vezes menor para o estudo de Gikas *et al.* (2017). A média de erros absolutos (MAE) também foi 6 vezes menor para o estudo de Bandeiras (2009) e 2 vezes menor para o estudo de Gikas *et al.* (2017).

Em todos índices estatísticos o modelo CFD-DEM obteve resultados superiores em relação ao modelo de Darcy-Forchheimer. Comparando-se os IC, o índice foi superior na simulação CFD-DEM se comparado com a simulação com meio poroso homogêneo utilizando as equações de Darcy-Forchheimer. A concordância do modelo CFD-DEM chegou a 0,89, conforme o IC de Willmot (1982) e 0,87 para o WC de Gikas *et al.* (2017) antes apenas 0,29 e 0,00 para os estudos de caso Bandeiras (2009) e Gikas *et al.* (2017), respectivamente. Lembrando que $IC=1$ indica a concordância perfeita entre o simulado e o observado.

O modelo CFD-DEM também demonstrou sua destreza segundo os critérios de Pielke (2013), onde D_{PIELKE} foi menor que o limite dado pelo autor para destreza de um modelo ($D_{PIELKE} < 2$) em ambos estudos de caso. Isso se dá devido a pouca divergência entre os desvios dos resultados observados pelo experimento e o simulado pela abordagem CFD-DEM e, tanto a RMSE, quanto a $RMSE_{bias}$ foram menores que o desvio do experimento. O modelo baseado nas equações de Darcy-Forchheimer, por sua vez, não conseguiu comprovar sua destreza em qualquer estudo de caso segundo esse índice, visto que os valores calculados são superiores ao limite de referência.

4.5. PARÂMETROS HIDRODINÂMICOS

Os resultados dos parâmetros hidrodinâmicos calculados conforme os estudos com traçadores para o experimento e os diferentes métodos de simulação estão representados na Tabela 7.

Tabela 7. Parâmetros hidrodinâmicos dos traçadores experimentais e sintéticos baseados nos estudos de Bandeiras (2009) e de Gikas *et al.* (2017)

Parâmetro	Unidade	Bandeiras (2009)			Gikas <i>et al.</i> (2017)		
		Exp.	CFD-DEM	Darcy-Forchheimer	Exp.	CFD-DEM	Darcy-Forchheimer
t_m	d	1,83	2,45	2,74	4,55	5,75	11,80
σ^2	d ²	0,63	1,88	0,61	2,05	14,02	1,77
σ_0^2	-	0,19	0,31	0,06	0,10	0,42	0,08
τ	d	0,99	0,99	0,99	3,60	3,60	3,60
λ	-	1,56	1,85	2,35	0,97	0,93	3,15
t_p	min	2220	2640	3360	5040	4800	16320
V_{med}	m.s ⁻¹	2,72e-06	1,84e-06	1,49e-06	8,58e-06	7,78e-06	2,97e-06
N	-	3	5	14	8	9	86
d	-	0,15	0,10	0,03	0,06	0,05	0,006

Legenda: t_m – tempo de detenção hidráulica médio; σ^2 - variância; σ_0^2 - variância adimensional; τ – tempo de detenção hidráulico teórico; λ – eficiência hidráulica; t_p – tempo de pico de concentração do traçador; V_{med} – velocidade média teórica; N – número de tanques-em-série; d – índice de dispersão

Fonte: O autor

Com base na comparação dos valores do t_m , nota-se que há uma diferença significativa entre os valores das simulações e do experimento. No caso da simulação utilizando a abordagem de Darcy-Forchheimer, essa variação é atribuída à discordância entre a curva concentração-tempo da simulação em relação à curva experimental. Essa discordância fez com que o t_m utilizando essa abordagem fosse 1,5 e 2,6 vezes maior em comparação aos experimentos de Bandeiras (2005) e Gikas *et al.* (2017), respectivamente.

Na simulação CFD-DEM, por sua vez, a diferença entre o t_m das simulações e do experimento é de 9 h para o estudo de Bandeiras (2009) e 24 h no estudo de Gikas *et al.*

(2017). Essa diferença pode ser atribuída ao fenômeno de cauda longa que tendeu a aumentar o t_m da simulação. Recalculando os parâmetros sem o prolongamento da curva os parâmetros hidráulicos tendem a se aproximar do valor experimental. O t_m recalculado foi de 2,18d para o estudo de caso Bandejas (2009) e 4,56d para Gikas *et al.* (2017), ou seja, para o estudo de Gikas *et al.* (2017) a diferença entre os parâmetros são na ordem de minutos. Além disso, percebe-se que o efeito de cauda longa afetou mais a simulação do WC baseado em Gikas *et al.* (2017) do que a de Bandejas (2009). Tendo em vista que a quantidade de traçador para o estudo de caso de Bandejas (2009) (100g/L) foi muito superior ao estudo de caso de Gikas *et al.* (2017) (75,33 mg/L) indica que concentrações iniciais maiores do traçador experimental são preferíveis para o monitoramento da curva concentração-tempo, devido ao cálculo do escalar passivo utilizado para simular o traçador da simulação, que pode minimizar os erros numéricos.

O fenômeno de cauda longa afeta ainda mais a variância (σ^2) das simulações utilizando a abordagem CFD-DEM, devido ao quadrado do tempo na Eq. 13. A remoção da parte problemática da curva modifica a variância de 1,88 para 0,49 para o estudo de caso de Bandejas (2009) e de 14,02 para 2,50 para o estudo de caso baseado em Gikas *et al.* (2017), sendo que no experimento a σ^2 foi de 0,63 e 2,05 para o estudo de Bandejas (2009) e Gikas *et al.* (2017), respectivamente

O valor do t_m foi maior que o τ tanto no experimento quanto nas simulações. Seeger *et al.* (2013) encontraram valores até 50% maiores que o valor teórico em seu estudo e atribuiu a sorção do traçador no meio suporte ou no biofilme, porém Bandejas (2009) realizou ensaio de adsorção em seu estudo, descartando a possibilidade desse fenômeno ter ocorrido em seu experimento. Esse fato reforça a possibilidade de zonas de estagnação terem retido o traçador em seu interior.

O método de simulação CFD-DEM consegue definir com êxito a eficiência hidráulica (λ) conforme o parâmetro de Persson *et al.* (1999). Para ambos os estudos de caso utilizando a abordagem proposta, as diferenças entre os parâmetros foram mínimas. No estudo de Bandejas (2009) o λ experimental foi de 1,71 ante 1,85 no simulado e no estudo de Gikas *et al.* (2017) o λ do experimento foi 0,97 e 0,93 na simulação. Essa concordância está ligada ao fato da abordagem CFD-DEM ser capaz de indicar com acurácia o tempo de pico (t_p) do traçador simulado em relação ao traçador experimental.

O método de simulação utilizando as equações de Darcy-Forchheimer, por sua vez, apesar de ter conseguido classificar a eficiência hidráulica como boa ($\lambda > 0,75$), mesma classificação

do experimento, os valores de λ para esse método de simulação foram de 2,36 e 3,15 para o estudo de Bandejas (2009) e Gikas *et al.* (2017), respectivamente, muito superiores aos experimentais.

Portanto, tendo em vista o valor de λ , pode-se concluir que a simulação utilizando a abordagem CFD-DEM consegue definir com exatidão a eficiência hidráulica do WC em detrimento da abordagem de meio poroso homogêneo.

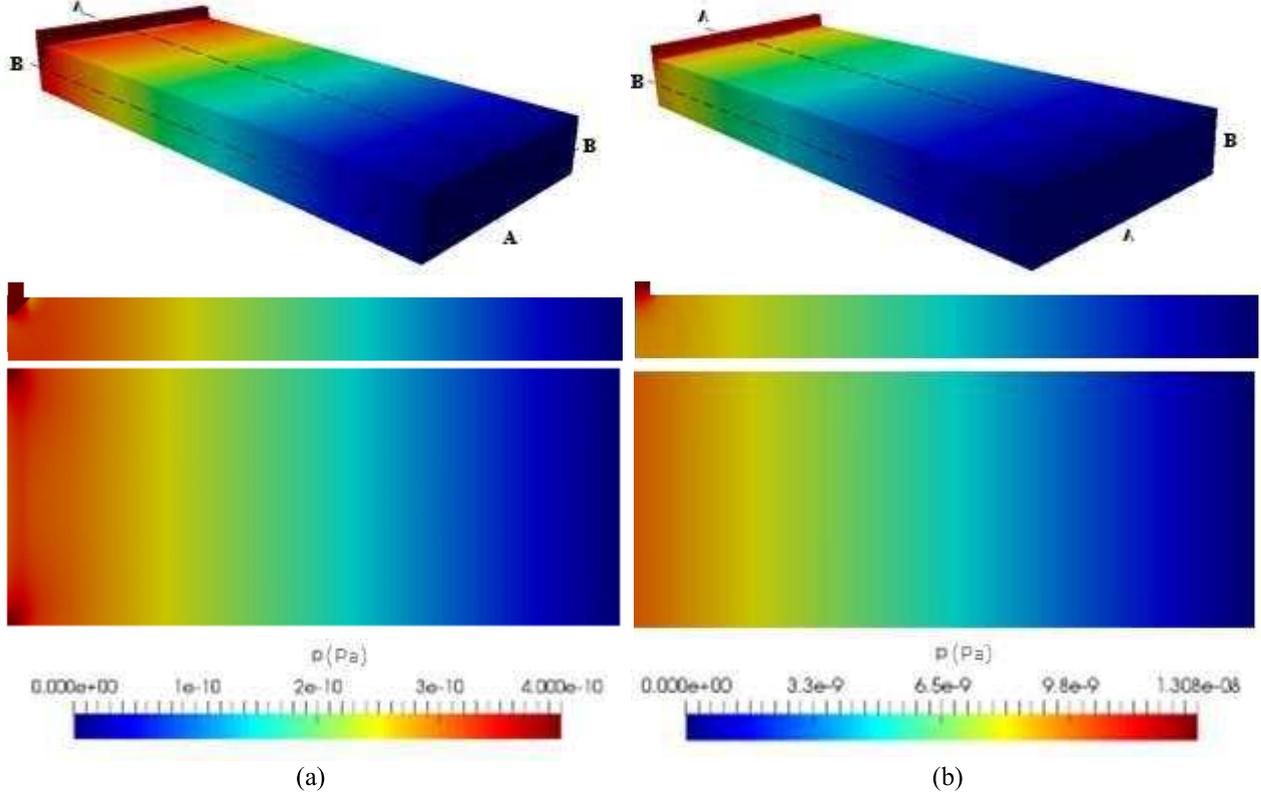
Em relação à classificação quanto ao modelo de escoamento ideal, no experimento de Bandejas (2009) o número de tanques-em-série e o número de dispersão indicaram a forte dispersão nesse ponto, sendo $N=3$, ou seja, para esse estudo de caso, o escoamento se afasta do fluxo em pistão. Na simulação utilizando a abordagem de modelo poroso homogêneo, por sua vez, os resultados indicaram uma dispersão consideravelmente menor, com $N=14$, ou seja, o modelo de escoamento se aproxima mais do fluxo em pistão indicando que a abordagem clássica não conseguiu classificar o modelo de escoamento. A simulação utilizando a abordagem CFD-DEM também classifica o escoamento como fluxo em pistão, porém o valor de $N=5$ é de apenas 2 tanques de diferença do experimento, sendo que a dispersão (d) foi ligeiramente menor na simulação.

Considerando o experimento de Gikas *et al.* (2017), o escoamento se aproxima do fluxo em pistão, sendo o N igual a 8, apesar da dispersão ainda ser considerada forte. Na simulação utilizando as equações de Darcy-Forchheimer, apesar do escoamento ter se aproximado do ideal fluxo em pistão, a dispersão foi considerada fraca e o $N=86$, muito superior ao do experimento ($N=8$). Na abordagem CFD-DEM, por sua vez, as pequenas concentrações do traçador sintético que causou o alongamento da curva resposta do traçador ainda causou distúrbios nos resultados. Removendo a parte problemática da curva, o valor de dispersão se iguala ao valor experimental e aumenta apenas 1 unidade de tanques, sendo $N=9$.

4.6. PÓS-PROCESSAMENTO

Na Figura 25 estão representados os mapas de cores para pressão das simulações para os estudos de caso de Bandejas (2009) com o acoplamento entre o CFD-DEM e a abordagem clássica por meio da resolução das equações de Darcy-Forchheimer.

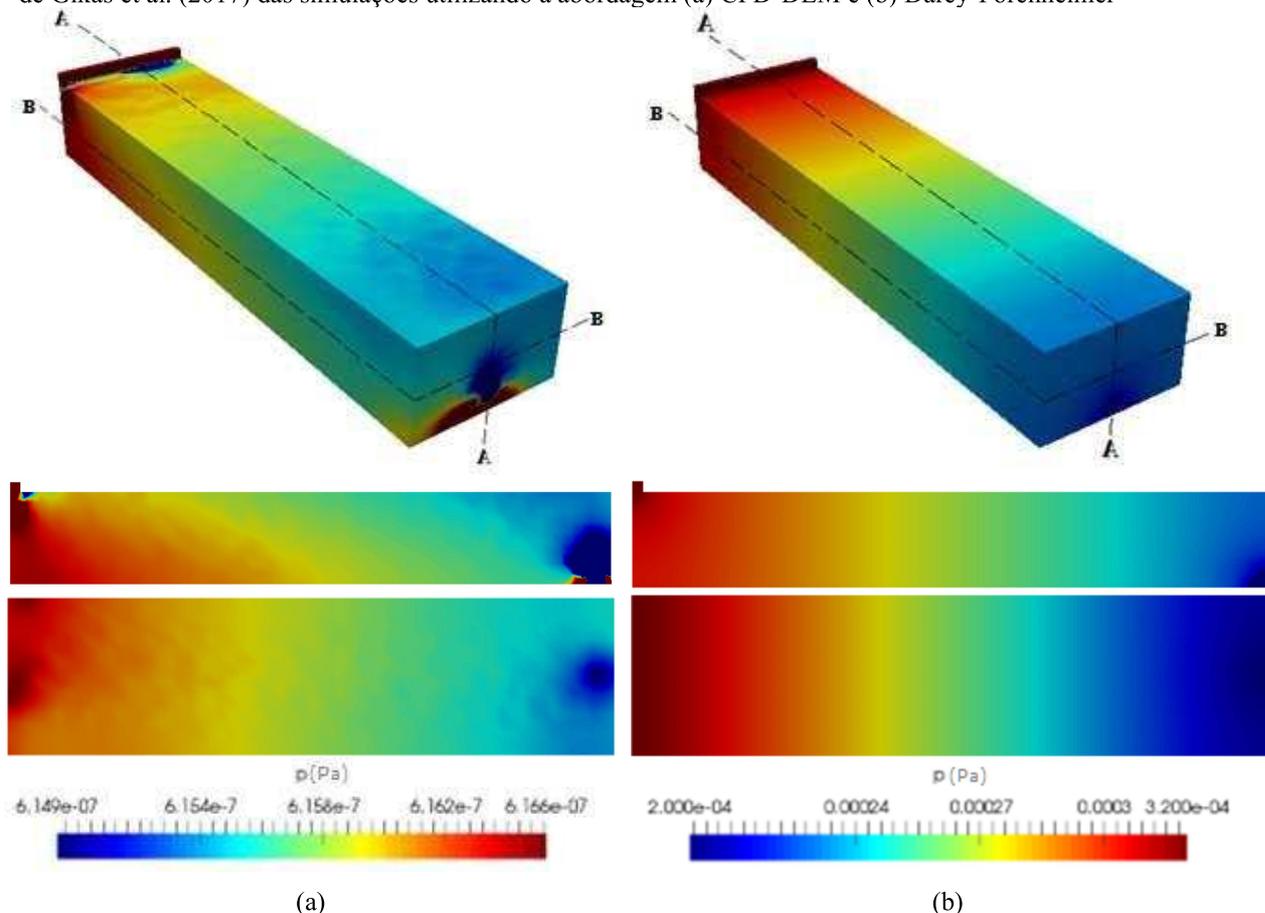
Figura 25. Mapa de cores para pressão (Pa) em isométrico, perfil transversal e longitudinal para os estudos de caso Bandeiras (2009) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer



Fonte: O autor

Na Figura 26 estão representados os mapas de cores para pressão das simulações para os estudos de caso de Gikas *et al.* (2017) com o acoplamento entre o CFD-DEM e a abordagem clássica por meio da resolução das equações de Darcy-Forchheimer.

Figura 26. Mapa de cores para pressão (Pa) em isométrico, perfil transversal e longitudinal para os estudos de caso de Gikas et al. (2017) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer



Fonte: O autor

Pela magnitude dos valores nota-se que a pressão da simulação utilizando a abordagem CFD-DEM possui magnitude menor em relação à simulação de meio poroso homogêneo considerando o mesmo estudo de caso. Além disso, percebe-se que na simulação do meio poroso homogêneo utilizando as equações de Darcy-Forchheimer (Figura 25b e Figura 26b) a distribuição da pressão também é homogênea e diminui gradualmente no sentido do comprimento em ambos os estudos de caso. Esse padrão era esperado, visto que essa abordagem apenas modifica o valor da pressão para ajustar as velocidades.

Nos mapas de cores para a simulação utilizando a abordagem CFD-DEM (Figura 25a e Figura 26a), por sua vez, as partículas do material de enchimento são adicionadas fisicamente na simulação, podendo causar pequenos distúrbios na pressão ao longo do leito. Na simulação baseada no estudo de Bandejas (2009), o padrão de distribuição de pressão para a simulação utilizando o acoplamento CFD-DEM (Figura 25a) é similar ao meio poroso homogêneo (Figura 25b) onde percebe-se uma diminuição gradual no sentido do comprimento.

Já na simulação baseada no estudo de Gikas *et al.* (2017) há diferenças significativas no padrão de distribuição da pressão entre os diferentes métodos de simulação. Na simulação

com a acoplagem CFD-DEM para o estudo de caso de Gikas *et al* (2017) (Figura 26a), a pressão tende a diminuir no sentido do comprimento, porém, com o padrão de distribuição heterogêneo, com diversas manchas de maior e menor pressão ao longo dos perfis.

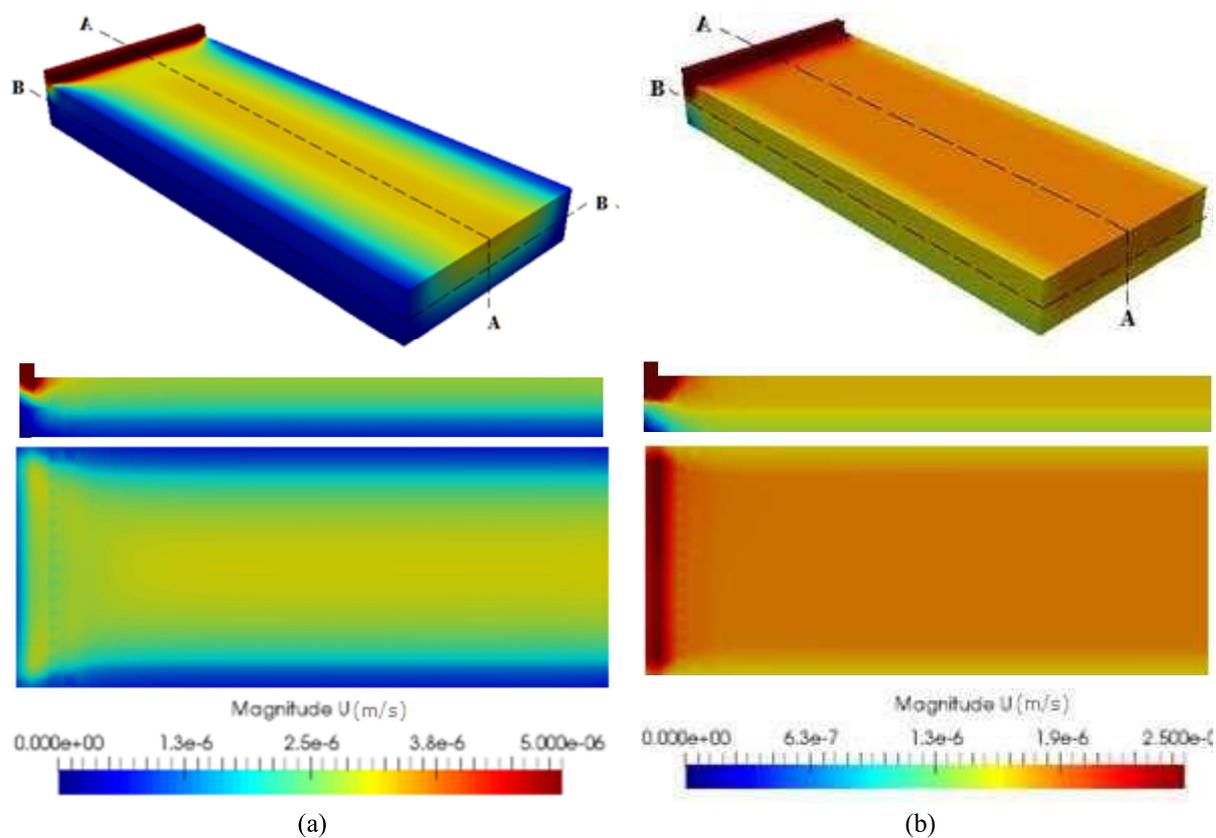
Essa diferença entre os estudos de caso para a simulação CFD-DEM, pode ser atribuída às diferenças entre seus aspectos, como a tubulação de distribuição e coleta do efluente, a taxa de aplicação hidráulica e as características físicas do leito, como a relação entre o comprimento largura e, principalmente o diâmetro das partículas do material de enchimento.

No caso de Bandeiras (2009) tanto a distribuição quanto a coleta do efluente são distribuídas ao longo da largura, tornando o padrão de distribuição de pressão mais homogêneos ao longo do leito, enquanto no estudo de Gikas *et al.* (2017) a coleta do efluente tratado é feita de forma concentrada causando perturbações na pressão. A taxa de aplicação hidráulica superior no caso de Gikas *et al.* (2017) também pode ter auxiliado no comportamento heterogêneo da pressão captado pelo modelo CFD-DEM.

Essas constatações indicam que o método de simulação utilizando a abordagem CFD-DEM permite analisar de forma representativa o padrão de distribuição de pressão em relação ao método de simulação de meio poroso homogêneo utilizando as equações de Darcy-Forchheimer, visto a incapacidade do método clássico em descrever diferenças no padrão de distribuição de pressões.

Na Figura 27 estão representados os mapas de cores para velocidade para os estudos de caso de Bandeiras (2009) e utilizando a abordagem sugerida, utilizando o acoplamento entre o CFD-DEM e a abordagem clássica por meio da resolução das equações de Darcy-Forchheimer.

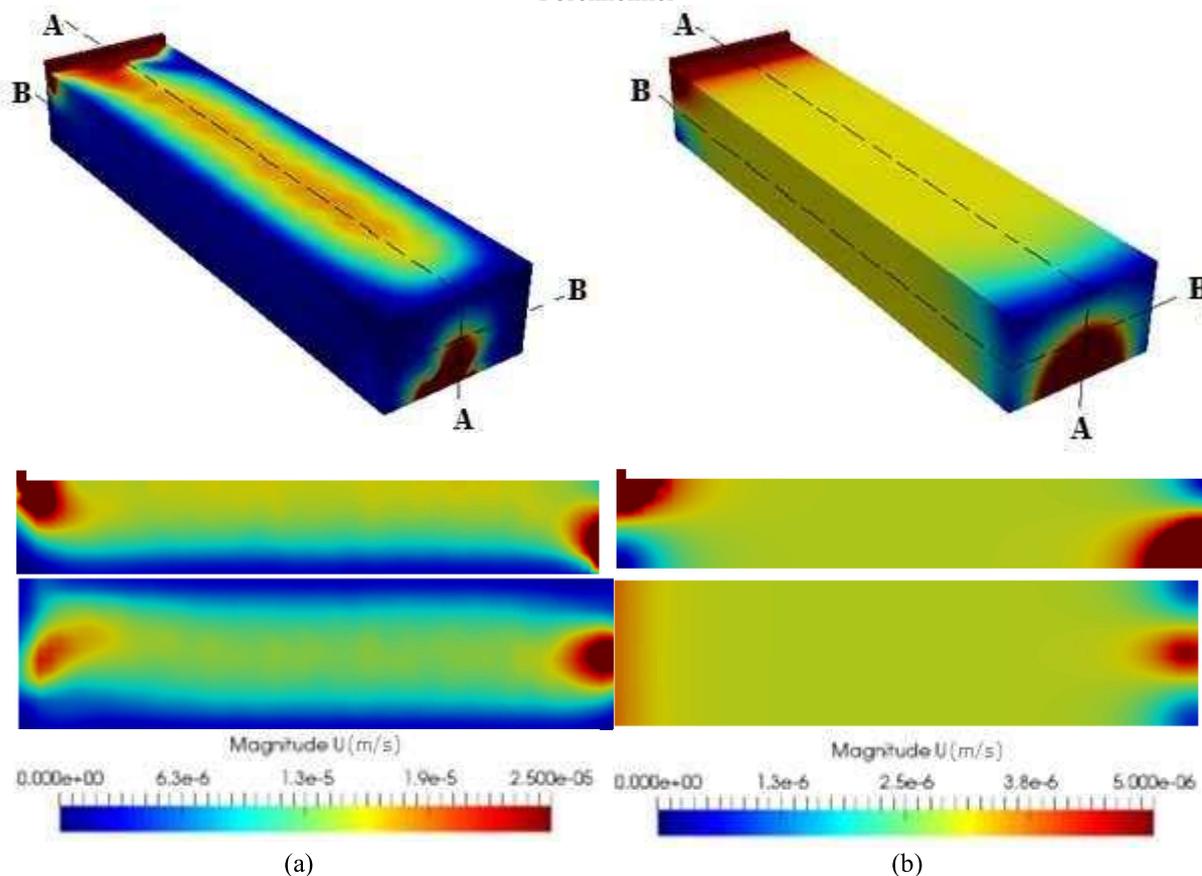
Figura 27. Mapa de cores para velocidade (m/s) em isométrico, perfil transversal e longitudinal para os estudos de caso Bandeiras (2009) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer



Fonte: O autor

Na Figura 28 estão representados os mapas de cores para velocidade para os estudos de caso de Gikas *et al.* (2017) e utilizando a abordagem sugerida, utilizando o acoplamento entre o CFD-DEM e a abordagem clássica por meio da resolução das equações de Darcy-Forchheimer.

Figura 28. Mapa de cores para velocidade (m/s) em isométrico, perfil transversal e longitudinal para os estudos de caso Gikas *et al.* (2017) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer



Fonte: O autor

Analisando os mapas de cores para velocidade percebe-se diferenças significativas no padrão de distribuição de velocidades para os diferentes métodos de simulação. Para o método de simulação utilizando as equações de Darcy-Forchheimer (Figura 27b e Figura 28b), observou-se zonas de maior velocidade próximas da entrada e saída do escoamento e um padrão constante e homogêneo no interior do leito. Além disso, formaram-se zonas de estagnação nas quinas. Esse padrão de comportamento também foi percebido por Rengers *et al.* (2016), que utilizou da mesma abordagem de meio poroso homogêneo. Em conformidade com o constatado nas curvas de concentração-tempo do traçador, a magnitude de velocidade para o método de simulação de Darcy-Forchheimer foi inferior ao método CFD-DEM, principalmente no estudo de caso Gikas *et al.* (2017).

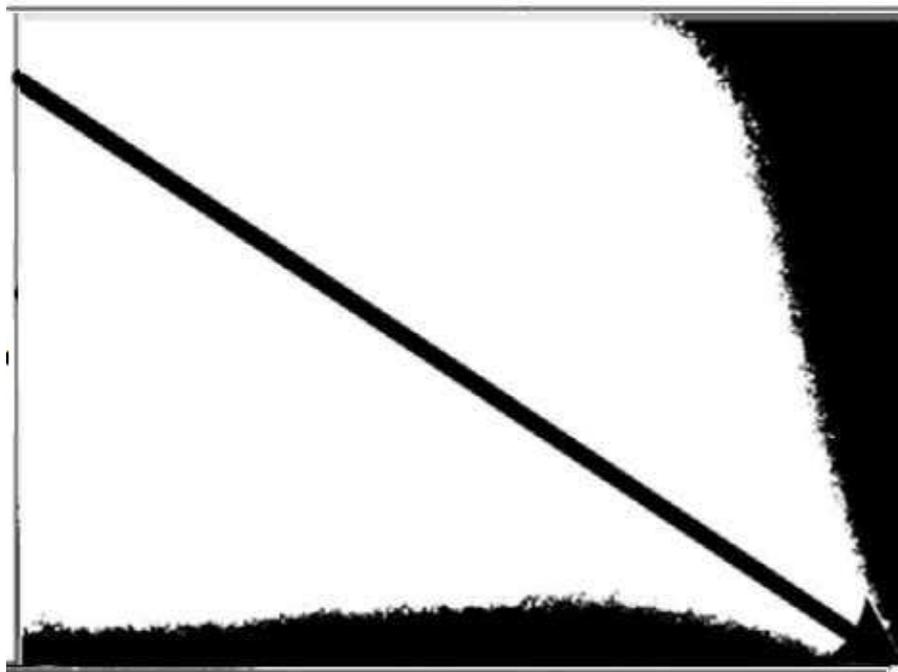
No estudo de caso de Bandeiras (2009) utilizando da abordagem clássica (Figura 27b), foram identificadas zonas mortas apenas nas quinas. Ainda foi identificado um pequeno retardamento na velocidade no fundo e nas laterais, porém não pode ser considerado como uma zona morta. Fiorese e Mancuso (2019), que adotaram a equação de Darcy para escoamento em meio poroso por meio do software MODFLOW e MODPATH, também

identificaram uma zona de estagnação ao fundo do WC em suas simulações, porém não fez considerações às laterais do reator.

No método de simulação CFD-DEM, por sua vez, foram notados alguns comportamentos que não foram percebidos pelo método de simulação clássico. Primeiramente, percebe-se que, em ambos estudos de caso, a velocidade do escoamento é superior no topo, indicando uma possível zona de escoamento preferencial, e próximo das zonas de entrada e saída. Esse padrão de comportamento também foi observado nos estudos experimentais de Tanner e Sukias (1995) e Suliman *et al.* (2006) que identificaram acúmulo de sólidos próximos à superfície do leito, enquanto De Paoli e Von Sperling (2013) notaram acúmulo de sólidos próximo da zona de entrada e saída, indicando zonas de maior circulação do escoamento.

Também foram identificadas zonas com velocidades menores nas paredes e principalmente nas quinas, apontando possíveis zonas mortas. Esse padrão de comportamento também foi constatado por Wang *et al.* (2014), onde foi notado visualmente por meio de traçadores fluorescentes que, para a configuração entrada no topo e saída no fundo (Figura 29), similar a utilizada no estudo de Gikas *et al.* (2017), o escoamento passa via curto-circuito pelo topo rumo a saída formando zonas mortas no fundo e nas quinas do WC, assim como observado na abordagem CFD-DEM.

Figura 29. Distribuição longitudinal de zonas ativas/mortas para a configuração Entrada-Topo Saída-Fundo



Fonte: Adaptado de Wang *et al.* (2014)

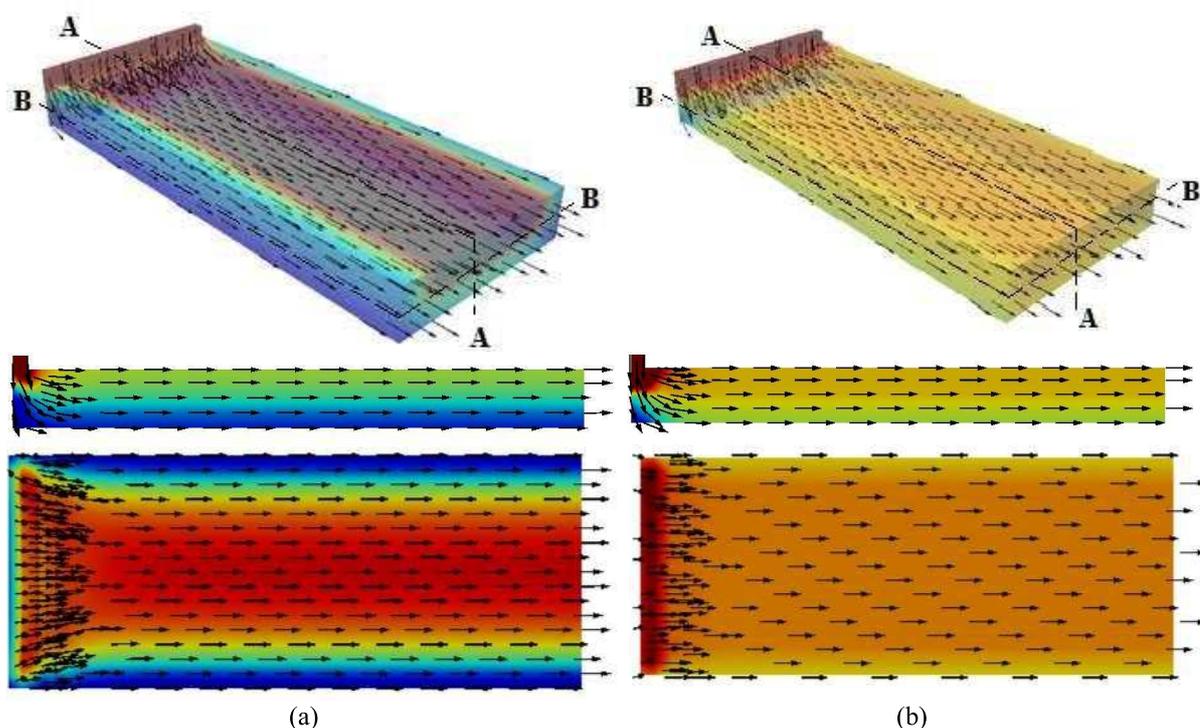
As zonas mortas influenciam negativamente na eficiência hidráulica dos WCs. Essa redução do volume efetivo é causado por diversos fatores, dentre outros, a relação entre o

comprimento e a largura, o material filtrante, a taxa de aplicação hidráulica (GARCÍA *et al.*, 2005; WANG *et al.*, 2014; DE MATOS *et al.*, 2018).

De fato, Fiorese e Mancuso (2019) aconselham mais estudos relacionados às configurações de entrada do escoamento em *wetlands* construídos, a fim de impedir a formação de zonas preferenciais ao escoamento e zonas mortas no fundo do sistema. Esse estudo indica a adoção de duas tubulações de distribuição na entrada em profundidades diferentes, a fim de evitar caminhos preferenciais e principalmente as zonas mortas no fundo do leito.

Na Figura 30 estão representados os vetores de velocidade para os estudos de caso de Bandeiras (2009) utilizando a abordagem sugerida, utilizando o acoplamento entre o CFD-DEM e a abordagem clássica por meio da resolução das equações de Darcy-Forchheimer.

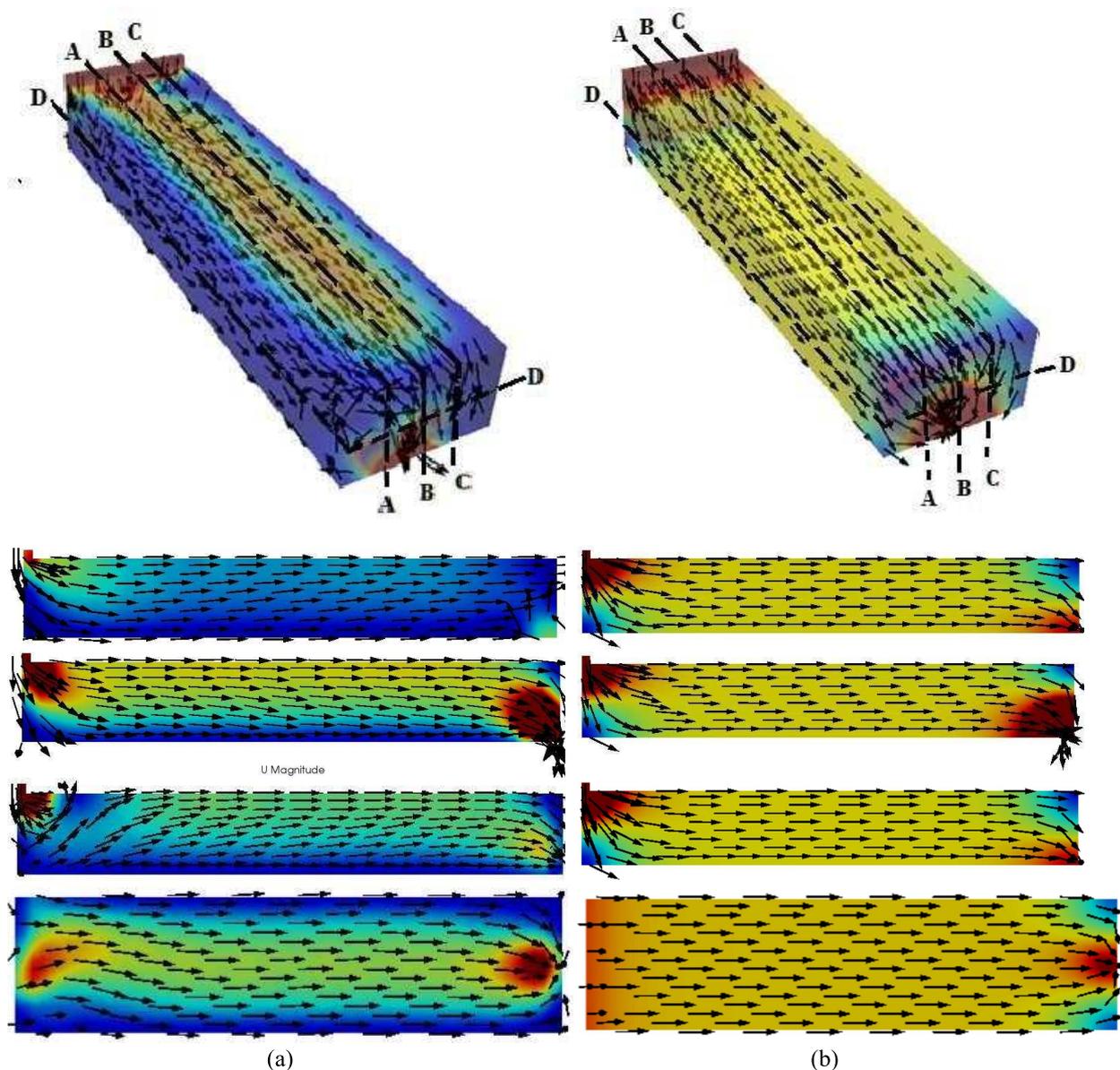
Figura 30. Vetores de velocidade em isométrico, perfil transversal e corte longitudinal para os estudos de caso Bandeiras (2009) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer



Fonte: O autor

Na Figura 31 estão representados os vetores de velocidade para os estudos de caso de Gikas *et al.* (2017) utilizando a abordagem sugerida, utilizando o acoplamento entre o CFD-DEM e a abordagem clássica por meio da resolução das equações de Darcy-Forchheimer.

Figura 31. Vetores de velocidade em isométrico, perfil transversal e cortes longitudinais para os estudos de caso Gikas *et al.* (2017) das simulações utilizando a abordagem (a) CFD-DEM e (b) Darcy-Forchheimer



Fonte: O autor

Os vetores de velocidade para a simulação utilizando o meio poroso homogêneo (Figura 30b e Figura 31b) partem diretamente da entrada rumo a saída sem anomalias na direção do escoamento, com comportamento similar ao fluxo em pistão, assim como Fiorese e Mancuso (2019) em seu modelo.

Nos vetores de velocidade utilizando o acoplamento entre CFD e DEM para o estudo de caso Bandeiras (2009) (Figura 30a) o comportamento é similar as simulações de meio poroso homogêneo (Figura 30b). Quanto ao estudo de caso Gikas *et al.* (2017), foi possível identificar na simulação CFD-DEM (Figura 31a) pequenas anomalias na direção do escoamento como vorticidades e alguns vetores contrários ao sentido de escoamento,

próximos da zona de entrada e de saída, comportamento provavelmente relacionado à coleta concentrada na saída do leito e pela presença das partículas.

Esse comportamento detectado pelo estudo de caso Gikas *et al.* (2017) nos vetores de velocidade indica que o modelo acoplado CFD-DEM é capaz de identificar anomalias na direção do escoamento que o modelo de Darcy-Forchheimer não é capaz.

4.7. RESTRIÇÕES E LIMITAÇÕES DO MODELO

O presente estudo limitou-se a estudo de *Wetlands* construídos subsuperficiais horizontais, porém é possível aplicar essa abordagem em outras configurações de WCs. A restrição de modelos matemáticos está relacionada com adoção de suposições, simplificações e omissões de processos e características. Foram realizadas simplificações nas tubulações de entrada e saída de modo a facilitar a criação da malha de volume finitos e o cálculo da vazão e velocidade.

A omissão principal do estudo está relacionada à omissão das plantas no sistema e do processo de colmatação. As plantas possuem papel importante no processo de bioquímico no tratamento de esgoto e sua presença também afeta a hidrodinâmica do sistema. A colmatação é o principal problema operacional de WCs, tendo grande impacto na hidrodinâmica do sistema, intensificada com o passar do tempo de operação. Outras omissões também foram estabelecidas, como os processos de evapotranspiração e precipitação pluviométrica. Para evitar problemas relacionados à essas omissões, para a validação do modelo foram utilizados estudos cujos leitos não possuem plantas, foram estabelecidos em ambiente de laboratório e em início de operação. No entanto, a inclusão desses elementos é fundamental para o desenvolvimento de estudos futuros da abordagem CFD-DEM em WCs.

Uma limitação importante desse estudo é a adoção de dados secundários para validação dos resultados. Os estudos limitaram à descrição dos procedimentos de inserção do traçador no leito, podendo causar interferências na simulação. Além disso, os estudos não fornecem a granulometria exata do material de enchimento, fornecendo apenas uma faixa granulométrica. Portanto, sugere-se para estudos futuros dados primários.

O *software CFDEM@coupling* não permite a simulação multifásica, portanto, o escoamento ocorre em meio saturado. Essa suposição é comum em modelos em WCs, como Ranieri *et al.* (2013). Além disso, o *software* considera esféricas as partículas do material de enchimento.

Mesmo com todas essas simplificações, o tempo das simulações para a abordagem CFD-DEM é muito superior à simulação de meio poroso homogêneo de Darcy-Forchheimer. A simulação do estudo de caso de Bandejas (2009), a abordagem clássica leva apenas 15 minutos ante mais de 5h para o acoplamento CFD-DEM para simular 12 dias de tempo de escoamento. Para o mesmo tempo de escoamento, a simulação do estudo de caso Gikas *et al.* (2017) a abordagem proposta leva mais de 20h ante cerca de 15 min para a abordagem clássica. Essa demanda computacional elevada do modelo CFD-DEM prejudica análises de WCs em escalar maiores, visto a necessidade de computadores de alto desempenho.

5. CONCLUSÕES

Nesse estudo, foi validada por meio de dados experimentais a modelagem acoplada do CFD com o DEM e comparou-se os resultados com a modelagem clássica por meio da resolução das equações de Darcy-Forchheimer. Até onde se sabe, o acoplamento CFD-DEM ainda não foi testado em WCs. Para comparar a hidrodinâmica dos experimentos, foi inserido no modelo um escalar passivo para simular a inserção de um traçador sintético na simulação. Comparando-se as curvas respostas do traçador experimental com o traçador sintético, a abordagem CFD-DEM mostrou-se superior ao modelo de meio poroso homogêneo de Darcy-Forchheimer, indicando com boa precisão o tempo de pico do traçador. Além disso, os índices atestaram a destreza da simulação entre o traçador modelado e o experimental.

Foi detectado pequenas concentrações do traçador sintético ao final da simulação que causou uma extensão da curva concentração-tempo gerando perturbações nos parâmetros hidrodinâmicos em ambas abordagens, porém mais acentuada na modelagem CFD-DEM. Apesar disso, a abordagem CFD-DEM consegue classificar com precisão a eficiência hidráulica do sistema. Ao remover essa extensão problemática da curva os parâmetros hidrodinâmicos simulados se ajustam bem aos experimentais. A causa desse problema na curva pode ser minimizada pela condução de estudos experimentais específicos para essa finalidade, visto que os estudos em que as simulações foram baseadas limitam as informações relacionadas a maneira que o traçador foi inserido.

Comparando-se dados do pós-processamento da simulação entre os métodos de simulação constata-se a superioridade do modelo acoplado CFD-DEM em identificar anomalias no escoamento e o comportamento interno em acordo com estudos experimentais de WCs. A modelagem de meio poroso de Darcy-Forchheimer é inapta para análises aprofundadas do comportamento interno de WCs. No entanto, a abordagem proposta é computacionalmente mais onerosa que a abordagem clássica.

Para trabalhos futuros, aconselha-se a validação do modelo para as outras configurações de WCs e incorporar processos omissos pelo estudo, em especial ao processo de colmatação. A abordagem DEM também pode ser utilizada para modelagem da colmatação física ao inserir as partículas dos sólidos suspensos juntamente com o escoamento. Além disso, esse modelo pode ser utilizado para aprimorar os estudos relativos à eficiência hidráulica de WCs, ao estudar a influência das características geométricas e operacional.

REFERÊNCIAS

- AKRATOS, Christos S; TSIHRINTZIS, Vassilios A. Effect of temperature, HRT, vegetation and porous media on removal efficiency of pilot-scale horizontal subsurface flow constructed wetlands. *Ecological Engineering*, v. 29, n. 2, p. 173–191, 2007. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857406001285>>.
- ALBAGLI, Sarita; CLINIO, Anne; RAYCHTOCK, Sabryna. Ciência Aberta: correntes interpretativas e tipos de ação | Open Science: interpretive trends and types of action. *Liinc em Revista*, v. 10, n. 2, 2014.
- ALBUQUERQUE, Antonio; BANDEIRAS, Rodrigo Mendonça. Analysis of hydrodynamic characteristics of a horizontal subsurface flow constructed wetland. In: CANDELA, LUCILLA (Org.). *Water Pollution in Natural Porous Media at Different Scales: Assessment of Fate, Impact and Indicators: WAPO2: B*. Barcelona (Spain): IGME, 2007. p. 329–338.
- ALBUQUERQUE, António João Carvalho. *Contribuição para o estudo da remoção de residuais de carbono em filtros biológicos de leito imerso e fluxo descendente*. 2004. Universidade da Beira Interior (Portugal), 2004.
- ALVARENGA, G. L. S. *et al.* Use of indium and rare earths activable tracers for the evaluation of the hydraulic performance of wastewater treatment units. 2013, Recife, Brasil: International nuclear atlantic conference, 2013. p. 24–29.
- ANTHES, Richard A *et al.* Estimation of skill and uncertainty in regional numerical models. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, v. 115, n. 488, p. 763–806, 1989.
- ANTHES, Richard A. Regional models of the atmosphere in middle latitudes. *Monthly weather review*, v. 111, n. 6, p. 1306–1335, 1983.
- ARAÚJO, Adérito; SOUSA, Ercília; ALBUQUERQUE, António. Longitudinal dispersion in a horizontal subsurface flow constructed wetland: a numerical solution. *Anziam Journal*, v. 50, p. C339–C353, 2008.
- ARCEIVALA, Sorab Jal. *Wastewater treatment and disposal: engineering and ecology in pollution control*. New Delhi: McGraw-Hill, 1981.
- BAIRD, Andrew J; SURRIDGE, Ben W J; MONEY, Russ P. An assessment of the piezometer method for measuring the hydraulic conductivity of a *Cladium mariscus*—*Phragmites australis* root mat in a Norfolk (UK) fen. *Hydrological Processes*, v. 18, n. 2, p. 275–291, 2004.
- BANDEIRAS, Rodrigo Mendonça. *Avaliação da influência da vegetação na variação das características hidrodinâmicas em leitos de escoamento subsuperficial e horizontal*. 2009. Universidade da Beira Interior, 2009.
- BLAZEJEWSKI, R.; MURAT-BLAZEJEWAKA, S. Soil clogging phenomena in constructed wetlands with subsurface flow. *Water Science & Technology*, v. 35, n. 5, p. 183–188, 1997.
- BODIN, Hristina *et al.* Influence of residence time analyses on estimates of wetland hydraulics and pollutant removal. *Journal of Hydrology*, v. 501, p. 1–12, 2013. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022169413005398>>.
- BONADONNA, Costanza; ERNST, G G J; SPARKS, R S J. Thickness variations and volume estimates of tephra fall deposits: the importance of particle Reynolds number. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, v. 81, n. 3–4, p. 173–187, 1998.

BRASIL, M. S.; DE MATOS, Antonio Teixeira; SORAES, A. A. Plantio e desempenho fenológico da Taboa (*Typha* sp.) utilizada no tratamento de esgoto doméstico em sistema alagado construído. *Engenharia Sanitaria e Ambiental*, v. 12, n. 3, 2006.

BRASIL, Mozart da Silva; MATOS, Antonio Teixeira De. Evaluating hydrological and hydraulic aspects in subsurface-flow constructed wetland systems. *Engenharia Sanitaria e Ambiental*, v. 13, n. 3, p. 323–328, 2008.

BRINKMAN, H C. A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles. *Flow, Turbulence and Combustion*, v. 1, n. 1, p. 27, 1949. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF02120313>>.

BRIX, Hans. Do macrophytes play a role in constructed treatment wetlands? *Water Science and Technology*, v. 35, n. 5, p. 11–17, 1997.

BRIX, Hans. Functions of macrophytes in constructed wetlands. *Water Science and Technology*, v. 29, n. 4, p. 71–78, 1994.

BRIX, Hans; SCHIERUP, Hans-Henrik. Sewage treatment in constructed reed beds—Danish experiences. *Water Pollution Research and Control Brighton*. Elsevier, 1988. p. 1665–1668.

BROVELLI, A *et al.* Coupled flow and hydro-geochemical modelling for design and optimization of horizontal flow constructed wetlands. 2007, 2007. p. 393–395.

CEBECI, Tuncer *et al.* *Computational fluid dynamics for engineers*. Springer Berlin Heidelberg, 2005.

CHANG, Tsang Jung *et al.* Flow uniformity and hydraulic efficiency improvement of deep-water constructed wetlands. *Ecological Engineering*, v. 92, p. 28–36, 2016. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S092585741630177X>>.

CHAZARENC, F *et al.* Effect of loading rate on performance of constructed wetlands treating an anaerobic supernatant. *Water science and technology*, v. 56, n. 3, p. 23–29, 2007.

COOPER, P. F. *et al.* *Reed beds and constructed wetlands for wastewater treatment*. Swindon, United Kingdom: WCR Publications, 1996.

COTA, Raquel da Silveira. *Hidrodinâmica e desempenho de filtros verticais plantados e não plantados com alimentação em pulso, empregados no tratamento de esgoto sanitário bruto*. 2011. 215 f. Universidade Federal de Minas Gerais, 2011.

COURANT, R; FRIEDRICHS, K; LEWY, H. Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik. *Mathematische Annalen*, v. 100, n. 1, p. 32–74, 1928. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01448839>>.

CUNDALL, Peter A; STRACK, Otto D L. A discrete numerical model for granular assemblies. *geotechnique*, v. 29, n. 1, p. 47–65, 1979.

DANCKWERTS, Peter V. Continuous flow systems: distribution of residence times. *Chemical engineering science*, v. 2, n. 1, p. 1–13, 1953.

DARCY, Henry. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon: exposition et application...* Paris: Victor Dalmont, 1856.

DE LEMOS, Marcelo J S. *Turbulence in porous media: modeling and applications*. Elsevier, 2012.

DE MATOS, Antonio Teixeira *et al.* Influence of the geometric configuration of unplanted horizontal subsurface flow constructed wetlands in the adjustment of parameters of organic matter decay models. *Journal of Water Process Engineering*, v. 22, p. 123–130, 2018. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2214714417305809>>.

DE MATOS, Mateus Pimentel *et al.* Clogging in horizontal subsurface flow constructed wetlands: influencing factors, research methods and remediation techniques. *Reviews in Environmental Science and Biotechnology*, v. 17, n. 1, p. 87–107, 1 mar. 2018. Disponível em: <<https://search.proquest.com/docview/1993457615?accountid=26629>>. Acesso em: 2 nov. 2019.

DE MATOS, Mateus Pimentel *et al.* Uso de traçador salino para avaliação da colmatção e das condições hidrodinâmicas em sistemas alagados construídos de escoamento horizontal subsuperficial. *ENGENHARIA AGRICOLA*, v. 35, n. 6, p. 1137–1148, 2015.

DE PAOLI, André Cordeiro. *Análise de desempenho e comportamento de wetlands horizontais de fluxo subsuperficial baseado em modelos hidráulicos e cinéticos*. 2010. 148 f. f. Universidade Federal de Minas Gerais, 2010.

DE PAOLI, André Cordeiro; VON SPERLING, Marcos. Evaluation of clogging in planted and unplanted horizontal subsurface flow constructed wetlands: solids accumulation and hydraulic conductivity reduction. *Water Science and Technology*, v. 67, n. 6, p. 1345–1352, 2013.

DEFO, Celestin *et al.* Development of linear models for predicting Ni concentrations uptake by three aquatic macrophytes species in vertical subsurface flow constructed wetlands. *Ecology, Environment and Conservation*, Export Date: 2 November 2019, v. 23, n. 1, p. 344–350, 2017. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85020214184&partnerID=40&md5=62e6450919ea17465e5c30476571ee9d>>.

DEFO, Célestin *et al.* Modelling approaches for simulating wetland pollutant dynamics. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, v. 47, n. 15, p. 1371–1408, 2017. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85032813106&doi=10.1080%2F10643389.2017.1350126&partnerID=40&md5=bc99ea418959962db23eb532c0e02643>>.

DENG, Zhi-Qiang; JUNG, Hoon-Shin. Variable residence time-based model for solute transport in streams. *Water resources research*, v. 45, n. 3, 2009.

DIETERICH, James H. Time-dependent friction in rocks. *Journal of Geophysical Research*, v. 77, n. 20, p. 3690–3697, 1972.

DOTRO, Gabriela *et al.* *Treatment Wetlands*. London, UK: IWA PUBLISHING, 2017. v. 16.

ENSSLIN, Leonardo *et al.* Avaliação do desempenho de empresas terceirizadas com o uso da metodologia multicritério de apoio à decisão-construtivista. *Pesquisa Operacional*, v. 30, n. 1, p. 125–152, 2010.

ERGUN, Sabri. Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.*, v. 48, p. 89–94, 1952.

FAN, Liwei; HAI, Reti; LU, Zexiang. CFD study on hydraulic performance of subsurface flow constructed wetland: Effect of distribution and catchment area. *Korean Journal of Chemical Engineering*, v. 26, n. 5, p. 1272–1278, set. 2009.

FERELLEC, J; MCDOWELL, G. Modelling realistic shape and particle inertia in DEM. *Géotechnique*, v. 60, n. 3, p. 227–232, 2010.

FILHO, F.J.C.M. *et al.* Hydraulic and hydrological aspects of an evapotranspiration-constructed wetland combined system for household greywater treatment. *Journal of Environmental Science and Health - Part A Toxic/Hazardous Substances and Environmental Engineering*, v. 53, n. 6, p. 493–500, 2018. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85041098961&doi=10.1080%2F10934529.2017.1422954&partnerID=40&md5=5be5e378d1a474daed1442fd239df354>>.

FIOREZE, Mariele; MANCUSO, Malva Andrea. MODFLOW and MODPATH for hydrodynamic simulation of porous media in horizontal subsurface flow constructed wetlands: A tool for design criteria. *Ecological Engineering*, v. 130, p. 45–52, 2019. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857419300357>>.

FONDER, Nat; HEADLEY, Tom. Systematic Classification, Nomenclature and Reporting for Constructed Treatment Wetlands. *Water and Nutrient Management in Natural and Constructed Wetlands*, 2010. p. 191–219.

FORCHHEIMER, Philipp. Wasserbewegung durch boden. *Z. Ver. Deutsch, Ing.*, v. 45, p. 1782–1788, 1901.

FOX, Douglas G. Judging air quality model performance: a summary of the ams workshop on dispersion model performance, woods hole, mass., 8–11 September 1980. *Bulletin of the American Meteorological Society*, v. 62, n. 5, p. 599–609, 1981.

GALVÃO, Ana Fonseca *et al.* Simulating flows in horizontal subsurface flow constructed wetlands operating in Portugal. *Ecological Engineering*, v. 36, n. 4, p. 596–600, 2010. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-77049121461&doi=10.1016%2Fj.ecoleng.2009.11.014&partnerID=40&md5=63e5c195515de12d21a048f8b1a6e50a>>.

GARCIA, Joan *et al.* Contaminant removal processes in subsurface-flow constructed wetlands: a review. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, v. 40, n. 7, p. 561–661, 2010.

GARCÍA, Joan *et al.* Effect of key design parameters on the efficiency of horizontal subsurface flow constructed wetlands. *Ecological Engineering*, v. 25, n. 4, p. 405–418, 2005. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857405001722>>.

GHRAIRI, Fatiha *et al.* Comparative Study between Two Granular Materials and their Influence on the Effectiveness of Biological Filtration. *Energy Procedia*, v. 74, p. 799–806, 2015. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1876610215015830>>.

GIKAS, G D *et al.* Evaluation of clogging in HSF pilot-scale CWs using tracer experiments. *European Water*, v. 58, p. 179–1847, 2017.

GIRALDI, D.; DE MICHELII VITTURI, M.; IANNELLI, R. FITOVERT: A dynamic numerical model of subsurface vertical flow constructed wetlands. *Environmental Modelling and Software*, v. 25, n. 5, p. 633–640, 2010. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364815209001200>>.

GOLSHAN, Shahab *et al.* Review and implementation of CFD-DEM applied to chemical process systems. *Chemical Engineering Science*, v. 221, p. 115646, 2020. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250920301780>>.

GONIVA, Christoph *et al.* Influence of rolling friction on single spout fluidized bed simulation. *Particuology*, v.

10, n. 5, p. 582–591, 2012.

GRIFFIN, PWLC; WILSON, L; COOPER, D. Changes in the use, operation and design of sub-surface flow constructed wetlands in a major UK water utility. 2008, Vikram University and IWA Indore, India, 2008. p. 1–7.

HAN, Sang Soo *et al.* Assessment of Suspended Solid Removal in a Surface Flow Constructed Wetland Using a Three-Dimensional Numerical Model. *Water Resources Management*, v. 28, n. 10, p. 3111–3125, 2014.

HENZE, Mogens *et al.* *Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. [S.l.]: IWA publishing, 2000.

HUA, G F; ZHU, W; ZHANG, Y H. A conceptual approach based on suspended solids to estimate clogging time in constructed wetlands. *Journal of Environmental Science and Health Part A*, v. 45, n. 12, p. 1519–1525, 2010.

HUA, Guofen *et al.* Influence of clogging and resting processes on flow patterns in vertical flow constructed wetlands. *Science of The Total Environment*, v. 621, p. 1142–1150, 2018. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969717328164>>.

HYÁNKOVÁ, E *et al.* The knowledge based on the research of the filtration properties of the filter media and on the determination of clogging causes. 2006, 2006. p. 23–29.

INSTITUTO TRATA BRASIL. *Benefícios Econômicos e Sociais da Expansão do Saneamento no Brasil*. . São Paulo-SP, 2018.

INTERNATIONAL WATER ASSOCIATION (IWA). *Constructed Wetlands for Pollution Control: Process, Performance, Design and Operation*. London: IWA Publishing, 2000.

ISLABÃO DE ISLABÃO, Genizia; COSTA DA SILVA PINTO, José Carlos; DOS SANTOS VIANNA JÚNIOR, Ardson. Technological trends in CFD applications. *Journal of technology management & innovation*, v. 5, n. 2, p. 76–83, 2010.

KADAVERUGU, Rakesh. Modeling of subsurface horizontal flow constructed wetlands using OpenFOAM®. *Modeling Earth Systems and Environment*, v. 2, n. 2, 1 jun. 2016.

KADLEC, Robert H. *et al.* *Constructed Wetlands for Pollution Control: processes, performance, design and operation*. London, UK: IWA Publishing, 2000.

KADLEC, Robert H.; WALLACE, Scott. *Treatment Wetlands*. 2nd. ed. Boca Raton-FL, USA: CRC Press, 2008.

KIVAIISI, A. K. The potencial for constructed wetlands for wastewater treatment and reuse in developeing countries: a review. *Ecological Engineering*, v. 16, p. 545–560, 2001.

KNOWLES, P. R.; GRIFFIN, P; DAVIES, P. A. Complementary methods to investigate the development of clogging within a horizontal subsurface flow tertiary treatment wetland. *Water Research*, v. 44, n. 1, p. 320–330, 2010.

KNOWLES, Paul *et al.* Clogging in subsurface-flow treatment wetlands: Occurrence and contributing factors. *Ecological Engineering*, v. 37, n. 2, p. 99–112, 2011. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857410002600>>.

KYAMBADDE, J. *et al.* A comparative study of *Cyperus papyrus* and *Miscanthidium violaceum* - based constructed wetlands for wastewater treatment in a tropical climate. *Water Resources*, v. 38, p. 475–485, 2004.

LANGERGRABER, G *et al.* Evaluation of substrate clogging processes in vertical flow constructed wetlands. *Water Science and Technology*, v. 48, n. 5, p. 25–34, 2003.

LANGERGRABER, G; HABERL, R. Constructed wetlands for water treatment. *Minerva Biotecnologica*, Cited By :21Export Date: 2 November 2019, v. 13, n. 2, p. 123–134, 2001. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0034933008&partnerID=40&md5=b78d08953c160c40425669d4df82d514>>.

LANGERGRABER, G; ŠIMŮNEK, J. Modeling variably saturated water flow and multicomponent reactive transport in constructed wetlands. *Vadose Zone Journal*, v. 4, n. 4, p. 924–938, 2005. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-33751333365&doi=10.2136%2Fvzj2004.0166&partnerID=40&md5=0cc785367c8980f9c2571549c1331bf4>>.

LANGERGRABER, Günter. Modeling of Processes in Subsurface Flow Constructed Wetlands: A Review. *Vadose Zone Journal*, 2008.

LEVENSPIEL, Octave. *Engenharia das reações químicas*. Editora Blucher, 2000.

LIU, Jiakai *et al.* Impacts of aquatic macrophytes configuration modes on water quality. *Water Science and Technology*, v. 69, n. 2, p. 253–261, jan. 2014. Disponível em: <<https://search.proquest.com/docview/1943675732?accountid=26629>>.

LU, J F; ZHANG, C W; JIAN, P. Meso-Structure Parameters of Discrete Element Method of Sand Pebble Surrounding Rock Particles in Different Dense Degrees BT - Proceedings of the 7th International Conference on Discrete Element Methods. 2017, Singapore: Springer Singapore, 2017. p. 871–879.

MACHADO, A I *et al.* Overview of the state of the art of constructed wetlands for decentralized wastewater management in Brazil. *Journal of Environmental Management*, v. 187, p. 560–570, 2017. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301479716308921>>.

MAIGA, Ynoussa; VON SPERLING, Marcos; MIHELICIC, James. Constructed Wetlands. In: HAAS, C; MIHELICIC, M.; HAAS, J. (Org.). . *GLOBAL WATER PATHOGEN PROJECT*. E. Lansing, MI: Michigan State University, UNESCO, 2017. .

MARTINEZ, C J; WISE, W R. Analysis of constructed treatment wetland hydraulics with the transient storage model OTIS. *Ecological Engineering*, v. 20, n. 3, p. 211–222, 2003. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0345447487&doi=10.1016%2FS0925-8574%2803%2900029-6&partnerID=40&md5=91d24be37f576be75a7de21e95aece35>>.

MAURER, L *et al.* Distribution and degradation trend of micropollutants in a surface flow treatment wetland revealed by 3D numerical modelling combined with LC-MS/MS. *Water Research*, v. 190, 2020. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135420312070?casa_token=oq3kkR3d-qcAAAA:smlnOgRuN6DpkoDYQsG3CR2-31mzJGAUHSY0tLjo3_xlu684jH2cjRIA0spEA7A4oIT8o8qp5A3w>. Acesso em: 12 mar. 2021.

METCALF, Eddy. Inc., wastewater engineering, treatment and reuse. *New York: McGraw-Hill*, 2003.

MEYER, Daniel *et al.* Modelling constructed wetlands: Scopes and aims – a comparative review. *Ecological Engineering*, v. 80, p. 205–213, 2015. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857414005679>>.

MIN, J.-H.; WISE, W R. Depth-averaged, spatially distributed flow dynamic and solute transport modelling of a large-scaled, subtropical constructed wetland. *Hydrological Processes*, v. 24, n. 19, p. 2724–2737, 2010.

Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-77956485389&doi=10.1002%2Fhyp.7686&partnerID=40&md5=51e2abb7e1cec12d00e2547cb1bda0dc>>.

MOLLE, P *et al.* How to treat raw sewage with constructed wetlands: an overview of the French systems. *Water Science and Technology*, v. 51, n. 9, p. 11–21, 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.2166/wst.2005.0277>>.

MORVANNOU, A *et al.* Characterizing hydraulic properties of filter material of a vertical flow constructed wetland. *Ecological Engineering*, v. 60, p. 325–335, 2013. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857413002668?casa_token=4_ZLCH3ORKIAAAAA:xO1BkLAbxbUeUiebvKvrwJeAdPs36bM6Jv7JNCSibLMMcLDdQme7MOQXSrhYqmx1q7IMbdd015dJ>. Acesso em: 15 mar. 2021.

MULAMOOTTIL, G.; MCBEAN, E. A.; ROVERS, F. *Constructed wetlands for the Treatment of landfill leachates*. Boca Raton-FL, USA: Lewis Publishers, 1999.

NASCIMENTO, Laís A. *et al.* Improved efficiency of constructed wetlands for oily water treatment with aid of microbubbles. *Chemical Engineering Transactions*, v. 57, p. 535–540, 2017. Disponível em: <https://www.engineeringvillage.com/share/document.url?mid=cpx_M7ed03feb15d2dc3110dM460610178163176&database=cpx&view=detailed>. Acesso em: 11 mar. 2021.

NEVES, Carlos Eduardo Veras. *Comportamento de materiais granulares usando o método dos elementos discretos*. 2009.

NIVALA, Jaime *et al.* Clogging in subsurface-flow treatment wetlands: measurement, modeling and management. *Water research*, v. 46, n. 6, p. 1625–1640, 2012.

OLHOEFT, Gary R; JOHNSON, Gordon R. Densities of rocks and minerals. *Practical handbook of physical properties of rocks and minerals*, v. 2, p. 1–38, 1989.

PAPAEVANGELOU, Vassiliki A; GIKAS, Georgios D; TSIHRINTZIS, Vassilios A. Chromium removal from wastewater using HSF and VF pilot-scale constructed wetlands: Overall performance, and fate and distribution of this element within the wetland environment. *Chemosphere*, v. 168, p. 716–730, 2017. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653516315363>>.

PAPAEVANGELOU, Vassiliki A; GIKAS, Georgios D; TSIHRINTZIS, Vassilios A. Evaluation of evapotranspiration in small on-site HSF constructed wetlands. *Journal of Environmental Science and Health, Part A*, v. 47, n. 5, p. 766–785, 2012.

PAUDEL, R *et al.* Effects of hydraulic resistance by vegetation on stage dynamics of a stormwater treatment wetland. *Journal of Hydrology*, v. 484, p. 74–85, 2013. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022169413000772?casa_token=4LFusxd9_nUAAAAA:72zWnDZE5PU_vDhnW1d8bjS3NadhNLJEFFTdSV1gbSXW3O9O4jXCsRkjKZmVm8hTLxd7BKSaDPIF>. Acesso em: 15 mar. 2021.

PAUDEL, R; JAWITZ, J W. Spatially distributed hydrodynamic modeling of phosphorus transport and transformation in a cell-network treatment wetland. *Journal of Hydrologic Engineering*, pp. 721-734, v. 22, n. 1, 2017. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85009386850&doi=10.1061%2F%28ASCE%29HE.1943-5584.0001403&partnerID=40&md5=8e83ccb121772752c04fde160b6e144f>>.

PEDESCOLL, A. *et al.* The effect of primary treatment and flow regime on clogging development in horizontal subsurface flow constructed wetlands: an experimental evaluation. *Water Resources*, v. 45, n. 12, p. 3579–3589, 2011.

PENG, Zhengbiao *et al.* Influence of void fraction calculation on fidelity of CFD-DEM simulation of gas-solid bubbling fluidized beds. *AIChE Journal*, v. 60, n. 6, p. 2000–2018, 2014.

PERSSON, J; SOMES, N L G; WONG, T H F. Hydraulics efficiency of constructed wetlands and ponds. *Water Science and Technology*, v. 40, n. 3, p. 291–300, 1999. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0273122399004485>>.

PHILIPPI, Luiz Sérgio; SEZERINO, Pablo Heleno. *Aplicação de sistemas tipo wetlands no tratamento de águas residuárias: utilização de filtros plantados com macrófitas*. Florianópolis, 2004.

PIELKE SR, Roger A. Mesoscale meteorological modeling, Vol. 98. *International Geophysics Series, Academic press, San Diego, CA*, 2013.

RADJAÏ, Farhang; DUBOIS, Frédéric. *Discrete-element modeling of granular materials*. Wiley-Iste, 2011.

RAJABZADEH, AR *et al.* Multiphysics modelling of flow dynamics, biofilm development and wastewater treatment in a subsurface vertical flow constructed wetland mesocosm. *Elsevier*, 2015. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857414005369?casa_token=QtIDeElkFY4AAAAA:Cr1JFO6acKK3P7BjIM0Nz7Wdk0FbPbTm5IHAGtGwHWiYTsQxJ0KqFhvpANeMTAGwGbtGwd-kM>. Acesso em: 11 mar. 2021.

RANIERI, Ezio; GORGOGNONE, Angela; SOLIMENO, Alessandro. A comparison between model and experimental hydraulic performances in a pilot-scale horizontal subsurface flow constructed wetland. *Ecological Engineering*, v. 60, p. 45–49, 2013. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857413002887>>.

REED, Sherwood C. Natural systems for waste management and treatment. *Wetland System*, 1995.

RENGERS, Emily Elizabeth *et al.* Hydraulic performance of a modified constructed wetland system through a CFD-based approach. *Journal of Hydro-Environment Research*, v. 12, p. 91–104, 1 set. 2016.

RENKER, M; ALBUQUERQUE, A. Evaluation of the influence of loading conditions on the simultaneous removal of organic matter and nitrogen in SSHF constructed wetlands. 2007, 2007. p. 1–12.

RICHARDS, L A. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, v. 1, n. 5, p. 318–333, 1931. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1745010>>.

RÍOS, D Ascuntar *et al.* Changes of flow patterns in a horizontal subsurface flow constructed wetland treating domestic wastewater in tropical regions. *Ecological Engineering*, v. 35, n. 2, p. 274–280, 2009.

ROACHE, Patrick J. Fundamentals of computational fluid dynamics(Book). *Albuquerque, NM: Hermosa Publishers*, 1998.

RODRIGUEZ-DOMINGUEZ, Marco A *et al.* Constructed Wetlands in Latin America and the Caribbean: A Review of Experiences during the Last Decade. *mdpi.com*, v. 12, n. 6, 2020. Disponível em: <www.scopus.com>. Acesso em: 12 mar. 2021.

SAMSÓ, Roger *et al.* Modelling bioclogging in variably saturated porous media and the interactions between surface/subsurface flows: Application to Constructed Wetlands. *Journal of Environmental Management*, v. 165, p. 271–279, 2016. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301479715302978>>.

SAMSÓ, Roger; GARCIA, Joan. BIO_PORE, a mathematical model to simulate biofilm growth and water

quality improvement in porous media: Application and calibration for constructed wetlands. *Ecological Engineering*, v. 54, p. 116–127, 2013. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857413000360>>.

SANCHES, Luiz Carlos Facundo; CARRION, Ronaldo; LIMA, Carlos Heracles M. O MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS EM PROBLEMAS DE FLUXO GRANULAR USANDO PROCESSAMENTO PARALELO. In: Simpósio de Mecânica Computacional, Vitória-ES, 2018. p. 1–13.

SANI, Abdulkadir *et al.* Impact of water quality parameters on the clogging of vertical-flow constructed wetlands treating urban wastewater. *Water, Air, and Soil Pollution*, v. 224, n. 3, 2013.

SANTAMARÍA, Jesús. *Ingeniería de reactores*. Síntesis Editorial, 347p., 1999.

SCHOLZ, Miklas; LEE, Byoung-hwa. Constructed wetlands: a review. *International Journal of Environmental Studies*, v. 62, n. 4, p. 421–447, 1 ago. 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00207230500119783>>.

SEZERINO, Pablo Heleno *et al.* Experiências brasileiras com wetlands construídos aplicados ao tratamento de águas residuárias: parâmetros de projeto para sistemas horizontais. *Engenharia Sanitária e Ambiental*, v. 20, n. 1, p. 151–158, 2015.

SEZERINO, Pablo Heleno *et al.* *Wetlands Construídos aplicados no tratamento de esgoto sanitário: Recomendações para implantação e boas práticas de operação e manutenção*. 1ª Edição ed. Tubarão-SC: Fundação Nacional de Saúde, 2018.

SHELEF, Oren; GROSS, Amit; RACHMILEVITCH, Shimon. *Role of Plants in a Constructed Wetland: Current and New Perspectives*. *Water*, 2013

SHIGETO, Yusuke; SAKAI, Mikio. Parallel computing of discrete element method on multi-core processors. *Particuology*, v. 9, n. 4, p. 398–405, 2011. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1674200111000903>>.

SHUTES, R B E. Artificial wetlands and water quality improvement. *Environment International*, v. 26, n. 5, p. 441–447, 2001. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0160412001000253>>.

SILVA, Edna Lúcia Da; MENEZES, Estera Muszkat. *Metodologia da pesquisa e elaboração de dissertação*. 2001.

SILVA, João Dos Santos Vila Da; ABDON, Myrian de Moura. Delimitação do Pantanal brasileiro e suas sub-regiões. *Pesquisa agropecuária brasileira*, v. 33, n. 13, p. 1703–1711, 1998.

SISTEMA NACIONAL DE INFORMAÇÃO SOBRE SANEAMENTO - SNIS. *Diagnóstico dos Serviços de Água e Esgoto - 2017*. Brasília-DF, 2019.

STEFANAKIS, Alexandros I *et al.* Effluent quality improvement of two pilot-scale, horizontal subsurface flow constructed wetlands using natural zeolite (clinoptilolite). *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 124, n. 1–3, p. 131–143, 2009.

STEFANAKIS, Alexandros I; AKRATOS, Christos S; TSIHRINTZIS, Vassilios A. Effect of wastewater step-feeding on removal efficiency of pilot-scale horizontal subsurface flow constructed wetlands. *Ecological Engineering*, v. 37, n. 3, p. 431–443, 2011. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857410003009>>.

STEFANAKIS, Alexandros I; TSIHRINTZIS, Vassilios A. Effect of outlet water level raising and effluent recirculation on removal efficiency of pilot-scale, horizontal subsurface flow constructed wetlands. *Desalination*, v. 248, n. 1–3, p. 961–976, 2009.

STEPHENSON, Ruth; SHERIDAN, Craig. Review of experimental procedures and modelling techniques for flow behaviour and their relation to residence time in constructed wetlands. *Journal of Water Process Engineering*, v. 41, p. 102044, 2021.

SUBTIL, Eduardo *et al.* *Manual de sistemas de Wetlands construídas para o tratamento de esgotos sanitário: implantação, operação e manutenção*, 2018.

SUBTIL, Eduardo; SANCHEZ, Aline; CAVALHERO, Amanda. Sistemas descentralizados de tratamento de esgoto e reúso de água, 2016. p. 201–220.

SULIMAN, F *et al.* Effect of the inlet–outlet positions on the hydraulic performance of horizontal subsurface-flow wetlands constructed with heterogeneous porous media. *Journal of contaminant hydrology*, v. 87, n. 1–2, p. 22–36, 2006.

SUNDARAVADIVEL, M; VIGNESWARAN, S. Constructed Wetlands for Wastewater Treatment. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, v. 31, n. 4, p. 351–409, 1 out. 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/20016491089253>>.

TANNER, Chris C; SUKIAS, James P. Accumulation of organic solids in gravel-bed constructed wetlands. *Water Science and Technology*, v. 32, n. 3, p. 229–239, 1995.

TONG, Kai *et al.* Review of modeling and simulation strategies for unstructured packing bed photoreactors with CFD method. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 131, p. 109986, 2020. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S136403212030277X>>.

TU, Jiyuan; YEOH, Guan Heng; LIU, Chaoqun. *Computational fluid dynamics: a practical approach*. Butterworth-Heinemann, 2018b.

UNICEF. *Progress on household drinking water, sanitation and hygiene 2000-2017: Special focus on inequalities*. . New York, 2019.

USEPA. *Constructed wetlands: treatment of municipal wastewaters*, 2000.

VERSTEEG, Henk Kaarle; MALALASEKERA, Weeratunge. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson education, 2007.

VON SPERLING, Marcos. *Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos*. Editora UFMG, 1996. v. 1.

VON SPERLING, Marcos; SEZERINO, Pablo Heleno. *Dimensionamento de Wetlands Construídos no Brasil: Documento de consenso entre os pesquisadores e praticantes*. Edição Esp Boletim Wetlands Brasil, 2018.

VYMAZAL, Jan. Does clogging affect long-term removal of organics and suspended solids in gravel-based horizontal subsurface flow constructed wetlands? *Chemical Engineering Journal*, v. 331, p. 663–674, 2018. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1385894717315012>>.

VYMAZAL, Jan. Plants in constructed, restored and created wetlands. *Ecological Engineering*, v. 61, p. 501–504, 2013a. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S092585741300459X>>.

VYMAZAL, Jan. Removal of Nutrients in Various Types of Constructed Wetlands. *The Science of the total environment*, v. 380, p. 48–65, 1 ago. 2007.

VYMAZAL, Jan. The use of hybrid constructed wetlands for wastewater treatment with special attention to nitrogen removal: A review of a recent development. *Water research*, v. 47, 14 jun. 2013b.

WALLACE, Scott D; KNIGHT, Robert Lee. *Small-scale constructed wetland treatment systems: feasibility, design criteria and O & M requirements*. IWA Publishing, 2006.

WANG, Jun *et al.* Numerical analysis of the performance of horizontal and wavy subsurface flow constructed wetlands. *Journal of Hydrodynamics*, v. 23, n. 3, p. 339–347, jun. 2011.

WANG, Rongzhen *et al.* Simulation and optimization of hydraulic performance of small baffled subsurface flow constructed wetland. *Water Science and Technology*, v. 84, n. 3, p. 632–643, 2021. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.2166/wst.2021.249>>.

WANG, Yuhui *et al.* Impacts of inlet–outlet configuration, flow rate and filter size on hydraulic behavior of quasi-2-dimensional horizontal constructed wetland: NaCl and dye tracer test. *Ecological Engineering*, v. 69, p. 177–185, 2014. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857414001311>>.

WILKS, Daniel S. *Statistical methods in the atmospheric sciences*. [S.l.]: Academic press, 2011. v. 100.

WILLMOTT, Cort J. Some comments on the evaluation of model performance. *Bulletin of the American Meteorological Society*, v. 63, n. 11, p. 1309–1313, 1982.

YANG, Mengyao *et al.* Effects of clogging on hydraulic behavior in a vertical-flow constructed wetland system: A modelling approach. *Ecological Engineering*, v. 109, p. 41–47, 1 dez. 2017. Disponível em: <https://www.engineeringvillage.com/share/document.url?mid=cpx_27d03c7b15eb9a42c6dM546510178163176&database=cpx&view=detailed>. Acesso em: 11 mar. 2021.

YANG, Q. *et al.* Contaminant removal of domestic wastewater by constructed wetlands: effects of plants species. *Integrated Plant Biologic*, v. 49, n. 4, p. 437–446, 2007.

YUAN, Chunbo *et al.* Numerical Models of Subsurface Flow Constructed Wetlands: Review and Future Development. *Sustainability*, v. 12, n. 8, p. 3498, 24 abr. 2020. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2071-1050/12/8/3498>>. Acesso em: 13 jul. 2020.

ZAHRAEIFARD, Vahid; DENG, Zhiqiang. Hydraulic residence time computation for constructed wetland design. *Ecological Engineering*, v. 37, n. 12, p. 2087–2091, 2011. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-80054107621&doi=10.1016%2Fj.ecoleng.2011.08.011&partnerID=40&md5=26080821165339d492cfd580899fe97a>>.

ZHAO, Jidong; SHAN, Tong. Coupled CFD–DEM simulation of fluid–particle interaction in geomechanics. *Powder technology*, v. 239, p. 248–258, 2013.