

# Modelagem em CFD da injeção de gás ozônio em um silo cilíndrico vertical contendo grãos de arroz

11 *Marcus Vinícius de Assis Silva<sup>1</sup>, Leda Rita D'Antonino Faroni<sup>1</sup>, Márcio Aredes Martins<sup>1</sup>, Adalberto Hipólito de Souza<sup>2</sup>, Daniel Jaime Vanegas<sup>1</sup>*

---

## RESUMO

O gás ozônio ( $O_3$ ) destaca-se como uma alternativa para implementação no manejo integrado de pragas de produtos armazenados. O objetivo deste estudo foi simular a injeção de gás ozônio nas concentrações 0,1; 0,2 e 0,3 mg L<sup>-1</sup> num fluxo de aeração, e determinar o tempo necessário para tratar uma massa de 76 t de grãos de arroz em concentração letal para *Sitophilus zeamais* Mots. Os resultados da simulação mostram que na concentração de 0,3 mg L<sup>-1</sup> é possível tratar 76 toneladas de grãos em um período de 9 dias.

**Palavras-chave:** Mecânica dos Fluidos Computacional; *Oryza sativa*; Armazenamento de grãos

## INTRODUÇÃO

O gás ozônio ( $O_3$ ) se apresenta como uma alternativa à fumigação com fosfina ( $PH_3$ ) para controle de insetos-praga de grãos armazenados. O gás  $O_3$  a forma triatômica do oxigênio ( $O_2$ ), além de ser um poderoso agente oxidante e possuir capacidade de desinfecção e esterilização, foi classificado pela Food and Drug Administration, em 2001, nos Estados Unidos como sanitizante seguro para a utilização em alimentos, já que o seu produto de degradação ( $O_2$ ) não é tóxico (Gabler et al., 2010).

---

<sup>1</sup>Universidade Federal de Viçosa - Avenida Peter Henry Rolfs, s/n - Campus Universitário, Viçosa - MG, 36570-900

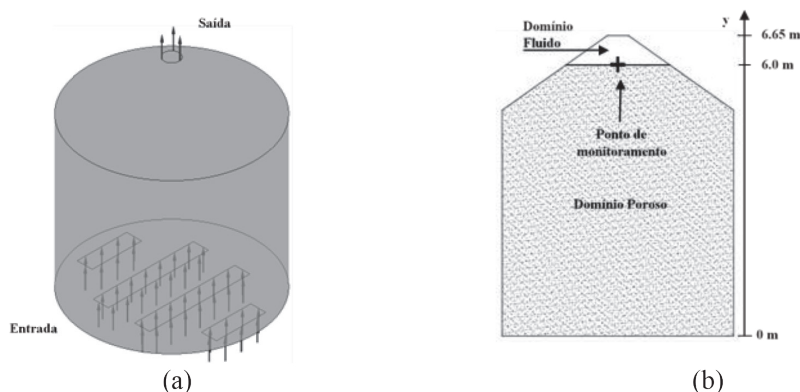
<sup>2</sup>Universidade Federal do Acre - Rodovia BR 364, Km 04 - Distrito Industrial, Rio Branco - AC, 69920-900

O gás ozônio tem se mostrado como um fumigante alternativo, eficiente no controle de insetos-praga dos grãos (Hardin et al., 2010; Isikber et al., 2015; Sousa et al., 2016). O entendimento da distribuição deste gás na massa de grãos é fundamental para a otimização de seu uso, principalmente para grandes volumes de grãos. Em virtude do alto custo de testes experimentais em escala comercial, o uso da técnica de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) é uma alternativa. O CFD tem se mostrado uma técnica muito eficiente para o estudo de escoamento fluido em meios porosos com reação (Bhattarai et al., 2015; Isa et al., 2016).

Para a um período de exposição de 18 horas na concentração de  $0,1 \text{ mg L}^{-1}$  Sousa et al., 2016 verificaram que o gás ozônio é letal para *Sitophilus zeamais*. A partir da concentração letal de  $0,1 \text{ mg L}^{-1}$ , o objetivo deste trabalho foi ajustar um modelo em CFD para explicar a dinâmica do escoamento do gás ozônio nas concentrações de 0,1; 0,2 e  $0,3 \text{ mg L}^{-1}$  num fluxo de aeração ( $0,5 \text{ m}^3 \text{ min}^{-1} \text{ t}^{-1}$ ), e determinar o tempo necessário para tratar uma massa de 76 t de grãos de arroz em concentração letal para insetos de *S. zeamais*

## MATERIAL E MÉTODOS

O escoamento do gás ozônio sobre a massa de grãos de arroz foi modelado em CFD usando o software ANSYS CFX V11.0. A Figura 1 mostra a geometria do silo considerada neste estudo. Os parâmetros utilizados na modelagem em CFD estão apresentados na Tabela 1.



**FIGURA 1.** Domínio computacional do silo com capacidade estáticas para 76 toneladas de arroz (a) e representação do meio poroso (b)

**TABELA 1.** Parâmetros utilizados na modelagem em CFD do escoamento do gás ozônio em um silo cilíndrico vertical contendo grãos de arroz.

Parâmetros	Valor	Referência
$A_{\text{Entrada/silo}}$	5 (m <sup>2</sup> )	
$A_{\text{Saída/silo}}$	0,2 (m <sup>2</sup> )	
$A_s$	1132 (m <sup>-1</sup> )	(Brooker et al., 1992)
$V_{\text{Silo}}$	133 (m <sup>3</sup> )	
$\bar{D}_p$	0,0042 (m)	(Brooker et al., 1992)
$D_s$	0,01 (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	(Silva et al., 2018a No prelo)
$D_g$	0,25 (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	(Ouyang et al., 1995)
$k_1$	0,00167 (s <sup>-1</sup> )	(Silva et al., 2018a No prelo)
$k_2$	0,45 (s <sup>-1</sup> )	(Silva et al., 2018b)
$h_m$	0,5 (m s <sup>-1</sup> )	(Silva et al., 2018b)
	0,12 (m s <sup>-1</sup> )	
R	1952 (Pa s m <sup>-2</sup> )	(Hunter, 1983)
S	10.419 (Pa s <sup>2</sup> m <sup>-3</sup> )	
$\varepsilon_g$	0,59	(Varnamkhasti et al., 2008)
$\mu_g$	1,87 X 10 <sup>-5</sup> (kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ) (ar)	(Bergman et al. 2011)

A disposição e dimensionamento dos dutos de aeração do silo foi feita de acordo com o padrão usual empregado (Weber et al., 2005). Para o domínio computacional representado pela Figura 1a foram geradas malhas computacionais, que após testes de convergência espacial e temporal foi escolhida uma malha de 29.971 nós e um intervalo de tempo de 12 h.

Na modelagem do escoamento do O<sub>3</sub>, foi considerada a teoria da mistura na qual o meio poroso é tratado como um meio contínuo. Entretanto para a transferência de massa, o transporte das espécies químicas foi considerado como uma condição de não equilíbrio para as fases sólida e gasosa. O gás presente no espaço intergranular foi

considerado como uma mistura ideal (ar + O<sub>3</sub>). O escoamento foi considerado como laminar, incompressível, isotérmico (25° C) e em regime transiente. O escoamento foi considerado laminar em razão do baixo número de Reynolds (Re) (Lesage et al., 2004).

As equações governantes do escoamento se resumem nas equações de Navier-Stokes (Eq. 1 e 2), a equação de transporte do gás O<sub>3</sub> na fase gasosa (Eq. 3) e na fase sólida (Eq. 5). Para o domínio fluido a porosidade ( $\varepsilon_g$ ) (é igual a 1).

$$\varepsilon_g \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g v) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g v) + \frac{1}{\varepsilon_g} \nabla \cdot (\rho_g v v) = -\varepsilon_g \nabla P_g + \mu_g \nabla^2 v + \rho_g \vec{g} + \varepsilon_g F \quad (2)$$

$$\varepsilon_g \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \omega_{O_3}^g) + \nabla \cdot (\rho_g \omega_{O_3}^g v) = \varepsilon_g \nabla \cdot (\rho_g D_g \nabla \omega_{O_3}^g) - k_1 \varepsilon_g \rho_g \omega_{O_3}^g - h_m A_s (\rho_g \omega_{O_3}^g) \quad (3)$$

$$(1 - \varepsilon_g) \frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \omega_{O_3}^s) = (1 - \varepsilon_g) \nabla \cdot (\rho_s D_s \nabla \omega_{O_3}^s) - h_m A_s (\rho_s \omega_{O_3}^s) - k_2 (1 - \varepsilon_g) \rho_s \omega_{O_3}^s \quad (4)$$

em que  $\varepsilon_g$  corresponde a fração volumétrica do gás;  $(1 - \varepsilon_g)$  corresponde a fração volumétrica da matriz sólida, ou seja, os grãos que constituem o meio poroso;  $t$  (s) é o tempo;  $\rho_g$  ( $kg\ m^{-3}$ ) é a densidade do gás;  $\rho_s$  ( $585\ kg\ m^{-3}$ ) é a densidade da matriz sólida;  $\mu$  ( $Pa\ s^{-1}$ ) é a viscosidade dinâmica do fluido;  $g$  ( $m\ s^{-2}$ ) é a aceleração gravitacional;  $v$  ( $m\ s^{-1}$ ) é a velocidade do gás;  $\omega_{O_3}^g$  é a fração em massa do ozônio no ar intergranular;  $\omega_{O_3}^s$  é a fração em massa do ozônio na matriz sólida;  $F$  ( $N\ m^{-3}$ ) representa as forças resistivas (viscosas e arrasto) resultantes da interação entre as fases sólida e fluida na matriz porosa;  $D_s$  ( $cm^2\ s^{-1}$ ) é a difusividade do gás ozônio através da matriz sólida do meio poroso;  $D_g$  ( $cm^2\ s^{-1}$ ) é a difusividade do gás ozônio no domínio fluido e no espaço intergranular;  $k_1$  ( $s^{-1}$ ) é a constante de decomposição do ozônio no espaço intergranular;  $k_2$  ( $s^{-1}$ ) é a constante de reação do gás ozônio devido sua interação com os grãos de arroz;  $A_s$  ( $m^{-1}$ ) é a área superficial específica para o meio poroso constituído de grãos de arroz em casca e  $h_m$  ( $m\ s^{-1}$ ) o coeficiente de transferência de massa.

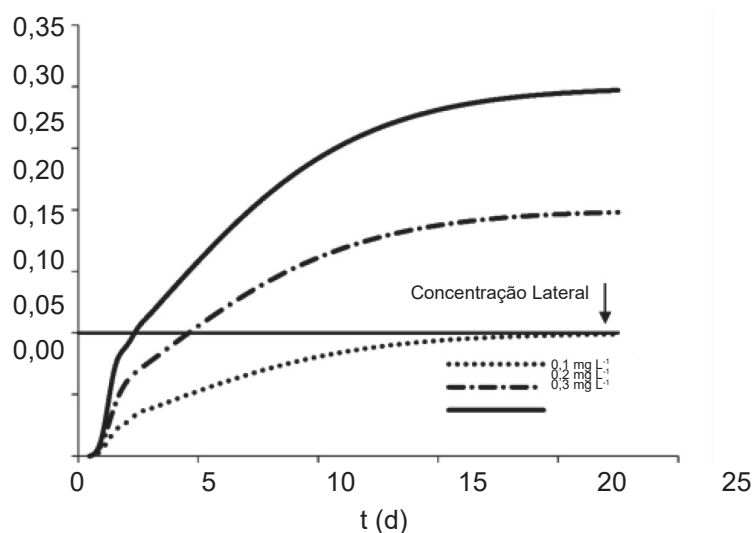
A queda de pressão no escoamento do gás causada pela resistência imposta pelo meio poroso está definida pela Equação 7, proposta por Hunter (1983):

$$\Delta P_g = Rv + Sv^2 \quad (7)$$

em que:  $R$  é o coeficiente linear de resistência ( $Pa\ s\ m^{-2}$ ) e  $S$  o coeficiente quadrático de resistência ( $Pa\ s^2\ m^{-3}$ ). Os valores de  $R$  e  $S$  para grãos de arroz em casca estão apresentados na Tabela 1.

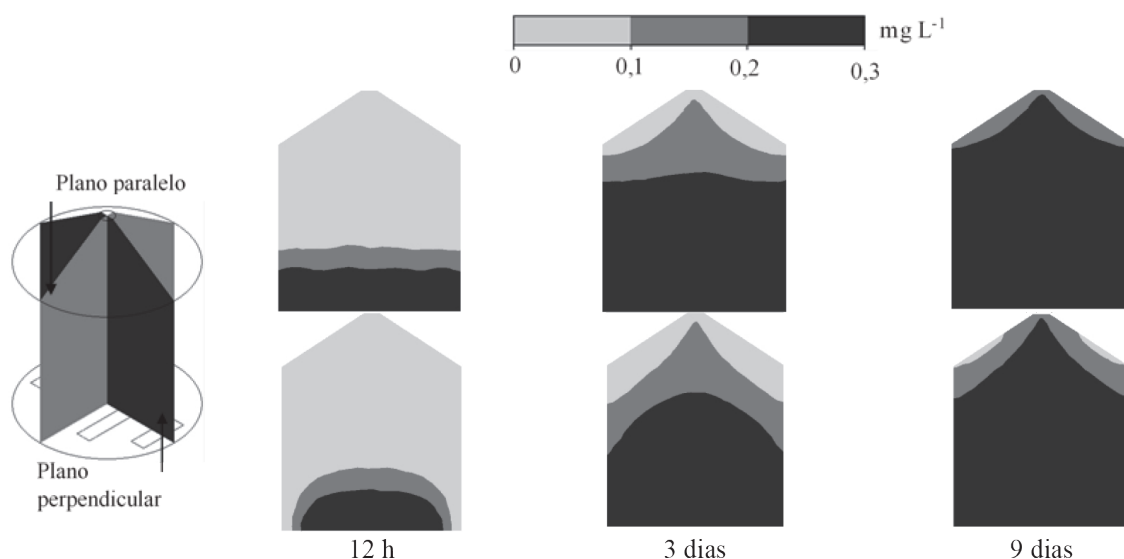
## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Apresenta-se na Figura 2 os dados simulados de concentração de ozônio ao longo do tempo, obtidos no ponto de monitoramento (Figura 1), localizado imediatamente acima da massa grãos. Observa-se que, ao estabelecer como condição de contorno as concentrações de 0,1; 0,2 e 0,3 mg L<sup>-1</sup>, a concentração de gás ozônio no ponto de monitoramento atinge o valor da concentração letal (0,1 mg L<sup>-1</sup>) em menor tempo para maiores concentrações. Ao estabelecer a concentração de 0,3 mg L<sup>-1</sup>, na entrada do silo, o valor da concentração do ozônio no ponto de monitoramento atinge 0,1 mg L<sup>-1</sup> com 2,5 dias. Mendez et al. (2003) verificaram que adesividade do arroz cozido não foi alterada após um tratamento de 30 dias com os grãos submetidos a concentração de 0,1 mg L<sup>-1</sup>. Isso reforça o potencial do ozônio como agente protetor de grãos e justifica estudos com o objetivo de viabilizar a aplicação do ozônio em escala industrial.



**FIGURA 2.** Concentração de ozônio, no ponto de monitoramento, ao longo do tempo para um silo vertical.

Observa-se na Figura 3 que a distribuição do gás ozônio não é uniforme e apresenta uma tendência de incremento da concentração na parte central do silo em razão dos maiores dutos de aeração se encontrarem dispostos no centro (Figura 1a). Para garantir que toda massa de grãos atinja a concentração letal de 0,1 mg L<sup>-1</sup>, foi calculado o tempo necessário para que a concentração de 0,1 mg L<sup>-1</sup> fosse estabelecida em todos os pontos da superfície da massa de grãos. Para uma concentração de 0,3 mg L<sup>-1</sup> e vazão específica de 0,5 m<sup>3</sup> min<sup>-1</sup> t<sup>-1</sup> é possível realizar o tratamento de toda a massa de grãos em 9 dias (Figura 3).



**FIGURA 3.** Perfil da concentração de gás ozônio nos planos perpendicular e paralelo aos dutos de aeração, para 12 h, 3 e 9 dias de tratamento para o silo de 76 toneladas de arroz.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BERGMAN, Theodore L. et al. **Fundamentals of heat and mass transfer**. John Wiley & Sons, 2011.

BHATTARAI, Sujala et al. Simulation of the ozone pretreatment of wheat straw. **Bioresource technology**, v. 196, p. 78-87, 2015.

BROOKER, Donald B.; BAKKER-ARKEMA, Fred W.; HALL, Carl W. **Drying and storage of grains and oilseeds**. Springer Science & Business Media, 1992. Cap. 2, pp. 25.

GABLER, Franka Mlikota et al. Influence of fumigation with high concentrations of ozone gas on postharvest gray mold and fungicide residues on table grapes. **Postharvest Biology and Technology**, v. 55, n. 2, p. 85-90, 2010.

HARDIN, James.A. et al. Ozone fumigation of stored grain; closed-loop recirculation and the rate of ozone consumption. **Journal of stored products research**, v.46, p.149-154, 2010.

HUNTER, A. J. Pressure difference across an aerated seed bulk for some common duct and store cross-sections. **Journal of Agricultural Engineering Research**, v. 28, n. 5, p. 437-450, 1983.

ISA, Z. M. et al. Mathematical modelling and numerical simulation of phosphine flow during grain fumigation in leaky cylindrical silos. **Journal of Stored Products Research**, v. 67, p. 28-40, 2016.

ISIKBER, Ali A.; ATHANASSIOU, Christos G. The use of ozone gas for the control of insects and micro-organisms in stored products. **Journal of stored products research**, v. 64, p. 139-145, 2015.

LESAGE, F.; MIDOUX, N.; LATIFI, M. A. New local measurements of hydrodynamics in porous media. **Experiments in fluids**, v. 37, n. 2, p. 257-262, 2004.

MENDEZ, F. et al. Penetration of ozone into columns of stored grains and effects on chemical composition and processing performance. **Journal of Stored Products Research**, v. 39, n. 1, p. 33-44, 2003.

OUYANG, S.; LI, X. G.; POTTER, O. E. Circulating fluidized bed as a catalytic reactor: experimental study. **AIChE Journal**, v. 41, n. 6, p. 1534-1542, 1995.

SILVA, M. V. A. et al. CFD modelling of diffusive-reactive transport of ozone gas in rice grains. **Biosystems Engineering**. 2018a.No prelo.

SILVA, M. V. A. et al. Modelagem em CFD do escoamento do gás ozônio em grãos de arroz. 2018b. Dissertação (Mestrado em Engenharia Agrícola) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa.

SOUSA, A. H. et al. Ozone toxicity to *Sitophilus zeamais* (Coleoptera: Curculionidae) populations under selection pressure from ozone. **Journal of Stored Products Research**, v. 65, p. 1-5, 2016.

VARNAMKHAISTI, M. Ghasemi et al. Some physical properties of rough rice (*Oryza Sativa* L.) grain. **Journal of Cereal Science**, v. 47, n. 3, p. 496-501, 2008.

WEBER, Érico Aquino. **Exelência em beneficiamento e armazenagem de grãos**. Salles, 2005.