

**UNIVERSIDADE DE CAXIAS DO SUL**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE**  
**PROCESSOS E TECNOLOGIAS**

**ANÁLISE FLUIDODINÂMICA DE BIORREATOR DESTINADO À**  
**PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO UTILIZANDO CFD**

**Guilherme Zanella Maurina**

Caxias do Sul, 2014

**Guilherme Zanella Maurina**

**ANÁLISE FLUIDODINÂMICA DE BIORREATOR DESTINADO À  
PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO UTILIZANDO CFD**

Dissertação apresentada no Programa de Pós Graduação em Engenharia de Processos e Tecnologias da Universidade de Caxias do Sul, visando à obtenção de grau de mestre em Engenharia de Processos e Tecnologias, orientado por Prof. Dr. Lademir Luiz Beal e coorientado por Profa. Dra. Camila Baldasso.

Caxias do Sul, 2014

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
Universidade de Caxias do Sul  
UCS - BICE - Processamento Técnico

M455a Maurina, Guilherme Zanella, 1987-  
Análise fluidodinâmica de biorreator destinado á produção de hidrogênio  
utilizando CFD / Guilherme Zanella Maurina. - 2014.  
81 f. : il. ; 30 cm

Apresenta bibliografia.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de Caxias do Sul, Programa de  
Pós-Graduação em Engenharia de Processos e Tecnologias, 2014.

Orientador: Prof. Dr. Lademir Luiz Beal ; coorientador : Profa. Dra.  
Camila Baldasso

1. Fluidodinâmica computacional. 2. Biorreatores. 3. Hidrogênio.  
I.Título.

CDU 2.ed.: 531.3:004

Índice para o catálogo sistemático:

1. Fluidodinâmica computacional	531.3:004
2. Biorreatores	621.318.43
3. Hidrogênio	546.11

Catalogação na fonte elaborada pela bibliotecária  
Carolina Machado Quadros – CRB 10/2236.

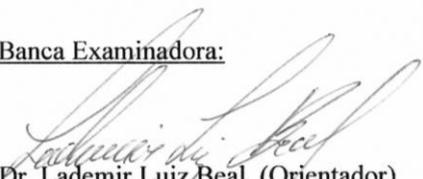
**“ANÁLISE FLUIDODINÂMICA DE BIORREATOR DESTINADO À PRODUÇÃO DE  
HIDROGÊNIO UTILIZANDO CFD.”**

**Guilherme Zanella Maurina**

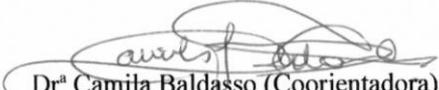
Dissertação de Mestrado submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos e Tecnologias da Universidade de Caxias do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Engenharia de Processos e Tecnologias, Área de Concentração: Desenvolvimento de Processos e Produtos Industriais.

Caxias do Sul, 22 de Agosto de 2014.

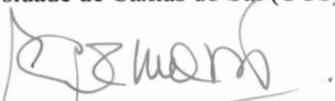
Banca Examinadora:



Dr. Lademir Luiz Beal (Orientador)  
Universidade de Caxias do Sul (UCS)



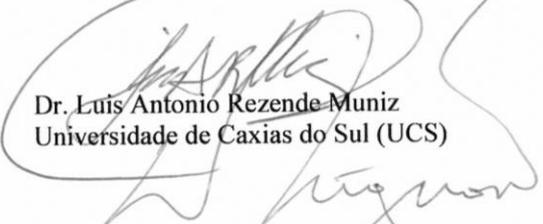
Dr<sup>a</sup> Camila Baldasso (Coorientadora)  
Universidade de Caxias do Sul (UCS)



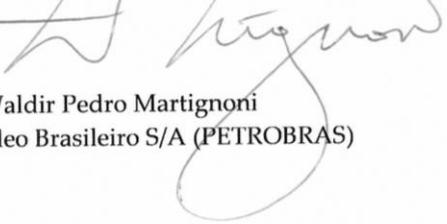
Dra. Edith Beatriz Camano Schettini  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)



Dr. Luiz Olinto Monteggia  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)



Dr. Luis Antonio Rezende Muniz  
Universidade de Caxias do Sul (UCS)



Dr. Waldir Pedro Martignoni  
Petróleo Brasileiro S/A (PETROBRAS)

## **AGRADECIMENTOS**

Gostaria de agradecer inicialmente ao professor Dr. Lademir Luiz Beal que considero um excelente professor e orientador e, acima de tudo, um amigo, sempre auxiliando na resolução das incontáveis dúvidas que surgiram durante a realização deste trabalho. Agradeço também a professora Dra. Camila Baldasso que sempre se mostrou disposta a me auxiliar quando tive dúvidas, principalmente no início desta pesquisa.

Aos colegas do Laboratório de Tecnologias Ambientais (LATAM), em especial ao Dr. Leonardo Machado da Rosa, pelo conhecimento repassado e pelas inúmeras horas dispendidas neste trabalho, sempre trazendo sugestões e ideias fundamentais para o êxito desta pesquisa.

A minha mãe e a meu pai que sempre me incentivaram a alcançar caminhos cada vez mais distantes. A minha irmã que de forma carinhosa sempre me apoiou no decorrer deste mestrado.

À empresa Petrobras e à Universidade de Caxias do Sul, pela parceria firmada que possibilitou a realização desta pesquisa.

Finalmente, gostaria de agradecer a todos que eu não tenha citado nesta lista de agradecimentos, mas que de uma forma ou de outra contribuíram não apenas para a minha dissertação, mas também para eu ser quem eu sou.

## SUMÁRIO

<b>NOMENCLATURA.....</b>	<b>11</b>
<b>1 INTRODUÇÃO.....</b>	<b>15</b>
1.1 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO .....	16
<b>2 OBJETIVOS.....</b>	<b>17</b>
2.1 OBJETIVO GERAL .....	17
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....	17
<b>3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....</b>	<b>18</b>
3.1 BIORREATORES PARA PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO.....	18
3.2 EFEITO DOS PARÂMETROS GEOMÉTRICOS E OPERACIONAIS NA MISTURA.....	20
3.3 CARACTERÍSTICAS DOS REGIMES DE ESCOAMENTO .....	21
3.4 ABORDAGEM FENOMENOLÓGICA.....	23
3.5 FORÇAS INTERFACIAIS .....	24
3.6 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL – CFD .....	25
<b>4 SIMULAÇÕES.....</b>	<b>27</b>
4.1 MODELAGEM MATEMÁTICA.....	27
4.1.1 Equações de Transporte .....	27
4.1.2 Transferência de quantidade de movimento interfacial.....	28
4.1.3 Modelo de turbulência.....	33
4.1.4 Avaliação da tensão de cisalhamento.....	34
4.1.5 Cálculo da vazão de recirculação .....	34
4.1.6 Determinação de campos médios de energia cinética turbulenta.....	34
4.2 MÉTODOS NUMÉRICOS .....	35
4.3 CONSTRUÇÃO DA GEOMETRIA .....	37
4.4 MALHA NUMÉRICA.....	38
4.5 CONDIÇÕES UTILIZADAS NAS SIMULAÇÕES.....	39

<b>5 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....</b>	<b>41</b>
5.1 TESTES PRELIMINARES.....	41
5.2 AVALIAÇÃO DA DIREÇÃO DE RECIRCULAÇÃO .....	44
5.3 AVALIAÇÃO DA VAZÃO DE RECIRCULAÇÃO .....	49
5.4 AVALIAÇÃO DAS FORÇAS INTERFACIAIS .....	52
5.5 AVALIAÇÃO DE DIFERENTES DISTRIBUIDORES .....	67
<b>6 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES .....</b>	<b>74</b>
6.1 CONCLUSÕES PRINCIPAIS .....	74
6.2 SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS .....	76
6.3 PRODUÇÃO CIENTÍFICA.....	76
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>78</b>

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 1.</b> Coeficientes do modelo k-epsilon modificado. ....	34
<b>Tabela 2.</b> Condições de contorno e propriedades físicas empregadas nas simulações numéricas. ....	40
<b>Tabela 3.</b> Campos médios de energia cinética turbulenta para diferentes correlações de arraste. ....	56
<b>Tabela 4.</b> Campos médios de energia cinética turbulenta para diferentes correlações de sustentação. ....	59
<b>Tabela 5.</b> Campos médios de energia cinética turbulenta para diferentes forças interfaciais. ....	62
<b>Tabela 6.</b> Campos médios de energia cinética turbulenta para diferentes forças interfaciais e uma entrada. ....	66
<b>Tabela 7.</b> Características das configurações de alimentação utilizadas nos Casos A, B, C, D e E. ....	69

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 1.</b> Configuração de um reator contínuo de mistura completa (adaptado de Ding <i>et al.</i> , 2010).	19
<b>Figura 2.</b> Configuração de um reator anaeróbio sequencial em batelada (adaptado de Xu, 2010).	19
<b>Figura 3.</b> Tipos de regimes de escoamento gás-líquido em colunas verticais: (A) homogêneo; (B) heterogêneo e (C) <i>slug</i> (adaptado de Kantarci <i>et al.</i> , 2005).	21
<b>Figura 4.</b> Relação entre o formato das bolhas e os grupos adimensionais Eötvös, Reynolds e Morton (adaptado de Clift <i>et al.</i> , 1978).	22
<b>Figura 5.</b> Diagrama esquemático do biorreator com recirculação descendente.	38
<b>Figura 6.</b> Malha utilizada na simulação contendo 130.000 volumes de controle: (A) seção superior do reator; (B) seção inferior e (C) corte transversal.	39
<b>Figura 7.</b> Perda de carga em função do número de volumes de controle da malha numérica.	42
<b>Figura 8.</b> Perfil da velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada $X$ em 2 m de altura.	42
<b>Figura 9.</b> Diagrama esquemático do biorreator com recirculação ascendente.	45
<b>Figura 10.</b> Fase líquida com recirculação descendente e vazão de $0,0015 \text{ m}^3/\text{s}$ : (A) velocidade média de mistura; (B) campo vetorial e (C) energia cinética turbulenta.	46
<b>Figura 11.</b> Fase líquida com recirculação ascendente e vazão de $0,0015 \text{ m}^3/\text{s}$ : (A) velocidade média de mistura; (B) campo vetorial e (C) energia cinética turbulenta.	47
<b>Figura 12.</b> Tensão de cisalhamento máxima para (A) regime descendente e (B) regime ascendente.	48
<b>Figura 13.</b> Fase líquida com recirculação ascendente e vazão de $0,00225 \text{ m}^3/\text{s}$ : (A) velocidade média de mistura; (B) campo vetorial e (C) energia cinética turbulenta.	49
<b>Figura 14.</b> Fase líquida com recirculação ascendente e vazão de $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$ : (A) velocidade média de mistura; (B) campo vetorial e (C) energia cinética turbulenta.	50
<b>Figura 15.</b> Tensão de cisalhamento máxima em função da coordenada $X$ em 2 m de altura.	51
<b>Figura 16.</b> Tensão de cisalhamento máxima na tubulação de entrada: (A) vazão de $0,0015 \text{ m}^3/\text{s}$ ; (B) vazão de $0,00225 \text{ m}^3/\text{s}$ e (C) vazão de $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$ .	51
<b>Figura 17.</b> Tensão de cisalhamento máxima na tubulação de entrada com vazão igual a $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$ : (A) 0,048 m; (B) 0,060 m; e (C) 0,080 m.	52
<b>Figura 18.</b> Diagrama esquemático do biorreator com duas saídas.	54

<b>Figura 19.</b> Perfil da velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada $X$ para diferentes correlações de arraste: (A) 0,7 m; (B) 2 m e (C) 3 m.....	55
<b>Figura 20.</b> Desvios nos campos de energia cinética turbulenta para diferentes correlações de arraste.	57
<b>Figura 21.</b> Perfil da velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada $X$ para diferentes correlações de sustentação: (A) 0,7 m; (B) 2 m e (C) 3 m. ....	58
<b>Figura 22.</b> Desvios nos campos de energia cinética turbulenta para diferentes correlações de sustentação. ....	60
<b>Figura 23.</b> Perfil da velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada $X$ para diferentes forças interfaciais: (A) 0,7 m; (B) 2 m e (C) 3 m. ....	61
<b>Figura 24.</b> Desvios nos campos de energia cinética turbulenta para diferentes forças interfaciais.....	62
<b>Figura 25.</b> Perfil da velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada $X$ para diferentes forças interfaciais e uma entrada: (A) 0,7 m; (B) 2 m e (C) 3 m.....	64
<b>Figura 26.</b> Campos de fração volumétrica média da fase gás para diferentes forças e uma entrada: (A) arraste; (B) arraste e sustentação; (C) arraste e massa virtual e (D) arraste, sustentação e massa virtual. ....	65
<b>Figura 27.</b> Desvios nos campos de energia cinética turbulenta para diferentes forças interfaciais e uma entrada.....	67
<b>Figura 28.</b> Vista esquemática do biorreator e das diferentes configurações de alimentação utilizadas nos Casos A, B, C, D e E. ....	68
<b>Figura 29.</b> Velocidade axial média da fase líquida obtida nos Casos A, B, C, D e E. ....	70
<b>Figura 30.</b> Campos vetoriais obtidos para a fase líquida junto às regiões de entrada para os Casos A, B, C, D e E. ....	71
<b>Figura 31.</b> Energia cinética turbulenta média da fase líquida obtida nos Casos A, B, C, D e E. ....	72
<b>Figura 32.</b> Valores calculados para a média ponderada da energia cinética turbulenta nos Casos A, B, C, D e E.....	73

## NOMENCLATURA

### *Letras Latinas*

A	área	$m^2$
$C_\mu, C_1, C_2$	constantes do modelo de turbulência $k-\varepsilon$	0,09; 1,44; 1,92
$C_D$	coeficiente da força de arraste	(-)
$C_L$	coeficiente da força de sustentação	(-)
$C_{VM}$	coeficiente da força de massa virtual	(-)
D	diâmetro do reator	m
$d_g$	diâmetro da bolha	m
$d_H$	máxima dimensão horizontal da bolha	m
Eo	número de Eötvös	(-)
g	aceleração da gravidade	$m.s^{-2}$
I	tensor unitário	(-)
k	energia cinética turbulenta	$m^2.s^{-2}$
M	transferência de quantidade de movimento entre as fases	$N.m^{-3}$
$M_D$	força de arraste	$N.m^{-3}$
$M_L$	força de sustentação	$N.m^{-3}$
$M_{VM}$	força de massa virtual	$N.m^{-3}$
p	pressão	Pa
$P_k$	produção de energia cinética turbulenta	$Pa.s^{-1}$
R	tensor relacionado às forças viscosas	$m.s^{-1}$
Re	número de Reynolds	(-)
Sr	taxa de cisalhamento adimensional	(-)
t	tempo	s
U	velocidade da fase	$m.s^{-1}$
$U_r$	velocidade relativa entre as fases	$m.s^{-1}$
V	volume	$m^3$
w	magnitude do gradiente de velocidade	$m.s^{-1}$
$y^+$	medida dinâmica da espessura do volume de controle	(-)

### *Letras Gregas*

$\alpha$	fração volumétrica	(-)
$\rho$	massa específica	$kg.m^{-3}$
$\nu$	viscosidade cinemática	$m^2.s^{-1}$
$\varepsilon$	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta	$m^2.s^{-3}$
$\tau$	tensão de cisalhamento	$N.m^{-2}$
$\mu$	viscosidade dinâmica	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	constantes do modelo de turbulência $k-\varepsilon$	1,0; 0,76923
$\nu_l$	viscosidade cinemática molecular	$m^2.s^{-1}$
$\nu^t$	viscosidade cinemática turbulenta	$m^2.s^{-1}$
$\sigma$	coeficiente da tensão superficial	$N.m^{-2}$
$\delta$	número utilizado para evitar erros numéricos	0,001
$\varphi$	variável genérica	(-)

### ***Subscritos***

b	bolha
eff	efetiva
f	face do volume de controle
g	fase gás
i	fase genérica
l	fase líquida
T	vetor transposto

### ***Siglas***

AFBR	reator anaeróbio de leite fluidizado
ASBR	reator anaeróbio sequencial em batelada
CFD	fluidodinâmica computacional
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
CSTR	reator contínuo de mistura completa
DNS	simulações numéricas diretas
EDP	equações diferenciais parciais
EGSB	reator anaeróbio de leite expandido
GAMG	<i>geometric-algebraic multi-grid</i>
GCI	índice de convergência da malha
MBR	biorreator com membranas
MVF	método dos volumes finitos
PBiCG	<i>preconditioned bi-conjugate gradient</i>
PCG	<i>conjugated gradient</i>
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
UASB	reator anaeróbio de fluxo ascendente com manto de lodo

## RESUMO

Devido à crescente preocupação com as questões ambientais envolvendo as emissões de gases que potencializam o efeito estufa e outros problemas associados aos combustíveis fósseis, o hidrogênio aparece como uma fonte de energia alternativa capaz de promover o desenvolvimento de forma sustentável. A produção de hidrogênio via fermentação anaeróbia é uma das rotas mais atraentes atualmente, envolvendo processos físicos, químicos e biológicos com inúmeras interações entre gases, líquidos e sólidos. No entanto, as pesquisas atuais têm dedicado especial atenção às características químicas e biológicas. Muitos reatores em escala real e de laboratório ainda são dimensionados por correlações empíricas, mas a compreensão dos fenômenos hidrodinâmicos envolvidos na produção de hidrogênio é um precursor necessário para a aplicação em projetos de escala industrial. Para otimizar o desempenho do reator, é essencial compreender a dinâmica das fases em seu interior. Neste contexto, o objetivo deste trabalho é empregar técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) para estudar e otimizar o comportamento fluidodinâmico de um reator anaeróbio sequencial em batelada (ASBR). Para tanto, foi adotada uma modelagem bifásica, tridimensional e turbulenta conduzida com o programa computacional OpenFOAM. Diferentes condições operacionais, configurações geométricas, bem como diferentes modelos, foram avaliados. Os resultados obtidos no estudo das forças interfaciais reforçam a importância e a necessidade de validar as simulações com dados experimentais, devido à grande variação nos resultados obtidos em cada caso simulado. Do ponto de vista das configurações geométricas e operacionais, observa-se que modificações na vazão e no sentido da recirculação, bem como alterações na geometria dos distribuidores afetam significativamente a velocidade de mistura e a energia cinética turbulenta no interior do reator. Estas modificações afetam a transferência de massa, a qual influencia diretamente na cinética das reações e possibilita uma maior produção de hidrogênio. Determinar o comportamento do reator de forma precisa é um precursor para propor alterações que melhorem a sua eficiência.

**Palavras-chave:** fluidodinâmica computacional; reator anaeróbio sequencial em batelada; forças interfaciais; hidrogênio.

## ABSTRACT

Due to the growing concern with environmental issues involving the emission of gases that enhance the greenhouse effect and other problems associated with fossil fuels, hydrogen arises as an alternative source of energy capable of promoting development on a sustainable manner. Hydrogen production via anaerobic fermentation is currently one of the most attractive routes, involving physical, chemical and biological processes with numerous interactions between gas, liquid and solid. However, current research has devoted special attention to chemical and biological characteristics. Many full-scale and laboratory-scale reactors are still dimensioned using empirical correlations, but the understanding of hydrodynamic phenomena involved in the production of hydrogen is a necessary precursor for the application in industrial scale projects. To optimize the performance of the reactor, it is critical to understand the dynamics of the phases inside. In this context, the aim of this work is to employ computational fluid dynamics (CFD) techniques to study and optimize the fluid dynamic behavior of an anaerobic sequential batch reactor (ASBR). Thus, a two-phase, three-dimensional and turbulent modeling was adopted, and simulations were conducted with the computer program OpenFOAM. Different operating conditions, geometric configurations and different models were evaluated. The results obtained in the study of interfacial forces reinforce the importance and the need to validate the simulations with experimental data, due to the large variation in the results obtained in each simulated case. Concerning geometric and operational settings, it was observed that changes in flow direction and recirculation, as well as changes in the geometry of distributors, affect significantly the velocity and the turbulent kinetic energy inside the reactor. These changes affect the mass transfer, which directly influences the reaction kinetics and enables greater production of hydrogen. The accurate establishment of the reactor behavior is a precursor to propose changes in order to improve its efficiency.

**Keywords:** computational fluid dynamics; anaerobic sequential batch reactor; interfacial forces; hydrogen.

## 1 INTRODUÇÃO

Devido à crescente preocupação com as questões ambientais envolvendo as emissões de gases que potencializam o efeito estufa e outros problemas associados aos combustíveis fósseis, o hidrogênio aparece como uma fonte de energia alternativa capaz de promover o desenvolvimento de forma sustentável. Embora existam dificuldades associadas ao seu armazenamento, muitos pesquisadores apontam o hidrogênio como o combustível do futuro, pela capacidade de ser utilizado em células altamente eficientes para a geração de eletricidade (Show *et al.*, 2011).

A produção de hidrogênio pode ser feita utilizando microrganismos capazes de metabolizar o substrato via rotas fotossintéticas ou fermentativas. As espécies envolvidas na produção de hidrogênio são as algas verdes, as cianobactérias e as bactérias fotossintéticas e fermentativas (Das e Veziroglu, 2008).

A produção de hidrogênio via fermentação anaeróbia de resíduos orgânicos aparece como a forma mais favorável de produção, por aliar altas taxas e redução da poluição orgânica (Show *et al.*, 2011).

Embora a produção de hidrogênio seja complexa e multifásica, envolvendo processos físicos, químicos e biológicos com inúmeras interações entre gás, líquido e sólido, as pesquisas atuais têm dedicado especial atenção às suas características químicas e biológicas.

Diversos avanços em sua produção, tais como o isolamento de cepas microbianas capazes de produzir hidrogênio a altas taxas, obtenção de fontes de carbono de baixo custo e alta eficiência e otimização do processo de fermentação microbiana, têm sido alcançados (Cao *et al.*, 2010).

Por outro lado, as características físicas, que afetam a eficiência do processo, vêm sendo relegadas a segundo plano, e muitos reatores em escala real e de laboratório ainda são dimensionados por correlações empíricas. O efeito dos campos de velocidade, da tensão cisalhante, turbulência e volume das frações multifásicas, que afetam significativamente a composição da comunidade microbiana, da atividade de biomassa e da sedimentabilidade do lodo são desta forma menosprezados (Wang *et al.*, 2010).

Compreender os fenômenos hidrodinâmicos envolvidos na produção de hidrogênio é um precursor necessário para a aplicação em projetos de engenharia. Para otimizar a configuração do reator e, por conseguinte, melhorar seu desempenho, o desenvolvimento e a aplicação de métodos de fluidodinâmica computacional (CFD) se faz adequado por simplificar o processo (Ding *et al.*, 2010).

Neste contexto, esta dissertação pretende contribuir com uma análise do escoamento no interior de um reator anaeróbio sequencial em batelada, utilizado para a produção de hidrogênio, empregando métodos de fluidodinâmica computacional. A partir do conhecimento do comportamento fluidodinâmico no processo atualmente empregado, alterações nas condições operacionais são avaliadas, com o intuito de otimizar a transferência de massa no interior do reator, a qual influencia diretamente a cinética das reações. Os resultados apresentados neste trabalho foram obtidos por meio do programa computacional OpenFOAM, que é um software livre, de código aberto e destinado à resolução de problemas envolvendo campos tensoriais. Sua principal aplicação é na solução de problemas relacionados à fluidodinâmica computacional (CFD), podendo-se citar a simulação de escoamentos turbulentos, escoamentos multifásicos e escoamentos reativos. Por ser de código livre e aberto, pode ser executado, adaptado, redistribuído e aperfeiçoado pelos usuários.

### 1.1 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

Para um melhor entendimento, esta dissertação foi dividida da seguinte maneira:

O Capítulo 1 apresenta uma breve Introdução sobre produção de hidrogênio e a técnica computacional CFD, enfatizando sua aplicabilidade na otimização de reatores, além de ressaltar o objetivo do estudo.

No Capítulo 2 descreve-se o objetivo geral e os objetivos específicos deste estudo.

Apresenta-se no Capítulo 3 uma visão geral sobre biorreatores para produção de hidrogênio e seus parâmetros geométricos e de operação; discutem-se, também, os principais fatores relacionados a escoamentos multifásicos, com ênfase na metodologia CFD aplicada a biorreatores.

O Capítulo 4 apresenta os modelos matemáticos utilizados nesta pesquisa, além das relações de fechamento do modelo como forças interfaciais e modelos de turbulência, sob uma ótica Euleriana-Euleriana; os métodos numéricos utilizados neste trabalho, a geometria e a malha computacional também são elencadas neste capítulo.

A apresentação e discussão dos resultados obtidos são realizadas no Capítulo 5.

O Capítulo 6 traz as principais conclusões desta pesquisa, além de recomendações para futuros trabalhos.

## **2 OBJETIVOS**

### **2.1 OBJETIVO GERAL**

Esta dissertação tem como objetivo compreender a fluidodinâmica em um biorreator utilizado para a produção de hidrogênio, por meio de um modelo matemático bifásico e turbulento. A partir disto, pretende-se propor modificações que incrementem a mistura e a formação de hidrogênio otimizando o processo.

### **2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

- 1) Propor uma modelagem adequada para a simulação fluidodinâmica de um biorreator anaeróbio sequencial em batelada.
- 2) Obter através de simulações numéricas um melhor entendimento da fluidodinâmica de um biorreator voltado à produção de hidrogênio.
- 3) Propor modificações geométricas e/ou operacionais para o aperfeiçoamento da mistura, apoiadas na modelagem proposta.

### 3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Apresenta-se neste capítulo uma visão global sobre biorreatores para produção de hidrogênio, com ênfase nos parâmetros geométricos e nas características operacionais que afetam a mistura. Na sequência são apresentados os principais fatores relacionados ao escoamento multifásico e ao estudo de CFD aplicado a produção de hidrogênio, com referência a alguns trabalhos desenvolvidos por pesquisadores da área.

#### 3.1 BIORREACTORES PARA PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO

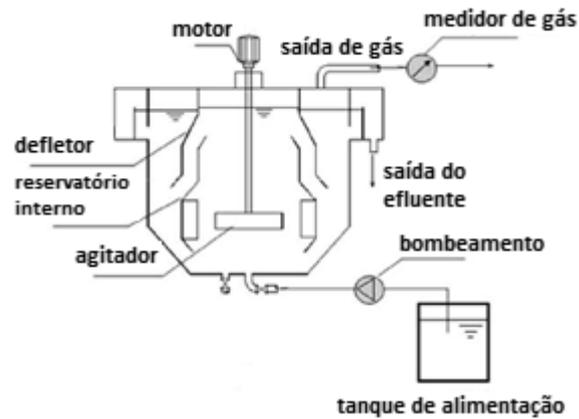
Os processos anaeróbios vêm experimentando um desenvolvimento muito significativo nos últimos anos, pois é uma tecnologia de baixo custo que pode ser aplicada em processo de tratamento de águas residuais com geração de biogás e hidrogênio.

O processo fermentativo para obtenção de hidrogênio pode ser realizado em batelada ou em modo contínuo. De acordo com Hallenbeck e Ghosh (2009), o modo contínuo de operação tende a ser mais eficiente.

Em relação aos reatores, Show *et al.*, (2011) apresentam diversas configurações aplicadas na produção de hidrogênio, entre as quais se destacam: reator contínuo de mistura completa (CSTR), reator anaeróbio sequencial em batelada (ASBR), biorreator com membranas (MBR), reator anaeróbio de fluxo ascendente com manto de lodo (UASB), reator anaeróbio de leito expandido (EGSB) e reator anaeróbio de leito fluidizado (AFBR).

Estudos recentes apontam o CSTR como o mais simples e também o mais utilizado atualmente (Ding *et al.*, 2010). Este reator geralmente apresenta formato cilíndrico, entrada e saída contínua de efluente e agitação mecânica. Através desta agitação, a biomassa é suspensa sendo completamente misturada ao substrato, conferindo assim, uma boa transferência de massa e um eficiente contato substrato-microrganismo (Jung *et al.*, 2011).

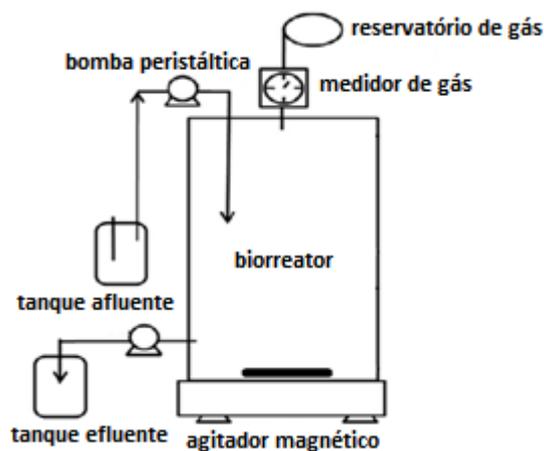
Por outro lado, segundo Zhang *et al.* (2006) o CSTR está sujeito a arraste de biomassa para curtos tempos de detenção hidráulica, restringindo assim a produção de hidrogênio. A Figura 1 apresenta a configuração de um CSTR.



**Figura 1.** Configuração de um reator contínuo de mistura completa (adaptado de Ding *et al.*, 2010).

Devido à dissociação entre o tempo de detenção hidráulica e o tempo de retenção celular, alta concentração de biomassa, flexibilidade operacional, independência em relação à instalação de um sedimentador e baixo investimento inicial, o ASBR vem sendo adotado na produção de hidrogênio. De acordo com Pinheiro *et al.* (2008) e Michelan *et al.* (2009), os princípios de operação são extremamente simples e seguem as seguintes etapas: enchimento, reação, sedimentação e retirada do efluente.

A versatilidade do ASBR já foi comprovada com diversos tipos de efluentes, incluindo os gerados pelas indústrias têxteis, petroquímicas, cervejarias, fábricas de celulose, curtumes, dentre outras (Tauseef *et al.*, 2013). No entanto, o ASBR apresenta um limite menor de carga orgânica volumétrica e uma menor produção de hidrogênio em relação ao CSTR (Won e Lau, 2011). Um diagrama esquemático de um ASBR é mostrado na Figura 2.



**Figura 2.** Configuração de um reator anaeróbico sequencial em batelada (adaptado de Xu, 2010).

### 3.2 EFEITO DOS PARÂMETROS GEOMÉTRICOS E OPERACIONAIS NA MISTURA

Muitas são as variáveis que afetam o desempenho de um biorreator, tais como a agitação, configuração geométrica do reator, relação inicial entre alimento e microrganismos ( $A/M$ ), temperatura e diluição inicial do efluente (Novaes *et al.*, 2010).

Entre estas, a agitação é um parâmetro crítico, especialmente em aplicações de grande escala, uma vez que falhas no processo de mistura podem resultar em uma menor transferência de massa, levando a um desempenho insuficiente do sistema. Além disso, a agitação também é crucial para solubilizar partículas de matéria orgânica, aumentando as taxas de consumo de substrato (Pinho *et al.*, 2005).

Existem várias formas para promover a agitação no interior de biorreatores, dentre estas a recirculação do biogás, a recirculação do efluente e a agitação mecânica são as que merecem maior destaque. Em um ASBR, a mistura geralmente é realizada por agitação mecânica ou por recirculação do biogás gerado no processo de fermentação (Michelan *et al.*, 2009). No entanto, Brito *et al.* (1997) e Pinheiro *et al.* (2008) identificaram que a produção de biogás pode ser insuficiente para promover turbulência suficiente para minimizar a ocorrência de “zonas mortas”. Assim, Brito *et al.* (1997) desenvolveram um ASBR onde a agitação foi realizada pela recirculação do substrato através de uma bomba pneumática, e concluíram que é possível utilizar este sistema para promover uma maior agitação. Pinheiro *et al.* (2008) avaliaram a velocidade de recirculação ideal para um ASBR utilizado no tratamento de águas residuais, e descobriram que a eficiência do sistema é limitado pela transferência de massa quando operado com baixas velocidades de recirculação.

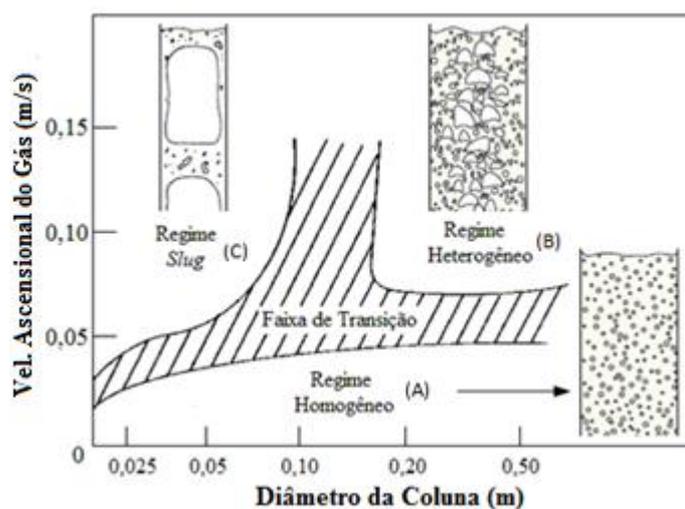
No entanto, velocidades mais elevadas de recirculação podem reduzir a atividade microbiana devido a altas tensões de cisalhamento, causando a ruptura das células (Bannari *et al.*, 2011) e resultando em um processo com reações de fermentação ineficientes. Do ponto de vista da engenharia, a tensão de cisalhamento pode ser manipulada para melhorar o processo de granulação do lodo biológico (Ren *et al.*, 2009).

Complementando as diversas investigações experimentais acerca da influência da agitação em biorreatores, também se encontram em literatura alguns estudos numéricos. Ding *et al.* (2010) apresentaram simulações tridimensionais em CFD de um reator CSTR em escala laboratorial, operando com agitação mecânica, escoamento bifásico gás-líquido para a produção de hidrogênio. Os resultados mostraram que o formato do agitador, bem como a velocidade de agitação, afetam significativamente os padrões de escoamento, sendo que as

maiores produções de hidrogênio foram obtidas com o rotor funcionando com velocidades entre 50 e 70 rpm. Wang *et al.* (2010) utilizou a metodologia desenvolvida por Ding *et al.* (2010) para investigar os efeitos do aumento de escala em reatores CSTR, e indicou que tal aumento acarreta em aumento de zonas de estagnação e pior distribuição dos campos de velocidade.

### 3.3 CARACTERÍSTICAS DOS REGIMES DE ESCOAMENTO

Os sistemas gás-líquido são caracterizados por diferentes regimes de escoamento, sendo classificados em três tipos principais: homogêneo, heterogêneo e *slug* (Figura 3). A variação dos regimes de escoamento depende principalmente da velocidade ascensional da fase dispersa (Wang *et al.*, 2007).



**Figura 3.** Tipos de regimes de escoamento gás-líquido em colunas verticais: (A) homogêneo; (B) heterogêneo e (C) *slug* (adaptado de Kantarci *et al.*, 2005).

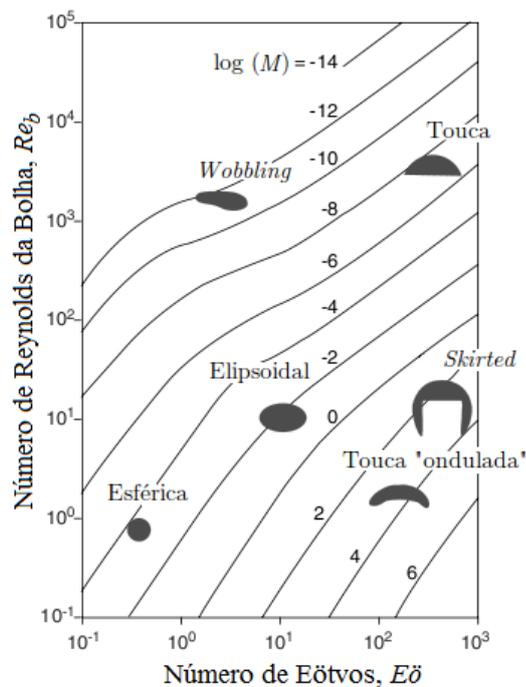
Para baixas velocidades ascensionais de gás, geralmente abaixo de 0,05 m/s, observa-se uma distribuição uniforme no tamanho das bolhas, caracterizando o regime homogêneo. Este regime apresenta menor complexidade em sua caracterização, pois todas as bolhas ascendem verticalmente com mínimas oscilações transversais e axiais, praticamente não ocorrendo coalescência ou quebra. O tamanho das bolhas é quase que exclusivamente determinado pelas características do distribuidor e pelas propriedades do sistema (Thorat e Joshi, 2004).

À medida que a velocidade ascensional do gás aumenta, geralmente acima de 0,10 m/s, a coluna passa a operar em regime de transição ou heterogêneo, onde há uma grande variação na fração volumétrica de gás, no tamanho das bolhas, na velocidade do líquido, na energia cinética turbulenta. O tamanho médio das bolhas na região central da coluna é governado pelos fenômenos de coalescência e quebra (Thorat e Joshi, 2004).

O regime *slug* é caracterizado pela formação de bolhas grandes, as quais apresentam tamanhos próximos ao diâmetro da coluna, como pode ser observado na Figura 3C. Esse tipo de escoamento pode ser obtido em colunas com pequenos diâmetros, operando a uma velocidade ascensional de gás superior a 0,10 m/s (Shaikh e Al-Dahhan, 2007).

Em colunas de bolhas, o regime de escoamento é fator determinante na operação e desempenho do sistema, pois a hidrodinâmica, transferência de calor e massa, e o comportamento da mistura são distintos nos diferentes regimes (Zahradník e Fialová, 1996).

Outra importante característica do escoamento em colunas de bolhas está no fato de que as bolhas possuem formas variáveis, as quais interagem de maneira diferente com a fase contínua. De acordo com Clift *et al.* (1978), as formas mais comuns são esfera, elipse e touca e podem ser determinadas através da relação entre três grupos adimensionais (Eötvös, Reynolds e Morton), conforme a representação gráfica mostrada na Figura 4.



**Figura 4.** Relação entre o formato das bolhas e os grupos adimensionais Eötvös, Reynolds e Morton (adaptado de Clift *et al.*, 1978).

As características morfológicas influenciam fortemente o escoamento, uma vez que, forças interfaciais são dependentes de parâmetros como área superficial das bolhas, distribuição de pressão na superfície destas, entre outros.

### 3.4 ABORDAGEM FENOMENOLÓGICA

Existem dois modos clássicos de enfoque em relação à descrição do escoamento de um fluido: o Euleriano e o Lagrangeano. No enfoque Euleriano, uma porção fluida é vista e estudada por um observador em uma posição coordenada fixa no espaço, ou seja, uma grandeza qualquer tem a sua variação em função do tempo e das três componentes dimensionais. Já no enfoque Lagrangeano, o observador analisa e observa o fenômeno movimentando-se com a mesma velocidade da porção de fluido, fazendo com que as grandezas sejam apenas função do tempo.

Escoamentos bifásicos podem ser modelados pelos dois tipos de abordagens, Euleriano-Euleriano e Euleriano-Lagrangeano. Na abordagem Euleriano-Euleriano, ambas as fases são tratadas como contínuas e interpenetrantes. As grandezas (escalares ou vetoriais) são transportadas através dos volumes de controle usando um sistema de coordenadas fixo, as equações locais instantâneas passam por médias adequadas (Rosa, 2008), a construção da trajetória e sua subsequente média não são realizadas explicitamente durante os cálculos. Esta abordagem necessita de um menor esforço computacional em relação à Euleriano-Lagrangeano (Buwa *et al.*, 2006).

Dentro da abordagem Euleriano-Lagrangeano, a fase contínua é tratada como Euleriano, enquanto que, para a fase dispersa, o movimento individual (ou em pequenos grupos) das partículas é simulado pela solução do balanço de forças para cada uma destas. A trajetória de várias partículas é computada em cada volume de controle, onde é feita uma aproximação média (Buwa *et al.*, 2006). Normalmente esta abordagem é recomendada quando a concentração da fase dispersa é baixa ou apresenta diferentes características de tamanho e composição química (Santos, 2005). Esta abordagem é conveniente no estudo do comportamento das bolhas em relação aos fenômenos de coalescência e quebra. A desvantagem deste modelo é que o número de bolhas é limitado, além de exigir maior capacidade de processamento computacional (Van Den Hengel *et al.*, 2005).

Devido a menor exigência computacional, adotou-se nesta pesquisa a abordagem Euleriano-Euleriano para o cálculo do escoamento bifásico entre a fase dispersa (bolhas de biogás) e a fase contínua (considerada uma mistura líquida de vinhoto e glicerol). Como o comportamento das bolhas depende de variáveis locais (campo de velocidade, turbulência, etc.), a modelagem inclui correlações para estimar a interação entre as fases.

### 3.5 FORÇAS INTERFACIAIS

Na operação de biorreatores multifásicos, a dinâmica das fases gasosa e líquida é afetada pelas interações entre as fases, regida pelas forças interfaciais (arraste, sustentação e massa virtual).

Uma partícula imersa em um fluido em movimento sofre o efeito de uma força de arraste a qual é causada por dois mecanismos. O primeiro mecanismo é provocado pelas tensões cisalhantes viscosas ao redor da partícula conhecida como fricção por contato e o outro mecanismo é conhecido como arraste de forma provocada por uma distribuição de pressão desigual que envolve a partícula em movimento, e está associado com o tamanho da bolha e sua forma.

Em escoamentos sob corpos, a variação repentina dos respectivos campos de velocidade e pressão acaba induzindo a um movimento rotacional no eixo do corpo, acarretando em uma drástica mudança nas forças cisalhantes nesta localização. Os vórtices que estão na interface entre os fluidos provocam assim uma ação de empuxo, correspondente a sustentação ou ascensão, dependendo da direção do movimento (Tabib *et al.*, 2008)

A força de massa virtual está diretamente relacionada à inércia do movimento relativo entre as fases. O deslocamento das bolhas provoca a aceleração do líquido nas regiões vizinhas a estas. Este conceito pode ser mais bem compreendido pela mudança de energia cinética nas regiões que sofrem aceleração das partículas que se movimentam (Joshi, 2001).

Para estimar essas interações, faz-se necessário utilizar correlações empíricas. A estimativa dos coeficientes dessas correlações para forças de arraste e de sustentação, por exemplo, pode variar significativamente, dependendo das condições de operação consideradas (Pang e Wei, 2011), o que pode resultar em diferenças nos resultados simulados. Estima-se que a magnitude da força de arraste seja da ordem de 100 vezes maior que as outras forças interfaciais (Laborde-Boutet *et al.*, 2009). Ainda assim, as forças de sustentação e massa virtual podem ter um papel importante no movimento das bolhas, mesmo em condições usuais

(Pang *et al.*, 2010). Desta forma, a modelagem precisa destas forças é importante para determinar corretamente a física do sistema (Tabib *et al.*, 2008). No entanto, ainda não há uma correlação estabelecida para estimar a força de sustentação (Hibiki e Ishii, 2007). Apesar de correlações que ignoram a influência de tensões de cisalhamento sobre a estimativa do coeficiente da força de sustentação, encontrou-se recentemente que esta influência não é desprezível (Dijkhuizen *et al.*, 2010).

### 3.6 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL – CFD

Para alcançar a produção em escala industrial, o aumento no tamanho dos reatores se faz necessário, o que, conseqüentemente, pode causar uma diminuição da homogeneidade fluidodinâmica. Esta diminuição muitas vezes acarreta um aumento do arraste de biomassa, surgimento de zonas mortas e curtos-circuitos. Os métodos mais tradicionais utilizados nos projetos de tais reatores podem ser classificados como análise dimensional e métodos experimentais. O principal obstáculo na aplicação de tais métodos é que os resultados finais não são conhecidos até que os experimentos sejam realizados em escala real, o que torna a precisão da escala bastante questionável (Wang *et al.*, 2010).

Com a aplicação de CFD, equipamentos industriais podem ser simulados em escala, empregando um modelo numérico computacional baseado na termodinâmica, fluidodinâmica e cinética das reações, e os processos, bem como os resultados da simulação podem ser visualizados antes de realizar experiências em escala real, o que poupa tempo e diminui custos (Wang *et al.*, 2010).

A CFD consiste na resolução das equações de conservação (massa, quantidade de movimento e energia) empregando métodos numéricos, como o Método dos Volumes Finitos e o Método dos Elementos Finitos. Estes métodos fornecem campos de velocidades, pressão, temperatura, etc., possibilitando avaliar o transporte de uma propriedade de interesse (Bitog *et al.*, 2011).

A técnica CFD também pode ser utilizada para otimizar reatores em operação, através de modificações em parâmetros de processo tais como a agitação (Ding *et al.*, 2010).

Um problema de CFD pode ser analisado de duas maneiras básicas. A primeira é realizada através do desenvolvimento de um código específico com o auxílio de modelos e programas numéricos voltados para a situação física de interesse. Já a segunda consiste na

utilização de um código comercial generalizado, sendo possível aplicá-lo para várias situações físicas.

Segundo Shaw (1992), a resolução de um problema de CFD consiste de três etapas: pré-processamento, solução numérica e pós-processamento. No pré-processamento, define-se primeiramente a geometria da região de interesse (domínio computacional), gerando-se malhas numéricas (subdivisão do domínio em um número finito de volumes de controle). Após são estabelecidas as condições de contorno, as propriedades físicas dos fluidos, os modelos matemáticos, as equações de fechamento e os detalhes numéricos a serem empregados na simulação, gerando assim um arquivo inicial para a solução numérica.

O caso definido no pré-processamento é carregado no solver, onde será solucionado por meio do seguinte algoritmo: (I) – Integração das equações de transporte sobre todos os (finitos) volumes de controle do domínio da solução; (II) – Discretização das equações de transporte, onde as equações diferenciais a serem solucionadas são substituídas por expressões algébricas aproximadas, escritas em termos dos valores nodais das variáveis dependentes; (III) – Solução das equações algébricas por métodos iterativos.

No pós-processamento as soluções são visualizadas e interpretadas. Outros cálculos também podem ser realizados a partir dos resultados obtidos, como o de valores médios das variáveis de interesse (velocidade, pressão, temperatura, tensão de cisalhamento) além da representação dos perfis destas variáveis através de gráficos e superfícies de contorno.

Diversas investigações experimentais foram realizadas para avaliar a influência de parâmetros físico-químicos em biorreatores voltados a produção de hidrogênio, porém estudos numéricos ainda são escassos. É importante ressaltar que a verificação de uma simulação mediante a realização de experimentos é o caminho mais seguro para garantir a confiabilidade de um determinado pacote computacional.

## 4 SIMULAÇÕES

Este capítulo apresenta a completa modelagem matemática e numérica empregada nas simulações em estudo. A modelagem matemática pode ser definida como a descrição de um fenômeno físico real por um conjunto de equações capazes de representar a realidade do fenômeno. A modelagem numérica consiste em um método capaz de resolver os sistemas de equações definidos na modelagem matemática, com mínimos erros numéricos, os quais podem causar divergência nos resultados.

### 4.1 MODELAGEM MATEMÁTICA

Este item apresenta a modelagem matemática utilizada na avaliação fluidodinâmica de um biorreator em escala piloto para produção de hidrogênio via fermentação de resíduos agroindustriais.

As equações são descritas para um sistema bifásico constituído por uma fase líquida, representada pela mistura entre a cultura microbiana e o substrato, e por uma fase gasosa, que corresponde aos gases gerados durante o processo fermentativo. Ambas as fases são tratadas como fluidos contínuos e interpenetrantes através de uma abordagem Euleriana-Euleriana.

Nesta abordagem, as equações que descrevem o transporte de massa e de quantidade de movimento de cada fase são desenvolvidas separadamente para cada fase, e sua dependência ocorre através dos termos de interação presentes nas equações de balanço de massa e de quantidade de movimento.

O código base para a realização deste trabalho foi apresentado por Rusche (2002). Seu trabalho gerou um *solver* bifásico conhecido como *twoPhaseEulerFoam*, o qual foi alterado pelo grupo de pesquisas do Laboratório de Tecnologias Ambientais (LATAM) da Universidade de Caxias do Sul (UCS), e implementado no programa computacional OpenFOAM.

#### 4.1.1 Equações de Transporte

As equações da continuidade e do transporte da quantidade de movimento, na sua formulação intensiva para a fase genérica  $i$  (onde  $i = g, l$  representam as fases gás e líquida, respectivamente), resolvidas pelo simulador, estão dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g) + \nabla(\alpha_g U) + \nabla(U_r \alpha_g (1 - \alpha_g)) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(U_i) + U_i \cdot \nabla(U_i) + \nabla \cdot (R_i^{eff}) + \frac{\nabla \alpha_i}{(\alpha_i + \delta)} R_i^{eff} = -\frac{\nabla p}{\rho_i} + g + \frac{M_i}{(\alpha_i + \delta)\rho_i}, \quad (2)$$

onde  $U_i$  representa a velocidade da fase  $i$ ,  $U_r$  a velocidade relativa entre as fases,  $\alpha_i$  é a fração volumétrica gás-líquido,  $\delta$  é um número (0,001), utilizado para evitar erros numéricos causados pela inexistência de alguma das fases ( $\alpha_i = 0$ ),  $p$  é a pressão,  $g$  é a aceleração da gravidade,  $\rho_i$  é a massa específica da fase  $i$  e  $M_i$  representa a transferência de quantidade de movimento devido às forças interfaciais.

O termo  $R_i^{eff}$  representa o tensor relacionado às forças viscosas, o qual é dado por:

$$R_i^{eff} = -v_i^{eff} \left( \nabla U_i + \nabla U_i^T - \frac{2}{3} I \nabla \cdot U_i \right) + \frac{2}{3} I k_i = 0, \quad (3)$$

onde  $v_i^{eff}$  é a viscosidade efetiva da fase  $i$ ,  $I$  é o tensor unitário, e  $k_i$  é a energia cinética turbulenta da fase  $i$ .

Nesta formulação descrita por Weller (2002) *apud* Rusche (2002), a equação de transporte de quantidade de movimento é dividida pela respectiva fração volumétrica, para evitar a singularidade, que pode ocorrer quando algumas das frações volumétricas tendem a zero.

#### 4.1.2 Transferência de quantidade de movimento interfacial

Diversos efeitos são observados quando se trata de transferência de quantidade de movimento entre as fases em um sistema multifásico. Considerando um sistema bifásico, o fluxo de quantidade de movimento entre as fases se relaciona de maneira oposta, como  $M_g = -M_l$  e pode ser aplicada para todas as forças.

Das diversas forças interfaciais apresentadas na literatura, podem-se citar as mais usuais e escrevê-las na forma:

$$M_i = M_D + M_L + M_{VM}, \quad (4)$$

onde os termos  $M_D$ ,  $M_L$  e  $M_{VM}$  representam as forças de arraste, de sustentação e de massa virtual, respectivamente.

Outras forças podem ser incluídas na Equação 4. No entanto, como já citado anteriormente, estas são as principais forças interfaciais relacionadas ao escoamento gás-líquido. A modelagem dos termos componentes da força interfacial total é apresentada a seguir.

### Força de arraste

Uma bolha imersa em um fluido em movimento sofre o efeito de uma força de arraste, a qual é devida a dois mecanismos. O primeiro mecanismo é provocado pelas tensões cisalhantes viscosas ao redor da bolha. O outro mecanismo é conhecido como arraste por pressão ou de forma, provocada por uma distribuição de pressão desigual que envolve a bolha em movimento, e está associado com o tamanho da bolha e sua forma (Bird *et al.*, 2004).

Em relação a sua relevância, na literatura encontram-se inúmeros trabalhos mostrando que esta força é a mais importante dentre as apresentadas. Segundo Chen *et al.* (2005) e Silva *et al.* (2012), para escoamentos bifásicos em colunas de bolhas, utilizando-se apenas a força de arraste, pode-se modelar corretamente o escoamento sem a adição de outra força interfacial.

A força de arraste é usualmente modelada pela equação:

$$M_D = \alpha_g \frac{3}{4} \frac{\rho_l}{d_g} C_D |U_r| U_r, \quad (5)$$

onde  $d_g$  é o diâmetro da bolha,  $U_r$  é a velocidade relativa entre as fases e  $C_D$  é o coeficiente de arraste.

O coeficiente de arraste ( $C_D$ ) depende das características do escoamento ao redor da bolha e é função, principalmente, do número de Reynolds da bolha ( $Re_b$ ), dado por:

$$Re_b = \frac{|U_r| d_g}{\nu_l}. \quad (6)$$

Neste trabalho, foram utilizadas cinco correlações para estimar o coeficiente de arraste ( $C_D$ ) entre as fases contínua e dispersa. Para todas as simulações, as bolhas foram modeladas como esféricas e rígidas. A correlação de Schiller e Naumann (1935) foi uma das primeiras propostas, tendendo, respectivamente, a valores de  $C_D = 24/Re_b$  e  $C_D = 0,44$  para baixos e altos números de Reynolds da bolha ( $Re_b$ ).

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_b} (1 + 0,15 \text{Re}_b^{0,687}) & \text{Re}_b \leq 1000 \\ 0,44 & \text{Re}_b > 1000 \end{cases}, \quad (7)$$

A correção de Dalla Valle (1948) também foi utilizada. De acordo com Pang e Wei (2011), esta oferece uma expressão contínua, porém resultando em valores ligeiramente mais elevados para  $C_D$  na faixa entre  $1 \leq \text{Re}_b \leq 200$ , conforme a equação:

$$C_D = \left( 0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{\text{Re}_b}} \right)^2, \quad (8)$$

Também foram avaliadas as correlações de Ma e Ahmadi (1990) e Zhang e Vanderheyden (2002). Ambas são expressões contínuas e estimam valores para  $C_D$  muito próximos aos obtidos com a correlação de Schiller e Naumann (1935). Estas correlações são apresentadas respectivamente pelas equações:

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}_b} (1 + 0,1 \text{Re}_b^{0,75}), \quad (9)$$

$$C_D = 0,44 + \frac{24}{\text{Re}_b} + \frac{6}{(1 + \sqrt{\text{Re}_b})}, \quad (10)$$

Por fim, avaliou-se a correlação de Laín *et al.* (2002), a qual promove mudanças suaves para os valores de  $C_D$  em função do  $\text{Re}_b$ . Esta correlação apresenta valores mais baixos quando comparados aos obtidos com a correlação de Schiller e Naumann (1935) para baixos números de  $\text{Re}_b$  e é obtida através das seguintes equações:

$$C_D = \begin{cases} \frac{16}{\text{Re}_b} & \text{Re}_b \leq 1,5 \\ \frac{14,9}{\text{Re}_b^{0,78}} & 1,5 < \text{Re}_b \leq 80 \\ \frac{48}{\text{Re}_b} \left( 1 - \frac{2,21}{\sqrt{\text{Re}_b}} \right) + 1,86 \times 10^{-15} \text{Re}_b^{4,756} & 80 < \text{Re}_b \leq 1500 \\ 2,61 & \text{Re}_b > 1500 \end{cases}, \quad (11)$$

### Força de sustentação

A força de sustentação está relacionada ao movimento lateral da fase dispersa. Esta força aparece devido aos efeitos da pressão e das tensões que atuam na superfície das bolhas (Tabib *et al.*, 2008).

Ao modelar a força de sustentação para escoamentos no interior de reatores, valores de velocidade mais baixos são esperados próximos à parede, e mais altos junto à linha central do escoamento. Este gradiente de velocidades resulta em uma força impelindo cada bolha em direção ao centro do reator. Desta forma, a força de sustentação atua em direção perpendicular ao escoamento, conforme apresentado pela equação:

$$M_L = \alpha_g C_L \rho_l U_r \times (\nabla \times U_g). \quad (12)$$

O coeficiente  $C_L$  tem sido objeto de estudo de vários autores, cada qual determinando seu valor de maneira diferente, dependendo da estrutura física do problema. Neste trabalho foi adotado o valor constante e igual a  $C_L = 0,5$ , presente em trabalhos como os de Delnoij *et al.* (1997), Días *et al.* (2008), Tabib *et al.* (2008) e Pang e Wei (2011). Três outras correlações para  $C_L$  também foram avaliadas: a correlação de Saffman (1965), que relaciona  $C_L$  com a tensão de cisalhamento através da equação:

$$C_L = \frac{9,69}{\pi} (\text{Re}_b \text{Sr}_b)^{-1/2}, \quad (13)$$

O termo  $\text{Sr}_b$  representa a taxa de cisalhamento adimensional, a qual é dada por:

$$\text{Sr}_b = \frac{|w|}{|U_r|} \frac{d_g}{2}, \quad (14)$$

onde  $w$  é a magnitude do gradiente de velocidade.

A correlação de Legendre e Magnaudet (1998), que resulta da associação entre duas soluções analíticas para  $C_L$  em baixos e altos números de Reynolds da bolha ( $\text{Re}_b$ ) e leva em consideração o efeito da deformação das bolhas na força de sustentação (Hibiki e Ishii, 2007), através da equação:

$$C_L = \left(2 - \exp\left(2,92d_g^{2,21}\right)\right) \sqrt{C_{L,low\text{Re}}^2 + C_{L,high\text{Re}}^2}, \quad (15)$$

onde  $C_{L,low\text{Re}}$  e  $C_{L,high\text{Re}}$  são definidos pelas equações:

$$C_{L,low\text{ Re}} = \frac{6}{\pi^2 \sqrt{\text{Re}_b} \text{Sr}_b} \left( \frac{2,255}{(1 + 0,2\text{Eo}^{-2})^{1,5}} \right), \quad (16)$$

$$C_{L,high\text{ Re}} = \frac{1}{2} \left( \frac{1 + 16/\text{Re}_b}{1 + 29/\text{Re}_b} \right), \quad (17)$$

O número de Eötvös ( $Eo$ ) é o quociente entre as forças de empuxo e as forças de tensão superficial, dado pela expressão:

$$Eo = \frac{g(\rho_l - \rho_g) d_g^2}{\sigma}, \quad (18)$$

onde  $\sigma$  é o coeficiente de tensão superficial.

Por fim, a correlação de Tomiyama *et al.* (2002), a qual é aplicável a bolhas deformáveis e dependente do número de Eötvös, está dada por:

$$C_L = \min(0,288 \tanh(0,121 \text{Re}_b), f(Eo_d)), \quad (19)$$

onde  $f(Eo_d)$  é uma função da correlação, dada por:

$$f(Eo_d) = 0,00105 Eo_d^3 - 0,0159 Eo_d^2 - 0,0204 Eo_d + 0,474, \quad (20)$$

onde  $Eo_d$  é o número de Eötvös modificado, dado por:

$$Eo_d = \frac{g(\rho_l - \rho_g) d_H^2}{\sigma}, \quad (21)$$

sendo  $d_H$  é a máxima dimensão horizontal da bolha, calculada pela correlação empírica de Wellek *et al.* (1966), conforme a equação:

$$d_H = d_g (1 + 0,163 Eo^{0,757}). \quad (22)$$

### Força de massa virtual

A força de massa virtual leva em conta os efeitos de aceleração e desaceleração da fase dispersa e o quanto desse trabalho é necessário para que essa fase acelere a fase contínua que está ao seu redor. Matematicamente esta é modelada pela expressão:

$$M_{VM} = \alpha_g C_{VM} \rho_l \left( \frac{DU_l}{Dt} - \frac{dU_g}{dt} \right), \quad (23)$$

onde  $C_{VM}$  é o coeficiente de massa virtual, igual a 0,50 para bolhas esféricas, conforme sugerido por Dhotre *et al.* (2009).

### 4.1.3 Modelo de turbulência

Devido à complexidade dos escoamentos turbulentos, diversos modelos para investigação da turbulência vêm sendo estudados ao longo dos anos. Entre os modelos mais utilizados, os baseados na abordagem RANS se destacam, devido a vantagens, como por exemplo, menor esforço computacional em relação a simulações numéricas diretas (DNS), entre outros tipos (Wu, 2013).

A introdução de quantidades médias e flutuantes de propriedades como a velocidade, nas equações de transporte de quantidade de movimento produzem as equações RANS. Estas representam apenas as quantidades médias do escoamento, modelando os efeitos da turbulência sem a necessidade da resolução das flutuações geradas por esta. No entanto, este procedimento introduz um termo conhecido como tensor de Reynolds, o qual necessita para sua resolução do emprego de modelos de turbulência.

O modelo de turbulência *k-epsilon* padrão foi introduzido por Launder e Spalding (1974), e apresenta como vantagens o bom desempenho na predição da maioria dos escoamentos de interesse industrial.

Este modelo é utilizado para determinar os efeitos da turbulência na fase contínua. A viscosidade efetiva da fase contínua é dada pela soma da viscosidade molecular ( $\nu_l$ ) com a viscosidade turbulenta ( $\nu^t$ ), a qual é calculada através da equação:

$$\nu^t = C_\mu (k_l^2 / \varepsilon_l), \quad (24)$$

onde  $C_\mu$  é uma constante,  $k_l$  a energia cinética turbulenta e  $\varepsilon$  sua dissipação.

As equações conservativas para  $k$  e  $\varepsilon$  são expressas através das equações:

$$\frac{\partial}{\partial t}(k_l) + (U_l \cdot \nabla)k_l - \nabla \cdot \left( \frac{\nu_l^{eff}}{\sigma_k} \nabla k_l \right) = P_k - \varepsilon_l, \quad (25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_l) + (U_l \cdot \nabla)\varepsilon_l - \nabla \cdot \left( \frac{\nu_l^{eff}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon_l \right) = \frac{\varepsilon_l}{k_l} (C_1 P_k - C_2 \varepsilon_l), \quad (26)$$

onde  $P_k$  é a produção de energia cinética turbulenta, descrita pela equação:

$$P_k = 2\nu_l^{eff} (\nabla U_l \cdot dev(\nabla U_l + (\nabla U_l)^T)), \quad (27)$$

Os valores das constantes do modelo de turbulência *k-epsilon* modificado podem ser encontrados na Tabela 1 (OpenFOAM, 2013).

## 4 SIMULAÇÕES

**Tabela 1.** Coeficientes do modelo k-epsilon modificado.

$C_\mu$	$C_1$	$C_2$	$\sigma_\kappa$	$\sigma_\varepsilon$
0,09	1,44	1,92	1,0	0,76923

### 4.1.4 Avaliação da tensão de cisalhamento

A tensão de cisalhamento é um parâmetro fundamental no projeto e operação de biorreatores, uma vez que apresenta grande influência na morfologia dos flocos e conseqüentemente na atividade dos microrganismos. A tensão de cisalhamento máxima em cada volume de controle é avaliada através da equação proposta por Bannari *et al.* (2011):

$$\tau_{\max} = \max(|\tau_{xy}|, |\tau_{xz}|, |\tau_{yz}|, |\tau_{xx}|, |\tau_{yy}|, |\tau_{zz}|). \quad (28)$$

### 4.1.5 Cálculo da vazão de recirculação

A fim de manter constante o volume de líquido no interior do biorreator, definiu-se uma equação que calcula a quantidade de líquido que sai através da tubulação de recirculação e a usa como condição de entrada. Esta equação depende da fração volumétrica da fase gás, da velocidade do líquido e das áreas de entrada ( $A_{in}$ ) e saída ( $A_{out}$ ):

$$\alpha_{g,in} = 1 - \frac{U_{l,out} A_{out} (1 - \alpha_{g,out})}{U_{l,in} A_{in}}. \quad (29)$$

### 4.1.6 Determinação de campos médios de energia cinética turbulenta

A mistura no interior do biorreator pode ser avaliada através do cálculo da energia cinética turbulenta. Valores elevados indicam a presença de vórtices que promovem a mistura.

Assim, uma média ponderada da energia cinética turbulenta ( $\bar{k}$ ) é calculada através da equação:

$$\bar{k} = \frac{\sum (k_l V_l)}{\sum (V_l)}, \quad (30)$$

onde  $V_l$  é o volume de líquido em cada volume de controle.

Com o cálculo de  $\bar{k}$  é possível comparar a intensidade da turbulência no interior do reator utilizando-se diferentes modelos para as forças interfaciais. Outro método adotado para esta comparação consiste em estimar a diferença na energia cinética turbulenta ( $\Delta\bar{k}$ ) em cada simulação utilizando como referência ( $k_{l,ref}$ ) os resultados obtidos com a correlação de Zhang e Vanderheyden (2002). Segundo Pang e Wei (2011) e Tabib *et al.* (2008), esta correlação apresenta bons resultados para escoamentos bifásicos em colunas de bolhas:

$$\Delta\bar{k} = \frac{\sum (|k_l - k_{l,ref}| V_l)}{\sum (V_l)}. \quad (31)$$

Os valores mais elevados de  $\Delta\bar{k}$  indicam que a distribuição da energia cinética turbulenta entre duas simulações diverge significativamente.

## 4.2 MÉTODOS NUMÉRICOS

Como apresentado no item 4.1, o modelo matemático que representa a física do escoamento gás-líquido em um reator anaeróbio sequencial em batelada está baseado em um sistema de Equações Diferenciais Parciais (EDP).

Devido à natureza não linear destas equações, faz-se necessária uma aproximação numérica através da discretização do domínio de cálculo, e integração das equações diferenciais. Este procedimento transforma as equações diferenciais em um domínio contínuo em equações algébricas em um domínio discreto. Na forma generalizada, a equação de transporte de uma variável  $\varphi$  pode ser escrita na forma apresentada na equação:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) + \nabla \cdot (\rho U \varphi) = \nabla \cdot (\Gamma^\varphi \nabla \varphi) + S^\varphi(\varphi), \quad (32)$$

onde  $\Gamma$  é a difusividade e  $S^\varphi(\varphi)$  é o termo fonte.

A necessidade de resolver as equações algébricas no domínio discreto obriga a ter o domínio de cálculo dividido em um número finito de volumes de controle, dando origem à malha numérica. O método utilizado pelo programa computacional OpenFOAM, para a solução das equações de transporte, é o Método dos Volumes Finitos (MVF), conforme descrito por Patankar (1980) e Maliska (1995). Neste, as equações diferenciais são integradas para o volume de controle ( $V_p$ ), a fim de obter valores médios de  $\varphi$  para cada volume de controle:

$$\int_t^{t+\delta t} \left[ \int_{V_p} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) dV + \int_{V_p} \nabla \cdot (\rho \vec{U} \varphi) dV \right] dt = \int_t^{t+\delta t} \left[ \int_{V_p} \nabla \cdot (\Gamma^\varphi \nabla \varphi) dV + \int_{V_p} S^\varphi(\varphi) dV \right] dt. \quad (33)$$

Para os termos convectivo e difusivo presentes na Equação 33, os quais possuem o operador divergente, faz-se necessário aplicar o Teorema de Gauss:

$$\int_{V_p} (\nabla \cdot \varphi) dV = \int_S dS \cdot \varphi. \quad (34)$$

Com isto, a equação diferencial parcial original (Equação 32) resulta em um sistema de equações algébricas, que podem ser resolvidas numericamente, e resultam em valores de  $\varphi^n$  para cada volume de controle no domínio discreto, conforme a equação:

$$\frac{\rho_P^n \varphi_P^n - \rho_P^0 \varphi_P^0}{\Delta t} V_P + \sum_f S \cdot (\rho U)_f \varphi_f = \sum_f \Gamma_f^\varphi S \cdot (\nabla \varphi)_f + S_I^\varphi V_P \varphi_P + S_E^\varphi V_P. \quad (35)$$

Na Equação 35, variáveis marcadas com o subscrito  $f$  referem-se a valores nas faces do volume de controle. Uma vez que as variáveis são armazenadas nos centros dos volumes de controle, há a necessidade de se obter os valores nas faces através de interpolação. No simulador utilizado (*twoPhaseEulerFoam*), disponibilizado pelo código OpenFOAM, há uma lista abrangente de esquemas de interpolação e sua escolha depende da acurácia, estabilidade numérica e das características apresentadas e necessárias de cada problema. Neste trabalho, foi utilizado um esquema linear para operadores gradientes e divergentes e um esquema implícito de Euler para a derivada temporal de primeira ordem (Rusche, 2002; OpenFOAM, 2013).

O sistema de equações algébricas lineares, dado em forma matricial, é resolvido parcialmente a cada iteração, partindo de uma estimativa inicial e obtendo uma resposta mais próxima da solução. Assim, várias iterações são necessárias até atingir a convergência, ou seja, para que a diferença entre a solução obtida e a solução real seja satisfatória. Como critério de convergência manteve-se o resíduo total abaixo de  $10^{-5}$  e como critério de estabilidade o número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) apresentado por Courant *et al.* (1967) abaixo de 1 durante as simulações.

$$CFL = U \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad (36)$$

onde  $U$  representa a velocidade da mistura da fase líquida,  $\Delta t$  o incremento de tempo e  $\Delta x$  o tamanho do volume de controle.

A resolução de cada variável se dá a partir de um *solver* capaz de lidar com a matriz de coeficientes que representa o conjunto das equações algébricas. A pressão foi solucionada

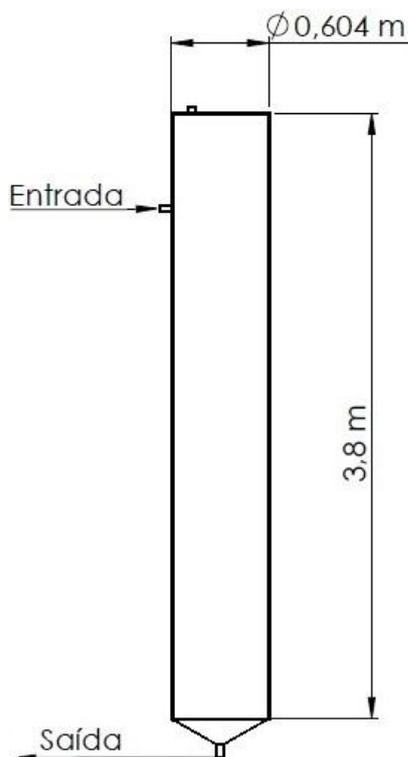
através do *solver* "Geometric-Algebraic Multi-Grid" (GAMG), a energia cinética turbulenta e a sua dissipação através do *solver* "Preconditioned Bi-Conjugate Gradient" (PBiCG) e a fração volumétrica através do *solver* "Conjugated Gradient" (PCG). Para resolver o problema de acoplamento entre os campos de pressão e velocidade, utilizou-se uma mescla entre os algoritmos SIMPLE e PISO.

### 4.3 CONSTRUÇÃO DA GEOMETRIA

Em CFD, a determinação e geração da geometria podem ser consideradas as etapas iniciais do trabalho. A geometria compreende o domínio físico de cálculo e deve ser gerada a partir de uma observação criteriosa do sistema a ser simulado. Uma geometria contendo poucos detalhes, ou seja, omitindo partes características importantes, pode levar a simulação a obter resultados inconsistentes com a realidade, enquanto que, uma geometria extremamente detalhada pode tornar o trabalho em uma simulação de difícil execução ou até mesmo impossível de ser realizada (Fontoura, 2013).

Neste trabalho utilizou-se a geometria tridimensional de um biorreator anaeróbio sequencial em batelada, localizado atualmente em uma planta industrial na cidade de Campinas. Este equipamento de aço inoxidável tipo 304 apresenta diâmetro interno de 0,604 m, altura de 3,8 m e uma capacidade total de 1 m<sup>3</sup>. A tubulação de recirculação apresenta um diâmetro interno de 0,04 m. Um diagrama esquemático do biorreator é mostrado na Figura 5.

Após a construção da geometria foi necessário identificar corretamente as superfícies externas para as condições de contorno do problema, localizando a posição da entrada, saídas e paredes. Ao final desta etapa iniciou-se a fase de geração da malha numérica.



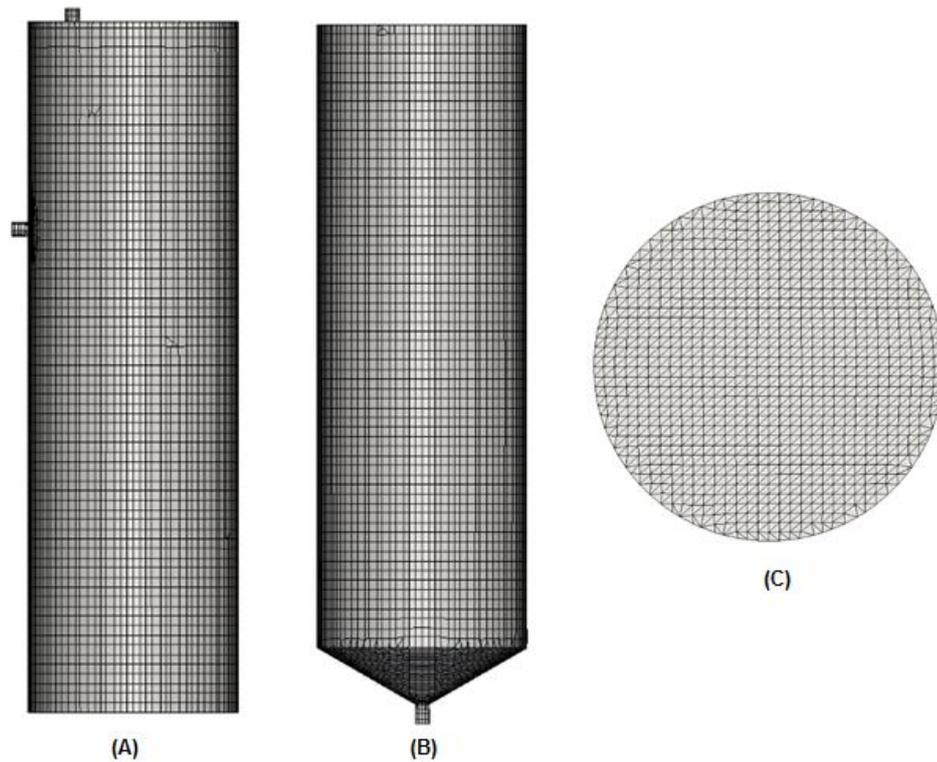
**Figura 5.** Diagrama esquemático do biorreator com recirculação descendente.

#### 4.4 MALHA NUMÉRICA

Um dos principais problemas envolvendo simulações é a obtenção de uma malha numérica que permita a simulação do equipamento real sem um consumo excessivo dos recursos computacionais (Rosa, 2002).

Na medida em que se aumentam o número de pontos discretos em uma malha, chega-se mais próximo da solução exata (Patankar, 1980). Porém, ao refinar-se a malha, mais pontos estão presentes e maior é o número de equações algébricas. Como consequência, é necessário um maior poder computacional e um maior tempo de simulação para manter o número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) abaixo de 1 durante as simulações.

Devido a esta condição, malhas com diferente quantidade de volumes de controle foram testadas para verificar a independência de malha, determinando-se que uma malha contendo 130.000 elementos é suficientemente refinada para prever corretamente o comportamento do escoamento no interior do biorreator. Detalhes desta malha junto à seção superior, inferior e transversal do biorreator são mostrados nas Figuras 6A, 6B e 6C respectivamente.



**Figura 6.** Malha utilizada na simulação contendo 130.000 volumes de controle: (A) seção superior do reator; (B) seção inferior e (C) corte transversal.

#### 4.5 CONDIÇÕES UTILIZADAS NAS SIMULAÇÕES

As propriedades físicas da fase contínua são caracterizadas por um fluido reologicamente semelhante à mistura entre a cultura microbiana e o substrato, composto pelo vinhoto descartado em usinas convencionais de açúcar e álcool e pela glicerina descartada em unidades de biodiesel. A fase dispersa apresenta as propriedades do biogás.

Este estudo desconsidera as reações de fermentação e a fase dispersa foi caracterizada, de acordo com Ding *et al.* (2010), por bolhas esféricas com diâmetro de 1 mm.

O biorreator opera atualmente com uma vazão de recirculação descendente, igual a  $0,0015 \text{ m}^3/\text{s}$ . Esta condição foi inicialmente adotada para as simulações, conduzidas em paralelo em uma *workstation* HP Z600. Foi estipulado um tempo de simulação igual a 300 s, independente do tempo de processamento, este regulado pelo número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

Este tempo está baseado em testes preliminares com uma malha bidimensional não uniforme, que determinou 200 s como o tempo necessário para que o biorreator se encontre em movimento pseudo-estacionário, isto é, com variações cíclicas do escoamento ao longo do

## 4 SIMULAÇÕES

tempo. A partir deste tempo, outros 100 s foram calculados, a fim de obter os valores médios dos resultados transientes, apresentados neste trabalho. Após este teste inicial, todas as simulações apresentadas foram obtidas com uma malha tridimensional não uniforme.

A Tabela 2 apresenta as condições de contorno e as propriedades físicas empregadas nos casos propostos.

**Tabela 2.** Condições de contorno e propriedades físicas empregadas nas simulações numéricas.

<b>Condições de Contorno</b>		
<b>Entrada</b>	Vazão da fase contínua: $0,0015 \text{ m}^3/\text{s}$	
<b>Saída</b>	101325 Pa	
<b>Parede</b>	Superfície lisa, não deslizamento para as duas fases	
<b>Propriedades Físicas</b>		
<b>Fase</b>	<b>Massa Específica</b>	<b>Viscosidade Cinemática</b>
<b>Dispersa (gás)</b>	$0,089 \text{ kg.m}^{-3}$	$8,4 \times 10^{-6} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$
<b>Contínua (líquido)</b>	$1009,7 \text{ kg.m}^{-3}$	$1,0 \times 10^{-6} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$
<b>Diâmetro das Bolhas</b>	0,001 m	
<b>Tensão superficial</b>	0,072 N/m	

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, apresenta-se a discussão dos resultados obtidos na pesquisa. Primeiramente, descreve-se o processo de determinação do refinamento necessário para a malha numérica, uma vez que ela é crucial para o desenvolvimento das demais etapas. Em seguida, avaliou-se a influência da alteração na direção de recirculação e do aumento da vazão de entrada na mistura do biorreator. Após, realizou-se o estudo relacionado às diferentes forças que são sugeridas na literatura para representar os fenômenos na interface de um escoamento gás-líquido. Por fim, a influência de diferentes configurações de alimentação foi avaliada a fim de aumentar a produção de hidrogênio no biorreator. Os resultados apresentados a seguir referem-se a valores obtidos com médias temporais, calculadas entre 200 e 300 s de escoamento.

### 5.1 TESTES PRELIMINARES

Inicialmente foram realizados testes de independência de malha, a fim de obter aquela cujo número de volumes de controle seja o menor possível sem acarretar em grandes erros numéricos.

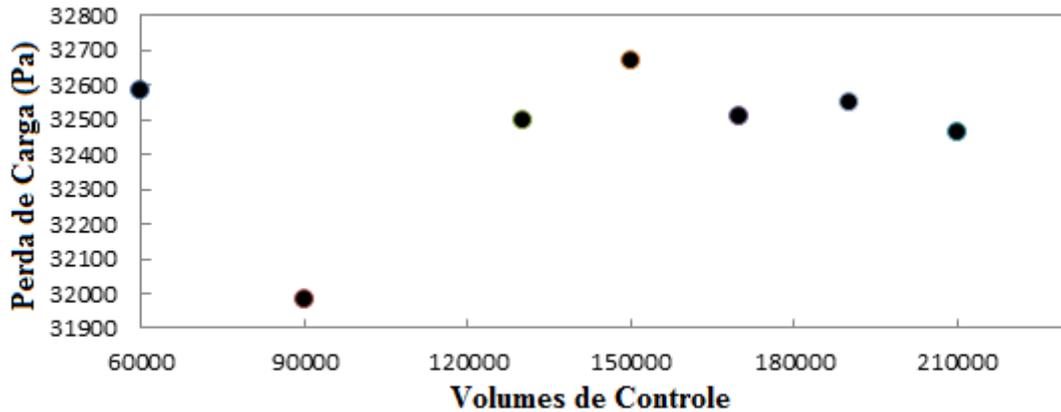
Sete malhas (com aproximadamente 60000, 90000, 130000, 150000, 170000, 190000 e 210000 volumes de controle) foram testadas através de simulações bifásicas gás-líquido. Dentre as forças interfaciais, considerou-se apenas a força de arraste, empregando-se a correlação de Schiller e Naumann (1935).

Para definição da malha ideal, analisou-se a perda de carga em função do número de volumes de controle da malha numérica, além do perfil de velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada  $X$  (radial) na altura de 2 m. Foi também avaliado o "Índice de Convergência da Malha" (GCI), que consiste na estimativa dos erros de discretização associados à simulação em CFD, principalmente quando os dados experimentais não estão disponíveis para comparação. Este método é aceito e recomendável para medir o erro inerente à malha numérica, conforme definido por Roache (1997).

A Figura 7 apresenta a diferença de pressão observada entre a entrada e a saída do reator, em função do número de volumes de controle do biorreator. Notam-se valores bastante elevados, pois as simulações levam em consideração a altura da coluna de líquido. Malhas

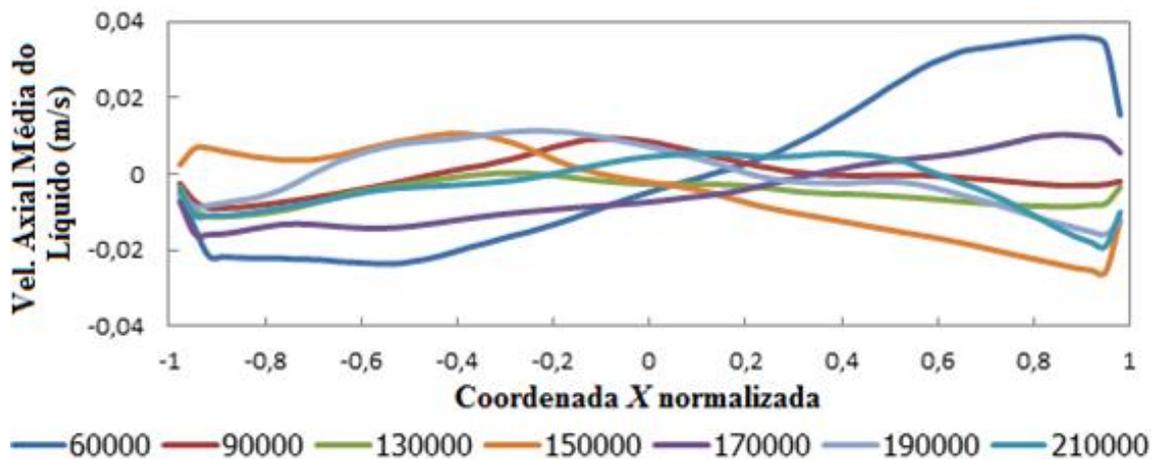
## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

com menos de 130000 volumes de controle, apresentam significativa influência do refinamento da malha sobre os valores da pressão.



**Figura 7.** Perda de carga em função do número de volumes de controle da malha numérica.

A Figura 8 apresenta o perfil de velocidade axial média do líquido na altura de 2 m. Observa-se que, as malhas com 60000 e 150000 volumes de controle apresentam uma discrepância em relação às demais malhas avaliadas.



**Figura 8.** Perfil da velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada X em 2 m de altura.

Avaliando-se os resultados apresentados, optou-se pela utilização da malha numérica composta por 130000 volumes de controle, uma vez que esta apresentou o comportamento próximo ao obtido com malhas mais refinadas, necessitando de um tempo computacional menor em relação a estas.

Para verificar a qualidade dos resultados obtidos com a malha escolhida, foi avaliado o seu índice de convergência (GCI). O GCI para malhas finas é definido pela equação de Roache (1997):

$$GCI_{fine}^{21} = \frac{1,25e_a^{21}}{r_{21}^p - 1}, \quad (37)$$

onde  $e_a^{21}$  é uma medida do erro relativo entre duas malhas,  $r$  é a relação de refinamento da malha e  $p$  a ordem do método de discretização. O erro relativo  $e_a^{21}$  é obtido através da seguinte equação:

$$e_a^{21} = \left| \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right|, \quad (38)$$

onde  $\phi_1$  é a solução numérica obtida com a malha refinada e  $\phi_2$  com a malha média. As relações de refinamento  $r_{21}$  e  $r_{32}$  são calculadas através das equações:

$$r_{21} = \frac{\left( \frac{1}{N_2} \sum V_l \right)^{1/3}}{\left( \frac{1}{N_1} \sum V_l \right)^{1/3}}, \quad (39)$$

$$r_{32} = \frac{\left( \frac{1}{N_3} \sum V_l \right)^{1/3}}{\left( \frac{1}{N_2} \sum V_l \right)^{1/3}}, \quad (40)$$

onde  $N_1$ ,  $N_2$  e  $N_3$  são respectivamente os volumes de controle das malhas fina, média e grosseira, e  $V_l$  é o volume de líquido em cada volume de controle.

O cálculo da ordem do método de discretização ( $p$ ) é realizado através da solução iterativa da equação:

$$p = \frac{1}{\ln(r_{21})} \left| \ln|e_{32}/e_{21}| + \ln \left( \frac{r_{21}^p - (1 \operatorname{sgn}(e_{32}/e_{21}))}{r_{32}^p - (1 \operatorname{sgn}(e_{32}/e_{21}))} \right) \right|, \quad (41)$$

onde  $e_{32} = \phi_3 - \phi_2$  e  $e_{21} = \phi_2 - \phi_1$ .

O erro inerente à malha de 130.000 volumes foi de 2,34%, enquanto que para a malha de 210000 volumes foi de 1,53%. Esta diferença percentual confirma a escolha da malha de 130000 volumes de controle.

No Capítulo 4, onde é descrita a modelagem utilizada para as simulações, é admitido que o escoamento encontra-se em regime turbulento, ou seja, para escoamentos em dutos cilíndricos tradicionalmente associa-se com um  $Re > 2100$ . O número de Reynolds é calculado de acordo com a seguinte equação:

$$Re = \frac{|U_t|D}{\nu_t}, \quad (42)$$

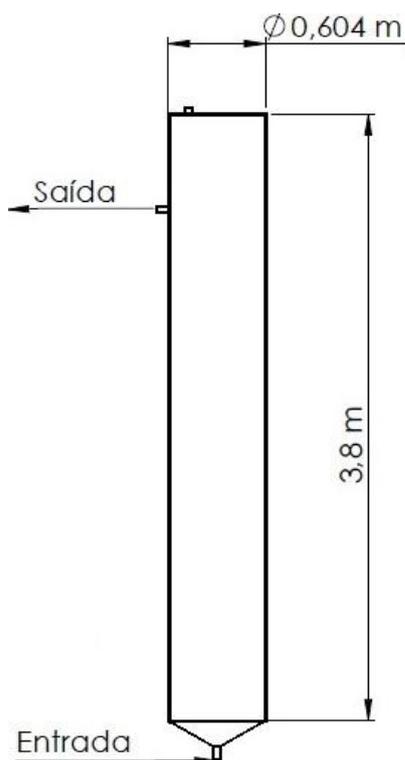
onde  $D$  é o diâmetro do reator. Nesta simulação verificou-se um  $Re > 3100$  para todo o reator com exceção de regiões muito próximas as paredes. Nestas regiões a malha apresenta o valor de  $y^+$  (medida adimensional da espessura dos volumes de controle junto às paredes do reator) igual a 32,5, que está de acordo com o recomendado para a simulação de casos turbulentos (Wilcox, 1998).

Com a confirmação da modelagem assumida para os cálculos, prossegue-se com a avaliação dos diferentes estudos de caso.

## 5.2 AVALIAÇÃO DA DIREÇÃO DE RECIRCULAÇÃO

Neste item são apresentados os resultados obtidos em dois estudos de caso: no primeiro mantêm-se as condições atuais de operação do biorreator, ou seja, recirculação no sentido descendente (Figura 5). No segundo, inverte-se a direção de recirculação e, conseqüentemente, o escoamento no interior do biorreator dá-se no sentido ascendente (Figura 9).

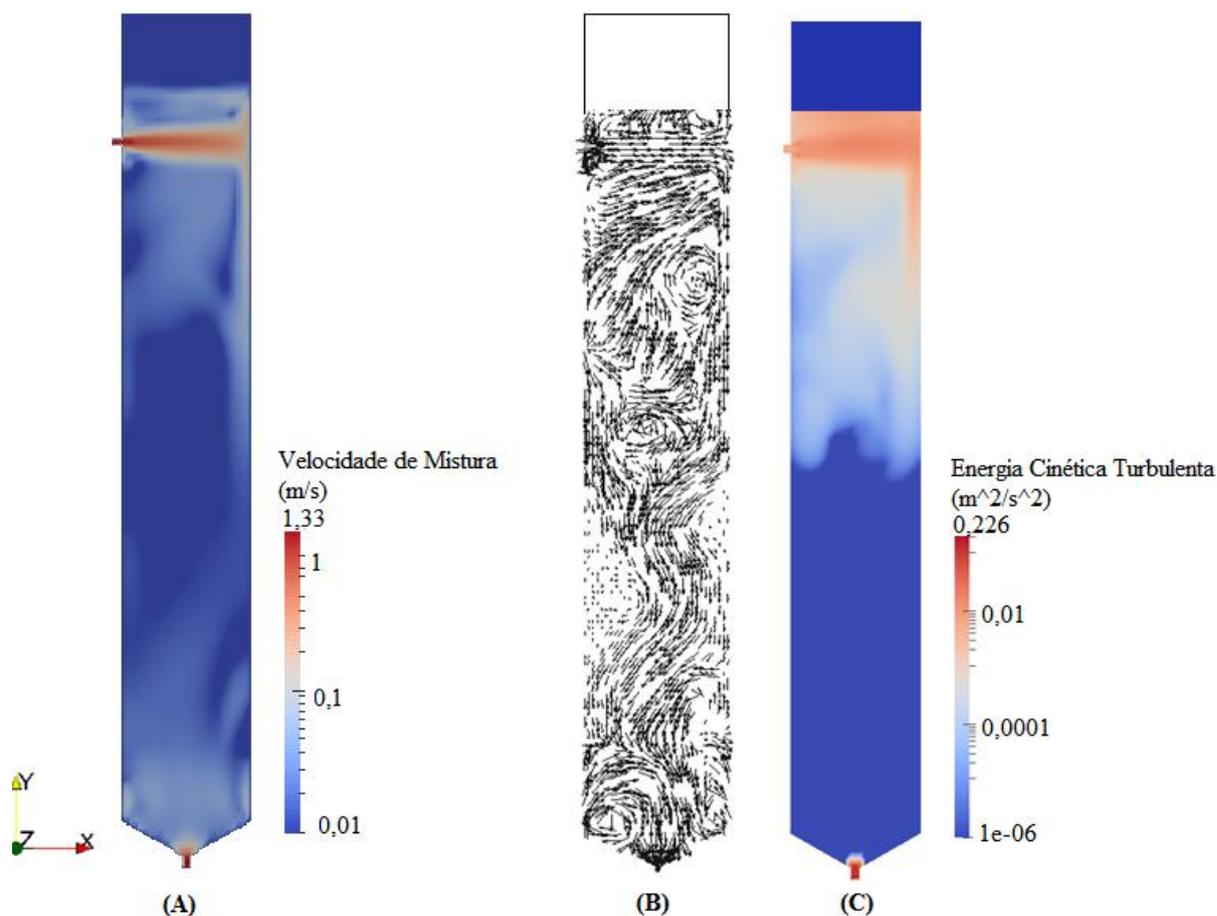
Devido à ausência de reações de fermentação, a fase dispersa é esperada somente na seção superior do biorreator, com a presença de bolhas na interface entre as fases dispersa e contínua. Com esta condição de operação, as forças de sustentação e de massa virtual foram negligenciadas e a interação gás-líquido foi modelada apenas pela força de arraste, empregando-se a correlação de Schiller e Naumann (1935). Em ambos os casos foi considerada a vazão de recirculação presente no reator em operação, igual a  $0,0015 \text{ m}^3/\text{s}$ .



**Figura 9.** Diagrama esquemático do biorreator com recirculação ascendente.

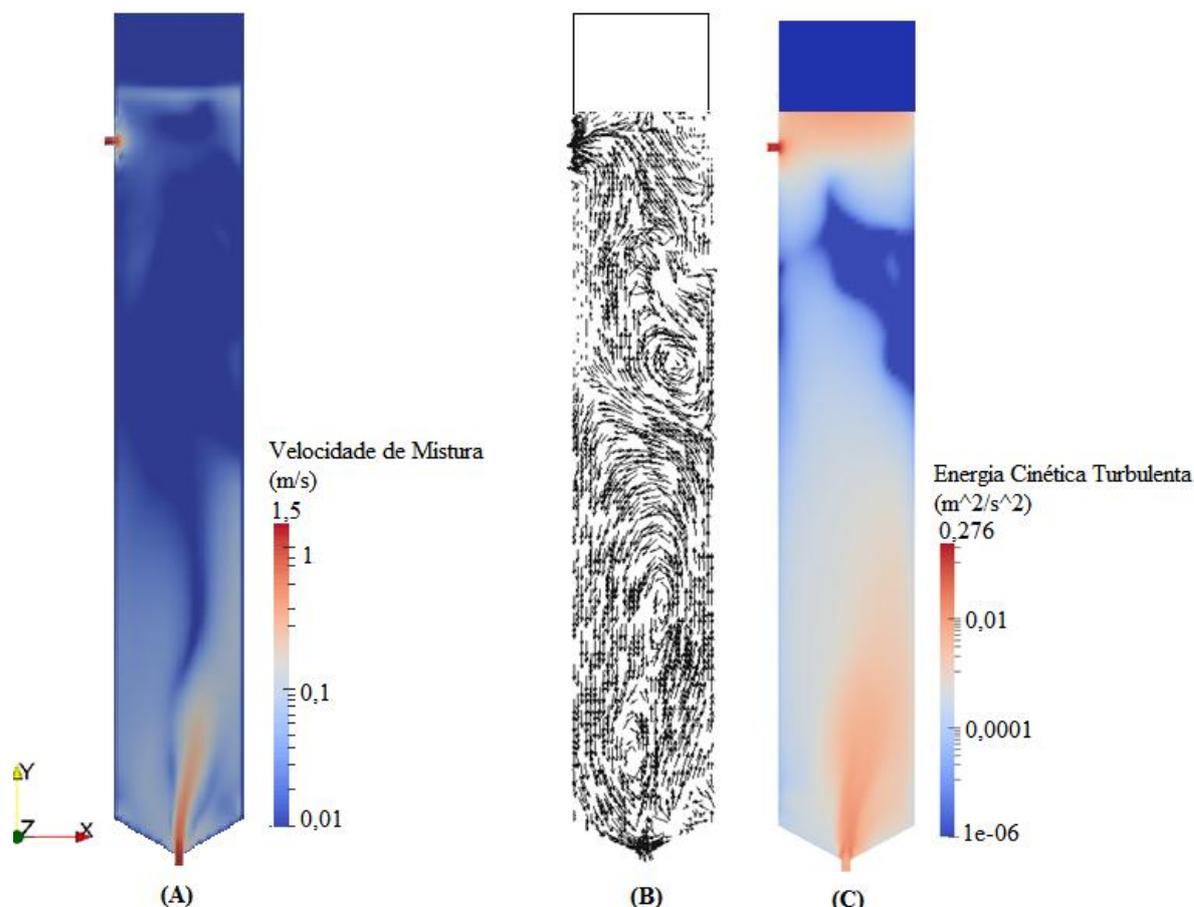
Os resultados obtidos com a simulação de recirculação descendente são apresentados na Figura 10. Observa-se na Figura 10A que a velocidade média temporal de mistura da fase líquida calculadas entre 200 e 300 s de escoamento é máxima (1,33 m/s) junto à entrada, na porção superior do equipamento. Valores altos para a velocidade também são observados junto à saída, na porção inferior do equipamento. Na maior parte do escoamento, a velocidade mantém-se abaixo de 0,10 m/s, sendo que, no percurso entre a entrada e a saída, o movimento apresenta uma grande quantidade de vórtices com exceção do jato de entrada (Figura 10B). Os vetores de velocidade foram suprimidos na porção superior por esta apresentar somente biogás, e normalizados (mesmo tamanho) para facilitar a sua visualização.

A energia cinética turbulenta também é maior junto à entrada do biorreator. Na Figura 10C, pode-se observar que a maior parte desta energia é dissipada na parede oposta à entrada. Isto resulta em uma menor turbulência sendo transportada através do biorreator. As velocidades baixas, associadas à análise da energia cinética turbulenta (Figura 10C) indicam uma baixa eficiência de mistura na porção inferior do biorreator.



**Figura 10.** Fase líquida com recirculação descendente e vazão de  $0,0015 \text{ m}^3/\text{s}$ : (A) velocidade média de mistura; (B) campo vetorial e (C) energia cinética turbulenta.

Na Figura 11 podem-se observar os resultados obtidos para a simulação com recirculação ascendente. Na parte superior do biorreator, a velocidade média temporal de mistura da fase líquida mantém-se igualmente abaixo de  $0,10 \text{ m/s}$ , porém é superior na porção inferior do equipamento. A velocidade máxima ( $1,50 \text{ m/s}$ ) é obtida junto à entrada do equipamento. Tal alteração implica em um aumento da turbulência na porção inferior do biorreator, permanecendo a mesma elevada também na porção superior (Figura 11C). A direção de entrada permite o transporte da energia cinética turbulenta ao longo do equipamento, sendo que a explicação para este fenômeno provém do fato de o jato de entrada perder parte de sua energia ao colidir com a parede do reator. Com isso, a simulação com recirculação ascendente indica uma melhora na mistura do biorreator.

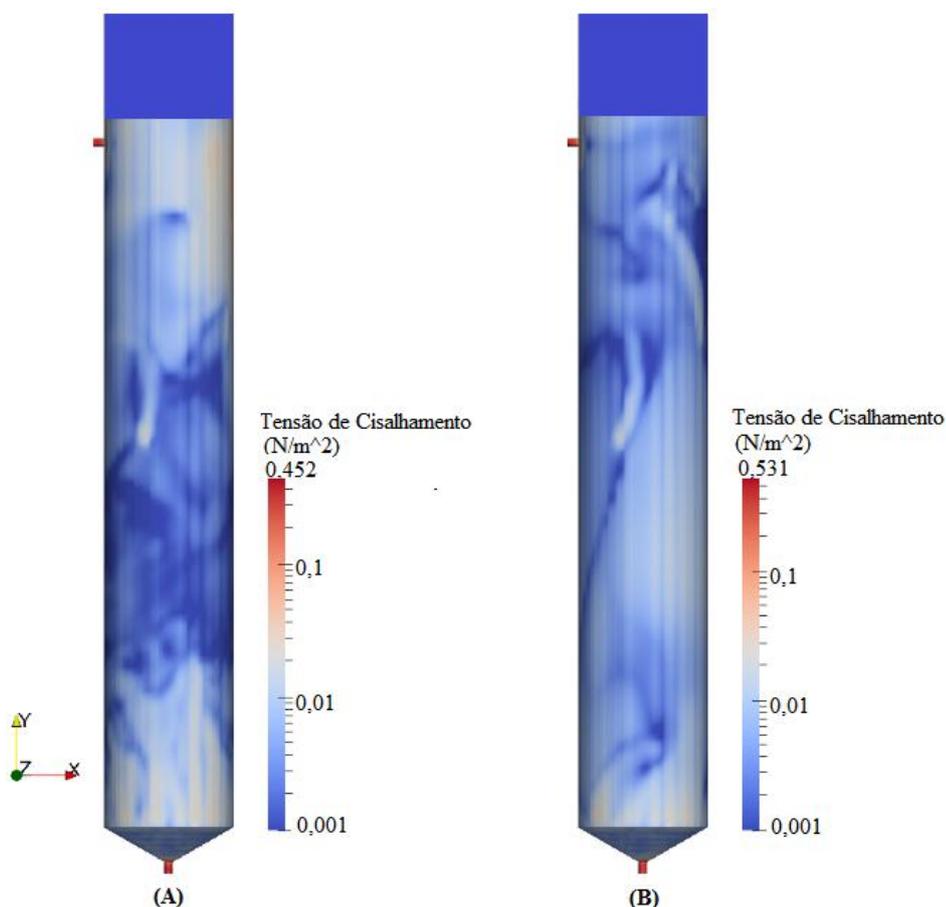


**Figura 11.** Fase líquida com recirculação ascendente e vazão de  $0,0015 \text{ m}^3/\text{s}$ : (A) velocidade média de mistura; (B) campo vetorial e (C) energia cinética turbulenta.

Como já mencionado no subitem 4.1.4, outro aspecto importante a se considerar é a tensão de cisalhamento. Velocidades de mistura mais elevadas podem inibir a atividade microbológica devido ao aumento da tensão de cisalhamento (Michelan *et al.*, 2009), causando a ruptura dos flocos e dificultando a sua separação do substrato (Bannari *et al.*, 2011).

Nurtono *et al.* (2012) sugerem como valor máximo aceitável  $0,66808 \text{ N}\cdot\text{m}^{-2}$  para a tensão de cisalhamento em cada volume de controle, a fim de preservar a integridade dos flocos. Na Figura 12, pode-se perceber que a tensão de cisalhamento máxima junto às paredes permanece muito abaixo deste limite. Percebe-se também que os dois pontos mais críticos estão localizados junto à tubulação de entrada, onde se obtém os valores máximos de  $0,452$  e  $0,531 \text{ N}\cdot\text{m}^{-2}$  para a recirculação descendente e ascendente, respectivamente. Em ambos os casos, a tensão de cisalhamento está abaixo do limite sugerido. Dessa maneira, é possível

afirmar que a operação com recirculação ascendente proporciona um melhor desempenho do biorreator, sem comprometer a atividade microbiológica.



**Figura 12.** Tensão de cisalhamento máxima para (A) regime descendente e (B) regime ascendente.

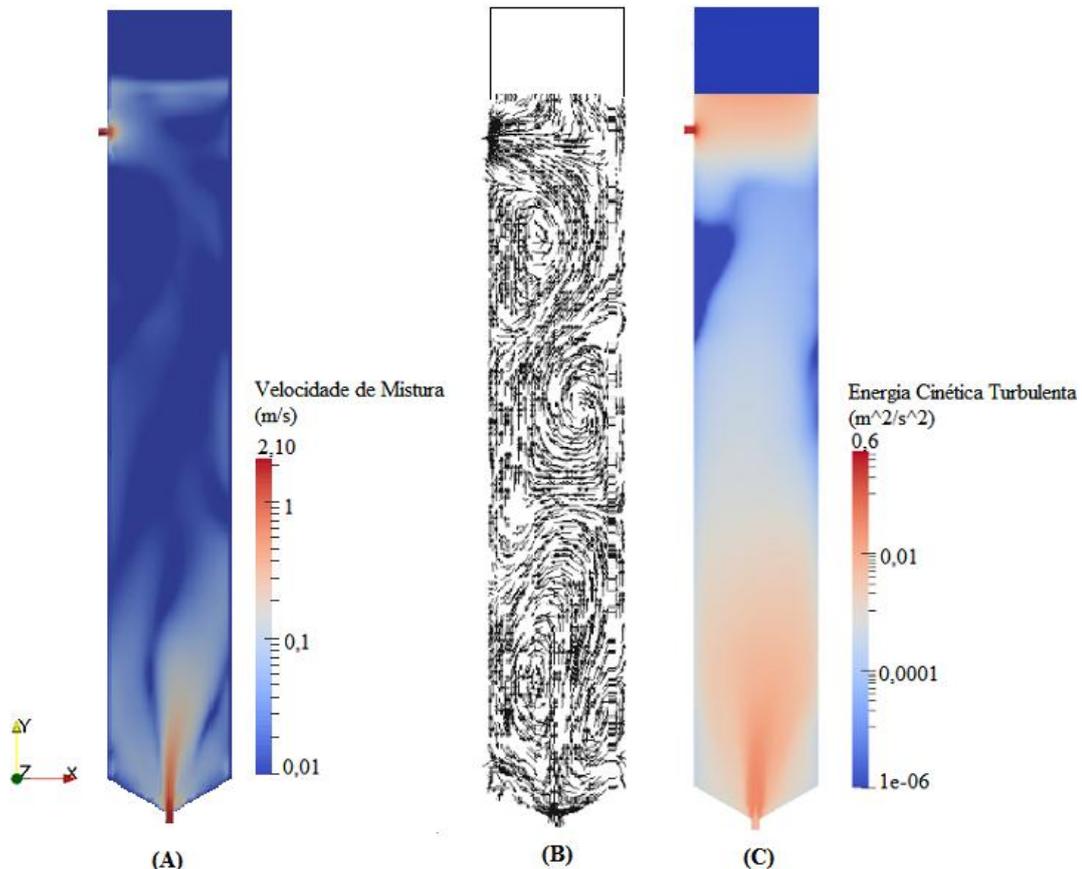
Os resultados obtidos indicam que, apenas com a mudança no sentido do escoamento, de descendente para ascendente, pode-se melhorar a mistura no interior do biorreator. A simulação de escoamento com recirculação ascendente mostrou uma maior energia cinética turbulenta no equipamento, o que indica uma melhor mistura e possivelmente uma maior produção de hidrogênio. Observou-se, também, um campo vetorial sem a presença de caminhos preferenciais para ambos os casos, característico de escoamentos turbulentos. Por fim, verificou-se que os valores máximos de tensão de cisalhamento mantiveram-se abaixo do limite proposto para ambas as simulações.

## 5.3 AVALIAÇÃO DA VAZÃO DE RECIRCULAÇÃO

De acordo com o item 5.2, a recirculação no sentido ascendente proporciona uma melhor mistura no interior do biorreator. Esta condição foi adotada na avaliação de diferentes vazões de recirculação. Duas novas simulações com vazões de  $0,00225$  e  $0,0030$   $\text{m}^3/\text{s}$ , que representam um incremento de 50% e 100% sobre a vazão anterior ( $0,0015$   $\text{m}^3/\text{s}$ ), foram realizadas. A fase dispersa tem as propriedades físicas do biogás e, novamente, é esperada somente na seção superior do biorreator, sendo a interface gás-líquido modelada apenas pela força de arraste, empregando-se a correlação de Schiller e Naumann (1935).

Na Figura 11, observou-se que embora a recirculação no sentido ascendente melhore significativamente a mistura, o mesmo apresenta baixos valores de velocidade para a fase líquida no interior do biorreator (Figura 11A), o que associado à análise da energia cinética turbulenta (Figura 11C) indica áreas de baixa eficiência de mistura, principalmente na porção superior do equipamento.

A Figura 13 apresenta os valores obtidos para a vazão de recirculação igual a  $0,00225$   $\text{m}^3/\text{s}$ .

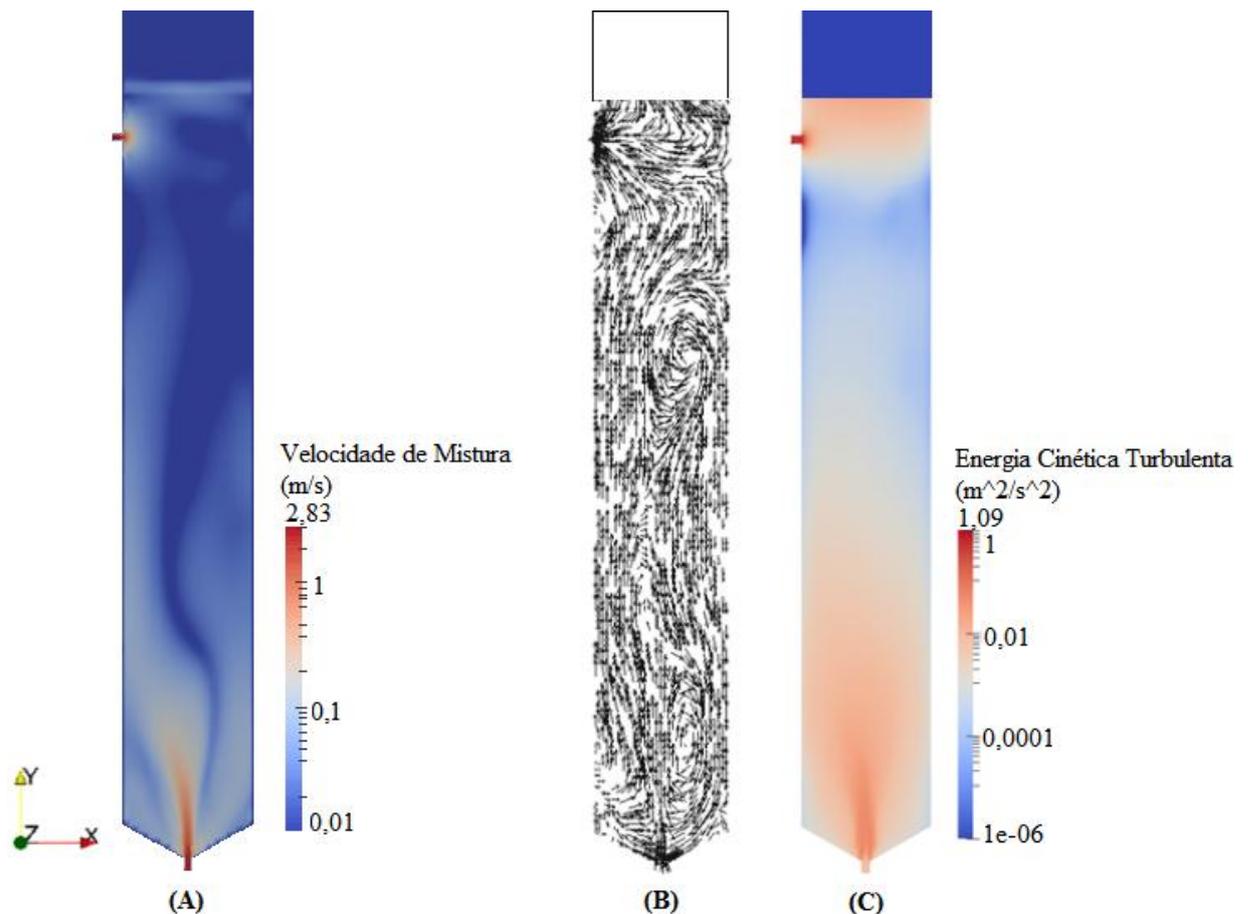


**Figura 13.** Fase líquida com recirculação ascendente e vazão de  $0,00225$   $\text{m}^3/\text{s}$ : (A) velocidade média de mistura; (B) campo vetorial e (C) energia cinética turbulenta.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Em comparação com a Figura 11, observa-se que este incremento de 50% sobre a vazão anterior provoca um aumento na velocidade de mistura ao longo de todo o reator, evidenciado pelo valor máximo (2,10 m/s) encontrado junto à tubulação de entrada. A análise da energia cinética turbulenta também indica uma melhoria na eficiência de mistura, porém evidencia a existência de "zonas mortas" na porção superior do biorreator.

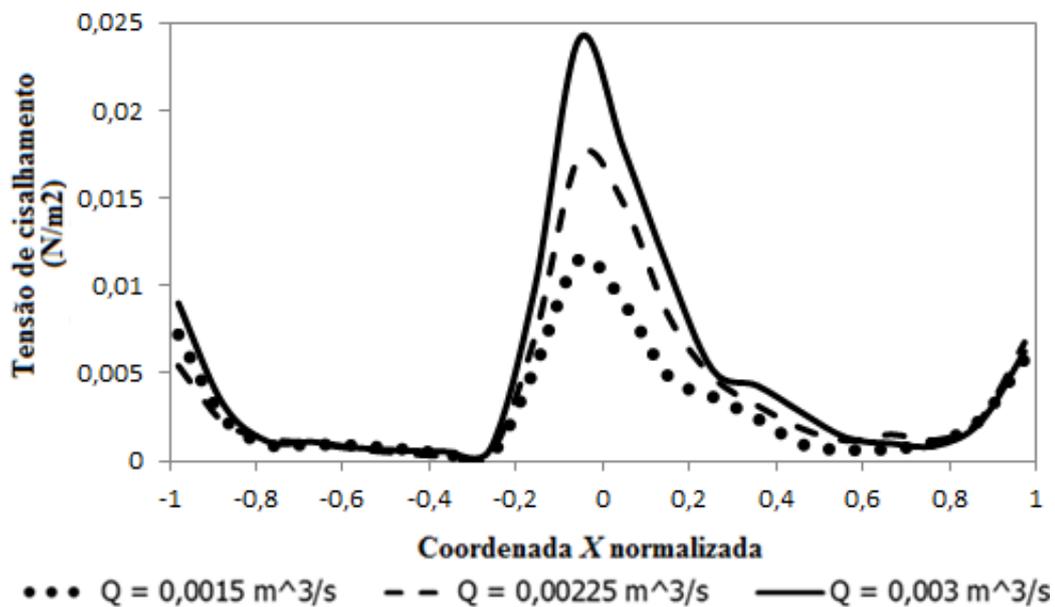
Os resultados para a simulação com a maior vazão de recirculação ( $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$ ) são apresentados na Figura 14. Ao dobrar a vazão inicial, a velocidade de mistura no interior do biorreator aumenta, atingindo o valor máximo de 2,83 m/s. O escoamento no seu interior é caracterizado pela presença de menos vórtices que nos casos anteriores e pela redução nos caminhos preferenciais (Figura 14B). Os valores de energia cinética turbulenta são mais elevados em todo o biorreator, inclusive na porção superior, evidenciado a diminuição das "zonas mortas" e proporcionando desta forma uma melhor mistura em todo o reator.



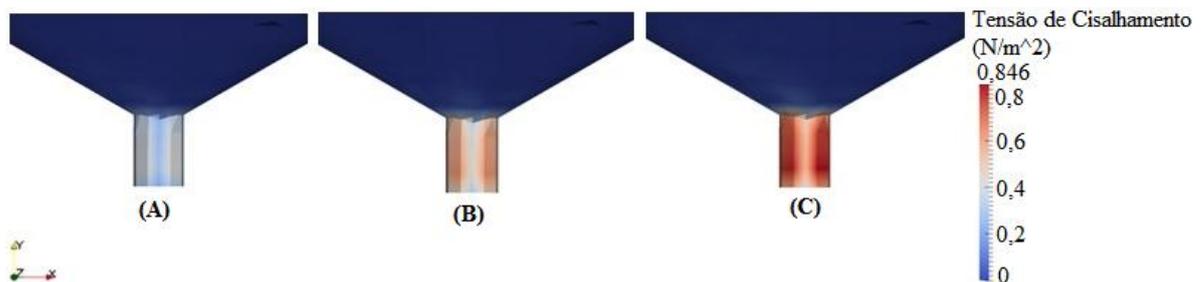
**Figura 14.** Fase líquida com recirculação ascendente e vazão de  $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$ : (A) velocidade média de mistura; (B) campo vetorial e (C) energia cinética turbulenta.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com o aumento da vazão de recirculação, uma atenção ainda maior deve ser dada à tensão de cisalhamento máxima, a fim de evitar a ruptura dos flocos que servem como suporte para a atividade microbiana. A Figura 15 apresenta os valores da tensão de cisalhamento máxima (Equação 28) em função da coordenada  $X$  (radial) na altura de 2 m. Estes valores são significativos para a maior parte do equipamento e situam-se abaixo do limite estabelecido por Nurtono *et al.* (2012) de  $0,66808 \text{ N m}^{-2}$ . No entanto, como pode ser visto na Figura 16, os valores máximos foram observados junto à tubulação de entrada, sendo respectivamente iguais a  $0,531$ ,  $0,635$  e  $0,846 \text{ N.m}^{-2}$  para as vazões de  $0,0015$ ,  $0,00225$  e  $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$ .



**Figura 15.** Tensão de cisalhamento máxima em função da coordenada  $X$  em 2 m de altura.



**Figura 16.** Tensão de cisalhamento máxima na tubulação de entrada: (A) vazão de  $0,0015 \text{ m}^3/\text{s}$ ; (B) vazão de  $0,00225 \text{ m}^3/\text{s}$  e (C) vazão de  $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$ .

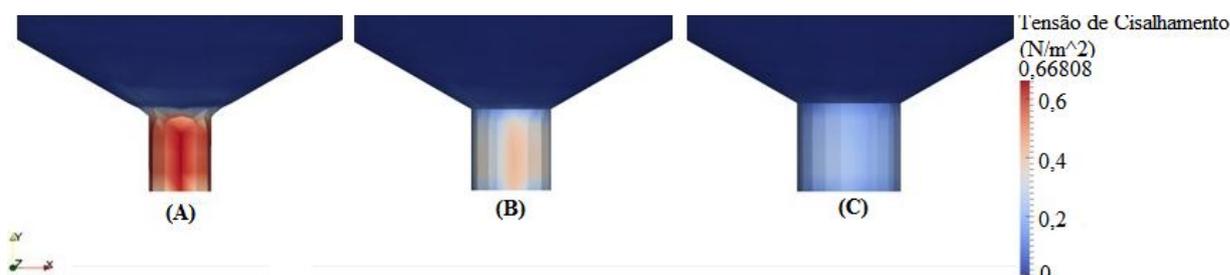
A simulação com a vazão de recirculação mais elevada ( $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$ ) pode provocar a degradação dos flocos, e, portanto um funcionamento ineficiente do biorreator. Este problema

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

pode ser contornado com a substituição das tubulações de recirculação atuais por tubulações de maior diâmetro. Assim, três novas simulações foram conduzidas, considerando um aumento de 20, 50 e 100% no diâmetro das tubulações e a maior vazão de recirculação, que propiciou a melhor mistura no reator. Os novos diâmetros apresentam respectivamente 0,048, 0,060 e 0,080 m.

Como pode ser visto na Figura 17A, a tubulação de recirculação com diâmetro de 0,048 m proporciona uma pequena redução na tensão de cisalhamento máxima, que continua acima do limite de  $0,66808 \text{ N m}^{-2}$ . As Figuras 17B e 17C apresentam os valores da tensão de cisalhamento máxima obtidos com os diâmetros de 0,060 e 0,080 m, respectivamente. Uma redução significativa da tensão de cisalhamento foi observada, ficando tais valores abaixo do limite proposto por Nurtono *et al.* (2012).

Sendo assim, a adoção da tubulação de recirculação com diâmetro de 0,060 m associado à vazão de  $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$ , propicia uma otimização da mistura no interior do biorreator sem comprometer a atividade microbológica.



**Figura 17.** Tensão de cisalhamento máxima na tubulação de entrada com vazão igual a  $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$ :  
(A) 0,048 m; (B) 0,060 m; e (C) 0,080 m.

### 5.4 AVALIAÇÃO DAS FORÇAS INTERFACIAIS

Nos resultados apresentados nos itens anteriores, a fase gasosa estava restrita à porção superior do biorreator, sendo assim, a única interação entre as fases se dava na interface da coluna líquida. Para as simulações a seguir, será determinado o escoamento com a presença de bolhas dispersas. Desta forma, a modelagem das forças interfaciais que atuam no escoamento bifásico gás-líquido, apresentada no subitem 4.1.2, é de extrema importância para capturar adequadamente os fenômenos físicos que ocorrem no interior do reator (Tabib *et al.*, 2008). Diversas forças foram propostas na tentativa de representar tais fenômenos, sendo que neste trabalho serão apresentadas e discutidas as forças de arraste, sustentação e massa virtual

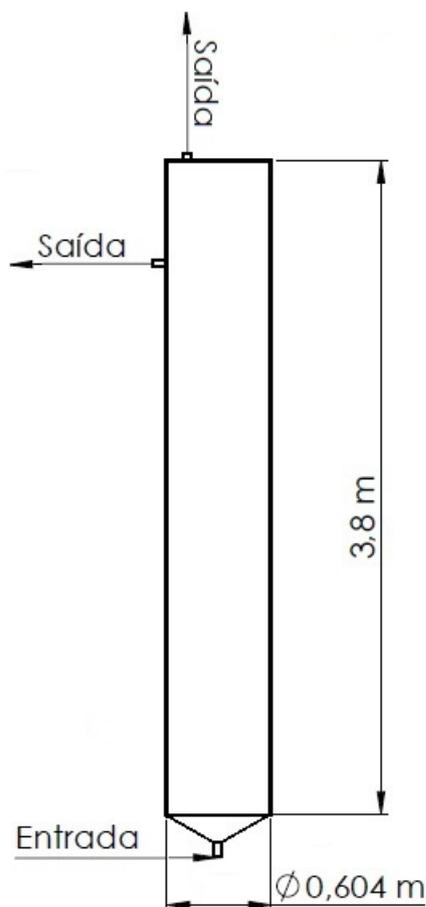
com suas respectivas correlações matemáticas. Apresenta-se neste item um estudo numérico de sensibilidade considerando diferentes forças e correlações.

Verifica-se na literatura que a magnitude da força de arraste é mais de 100 vezes superior a de outras forças interfaciais (Laborde-Boutet *et al.*, 2009). No entanto, em condições normais de pressão, as forças de sustentação e de massa virtual podem influenciar significativamente o movimento da fase dispersa (Pang *et al.*, 2010).

Tais afirmações levam, por consequência, a questionamentos quanto à relevância de cada uma das forças interfaciais para a física do problema em estudo. Neste sentido, quatorze casos foram comparados, assumindo que a fase dispersa apresenta as propriedades físicas do biogás, com bolhas esféricas e de diâmetro igual a 0,001 m, presentes inicialmente na seção superior do biorreator. Como não foram consideradas reações de fermentação, simulou-se a alimentação do biogás através de toda a base do equipamento, a fim de obter bolhas dispersas e poder, assim, avaliar sua interação. A alimentação do substrato, por sua vez, se deu pela tubulação de entrada na seção inferior do equipamento. Adotou-se a vazão de recirculação ascendente e igual a 0,00225 m<sup>3</sup>/s para o substrato e 8 m<sup>3</sup>/d para o biogás (similar a obtida no equipamento piloto) como condições de contorno. As saídas de ambas as fases estão localizadas na seção superior do biorreator. A Figura 18 apresenta um diagrama esquemático do biorreator utilizado na avaliação das diferentes forças interfaciais.

As cinco primeiras simulações consideraram apenas a presença da força de arraste, avaliando-se as diferentes correlações propostas. As simulações restantes adotaram a correlação de Zhang e Vanderheyden (2002) para a força de arraste. Quatro simulações foram realizadas incluindo diferentes correlações para estimar a força de sustentação. Uma simulação considerou as força de arraste e de massa virtual, e outra simulação as três forças. Por fim, as últimas quatro simulações consideraram a força de arraste, de arraste e sustentação, arraste e massa virtual e todas as três forças juntas, no caso de ambas as fases adentrarem ao biorreator através da tubulação de recirculação.

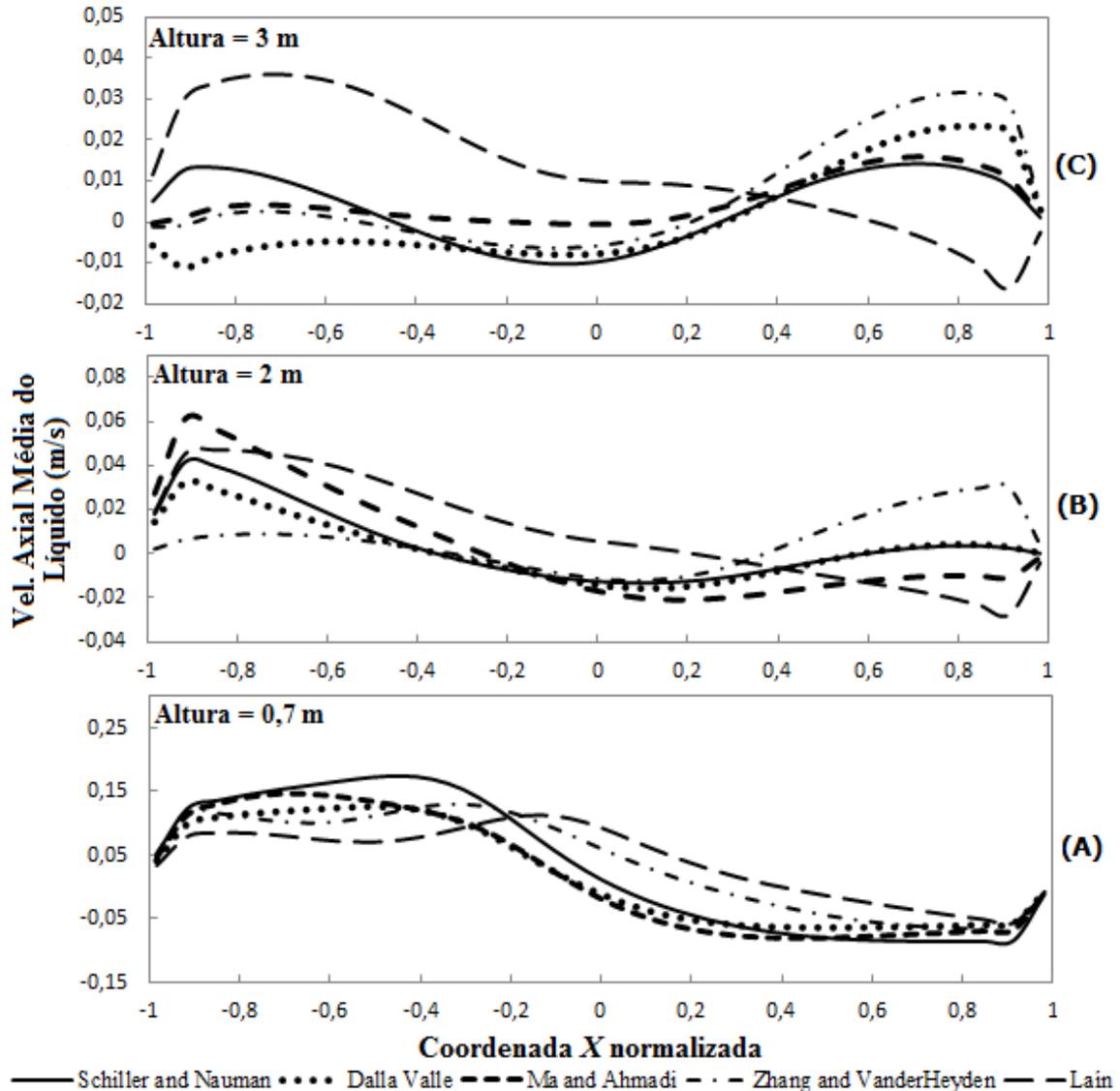
A correlação de Schiller e Naumann (1935) foi fornecida e já estava implementada no código OpenFOAM, bem como os valores constantes para  $C_L$  e  $C_{VM}$ . As demais correlações avaliadas neste trabalho foram incluídas pelo grupo de pesquisas do Laboratório de Tecnologias Ambientais (LATAM) da Universidade de Caxias do Sul (UCS) no código-fonte.



**Figura 18.** Diagrama esquemático do biorreator com duas saídas.

Cinco correlações foram utilizadas para estimar o coeficiente da força de arraste entre a mistura líquida e as bolhas esféricas: Schiller e Naumann (1935), Dalla Valle (1948), Ma e Ahmadi (1990), Zhang e Vanderheyden (2002) e Laín *et al.* (2002). As predições obtidas para o perfil de velocidade axial médio da fase líquida em função da coordenada  $X$  (radial) são apresentadas na Figura 19. Notam-se pequenas diferenças no padrão de escoamento em função das diferentes correlações de arraste.

Na altura de 0,7 m (Figura 19A), todos os perfis de velocidade obtidos apresentam um perfil similar, com valores maiores localizados entre o centro e o lado esquerdo do biorreator. A velocidade nesta região é fortemente influenciada pela vazão de entrada.



**Figura 19.** Perfil da velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada  $X$  para diferentes correlações de arraste: (A) 0,7 m; (B) 2 m e (C) 3 m.

Perfis de velocidade observados na altura de 2 m (Figura 19B) apresentam valores máximos junto às paredes do reator. No entanto, estes valores são muito pequenos quando comparados aos obtidos na altura de 0,7 m. Velocidades mais baixas também podem ser observadas na região superior do reator, na altura de 3 m (Figura 19C). Nesta posição, a maioria das correlações testadas resulta em um comportamento similar, com velocidades mais elevadas no lado oposto a saída do reator. Os resultados obtidos com a correlação de Schiller e Naumann (1935) desviam deste padrão, apontando um perfil quase simétrico para a velocidade axial. A utilização da correlação de Laín *et al.* (2002) também resultou em um padrão de escoamento distinto, com velocidades mais elevadas junto a saída do reator. Deve-

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

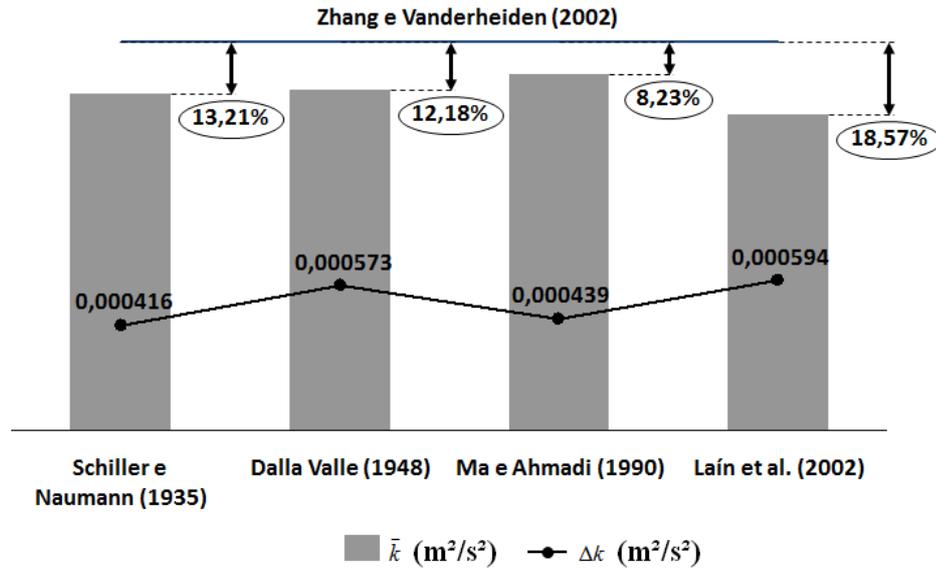
se ressaltar que os resultados obtidos referem-se a valores obtidos com médias temporais, calculadas entre 200 e 300 s de escoamento.

A mistura no interior do biorreator pode ser avaliada através do cálculo da energia cinética turbulenta. A Tabela 3 e a Figura 20 resumem as propriedades definidas pelas Equações 30 e 31.

**Tabela 3.** Campos médios de energia cinética turbulenta para diferentes correlações de arraste.

Correlação	$\bar{k}$ (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )	Diferença % de $\bar{k}$	$\overline{\Delta k}$ (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )
Schiller e Naumann (1935)	0,001329	-13,21%	0,000416
Dalla Valle (1948)	0,001345	-12,18%	0,000573
Ma e Ahmadi (1990)	0,001406	-8,23%	0,000439
Zhang e Vanderheyden (2002)	0,001532	–	–
Laín <i>et al.</i> (2002)	0,001247	-18,57%	0,000594

Verificam-se desvios significativos na média ponderada da energia cinética turbulenta ( $\bar{k}$ ) para as diferentes correlações de arraste. A correlação de Laín *et al.* (2002) fornece o menor valor de  $\bar{k}$  dentre as correlações avaliadas. A análise de  $\overline{\Delta k}$  confirma que o campo médio de energia cinética turbulenta previsto com a correlação de Laín *et al.* (2002) diverge significativamente dos valores obtidos com a correlação de Zhang e Vanderheyden (2002). Uma explicação para esta diferença reside no fato de os valores de  $C_D$  tenderem a  $16/\text{Re}_b$  quando a correlação de Laín *et al.* (2002) é aplicada na região de Stokes (Pang e Wei, 2011). Por sua vez, os valores de  $C_D$  obtidos com a correlação de Zhang e Vanderheyden (2002) tendem a  $24/\text{Re}_b$  nesta região. Vale ressaltar que o escoamento no interior do biorreator apresenta valores para  $\text{Re}_b$  próximos a 106,20, embora valores menores possam ser encontrados junto às paredes e em regiões estagnadas.

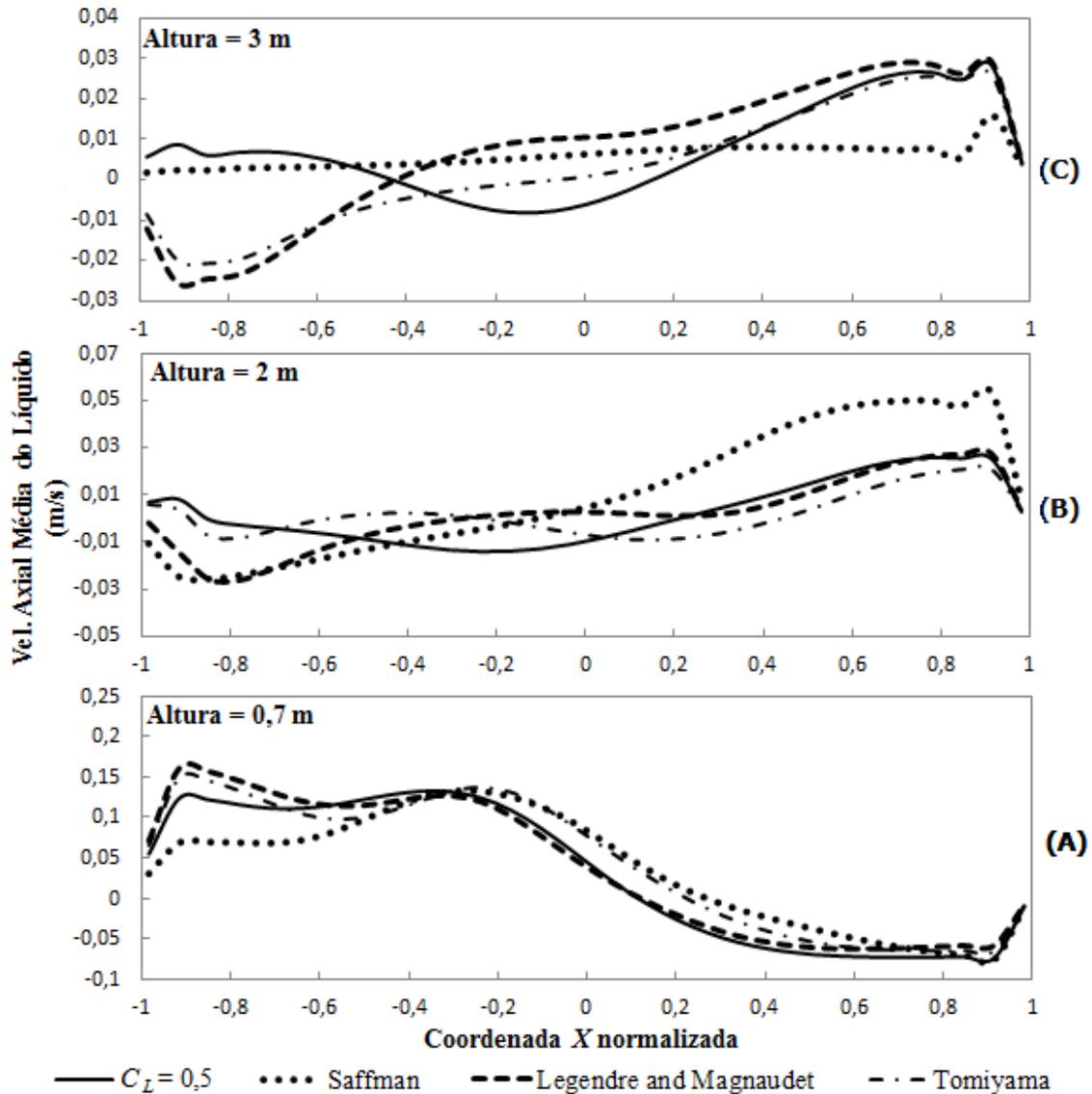


**Figura 20.** Desvios nos campos de energia cinética turbulenta para diferentes correlações de arraste.

Pequenas diferenças também foram encontradas ao utilizar outras correlações. No entanto, os valores da Tabela 3 confirmam o comportamento encontrado na Figura 19, com valores muito próximos para as correlações de Ma e Ahmadi (1990) e Zhang e Vanderheyden (2002). Os valores obtidos com a correlação de Ma e Ahmadi (1990) tendem a  $24/\text{Re}_b$  na região de Stokes. Assim, pode-se concluir que a utilização de diferentes correlações de arraste pode alterar em até 18,57% os valores de  $\bar{k}$ , o que influencia significativamente no projeto de novos biorreatores (Figura 20).

Para estimar o efeito de diferentes coeficientes para a força de sustentação, quatro modelos foram considerados: um valor constante ( $C_L = 0,5$ ), e as correlações de Saffman (1965), Legendre e Magnaudet (1998) e Tomiyama *et al.* (2002). A correlação de Zhang e Vanderheyden (2002) foi mantida para estimar a força de arraste em todos os casos.

Os perfis de velocidade axial médio da fase líquida em função da coordenada  $X$  (radial), nas alturas de 0,7 m, 2 m e 3 m, são apresentados respectivamente nas Figuras 21A, 21B e 21C.



**Figura 21.** Perfil da velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada  $X$  para diferentes correlações de sustentação: (A) 0,7 m; (B) 2 m e (C) 3 m.

Na altura de 0,7 m a mistura líquida está próxima à região de entrada, portanto esperam-se gradientes de velocidade mais elevados, o que interfere nos cálculos da força de sustentação. Pode ser visto na Figura 21A que todas as correlações para estimar a força de sustentação fornecem valores similares. Pequenas diferenças são observadas no lado esquerdo do biorreator, quando utilizada a correlação de Saffman (1965).

Em alturas mais elevadas (Figuras 21B e 21C), a força de sustentação tende a perder sua intensidade e os resultados obtidos com diferentes correlações tendem a estar próximos. No entanto, as diferenças estão presentes, principalmente quando se compara um valor constante para  $C_L$  com a correlação de Saffman (1965). Utilizando  $C_L = 0,5$ , assume-se que a

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

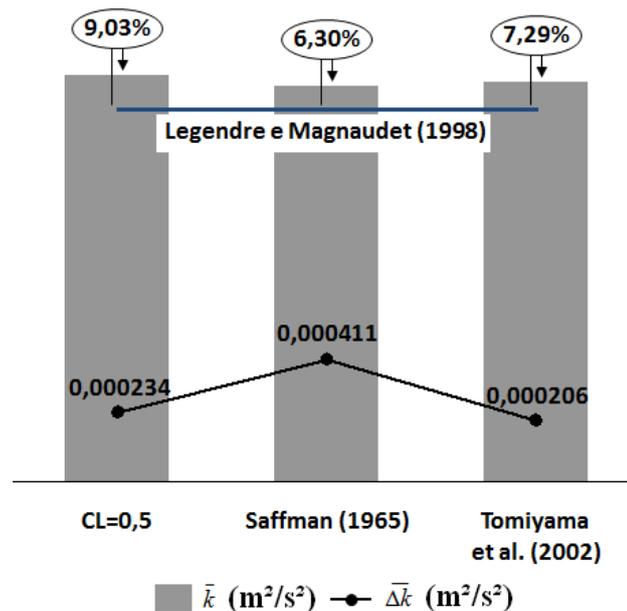
força de sustentação que atua sobre as bolhas tem a mesma intensidade independente do número de Reynolds da bolha ( $Re_b$ ). Isto resulta em diferentes estimativas para esta força, que são evidências em alturas mais elevadas. Os perfis de velocidade axial obtidos com a correlação de Saffman (1965) também diferem dos obtidos com as correlações de Legendre e Magnaudet (1998) e Tomiyama *et al.* (2002). A correlação de Saffman (1965) apresenta uma dependência do  $C_L$  em relação à tensão de cisalhamento, mesmo em elevados  $Re_b$ .

Um método utilizado para comparar os resultados foi calcular os campos médios de energia cinética turbulenta para as diferentes correlações da força de sustentação (Tabela 4 e Figura 22). A correlação de Legendre e Magnaudet (1998) fornece uma forte dependência, tanto para o número de Reynolds da bolha como para a tensão de cisalhamento (Hibiki e Ishii, 2007). Esta correlação foi utilizada como base para estimar as diferenças na energia cinética turbulenta em cada simulação.

**Tabela 4.** Campos médios de energia cinética turbulenta para diferentes correlações de sustentação.

Correlação	$\bar{k}$ (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )	Diferença % de $\bar{k}$	$\Delta\bar{k}$ (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )
$C_L = 0,5$	0,001376	+9,03%	0,000234
Saffman (1965)	0,001341	+6,30%	0,000411
Legendre e Magnaudet (1998)	0,001262	–	–
Tomiyama <i>et al.</i> (2002)	0,001354	+7,29%	0,000206

Na Tabela 4 e na Figura 22, observa-se que o uso de uma constante resultou na maior diferença (9,03%), o que pode ser ocasionado pelo fato da constante desconsiderar o  $Re_b$  no cálculo da força de sustentação. A correlação de Saffman (1965) apresenta dependência em relação à tensão de cisalhamento, independente do  $Re_b$ , resultando na maior diferença no campo médio de energia cinética turbulenta ( $\Delta\bar{k}$ ). O valor de  $\bar{k}$  obtido com esta correlação foi 6,30% superior ao obtido com a correlação de Legendre e Magnaudet (1998).

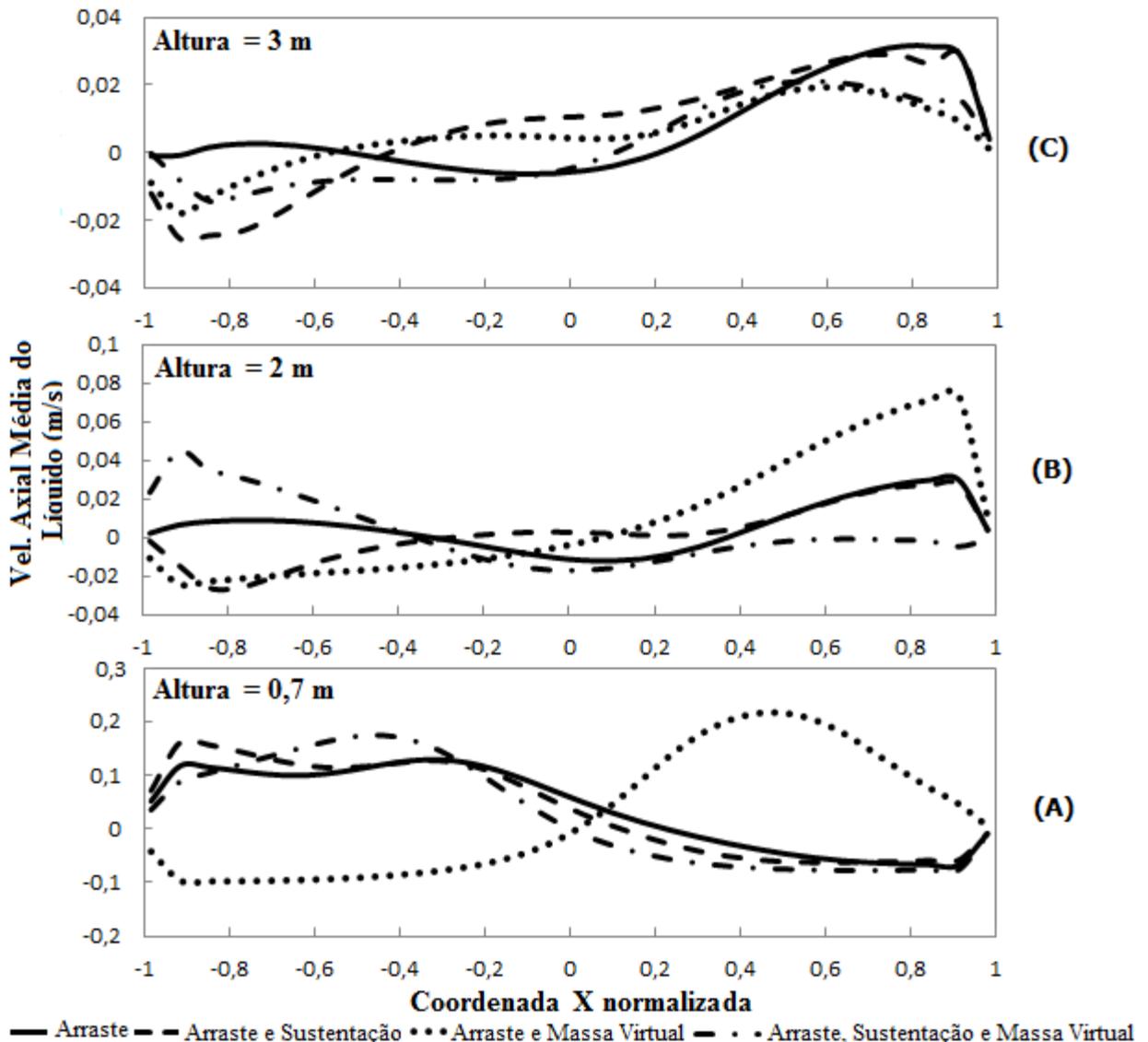


**Figura 22.** Desvios nos campos de energia cinética turbulenta para diferentes correlações de sustentação.

Sendo assim, verificou-se que diferentes correlações para o coeficiente de sustentação podem alterar em até 9,03% os valores da média ponderada da energia cinética turbulenta para o biorreator em estudo.

Demonstrou-se que os resultados obtidos para o biorreator em estudo podem ser significativamente influenciados pelas diferentes correlações de arraste e sustentação. Outro fator que influencia nos resultados são as diferentes forças escolhidas para representar os fenômenos físicos.

Foram comparadas simulações considerando apenas a força de arraste (calculado através da correlação de Zhang e Vanderheyden, 2002), as forças de arraste e de sustentação (incluindo a correlação de Legendre e Magnaudet, 1998), as forças de arraste e massa virtual (considerando um coeficiente constante  $C_{VM} = 0.5$ ), e a associação das três forças. Na Figura 23, são apresentados os perfis de velocidade axial médio da fase líquida em função da coordenada  $X$  (radial), nas alturas de 0,7 m, 2 m e 3 m.



**Figura 23.** Perfil da velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada X para diferentes forças interfaciais: (A) 0,7 m; (B) 2 m e (C) 3 m.

Próximo à seção inferior do biorreator, na altura de 0,7 m (Figura 23A), o perfil de velocidade axial do líquido considerando as forças de arraste e massa virtual apresenta diferenças significativas dos resultados obtidos considerando outras associações de forças interfaciais. Os demais perfis de velocidade axial apresentaram boa concordância entre si. Isto indica que ao utilizar a força de massa virtual, a força de sustentação também deve ser considerada, de modo a obter resultados coerentes. Sem essas duas forças, apenas a força de arraste pode fornecer perfis de velocidade em boa concordância com os resultados de uma modelagem mais completa.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na altura de 2 m (Figura 23B), o perfil de velocidade axial aplicado às três forças aponta um valor máximo próximo à saída do reator. Por outro lado, os perfis obtidos com as forças de arraste e sustentação, e com as forças de arraste e massa virtual apresentam um comportamento inverso, com valores negativos nesta região.

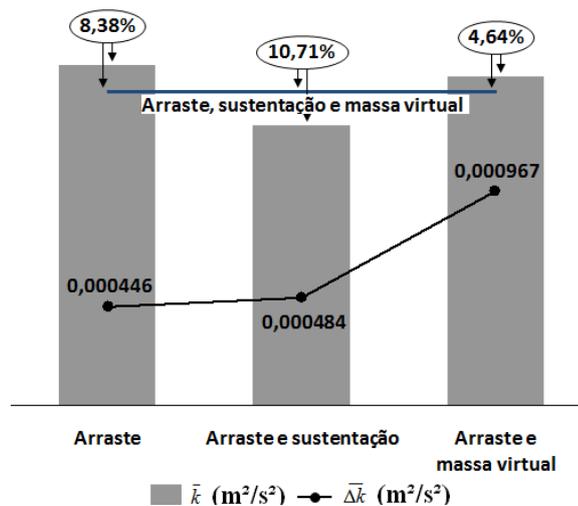
Na seção superior do reator (Figura 23C), todas as simulações apresentam uma boa concordância, com exceção da simulação utilizando apenas a força de arraste, pois essa é a única a apresentar valores positivos na lateral esquerda do equipamento.

A escolha das forças interfaciais também pode influenciar nos campos médios de energia cinética turbulenta, como pode ser visto na Tabela 5 e na Figura 24.

**Tabela 5.** Campos médios de energia cinética turbulenta para diferentes forças interfaciais.

Forças Interfaciais	$\bar{k}$ (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )	Diferença % de $\bar{k}$	$\overline{\Delta k}$ (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )
Arraste	0,001531	+8,38%	0,000446
Arraste e sustentação	0,001262	-10,71%	0,000484
Arraste e massa virtual	0,001479	+4,64%	0,000967
Arraste, sustentação e massa virtual	0,001413	–	–

A simulação considerando as forças de arraste e sustentação resultou nos menores valores de  $\bar{k}$ , que quando comparados com os resultados obtidos na associação das três forças resultou em uma diferença de 10,71%. Por sua vez, as forças de arraste e massa virtual apresentaram a menor diferença na média ponderada da energia cinética turbulenta (4,64%), porém resultou na maior diferença na distribuição da turbulência ( $\overline{\Delta k}$ ), o que está de acordo com resultados observados na Figura 23.



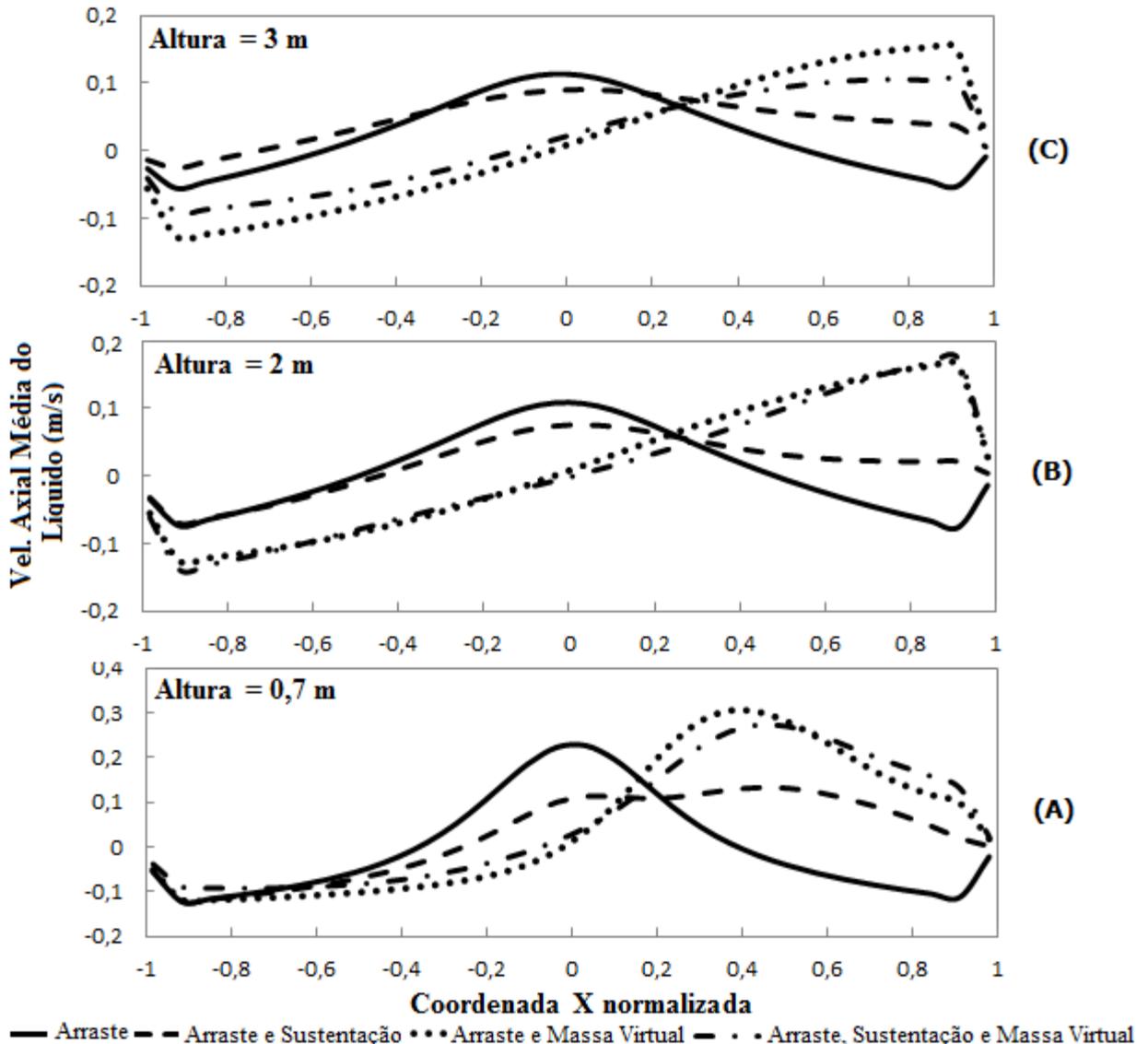
**Figura 24.** Desvios nos campos de energia cinética turbulenta para diferentes forças interfaciais.

A inclusão de diferentes forças interfaciais influencia significativamente os resultados obtidos nas simulações, reforçando a ideia de que estas forças devem ser cuidadosamente consideradas e sempre que possível validada com dados experimentais para não incorrer em erros que prejudiquem o desempenho do biorreator a ser projetado. No entanto, a comparação destes valores com os obtidos para as diferentes correlações de arraste e sustentação indicam que estas apresentam maior influência nos resultados das simulações e também devem ser validadas sempre que possível.

Os próximos quatro casos foram simulados para analisar a influência das diferentes forças (apenas a força de arraste, força de arraste e sustentação, força de arraste e massa virtual e a associação das três forças), quando ambas as fases (gás e líquido) são alimentadas pela tubulação de recirculação. Assim, a magnitude de cada força interfacial é intensificada, bem como as diferenças entre as simulações. Para todas as simulações mantiveram-se as mesmas correlações utilizadas anteriormente.

Na altura de 0,7 m (Figura 25A), observa-se que os perfis de velocidade axial médios da fase líquida obtidos na ausência da força de massa virtual divergem dos demais resultados que incorporam esta força. Junto à saída do biorreator (Figura 25C), ambos os perfis apresentam boa concordância entre si, embora as simulações que consideram a força de arraste e as forças de arraste e sustentação apresentem valores máximos próximos do centro, o que não ocorre nos demais casos. Isto confirma a forte influência da força de massa virtual na predição do escoamento. A Figura 25 também mostra que a força de sustentação, estimada com a correlação de Legendre e Magnaudet (1998), apresenta maior influência na seção inferior do biorreator, próximo à entrada, onde estão presentes os maiores gradientes de velocidade.

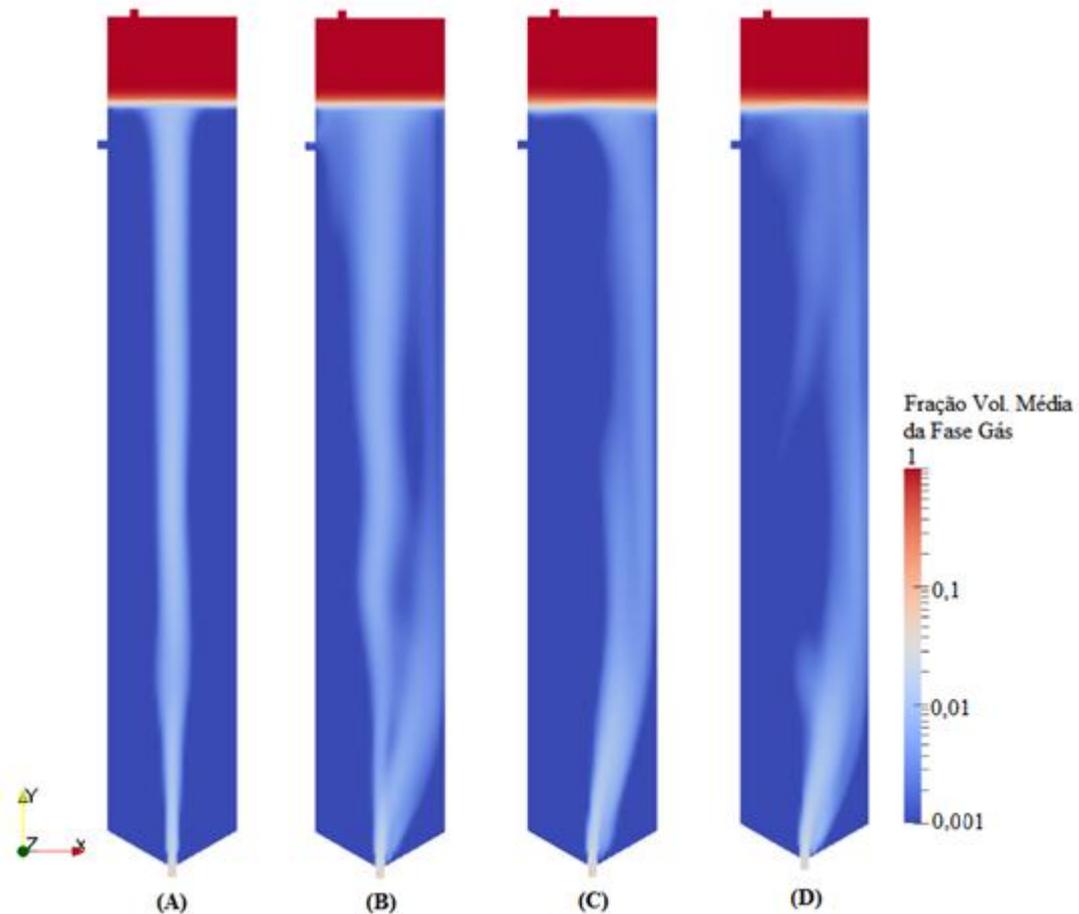
Incluindo as três forças (arraste, sustentação e massa virtual), os perfis obtidos para a velocidade axial do líquido foram semelhantes aos obtidos utilizando apenas as forças de arraste e massa virtual, embora os valores máximos e mínimos para este último são mais elevados. Isto indica que para as condições de operação deste biorreator, a força de massa virtual apresenta maior influência sobre o escoamento que a força de sustentação.



**Figura 25.** Perfil da velocidade axial média da fase líquida em função da coordenada  $X$  para diferentes forças interfaciais e uma entrada: (A) 0,7 m; (B) 2 m e (C) 3 m.

Os resultados obtidos para o perfil de distribuição da fração volumétrica média da fase gás, considerando apenas a força de arraste, incluindo a força de sustentação, a força de massa virtual, e considerando as três forças, são apresentados respectivamente nas Figuras 26A, 26B, 26C e 26D.

Os resultados obtidos apenas com a força de arraste são apresentados na Figura 26A. Verifica-se que as bolhas se concentram no eixo do reator ao longo de toda a sua altura.



**Figura 26.** Campos de fração volumétrica média da fase gás para diferentes forças e uma entrada: (A) arraste; (B) arraste e sustentação; (C) arraste e massa virtual e (D) arraste, sustentação e massa virtual.

A inclusão da força de sustentação altera este comportamento, pois a pluma se dispersa ligeiramente em direção à parede direita do equipamento (Figura 26B). Esta alteração está de acordo com a formulação desta força, que é transversal ao escoamento. Comparando a Figura 26B com os perfis de velocidade axial da fase líquida na Figura 25, observa-se que a força de sustentação tem sua maior influência nas regiões com maior velocidade e menor pressão.

Na Figura 26C, verifica-se o efeito da força de massa virtual na distribuição da fase gás. A pluma formada na seção inferior do biorreator escoar em direção à saída do equipamento mantendo-se próxima a parede, na região de maior velocidade de acordo com a Figura 25.

O perfil de distribuição da fração volumétrica média da fase gás obtida com a inclusão das três forças, conforme ilustrado na Figura 26D, mostra um padrão de escoamento

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

semelhante ao observado na Figura 26C, onde a pluma se desenvolve próxima a parede do biorreator. Além disso, a pluma tende a dissipar-se como ocorre na Figura 26B. Sendo assim, tanto a força de sustentação como a força de massa virtual contribui para determinar o padrão de escoamento do biorreator.

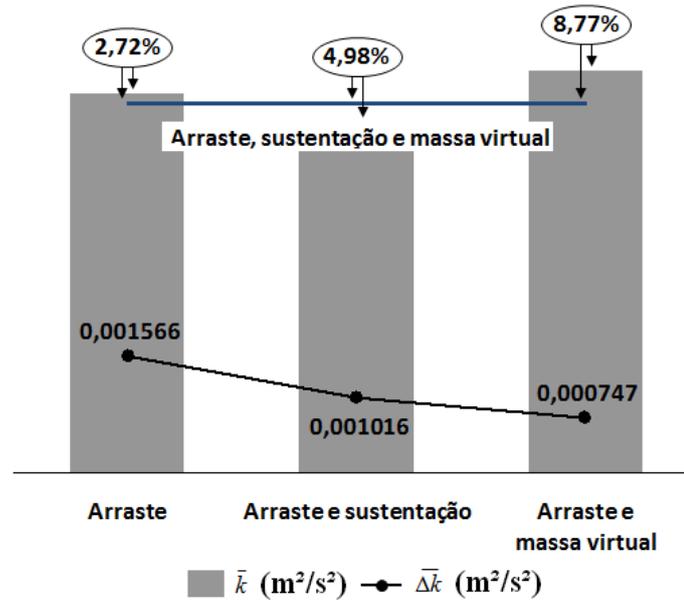
Da mesma forma como foi observado na Tabela 5 e na Figura 24, a escolha de diferentes forças interfaciais afeta a energia cinética turbulenta. A Tabela 6 apresenta os valores calculados para as simulações em que ambas as fases (gás e líquido) são alimentadas pela tubulação de recirculação.

**Tabela 6.** Campos médios de energia cinética turbulenta para diferentes forças interfaciais e uma entrada.

<b>Forças Interfaciais</b>	$\bar{k}$ (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )	<b>Diferença % de <math>\bar{k}</math></b>	$\overline{\Delta k}$ (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )
Arraste	0,005109	+2,72%	0,001566
Arraste e sustentação	0,004726	-4,98%	0,001016
Arraste e massa virtual	0,005409	+8,77%	0,000747
Arraste, sustentação e massa virtual	0,004973	—	—

De acordo com a Figura 27, a simulação considerando apenas a força de arraste resultou em um valor para a média ponderada da energia cinética turbulenta ( $\bar{k}$ ) próxima ao obtido com a aplicação das três forças, com uma diferença de apenas 2,72%, porém ocasionou a maior diferença na distribuição da turbulência ( $\overline{\Delta k}$ ). A inclusão da força de sustentação resultou em uma diminuição de 4,98% no valor de  $\bar{k}$ . A inclusão da força de massa virtual aumentou em 8,77% o valor de  $\bar{k}$ , e também resultou em uma menor diferença na distribuição da turbulência ( $\overline{\Delta k}$ ). Estes resultados estão de acordo com os perfis observados na Figura 26.

Novamente estes resultados reforçam a importância das forças interfaciais e a necessidade de validar as simulações com dados experimentais. Nos casos em que não é possível realizar a validação, a utilização de uma modelagem mais completa é a abordagem mais segura a ser adotada.



**Figura 27.** Desvios nos campos de energia cinética turbulenta para diferentes forças interfaciais e uma entrada.

### 5.5 AVALIAÇÃO DE DIFERENTES DISTRIBUIDORES

Tendo como objetivo proporcionar uma melhor mistura e maior conversão de substrato no interior do biorreator, a compreensão da influência de diferentes configurações de alimentação, tanto pela base, como pelo topo do reator, torna-se fundamental. A vazão de entrada pode ser utilizada para promover a mistura, o que de acordo com Bannari *et al.* (2011), é extremamente importante para garantir a disponibilidade de nutrientes aos microrganismos.

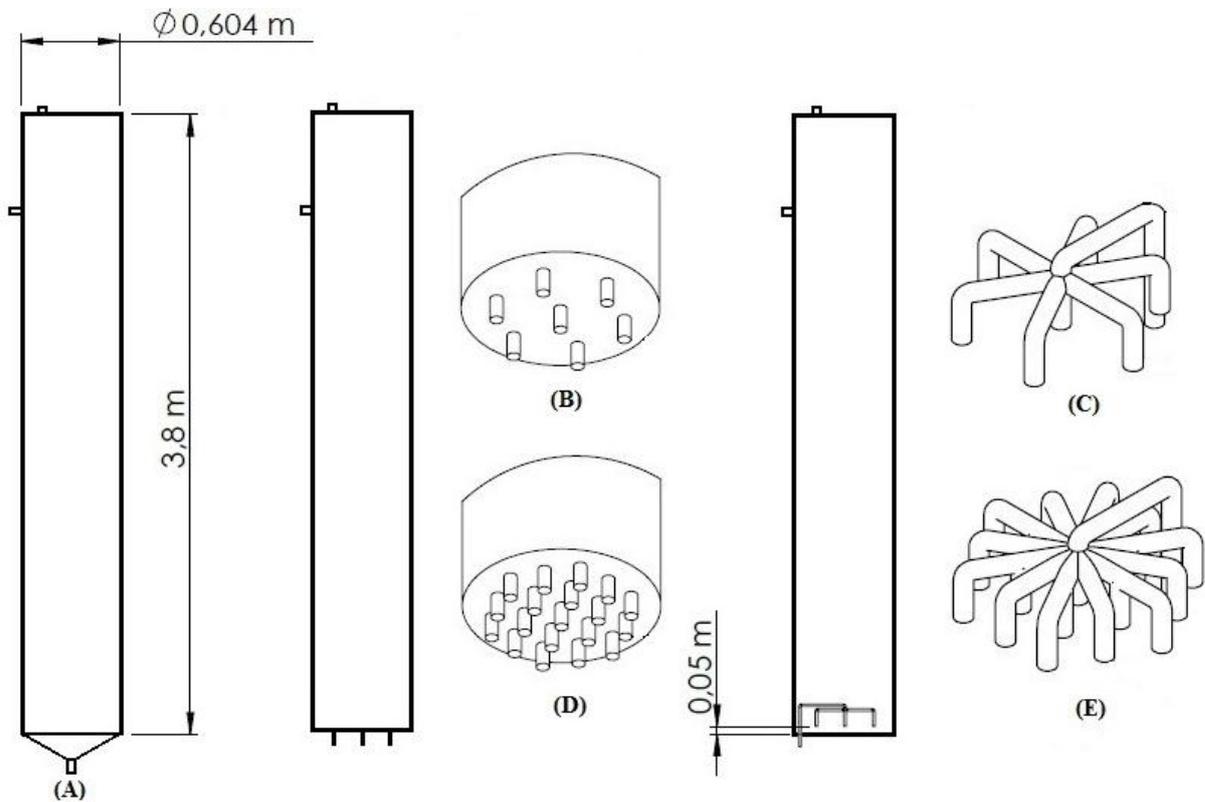
Uma distribuição inadequada da vazão de entrada geralmente é ocasionada por distribuidores mal projetados, o que acarreta em maior quantidade de “zonas mortas” (regiões com pouca mistura), e diminuição da força motriz de transferência de calor/massa (Fan *et al.*, 2009).

Para estudar a influência de diferentes configurações de alimentação, cinco casos foram comparados, assumindo que para ambos a fase dispersa apresenta as propriedades físicas do biogás, com bolhas esféricas e de diâmetro igual a 0,001 m, presentes inicialmente na seção superior do biorreator. Como não foram consideradas reações de fermentação, simulou-se a alimentação do biogás através de toda a base do equipamento. A alimentação do substrato, por sua vez, deu-se através de diferentes configurações de distribuidores localizados na seção inferior do reator. Manteve-se a mesma vazão de recirculação de substrato, igual a

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

0,00225 m<sup>3</sup>/s para todos os casos, e alimentação de 8 m<sup>3</sup>/d para o biogás como condições de contorno. As saídas de ambas as fases estão localizadas na seção superior do biorreator.

A primeira simulação (Caso A) considerou apenas um tubo de entrada, com recirculação ascendente, posicionado junto ao centro e na porção inferior do biorreator. Esta configuração apresenta uma região cônica junto à base do equipamento. As demais simulações suprimiram a base cônica e consideraram sete tubos direcionados para o topo do reator (Caso B), sete tubos direcionados para a base (Caso C), dezenove tubos direcionados para o topo (Caso D) e dezenove tubos direcionados para a base (Caso E). Em todos os casos as tubulações de entrada e saída apresentam um diâmetro interno de 0,04 m. A Figura 28 ilustra estas configurações, e a Tabela 7 resume os casos simulados.



**Figura 28.** Vista esquemática do biorreator e das diferentes configurações de alimentação utilizadas nos Casos A, B, C, D e E.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

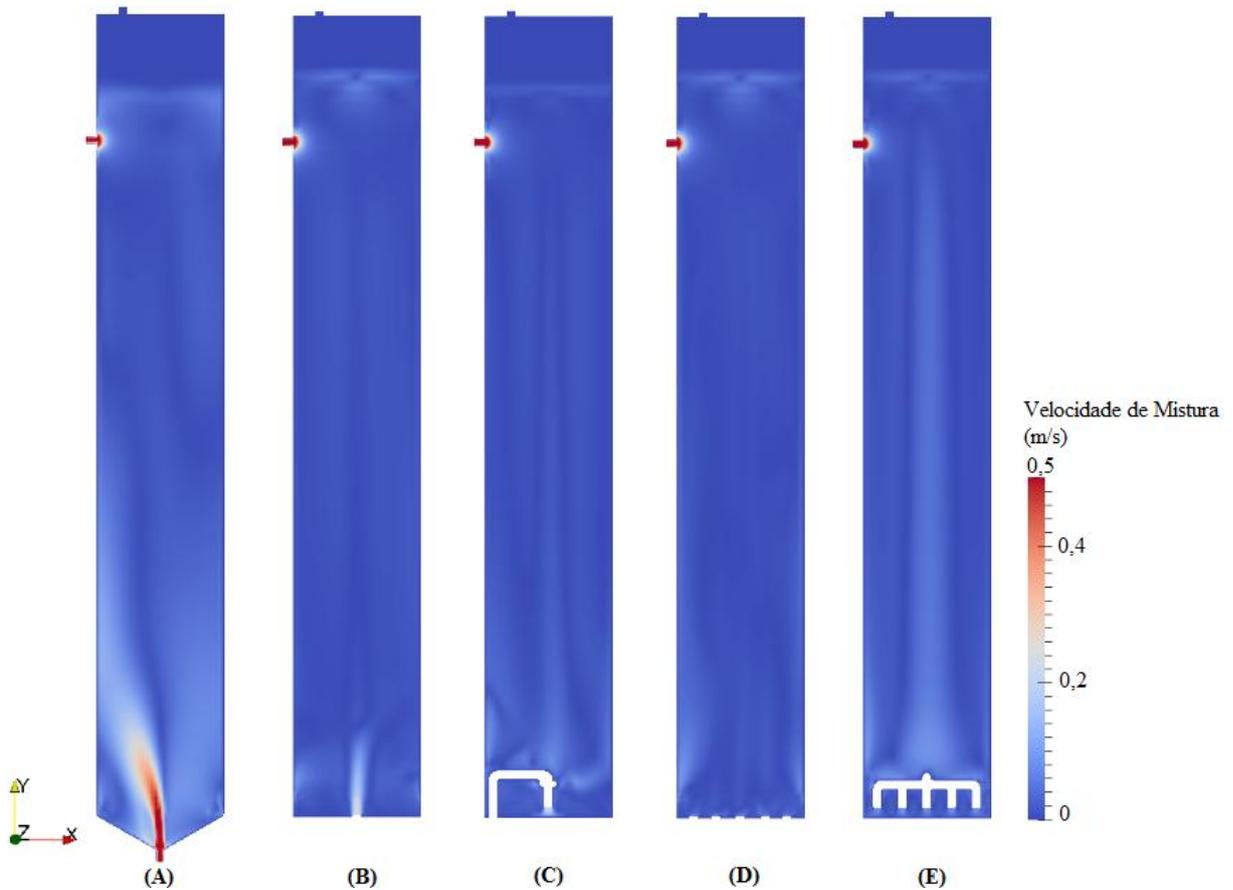
**Tabela 7.** Características das configurações de alimentação utilizadas nos Casos A, B, C, D e E.

<b>Caso</b>	<b>Número de tubos de entrada</b>	<b>Direção de entrada</b>
A	1	Ascendente
B	7	Ascendente
C	7	Descendente
D	19	Ascendente
E	19	Descendente

Em todas as simulações um maior refinamento da malha foi aplicado junto às regiões de entrada, para capturar corretamente o efeito dos diferentes distribuidores, e próximo às regiões de saída, as quais podem apresentar gradientes de velocidade elevados. Além disso, conforme os resultados e discussão apresentados no item anterior, todas as forças interfaciais foram consideradas (arraste, sustentação e massa virtual), sendo o coeficiente da força de arraste calculado através da correlação de Zhang e Vanderheyden (2002), da força de sustentação através da correlação de Legendre e Magnaudet (1998), e o coeficiente constante  $C_{VM} = 0.5$  (Auton *et al.*, 1988) adotado para o cálculo da força de massa virtual.

Os resultados obtidos para os casos propostos são apresentados nas figuras a seguir, as quais revelam seções transversais do biorreator ao longo de sua altura. Deve ser observado que nem todos os tubos de entrada podem ser visualizados nestas seções transversais.

Na Figura 29, são apresentados os campos de velocidade axial média da fase líquida para todos os casos propostos. Na simulação do Caso A (Figura 29A), a utilização de apenas um tubo de entrada resultou no maior gradiente de velocidade (2,07 m/s), próximo à base do biorreator. Percebe-se que embora esta configuração de alimentação seja simétrica, a turbulência no interior do equipamento provoca assimetrias no fluxo. A utilização de distribuidores com maior número de tubos de entrada resultou em uma distribuição mais uniforme da velocidade. Ao mesmo tempo, um maior número de tubos ocasionou uma diminuição nas velocidades de entrada, a fim de manter em todos os casos uma vazão constante. É interessante notar que no Caso E, com dezenove tubos e recirculação descendente, os valores da velocidade axial média da fase líquida se aproximam de 0,2 m/s ao longo de todo o eixo do reator (Figura 29E).

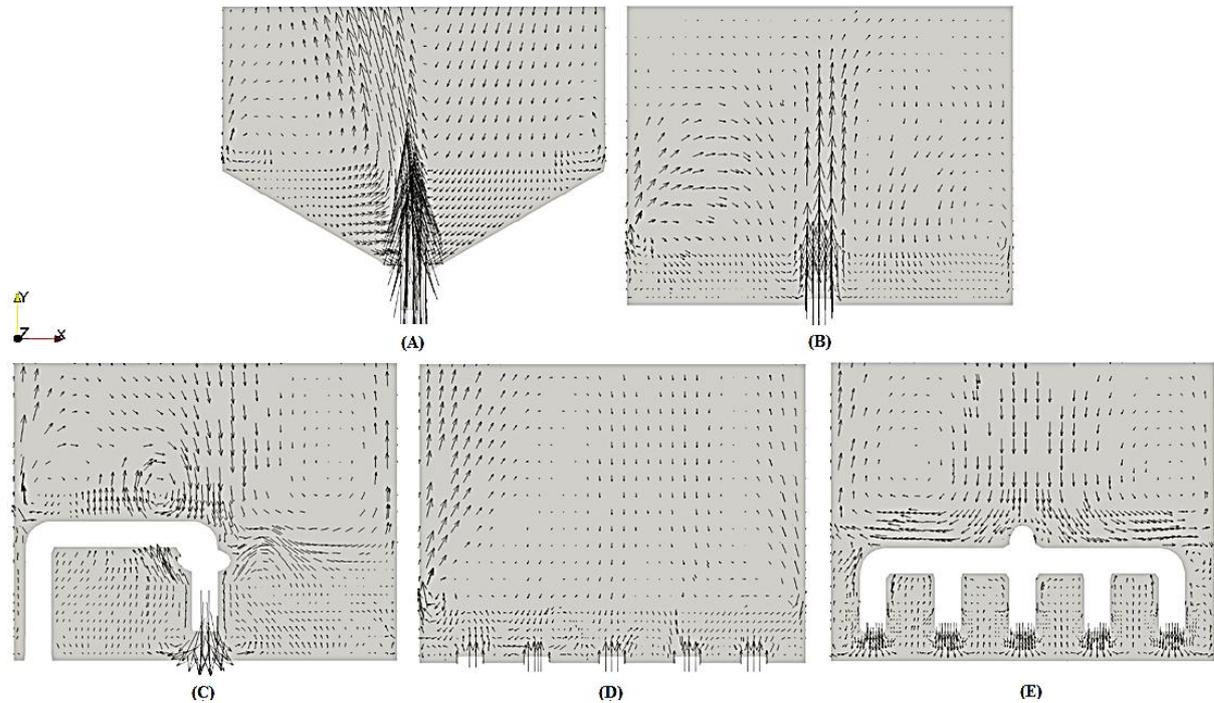


**Figura 29.** Velocidade axial média da fase líquida obtida nos Casos A, B, C, D e E.

A Figura 30 apresenta detalhes dos campos vetoriais para a fase líquida, obtidos junto à entrada do biorreator. Na Figura 30A percebe-se a forte influência da vazão de alimentação por um único tubo de entrada, a qual é preponderante no desenvolvimento do escoamento desta região. No Caso B, o qual considerou um distribuidor com sete tubos de entrada e recirculação ascendente (Figura 30B), nem todos os tubos podem ser vistos nesta seção transversal, porém nota-se que as maiores velocidades estão próximas aos mesmos. No Caso C, os sete tubos de entrada estão dirigidos para a base do biorreator (Figura 30C), implicando assim em um escoamento mais uniforme, com exceção das regiões próximas às paredes do distribuidor. A configuração com dezenove tubos e recirculação ascendente foi utilizada no Caso D, o que resultou no campo vetorial mais uniforme próximo à zona de entrada, como pode ser visto nas Figuras 29D e 30D. A Figura 30E apresenta o campo vetorial obtido com a utilização de dezenove tubos voltados para a base do biorreator (Caso E). Diferentemente do resultado encontrado para o Caso D, neste o campo vetorial não

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

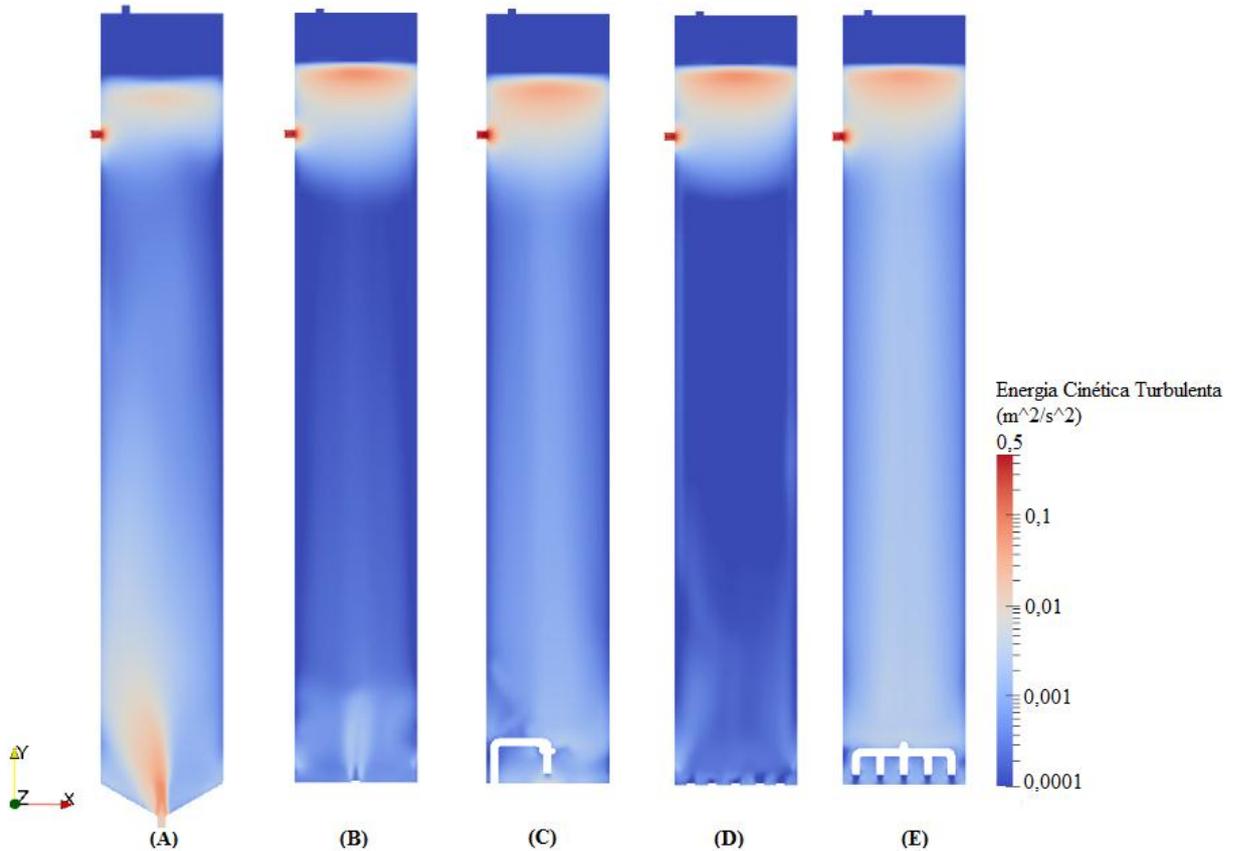
é uniforme e apresenta grandes vórtices sobre o distribuidor, provavelmente originários do contato entre o líquido e as paredes do distribuidor.



**Figura 30.** Campos vetoriais obtidos para a fase líquida junto às regiões de entrada para os Casos A, B, C, D e E.

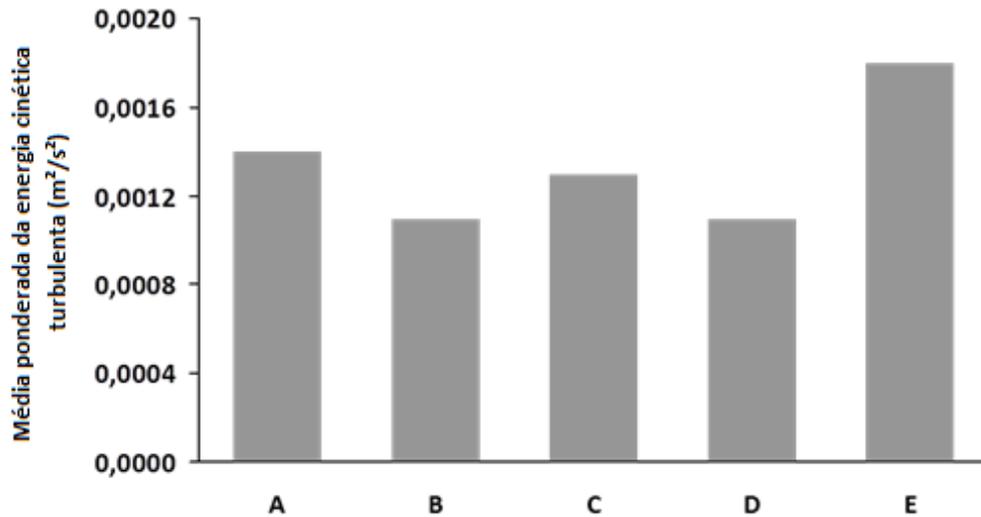
Os campos de energia cinética turbulenta média da fase líquida obtidos para cada caso são apresentados na Figura 31. Para o Caso A, a velocidade mais elevada próxima à tubulação de entrada resulta em maior turbulência nesta região, a qual é propagada ao longo de todo o equipamento (Figura 31A). Valores elevados de  $k$  também são observados para todos os casos simulados, junto ao topo do reator (próximo da superfície livre de líquido), e na saída lateral. Nestas regiões o líquido sofre uma aceleração devido à tubulação de recirculação. A utilização de distribuidores direcionados para o topo do biorreator (Figuras 31B e 31D), resulta em valores mais baixos de energia cinética turbulenta, pois os mesmos apresentam velocidades mais uniformes para a fase líquida. Na Figura 31C, pode ser visto que a utilização de sete tubos de entrada direcionados para a base do equipamento resultou em um campo quase uniforme de energia cinética turbulenta, exceto para a região próxima ao topo do reator que apresentou valores mais elevados. Este é o mesmo comportamento encontrado com

dezenove tubos e recirculação descendente (Figura 31E), embora para este caso os valores de energia cinética turbulenta sejam mais elevados ao longo de todo o reator.



**Figura 31.** Energia cinética turbulenta média da fase líquida obtida nos Casos A, B, C, D e E.

A Figura 32 apresenta a média ponderada da energia cinética turbulenta ( $\bar{k}$ ), calculada através da Equação 30, para cada um dos casos simulados. O Caso A resultou em um valor médio de  $0,0014 \text{ m}^2/\text{s}^2$ . A utilização de distribuidores direcionados para o topo do biorreator (Casos B e D) gerou valores de  $\bar{k}$  próximos a  $0,0011 \text{ m}^2/\text{s}^2$ , o que representa uma redução de aproximadamente 20% na turbulência no interior do reator. O Caso C resultou em um escoamento com turbulência equivalente ao encontrado no Caso A. No Caso E, a média ponderada da energia cinética turbulenta resultou em  $0,0018 \text{ m}^2/\text{s}^2$ , o que indica que ao utilizar este distribuidor a turbulência pode ser aumentada em 27%.



**Figura 32.** Valores calculados para a média ponderada da energia cinética turbulenta nos Casos A, B, C, D e E.

Os resultados obtidos indicam que a utilização de distribuidores com recirculação ascendente, resulta em um escoamento mais uniforme, porém ao mesmo tempo com valores mais baixos de energia cinética turbulenta, o que pode ocasionar uma mistura ineficiente. Ao considerar os distribuidores com recirculação descendente, a adoção de sete tubos de entrada resultou em um escoamento similar ao obtido com apenas um tubo. A configuração com dezenove tubos de entrada resultou no campo de escoamento mais turbulento, o que indica que a utilização de um distribuidor com um grande número de tubos e direcionado para a base do reator, pode aumentar a energia cinética turbulenta e consequentemente melhorar a mistura aumentando a produção de hidrogênio.

## 6 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

### 6.1 CONCLUSÕES PRINCIPAIS

Esta dissertação teve como objetivo a análise fluidodinâmica de um biorreator utilizado para a produção de hidrogênio e o aperfeiçoamento da mistura através de ferramentas de Fluidodinâmica Computacional. Para tanto, uma modelagem bifásica, considerando o escoamento turbulento, foi adotada.

Para buscar um melhor entendimento da fluidodinâmica no interior do biorreator, foram realizadas simulações com vazão de recirculação no sentido descendente e igual a  $0,0015 \text{ m}^3/\text{s}$ , as quais mostraram a presença de uma região de mistura pobre (pouca turbulência) na porção inferior do reator. Com a modificação para recirculação ascendente, resultados indicaram um aumento na energia cinética turbulenta sem comprometer a integridade da biomassa.

Considerando o escoamento no sentido ascendente, diferentes vazões de recirculação foram comparadas e indicaram que com uma vazão de  $0,0030 \text{ m}^3/\text{s}$  (i.e., o dobro da vazão original), consegue-se eliminar todas as “zonas mortas” (regiões com pouca mistura), proporcionando um aumento na velocidade de mistura e na energia cinética turbulenta no interior do biorreator. No entanto, esta condição resulta numa tensão de cisalhamento junto à tubulação de recirculação que ultrapassa o limite recomendado na literatura. Este problema pode ser solucionado com a utilização de uma tubulação de recirculação com maior diâmetro interno (0,06 m).

Para a simulação de casos considerando bolhas dispersas no reator, foi necessário avaliar a influência de diferentes forças agindo sobre as fases. A modelagem das forças interfaciais que atuam no escoamento bifásico foi estimada através de diferentes correlações para as forças de arraste e sustentação. Os resultados indicam que a utilização de diferentes coeficientes afeta significativamente os valores estimados para a energia cinética turbulenta. A utilização da força de arraste como sendo a única força interfacial fornece valores de energia cinética turbulenta semelhante aos encontrados utilizando uma modelagem mais completa. No entanto, a ausência das forças de sustentação e massa virtual compromete os resultados de distribuição da energia cinética turbulenta.

Por fim, diferentes configurações geométricas para os distribuidores de entrada foram avaliadas e comparadas com a configuração original (um tubo). Os resultados mostram que um maior número de tubos associado à recirculação descendente, proporciona um incremento

## 6 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

---

na turbulência. Isto significa uma melhor mistura das fases gás e líquido e contribui com um aumento na eficiência do equipamento.

Estas modificações propostas melhoram a transferência de massa no interior do reator, a qual influencia diretamente na cinética das reações e possibilita uma maior produção de hidrogênio.

O programa computacional OpenFOAM apresentou-se como uma ferramenta adequada nas simulações realizadas e versátil na implementação de novas rotinas computacionais ao modelo.

## 6.2 SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

Pode-se destacar como sugestões para trabalhos futuros:

- Validação dos resultados com dados experimentais;
- Inclusão das reações de fermentação ao modelo;
- Simulação considerando um sistema trifásico gás-líquido-sólido;
- Avaliação de diferentes modelos para a turbulência;
- Simulação através da abordagem Euleriano-Lagrangeano;
- Estudo de diferentes configurações/regimes (UASB, *gaslift*);
- Utilização de membranas associadas ao biorreator em estudo;
- Consideração de bolhas com tamanho variável ao modelo.

## 6.3 PRODUÇÃO CIENTÍFICA

Cabe ressaltar que além desta dissertação, os resultados obtidos contribuíram com as seguintes produções científicas:

- Optimization of a hydrogen production bioreactor using computational fluid dynamic (CFD) techniques. Apresentado no 13th World Congress on Anaerobic Digestion, 2013, Santiago de Compostela, Espanha.

- Estudo da fluidodinâmica de um biorreator para produção de hidrogênio utilizando técnicas de CFD. Apresentado no XIX Simpósio Nacional de Bioprocessos, 2013, Foz do Iguaçu, Brasil.

- CFD simulation of an anaerobic sequencing batch reactor for biohydrogen production. Apresentado no 11° Congreso Interamericano de Computación Aplicada a la Industria de Procesos, 2013, Lima, Peru.

- Effects of Interfacial Forces on the Hydrodynamic Behavior of an Anaerobic Sequencing Batch Reactor (ASBR). Apresentado no 2013 AIChE Annual Meeting, 2013, São Francisco, EUA.

- Effect of Internal Recirculation Velocity in an Anaerobic Sequencing Batch Reactor (ASBR). Publicado no Brazilian Journal of Chemical Engineering. DOI: 10.1590/0104-6632.20140314s00002895

- Simulación en CFD de un reactor anaerobio discontinuo utilizado para la producción de hidrógeno. Publicado no periódico Información Tecnológica. DOI: 10.4067/S0718-07642014000400004

- CFD Analysis of the Effect of Baffle Plates on the Fluid Flow in an Anaerobic Sequencing Batch Reactor. Publicado no Chemical Engineering Transactions. DOI:10.3303/CET1438023

- Numerical Study of Different Inlet Configurations on the Fluid Dynamics of an Anaerobic Sequencing Batch Reactor. Publicado no Chemical Engineering Transactions. DOI:10.3303/CET1438022

- Influence of interfacial forces on the mixture prediction of an anaerobic sequencing batch reactor (ASBR). Aceito para publicação no Brazilian Journal of Chemical Engineering.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AUTON T. R.; HUNT J. C. R.; PRUD'HOMME M. The force exerted on a body in inviscid unsteady nonuniform rotational flow, **Journal of Fluid Mechanics**, v. 197, p. 241-257, 1988.

BANNARI, R.; BANNARI, A.; SELMA, B.; PROULX, P. Mass transfer and shear in an airlift bioreactor: Using a mathematical model to improve reactor design and performance. **Chemical Engineering Science**, v. 66, p. 2057-2067, 2011.

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. **Fenômenos de Transporte**, LTC, Rio de Janeiro, 2004.

BITOG, J. P.; LEE, I. B.; LEE, C. G.; KIM, K. S.; HWANG, H. S.; HONG, S. W.; SEO, I. H.; KWON, K. S.; MOSTAFA, E. Application of computational fluid dynamics for modeling and designing photobioreactors for microalgae production: A review. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 76, p. 131-147, 2011.

BRITO, A. G.; RODRIGUES, A. C.; MELO, F. L. Feasibility of a pulse sequencing batch reactor with anaerobic aggregated biomass for the treatment of low strength wastewater. **Water Science and Technology**, v. 35, p. 193-198, 1997.

BUWA, V. V.; DEO, D. S.; RANADE, V. V. Eulerian-Lagrangian simulations of unsteady gas-liquid flows in bubble columns. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 32, p. 864-885, 2006.

CAO, G. L.; REN, N. Q.; WANG, A. J.; GUO, W. Q.; YAO, J.; FENG, Y. J.; ZHAO, Q. L. Statistical optimization of culture condition for enhanced hydrogen production by *thermoanaerobacterium thermosaccharolyticum* w16. **Bioresource Technology**, v. 101, p. 2053-2058, 2010.

CHEN, P.; SANYAL, J.; DUDUKOVIC, M. P. Numerical simulation of bubble columns flows: Effect of different breakup and coalescence closures. **Chemical Engineering Science**, v. 60, p. 1085-1101, 2005.

CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. **Bubbles, Drops, and Particles**. Academic Press, San Diego, CA, USA, 1978.

COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. On the partial difference equations of mathematical physics. **IBM Journal of Research and Development**, v. 11, p. 215-234, 1967.

DAS, D.; VEZIROGLU, T. N. Advances in biological hydrogen production processes. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 33, p. 6046-6057, 2008.

DELNOIJ, E.; KUIPERS, J. A. M.; VAN SWAAIJ, W. P. M. Dynamic simulation of gas-liquid two-phase flow: effect of column aspect ratio on the flow structure. **Chemical Engineering Science**, v. 52, p. 3759-3772, 1997.

DHOTRE, M. T.; NICENO, B.; SMITH, B. L.; SIMIANO, M. Large-eddy simulation (LES) of the large scale bubble plume. **Chemical Engineering Science**, v. 64, p. 2962-2704, 2009.

DÍAS, E. M.; IRANZO, A.; CUADRA, D.; BARBERO, R.; MONTES, F.; GALÁN, M. Numerical simulation of the gas-liquid flow in a laboratory scale bubble column Influence of bubble size distribution and no drag forces. **Chemical Engineering Journal**, v. 139, p. 363-379, 2008.

DIJKHUIZEN, W.; VAN SINT ANNALAND, M.; KUIPERS, J. A. M. Numerical and experimental investigation of the lift force on single bubbles. **Chemical Engineering Science**, v. 65, p. 1274-1287, 2010.

DING, J.; WANG, X.; ZHOU, X. F.; REN, N. Q.; GUO, W. Q. CFD optimization of continuous stirred-tank (CSTR) reactor for biohydrogen production. **Bioresource Technology**, v. 101, p. 7005-7013, 2010.

FAN Z.; ZHOU X.; LUO L.; YUAN W. Numerical investigation of constructed distributors with different configurations, **Chinese Journal of Chemical Engineering**, v. 17, p. 175-178, 2009.

FONTOURA, D. V. R. **Desenvolvimento de um modelo tridimensional bifásico para a predição da formação de coque em tubos de fornos de petróleo.** Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2013.

HALLENBECK, P. C.; GHOSH, D. Advances in fermentative biohydrogen production: the way forward? **Trends in Biotechnology**, v. 27, p. 287-297, 2009.

HIBIKI, T.; ISHII, M. Lift force in bubbly flow systems. **Chemical Engineering Science**, v. 62, p. 6457-6474, 2007.

JOSHI, J. B. Computational flow modelling and design of bubble column reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 56, p. 5893-5933, 2001.

JUNG, K. W.; KIM, D. H.; KIM, S. H.; SHIN, H. S. Bioreactor design for continuous dark fermentative hydrogen production. **Bioresource Technology**, v. 102, p. 8612-8620, 2011.

KANTARCI, N.; BORAK, F.; ULGEN, K. O. Bubble column review. **Process Biochemistry**, v. 40, p. 2263-2283, 2005.

LABORDE-BOUTET, C.; LARACHI, F.; DROMARD, N.; DELSART, O.; SCHWEICH, D. CFD simulation of bubble column flows: Investigations on turbulence models in RANS approach. **Chemical Engineering Science**, v. 64, p. 4399-4413, 2009.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, p. 269-289, 1974.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.** LTC, 1995.

MICHELAN, R.; ZIMMER, T. R.; RODRIGUES, J. A. D.; RATUSZNEI, S. M.; MORAES, D.; ZAIAT, M.; FORESTI, E. Effect of impeller type and mechanical agitation on the mass transfer and power consumption aspects of ASBR operation treating synthetic wastewater. **Journal of Environmental Management**, v. 90, p. 1357-1364, 2009.

NOVAES, L. F.; SARATT, B. L.; RODRIGUES, J. A. D.; RATUSZNEI, S. M.; MORAES, D.; RIBEIRO, R.; ZAIAT, M.; FORESTI, E. Effect of impeller type and agitation on the performance of pilot scale ASBR and AnSBR applied to sanitary wastewater treatment. **Journal of Environmental Management**, v. 91, p. 1647-1656, 2010.

NURTONO, T.; NIRWANA, W. O. C.; ANWAR, N.; KUSDIANTO, NIA, S. M.; WIDJAJA, A.; WINARDI, S. A computational fluid dynamics (CFD) study into a hydrodynamic factor that affects a bio-hydrogen production process in a stirred tank reactor. **Procedia Engineering**, v. 50, p. 232-245, 2012.

OpenFOAM, **OpenFOAM user guide**, 2013.

PANG, M.; WEI, J. Analysis of drag and lift coefficient expressions of bubbly flow system for low to medium Reynolds number. **Nuclear Engineering and Design**, v. 241, p. 2204-2213, 2011.

PANG, M.; WEI, J.; YU, B. Numerical study of bubbly upflows in a vertical channel using the Euler-Lagrange two-way model. **Chemical Engineering Science**, v. 65, p. 6215-6228, 2010.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York Hemisphere, p. 67-68, 1980.

PINHEIRO, D. M.; RATUSZNEI, S. M.; RODRIGUES, J. A. D.; ZAIAT, M.; FORESTI, E. Fluidized ASBR treating synthetic wastewater: Effect of recirculation velocity. **Chemical Engineering and Processing**, v. 47, p. 184-191, 2008.

PINHO, S. C.; RATUSZNEI, S. M.; RODRIGUES, J. A. D.; FORESTI, E.; ZAIAT, M. Feasibility of treating partially soluble wastewater in an aerobic sequencing batch biofilm reactor (AnSBBR) with mechanical stirring. **Bioresource Technology**, v. 96, p. 517-519, 2005.

REN, T. T.; MU, Y.; LIU, L.; LI, X. Y.; YU, H. Q. Quantification of the shear stresses in a microbial granular sludge reactor. **Water Research**, v. 43, p. 4643-4651, 2009.

ROACHE, P. J. Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics. **Annual Reviews in Fluid Mechanics**, 1997.

ROSA, L. M. **Aplicação de Técnicas CFD para o Cálculo de Escoamento em Meio Reativo em Riser**. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2008.

ROSA, L. M. **Simulação de reações químicas e consumo de calor em risers**. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2002.

RUSCHE, H. **Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fraction**. Ph.D. Thesis, Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, Technology and Medicine, University of London, London, UK, 2002.

SANTOS, C. M. **Simulação Tridimensional com Sistema Gás-Líquido em Colunas de Bolhas Campinas**. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2005.

SHAIKH, A.; AL-DAHMAN, M. H. A review on flow regime transition in bubble columns. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, v. 5, p. 1-68, 2007.

SHAW, C. T. **Using computational fluid dynamics**. Department of Engineering. University of Warwick, Prentice Hall, 1992.

SHOW, K. Y.; LEE, D. J.; CHANG, J. S. Bioreactor and process design for biohydrogen production. **Bioresource Technology**, v. 102, p. 8524-8533, 2011.

SILVA, M. K.; D'ÁVILA M. K.; MORI M. Study of the interfacial forces and turbulence models in a bubble column. **Computers and Chemical Engineering**, v. 44, p. 34-44, 2012.

TABIB, M. V.; ROY, S. A.; JOSHI, J. B. CFD simulation of bubble column-An analysis of interphase forces and turbulence models. **Chemical Engineering Journal**, v. 139, p. 589-614, 2008.

TAUSEEF, S. M.; ABBASI, T.; ABBASI, S. A. Energy recovery from wastewaters with high-rate anaerobic digesters. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 19, p. 704-741, 2013.

THORAT, B.; JOSHI, J. Regime transition in bubble columns: experimental and predictions. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 28, p. 423-430, 2004.

VAN DEN HENGEL, E. I. V.; DEEN, N. G.; KUIPERS, J. A. M. Application of Coalescence and Breakup Models in a Discrete Bubble Model for Bubble Columns. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 44, p. 5233-5245, 2005.

WANG, T.; WANG, J.; JIN, Y. Slurry Reactors for Gas-to-Liquid Processes: A Review. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 46, p. 5824-5847, 2007.

WANG, X.; DING, J.; GUO, W. Q.; REN, N. Q. Scale-up and optimization of biohydrogen production reactor from laboratory-scale to industrial-scale on the basis of computational fluid dynamics simulation. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 35, p. 10960-10966, 2010.

WELLER, H. G. Derivation, modeling and solution of the conditionally averaged two-phase flow equations. **Technical Report TR/HGW/02**, Nabla Ltd., 2002.

WILCOX, D. C. **Turbulence modeling for CFD**. DCW Industries, La Cañada, California, 1998.

WON, S. G.; LAU, A. K. Effects of key operational parameters on biohydrogen production via anaerobic fermentation in a sequencing batch reactor. **Bioresource Technology**, v. 102, p. 6876-6883, 2011.

WU, B. Advances in the use of CFD to characterize, design and optimize bioenergy systems. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 93, p. 195-208, 2013.

XU, X.; YAO, W.; ZHU, J. Effect of pH on continuous biohydrogen production from liquid swine manure with glucose supplement using an anaerobic sequencing batch reactor. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 35, p. 6592-6599, 2010.

ZAHRADNÍK, J.; FIALOVÁ, M. The effect of bubbling regime on gas and liquid phase mixing in bubble column reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 51, p.2491-2500, 1996.

ZHANG, Z. P.; SHOW, K. Y.; TAY, J. H.; LIANG, D. T.; LEE, D. J.; JIANG, W. J. Effect of hydraulic retention time on biohydrogen production and anaerobic microbial community. **Process Biochemistry**, v. 41, p. 2118-2123, 2006.