

UNIVERSIDADE DE CAXIAS DO SUL
ÁREA DO CONHECIMENTO DE CIÊNCIAS EXATAS E ENGENHARIAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA E CIÊNCIAS
AMBIENTAIS – PPGECAM
MESTRADO PROFISSIONAL

APLICAÇÃO DE MODELAGEM MULTIFÁSICA PARA ESTUDO DE
BIORREATORES ANAERÓBIOS

CAMILA D' BASTIANI

Caxias do Sul, RS

2017

CAMILA D' BASTIANI

**APLICAÇÃO DE MODELAGEM MULTIFÁSICA PARA ESTUDO DE
BIORREATORES ANAERÓBIOS**

Dissertação apresentada no Programa de Pós Graduação em Engenharia e Ciências Ambientais da Universidade de Caxias do Sul, como requisito parcial para a obtenção de grau de mestre em Engenharia e Ciências Ambientais.

Área de concentração: Gestão e Tecnologia Ambiental

Professor Orientador: Dr. Lademir Luiz Beal

Professor Co-Orientador: Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto.

Caxias do Sul, RS

2017

D277a D' Bastiani, Camila

Aplicação de Modelagem Multifásica Para Estudo de Biorreatores Anaeróbios / Camila D' Bastiani. – 2017.

210 f.: il.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de Caxias do Sul, Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciências Ambientais, 2017.

Orientação: Lademir Luiz Beal.

Coorientação: Severino Rodrigues de Farias Neto.

1. CFD. 2. Biogás. 3. Escoamento Multifásico. 4. UASB. 5. PIV. I. Beal, Lademir Luiz, orient. II. Farias Neto, Severino Rodrigues de, coorient. III. Título.

“APLICAÇÃO DE MODELAGEM MULTIFÁSICA PARA ESTUDO DE BIORREATORES ANAERÓBIOS.”

Camila D' Bastiani

Dissertação de Mestrado submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciências Ambientais da Universidade de Caxias do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Engenharia e Ciências Ambientais, Área de Concentração: Gestão e Tecnologia Ambiental.

Caxias do Sul, 20 de abril de 2017.

Banca Examinadora:

Dr. Lademir Luiz Beal
Orientador
Universidade de Caxias do Sul

Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto
Coorientador
Universidade Federal de Campina Grande

Dr. ^a Flávia Schwarz Franceschini Zinani
Universidade do Vale do Rio dos Sinos

Dr. Juliano Rodrigues Gimenez
Universidade de Caxias do Sul

Dr. Luis Antônio Rezende Muniz
Universidade de Caxias do Sul

Dedico essa dissertação aos meus pais Jorge e Loreti, pelo amor e apoio em todas as escolhas que fiz na vida.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pelas oportunidades que tive que me trouxeram até onde estou hoje, e por ter passado por tantas situações, as boas e as ruins. Agradeço aos meus pais, por terem me ensinado muito mais do que a andar e a falar, mas por terem sido minha base sólida, e terem me mostrado o caminho para ser um ser humano de caráter e integridade. Ao meu amado pai, por todo esforço para que nada me faltasse, pelas tantas vezes que não me deixou na mão, seja dando uma carona para casa ou um conselho de pai. À minha querida mãe, por ter sido minha base em casa, sempre me dando toda a ajuda e carinho que precisei, e me auxiliando nos momentos mais difíceis. Ao meu irmão pelo apoio sempre. Agradeço muito ao Prof. Lademir Beal, pela oportunidade, confiança e orientação, sem essa oportunidade talvez eu nunca tivesse descoberto as maravilhas da fluidodinâmica, e também por todos os anos de parceria desde a graduação. Ao Prof. Severino Farias Neto, um agradecimento muito especial, mesmo sem saber bem do que se tratava, mesmo sendo eu uma total desconhecida, aceitou sem hesitar quando pedi sua orientação, esse trabalho com certeza não teria sido possível sem a sua ajuda e as horas de Skype e telefonemas. Agradeço de forma especial à PETROBRAS, por ter confiado tal projeto à UCS e à UCS, permitindo que eu realizasse este trabalho. Agradeço ao Nicolas Spogis, pela ajuda com a malha, ao Rodrigo Peralta da ESSS pelo apoio técnico sempre que precisei e ao amigo José Nogueira Filho pelas conversas sobre CFD. Aos amigos e bolsistas que trabalharam comigo: Jeferson Luis Alba e Gabriel Mazarotto. Foram horas e mais horas de uma parceria que deu muito certo, o nome de vocês está nesse trabalho por merecimento, sei que um “obrigada” é pouco, mas Obrigada! Agradeço também ao Prof. Juliano Gimenez, ao funcionário Flávio Pedrotti, à colega e amiga Juliane Inês de Azevedo, às colegas mestrandas, aos colegas bolsistas e a toda a equipe do Laboratório de Tecnologia Ambiental – LATAM pela parceria, não só na hora de trabalhar, mas também nas horas de lazer como as divertidas “horas do lanche”, somos mais que uma equipe de trabalho, somos amigos! Por fim, agradeço aos meus amigos, aqueles que estão comigo há tanto tempo, sem vocês eu não seria a pessoa que sou hoje, sem as alegrias dos finais de semana, jamais suportaria as incansáveis horas na frente de computadores buscando a “simulação perfeita”.

"They did not know it was impossible,

So they did it!"

Mark Twain

RESUMO

Buscando compreender o comportamento hidrodinâmico de um reator anaeróbio de fluxo ascendente (UASB), o presente trabalho teve por objetivo desenvolver um modelo numérico utilizando ferramentas de Fluidodinâmica Computacional (CFD) para a simulação do comportamento do escoamento trifásico (líquido, gás e sólido) em um reator UASB utilizado na produção de biogás a partir da vinhaça, e validar este modelo utilizando técnicas de Velocimetria de Partículas por Imagem (PIV). Para tanto, inicialmente foi projetado o reator UASB e em seguida foram desenvolvidas a geometria e a malha. As simulações foram executadas no software Fluent, utilizando uma malha com 528.000 volumes de controle. Foram inicialmente realizadas simulações do escoamento monofásico do líquido e em seguida simulações bifásicas gás/líquido e sólido/líquido foram realizadas adotando-se uma abordagem Euleriana-Euleriana, isotérmica, transiente e tridimensional. Por fim, os modelos bifásicos já validados foram associados em um modelo trifásicos. Técnicas de PIV foram utilizadas na validação dos modelos bifásicos e do trifásico. Na etapa de validação dos modelos numéricos, foi verificada uma diferença máxima entre resultados experimentais e computacionais menor de 4% para todos os casos. Foi verificado que a força de arraste é a que exerce a maior influência no perfil do escoamento gás/líquido. Com relação ao escoamento sólido/líquido, o modelo de Gidaspow foi escolhido para o cálculo do coeficiente de arraste, após comparação com resultados experimentais. Nas simulações trifásicas, verificou-se o gás foi o principal responsável pela qualidade da mistura dentro do reator, reduzindo de 44% o percentual de zonas mortas no reator no caso sólido/líquido para 0,02% no caso trifásico e aumentando em cerca de oito vezes a magnitude da velocidade das fases sólida e líquida. O sistema de distribuição de gás exerceu forte influência no perfil do escoamento, tendo induzido recirculação interna no reator. A compreensão do escoamento permitirá otimizações no processo e no reator de forma a buscar o aumento da eficiência de tratamento bem como da geração de biogás.

Palavras-chave: CFD. Biogás. Escoamento Multifásico. UASB. PIV.

ABSTRACT

Aiming to understand the hydrodynamics of a Upflow Anaerobic Sludge Blanket (UASB) reactor, this work aimed to apply multiphase modeling through computational fluid dynamics (CFD) to assess the behavior of the three phase flow (liquid, gas and solid) in a UASB reactor, which is used in the biogas production using vinasse as substrate and the to validate the results using Particle Image Velocimetry (PIV) techniques. Therefore, the UASB reactor was designed and then the geometry and mesh were developed. The simulations were performed using the software Fluent and a mesh with 528.000 control volumes. Initially, monophasic simulations of the liquid phase were carried out. Next, two phase simulations were performed considering the pairs of phases gas/liquid and solid/liquid. An Eulerian-Eulerian approach was adopted, together with isothermal, transient and tridimensional conditions. After validated, the two-phase models (solid/liquid and gas/liquid) were combined into a three-phase model. PIV was used for the experimental validation of the two and three-phase models. The numerical model validation showed maximum differences lower than 4% between experimental and computational results for the three cases (gas/liquid, solid/liquid and liquid/gas/solid). Numerical results showed that the drag force plays the major role on the gas/liquid flow profile. Regarding the solid/liquid flow, Gidaspow model was chosen to estimate the drag force coefficient after comparisons between numerical and experimental results. Three-phase simulations showed that the gas was the main responsible for the mixing quality within the reactor. Dead zones were reduced from 44% in the solid/liquid simulations to 0,02% in the three-phase simulations and the liquid and solid velocity magnitude increased in about eight times. The configuration of the gas distribution system played a major role on the overall flow profile and drove liquid recirculation along the axial position. Understanding the multiphase flow within this reactor will allow optimizations on the process as well as on the reactor, in order to seek an increase on the efficiency both in the treatment and biogas in the production.

Keywords: CFD. Biogas. Multiphase Flow. UASB. PIV.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Características da vinhaça resultante de mostos de melaço, de caldo de cana e de mostos mistos de caldo e melaço.....	26
Tabela 2 - Equivalência energética entre 1 Nm ³ de biogás e outras fontes energéticas.....	27
Tabela 3 - Resultados experimentais obtidos em reatores UASB para tratamento de vinhaça.....	33
Tabela 4 - Dados obtidos no dimensionamento do reator UASB.....	55
Tabela 5 - Condições de contorno - Simulações iniciais.....	66
Tabela 6 - Simulações numéricas gás/líquido iniciais.....	66
Tabela 7 - Condições de contorno/modelos adotados para simulações trifásicas. ...	70
Tabela 8 - Propriedades das fases utilizadas nas simulações.....	81
Tabela 9 - Resultados teste de independência de malhas - GCI.....	83

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Resumo da literatura para escoamentos bifásicos (líquido/gás) em reatores.....	50
Quadro 2 - Resumo da literatura para escoamentos bifásicos (sólido/líquido) e trifásicos (sólido/líquido/gás) em reatores.....	51
Quadro 3 - Principais métodos utilizados para realizar as simulações numéricas monofásicas.....	63
Quadro 4 - Simulações realizadas - comparação entre forças interfaciais.....	67

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Representação esquemática do processo de digestão anaeróbia.....	24
Figura 2 - Esquema de Configuração reator UASB.....	29
Figura 3 - Fluxo para solução de problemas de escoamento em CFD.	35
Figura 4 - Padrões de escoamento em dutos verticais.	40
Figura 5 - Resumo dos enfoques para sistemas multifásicos.	41
Figura 6 - Força de sustentação devido à taxa de deformação do fluido	45
Figura 7 - Representação da massa virtual.....	46
Figura 8 - Reator UASB projetado para fins de simulação em CFD e validação utilizando PIV a partir dos dados do efluente a ser tratado(vinhaça).	55
Figura 9 - Domínio de cálculo utilizado e simplificações adotadas.....	59
Figura 10 - Perfil de velocidades do escoamento laminar em dutos.	61
Figura 11 - Reator utilizado nos experimentos.	71
Figura 12 - Seção do fundo do reator experimental. (a) Parte inferior do reator. (b) Detalhe do distribuidor de líquido. (c) Detalhe do distribuidor de gás.	72
Figura 13 - Reator experimental com o leito de sólidos utilizado para validação.	73
Figura 14 - Configurações utilizadas para o sistema PIV. (a) Configuração utilizada para avaliação dos escoamentos Gás/Líquido e Trifásico. (b) Configuração utilizada para avaliação do escoamento Sólido/Líquido.	76
Figura 15 - Configuração do sistema de Shadowgraphy utilizado.....	77
Figura 16 - Distribuição Granulométrica - grânulos de lodo anaeróbio	80
Figura 17 - Grânulo de lodo anaeróbio analisado em microscópio (5X).....	80
Figura 18 - Representação gráfica da malha e detalhes de entrada e saída do domínio.	83

LISTAS DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ADV	Acoustic Doppler Velocimetry (Velocimetria Acústica Doppler)
CFD	Computacional Fluid Dynamics (Fluidodinâmica Computacional)
DNS	Direct Numerical Simulation (Solução Numérica Direta)
EPE	Empresa de Pesquisa Energética
GCI	Grid Convergence Index (Índice de Convergência de malha)
IEA	International Energy Agency (Agência Internacional de Energia)
KTGF	Kinetic Theory of Granular Flow (Teoria Cinética do Escoamento Granular)
LES	Large Eddy Simulation (Simulação de Grandes Escalas)
MEF	Métodos de Elementos Finitos
MDF	Métodos de Diferenças Finitas
MVF	Métodos de Volumes Finitos
pH	Potencial Hidrogeniônico
PIV	Particle Image Velocimeter (Velocimetria de Partículas por Imagem)
PLIF	Planar Laser Induced Fluorescence (Velocimetria Planar de Fluorescência Induzida por Laser)
RANS	Reynolds-Averaged Navier–Stokes (equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds)
UASB	Upflow Anaerobic Sludge Blanket (Reator Anaeróbio de Fluxo Ascendente de Manta de Lodo)
VOF	Volume ou Fluido

LISTA DE NOMENCLATURAS

C	Carbono
CH ₄	Metano
CO ₂	Dióxido de Carbono
H ₂	Hidrogênio
H ₂ SO ₄	Ácido Sulfúrico
N ₂	Nitrogênio
NaOH	Hidróxido de sódio

LISTAS DE SÍMBOLOS

A	Área da seção transversal do reator (m ²)
C_D	Coefficiente de arraste
C_{lift}	Coefficiente de sustentação
C_{mv}	Coefficiente de massa virtual
C_{td}	Constante de dispersão turbulenta
COV	Carga Orgânica Volumétrica (kg DQO.m ⁻³ .d ⁻¹)
D	Diâmetro (m)
DBO	Demanda Bioquímica de Oxigênio (mgO ₂ .L ⁻¹)
d	Diâmetro da fase dispersa (bolha ou grânulos) (m)
DQO	Demanda Química de Oxigênio (mgO ₂ .L ⁻¹)
\vec{F}_D	Força de arraste (N)
\vec{F}_{lift}	Força de sustentação (N)
\vec{F}_{mv}	Força de massa virtual (N)
\vec{F}_q	Força de corpo externa (N)
$\vec{F}_{td,q}$	Força de dispersão turbulenta (N)
F _s	Fator de segurança
\vec{g}	Aceleração da gravidade (m.s ⁻²)
H	Altura do reator (m)
K_{pq}	Coefficiente de troca interfacial entre as fases p e q
K_{sl}	Coefficiente de troca sólido/líquido
k_q	Energia cinética turbulenta da fase contínua (m ² .s ⁻²)
M	Massa molar (kg.mol ⁻¹)
ρ	Ordem de convergência
P	Pressão (Pa)
P _{abs}	Pressão absoluta (Pa)
P _{stat}	Pressão estática (Pa)
P _{ref}	Pressão de referência (Pa)
Q	Vazão (m ³ .d ⁻¹)
R	Raio total (m)

r	Raio local (m)
$Re_{líq}$	Número de Reynolds do líquido (monofásico)
Re_p	Reynolds da partícula ou da bolha
Re_ω	Número de Reynolds relacionado à vorticidade
r_r	Razão de refinamento
S	Concentração de substrato afluyente do reator (kg DQO. m ³ ⁻¹)
TDH	Tempo de Detenção Hidráulica (d)
T	Temperatura (K)
V	Volume total do reator (m ³)
V_i	Volume da fase i
v	Velocidade superficial do escoamento/velocidade ascensional (m.s ⁻¹)
\vec{v}_i	Velocidade da fase i (m.s ⁻¹)
v_r	Velocidade relativa (m.s ⁻¹)
$v_{r,s}$	Correlação para a velocidade terminal para a fase sólida
$v(R)$	Velocidade axial laminar (m.s ⁻¹)
y	Fração mássica

LETRAS GREGAS E OPERADORES MATEMÁTICOS

α_i	Fração volumétrica da fase i
ε	Erro relativo entre as soluções
μ	Viscosidade dinâmica (kg.m ⁻¹ .s ⁻¹)
ρ	Massa específica (kg.m ⁻³)
$\bar{\tau}_i$	Tensor de tensões da fase
τ	Tensão de cisalhamento
ϕ	Variável qualquer
∇	Operador Nabla
\times	Produto vetorial
$\frac{D}{Dt}$	Derivada Substantiva
$\nabla\alpha_p$	Gradiente de fração volumétrica da fase contínua
$\frac{\partial}{\partial t}$	Derivada parcial com respeito ao tempo

SUBSCRITOS

D	Referente à força de arraste
Lift	Referente à força de sustentação
mv	Referente à força de massa virtual
p	Referente à fase dispersa/partícula
q	Referente à fase contínua
i	Referente a uma fase qualquer (sólido, líquido ou gás)
SSV	Referente à demanda química de oxigênio convertida em biomassa
Rem	Referente à demanda química de oxigênio removida do sistema
Sulf	Referente à demanda química de oxigênio convertida em sulfato
Met	Referente à demanda química de oxigênio convertida em metano
A	Referente ao metano
B	Referente ao dióxido de carbono
Biogás	Referente ao Biogás
1	Referente à malha mais refinada
2	Referente à malha intermediária
3	Referente à malha mais grosseira
h=0	Referente ao resultado quando o espaçamento da malha é zero
s	Referente à fase sólida
l	Referente à fase líquida
g	Referente à fase gasosa

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	19
2 OBJETIVOS.....	22
2.1 OBJETIVO GERAL.....	22
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	22
3 REFERENCIAL TEÓRICO	23
3.1 DIGESTÃO ANAERÓBIA E TRATAMENTO DE EFLUENTES	23
3.2 VINHAÇA	25
3.3 REATOR UASB.....	28
3.3.1 <i>Critérios de Projeto</i>	30
3.3.2 <i>Aplicações de Reatores UASB</i>	31
3.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)	33
3.4.1 <i>Discretização do domínio</i>	35
3.4.2 <i>Métodos de discretização das equações diferenciais</i>	37
3.5 ESCOAMENTO MULTIFÁSICO	38
3.5.1 <i>Padrões de escoamento e abordagens</i>	39
3.5.2 <i>Modelos matemáticos – Forças interfaciais</i>	42
3.5.3 <i>Modelos matemáticos – Turbulência</i>	47
3.6 VELOCIMETRIA DE PARTÍCULAS POR IMAGEM (PIV)	52
4 METODOLOGIA.....	54
4.1 PROJETO DO REATOR E CARACTERIZAÇÃO DAS FASES	54
4.1.1 <i>Projeto do reator UASB</i>	54
4.1.2 <i>Caracterização das fases</i>	56
4.2 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS.....	58
4.2.1 <i>Definição da Geometria</i>	58
4.2.2 <i>Definição da malha</i>	59
4.2.3 <i>Escoamento monofásico</i>	61
4.2.4 <i>Escoamento multifásico</i>	63
4.3 EXPERIMENTAL.....	71
4.3.1 <i>Reator</i>	71
4.3.2 <i>PIV e Shadowgraphy</i>	74

5 RESULTADOS	78
5.1 CARACTERIZAÇÃO DAS FASES.....	79
5.2 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS.....	82
5.2.1 <i>Teste de Independência de Malhas (GCI)</i>	82
5.3 ARTIGOS	84
ARTIGO 1.....	84
ARTIGO 2.....	96
ARTIGO 3.....	114
ARTIGO 4.....	134
ARTIGO 5.....	139
6 CONCLUSÕES.....	167
7 RECOMENDAÇÕES	170
8 REFERÊNCIAS	171
APÊNDICE A	182
APÊNDICE B	207

1 INTRODUÇÃO

A busca por fontes de energias renováveis tem se tornado de inestimável importância, dado o potencial poluidor e de degradação ambiental das principais fontes de energias não renováveis das matrizes energéticas global e nacional. Em nível mundial, a participação da geração de energia empregando biomassa em 2010 foi de 10%, segundo dados da *International Energy Agency* (IEA) (IEA, 2012). No Brasil, segundo dados da Empresa de Pesquisa Energética (EPE), em 2012 a biomassa representou 6,8% da matriz energética brasileira, enquanto em 2013 houve um aumento para 7,6% (BRASIL, 2015). Ou seja, nota-se uma crescente preocupação com o desenvolvimento e a aplicação de tecnologias que foquem na produção de energias através da biomassa.

Seguindo a tendência de aumento do percentual de geração de energia empregando biomassa, há o interesse no estudo de novas fontes que possam ser econômica, técnica e ambientalmente viáveis. Neste sentido, surge a possibilidade de uso do vinhoto ou vinhaça como biomassa para produção de energia renovável, através da geração de biogás.

A vinhaça trata-se do principal efluente do processo de destilação fracionada do caldo de cana-de-açúcar (garapa) fermentado, para a obtenção do etanol (álcool etílico). Para cada litro de álcool produzido, em média 13 litros de vinhaça são gerados como resíduo (Fuess, 2013). Segundo dados de Cortez, Freire e Rosillo-Calle (1996) este resíduo apresenta demanda química de oxigênio (DQO) entre 15.000 e 65.000 $\text{mgO}_2\text{L}^{-1}$ e demanda bioquímica de oxigênio (DBO) entre 6.000 e 25.000 $\text{mgO}_2\text{L}^{-1}$. A criação do programa Proálcool em 1975 gerou um aumento expressivo da produção de álcool no país. A disposição deste resíduo era feita em corpos hídricos até que as portarias 323 de 29/11/78 e 158 de 03/11/80 do Ministério do Interior proibiram esta forma de disposição (BRASIL, 1978, 1980). Desde então, tem-se utilizado o resíduo na fertirrigação de solos para o plantio de cana-de-açúcar. No entanto, é sabido que o excesso da utilização deste resíduo no solo pode levar ao comprometimento do meio ambiente, desde as características físicas e químicas do solo até as águas subterrâneas a partir da sua percolação (LAIME et al., 2011).

Aliando as necessidades de destinação adequada da vinhaça e de produção de energias renováveis, surge o projeto BIOGÁS, uma parceria entre a

PETROBRÁS e a Universidade de Caxias do Sul, onde este trabalho está inserido. O projeto de produção de biogás pela fermentação anaeróbia da vinhaça é justificado pela alta carga orgânica da vinhaça, tendo assim um alto potencial energético. Estima-se que a partir da produção de 1 m³ de etanol possibilite-se a geração de 185 Nm³ de biogás, contendo aproximadamente 60% de metano em sua composição (POMPERMAYER; JUNIOR, 2000). Em 2015, segundo dados do Ministério da Agricultura, foram produzidos 30,479 milhões de m³ de álcool no Brasil (BRASIL, 2016). Considerando tais dados, estima-se uma capacidade de produção de 5,638 bilhões de Nm³ de biogás a partir da vinhaça ou 3.383 milhões de Nm³ de metano purificado para utilização como combustível de automóveis. Sabendo-se que 1 Nm³ de biogás tem o potencial de gerar 1,25 KWh de energia, no ano de 2015 o Brasil deixou de gerar em torno de 7,048 milhões de MWh. Considerando que em 2015, segundo dados da Hidrelétrica de Itaipu, (ITAIPU, 2016) foram gerados 89,215 milhões de Mwh de energia em sua unidade, isso equivale a aproximadamente 7,9% da produção de energia de Itaipu neste ano.

Nota-se, portanto, uma elevada capacidade de produção de energia limpa a partir da vinhaça. No entanto, os custos de testes em reatores em escala real, para definição de parâmetros de processo e dimensionamento podem tornar este tipo de teste inviável e os estudos de reatores em escala de bancada podem ser pouco precisos quanto a determinados parâmetros. Neste sentido, Samstag et al. (2016) cita a utilização de Fluidodinâmica Computacional (CFD) como uma tecnologia emergente na área de tratamento de efluentes, a qual permite a análise global de escoamentos com as mais diversas características, visando a compreensão da hidrodinâmica e a otimização de processos de tratamento de efluentes.

O comportamento hidrodinâmico pode ser considerado um aspecto primordial no desempenho de reatores do tipo *Upflow Anaerobic Sludge Blanket* (UASB). O contato entre as três fases presentes no reator (gás, sólido e líquido) e a transferência de quantidade de movimento entre as fases influenciam diretamente nas biorreações responsáveis pela digestão anaeróbia do efluente a ser tratado. No entanto, existe a necessidade de análise do impacto das fases sólida e gasosa na distribuição do escoamento em sistemas de tratamento de efluentes, segundo Samstag et al (2016). Buscando atender a esta demanda, o presente estudo busca desenvolver um modelo adequado para simular biorreatores UASB seguindo uma

abordagem trifásica, levando em consideração em especial quais as principais forças interfaciais, modelos de turbulência e configuração do reator levam a resultados mais precisos, e validar estes resultados utilizando técnicas de velocimetria por imagem através de um equipamento de PIV (*Particle Image Velocimeter*). Os resultados deste estudo permitem a simulação de processos aplicados à produção de biogás a partir da vinhaça da cana-de-açúcar. O modelo hidrodinâmico trifásico permite também a futura inclusão de modelos cinéticos de digestão anaeróbia na simulação do reator e, portanto, uma compreensão global do processo de tratamento de efluentes.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Simular o comportamento do escoamento trifásico (líquido, gás e sólido) em um reator UASB, por meio de fluidodinâmica computacional, validando experimentalmente os resultados.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

A seguir são apresentados os objetivos específicos deste estudo:

- a) definir malha adequada para as simulações, através de estudo de malhas com diferentes refinamentos;
- b) definir modelos computacionais bifásicos gás/líquido e sólido/líquido para o reator UASB;
- c) analisar a influência das diferentes forças interfaciais (arraste, massa virtual e sustentação) na transferência de quantidade de movimento entre as fases, definindo qual deverá ser utilizada nas simulações;
- d) analisar a influência da variação da vazão de gás e do tamanho das bolhas de biogás geradas sobre o comportamento do escoamento gás/líquido no reator;
- e) validar os resultados das simulações numéricas utilizando dados experimentais do escoamento obtidos através da utilização de velocimetria de partículas por imagem (PIV) e *Shadowgraphy*.

3 REFERENCIAL TEÓRICO

Neste capítulo são abordados conceitos e formulações matemáticas que foram considerados importantes ao longo do desenvolvimento deste estudo.

3.1 DIGESTÃO ANAERÓBIA E TRATAMENTO DE EFLUENTES

A revolução industrial e os avanços tecnológicos na área da saúde contribuíram com o rápido crescimento populacional e com o advento industrial os quais levaram ao surgimento de um novo problema: a quantidade de efluentes gerados tanto em processos industriais quanto em domicílios aumentou vigorosamente. Inicialmente, o descarte era feito diretamente em águas fluviais, gerando danos aos ecossistemas locais. Logo surgiu a necessidade do desenvolvimento de processos físicos, químicos e biológicos para reduzir a carga orgânica e remover os poluentes de tais efluentes. Os processos biológicos desenvolvidos se dividem majoritariamente em dois grandes grupos quanto à utilização ou não de oxigênio: aeróbios e anaeróbios.

A digestão anaeróbia trata-se de um processo natural de biodegradação da matéria orgânica que ocorre em ambientes onde não há a presença de oxigênio. Desde a metade dos anos 1800, vem sendo utilizada no tratamento de resíduos gerados pela intervenção humana (KYTHREOTOU; FLORIDES; TASSOU, 2014). Processos de tratamento de efluentes através da digestão anaeróbia se tornaram populares devido à sua capacidade de além de tratar os efluentes gerar energia na forma de biogás e possibilitar a utilização, em certos casos, do afluente do reator como biofertilizante (SZYMANSKI; BALBINOT; SCHIRMER, 2010).

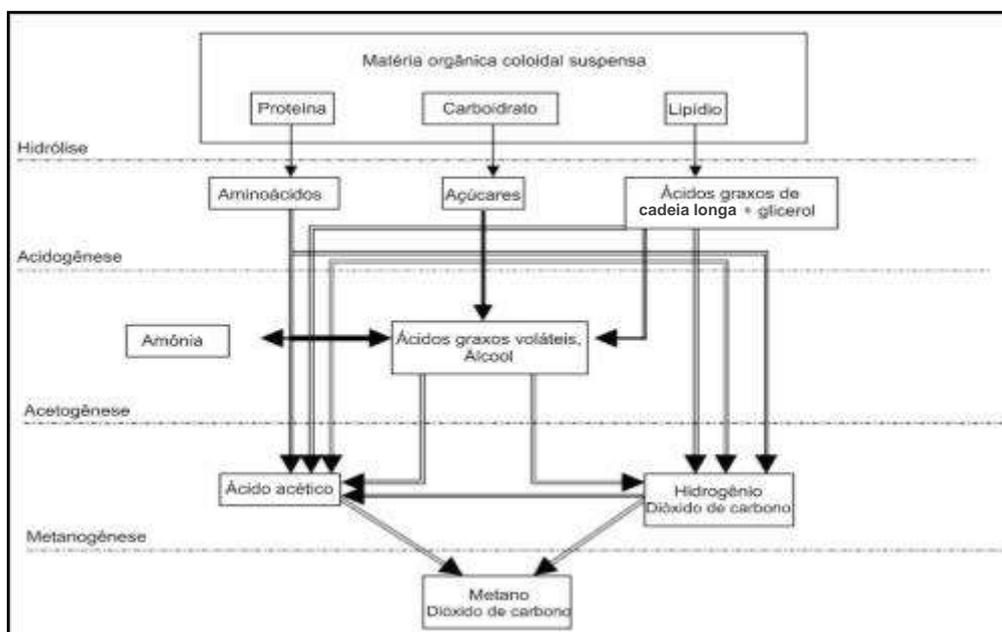
O processo de digestão anaeróbia se dá devido a uma série de processos microbiológicos os quais convertem compostos orgânicos em metano, dióxido de carbono e outros compostos em menores quantidades (CHEN et al., 2014). Acerca das condições de temperatura, a digestão anaeróbia pode acontecer sob condições psicrófilas (< 20°C), mesofílicas (20-45°C) ou termofílicas (45-60°C). No entanto, em processos de tratamento de efluentes, em geral os biodigestores são projetados para as duas últimas condições (SAFLEY; WESTERMAN, 1992).

A degradação da matéria orgânica em processos anaeróbios pode ser dividida em estágios nos quais consórcios de diversas espécies de microrganismos trabalham interativamente (WIJFFELS; BARTEN; REITH, 2003). Mes et al. (2003) dividem o processo de digestão anaeróbia nos quatro estágios apresentados a seguir:

- hidrólise: nesta etapa ocorre a conversão de biopolímeros insolúveis a compostos orgânicos;
- acidogênese: etapa em que ocorre a conversão de compostos solúveis a ácidos graxos voláteis e CO_2 .
- acetogênese: etapa em que ocorre a conversão de ácidos graxos voláteis a acetato e H_2 ;
- metanogênese: nesta etapa o acetato, o CO_2 e o H_2 são convertidos a gás metano.

A Figura 1 apresenta de forma esquemática o processo de digestão anaeróbia e suas etapas.

Figura 1 - Representação esquemática do processo de digestão anaeróbia



Fonte: Adaptado de: Mes, A.J.M. et al. (2003)

Devido à sua capacidade de gerar metano, o que pode tornar o processo ambiental e economicamente viável, muitos estudos têm sido conduzidos de forma a buscar maiores eficiências e diferentes configurações de reatores que possibilitem o

aumento da recuperação energética em biorreatores anaeróbios. Segundo Yadvika et al. (2004), as quatro principais técnicas estudadas para incrementar a produção de biogás em processos anaeróbios são: adição de aditivos como biomassa verde, linhagens específicas de bactérias e compostos inorgânicos; utilização de uma corrente de reciclo do afluente do reator; alteração de parâmetros operacionais (temperatura, pH, pré-tratamento, tamanho de partícula, razão C:N, agitação, inoculação, carga orgânica volumétrica, tempo de retenção hidráulica, concentração de sólidos) e, por último, o uso de reatores de filme fixo/biofilme.

3.2 VINHAÇA

Conforme mencionado, a vinhaça trata-se do principal efluente do processo de destilação fracionada do caldo de cana-de-açúcar (garapa) fermentado, para a obtenção do etanol (álcool etílico). Conforme é possível observar na Tabela 1, as características da vinhaça são muito variáveis e dependem principalmente de sua origem dentro do processo sucroalcooleiro.

É também possível observar que os valores carga orgânica em termos de DQO deste resíduo variam entre 15.000 e 65.000 mgO₂.L⁻¹, um valor mais de 100 vezes maior que a média de efluentes domésticos. Portanto, a vinhaça é considerada um efluente de alta carga orgânica. Em função desta característica, demonstrou ser um excelente fertirrigante do ponto de vista agrícola, pois possibilita a incorporação de nutrientes além da reutilização da água e da redução no consumo de fertilizantes sintéticos. Porém, segundo Silva et al., 2014, é necessário atentar para a dosagem de vinhaça a ser aplicada no solo, considerando os altos teores de elementos como potássio, cálcio, magnésio e além da matéria orgânica. A utilização desta como fertirrigante não deve ser maior que a capacidade de retenção de água do solo, sendo um dos motivos para isto é a possibilidade de lixiviação dos elementos presentes atingindo águas subterrâneas.

Tabela 1 - Características da vinhaça resultante de mostos de melaço, de caldo de cana e de mostos mistos de caldo e melaço.

Parâmetro	Unidade	Melaço	Caldo	Misto
pH	-	4,2 - 5,0	3,7 - 4,6	4,4 - 4,6
Temperatura	°C	80 - 100	80 - 100	80 - 100
DBO	mgO ₂ .L ⁻¹	25.000	6.000 – 16.500	19.800
DQO	mgO ₂ .L ⁻¹	65.000	15.000-33.000	45.000
Sólidos totais	mg.L ⁻¹	81.500	23.700	52.700
Sólidos voláteis	mg.L ⁻¹	60.000	20.000	40.000
Sólidos fixos	mg.L ⁻¹	21.500	3.700	12.700
Nitrogênio	mgN.L ⁻¹	450 – 1.610	150 - 700	480 - 710
Fósforo	mgP ₂ O ₅ .L ⁻¹	100 - 290	10-210	9 - 200
Potássio	mg K ₂ O.L ⁻¹	3.740 – 7.830	1.200 – 2.100	3.340 – 4.600
Cálcio	mgCaO.L ⁻¹	450 – 5.180	130 – 1.540	1.333 – 4.570
Magnésio	mgMgO.L ⁻¹	420 - 1520	200 - 490	580 - 700
Sulfato	mgSO ₄ .L ⁻¹	64.00	600 - 760	3.700 – 3.730
Carbono	mgC.L ⁻¹	11.200 – 22.900	5.700 – 13.400	8.700 – 12.100
Relação C/N	-	16 - 16,27	19,7 - 21,07	16,40 - 16,43
Matéria orgânica	mg.L ⁻¹	63.400	19.500	3.800
Subst. Redutoras	mg.L ⁻¹	9.500	79.00	8.300

Fonte: Viana, 1998

Dentre os principais problemas associados à inadequada aplicação da vinhaça no solo, Fuess (2013) destaca os seguintes: salinização, contaminação do lençol freático, alterações nas características dos corpos d'água e contaminação por metais. Acerca da salinização (acúmulo de sais solúveis) do solo, o autor cita que o acúmulo excessivo de sais devido à lixiviação destes leva a deficiências na disponibilização dos nutrientes às plantas o que resulta em quedas na qualidade e na produtividade da lavoura. Outro efeito do acúmulo dos sais no solo e a obstrução dos poros dos solos associada à geração de condições anaeróbias com consequente redução da atividade microbiana. De acordo com o autor, a contaminação do lençol freático também pode ocorrer devido à lixiviação dos nutrientes. O autor destaca as possíveis contaminações em especial pela presença de sais de potássio e por nitrato (em razão da oxidação do nitrogênio orgânico e da amônia). Vale ressaltar que altas concentrações de nitrato na água podem levar a

patologias na população que utiliza estas águas. Quanto às alterações nas características dos corpos d'água, pode ocorrer a acidificação destes em consequência do pH ácido da vinhaça, além do aumento da turbidez dos corpos d'água em razão das altas concentrações de sólidos suspensos e do aumento de matéria orgânica disponível no meio aquático, alterando consideravelmente os ecossistemas presentes nestes corpos d'água. Por último, o autor ressalta que embora ainda sejam escassos os trabalhos que tratam da contaminação por meio de metais, incluindo metais pesados, é possível encontrar estudos como os de USEPA (1986) e Ramalho e Amaral Sobrinho (2001) que demonstram a presença de concentrações elevadas de metais em amostras de vinhaça.

Como alternativa ao processo de fertirrigação surge, o tratamento da vinhaça através de digestão anaeróbia. Uma das vantagens da digestão anaeróbia, neste caso, é que após o tratamento da vinhaça a carga orgânica é reduzida, a maioria dos contaminantes é removida e o pH é estabilizado, desta forma é possível utilizar o efluente já tratado na fertirrigação com menor impacto ambiental. Mas, talvez, a maior vantagem do tratamento da vinhaça por digestão anaeróbia consista na possibilidade de recuperação energética, pela geração de biogás neste processo. Este biogás pode ser utilizado tanto no aquecimento de caldeiras ou trocadores de calor dentro do processo, através de sua queima, ou a sua conversão em energia elétrica. A Tabela 2 apresenta a equivalência entre 1 Nm³ de biogás e outras fontes energéticas, demonstrando assim a eficácia da utilização do biogás e, portanto, a digestão anaeróbia da vinhaça como alternativa viável à disposição da vinhaça no solo dos pontos de vista ambiental e econômico.

Tabela 2 - Equivalência energética entre 1 Nm³ de biogás e outras fontes energéticas.

Fonte energética/unidade	Equivalência
Álcool (L)	0,8
Carvão mineral (kg)	0,74
Lenha (kg)	3,5
Eletricidade (kWh)	1,25 – 1,43
Gasolina (L)	0,61 – 0,70
GLP (kg)	0,40 – 1,43
Óleo Diesel (L)	0,55

Fonte: Adaptado de Pompermayer e Junior, 2000

3.3 REATOR UASB

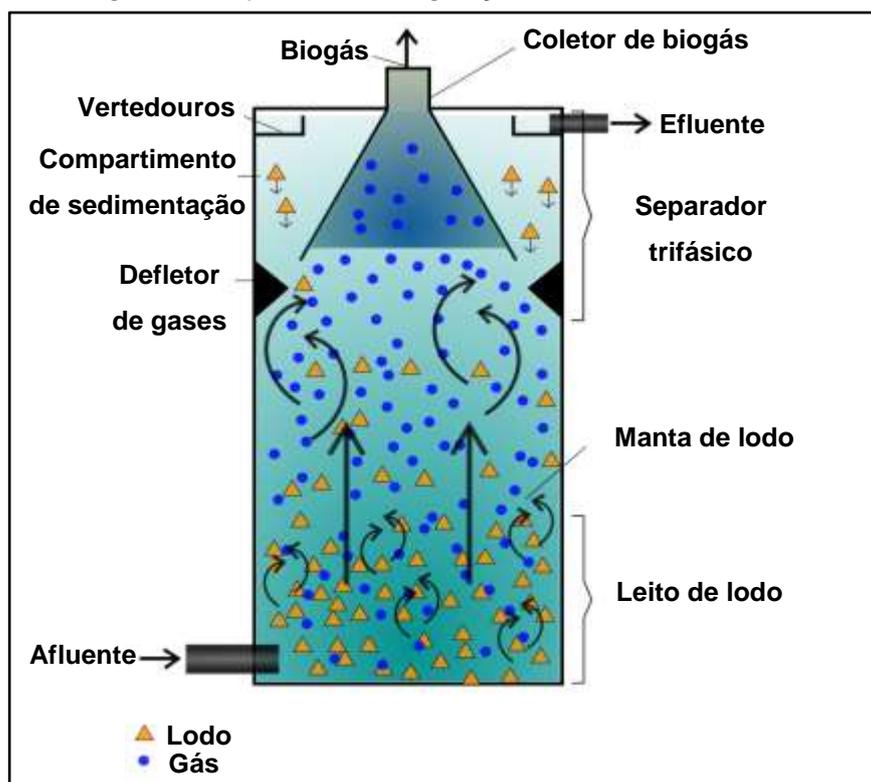
Até meados dos anos 1970, os processos anaeróbios eram pouco usados. No entanto, com o crescimento da crise energética, os tradicionais reatores aeróbios (dependentes tanto de eletricidade quanto da utilização de equipamentos para aeração do meio) começaram a dar espaço a uma nova tecnologia desenvolvida na Holanda no final desta década: o reator anaeróbio de manta de lodo ou UASB (*Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor*) (SOUZA, 1986). Com as vantagens de ser um reator simples, compacto (baixas demandas de área), de baixo custo de implantação e operação, baixa produção de lodo, possibilidade de reinício rápido e com altas taxas e eficiência de tratamento (remoção de DQO/DBO na ordem de 65% a 75%), o UASB ganhou espaço em especial na área de tratamento de efluentes que apresentam como principal poluente a elevada carga orgânica.

O reator UASB consiste basicamente em um tanque, onde o compartimento de digestão encontra-se no fundo. Este compartimento é formado inicialmente por um leito de lodo, com uma concentração alta de sólidos. Mais acima se encontra uma manta de lodo, a qual apresenta uma concentração menor de sólidos. No topo, o reator possui um separador trifásico. A Figura 2 ilustra a construção de um reator UASB.

A operação do sistema se inicia com a inoculação do reator com quantidades suficientes de lodo anaeróbio. Em seguida é realizada a alimentação do efluente, distribuindo este pelo fundo do reator, buscando-se um bom contato entre o leito e o efluente, para que se inicie assim a degradação da matéria orgânica através de reações anaeróbias. Uma zona de crescimento bacteriano mais disperso ocorre na camada acima do leito, denominada manta de lodo, em que as velocidades de sedimentação dos sólidos são mais baixas. As bolhas de biogás que se formam como resultado das reações anaeróbias tem um escoamento ascendente, contribuindo para a mistura do sistema. No entanto este movimento gera também o carregamento de lodo, gerando então a necessidade de um separador trifásico (gases, sólidos e líquidos) na parte superior do reator. Acima e no entorno deste separador cria-se uma câmara de sedimentação, na qual o lodo mais pesado é removido da fase líquida, retornando ao compartimento de digestão (zona da manta e do leito de lodo), ao passo que partículas mais leves são perdidas junto ao

efluente final. A entrada de biogás no compartimento de sedimentação é impedida através da instalação de defletores de gases nas paredes do reator. Por fim o biogás é coletado através do coletor de biogás instalado no topo do reator (SOUZA, 1986).

Figura 2 - Esquema de Configuração reator UASB.



As biorreações que ocorrem neste tipo de reator estão intimamente ligadas aos seus aspectos hidrodinâmicos, em especial à qualidade da mistura dentro do reator. Dois fatores influenciam de forma majoritária a mistura neste processo: a velocidade ascensional do líquido e a velocidade superficial do gás formado no reator. Em efluentes com alta carga orgânica, a velocidade ascensional do líquido será menor devido à necessidade de um maior tempo de detenção hidráulica (TDH), por este motivo se torna ainda mais acentuada a influência do gás gerado na auto mistura do sistema. A existência de caminhos preferenciais no reator pode levar à geração de zonas mortas e curtos circuitos causados por uma má condição de mistura, levando a um menor contato entre o efluente a ser tratado e a biomassa, conseqüentemente a redução de DQO do efluente será menor, gerando assim uma menor produção de biogás. Outro fator que pode interferir na geração ou não de

zonas mortas é a forma de distribuição de efluente, caso seja má projetada levará a criação de caminhos preferenciais, levando à existência de zonas mortas no reator, conseqüentemente o volume útil do reator passa a ser menor.

3.3.1 Critérios de Projeto

Segundo Souza (1986), os critérios básicos para o projeto de reatores UASB são: carga orgânica volumétrica aplicada (COV), velocidade superficial do escoamento e altura.

As cargas orgânicas volumétricas do reator que têm sido adotadas nos projetos em escala plena não têm ultrapassado $15 \text{ kgDQO.m}^{-3}.\text{dia}^{-1}$, embora tenha se observado o sucesso de estações piloto com cargas aplicadas elevadas (da ordem de $45 \text{ kgDQO.m}^{-3}.\text{dia}^{-1}$). A COV pode ser calculada a partir da vazão de efluente (Q), da concentração de substrato afluente do reator (S) e do volume do reator (V) (SOUZA, 1986):

$$\text{COV} = \frac{Q \times S}{V} \quad (1)$$

Dessa forma o volume pode ser calculado a partir de:

$$V = \frac{Q \times S}{\text{COV}} \quad (2)$$

Outro parâmetro a ser conhecido é o Tempo de Detenção Hidráulica (TDH), em dias, que representa o tempo que o fluido permanece no interior do reator. Segundo SOUZA (1986), este tempo pode ser calculado usando-se:

$$\text{TDH} = \frac{V}{Q} \quad (3)$$

A diminuição das velocidades superficiais ascendentes favorece a sedimentação do lodo no compartimento de decantação; dessa forma, torna-se importante conhecer a velocidade superficial do escoamento (v), a qual pode ser calculada a partir das Equações 4 e 5:

$$v = \frac{Q}{A} \quad (4)$$

$$v = \frac{H}{TDH} \quad (5)$$

sendo A a área da seção transversal do reator e H a altura do reator.

Pode-se verificar através destas equações a estreita relação entre a altura, a velocidade superficial do escoamento e o tempo de detenção hidráulica.

Em efluentes concentrados (como é o caso da vinhaça) o parâmetro de projeto limitante deve ser a carga orgânica aplicada. Nessas circunstâncias, é importante que o reator tenha a maior altura possível por unidade de volume, tendo em vista a redução da área requerida; no entanto, a altura máxima indicada é em torno de 6 m, pois alturas superiores a essa causarão problemas de processo, tais como dificuldade de separação gás/líquido, formação de espuma, entre outros (SOUZA, 1986). Em seu trabalho Souza e Garcia (1986) utilizaram um reator UASB para tratar vinhaça. Os valores testados para a carga orgânica volumétrica foram 9,4 e 16,2 kgDQO.m⁻³.dia⁻¹, obtendo resultados similares para a produção de biogás porém com um menor TDH para a segunda condição.

3.3.2 Aplicações de reatores UASB

Inicialmente desenvolvido na Holanda para aplicação em tratamento de efluentes industriais, os quais em geral possuem alta carga orgânica, o reator UASB ganhou as mais diversas aplicações. A seguir serão citadas algumas das aplicações mais recentes.

Intanoo et al. (2014) estudaram a aplicação de reatores UASB em dois estágios buscando a obtenção de hidrogênio no primeiro reator e de metano no segundo reator a partir dos efluentes líquidos da produção de mandioca. O objetivo foi avaliar a otimização do reator quando realizado o reciclo do efluente do UASB metanogênico a uma razão constante de 1:1 para o UASB produtor de hidrogênio. Foi verificada uma redução no consumo de NaOH para controle do pH no primeiro reator.

O estudo realizado por El-Sheikh et al. (2011) visa o pós tratamento de resíduos biológicos de curtume através de dois reatores UASB em série, buscando atender a parâmetros que permitam o lançamento do efluente na rede de esgotos municipal. Foi verificada uma remoção de DQO de 78,2% no primeiro reator e 21,8%

no segundo reator. Segundo os autores, deve ser realizada uma análise prévia do efluente para verificar a necessidade de um segundo reator. Foi verificado também no estudo que o uso de H_2SO_4 para o controle do pH teve uma influência negativa, pois o enxofre pode diminuir a atividade metanogênica das bactérias. Por fim, foi verificada eficiência de remoção de DQO e atendimento aos parâmetros egípcios de lançamento de efluentes na rede municipal com o uso de reatores UASB.

O tratamento de esgotos domésticos através de reatores UASB em regiões tropicais e subtropicais tem sido amplamente recomendado por pesquisas, segundo Rizvi et al. (2013). Os autores estudaram a partida de um reator com esta finalidade e a influência da temperatura, idade do lodo e tempo de retenção hidráulica no desempenho do reator UASB. Foi verificado um tempo de partida de 120 dias e a melhora no desempenho do reator com o aumento da temperatura e idade do lodo.

A obtenção de biogás através da vinhaça da cana-de-açúcar em reatores UASB tem sido estudada há algum tempo, por certos autores. Junior et al. (2016) estudaram a aplicação de reatores UASB de operação contínua em um e dois estágios para o tratamento de vinhaça, concluindo que a sua operação em dois estágios levou a uma produção de metano em torno de 25% maior. Em seu estudo, Janke et al. (2016) estudaram o aumento na produção de metano e da estabilidade do processo de produção de biogás através da adição de ureia e oligoelementos ao reator. O estudo demonstrou que o processo se manteve estável com a suplementação, além de ter gerado um aumento de 79% na produção de metano. A conversão de vinhaça a metano em reatores UASB com aumento gradual da COV foi estudada por Barros, Duda, Oliveira (2016). Diferentes valores para a COV e para o TDH foram utilizados nos dois reatores estudados. O estudo verificou que a recirculação do efluente tratado permitiu o ajuste do pH do afluente sem a necessidade de adição de hidróxido de sódio. Faria (2014) utilizou dois reatores UASB em série (Reator a e Reator b) para o tratamento de vinhaça diluída na faixa de temperatura termofílica. O estudo verificou que a utilização de reatores UASB em série indicou uma separação dos microrganismos metanogênicos no segundo reator (Reator b), permitindo uma concentração de metano de 82% no biogás produzido. A Tabela 3 apresenta um resumo de alguns dos resultados mais recentes obtidos em reatores UASB tratando vinhaça. Observa-se nesta uma variação de TDH entre 7,5 h e 67,2 h e de remoção de DQO entre 27% e 82%, especialmente devido a fatores

de projeto e condições de operação, além das características da vinhaça utilizada. O rendimento na produção de metano variou em torno de 180% entre o menor e o maior valor, apresentando um valor médio entre os trabalhos de $0,252 \text{ Nm}^3.\text{KgDQO}_{\text{rem}}^{-1}$. Percebe-se que nos reatores de menor volume (1,3 L, 3,4 L, 10 L e 12 L) o rendimento de metano é maior (o reator de 5,6 L foi desconsiderado, pois está em série com outro reator). Isso acontece, pois o controle das condições operacionais de reatores em escala de bancada torna-se mais simples se comparado a reatores maiores, em escala piloto ou escala real, além disso, existe uma maior facilidade em se manter um alto desempenho hidrodinâmico em reatores menores. Um controle mais eficiente de fatores como temperatura e pH do reator conduz a um maior desempenho na produção de biogás.

Tabela 3 - Resultados experimentais obtidos em reatores UASB para tratamento de vinhaça.

Referência	Volume Reator (L)	Temp. (°C)	COV (kgDQO.m ⁻³ .dia ⁻¹)	TDH (h)	Eficiência de remoção -DQO- (%)	Rendimento de metano (Nm ³ .kgDQO _{rem} ⁻¹)
Júnior et al. (2016)	10 (a)	55	25	34	74,2	0,234
	3,4 (b)	55	25	23	72.6	0,306
Janke et al. (2016)	1,3	40	9,6	60	-	0,239
Barros et al. (2016)	40,5 (a)	40	7,5 (a)	67,2(a)	Entre 49 - 82	0,181 (a)
	21,5 (b)		11,5 (b)	43,2-67,2(b)		0,185 (b)
Faria (2014)	12,1 (a)	55	20	16	36	0,460
	5,6 (b)		35	7,5	27	0,160

(a) e (b) utilizados para diferenciar os dois reatores utilizados em trabalhos onde o autor utilizou mais de um reator em seus experimentos.

3.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)

Com o advento da informática e o rápido e crescente desenvolvimento de computadores cada vez mais velozes e com maiores capacidades de armazenamento houve também a expansão da utilização de técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD).

Fluidodinâmica computacional se define pela utilização de métodos computacionais para a simulação numérica e solução de modelos aplicados à

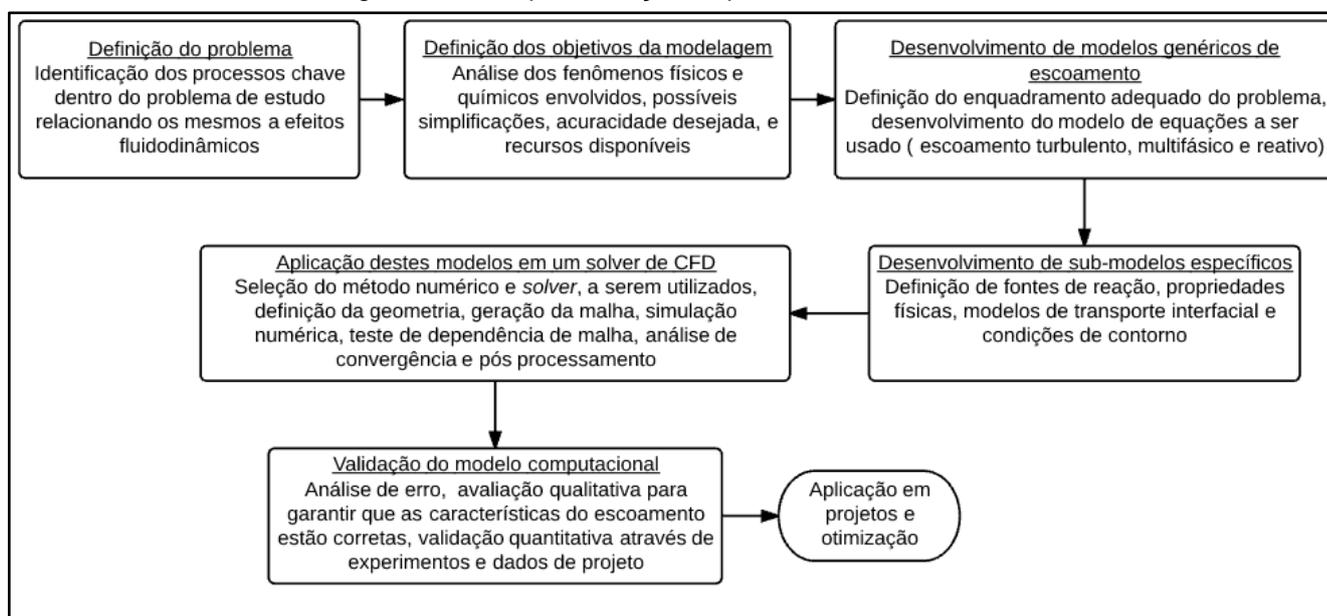
Dinâmica de Fluidos, a partir da solução de equações da conservação da quantidade de movimento, de massa e da energia.

A utilização de CFD pode ser vantajosa por diversos motivos, como por exemplo:

- a) previsão: permite a previsão do desempenho de um novo produto antes que este entre em operação ou em mercado, com vistas também a evitar falhas;
- b) detalhamento: em geral simulações computacionais são capazes de fornecer um nível maior de detalhamento do que os experimentos, permitindo ainda o cálculo de dados derivados (tensão, vorticidade, tempo de residência);
- c) custos: no caso de experimentos de larga escala e que demandam altos custos, a simulação computacional pode ter um custo menor por não envolver equipamentos e suprimentos para testes; no entanto, é preciso atentar para o custo dos softwares de simulação, da necessidade de uma infraestrutura para validação do modelo e da mão de obra necessária no intuito de calcular o custo/benefício de simulações computacionais;
- d) tempo: a possibilidade de realizar diversas simulações, alterando diferentes parâmetros em um tempo relativamente pequeno se comparado aos experimentos; mas assim como na questão de custos, é importante avaliar o tipo de experimento que estará sendo simulado, pois há casos onde o tempo de experimento pode ser menor e menos desgastante que a simulação em CFD.

A simulação computacional, embora busque obter os resultados mais precisos possíveis, sempre irá fornecer resultados aproximados, uma vez que as soluções não são analíticas. Ranade (2002) sugere um fluxo para a resolução de problemas relacionados à modelagem fluidodinâmica de escoamentos (Figura 3), ressaltando a importância da compreensão do problema físico e de suas variáveis antes do início da etapa de simulação, buscando assim evitar, ao máximo, erros relacionados à simulação.

Figura 3 - Fluxo para solução de problemas de escoamento em CFD.



Fonte: adaptado de Ranade (2002)

Percebe-se neste contexto a importância de um prévio conhecimento tanto das características do escoamento quanto dos modelos disponíveis para o cálculo das variáveis a serem estudadas. O item 3.5 deste trabalho trata dos modelos aplicados a escoamentos multifásicos.

3.4.1 Discretização do domínio

Visando à solução de equações algébricas aplicáveis ao escoamento, buscando resolver numericamente as equações diferenciais ou equações de conservação de massa, movimento linear, energia e de matéria, existe a necessidade de discretização do domínio físico ou geração de malha. A escolha da forma mais adequada de geração dessa malha para cada problema influencia de forma significativa os resultados obtidos nas simulações CFD. Há a possibilidade de geração de diferentes tipos de malhas, dependendo do resultado desejado e da complexidade da geometria. Primeiramente, para malhas no plano bidimensional dois tipos de elementos estão disponíveis: triangulares ou quadrilaterais. Enquanto no espaço tridimensional (3D) existem, de forma geral, quatro opções de volumes disponíveis, sendo eles: tetraédricos, hexaédricos, piramidais e prismáticos de base triangular (THOMPSON, 1996).

Existem dois tipos de malhas: malhas estruturadas e malhas não estruturadas. Uma malha estruturada requer que todos os nós da malha tenham um número igual de elementos adjacentes (em geral elementos quadriláteros ou hexaédricos). A posição de qualquer ponto da malha no domínio é identificado por um conjunto de dois (2D) ou três (3D) índices (i, j, k), sendo portanto equivalente ao plano cartesiano. Este tipo de malha é mais usual em geometrias simples, devido às suas restrições. Em malhas não estruturadas (em geral elementos triangulares ou tetraédricos), estas restrições são menores, adequando o domínio de solução à geometria desejada. A vantagem da adaptabilidade pode ser, no entanto, sobreposta pela irregularidade da estrutura gerada (FERZIGER; PERIC, 2002).

É necessário, antes de escolher o tipo de malha a ser utilizado, observar os resultados esperados, a física do problema e a geometria utilizada. Simplificações na geometria que levem a uma malha com melhor qualidade é altamente recomendada, uma vez que uma malha com qualidade melhor, gera resultados mais precisos.

A discretização do domínio por si só não garante a qualidade dos resultados das simulações a serem realizadas. Segundo Patankar (1980), à medida que se aumenta o número de pontos discretos em uma malha, chega-se mais próximo da solução exata do problema. Logo, malhas grosseiras, ou seja, com um menor número de volumes de controle ou elementos podem ser inadequadas, levando a resultados imprecisos. Por outro lado, malhas excessivamente refinadas levam a um custo computacional elevado devido ao aumento no tempo de processamento (SIMÕES, 2009), uma vez que ao aumentar o número de volumes de controle aumenta-se o número de equações algébricas que compõem o sistema de equações a ser resolvido. Neste sentido, torna-se de fundamental importância garantir que os resultados obtidos sejam, ao mesmo tempo, precisos e independentes da malha, ou seja, que o refinamento da malha não gere uma alteração relevante nos resultados.

Com o objetivo de buscar a malha ideal para cada problema surgem diferentes métodos. O refinamento adaptativo de malhas citado por Yu et al.(2013), Berger (1984) e Berger e Colella (1989) busca a geração de malhas que possuam maior refinamento nas áreas com maior gradiente de variação da propriedade a ser medida. A vantagem deste método consiste na possibilidade de um refinamento local, possibilitando uma solução com um menor número de volumes.

Visando à padronização de um método para realizar testes de dependência de malha, Roache (1994) propôs o cálculo de um índice de convergência da malha ou *Grid Convergence Index* (GCI). O método se baseia na estimativa do erro de convergência derivado na teoria generalizada da Extrapolação de Richardson e disponibiliza um método assintótico para quantificar incertezas de convergência de malha. Busca-se neste método relacionar os resultados do teste de convergência de malha com os esperados ao aumentar o número de volumes de controle da malha a uma razão fixa de refinamento (r_r). O método foi aplicado por Craig, Nieuwoudt e Niemand (2013) em seu estudo e, segundo os autores, o objetivo do refinamento da malha é obter uma solução que esteja no intervalo assintótico, através da comparação de resultados obtidos com malhas com diferentes refinamentos.

3.4.2 Métodos de discretização das equações diferenciais

Simulações fluidodinâmicas computacionais envolvem a solução numérica de equações diferenciais de estado como equações de conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia. Para tal, podem ser utilizados os métodos tradicionais para a solução de equações diferenciais que são os Métodos de Diferenças Finitas (MDF), de Volumes Finitos (MVF) e de Elementos Finitos (MEF) (HIRSCH, 1988).

O MDF, historicamente, sempre foi empregado na área de mecânica de fluidos, resolvendo problemas altamente não lineares, uma vez que envolvem as equações de Navier-Stokes. Assim, seu desenvolvimento se concentrou na tentativa de compreender e resolver as não linearidades dos termos advectivos e na problemática do acoplamento entre as equações, deixando em segundo plano o tratamento de geometrias complexa (MALISKA, 2004).

Por outro lado, o MEF foi em geral aplicado na área estrutural para a solução de problemas de elasticidade, os quais não possuem o termo advectivo. O emprego de malhas não estruturadas do tipo triangular permite que problemas em geometrias complexas possam ser resolvidos. Sendo assim, o MDF e o MEF trabalham com pontos na malha e não com volumes, não sendo conservativos em nível discreto.

Até o início da década de 1970 o MEF destacava-se pela sua grande capacidade de tratamento de geometrias complexas e alto custo computacional ao

tratar os termos advectivos das equações de movimento e o MDF era muito aplicado na área de fluidos, mas sem ferramentas para tratar geometrias complexas. Foi então que o aprimoramento do MVF foi consolidado. A realização do balanço da propriedade em questão nos volumes elementares ou volumes finitos é uma das formas de se obter as equações aproximadas no método dos volumes finitos; outra forma é integrar sobre o volume elementar, no espaço e no tempo as equações na forma conservativa. Para deduzir as equações diferenciais que representam fenômenos físicos, é necessário, primeiramente, realizar um balanço para a propriedade em um volume finito, e, em seguida, aplicar o processo de limites para a obtenção da equação diferencial. Desta forma, percebe-se que os dois processos de obtenção das equações aproximadas são equivalentes (MALISKA, 2004).

É importante observar que o MDF trata da substituição do operador diferencial por seu correspondente numérico, enquanto o MVF realiza um balanço de conservação da propriedade para cada volume elementar no intuito de obter a correspondente equação aproximada, sendo assim capaz de resolver problemas em geometrias irregulares (MALISKA, 2004).

3.5 ESCOAMENTO MULTIFÁSICO

Escoamentos multifásicos dizem respeito ao deslocamento simultâneo de um ou mais fluidos na presença ou não de uma fase particulado (que pode ser sólida, líquida ou gasosa). Este tipo de escoamento está presente nos mais variados tipos de processos, entre eles: processos biológicos, químicos ou bioquímicos, processos de craqueamento catalítico, minerodutos, caldeiras e processos de separação (fluido-sólido ou fluido-fluido). As variáveis e forças envolvidas vão depender em especial das características dos fluidos, condições de operação e geometria onde ocorre o escoamento. Prever a interação entre as fases pode ser considerado o grande desafio da modelagem de escoamentos multifásicos e, por isso, da importância de estudos nesta área.

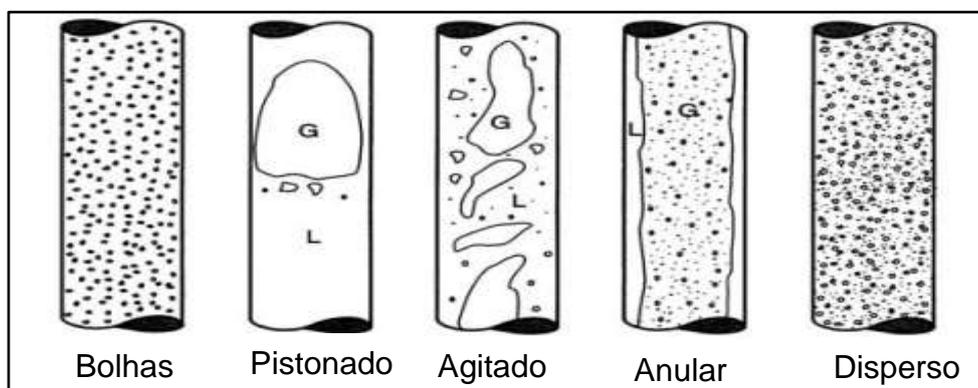
3.5.1 Padrões de escoamento e abordagens

Com relação a escoamentos multifásicos, dependendo das condições operacionais, da geometria do duto ou equipamento e da interação entre as fases, diferentes regimes de escoamento podem ser observados ou mesmo gerados. Ranade (2002) classifica estes regimes de escoamento de acordo com a presença das fases termodinâmicas: gás/líquido, gás/sólido, gás/líquido/sólido, líquido/líquido, líquido-sólido e assim por diante. Acerca da topologia do escoamento, os regimes de escoamento podem ser:

- a) escoamento disperso: considera-se uma fase como sendo contínua e todas as outras fases existentes como dispersas escoando através da fase contínua; um exemplo, é o caso de reatores coluna de bolha, onde o gás (fase dispersa) flui através do líquido (fase contínua);
- b) escoamento estratificado: todas as fases estão presentes de forma contínua no escoamento, estando as interfaces localizadas entre as diferentes fases; pode ser dado como exemplo o escoamento de água e óleo em dutos;
- c) escoamento de mistura: neste tipo de escoamento existem partículas dispersas e ao mesmo tempo uma interface semi-contínua, tendo um comportamento similar ao que acontece no escoamento anular com bolhas, onde algumas bolhas de gás escoam através do filme líquido anular (RANADE, 2002).

Entre os padrões de escoamento citados, o mais comum é o de escoamento disperso. O escoamento gás/líquido está presente em grande parte dos biorreatores, tanto nos que geram algum tipo de gás, quanto nos que necessitam de ar para promoverem as biorreações. Por este motivo, este tipo de escoamento em especial apresenta uma classificação quando do escoamento em dutos. Em geral, os padrões de escoamento gás/líquido em dutos horizontais ou verticais podem ser na forma de bolhas, pistonado, agitado, anular e disperso, conforme ilustrado na Figura 4 (BRENNEN, 2005).

Figura 4 - Padrões de escoamento em dutos verticais.

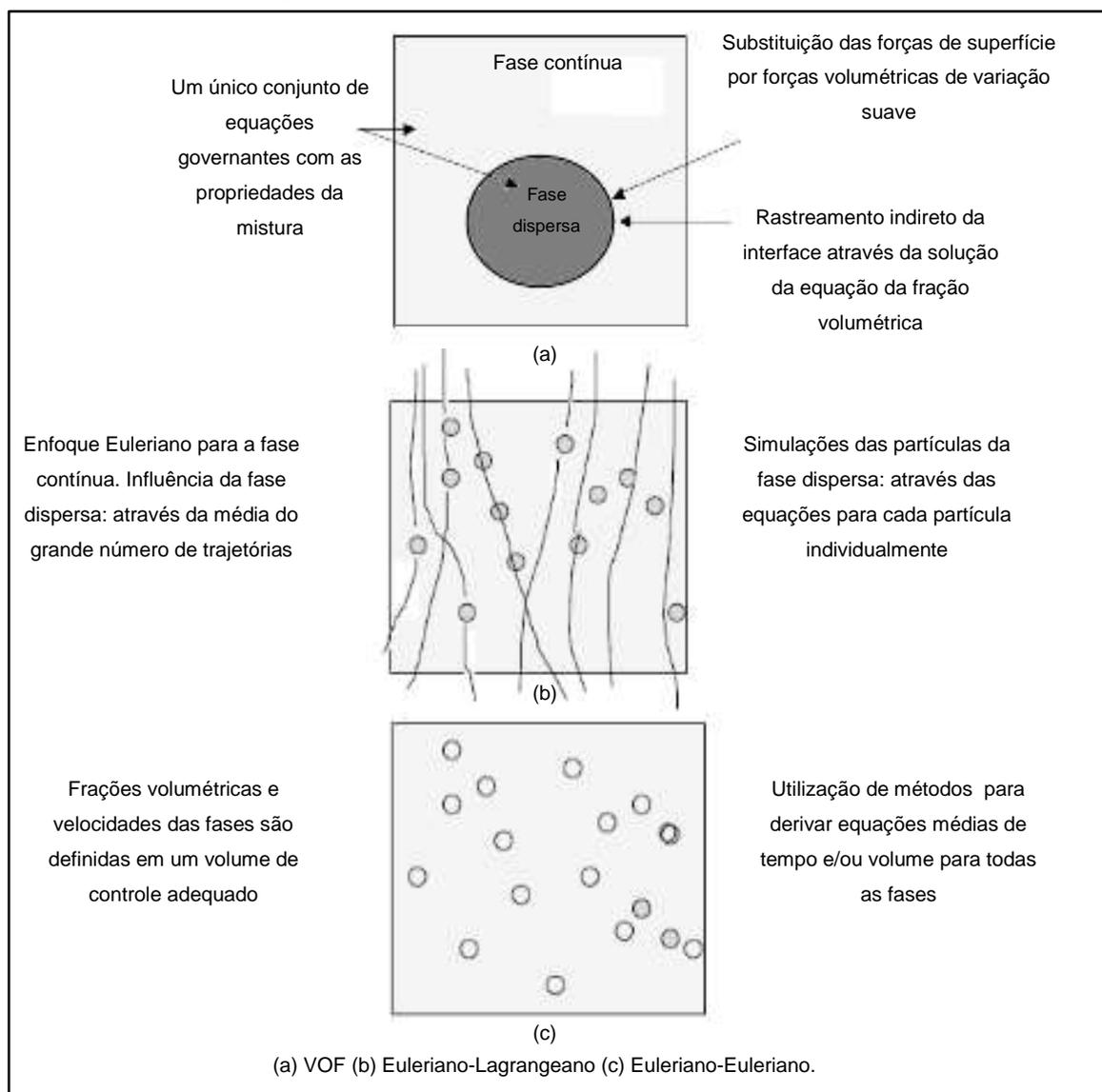


Fonte: Brennen, 2005.

De acordo com Ranade (2002), a modelagem de escoamentos multifásicos em geral é feita seguindo uma das três abordagens: VOF (volume de fluido), Euleriana-Lagrangeana ou Euleriana-Euleriana. O modelo VOF conceitualmente se trata do mais simples. O movimento das fases é modelado empregando uma formulação de equações locais e instantâneas para a massa, o movimento e a energia. Esta abordagem acompanha o movimento de todas as fases, a partir do qual o movimento da interface é indiretamente inferido, portanto as forças interfaciais são substituídas por “forças volumétricas de variação suave” (Figura 5a). Este modelo é limitado a modelar o movimento de apenas uma fase dispersa com poucas partículas (RANADE, 2002).

Na abordagem Euleriana-Lagrangeana, o sistema de referência Lagrangeano se movimenta com a partícula e uma equação da conservação da quantidade de movimento é resolvida para cada partícula (Figura 5b). Esta abordagem restringe-se apenas a sistemas dispersos e é recomendada quando a fase dispersa possui uma fração volumétrica baixa (inferiores a 10%), podendo levar a altos custos computacionais do contrário (PALADINO, 2005). Em uma abordagem Euleriana-Euleriana, ambas as fases são assumidas como interpenetrantes e contínuas em um enfoque Euleriano, resultando na completa resolução das equações de Navier-Stokes para as duas fases.

Figura 5 - Resumo dos enfoques para sistemas multifásicos.



Fonte: Adaptado de Ranade, 2002.

A simulação da trajetória das fases (contínuas ou dispersas) não é realizada computacionalmente, mas conceitualmente. Para o acoplamento entre as fases dispersas e a fase contínua, é realizada a implementação dos termos de transferência interfacial dentro das equações de balanço de quantidade de movimento (Figura 5c). É recomendado para casos em que a fração volumétrica da fase dispersa é significativa (RANADE, 2002; PALADINO, 2005; LIMA, 2008).

3.5.2 Modelos matemáticos – Forças interfaciais

Dentro do enfoque Euleriano-Euleriano com fases dispersas, a introdução do termo de transferência de quantidade de movimento entre as fases leva à necessidade da análise de quais forças interfaciais existem para cada caso a ser estudado e quais os modelos adequados para a quantificação de tais forças. Além disso, existe a necessidade de verificar se o escoamento é laminar ou turbulento. No caso de escoamentos turbulentos, ainda é necessário escolher um modelo de equações adequado para a previsão dos efeitos da turbulência no escoamento.

Dentre as forças que influenciam na transferência interfacial, três podem ser citadas como as principais: força de arraste (F_D), força de sustentação (F_{lift}) e força de massa virtual (F_{mv}). Quando modelos de turbulência são ativados, o escoamento ainda pode sofrer influência da força de dispersão turbulenta (F_{td}) e da força de interação turbulenta (F_{ti}). A seguir são discutidas estas forças e sua modelagem matemática.

Força de arraste (\vec{F}_D): com relação a escoamentos dispersos, é a responsável pela maior parte da transferência de quantidade de movimento interfacial entre as fases (BATEN; ELLENBERGER; KRISHNA, 2003; CHEN; SANYAL; DUDUKOVIC, 2005; LIMA et al., 2011; CHENG; ZHU, 2005). De forma geral pode ser calculada por:

$$\vec{F}_D = C_D \frac{\pi}{4} d_p^2 \rho_q v_r^2 \quad (6)$$

sendo d_p o diâmetro da fase dispersa, ρ_q a massa específica da fase contínua, v_r a velocidade relativa e C_D um coeficiente de arraste. A literatura apresenta diversas correlações para o cálculo do coeficiente de arraste com o modelo escolhido dependendo das características do escoamento, das fases presentes no escoamento, do formato da fase dispersa, etc. Em geral, o C_D varia com o número da Reynolds da partícula (Re_p) que pode ser calculado por:

$$Re_p = \frac{d_p |v_p - v_q| \rho_q}{\mu_q} \quad (7)$$

onde v_p corresponde a velocidade da fase dispersa ou partícula, v_q velocidade da fase contínua, $v_p - v_q$ a velocidade relativa e μ_q a viscosidade dinâmica da fase contínua.

A força de arraste sobre um corpo pode ser decomposta em força devido ao cisalhamento superficial e força de arraste de forma. Desta forma, para baixos Re_p o arraste é em especial gerado pelo atrito superficial. À medida que o Re_p aumenta, o arraste de forma começa a ter maior influência até o ponto que a altos Re_p o arraste se dá principalmente por este fenômeno. A partir disso é possível dizer que existem principalmente três regimes citados na literatura segundo Paladino (2005):

- Regime de Stokes ($Re_p \leq 1$): o coeficiente de arraste neste regime é definido por:

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \quad (8)$$

- Regime Viscoso ($1 < Re_p < 1000$): a literatura apresenta inúmeras correlações teóricas e experimentais que podem ser aplicadas neste regime. Para escoamentos em regime viscoso, Schiller e Naumann (1933) apresentam a correlação definida por:

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15Re_p^{0,687}) \quad (9)$$

Ainda com relação a regimes viscosos, em escoamentos com gotas, bolhas ou partículas sólidas Ishii e Zuber (1979) por sua vez propuseram a seguinte correlação:

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0,1Re_p^{0,75}) \quad (10)$$

Cabe nesse ponto uma análise do problema em questão e da literatura na definição de qual correlação é mais adequada para cada caso. Um resumo das correlações para este regime e para casos especiais do regime turbulento é apresentado após a descrição dos regimes.

Regime inercial ou turbulento ($1000 < Re_p < 2 \times 10^5$): neste regime o número de Re_p passa a não ter mais influência no arraste, sendo este apenas função do arraste de forma. O coeficiente assume assim um valor constante de 0,44.

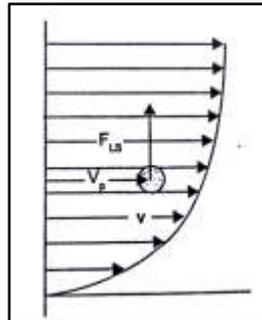
Acerca das correlações mais comuns para o cálculo do C_D em regimes fluido-fluido pode-se citar: Schiller e Naumann (1933), que é recomendada para casos de interação fluido-fluido, na forma de partículas dispersas. Morsi e Alexandre (1972) propuseram o modelo mais completo, se ajustando a uma larga gama de valores de Re_p , porém tornando a simulação menos estável. O modelo proposto por Clift, Grace e Weber (1978) é indicado quando a fase dispersa possui uma variedade de formatos e regiões do domínio de estudo com altas concentrações de partículas. O modelo de Ishii (1979) o qual é recomendado para escoamentos em ebulição.

Com relação a regimes fluido-sólido, foram discutidos três modelos para o cálculo do coeficiente de arraste. O modelo de Syamlal e O'Brien (1989) é derivado para uma única partícula esférica em um fluido, e modificado com uma correlação para a velocidade relativa ($v_{r,s}$). Segundo Lundberg e Halvorsen (2008), a correlação para a velocidade relativa trata-se da velocidade terminal de sedimentação da partícula em um sistema dividida pela velocidade terminal de sedimentação de uma esfera. O modelo Wen e Yu (1966) que é recomendado para sistemas diluídos, segundo Lahiri e Ghanta (2010). Este modelo utiliza uma correlação a partir de dados experimentais de Richardson and Zaki, e é válido quando as forças internas são negligenciáveis o que significa que as forças viscosas são as que mais influenciam o comportamento do escoamento Lundberg e Halvorsen (2008). Por fim, o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) trata-se de uma combinação do modelo de Wen e Yu (1966) com a equação de Ergun. A equação de Ergun é derivada para leitos densos, e relaciona a força de arraste com a queda de pressão através de um leito poroso. De acordo com Lahiri e Ghanta (2010) este modelo é mais recomendado para casos de leitos fluidizados densos

Força de sustentação (\vec{F}_{lift}): trata-se da força que age em uma partícula imersa em um fluido em uma direção ortogonal à direção do escoamento, possui grande importância no movimento lateral das partículas (ROSA, 2012). Dois diferentes mecanismos podem gerar forças laterais. O primeiro deles trata-se de quando a partícula possui rotação própria, em função de choques com as paredes ou com outras partículas. A força de sustentação gerada por este efeito é denominada força de Magnus. O segundo mecanismo trata de partículas submetidas a um escoamento externo, onde o fluido se deforma, ou seja, onde há vorticidade.

Este mecanismo é denominado efeito Saffman (LUO; DAHHAN, 2011; ROSA, 2012). Em escoamentos gás/liquido Saffman (1965,1968) cita que a força de Saffman é em geral mais significativa que a força de Magnus. A Figura 6 apresenta uma representação esquemática da força de sustentação e das velocidades da partícula e do fluido.

Figura 6 - Força de sustentação devido à taxa de deformação do fluido



Fonte: Rosa, 2012

A força de sustentação (\vec{F}_{lift}) é calculada conforme a Equação 11. Onde C_{lift} trata-se do coeficiente de sustentação, \vec{v}_q a velocidade da fase contínua, \vec{v}_p a velocidade da fase dispersa e α_p a fração volumétrica da fase dispersa:

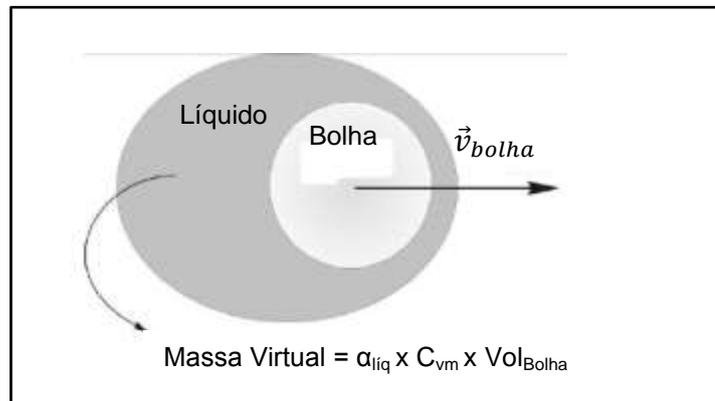
$$\vec{F}_{lift} = C_{lift} \rho_q \alpha_p (\vec{v}_p - \vec{v}_q) \times (\nabla \times \vec{v}_q) \quad (11)$$

Força de massa virtual (\vec{F}_{mv}): trata-se da quantidade de movimento necessária para deslocar a massa da fase contínua pela passagem de uma bolha. Isso requer que esta parcela de massa seja acelerada em relação à aceleração que tinha originalmente dentro da fase contínua (Paladino, 2005). A região do escoamento que é perturbada pela partícula dependerá fortemente da forma geométrica da partícula, inclusive de sua simetria (Rosa, 2012). De forma geral a massa virtual pode ser calculada por:

$$\vec{F}_{mv} = \alpha_p \rho_q C_{mv} \left(\frac{D_q \vec{v}_q}{Dt} - \frac{D_p \vec{v}_p}{Dt} \right) \quad (12)$$

sendo o C_{mv} o coeficiente de massa virtual, dependente da aceleração, geralmente igual a 0,5. Fisicamente, este coeficiente trata-se da relação entre o volume de massa deslocado e o volume da bolha, conforme Figura 7 (Paladino, 2005).

Figura 7 - Representação da massa virtual.



Fonte: adaptado de Paladino (2005)

Força de dispersão turbulenta ($\vec{F}_{td,q}$): em escoamentos turbulentos surgem ainda duas forças interfaciais que podem ser consideradas as forças de dispersão e interação turbulenta. Neste trabalho, apenas a primeira é discutida. A força de dispersão turbulenta leva em consideração a difusão turbulenta da fase dispersa na fase contínua (LUO; DAHHAN, 2011) e pode ser calculado por:

$$\vec{F}_{td,q} = -\vec{F}_{td,p} = C_{td}\rho_q k_q \nabla\alpha_q \left(\frac{D_q \vec{v}_q}{Dt} - \frac{D_p \vec{v}_p}{Dt} \right) \quad (13)$$

onde ρ_q é a massa específica da fase contínua, k_q a energia cinética turbulenta da fase contínua, $\nabla\alpha_p$ o gradiente de fração volumétrica da fase contínua e C_{td} a constante de dispersão turbulenta, em geral um valor entre 0,1 e 0,5 (LUO; DAHHAN, 2011).

Teoria Cinética do Escoamento Granular (KTGF): Além das forças interfaciais, para casos de escoamentos onde uma das fases é sólida na forma de grânulos, é possível modelar a cinética que rege as colisões entre estes grânulos utilizando a teoria cinética do escoamento granular (KTGF). Esta teoria foi inicialmente estudada por Jenkins e Savage (1983). Mais tarde foi aperfeiçoada e novos modelos para escoamentos multifásicos foram desenvolvidos por Lun et al. (1984), Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) e Syamlal e O'Brien (1989). Esta teoria é utilizada para modelar as tensões da fase granular em modelos que adotam a abordagem Euleriana-Euleriana. Trata-se de uma extensão da teoria cinética

clássica dos gases, porém aplicada a escoamentos granulares que possuem uma fase contínua (fluido) e uma fase sólida dispersa (MARINI, 2008). Baseia-se no pressuposto de que a velocidade de distribuição individual das partículas, entre um grande número de partículas dentro de um conjunto do volume, pode ser representada pela distribuição dos seus pontos de velocidade (Araújo et al., 2014). De acordo com Ding e Gidapow (1990), nesta teoria a temperatura termal é substituída por uma temperatura do escoamento granular, a qual mede as oscilações aleatórias das partículas (GIDASPOW; JUNG e SINGH, 2004) e onde uma equação diferencial é derivada utilizando os métodos da teoria cinética. Desta forma, a viscosidade e as tensões da fase granular são uma função desta temperatura granular, a qual varia de acordo com o tempo e a posição em um leito fluidizado.

3.5.3 Modelos matemáticos – Turbulência

Escoamentos turbulentos são comuns em problemas de engenharia, em especial em reatores que necessitam de uma boa qualidade de mistura. Ferziger e Peric (2002) descrevem as principais características dos escoamentos turbulentos:

- a) são altamente transientes, sendo que o perfil de velocidades em função do tempo varia constantemente;
- b) são tridimensionais e embora a velocidade média no tempo pode ser uma função apenas de duas coordenadas no plano cartesiano, o perfil instantâneo flutua rapidamente nas três dimensões espaciais;
- c) possuem uma grande quantidade de vorticidade, sendo esse um dos principais mecanismos responsáveis pelo aumento da intensidade turbulenta.
- d) pelo mecanismo de difusão turbulenta, a turbulência aumenta a taxa à qual as quantidades conservativas são misturadas;
- e) por meio do mecanismo de difusão turbulenta, fluidos com diferentes quantidades de movimento são colocados em contato, reduzindo gradientes de velocidade graças à viscosidade e assim reduzindo a energia cinética do escoamento, ou seja, o processo de mistura é dissipativo;

f) são complexos, em especial, devido à aleatoriedade de seu comportamento e por oscilarem em uma ampla gama de escala de tempo.

Justamente devido à complexidade do escoamento em regime turbulento, uma série de modelos visando à investigação e simulação da turbulência vêm sendo estudados ao longo dos anos. Entre os principais modelos, os que se baseiam na abordagem RANS (*Reynolds-averaged Navier–Stokes*) se destacam, em especial, devido a vantagens como o menor esforço computacional em relação a outros modelos que utilizam a abordagem DNS (*direct numerical simulation*) e a abordagem LES (*large eddy simulation*). No entanto os modelos baseados na abordagem RANS apresentam uma precisão menor se comparados a modelos baseados nas abordagens DNS e LES (MAURINA et al., 2014; WU, 2013)

Embora o conjunto de equações utilizando no método RANS seja formalmente equivalente à forma utilizada para o escoamento no regime laminar, não é possível a sua solução sem o acréscimo de informações adicionais. De fato, quando são introduzidas as quantidades médias e flutuantes das propriedades, como a velocidade, nas equações de transporte da quantidade de movimento, é também inserido um termo conhecido como tensor de Reynolds, o qual necessita para sua resolução do emprego de modelos de turbulência (HIRSCH, 1988).

Entre as diversas opções de modelos o $k-\epsilon$ tem sido o mais popular na modelagem da turbulência da mistura em biorreatores, embora outros modelos (*Reynolds stress model*, $k-\omega$, etc..) também sejam utilizados em algumas aplicações específicas. De forma geral, modelos de turbulência de duas equações são desenvolvidos com base na hipótese de Boussinesq, a qual assume turbulência isotrópica local. A vantagem destes modelos reside no baixo custo computacional aliado ao bom desempenho na predição da maioria dos escoamentos de interesse industrial (WU, 2013).

O modelo de turbulência $k-\epsilon$ é utilizado para determinar os efeitos da turbulência na fase contínua, desconsiderando possíveis turbulências na fase dispersa. Segundo Lima (2008) em escoamentos multifásicos utilizando o modelo $k-\epsilon$ os termos referentes à transferência interfacial para energia cinética turbulenta e para taxa de dissipação turbulenta, devem ser acrescentados nas equações de transporte.

Buscando uma compreensão dos modelos utilizados em escoamentos multifásicos, foi realizada uma extensiva revisão da literatura. O Quadro 1 traz um resumo da literatura com os modelos matemáticos utilizados para casos de escoamento líquido/gás e o Quadro 2 traz os mesmos dados para escoamentos trifásicos sólido/líquido/gás e escoamentos bifásicos sólido/líquido.

Os métodos numéricos e forças interfaciais dependem do caso a ser estudado, em especial das condições de contorno e das fases presente no escoamento. Por esse motivo, é possível perceber que a utilização de modelos de turbulência é muito comum em escoamento, em função das condições dos fluxos estudados. Dentre os modelos de turbulência, o mais utilizado para escoamentos multifásicos pelos autores estudados foi o modelo $k-\epsilon$, tanto para escoamentos bifásicos quanto para escoamentos multifásicos.

Acerca dos modelos utilizados para a previsão da transferência de movimento interfacial, a maior parte dos autores estudados optou pela utilização apenas a força de arraste. Com relação às iterações gás-líquido, o modelo de Schiller e Naumann foi o mais utilizado pelos autores estudados, seguido pelos modelos de Ishii-Zuber (1979) e Clift, Grace e Weber (1978). Enquanto que para as iterações sólido-líquido se destacam os modelos de Wen and Yu e Gidaspow. O coeficiente de arraste entre gás e sólido para escoamentos trifásicos não foi modelado por alguns autores; porém para os casos onde foi modelado o modelo de Schiller e Naumann destaca-se como o mais usado. Com relação à modelagem da fase sólida, a teoria cinética do escoamento granular foi utilizada por aproximadamente metade dos autores estudados. Quando da utilização da força de sustentação nas simulações, o coeficiente de sustentação de 0,5 foi o mais utilizado.

Quadro 1 - Resumo da literatura para escoamentos bifásicos (líquido/gás) em reatores.

Autor	Tipo de reator	Solver	C_d (líquido/ gás)	Modelo de turbulência	Outras forças/ modelos considerados
Baten; Ellenberger e Krishna (2003)	Reator Airlift	CFX 4.2/4.4	Clift, Grace e Weber (1978)	k- ϵ	NA
Simcik et al. (2011)	Reator Airlift	Fluent 6.3/ CFX 12.1	Tomiyama et al. (2002)	k- ϵ	F_{td}
Luo e Dahhan (2011)	Reator Airlift	CFX 5.7	Clift, Grace e Weber (1978) $C_D=0.44$; Schiller e Naumann; Ishii-Zuber (1979)	k- ϵ ; Reynolds stress Model	$F_{lift} - C_{lift}$: Safmman $F_{td} - C_{td}$: Lopez de Bertodano
Chen; Sanyal e Dudukovic (2005)	Coluna de bolhas	Fluent	Schiller e Naumann	k- ϵ	NA
Santos et al. (2007)	Coluna de bolhas	CFX 5.7	Clift, Grace e Weber (1978); Ishii-Zuber (1979); Schiller e Naumann	k- ϵ	NA
Bannari et al. (2008)	Coluna de bolhas	Open FOAM	Schiller e Naumann; Tomiyama et al. (2004)	k- ϵ	$F_{lift} - C_{lift} : 0,14$; Tomiyama et al. (2004); $F_{mv} - C_{mv} : 0,5$; Tomiyama et al. (2004)
Krishna et al. (2009)	Coluna de bolhas	CFX 4.1	Harmathy	k- ϵ	NA
Laborde-Boutet et al. (2009)	Coluna de bolhas	Fluent	Schiller e Naumann	k- ϵ	NA
Dapelo; Alberini; Bridgeman (2015)	Digestor anaeróbio	Fluent	Dewsbury	Reynolds stress models	$F_{lift} - C_{lift}$: Tomiyama et al. $F_{mv} - C_{mv} : 0,5$
Kerdouss; Bannari; Proulx (2006)	Tanque agitado	Fluent	Schiller e Naumann	k- ϵ	NA

Quadro 2 - Resumo da literatura para escoamentos bifásicos (sólido/líquido) e trifásicos (sólido/líquido/gás) em reatores

Autor	Tipo de reator	Fases	Solver	C_d (Líquido/Gás)	C_d (Sólido/Líquido)	C_d (Gás/Sólido)	Modelo de turbulência	Outras forças
Ren et al. (2009)	UASB	S/L/G	Fluent 6.2	Schiller e Naumann	Wen and Yu	NA	k- ϵ	$C_{lift} = 0,5$
Lima et al. (2011)	UASB	S/L/G	CFX	Ishii-Zuber	Schiller e Naumann	NA	k- ϵ	NA
Ruttithiwapanich; Songkasiri; Ruenglerpanyakul (2013)	UASB	S/L/G	CFX	Tomiyama et al. (1999)	Wen and Yu	NA	k- ϵ	NA
Wang et al. (2009)	EGSB	S/L/G	Fluent 6.3	Schiller e Naumann	Wen and Yu	NA	k- ϵ	$C_{lift} = 0,5$
Yu et al. (2013)	Digestor anaeróbio	S/L/G	Fluent 6.3	Schiller e Naumann	Wen and Yu (KTGF)	Schiller e Naumann	k- ϵ	NA
Azargoshasb et al. (2015)	Digestor anaeróbio	S/L/G	Fluent 6.3	Schiller e Naumann	Syamlal e O'Brien (KTGF)	Schiller e Naumann	k- ϵ	NA
Wang; Jia; Wen (2011)	Reator Airlift	S/L/G	CFX 10.0	Ishii-Zuber	Wen Yu	NA	k- ϵ	$C_{lift} = 0,5$
Silva et al. (2013)	Leito de lama	S/L/G	CFX 14	Ishii-Zuber	Gidaspow; Wen and Yu (KTGF)	Schallenberg et al.; Syamlal e O'Brien	k- ϵ	NA
Cheng e Zhu (2005)	Leito Fluidizado	S/L	Fluent 4.5.6.	NA	Wen Yu (KTGF)	NA	k- ϵ	NA
Cornelissen et al. (2007)	Leito Fluidizado	S/L	Fluent 6.1.22	NA	Gidaspow; Wen and Yu (KTGF)	NA	Laminar	NA

*S= Sólido; L = Líquido; G = Gás

3.6 VELOCIMETRIA DE PARTÍCULAS POR IMAGEM (PIV)

Técnicas destinadas à visualização e compreensão de escoamentos têm sido estudadas ao longo dos anos por diferentes razões e com diferentes objetivos. Graças a esses estudos diversas técnicas foram desenvolvidas ao longo dos anos. Hu et al. (2010) citam como principais técnicas convencionais de visualização/caracterização de escoamentos: métodos condutométricos, métodos térmicos e métodos que envolvem mudança da coloração. Recentemente novas técnicas têm sido utilizadas, como a Velocimetria Acústica Doppler (ADV), em que as velocidades são medidas com base no deslocamento Doppler entre o sinal acústico transmitido e o sinal detectado após a dispersão das partículas que se movem com o fluido (GRESCH; BRAUN E GUJER, 2011). A velocimetria planar de fluorescência induzida por laser (PLIF) é um método planar, não intrusivo e de alta resolução baseado na relação monotônica entre a concentração de partículas de traçador e a intensidade de fluorescência (HU et al., 2010).

Entre os métodos não intrusivos, a velocimetria de partículas por imagem (PIV) diz respeito a um método de alta resolução capaz de capturar campos de velocidade em três dimensões, devido a sua configuração. De acordo com Raffel et al. (1998), essa técnica originou-se no início da década de 80, quando foram iniciadas as pesquisas e desenvolvidos os conceitos primários. No Brasil, sua utilização ainda é pouco conhecida, porém, conforme Grant (1997), a velocimetria de partículas por imagem teve uma rápida evolução devido a pesquisas feitas em paralelo com técnicas de medição óptica, processamento de imagens e visualização de escoamento, entre outros. Entre os seus principais campos de aplicação Schroeder e Willert (2008) citam as indústrias automobilística, aerodinâmica, escoamentos supersônicos, biomedicina, indústria naval, entre outros.

A técnica se baseia na utilização de partículas traçadoras suspensas no escoamento a ser estudado que são iluminadas por um plano de laser e, então, câmeras corretamente posicionadas registram a posição destas partículas em intervalos de tempo diferentes. Cada câmera captura duas imagens em sequência denominadas frames ou quadros. A partir da medição do deslocamento das partículas, o movimento do fluido pode ser determinado (CAMPBELL et. al., 2000). Segundo Cioscan e Ilescu (2012), acerca da densidade de partículas que deve estar

presente no escoamento, um mínimo de duas partículas correspondentes deve existir nas áreas de análise em ambos os *frames* visando à obtenção de um bom resultado. Entre os cuidados a serem tomados neste tipo de análise, Raffel (1998) cita que incidência do plano de luz laser deve se dar em uma superfície plana, para evitar a difração desta luz.

Na área de investigação de sistemas de tratamento de efluentes, PIV ainda é uma técnica recente. Kilander; Blomström e Rasmuson (2006) tiveram por objetivo analisar a evolução do tamanho dos flocos em uma distribuição temporal e espacial em um tanque de base quadrada com a utilização de PIV, onde utilizaram técnicas de PIV na investigação de velocidades e tamanhos de flocos em processo de coagulação e floculação. Em seu trabalho, Guo et al. (2009) analisaram a sedimentação de partículas de lodo ativado sob condições turbulentas utilizando técnicas de PIV. Ainda, seguindo a linha de investigações acerca dos flocos, Zhong et al. (2011) utilizaram velocimetria por imagens na investigação das mudanças estruturais que ocorreram durante a formação dos flocos, além da influência que o ácido húmico tem no que diz respeito ao tamanho, a velocidade de sedimentação e a estrutura do floco. Visando compreender as propriedades hidrodinâmicas de grandes agregados de partículas floculadas, durante o processo de sedimentação da água tratada, as técnicas de PIV foram utilizadas por Xiao, Lam e Li (2013).

A floculação utilizando diferentes flocculantes em diferentes amostras de água foi investigada com a utilização de velocimetria por imagem por Xiao et al. (2010), possibilitando a caracterização dos flocos em diferentes processos. A aplicação de PIV na área de tratamento de efluentes não está restrita à análise de processos que envolvem floculação. Em seu estudo, Liu et al. (2015) analisaram a necessidade da utilização de promotores de turbulência com o intuito de amenizar o efeito de incrustação em membranas e aumentar a transferência de massa em um módulo de membranas.

Por fim, vale ressaltar que a velocimetria de partículas por imagem possibilita uma grande variedade de estudos e aplicações, porém possui também um alto custo envolvido devido aos equipamentos necessários. Sendo assim deve ser avaliado o tipo de estudo a ser realizado e as possibilidades existentes para a medição das variáveis a serem analisadas.

4 METODOLOGIA

4.1 PROJETO DO REATOR E CARACTERIZAÇÃO DAS FASES

4.1.1 Projeto do reator UASB

O reator UASB utilizado neste estudo foi projetado com base nas características físico-químicas da vinhaça, buscando reduzir sua carga orgânica. No entanto, devido à variação de DQO deste efluente (entre 15.000 e 65.000 mgO₂.L⁻¹ em média), foi decidido projetar o reator para a condição que apresentasse a maior vazão de entrada no reator.

O projeto do reator seguiu os métodos propostos por Souza (1986). O diâmetro e a altura do reator foram definidos em 0,3 m e 2,12 m, tendo um volume total de 140 L. Os sedimentadores foram construídos de forma a permitir o retorno do lodo à zona de digestão, por esta razão foram projetados com um ângulo de 50°. Os defletores de gás devem ser projetados de forma a permitir o direcionamento do gás para dentro do coletor de gás, desta forma foi utilizado um ângulo de 60° em seu projeto. As Figuras 8a e 8b apresentam o projeto do reator, desenhado no software comercial Inventor Professional 2016, versão estudantil, da Autodesk e o detalhe da distribuição de efluente (Figura 8c) baseada no trabalho de Maurina et al.(2014).

A carga orgânica volumétrica foi estabelecida como critério inicial de projeto. Em seu trabalho, Souza e Garcia (1986) utilizaram dois valores para a COV quando utilizada vinhaça como substrato, 9,4 e 16,2 kg DQO m⁻³.dia⁻¹, com ambos tendo sido levados em consideração no cálculo da condição de maior vazão. Foi admitida uma eficiência de remoção de 80% para fins de projeto (SOUZA, 1986). Foi considerado que o biogás produzido é composto por dióxido de carbono (CO₂) e metano (CH₄), nas proporções de 35% e 65% respectivamente.

A Tabela 4 apresenta um resumo das características de projeto e operação do reator UASB projetado

Figura 8 - Reator UASB projetado para fins de simulação em CFD e validação utilizando PIV a partir dos dados do efluente a ser tratado (vinhaça).

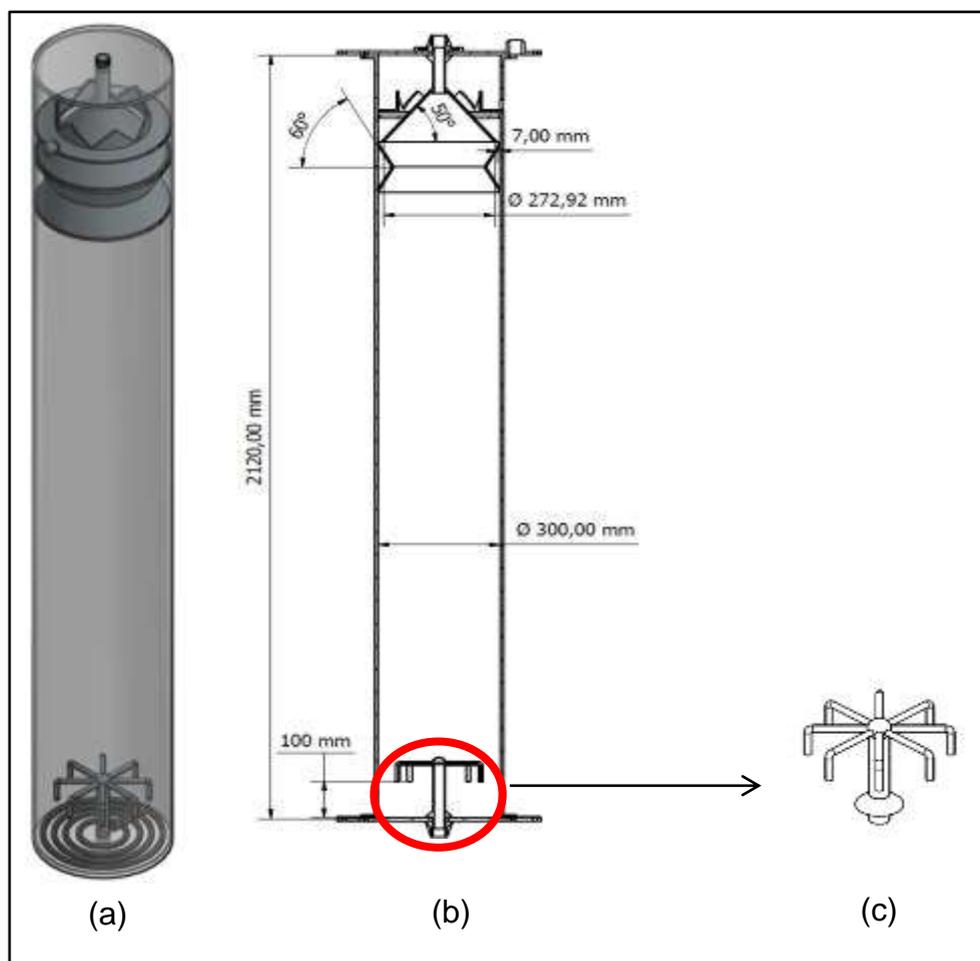


Tabela 4 - Dados obtidos no dimensionamento do reator UASB.

Característica	Valor	Unidade
COV	16,2	kgDQO.m ⁻³ .dia ⁻¹
Vazão de entrada	0,006425	m ³ .h ⁻¹
TDH	22,22	h
DQO _{rem}	1,85	kg.dia ⁻¹
DQO _{SSV}	0,06	kg.dia ⁻¹
DQO _{Sulf}	0,07	kg.dia ⁻¹
DQO _{Met}	1,72	kg.dia ⁻¹
Geração de metano (20°C)	0,02696	Nm ³ .h ⁻¹
Geração de biogás (20°C)	0,04148	Nm ³ .h ⁻¹
Velocidade ascensional (líquido)	2,525.10 ⁻⁵	m.s ⁻¹
Fração volumétrica de biogás no reator	0,0059	-

4.1.2 Caracterização das fases

Visando uma simulação numérica que utilizasse dados o mais próximo possível das condições reais de um biorreator UASB, foi realizada a caracterização das fases. Admitiu-se que a fase líquida possuía as mesmas características da água a 20°C.

Inicialmente, foi coletado lodo granular proveniente do leite de lodo de um reator UASB, o qual é utilizado no tratamento de efluentes de uma indústria alimentícia localizada na região da Serra Gaúcha. A caracterização da fase sólida presente no reator a ser simulado foi realizada utilizando este lodo.

Para a análise do diâmetro médio dos grânulos e da distribuição granulométrica, foi utilizado um analisador de partículas HORIBA, modelo Partica LA-950-A. Foram analisadas 36 amostras de lodo e os dados tabulados em uma planilha eletrônica, onde foi feito gráfico de distribuição granulométrica. Buscando eliminar valores de cauda, decidiu-se descartar os dados de diâmetros abaixo da faixa de 21,41% da amostra, onde estavam presentes diâmetros abaixo de 0,4 mm, por não serem considerados valores normais para grânulos, podendo tratar-se de microflocos ou grânulos quebrados, os quais não são objetos deste estudo.

Os grânulos foram também caracterizados quanto à sua esfericidade, parâmetro que varia de 0 a 1 e indica o quão próximo o grânulo está de uma esfera. Na prática é comum encontrar valores de 0,45 (alongada) a 0,97 (muito esférica). Uma vez que a análise tridimensional exige instrumental óptico específico, Wadell (1935) propôs cálculos em duas dimensões, através da razão entre o perímetro de um círculo com a mesma área da partícula e o diâmetro do círculo menor circunscrito a esta área. De outro modo, é obtido a partir da razão entre o perímetro de um círculo com a mesma área da partícula e o perímetro da partícula. As imagens para este estudo foram obtidas utilizando-se um microscópio Zeiss, Axio Scope A1. As imagens foram então tratadas com o software Image J, para mensuração da área e perímetro, e cálculo de circularidade dos grânulos, e os dados foram tabulados em uma planilha eletrônica.

A massa específica e a densidade do lodo foram determinadas pelo método do picnômetro, conforme *Standard methods for the examination of water and wastewater* (RICE et al., 2012).

Para a determinação da velocidade de sedimentação foi utilizada uma coluna de sedimentação de 2,25 m de altura e 0,20 m de diâmetro e o método foi adaptado de Winkler, et al. (2016). Foram marcados dois pontos na coluna, um a 0,70 m de altura da base (P1) e outro a 0,10 m da base (P2). Foram então separadas dez amostras de 10 g de lodo e adicionados 100 mL de água destilada a cada uma destas. As amostras foram despejadas no topo do reator uma a uma e foi medido o tempo necessário para que o primeiro e o último grânulo de cada amostra atingissem os pontos P1 e P2. A partir destes dados foi calculada a velocidade de sedimentação média.

Embora o biogás proveniente de biorreatores seja composto por diversos gases, entre eles: metano (CH₄), dióxido de carbono (CO₂), amônia (NH₃), hidrogênio (H₂), nitrogênio (N₂) e sulfeto de hidrogênio (H₂S), a literatura reporta concentrações muito baixas de NH₃, H₂, N₂ e H₂S, sendo assim possível considerar o biogás como sendo uma mistura composta principalmente por CH₄ e CO₂ (JANKE et al., 2016). Van Haandel e Lettinga (1994) reportaram que o biogás gerado na biodigestão de águas residuárias domésticas possui em sua composição entre 70 a 80% de metano, enquanto Janke (2016) encontrou concentrações de metano entre 58 e 80% no biogás proveniente da biodigestão da vinhaça.

A simulação numérica do biogás como sendo uma fase dispersa composta por multicomponentes levaria a um esforço computacional elevado. Por esta razão, optou-se por considerá-lo uma mistura de composição fixa, contendo 65% de CH₄ (A) e 35% de CO₂ (B). Dessa forma, tornou-se necessário determinar as propriedades desta mistura, a partir de uma adaptação do método proposto por Lima (2008).

A massa específica da mistura ou do biogás ($\rho_{\text{biogás}}$) foi determinada pela média harmônica da fração mássica (y) dos componentes da mistura, considerada ideal, usando a seguinte equação:

$$\frac{y_A}{\rho_A} + \frac{y_B}{\rho_B} = \frac{1}{\rho_{\text{biogás}}} \quad (14)$$

O mesmo procedimento foi utilizado no cálculo da viscosidade dinâmica ($\mu_{\text{biogás}}$) da mistura:

$$\frac{y_A}{\mu_A} + \frac{y_B}{\mu_B} = \frac{1}{\mu_{biogás}} \quad (15)$$

4.2 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

A estrutura do setor de Fluidodinâmica Computacional, pertencente ao Laboratório de Tecnologias Ambientais (LATAM) da Universidade de Caxias do Sul (UCS), foi utilizada ao longo deste trabalho. O pacote comercial da Ansys, versão 16.2, incluindo os softwares ICEM CFD, Fluent e CFX Post foi utilizado. Para a solução das equações diferenciais de continuidade e da quantidade de movimento, o programa Fluent utiliza o método dos volumes finitos.

4.2.1 Definição da Geometria

A primeira questão a ser definida acerca das simulações numéricas refere-se ao domínio de estudo onde as simulações foram realizadas. Sabe-se que uma geometria simplificada possibilita a obtenção de resultados melhores, uma vez que evita problemas relacionados à geração de malhas em geometrias complexas além de permitir a redução do tempo de simulação.

Escoamentos multifásicos consistem em escoamentos complexos, exigindo assim um grande esforço computacional. Lima (2008) realizou simulações no espaço bi e tridimensional de um reator UASB e constatou uma simetria angular e radial do comportamento fluidodinâmico, tanto no caso do escoamento monofásico como no trifásico. Baseado nesse trabalho foi decidido utilizar uma geometria no espaço tridimensional, porém de meio reator no sentido radial. Visando à simplificação do domínio de cálculo a ser discretizado foram feitas as seguintes considerações:

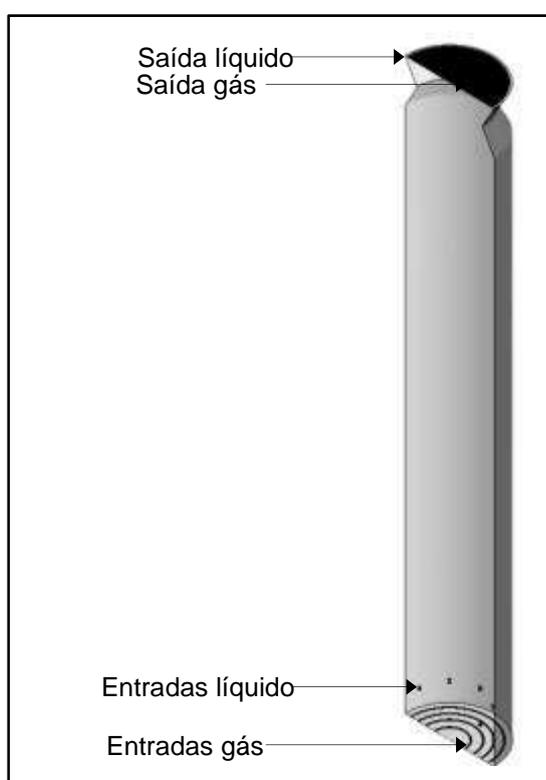
- a) os vertedouros no topo do reator bem como o cone de saída do gás não foram simulados, permitindo assim a criação de uma malha de melhor qualidade;
- b) o domínio de cálculo se estende da base do reator até a altura de 1,8 m, onde se inicia o cone separador, permitindo assim a simulação da retirada do gás do reator;

c) a estrutura do distribuidor de efluente não foi modelada, tendo sido consideradas apenas as áreas de entrada do efluente e em seção quadrada, o que possibilitou a geração de uma malha com uma qualidade superior;

d) a geração de gás foi simulada através da entrada de gás por meio de quatro anéis concêntricos situados na base do reator.

A Figura 9 apresenta o domínio de cálculo utilizado para as simulações fluidodinâmicas ao longo deste trabalho bem como as simplificações adotadas.

Figura 9 - Domínio de cálculo utilizado e simplificações adotadas.



4.2.2 Definição da malha

O método escolhido para a discretização do domínio de cálculo foi a geração de malhas hexaédricas estruturadas e, em seguida, convertidas em malhas não estruturadas. A estratégia utilizada foi a criação de blocos no software ICEM CFD que em seguida foram subdivididos e adaptados à geometria de forma a gerar as malhas utilizadas.

Foram realizadas diferentes simulações numéricas visando avaliar o impacto do refinamento da malha na incerteza dos resultados. Assim, foi realizada a análise

de independência de malha a partir da comparação de resultados numéricos e do cálculo do GCI (índice de convergência de malha) desenvolvido por Roache (1994). Para este estudo foram geradas três malhas com as seguintes quantidades de volumes de controle: 1.035.064 (malha 1), 528.000 (malha 2) e 248.720 (malha 3). A razão de refinamento (r_r) utilizada foi de 2,12 entre as malhas 2 e 3 e de 1,96 entre as malhas 1 e 2.

Para o cálculo do GCI, foram assumidos parâmetros de desempenho, chamados aqui de f , têm-se f_1 , f_2 e f_3 para as três malhas escolhidas. Parâmetros de desempenho são variáveis que possuem influência no desempenho do processo que está sendo estudado, e que são escolhidas para analisar a convergência do resultado. Um exemplo de parâmetro de desempenho é a análise da velocidade do gás em reatores colunas de bolha. Considerando ainda uma razão de refino constante de $r_r = 2$. A ordem de convergência (p) pode ser calculada pela seguinte Equação:

$$p = \frac{\ln\left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1}\right)}{\ln(r_r)} \quad (16)$$

O cálculo pela extrapolação de Richardson, negligenciando termos de ordem mais alta, dá uma estimativa exata do parâmetro de desempenho, quando o espaçamento da malha é zero:

$$f_{h=0} = \frac{r_r^p f_1 - f_2}{r_r^p - 1} \quad (17)$$

Quando um mínimo de três soluções está disponível, Roache (1998) sugere um fator de segurança de $F_s=1,25$. Para o cálculo do erro relativo entre as soluções (ϵ) foram utilizadas as Equações 18 e 19:

$$\epsilon_{12} = \left| \frac{f_2 - f_1}{f_1} \right| \quad (18)$$

$$\epsilon_{23} = \left| \frac{f_3 - f_2}{f_2} \right| \quad (19)$$

Logo, para o cálculo dos GCI's entre as três malhas foram utilizadas as Equações 20 e 21:

$$GCI_{12} = \frac{F_s \left| \frac{f_2 - f_1}{f_1} \right|}{r_r^{p-1}} \quad (20)$$

$$GCI_{23} = \frac{F_s \left| \frac{f_3 - f_2}{f_2} \right|}{r_r^{p-1}} \quad (21)$$

É possível dizer que a faixa assintótica foi alcançada quando:

$$GCI_{23} \approx r_r^p GCI_{12} \quad (22)$$

Ou:

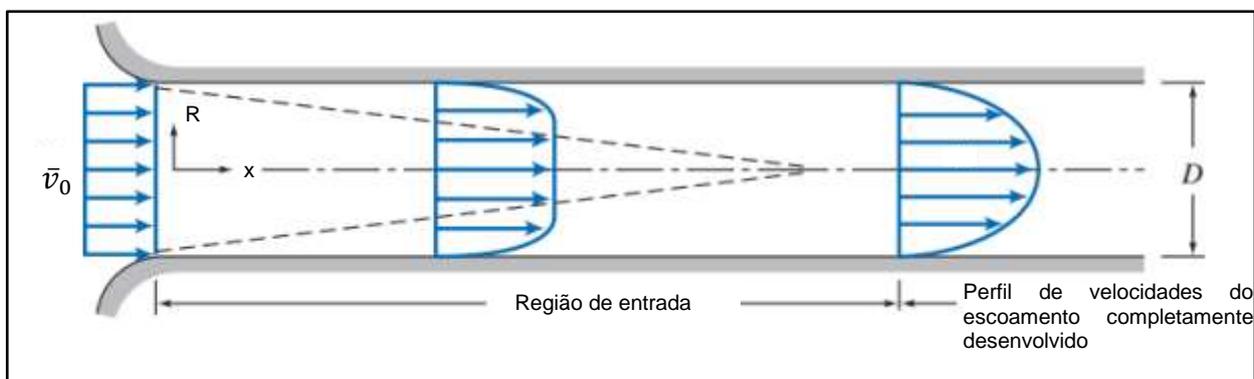
$$\frac{GCI_{23}}{r_r^p GCI_{12}} \approx 1 \quad (23)$$

Nesse caso, pode-se dizer que o resultado é independente da malha.

4.2.3 Escoamento monofásico

O escoamento monofásico foi inicialmente simulado com o objetivo de caracterizar o comportamento do escoamento laminar do fluido dentro do reator quando da ausência das outras fases. Espera-se, nesse caso, um comportamento similar ao escoamento de Hagen-Poiseuille; ou seja, um escoamento não ideal, laminar completamente desenvolvido de um fluido newtoniano em um duto (HAUKE, 2008), conforme Figura 10, a qual apresenta o perfil de velocidades típico para este tipo de escoamento.

Figura 10 - Perfil de velocidades do escoamento laminar em dutos.



Fonte: adaptado de Fox; McDonald e Pritchard, 2004.

Tendo por base a vazão (Q) e a área da seção transversal (A) de projeto do reator UASB, foram calculadas a velocidade média (\bar{v}) e a velocidade máxima ($v_{m\acute{a}x}$) do escoamento usando as equações (HAUKE, 2008):

$$\bar{v} = \frac{Q}{A} \quad (24)$$

$$v_{m\acute{a}x} = 2 \cdot \bar{v} \quad (25)$$

Em seguida, foi utilizada a Equação 26 para calcular a velocidade axial laminar $v(R)$ para o escoamento completamente desenvolvido em uma seção transversal do reator de raio R e gerado o gráfico com o perfil de velocidades em função do raio (r):

$$v(R) = v_0 \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (26)$$

Tendo por base a velocidade máxima, os dados da fase líquida (água, 20°C) e os dados dimensionais do reator UASB, foi calculado o número de Reynolds para o escoamento monofásico por:

$$Re_{l\acute{i}q} = \frac{\rho \cdot \bar{v} \cdot D}{\mu} \quad (27)$$

Em seguida, foram realizadas as simulações numéricas do escoamento monofásico, utilizando a água como fluido incompressível, em regime estacionário e laminar. Acerca das condições de contorno, na entrada de líquido foi assumida velocidade igual a 0,00711 m.s⁻¹, na direção -y. A pressão estática na fronteira de saída do líquido (P_{stat}) foi definida como 0 Pa, uma vez que a pressão de referência (P_{ref}) foi definida como 101.325 Pa, garantindo assim, que a pressão absoluta (P_{abs}) nesta fronteira fosse igual à pressão atmosférica, conforme Equação 28 (LIMA, 2008):

$$P_{abs} = P_{stat} + P_{ref} \quad (28)$$

Foi adotada a condição de não deslizamento nas paredes do reator, ou seja, as componentes de velocidades nas direções x, y e z são nulas.

O Quadro 3 apresenta os métodos numéricos adotados nas simulações.

Quadro 3 - Principais métodos utilizados para realizar as simulações numéricas monofásicas.

Parâmetro		Solver/Método
Solver		<i>Pressure-based</i>
Acoplamento Pressão-Velocidade		<i>SIMPLE</i>
Esquemas de discretização espacial	Gradiente	<i>Least Squares Cell Based</i>
	Pressão	<i>Second Order</i>
	Momento	<i>Third-Order MUSCL</i>

Com o objetivo de facilitar a análise dos resíduos de uma variável qualquer (ϕ) o Fluent oferece a opção de analisar os resíduos em uma escala global ou local. Neste trabalho, foram analisadas as escalas globais dos resíduos para análise de convergência. A convergência foi verificada quando os residuais atingiram valores próximos a 10^{-13} em estado estacionário e os valores para as variáveis monitoradas (pressão, velocidade e vazão mássica) não apresentavam mais variação.

As equações de massa e movimento linear foram utilizadas. Os resultados foram comparados aos resultados teóricos e de projeto e serviram como base para avaliação dos escoamentos bi e trifásicos.

4.2.4 Escoamento multifásico

O estudo do escoamento multifásico levou em consideração as fases líquida (água), sólida (grânulos de lodo) e gasosa (biogás) e foi realizado em três fases. A primeira compreendeu o estudo fluidodinâmico da interação entre as fases gasosa e líquida. Em seguida, foi estudada a interação entre as fases sólida e líquida. A partir destes dois modelos foi então realizado o estudo trifásico do reator UASB compreendendo as três fases.

Foram realizadas simulações transientes no espaço tridimensional. Foi adotada a abordagem Euleriana-Euleriana, a qual assume que as fases são matérias contínuas e interpenetrantes sendo função do espaço e do tempo em um referencial inercial. Esta abordagem foi adotada em função das vantagens computacionais deste método, pois o esforço computacional permanece constante mesmo com o aumento da fração volumétrica das fases dispersas ao contrário do que ocorre na abordagem Euleriana-Lagrangiana, onde quanto maior a fração volumétrica da fase dispersa, maior o esforço computacional necessário (MICHELE

e HEMPEL, 2002). Na abordagem Euleriana-Euleriana as leis de conservação de massa e movimento são satisfeitas para cada fase individualmente. O volume da fase i (V_i) é definido pela Equação (ANSYS, 2015):

$$V_i = \int_V \alpha_i dV \quad (29)$$

sendo:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1 \quad (30)$$

As simulações foram realizadas sob condições isotérmicas, não sendo assim necessários cálculos de transferência de calor. Também não foram consideradas transferências de massa entre as fases. Assim, a conservação de massa e de movimento das fases foram governados exclusivamente pela equação de conservação de movimento. As seguintes equações são resolvidas pelo Fluent para a transferência de quantidade de movimento entre dois fluidos e para a continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -\alpha_q \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) + (\vec{F}_q + \vec{F}_{lift,q} + \vec{F}_{mv,q} + \vec{F}_{td,q})) \quad (31)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_p \rho_p) + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{v}_q) = 0 \quad (32)$$

sendo consideradas duas fases de fluidos q (fase contínua) e p (fase dispersa), onde \vec{g} é a aceleração da gravidade, P a pressão, $\bar{\tau}_q$ é o tensor de tensões da fase, K_{pq} o coeficiente de troca interfacial, \vec{F}_q uma força de corpo externa, $\vec{F}_{lift,q}$ a força de sustentação, $\vec{F}_{mv,q}$ a força de massa virtual e $\vec{F}_{td,q}$ a força de dispersão turbulenta (ANSYS, 2015).

De acordo com Fox; McDonald e Pritchard (2004), fluidos onde a tensão de cisalhamento (τ) é diretamente proporcional à taxa de deformação (dv/dy) são caracterizados como fluidos newtonianos, conforme Equação:

$$\tau \propto \frac{dv}{dy} \quad (33)$$

Na lei da viscosidade de Newton, a constante de proporcionalidade trata-se da viscosidade dinâmica (μ):

$$\tau = \mu \frac{dv}{dy} \quad (34)$$

Neste trabalho, a fase contínua foi assumida como sendo um fluido newtoniano.

4.2.4.1 Escoamento bifásico gás/líquido

Foi inicialmente definido um modelo bifásico gás/líquido e utilizando este modelo foram realizadas análises com diferentes tamanhos de bolha e vazões de biogás. Em seguida, foram analisadas as influências de diferentes forças interfaciais na simulação e a partir destas foi definido o modelo final a ser empregado nas simulações trifásicas.

Acerca da transferência de quantidade de movimento entre as fases gás e líquido, o modelo inicial considerou as forças de arraste e de massa virtual. Segundo Laborde-Boutet et al. (2009) a magnitude das forças de arraste em um escoamento gás/líquido pode ser até 100 vezes maiores que as outras, sendo assim de fundamental importância no comportamento hidrodinâmico do reator. No escoamento em questão, espera-se que as bolhas de gás influenciem na velocidade ascensional do líquido também pela força de massa virtual, a qual pode ser calculada como a massa de líquido carregada pela bolha (PALADINO, 2005), por este motivo esta força foi considerada nas simulações iniciais.

A força de arraste (\vec{F}_D) pode ser calculada pela Equação 6. Considerando as bolhas de gás como esféricas e dispersas no escoamento foi escolhido o modelo de Schiller e Naumann (1933) para a determinação do coeficiente de arraste entre o gás e o líquido ($C_{D,gl}$), o qual é definido por:

$$C_{D,gl} = \begin{cases} 24 \left(\frac{1+0.15Re^{0.687}}{Re} \right) & Re \leq 1000, \\ 0.44 & Re > 1000, \end{cases} \quad (35)$$

onde o número de Reynolds para a bolha é determinado pela Equação 7.

A força de massa virtual (\vec{F}_{mv}) é responsável pela força necessária para movimentar uma determinada quantidade de fluido da fase contínua devido ao movimento da bolha (PALADINO, 2005). Esta força pode ser calculada usando a

Equação 12. Neste estudo foi utilizado o valor de 0,5 para o coeficiente de massa virtual (C_{mv}) de uma partícula esférica em um escoamento não viscoso, mesmo coeficiente utilizado por Bannari et al. (2008) na simulação de um reator de coluna de bolhas. Em função da baixa velocidade do escoamento foi utilizado modelo laminar.

As condições de contorno das simulações iniciais são apresentadas na Tabela 5 enquanto a Tabela 6 resume quais foram as simulações numéricas realizadas nesta fase inicial. Em todas as simulações foi assumido uma pressão de operação igual 101.325 Pa.

Tabela 5 - Condições de contorno - Simulações iniciais.

	Tipo	Valor	Unidade
Entrada de líquido	<i>Velocity Inlet</i>	0,00711	m.s ⁻¹
Saída de líquido	<i>Pressure Outlet</i>	0	Pa
Entrada de gás	<i>Velocity Inlet</i>	Tabela 6	m.s ⁻¹
Saída de gás	<i>Degassing</i>	-	-
Simetria	<i>Symmetry</i>	-	-
Parede	Superfície lisa, sem deslizamento	-	-

O algoritmo *Phase Coupled SIMPLE* foi usado na solução do acoplamento pressão-velocidade. A discretização espacial das equações aplicadas em equações algébricas foi realizada utilizando os esquemas *Third-Order MUSCL* para o momento e *QUICK* para a fração volumétrica.

Tabela 6 - Simulações numéricas gás/líquido iniciais.

Simulação (ID)	Velocidade de entrada do gás (m.s ⁻¹)	Vazão de gás (Nm ³ .h ⁻¹)	Diâmetro da bolha (m)
V1B3	1,12 x10 ⁻³	4,15 x10 ⁻²	3 x10 ⁻³
V2	2,24 x10 ⁻³	8,27 x10 ⁻²	3 x10 ⁻³
V3	3,36 x10 ⁻³	1,24 x10 ⁻¹	3 x10 ⁻³
V4	4,48 x10 ⁻³	1,65 x10 ⁻¹	3 x10 ⁻³
B2	1,12 x10 ⁻³	4,15 x10 ⁻²	2 x10 ⁻³
B1	1,12 x10 ⁻³	4,15 x10 ⁻²	1 x10 ⁻³

A partir destas condições de contorno e utilizando os mesmos esquemas numéricos de discretização espacial, foram testadas diferentes combinações de

forças interfaciais, visando estabelecer a condição a ser usada nas simulações trifásicas. O Quadro 4 apresenta um resumo das simulações realizadas nesta fase. Foi utilizado como base o tamanho de bolha de 3 mm e a vazão de gás de $4,15 \times 10^{-2} \text{ Nm}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ nesta etapa de simulações.

Além das equações de conservação de massa e movimento linear, nas simulações iniciais para o escoamento bifásico (testes de malhas e avaliações das forças interfaciais) foi considerado o modelo k-epsilon padrão para prever o comportamento turbulento da fase contínua no interior do reator UASB. Foi também considerada a força de dispersão turbulenta, utilizando o modelo de Bertodano, Lahey e Jones (1994), com a constante de dispersão turbulenta (C_{td}) igual a 0,1. Simulações em condição laminar foram realizadas nos casos onde foi avaliado o impacto da velocidade do gás e tamanho da bolha na velocidade do líquido

Quadro 4 - Simulações realizadas - comparação entre forças interfaciais.

Simulação (ID)	Forças interfaciais consideradas/Modelo
A	Força de Arraste /Schiller-Naumann
B	Força de Arraste / Schiller-Naumann Força de Sustentação/Saffman-mei
C	Força de Arraste / Schiller-Naumann Força de Massa Virtual/ $C_{vm} = 0,5$
D	Força de Arraste / Schiller-Naumann Força de Massa Virtual/ $C_{vm} = 0,5$ Força de Sustentação/Saffman-Mei

O modelo utilizado para o coeficiente de sustentação (C_{lift}) foi o de Saffman-Mei, que é recomendado para bolhas esféricas que não sofrem distorção significativa (MEI, KLAUSNER, 1994), conforme Equação:

$$C_{lift} = \begin{cases} 6,46 \times f(Re_p, Re_\omega) & Re_p \leq 40 \\ 6,46 \times 0,0524 (\beta Re_p)^{1/2} & 40 < Re_p < 100 \end{cases} \quad (36)$$

onde:

$$\beta = 0,5 (Re_\omega / Re_p) \quad (37)$$

$$f(Re_p, Re_\omega) = (1 - 0,3314\beta^{0,5})e^{-0,1Re_p} + 0,3314\beta^{0,5} \quad (38)$$

sendo Re_p o número de Reynolds da partícula, e Re_ω o número de Reynolds relacionado a vorticidade.

Para a validação final do modelo bifásico gás/líquido foi estabelecida como condição de contorno e tamanho de bolha padrão a simulação B2, ou seja, tamanho de bolha de 2 mm e vazão de gás de $4,15 \times 10^{-2} \text{ Nm}^3.\text{h}^{-1}$. Para a avaliação da transferência de quantidade de movimento entre as fases, apenas a força de arraste foi considerada nas simulações utilizadas na validação do modelo. Após análise das simulações, foi verificado que os resultados numéricos não apresentaram diferenças significativas devido à utilização de modelos de turbulência. Portanto, foi decidido não utilizar modelo de turbulência nesta simulação e nas posteriores, uma das razões foi a dificuldade de convergência encontrada nas simulações trifásicas quando ativado modelo de turbulência. A partir dos dados destas simulações foi escolhido o modelo e condições de contorno a serem utilizados nas simulações trifásicas

4.2.4.2 Escoamento bifásico sólido/líquido

Após a definição do modelo de escoamento gás/líquido, foi estudado o escoamento sólido/líquido. Considerando que o lodo presente em reatores UASB se encontra na forma de grânulos, foi utilizado o modelo granular com aplicação da teoria cinética do escoamento granular (KTGF) para a parametrização da fase sólida. Foi assumido um diâmetro médio constante para os grânulos de 2 mm e um limite máximo de empacotamento de 0,6. Foi considerada a altura do leito de lodo de 0,63 m.

Para a avaliação da transferência de quantidade de movimento entre as fases, foram negligenciadas as forças de sustentação e de massa virtual, sendo considerada apenas a força de arraste, seguindo as mesmas considerações de Cornelissen et al. (2007).

Para o coeficiente de arraste entre o sólido e o líquido $C_{D,sl}$ foram testados três modelos. O primeiro testado foi o modelo de Syamlal e O'Brien (1989), que é definido conforme Equação 39. Este modelo é recomendado quando a tensão de cisalhamento é definida de acordo com Syamlal, Rogers e O'Brien (1993).

$$C_{D,sl} = \left(0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{Re_p/v_{r,s}}} \right)^2 \quad (39)$$

onde Re_p é o número de Reynolds da partícula definido pela Equação 7. O termo $v_{r,s}$ trata-se da correlação para a velocidade terminal para a fase sólida, definida por:

$$v_{r,s} = 0,5 \left(A - 0,06Re_p + \sqrt{(0,06Re_p)^2 + 0,12Re_p(2B - A) + A^2} \right) \quad \text{Onde: } \begin{cases} A = \alpha_l^{4,14} \\ B = 0,8 \alpha_l^{1,28}; \alpha_l \leq 0,85 \\ B = \alpha_l^{2,65}; \alpha_l > 0,85 \end{cases} \quad (40)$$

O modelo de Wen e Yu (1966) embora seja mais apropriado para sistemas diluídos segundo, Lahiri e Ghanta (2010), também foi testado. Neste modelo o coeficiente de arraste é definido por:

$$C_{D,sl} = \frac{24}{\alpha_l Re_p} \left[1 + 0,15(\alpha_l Re_p)^{0,687} \right] \quad (41)$$

Em seguida, foi testado o modelo proposto por Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992). Segundo Lahiri e Ghanta (2010) este modelo é recomendado para leitos fluidizados densos, que é o caso do leito de lodo do reator UASB. O modelo se trata de uma combinação do modelo de Wen e Yu e da Equação de Ergun. O coeficiente de arraste também é calculado pela Equação 41, porém quando a fração volumétrica de líquido é menor que 0,8 o coeficiente de troca sólido/líquido (K_{sl}) é calculado por:

$$K_{sl} = 150 \frac{\alpha_s(1-\alpha_l)\mu_l}{\alpha_l d_s^2} + 1,75 \frac{\rho_l \alpha_s |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{d_s} \quad (42)$$

Acerca das condições de contorno, a única entrada considerada foi a de líquido a uma velocidade de $0,00711 \text{ m.s}^{-1}$. As outras condições de contorno foram iguais aos citados na simulação líquido/gás.

A solução numérica foi obtida com a utilização do algoritmo *Phase Coupled SIMPLE* no acoplamento pressão-velocidade. A discretização espacial das equações aplicadas em equações algébricas foi realizada utilizando os esquemas *Second Order Upwind* para o momento e *QUICK* para a fração volumétrica. Foi ainda utilizada a formulação transiente pelo método *Bounded Second Order Implicit* e ativada a opção "*High Order Term Relaxation*".

4.2.4.3 Escoamento trifásico

Para a modelagem computacional do escoamento trifásico, foram escolhidos os modelos mais adequados para o tratamento das fases conforme os estudos bifásicos realizados. Foi ainda necessária a modelagem da força de arraste entre o sólido e o gás, onde foi utilizado o modelo de Schiller e Naumann (1933) para o cálculo do coeficiente de arraste entre estas fases ($C_{D,sg}$).

Com relação à transferência de quantidade de movimento entre as fases, foram desconsideradas as forças de sustentação, massa virtual e dispersão turbulenta. Foi utilizado um modelo de escoamento laminar para as simulações trifásicas. A Tabela 7 resume as condições de contorno e os parâmetros adotados na simulação trifásica.

Tabela 7 - Condições de contorno e modelos adotados para as simulações trifásicas.

	Parâmetro	Tipo/Modelo	Valor	Unidade
CONDIÇÕES DE CONTORNO	Entrada de líquido	<i>Velocity Inlet</i>	$7,11 \times 10^{-3}$	$m.s^{-1}$
	Saída de líquido	<i>Pressure Outlet</i>	0	Pa
	Entrada de gás	<i>Velocity Inlet</i>	$1,12 \times 10^{-3}$	$m.s^{-1}$
	Saída de gás	<i>Degassing</i>	-	-
	Simetria	<i>Symmetry</i>	-	-
	Parede	Superfície lisa, sem deslizamento	-	-
MODELOS ADOTADOS	$C_{D,gl}$	Schiller and Naumann	-	-
	$C_{D,ls}$	Gidaspow	-	-
	$C_{D,gs}$	Schiller and Naumann	-	-
	Diâmetro das bolhas de gás	-	2	mm
	Diâmetro dos grânulos	-	2	mm
	Tratamento da fase sólida	KTGF	-	-
	Turbulência	Laminar	-	-
	Altura do leito de lodo	-	0,63	m
	Fração volumétrica de lodo no leito	-	0,60	-
	Pressão de operação	-	101.325	Pa

A solução numérica foi obtida utilizando a mesma parametrização adotada nas simulações sólido/líquido, porém foi necessário alterar o algoritmo utilizado no acoplamento pressão-velocidade para Coupled, buscando melhorar a convergência dos resultados.

4.3 EXPERIMENTAL

4.3.1 Reator

O reator em escala reduzida foi construído em Polimetilmetacrilato (acrílico) seguindo as dimensões de projeto já discutidas nesse trabalho (Figura 11). A escolha do material se deu em função da necessidade de se ter um reator transparente, possibilitando assim a visualização do escoamento para coleta de imagens através do sistema de PIV/Shadowgraphy. O reator foi construído de forma modular, com cinco módulos, de forma a facilitar futuras alterações a serem realizadas. O feixe de laser gerado no PIV quando incide em superfícies curvas pode sofrer refração. Por este motivo foi construído um encapsulamento hexaédrico ao redor do reator, e a região entre a parede externa do reator e o encapsulamento foi preenchida com água, assim evitando possíveis refrações.

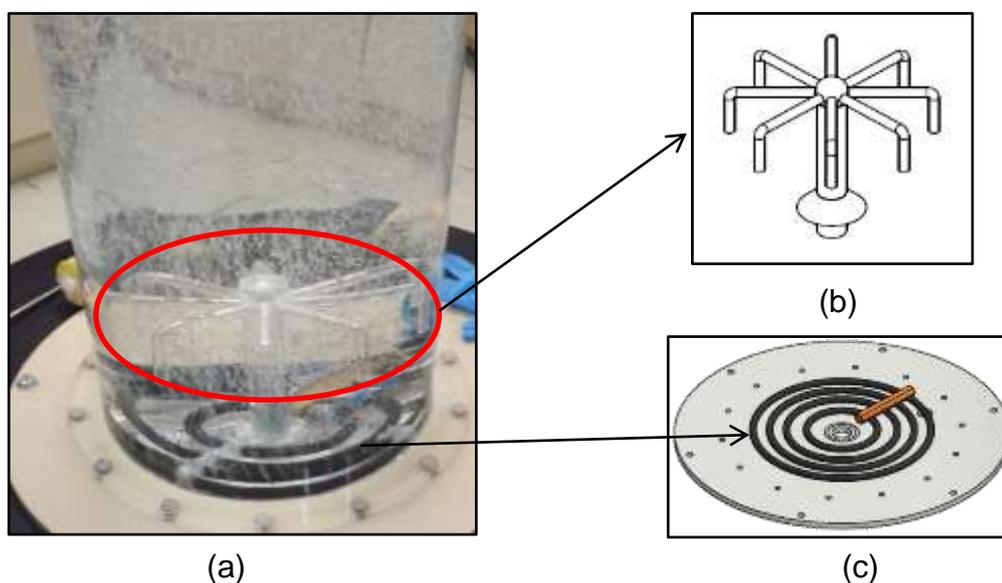
Figura 11 - Reator utilizado nos experimentos.



No fundo do reator encontram-se os sistemas de distribuição, conforme pode ser visualizado na Figura 12a. O distribuidor de gás foi construído utilizando

mangueiras flexíveis furadas e uma entrada principal de ar. O sistema consiste de quatro anéis concêntricos de diferentes diâmetros, conforme Figura 12c. Este modelo foi escolhido após estudo realizado por Bastiani (2016), onde foi verificado que essa forma de distribuição de gás é a que gera um perfil de distribuição de gás mais similar ao que seria gerado caso o reator estivesse gerando biogás. O distribuidor de líquido encontra-se no fundo do reator e também foi construído em acrílico (Figura 12b).

Figura 12 - Seção do fundo do reator experimental. (a) Parte inferior do reator. (b) Detalhe do distribuidor de líquido. (c) Detalhe do distribuidor de gás.



A utilização dos métodos propostos (PIV/Shadowgraphy) para a visualização do escoamento exige que o fluido seja transparente, permitindo assim a coleta das imagens com melhor qualidade, sendo assim a utilização de efluente e biomassa teria um efeito negativo nos experimentos. Dessa forma, o reator foi preenchido com água. Durante os experimentos a vazão de água foi controlada utilizando uma bomba hidráulica, marca *Netzsch*, ligada a um inversor de frequência (Marca: Weg; Modelo: CFW 10). A vazão utilizada foi de $6.42 \text{ L}\cdot\text{h}^{-1}$ em todos os experimentos, seguindo o projeto do reator. O gás utilizado foi ar comprimido, a temperatura ambiente. A vazão de ar foi controlada utilizando um rotâmetro, marca Applitech, modelo 1900 em combinação com um regulador de pressão diferencial do mesmo fabricante. A vazão de gás utilizada foi de $41 \text{ L}\cdot\text{h}^{-1}$ para todos os experimentos. Buscando um sólido com características similares as dos grânulos de lodo, foi escolhido o material PSCristal N 1921 (Poliestireno) do fornecedor Innova em função

deste material ter uma média de diâmetro dos pellets em torno de 2 mm, e possuir uma massa específica de 1.050 kg.m^{-3} , a mesma massa específica encontrada para os grânulos de lodo. Um leito de sólidos de 0,63 m foi colocado no reator para avaliação do comportamento hidrodinâmico bifásico (sólido/líquido) e trifásico (gás/sólido/líquido), conforme Figura 13.

Figura 13 - Reator experimental com o leito de sólidos utilizado para validação.



A fração volumétrica de gás experimental dentro do reator foi estimada pelo método do gás *hold up*. Para tal, a altura encontrada do líquido foi medida, em seguida foi ligado o gás e a altura que o líquido atinge foi novamente medida. A diferença entre as alturas foi calculada, e o volume ocupado pelo gás foi calculado por esta diferença. Em seguida foi calculada a fração volumétrica considerando o volume útil do reator.

4.3.2 PIV e *Shadowgraphy*

Buscando a validação dos resultados numéricos foram utilizadas duas técnicas: a velocimetria de partículas por imagem (PIV), a qual possibilita a visualização dos perfis de escoamento de fluidos, além da análise de dados como a velocidade média; e a *Shadowgraphy* (*Shadowgrafia*), a qual permite a análise das bolhas presentes em um escoamento, entre outras análises.

A técnica de PIV consiste na iluminação de uma seção do escoamento, utilizando um laser, em dois instantes próximos, para a captura de imagens do escoamento. Nestas imagens são registradas as posições de partículas traçadoras. Um software específico para análise de escoamento é então utilizado para processar essas imagens, e o campo de movimento médio das partículas é obtido. Um equipamento de PIV, 3D estereoscópio do fornecedor *La Vision* foi utilizado ao longo deste estudo. O equipamento base é formado por: duas câmeras *ImagerProSX 5M*, utilizando lentes *Nikon*, um gerador de laser *Quantel Double-Pulsed Nd:YAG EverGreen EVG 00200*. Após serem coletadas, as imagens foram processadas em um microcomputador, com processador *Intel Xeon E5620* e placa de vídeo *Zotac/NVIDIA GeForce GT 610*, utilizando o software *DaVis 8.8.2*.

Para a coleta das imagens, as câmeras e o laser foram colocados em trilhos verticais, permitindo a coleta de imagens ao longo da altura do reator. Uma vez que o reator possui uma altura muito maior que o campo de captura das lentes, para as coletas do caso gás/líquido o reator foi dividido em sete seções verticais, enquanto para as coletas sólido/líquido foram coletadas imagens de cinco seções, pois não foi possível a coleta de imagens na região do leito de sólidos. As câmeras foram posicionadas em um ângulo de respectivamente 60° and 120° em relação ao plano de laser, e o laser foi posicionado de forma a iluminar o plano central, longitudinal do reator.

Para cada pulso do laser duas imagens foram capturadas em cada câmera, buscando capturar o deslocamento das partículas. O tempo entre os pulsos variou ao longo das seções do reator, pois ele é dependente da velocidade do escoamento. Maior a velocidade do escoamento, menor deve ser o tempo entre os pulsos para capturar um deslocamento de em torno 10 pixels entre os dois pulsos. A obtenção de um bom campo médio vetorial está ligada à quantidade de amostras, ou nesse

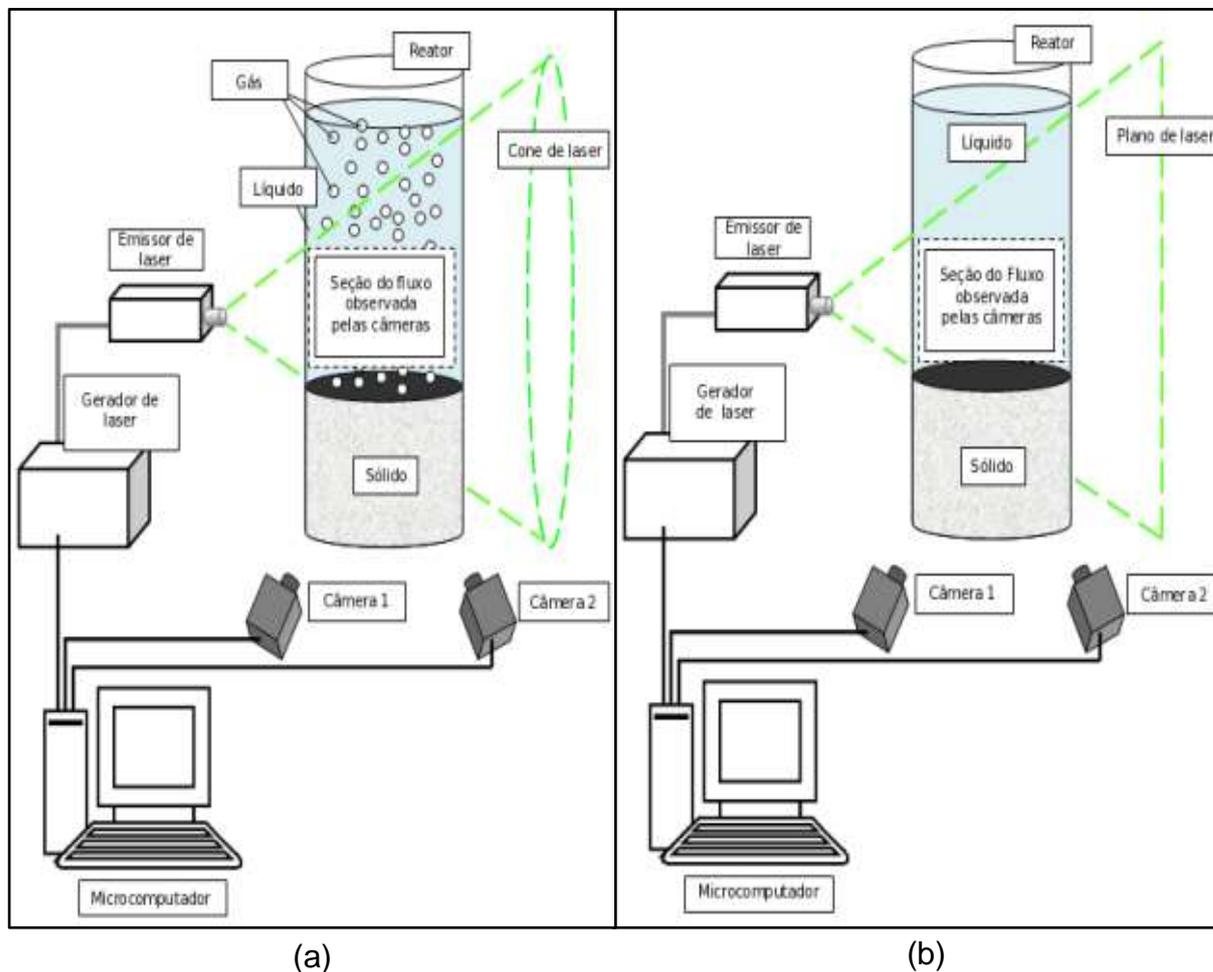
caso, a quantidade de imagens capturadas e processadas. Porém, um número muito grande de imagens demanda uma capacidade de armazenamento elevada. Desta forma, foi decidido capturar 200 imagens por seção.

Duas configurações de PIV foram utilizadas. Para a coleta dos dados do escoamento gás/líquido e do escoamento trifásico foi necessário o uso de filtros 540 nm, para evitar possíveis danos causados pela dispersão do laser devido à presença de bolhas. Foi utilizada também uma lente cilíndrica no laser, para a geração do cone de laser, pois a utilização apenas do feixe poderia gerar a dispersão da luz pelas bolhas. A Figura 14a ilustra a configuração utilizada na avaliação destes dois escoamentos, onde há a presença de bolhas. Os traçadores usados nesta configuração foram partículas fluorescentes 20-50 μm , de acordo com instruções do fabricante. A segunda configuração foi utilizada nos experimentos sólido/líquido, sem a presença das bolhas. Nesse caso, foi gerado um feixe de laser, sem a necessidade da utilização da lente cilíndrica. Os filtros para as lentes das câmeras também não foram necessários. Os traçadores utilizados foram micro esferas ocas de vidro, que foram utilizadas por orientação do fabricante. Detalhes sobre a configuração utilizada para o escoamento sólido/líquido podem ser visualizados na Figura 14b.

Os equipamentos base empregados para a *Shadowgraphy* ou *Shadow Imaging* tratam-se dos mesmos utilizados no PIV, com a diferença de que apenas uma câmera é utilizada nesse sistema. *Shadow Imaging* é um sistema baseado na retro iluminação com luz pulsada para obtenção da imagem das sombras de partículas ou bolhas visando sua análise (velocidade, tamanho, entre outras características). Uma fonte de luz (nesse caso o laser) é posicionada atrás da região de interesse (o reator) e a câmera é colocada em frente e alinhada ao laser. Nesse caso é utilizado um dispersor, para obter um feixe disperso de laser, e não são utilizadas partículas traçadoras.

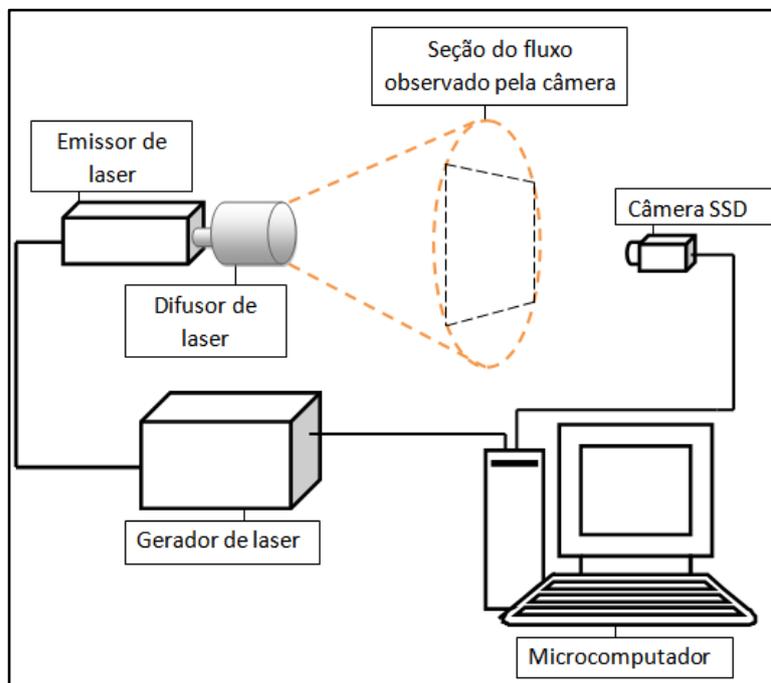
O laser ilumina a região do reator em dois momentos diferentes e a câmera captura a imagem da sombra das bolhas em cada pulso. Posteriormente, as imagens são tratadas pelo software, onde a distância percorrida pelas bolhas entre os dois pulsos do laser é obtida.

Figura 14 - Configurações utilizadas para o sistema PIV. (a) Configuração utilizada para avaliação dos escoamentos Gás/Líquido e Trifásico. (b) Configuração utilizada para avaliação do escoamento Sólido/Líquido.



Assim, dados como a velocidade e diâmetro de cada bolha são calculados. Esse método foi utilizado para a obtenção de dados experimentais para o tamanho de bolha e velocidade média do gás nos experimentos gás/líquido. Foram analisadas regiões do reator em diferentes posições verticais. A Figura 15 ilustra a configuração utilizada nesses experimentos.

Figura 15 - Configuração do sistema de Shadowgraphy utilizado.



A validação experimental com a utilização do PIV permitirá uma maior confiabilidade dos resultados obtidos, uma vez que permitirá a comparação de dados numéricos com dados experimentais.

5 RESULTADOS

Este trabalho gerou cinco artigos que são apresentados no capítulo de resultados. No apêndice A são apresentadas outras duas publicações derivadas deste trabalho.

O Artigo 1, intitulado “Avaliação da Influência das Forças Interfaciais na Previsão da Mistura Gás/Líquido em Reatores UASB Usando CFD” foi apresentado no III Simpósio Sobre Sistemas Sustentáveis (ISBN 978-85-7193-398-9), o qual foi realizado em Porto Alegre em Outubro/2016.

O Artigo 2, sob o título “*CFD Analysis on the effect of gas flow rate and bubble size on UASB reactors hydrodynamics*”, foi submetido ao periódico *Water Science and Technology*, em 27/03/2017 conforme comprovante apresentado no Apêndice B.

Em seguida, o Artigo 3 intitulado “*CFD Simulation and PIV Validation of the gas/liquid behavior in an UASB reactor*” foi submetido ao periódico *Engenharia Sanitária e Ambiental*, em 03/05/2017 conforme constam os comprovantes no Apêndice B.

Na sequência, é apresentado o Artigo 4 “*CFD study of interfacial momentum transfer between liquid/solid in the sludge bed of an UASB reactor*”, o qual foi submetido ao 15th IWA World Conference on Anaerobic Digestion, conforme comprovante apresentado no Apêndice B.

Por fim, o Artigo 5, com resultados das simulações sólido/líquido e trifásicas é apresentado sob o título “*Three-Phase CFD Simulation and PIV Validation of an UASB reactor*”, foi submetido ao periódico *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, em 04/04/2017 conforme comprovante apresentado no Apêndice B.

No Apêndice A também é apresentado o artigo “*Study of Different Forms of Gas Inlet and Distribution in UASB Reactors for the CFD Simulation and PIV Validation*” o qual foi apresentado no XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química (ISSN: 21785600, Vol 1), que ocorreu em Fortaleza-BR, em Setembro/2016. Este artigo serviu de base para definições no início do projeto. É apresentado também o capítulo “A Aplicação de Técnicas de Visualização de Fluxo por PIV na Otimização de Reatores para o Tratamento de Efluentes – Uma Revisão da Literatura Científica”, o qual foi selecionado para o livro Estudos Ambientais, Capítulo 8, volume 3, ISBN: 978-85-7193-01-6.

No presente capítulo serão apresentados também resultados que não constam em artigos.

5.1 CARACTERIZAÇÃO DAS FASES

Visando a obtenção de dados de entrada para as simulações numéricas, foram caracterizadas as três fases a serem consideradas no escoamento multifásico. Foi adotada temperatura constante de 293,15 K para todas as caracterizações realizadas.

A fase sólida, ou os grânulos de lodo anaeróbio, foi caracterizada quanto a: diâmetro médio, esfericidade, massa específica e velocidade de sedimentação.

A Figura 16 apresenta a distribuição granulométrica encontrada após a análise de 36 amostras de lodo anaeróbio. Valores de cauda foram desconsiderados, buscando evitar que microflocos, grânulos quebrados ou agregados fossem considerados no cálculo do diâmetro médio.

O diâmetro médio da amostra calculado foi de 1,55 mm com um desvio padrão de 0,59 mm, valor que está de acordo com o intervalo de valores reportado na literatura. Após analisar amostras provenientes de quatro diferentes reatores UASB Liu et al. (2006) encontraram valores entre 0,7 mm e 1,4 mm para o diâmetro médio dos grânulos provenientes destes reatores. Os autores citam ainda outros trabalhos que apresentam diâmetros médios de até 2,2 mm. Chang e Lin (2004) reportaram valores entre 0,2 mm e 0,4 mm de diâmetro para grânulos de lodo anaeróbio, para diferentes tempos de operação de um reator UASB.

Com relação à circularidade, a avaliação englobou grânulos dentro da faixa de distribuição granulométrica obtida. Nesta faixa de diâmetro, foram analisadas 150 imagens e verificou-se circularidade média de 0,50 com desvio padrão de 0,11. A Figura 17 apresenta uma das imagens capturadas através de microscópio ao longo da caracterização dos grânulos. Não foram encontrados dados na literatura para corroborar os resultados obtidos.

Figura 16 - Distribuição Granulométrica - grânulos de lodo anaeróbio

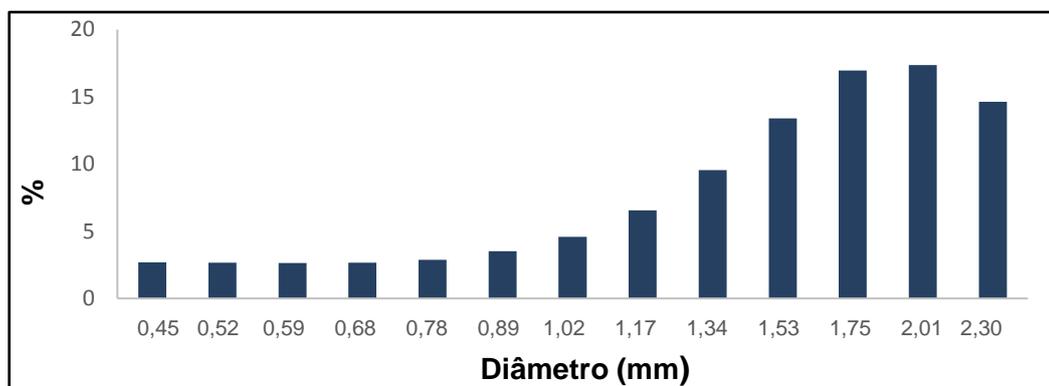


Figura 17 - Grânulo de lodo anaeróbio analisado em microscópio (5X).



Com relação à massa específica dos grânulos, após a análise de quatorze amostras foi encontrado o resultado de 1.050 kg.m^{-3} , com um desvio padrão de 43 kg.m^{-3} . A velocidade de sedimentação também foi avaliada, obtendo-se uma média de velocidade de sedimentação de $0,040 \text{ m.s}^{-1}$.

A fase gasosa ou o biogás foi caracterizado quanto à sua viscosidade dinâmica (μ) e massa específica (ρ). Foi considerado que o biogás é composto por 65% de metano (CH_4) e 35% de dióxido de carbono (CO_2). A viscosidade dinâmica do biogás foi calculada por:

$$\frac{0,65}{0,0109 \text{ cP}} + \frac{0,35}{0,0147 \text{ cP}} = \frac{1}{\mu_{\text{biogás}}} \quad (43)$$

$$\mu_{\text{biogás}} = 0,011984 \text{ cP} \quad (44)$$

$$\mu_{\text{biogás}} = 1,1984 \times 10^{-5} \text{ Pa.s} \quad (45)$$

Para o cálculo da massa específica ou densidade absoluta do biogás, primeiramente foi calculada a massa específica de cada componente por:

$$\rho = \frac{PM}{RT} \quad (46)$$

considerando: M a massa molar do gás ($M_{\text{CH}_4} = 0,01604 \text{ kg.mol}^{-1}$; $M_{\text{CO}_2} = 0,04401 \text{ kg.mol}^{-1}$); P a pressão atmosférica (101.325 Pa), T a temperatura (293,15 K) e R a constante universal dos gases perfeitos ($8,31 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$).

Dessa forma, a massa específica calculada para o metano foi de $0,667 \text{ kg.m}^{-3}$ e para o dióxido de carbono $1,830 \text{ kg.m}^{-3}$. Esses valores foram então utilizados para o cálculo da massa específica do biogás através da média harmônica da fração mássica de cada componente, através da equação:

$$\frac{0,65}{0,667 \text{ Kg/m}^3} + \frac{0,35}{1,830 \text{ Kg/m}^3} = \frac{1}{\rho_{\text{biogás}}} \quad (47)$$

$$\rho_{\text{biogás}} = 0,8578 \text{ kg.m}^{-3} \quad (48)$$

As bolhas de biogás geradas foram consideradas esféricas com diâmetro médio de 0,002 m, conforme o trabalho de Narnoli e Mehrotra (1997).

A fase líquida foi considerada como sendo água a 293,15 K, sendo, assim, utilizados os valores padrão para a viscosidade e massa específica a esta temperatura fornecidos pelo software. Uma vez que o fluido utilizado foi água, admitiu-se um comportamento newtoniano para esta fase em todas as simulações. A Tabela 8 resume as principais características das três fases utilizadas nas simulações numéricas.

Tabela 8 - Propriedades das fases utilizadas nas simulações.

Propriedade	Fase contínua (Líquido)	Fase Dispersa (biogás)	Fase Dispersa (grânulos de lodo)
Massa específica (ρ) (kg.m^{-3})	998,2	0,8578	1.050
Viscosidade dinâmica (μ) ($\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$)	$1,003 \times 10^{-3}$	$1,1984 \times 10^{-5}$	-
Diâmetro (mm)	-	2,00	2,00

5.2 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Após a definição da geometria a ser utilizada e da caracterização das fases, foi realizada a etapa de simulações numéricas, que compreendeu o teste de independência de malhas e as simulações bifásicas e trifásicas. Neste capítulo são apresentados os resultados para o teste de malhas que não constam nos artigos gerados a partir deste trabalho.

5.2.1 Teste de Independência de Malhas (GCI)

A Figura 18 apresenta a representação gráfica da malha 3 com detalhes da parte superior, onde estão localizadas as regiões de saída (c) e inferior, onde estão localizadas as entradas do domínio (d). Utilizando cada uma das malhas foi realizada uma simulação multifásica gás-líquido, seguindo a mesma parametrização apresentada no item 4.2.4.1 deste trabalho.

Para o teste de independência de malha pelo método do GCI, utilizando as três malhas descritas na metodologia, foram escolhidos dois parâmetros de desempenho: velocidade ascensional do gás média ($m.s^{-1}$) e fração volumétrica do gás média. A Tabela 9 resume os resultados da análise de GCI.

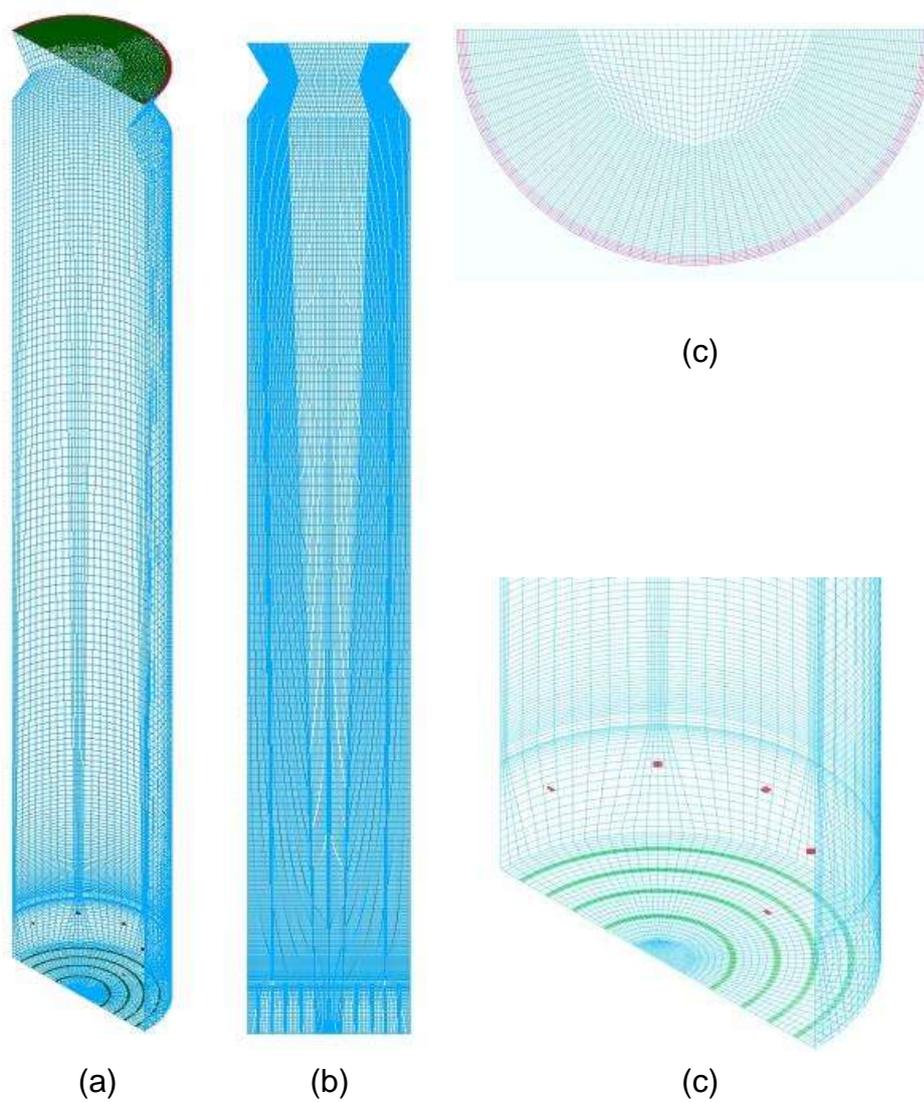
Considerando que os resultados para a faixa assintótica são próximos a 1, é possível afirmar que os resultados apresentados demonstram que a malha mais refinada (malha 1) é adequada para as simulações a serem realizadas. Porém, o tempo computacional para processar modelos multifásicos na malha 1, a qual apresenta o dobro de elementos da malha 2, foi em torno de 40% maior, gerando assim maiores custos computacionais. Foi verificado que a diferença máxima entre os resultados obtidos com as malhas 1 e 2 girou de em torno 8%. Desta forma, entende-se que a diferença entre os resultados obtidos com as malhas 1 e 2 não justifica o custo computacional elevado, por esse motivo a malha 2 foi escolhida para a realização das simulações numéricas.

Tabela 9 - Resultados teste de independência de malhas - GCI.

	$f_{h=0}$	f_1	f_2	f_3	p	GCI_{12}	GCI_{23}	Faixa Assintótica*
Velocidade ascensional do gás média (m.s ⁻¹)	0,3552	0,2688	0,2478	0,2739	-0,314	-0,402	-0,542	1,085
Fração volumétrica do gás média	$8,54 \times 10^{-4}$	$5,59 \times 10^{-4}$	$5,37 \times 10^{-4}$	$5,61 \times 10^{-4}$	0,104	0,659	0,738	1,041

*Faixa Assintótica: $GCI_{23}/(r^p \times GCI_{12}) \approx 1$

Figura 18 - Representação gráfica da malha e detalhes de entrada e saída do domínio.



5.3 ARTIGOS

ARTIGO 1

AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DAS FORÇAS INTERFACIAIS NA PREVISÃO DA MISTURA GÁS/LÍQUIDO EM REATORES UASB USANDO CFD

Camila D' Bastiani^a, Lademir Luiz Beal^b, Jéferson Luis Alba^c, Severino Rodrigues de Farias Neto^d, Ana Paula Rodrigues Torres^e, Maíra Paula de Sousa^f

^aUniversidade de Caxias do Sul, e-mail: camiladbastiani@gmail.com; ^bUniversidade de Caxias do Sul, e-mail: lbeal@ucs.br;

^cUniversidade de Caxias do Sul, e-mail: jlalba@gmail.com, ^dUniversidade Federal de Campina Grande, e-mail: s.fariasn@gmail.com, ^eCENPES/PETROBRAS, e-mail: aportres@petrobras.com.br, ^fCENPES/PETROBRAS, e-mail: mpsousa@petrobras.com.br

Introdução

O aumento considerável no consumo mundial de energia tem levado ao esgotamento das reservas naturais das fontes não renováveis. Desta forma a busca por fontes alternativas de energia limpa se tornou um tópico de interesse em nível mundial. Neste contexto, processos que permitam o tratamento de efluentes em paralelo com a geração de energias limpas devem ser estudados com maior atenção.

A digestão anaeróbia é um processo natural de biodegradação da matéria orgânica que ocorre em ambientes onde não há a presença de oxigênio. Desde a metade dos anos 1.800 vem sendo utilizada no tratamento de resíduos gerados pela intervenção humana (Kythreotou; Florides; Tassou, 2014). Recentemente processos de tratamento de efluentes por meio de digestão anaeróbia têm sido mais difundidos devido à sua capacidade de além de tratar os efluentes gerar energia na forma de biogás e possibilitar a utilização, em certos casos, do afluente do reator como biofertilizante (Szymanski; Balbinot; Schirmer, 2010). Diversas configurações de reatores podem ser utilizadas em processos de digestão anaeróbia, entre os mais comuns estão os reatores anaeróbios de fluxo ascendente (UASB). Desenvolvidos no final da década de 70, possibilitam o tratamento de efluentes com uma ampla gama de características, desde baixas cargas orgânicas como no caso de efluentes domésticos até efluentes com altas cargas orgânicas como é o caso da vinhaça (Lettinga; Pol, 1991; Yetilmezsoy, Sapci-Zengin, 2009; Dessi, et al, 2016).

Embora se trate de um reator simples acerca do seu conceito e da sua operação aspectos hidrodinâmicos de reatores UASB ainda apresentam um amplo

campo de estudo. Por se tratar de um reator com escoamento multifásico, as interações entre as fases desenvolvem um papel fundamental no comportamento hidrodinâmico do reator, influenciando também de forma direta na qualidade da mistura o que influenciará diretamente na eficiência do processo. No entanto, de forma geral, estas interações não são consideradas no projeto de biorreatores, podendo levar a diferenças entre as condições de projeto e de operação dos mesmos.

Visando a compreensão do comportamento hidrodinâmico e assim o aperfeiçoamento das técnicas de projeto deste tipo de reator surgem as ferramentas de fluidodinâmica computacional ou *Computacional Fluid Dynamics* (CFD) aplicadas a escoamentos multifásicos em biorreatores. Coroneo et al., 2011 e Ranade, 2002 citam a fluidodinâmica computacional como uma poderosa ferramenta na predição do comportamento fluidodinâmico local, possibilitando a avaliação da qualidade de mistura em reatores.

Em simulações de escoamentos multifásicos sob a abordagem Euleriana-Euleriana, a introdução do termo de transferência de momento interfacial leva à necessidade da análise de quais forças interfaciais existem para cada caso a ser estudado e quais os modelos adequados para a quantificação de tais forças.

Neste contexto, o objetivo deste trabalho é analisar a influência das forças interfaciais (forças de arraste, sustentação e massa virtual) sobre o comportamento fluidodinâmico do reator UASB.

Os resultados deste trabalho contribuem para a compreensão do papel que as forças interfaciais exercem no escoamento gás/líquido em reatores UASB, possibilitando a futura modelagem multifásica completa deste tipo de reator.

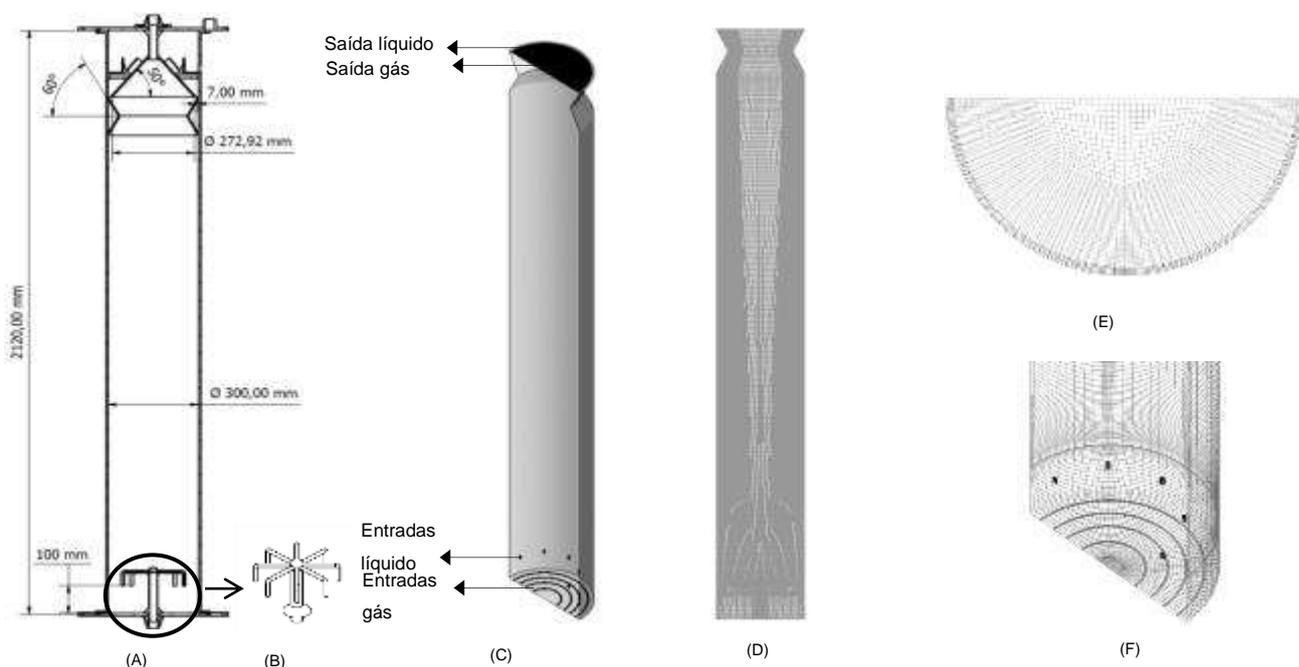
Materiais e Métodos

Geometria e Malha

O reator utilizado neste estudo foi projetado de forma a permitir o tratamento da vinhaça proveniente da indústria sucroalcooleira. Trata-se de um reator UASB com diâmetro de 0,3 m e a altura de 2,02 m tendo um volume total de 142,7 L. O ângulo dos sedimentadores e do defletor de gases foram projetados de acordo com Souza, 1986 (Figura 1A), e o sistema de distribuição do efluente na entrada do reator foi

escolhido baseado no estudo de Maurina et al., 2014 (Figura 1B). Para as simulações numéricas esta geometria foi simplificada (Figura 1C), possibilitando a geração da malha com maior qualidade e, assim, garantindo maior acuracidade dos resultados. O domínio de cálculo escolhido no espaço tridimensional se estende da base do reator até a altura de 1,8 m (onde se inicia o cone separador) e assume uma simetria radial compreendendo desta forma metade do reator. O domínio foi discretizado em malhas com 1.035.064, 528.000 e 248.720 volumes de controle para o teste de malhas utilizando o método GCI (Grid Convergence Index) conforme proposto por Roache, 1994. Detalhes da malha são apresentados nas Figuras 1D, 1E e 1F. Foram comparados os resultados para a fração volumétrica e a velocidade do gás em simulações multifásicas.

Figura 1: Detalhamento da geometria e malha do reator UASB. (A) Representação técnica do reator projetado (B) Detalhe do sistema de distribuição de efluente (C) Geometria simplificada utilizada nas simulações (D) Vista frontal da malha utilizada nas simulações (E) Vista superior da malha (F) Detalhe da parte inferior da malha utilizada



Modelagem Matemática

Foram realizadas simulações multifásicas, transientes no espaço tridimensional considerando as fases gás e líquido, utilizando a versão acadêmica do software Fluent 16.2. Foi adotada uma abordagem Euleriana-Euleriana a qual

assume que as fases são matérias contínuas e interpenetrantes sendo função do espaço e do tempo em um referencial inercial.

As simulações foram realizadas sob condições isotérmicas, não sendo assim necessários cálculos de transferência de calor. Também não foram consideradas transferências de massa entre as fases, sendo assim a equação de conservação de matéria não foi avaliada para o sistema. Desta forma, o movimento das fases foi governado pelas equações de conservação de massa e momento. A Equação 1 é resolvida pelo Fluent para a transferência de momento entre dois fluidos segundo Ansys, 2015:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -\alpha_q \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (K_{pq}(\vec{v}_p - \vec{v}_q) + (\vec{F}_q + \vec{F}_i)) \quad (1)$$

Considerando duas fases de fluidos q (fase contínua) e p (fase dispersa) e onde \vec{g} é a aceleração da gravidade, P a pressão, $\bar{\tau}_q$ é o tensor de tensões da fase, K_{pq} o coeficiente de troca interfacial, \vec{F}_q uma força de corpo externa e \vec{F}_i o somatório das forças interfaciais conforme Equação 2:

$$\vec{F}_i = \vec{F}_{lift,q} + \vec{F}_{mv,q} + \vec{F}_{td,q} + \vec{F}_{D,q} \quad (2)$$

Sendo $\vec{F}_{lift,q}$ a força de sustentação, $\vec{F}_{mv,q}$ a força de massa virtual, $\vec{F}_{td,q}$ a força de dispersão turbulenta e $\vec{F}_{D,q}$ a força de arraste.

A força de arraste \vec{F}_D é a responsável pela maior parte da transferência de quantidade de movimento interfacial entre as fases (Baten; Ellenberger; Krishna, 2003; Chen; Sanyal; Dudukovic, 2005; Lima et al., 2011; Cheng; Zhu, 2005), sua magnitude em um escoamento gás/líquido pode ser até 100 vezes maior que as outras forças (Laborde-Boutet et al., 2009). A força de arraste pode ser calculada usando a Equação 3, onde d_p é o diâmetro da fase dispersa, ρ_q a massa específica da fase contínua, v_p a velocidade da fase dispersa e C_D um coeficiente de arraste. Neste estudo as bolhas de gás foram consideradas esféricas e dispersas no escoamento, sendo assim foi escolhido o modelo de Schiller; Naumann (1933) para a determinação do coeficiente de arraste entre o gás e o líquido ($C_{D,gl}$) conforme Equação 4.

$$\vec{F}_D = C_D \frac{\pi}{4} d_p^2 \rho_q v_p \quad (3)$$

$$C_{D,gl} = \begin{cases} 24 \left(\frac{1+0.15Re^{0.687}}{Re} \right) & Re \leq 1000, \\ 0.44 & Re > 1000 \end{cases} \quad (4)$$

A força de sustentação (\vec{F}_{lift}) trata-se da força que age em uma partícula imersa em um fluido em uma direção ortogonal à direção do escoamento e é de fundamental importância na previsão do movimento lateral das partículas (Rosa, 2012). Segundo Luo e Dahhan, 2011 dois mecanismos distintos podem gerar forças laterais, denominados efeito Magnus e efeito Saffman. Neste estudo foi considerado apenas o efeito Saffman que de acordo com Saffman (1966a,1968b) é em geral mais significativo em escoamentos gás/liquido. Desta forma, a força de sustentação foi calculada conforme a Equação 5, onde, \vec{v}_q é a velocidade da fase contínua, \vec{v}_p a velocidade da fase dispersa e C_{lift} trata-se do coeficiente de sustentação, calculado utilizando o modelo de Saffman-Mei (Mei; Klausner, 1994) que é recomendado para bolhas esféricas que não sofrem distorção significativa e foi determinada com auxílio das Equações 6, 7 e 8.

$$\vec{F}_{lift} = C_{lift} \rho_q \alpha_p (\vec{v}_p - \vec{v}_q) \times (\nabla \times \vec{v}_q) \quad (5)$$

$$C_{lift} = \begin{cases} 6,46 \times f(Re_p, Re_\omega) & Re_p \leq 40 \\ 6,46 \times 0,0524 (\beta Re_p)^{1/2} & 40 < Re_p < 100 \end{cases} \quad (6)$$

Onde:

$$\beta = 0,5 (Re_\omega / Re_p) \quad (7)$$

$$f(Re_p, Re_\omega) = (1 - 0,3314\beta^{0,5})e^{-0,1Re_p} + 0,3314\beta^{0,5} \quad (8)$$

Sendo Re_p o número de Reynolds da partícula, e Re_ω o número de Reynolds relacionado a vorticidade.

A força de massa virtual \vec{F}_{mv} é responsável pelo momento necessário para mover uma determinada quantidade da fase contínua devido ao movimento da bolha (Paladino, 2005). Esta força pode ser calculada usando a Equação 9 .

$$\vec{F}_{mv} = \alpha_p \rho_q C_{mv} \left(\frac{d_q \vec{v}_q}{dt} - \frac{d_p \vec{v}_p}{dt} \right) \quad (9)$$

Sendo o C_{mv} o coeficiente de massa virtual, dependente da aceleração. Neste estudo foi assumido o valor padrão de 0,5 para partículas esféricas em um escoamento não viscoso para este coeficiente

Em escoamentos turbulentos surgem ainda duas forças interfaciais que podem ser consideradas: as forças de dispersão e interação turbulenta. Neste trabalho apenas a primeira é discutida. A força de dispersão turbulenta leva em consideração a difusão turbulenta da fase dispersa na fase contínua (Luo; Dahhan 2011) e foi calculada pelo modelo de Bertodano, Lahey e Jones (1994) por:

$$\vec{F}_{td,q} = -\vec{F}_{td,p} = C_{td}\rho_q k_q \nabla\alpha_q \quad (10)$$

Considerando-se k_q a energia cinética turbulenta da fase contínua, $\nabla\alpha_p$ o gradiente de fração volumétrica da fase contínua e C_{td} a constante de dispersão turbulenta. Neste trabalho foi assumido o valor de 0,1 para esta constante. A turbulência foi simulada utilizando o modelo de duas equações k- ϵ realizável. Foi ativado o modelo multifásico para fases dispersas, uma vez que a fração volumétrica da fase secundária é muito pequena.

Condições Operacionais

O fluido adotado foi água a 293,15K, sendo assim considerado newtoniano. Para o gás foram assumidas as propriedades do biogás. Estas foram calculadas através da média harmônica das propriedades de cada componente da mistura, considerando-se o mesmo como uma mistura de composição fixa, contendo 65% de CH₄ e 35% de CO₂, as bolhas foram consideradas esféricas e com o diâmetro de 0,003 m (Narnoli; Mehrotra, 1997). As propriedades de ambas as fases estão resumidas na Tabela 1.

Tabela 1: Propriedades dos fluidos utilizados nas simulações

Propriedade	Fase contínua (Líquido)	Fase Dispersa (biogás)
Massa específica (ρ) (kg.m ⁻³)	998,2	0,8578
Viscosidade dinâmica (μ) (kg.m ⁻¹ .s ⁻¹)	0,001003	1,1984e-5
Diâmetro de bolha	-	0,003 m

Uma vez que não foram consideradas reações dentro do reator, o gás foi introduzido através de anéis concêntricos localizados no fundo deste conforme estudo prévio realizado por Bastiani et al., 2016. O líquido foi introduzido no reator

por distribuidores que direcionam o fluxo em direção à base do reator, visando melhorar a qualidade da mistura dentro do reator. As saídas de líquido e gás do domínio de cálculo estão localizadas no topo do reator (Figura 1C). A Tabela 2 sumariza as condições de contorno adotadas nesta simulação.

Tabela 2: Condições de contorno utilizadas nas simulações

	Tipo	Valor	Unidade
Entrada de líquido	Velocidade de entrada	0,00711	m.s ⁻¹
Saída de líquido (P_{stat})	Pressão na saída	0*	Pa
Entrada de gás	Velocidade de entrada	$1,12 \times 10^{-3}$	m.s ⁻¹
Saída de gás	Desgaseificação	-	-
Simetria	Simetria	-	-
Pressão de operação (P_{ref})	-	101.325*	Pa
Parede	Superfície lisa, sem deslizamento	-	-

* Considerando que a pressão absoluta é a soma da pressão na saída (P_{stat}) e da pressão de operação (P_{ref}), foi considerada nula a pressão na saída de líquido para que a pressão absoluta correspondesse a pressão atmosférica na condição de contorno obedecendo a equação: $P_{abs} = P_{stat} + P_{ref}$

Quatro casos foram simulados com o objetivo de compreender a influência das diferentes forças interfaciais. Em todos os casos foi considerada também a força de dispersão turbulenta. Para o Caso A foi considerada apenas o arraste, no Caso B além do arraste foi considerada a força de sustentação, para o Caso C foram consideradas as forças de arraste e massa virtual e para o Caso D foram consideradas as forças de arraste, massa virtual e sustentação.

Foram calculados também os percentuais de zonas mortas do reator para todos os casos. Segundo Ren et al.; 2009 o volume de zonas mortas pode ser estimado calculando-se o volume total de células que apresentam velocidades de líquido baixas. Foram consideradas zonas mortas ou estagnantes como sendo as regiões onde a velocidade superficial do líquido está abaixo de 5% da velocidade média do reator.

Resultados e Discussões

Na etapa de definição da malha a ser utilizada, o teste de malhas realizado demonstrou que a malha com 528.000 volumes de controle é suficientemente refinada, para garantir a acuracidade dos resultados com o menor esforço computacional na predição do comportamento fluidodinâmico dentro do reator.

Visando a compreensão das diferentes forças interfaciais na previsão da mistura do reator foram analisados dados referentes às velocidades ascensionais do gás e do líquido, fração volumétrica do gás e energia cinética.

Foi verificado que a maior influência quando da consideração ou não das forças interfaciais estudadas se dá no perfil da velocidade ascensional do gás e na energia cinética turbulenta do líquido (Figuras 2 e 4). O perfil de velocidade ascensional do gás é diretamente influenciado pela distribuição de gás no reator (Figura 3), sendo assim quando consideradas as três forças a distribuição de gás é mais uniforme ao longo do reator (Figura 2D), gerando um perfil de velocidades mais distribuído. A utilização apenas da força de arraste gera um perfil de velocidades mais próximo a esta condição (Figura 2A), quando utilizada a força de arraste combinada com outra força forma-se um perfil com velocidades de gás extremamente baixas no centro do reator (Figuras 2B e 2C). A energia cinética turbulenta nos casos B e C é maior na região central do reator, tendo um perfil semelhante nestes dois casos (Figura 4B e 4C), provavelmente por existir uma maior área livre nessa região para circulação do líquido, devido à ausência de gás nessa região.

Figura 2: Campos de velocidades do gás para os Casos A, B, C e D

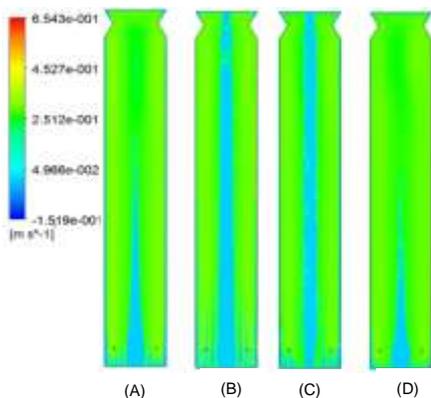


Figura 3: Campos de fração volumétrica do gás para os Casos A, B, C e D

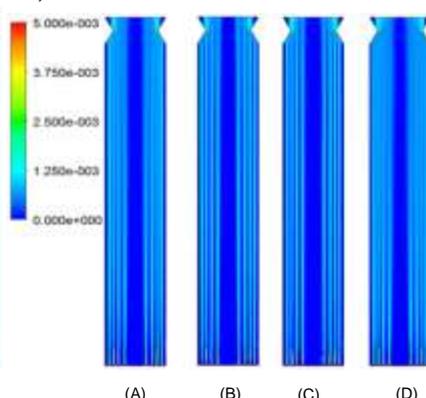


Figura 4: Campos de energia cinética turbulenta para os Casos A, B, C e D

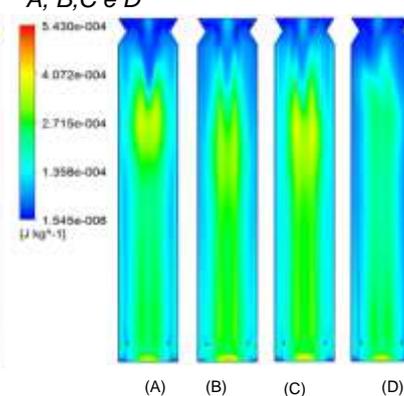
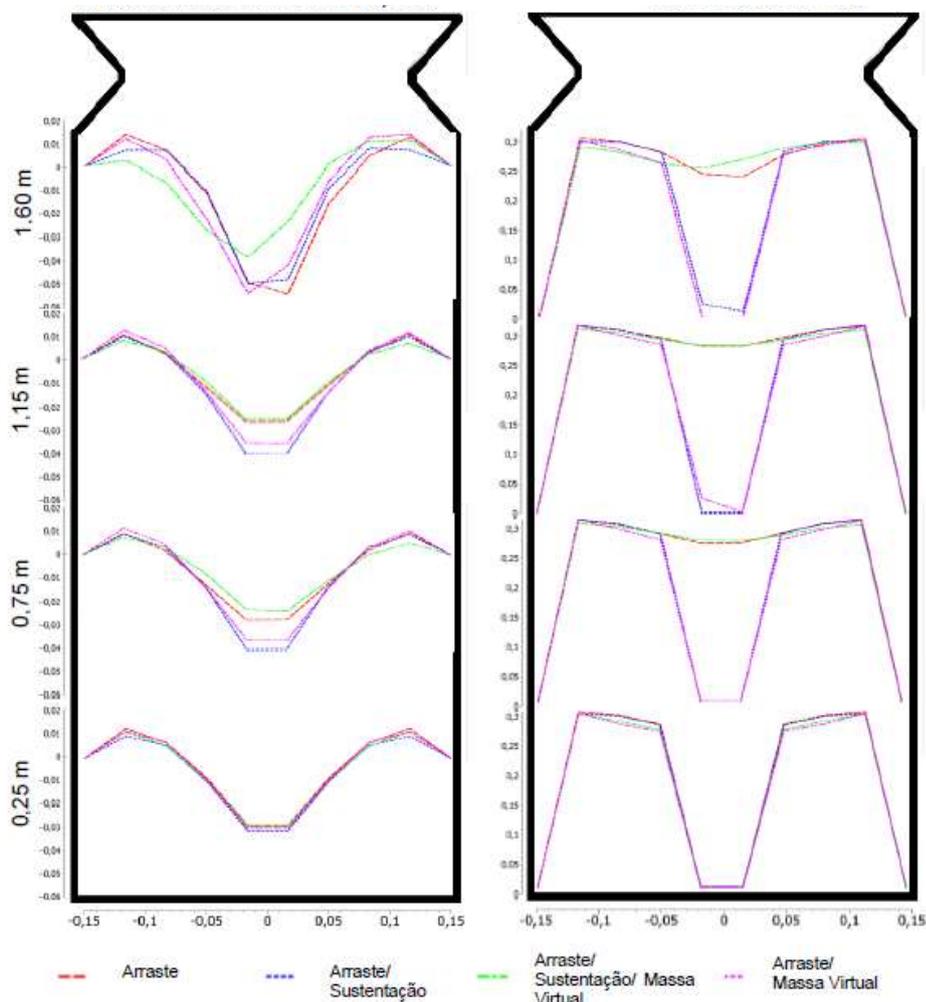


Figura 5: Perfis de velocidade radial em diferentes alturas do reator- Líquido Figura 6: Perfis de velocidade radial em diferentes alturas do reator- Gás



Foi analisado também o perfil radial das velocidades do gás e do líquido em diferentes alturas (0,25 m 0,75 m, 1,15 m e 1,60 m). Verificou-se que na região inferior do reator o perfil de velocidade é similar para os quatro casos. Porém, à medida que se afasta da base do reator, percebe-se uma clara distinção entre os casos A e D e os casos B e C, onde a força de arraste é utilizada junto a força de massa virtual ou a força de sustentação. Para a velocidade do líquido (Figura 5) a variação entre as forças é relativamente pequena, sendo mais visível na região central do reator. No entanto referente a velocidade do gás percebe-se uma variação acentuada ao longo das diferentes regiões do reator (Figura 6).

Em ambos os casos o perfil de velocidades próximo ao topo é mais desordenado, em função dos efeitos da recirculação interna de líquido que ocorre no

reator. Esta recirculação interna é provocada pela alimentação do gás cuja distribuição no reator não é radialmente uniforme. Assim, a fração volumétrica de gás se torna maior na região acima do seu sistema de distribuição e menor no centro do reator. Desta forma, na região onde o gás está presente a área disponível para o escoamento do líquido é menor, levando a maiores velocidades desta fase. Porém próximo ao topo do reator, a direção deste fluxo se inverte e o fluido desce gerando assim uma recirculação interna no reator.

Na Tabela 3 são apresentados os resultados numéricos obtidos para as médias das velocidades da fase líquida dentro do reator e o percentual de zonas mortas para cada caso. No Caso C, onde foram consideradas as forças de arraste e massa virtual foi gerada a maior velocidade média, por outro lado o caso onde além destas foi considerada também a sustentação (Caso B) foi gerada a menor velocidade média. A respeito das zonas mortas, a simulação onde a força de arraste foi utilizada em conjunto com a de sustentação (Caso B) demonstrou o maior percentual e zonas mortas enquanto o menor percentual ocorreu no caso onde a massa virtual foi incorporada a estas (Caso C).

Assumindo-se o Caso D como padrão por ser o mais completo, uma vez que considera as três forças abordadas neste estudo, foram comparados os desvios percentuais da média das velocidades e do percentual de zonas mortas em relação a este caso. A utilização da força de arraste aliada a força de sustentação (Caso B) gerou o menor desvio com relação à velocidade e por consequência o maior desvio em relação a quantidade de zonas mortas, o oposto ocorreu quando a força de arraste foi simulada em conjunto com a força de massa virtual (Caso C), obtendo o maior desvio para a velocidade e portanto o menor percentual de zonas mortas. Valores intermediários foram obtidos com a utilização apenas da força de arraste em ambos os casos (Caso A).

Tabela 3: Resultados numéricos para a velocidade e o percentual de zonas mortas

	Velocidade média (m.s ⁻¹)	Desvio % em relação ao caso D (velocidade)	% de zonas mortas	Desvio % em relação ao caso D (zonas mortas)
Arraste (A)	1,017x10 ⁻²	25,60	6,73	20,61
Arraste/Sustentação (B)	9,307x10 ⁻³	12,99	7,72	38,35
Arraste/Massa Virtual (C)	1,056x10 ⁻²	30,38	6,25	12,01
Arraste/Sustentação/Massa Virtual (D)	8,097x10 ⁻³	-	5,58	-

Conclusões

É possível verificar pelos resultados que a utilização apenas da força de arraste apresenta perfis semelhantes ao perfil apresentado das três forças em conjunto, comprovando assim que esta é a principal força responsável pela transferência de momento interfacial em reatores gás/líquido. A utilização da força de arraste em conjunto com a força de sustentação ou com a força de massa virtual leva a perfis semelhantes, apresentando uma mistura menos eficiente nestas simulações.

Pode-se ainda concluir que a influência das forças interfaciais se torna mais aparente conforme o escoamento se torna mais desenvolvido, sendo menor na base do reator e mais visível na região central do reator. No topo do reator, onde ocorre uma mudança de direção do fluxo de líquido devido à recirculação interna de líquido que ocorre, a turbulência (apresentada em termos de energia cinética turbulenta neste estudo) é maior, levando assim a uma irregularidade maior nos perfis de velocidade em alturas maiores.

Foram observados valores percentuais similares para a quantidade de zonas mortas e para a velocidade média em todos os casos avaliados, por outro lado o desvio percentual em relação ao caso D demonstrou uma diferença significativa tanto para a quantidade de zonas mortas quanto para a velocidade média calculada.

Referências

- Ansys; 2015. Manual Fluent 16.2. Ansys, UK,
- Bastiani, C. D., Beal, L. L., Alba, J. L., Torres, A. P. R., Souza, M. P.; 2016. Study of Different Forms of Gas Inlet and Distribution in UASB Reactors for the CFD Simulation and PIV Validation. In: XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química.
- Baten, J.M.V.; Ellenberger, J.; 2003. Krishna, R. Hydrodynamics of internal air-lift reactors: experiments versus CFD simulations. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. v. 42, n.10, p.733-742.
- Bertodano, M. L.; 1991. Turbulent Bubbly Flow in a Triangular Duct. Ph.D. Thesis. Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, New York.
- 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.
- Cheng, Y.; Zhu, J. X.; 2005. CFD Modeling and Simulation of Hydrodynamics in Liquid-Solid Circulating Fluidized Beds. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.83, p. 177-185.
- Coroneo, M.; Montante, G.; Paglianti, A.; Magelli F.; 2011. CFD prediction of fluid flow and mixing in stirred tanks: Numerical issues about the RANS simulations. *Computers and Chemical Engineering*, v.35, p. 1959-1968.

Dessi, P.; Jain, R.; Singh, S.; Seder-Colomina, M.; van Hullebusch, E. D.; Rene, E.R.; Ahammad, S. Z.; Carucci, A.; Lens, P. N. L. 2016. Effect of temperature on selenium removal from wastewater by UASB reactors. *Water Research*, v. 94, p. 146-154.

Kythreotou, N.; Florides, G.; Tassou, S. A.; 2014. A review of simple to scientific models for anaerobic digestion. *Renewable Energy*, v. 71, p. 701-714.

Laborde-Boutet, C.; Larachi, F.; Dromard, N.; Delsart, O.; Schweich, D.; 2009. CFD simulation of bubble column flows: Investigations on turbulence models in RANS approach. *Chemical Engineering Science*, v. 64, p. 4399-4413.

Lettinga, G.; Pol, W. H.; 1991. UASB-Process Design for Various Types of Wastewaters. *Water Science and Technology*, v.24, n.8, p. 87-107.

Lima, M. G. S.; Neto, S. R. F.; Lima, A. G. B.; Nunes, F. C. B.; Gomes, L. A.; 2011. Theoretical/Experimental Study of an Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor Treating Domestic Wastewater. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, v.9.

Luo, H. P., Dahhan, M. H. A.; 2011. Verification and Validation of CFD simulations for Local Flow Dynamics in a Draft Tube Airlift Bioreactor. *Chemical Engineering Science*, v. 66, p. 907-923.

Maurina, G. Z.; Rosa, L. M.; Beal, L. L.; Torres, A. P.; Sousa, M. P.; 2014. Numerical Study of Different Inlet Configurations on the Fluid Dynamics of an Anaerobic Sequencing Batch Reactor. *Chemical Engineering Transactions*, v. 38, p. 127-132.

Mei, R.; Klausner, J. F.; 1994. Shear Lift Force on Spherical Bubbles. *J.Fluid Mech*, v. 15, p. 62-65.

Narnoli, S. K., Mehrotra, I.; 1997. Sludge Blanket of UASB Reactor: Mathematical Simulation. *Water Research*, v 3, n. 4, p. 715-726.

Paladino, E. E.; 2005. Estudo do escoamento multifásico em medidores de vazão do tipo pressão diferencial. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil.

Ranade, V. V.; 2002. Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering. Academic Press, India. 452 p.

REN, T.T.; MU, Y.; NI, B.J.; YU, H.Q. 2009. Hydrodynamics of Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactors. *AIChE Journal*, v. 55, p. 516-528

Roache, P. J.; 1994. Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies. *Journal of Fluids Engineering*, v.116, p. 405-413.

Rosa, E. S.; 2012. Escoamento Multifásico Isotérmico – Modelos de multifluidos e de mistura. Porto Alegre – Bookman, 260 p.

Saffman, P.G.; 1965. The lift on a small sphere in a slow shear flow. *Journal of Fluid Mechanics* v.22.

Saffman, P.G., 1968. Corrigendum to 'The lift on a small sphere in a slow shear flow'. *Journal of Fluid Mechanics* v.31.

Schiller L., Naumann Z., Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftbereitung, *Z. Ver. Deutsch*, 1933, v. 77.

Souza, M. E.; 1986. Criteria for the utilization, design and operation of UASB reactors. *Water science and technology*, v.18, n. 12, p. 55-69.

Szymanski, M.S.E; Balbinot, R.; Schirmer, W. N.; 2010. Biodigestão anaeróbia da vinhaça: aproveitamento energético do biogás e obtenção de créditos de carbono – estudo de caso. *Semina: Ciências Agrárias*, Londrina, v. 31, n. 4, p. 901-912.

Yetilmezsoy, K.; Sapci-Zengin, Z.; 2009. Stochastic modeling applications for the prediction of COD removal efficiency of UASB reactors treating diluted real cotton textile wastewater. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, v. 23, p. 13-26.

ARTIGO 2

CFD Analysis on the effect of gas flow rate and bubble size on UASB reactors hydrodynamics

Short Title: Gas flow rate and bubble size effects on UASB hydrodynamics

Camila D' Bastiani ^a, Jéferson Luis Alba^a, Severino Rodrigues de Farias Neto^b, Ana Paula Rodrigues Torres^c, Lademir Luiz Beal^{a*}

^a Environmental Technology Laboratory, Postgraduate Program in Engineering and Environmental Sciences, University of Caxias do Sul (PPGECAM-UCS), 1130, Francisco Getúlio Vargas St, Caxias do Sul, RS, Brasil

(E-mail: llbeal@ucs.br*)

* **Corresponding author**

^b Department of Chemical Engineering, Center of Science and Technology, Federal University of Campina Grande, 882, Aprígio Veloso St., Campina Grande, PB, Brasil.

^c Research and Development Center Leopoldo Américo Miguez de Mello, Petrobras, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

ABSTRACT

Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations were performed to assess the influence of the gas flow rate and bubble size in the overall hydrodynamic behavior of a biogas producing Upflow Anaerobic Sludge Blanket (UASB) reactor. Gas flow rate ranged between 4.15×10^{-2} and $1.65 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ and three bubble sizes were tested. Eulerian-eulerian, transient, isothermal, 3D simulations were performed. The results showed that the increase in the gas flow rate led to higher gas upflow velocities and higher gas volumetric fractions. The liquid upflow and magnitude velocities were also increased due to the increased gas flow rate. A direct relationship between the gas and the liquid velocities was observed. Also, a direct correlation was reported between the gas flow rate and the liquid velocities. For the changes in bubble size, the results showed that the gas velocity is influenced by the size of the bubble. At

constant gas flow rates and increased bubble size, it was noticed a reduction in the gas volumetric fraction inside the reactor.

Keywords

Biogas; Biomass; Bubble size; CFD; Momentum transport; UASB.

INTRODUCTION

Computational Fluid Dynamics has become an important tool for the analysis and improvement of wastewater treatment systems according to Samstag *et. al*, 2016. The Upflow Anaerobic Sludge Blanket (UASB) reactor has been used for treating wastewaters with a large range of characteristics (Lettinga & Pol, 1991). Concerning concept and operation, UASB reactors are relatively simple. They are based in the anaerobic digestion principles. The feeding system usually is on the top of the reactor leading the wastewater to the bottom and then the wastewater, during the process, moves from the bottom to the top through the sludge bed where the biogas production takes place. The mixing is mainly promoted by the biogas bubbles and the upward wastewater movement. The bioreactions that take place within the reactor are closely linked with the mixing quality, the absence of dead zones, the hydraulic retention time and other fluid dynamic aspects. A poor mixing will not allow the biomass to get in contact with the wastewater, thus reducing the organic load conversion.

Mixing conditions are a function of the movement of each one of the three phases, especially due to the interfacial forces that act between them. The liquid flows through the empty spaces of the sludge bed, causing a small expansion on it. At the same time, biogas is formed within the bed and starts to be released and moves in the upward direction.

Interfacial momentum transfer between the phases plays an important role on the reactor hydrodynamics. The drag force (\vec{F}_D) is responsible for mostly of the interfacial momentum transfer between the phases (Baten *et al.*, 2003; Cheng & Zhu, 2005; Lima *et al.*, 2011; Simcik *et al.*, 2011). It can be estimated using:

$$\vec{F}_D = C_D \frac{\pi}{4} d_p^2 \rho_q v_r^2 \quad (1)$$

where C_D is the drag coefficient, d_p is the dispersed phase diameter, ρ_q the continuous phase density and v_r the relative velocity.

The virtual mass force (\vec{F}_{vm}) accounts for the momentum required to move a certain amount of the continuous phase due to the bubble movement. In bubbly gas/liquid flows it is expected that the gas bubbles will have an influence on the liquid upflow velocity. Thus, in some cases, the \vec{F}_{vm} can have a considerable influence on the interfacial momentum transfer, and can be calculated using:

$$\vec{F}_{vm} = \alpha_p \rho_q C_{vm} \left(\frac{D_q \vec{v}_q}{Dt} - \frac{D_p \vec{v}_p}{Dt} \right) \quad (2)$$

In cases where there is lateral particle motion, it is important to consider also the lift force (\vec{F}_{lift}), that is the force acting on a particle immersed in a fluid in an orthogonal direction to the flow direction.

Sivasubramanian & Prasad (2009) experimentally investigated the influence of superficial gas velocity and fluid properties on gas holdup and liquid circulation velocity, in and airlift column reactor. The authors found out that the increase in the superficial gas velocity increased the liquid circulation velocity. Vial *et al.* (2001) applied Laser Doppler anemometry to a bubble column reactor equipped successively with three different gas distributors. They studied the evolution of the

local hydrodynamic parameters of the liquid phase with the gas velocity changes and found that the liquid centerline velocity is shown to be proportional to the gas velocity. Another parameter that plays an important role on the overall hydrodynamics on a gas/liquid flow is the bubble size. The gas upflow velocity is closely linked with the buoyancy force. This force changes with the cubic power of the bubble's diameter. Considering that, it is possible to say that the bigger is the bubble's diameter the higher is the bubble's upflow velocity (Narnoli & Mehrotra, 1997). Tsuchiya *et al.* (1997) experimentally studied gas-liquid-solid fluidization in light of the velocity of single bubbles rising through the suspension. They reported a proportional relationship between bubble size and the gas upflow velocity. The increase in the gas velocity with the bubble diameter was reported as well by Pourtousi *et al.*, (2015). The authors investigated the effect of bubble diameter size on the prediction of flow pattern, using CFD simulations of a homogeneous bubble column regime.

In this context, CFD arises as a powerful tool to predict the interactions between the phases as well as the overall hydrodynamic behavior of UASB reactors. The aim of this study is to perform a CFD analysis on the influence of different gas flow rates and bubble sizes on the liquid flow profile and velocity in UASB reactors, mimicking the effect that larger biogas production, as well as, the range of bubble sizes released from the sludge bed would have in the overall hydrodynamics of the reactor.

METHODS

UASB design and geometry

A small scale UASB reactor was designed for simulating an anaerobic process treating sugarcane vinasse and thus generating biogas. The organic load was chosen as the design criteria (Souza, 1986). It was adopted an efficiency of 80% of

COD removal based on the results reported by Goodwin & Stuart, 1994 and Kennedy & Lentz (2000).

The influent distribution system was designed aiming to achieve the best mixing conditions and the gas inlet system was designed in order to generate the best mixing between water and liquid as proposed by Bastiani (2016). Figure 1 shows the entire designed geometry and the region that was chosen to be the control volume for the reactor CFD analysis. The volume control comprises the region where the main reactions take place, thus where the mixing needs to be efficient. A fixed usable volume of 0.14 m³, a diameter of 0.3 L and a height of 2.12 m were used for the reactor design and estimation of the operating parameters.

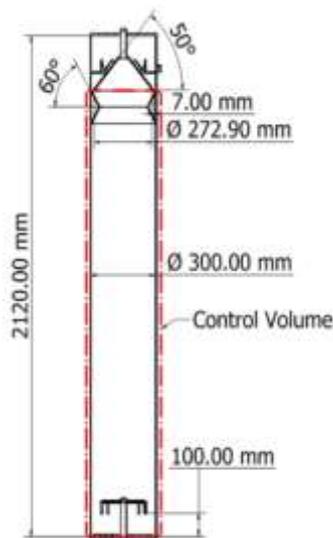


Figure 1 | UASB Geometry and control volume used for this work.

Meshing and Mesh Independence Study

For this study, the domain discretization was done using structured blocks meshing techniques. Considering the computational costs and the work of Lima (2011), three-dimensional simulations of half reactor (longitudinal section) were performed.

Two simplifications were assumed for manufacturing the mesh: the conical region was not considered and the influent distribution system was simplified into inlet

surfaces.

In order to perform the GCI analysis, three different meshes were generated, considering ratios (r_r) of 2.12 and 1.96: mesh 1(1,035,064 elements), mesh 2 (528,000 elements) and mesh 3 (248,720 elements). Next, two performance parameters (f) were chosen: the volume averaged upflow velocity for the gas and the averaged gas volumetric fraction within the reactor. The method developed by Roache (1994) and also used by Craig *et al.* (2013) was then applied to estimate the asymptotic range. It is correct to say that asymptotic range of convergence was reached, and thus the result is mesh independent when:

$$GCI_{23} \approx r_r^p GCI_{12} \quad (3)$$

or:

$$\frac{GCI_{23}}{r_r^p GCI_{12}} \approx 1 \quad (4)$$

CFD model

Aiming to assess the gas influence on the behavior of the liquid flow, monophasic and two-phase simulations were performed. Those simulations were performed with the support of the Fluent 16.2. Considering a calculated Reynolds number of 7.45 for the designed upflow velocity, a laminar model was chosen for the simulations.

For the two-phase simulations of the fluid dynamics, a gas (biogas) and a liquid (water) phases were considered to be under isothermal conditions at 293.15 K. The physical properties of both phases are summarized in Table 1.

Table 1 | Physical properties of the fluids (293.15 K; 1 atm).

Property	Unit	Continuous phase (liquid)	Dispersed phase (biogas)
Density (ρ)	kg·m ⁻³	998.2	0.8578
Dinamic viscosity (μ)	kg·m ⁻¹ ·s ⁻¹	1.003 x 10 ⁻³	1.1984 x 10 ⁻⁵
Bubble Size (d_b)	m	-	0.001 ; 0.002 ; 0.003

The hydrodynamics of a multiphase gas-liquid flow was simulated using a Eulerian-Eulerian approach. The mass conservation and the movement of each phase were governed by the moment conservation equation. Over this study, the mass and energy transfer among the phases was neglected. The Fluid-Fluid moment equation solved by Fluent and the continuity equation are the following (Ansys, 2015):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -\alpha_q \nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) + (\vec{F}_q + \vec{F}_{lift,q} + \vec{F}_{vm,q} + \vec{F}_{td,q} + \vec{F}_D)) \quad (5)$$

and:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_p \rho_p) + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{v}_q) = 0 \quad (6)$$

where, q is the continuous and p the dispersed, P is the pressure, \vec{g} the gravity acceleration, $\bar{\bar{\tau}}_q$ is the phase stress-strain tensor, K_{pq} is the interphase momentum exchange coefficient, \vec{F}_q is an external body force, $\vec{F}_{lift,q}$ is a lift force, $\vec{F}_{vm,q}$ is a virtual mass force, $\vec{F}_{td,q}$ is a turbulent dispersion force and \vec{F}_D is a drag force.

This study was based on the effects of the drag force and also the virtual mass, according to Rosa, *et al.* (2015) those are the two interfacial forces that affect the most this kind of flow.

Considering that the gas bubbles were spherical and the distribution was sparse the model chosen to determine the drag force coefficient (C_D) was the Schiller & Naumann (Ansys, 2015):

$$C_D = \begin{cases} 24 \left(\frac{1+0.15Re^{0.687}}{Re} \right) & Re \leq 1,000, \\ 0.44 & Re > 1,000, \end{cases} \quad (7)$$

where the Reynolds number for the bubble is calculated by:

$$Re = \frac{d_b |v_l - v_g| \rho_l}{\mu_l} \quad (8)$$

For the virtual mass modeling, the virtual mass coefficient (C_{vm}) for a spherical particle in and inviscid flow was assumed to be 0.5, the same used by Bannari *et al.* (2008) for a bubble column.

In order to solve the velocity-pressure coupled differential equations, the Phase Coupled SIMPLE algorithm was used. The Third-Order MUSCL and the QUICK schemes were used to discretize the governing equations into algebraic equations in the final solution.

Over this study, four different velocities for the gas inlet and three different bubble sizes were studied. Table 2 shows the boundary conditions that were used for all the simulations. Considering that the Absolute Pressure (P_{abs}) is the sum of the Pressure at the Outlet (P_{stat}) plus the Operating Pressure (P_{ref}), the outlet pressure was considered zero, so the P_{abs} will correspond to the atmospheric pressure at the outlet boundary condition. It was considered a Reference Operating Pressure of 101.325 Pa. Table 3 shows the numerical simulations that were performed over this study.

Table 2 | Boundary Conditions

	Type	Value	Unit
Liquid Inlet	Velocity Inlet	0.00711	m·s ⁻¹
Liquid Outlet	Pressure Outlet	0	Pa
Gas Outlet	Degassing	-	-
Gas Inlet	Velocity Inlet	According to Table 4	m·s ⁻¹
Symmetry	Symmetry	-	-

Table 3 | Numerical Simulations Performed

Simulation ID	Gas Inlet Velocity ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	Gas Flow Rate ($\text{m}^3\cdot\text{h}^{-1}$)	Bubble Size (m)
V1B3	1.12×10^{-3}	4.15×10^{-2}	3×10^{-3}
V2	2.24×10^{-3}	8.24×10^{-2}	3×10^{-3}
V3	3.36×10^{-3}	1.24×10^{-1}	3×10^{-3}
V4	4.48×10^{-3}	1.65×10^{-1}	3×10^{-3}
B2	1.12×10^{-3}	4.15×10^{-2}	2×10^{-3}
B1	1.12×10^{-3}	4.15×10^{-2}	1×10^{-3}

In order to assess the gas flow rate effect on the liquid upflow velocity, four different velocities were tested thus mimicking the effect of the production of different flow rates of biogas. Also, three different bubble sizes were simulated observing the bubble size range described by Narnoli & Mehrotra (1997) for bubbles that come off the bottom of an UASB reactor (1-4 mm). It was used an adaptive time stepping method, with a time step size at convergence of 0.001 s and residuals of 1e^{-4} .

RESULTS AND DISCUSSIONS

Meshing and Mesh Independence Study

For this study, a two-phase gas-liquid, Eulerian model was used when assessing mesh independence. For the gas upflow velocity, it was calculated a GCI_{12} of -0.402 and a GCI_{23} of -0.542, thus a result of 1.085 was found for the asymptotic range. Concerning the gas volumetric fraction, it was estimated a GCI_{12} of 0.659 and a GCI_{23} of 0.738, resulting in an asymptotic range of 1.041.

It can be seen by the results that the chosen meshes are in the asymptotic range, what means that the finest mesh can provide sufficiently accurate results. However, the results for the performance parameters between the Meshes 1 and 2 showed a maximum difference of 8% and the flow patterns were very similar between these

meshes. Also, the computational time required for convergence was much smaller for Mesh 2 with very similar results. For those reasons, the Mesh 2 was chosen for further simulations.

Monophasic Simulation and Model Validation

Aiming to learn about the profile and the velocity for a monophasic flow, a simulation was performed using only water as the fluid. The results were then compared with analytical results calculated from:

$$V_{max} = 2 \cdot V_m \quad (9)$$

$$V_m = \frac{Q}{A} \quad (10)$$

$$V_r = V_{max} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (11)$$

where V_{max} is the maximum velocity, V_m the mean velocity, A represents the superficial area of the reactor cross section, V_r is the velocity at a radius r and R is the reactor radius.

The results showed good agreement. The difference for the mean velocity between analytical and numerical results was around 3% and for the maximum velocity was 0%. Thus the computational model was suitable for the reactor.

The two-phase model was then validated through gas/liquid steady state simulations, with a gas volumetric fraction at the inlet of 1×10^{-6} . It is expected that in the presence of a low gas volumetric fraction, the model should report results close to the monophasic simulations. A mean upflow velocity of $2.50783 \times 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ was found, which is a result 2.3% higher than the monophasic simulated result. For the maximum velocity a greater difference was found, the simulated velocity of $5.52304 \times 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ is 9.3% higher than the monophasic simulation result.

The profile of the upflow velocity as a function of the radius for the three situations can be visualized in Figure 2. Monophasic analytical and numerical simulations show the same velocity profile. Even though the two-phase velocity profile shows a good agreement with the monophasic simulations, at the center of the reactor some differences can be observed in the gas/liquid simulation for the highest velocities.

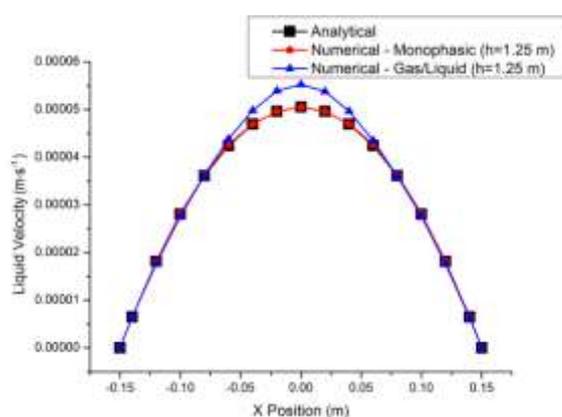


Figure 2 | Monophasic Simulation: Upflow Velocity Profile.

Two-phase Simulations

Changes in the gas flow rate

The multiphase simulations were performed using the model described in the methodology for 218 s when the upflow gas velocity and the gas volumetric phase have reached the steady state in the transient simulations. The first set of simulations aimed to assess the impact that increased gas flow rates, would have in the general hydrodynamic behavior of the reactor. This effect could happen in cases where the gas production is increased due to many factors, once bioprocesses are not constant as they depend on several external factors such as influent pH, temperature, biodegradable COD, influent flow rate, organic load and volatile fatty acids.

It is possible to observe in Table 4 that the gas upflow velocity and the gas volumetric fraction are correlated with the gas production. The liquid upflow and magnitude velocities were also increased due to the gas velocities.

Table 4 | Summary of the simulated results – Changes in gas flow rate.

	Gas Flow Rate (m³·h⁻¹)	Gas Upflow Velocity (m·s⁻¹)	Liquid Upflow Velocity (m·s⁻¹)	Liquid velocity –magnitude– (m·s⁻¹)	Gas Volume Fraction
V1B3	4.15 x 10 ⁻²	0.2479	2.70 x 10 ⁻⁵	2.09 x 10 ⁻²	5.55 x 10 ⁻⁴
V2	8.24 x 10 ⁻²	0.2629	3.57 x 10 ⁻⁵	2.99 x 10 ⁻²	1.10 x 10 ⁻³
V3	1.24 x 10 ⁻¹	0.2717	4.73 x 10 ⁻⁵	3.76 x 10 ⁻²	1.64 x 10 ⁻³
V4	1.65 x 10 ⁻¹	0.2729	5.53 x 10 ⁻⁵	4.10 x 10 ⁻²	2.17 x 10 ⁻³

It was observed a positive linear correlation between the gas and the liquid velocities, with a correlation coefficient of 0.9687. A linear correlation was also observed between the gas flow rate in the reactor and the liquid velocities, with a correlation of 0.9674. This correlation indicates that when the biogas yield in the reactor increases, the liquid velocity magnitude is also increased.

The highest gas volumetric fraction was found for the simulation with the highest gas flow rate (simulation V4). It happens because the gas flow rate increases in a much higher rate than the gas upflow velocity, causing the gas to accumulate inside the reactor. Higher is the area occupied by the gas inside the reactor, smaller is the free area for the liquid to flow upwards, thus the liquid velocity is also increased.

It was also observed in the simulations that the gas induces an internal recirculation of the liquid (Figure 3). This effect generates a better mixing within the reactor, thus allowing a higher time of contact between the biomass and the influent and consequently a higher biogas yield.

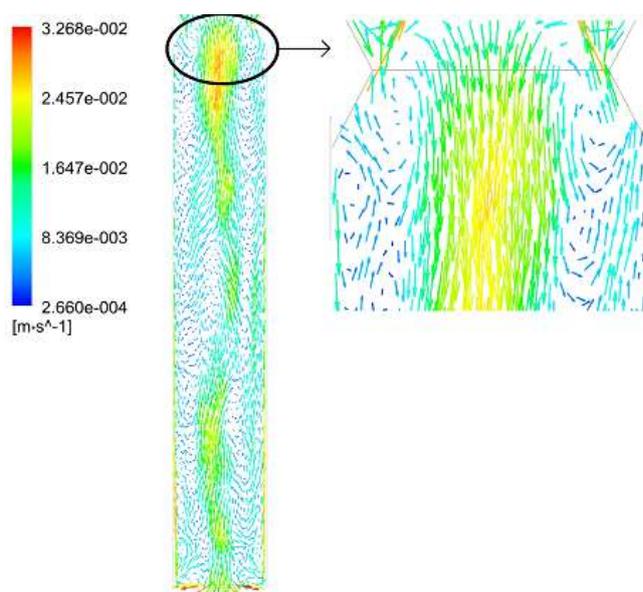


Figure 3 | Liquid velocity vectors at a central plane for unsteady results - Case V1B3

Bubble size effect

As the bubbles are released from the sludge bed in UASB reactors they flow in the upward direction, until they reach the three phase separator at the top. Table 5 presents results for bubbles between 1 mm to 3 mm.

Table 5. | Summary of the simulated results – Changes in bubble size.

	Bubble Size (mm)	Gas Upflow Velocity ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	Liquid Upflow Velocity ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	Liquid velocity –magnitude– ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	Gas Volumetric Fraction
B1	1	0.1107	3.38×10^{-5}	2.80×10^{-2}	1.38×10^{-3}
B2	2	0.1930	3.13×10^{-5}	2.42×10^{-2}	7.68×10^{-4}
V1B3	3	0.2479	2.70×10^{-5}	2.09×10^{-2}	5.55×10^{-4}

The 3 mm bubble shows a gas upflow velocity around 29% higher than the 2 mm bubble and more than 2 times the velocity of the smaller bubble simulated (1 mm). For the bubble size range studied, the results showed a linear correlation between gas upflow velocity and bubble size (Figure 4a). Considering a constant gas flow rate, the smaller velocities for the gas led to a shortest hydraulic retention time of the gas phase (HRT - calculated using the gas upflow velocity, the reactor transverse

area and volume). The gas HRT for the 1 mm bubble was around 18 s while the HRT for the 3 mm bubble was about 8 s. It happens because the gas needs a higher time to reach the degassing zone of the reactor, thus being released from the liquid surface. In other words, the gas volumetric fraction increases with the reduction in the size of the bubble as shown in Table 5 because the bubbles last longer inside the reactor leading to an accumulation of gas.

As a result of the increased gas volumetric fraction, there is a reduction in the area available for the liquid to move upwards. It is known that the relationship between area and velocity is inversely proportional. Considering that the liquid flow was kept constant over the simulations and the area was reduced it is possible to see in the results that the liquid upflow velocity increases with the reduction in the bubble size.

Figure 4b shows a direct relationship between bubble size and liquid velocity.

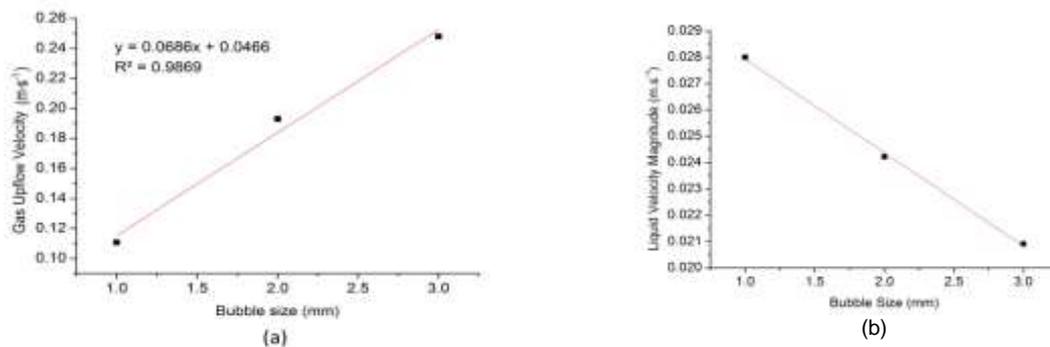


Figure 4 | (a) Gas upflow velocity and bubble size correlation. (b) Liquid velocity and bubble size correlation.

The increment in the gas velocity associated with a reduction in the gas volumetric fraction had an opposite relationship to what happened when the gas flow rate was increased. Figure 5 shows a comparison between the cases where the gas flow rate was increased and where the bubble size was increased. It is possible to say that with increased gas flow rates (V_2 , V_3 , and V_4) the velocity was not increased at a

high rate. So the gas accumulated in the reactor and the gas volume fraction was increased. On the other hand, a constant gas flow rate (B1 and B2) associated with higher velocities due to the bubble size led to a reduction in the gas volume fraction. In other words, the gas volume fraction is a function of both, the gas upflow velocity and the gas flow rate. Thus there is a proportional relationship with the gas flow rate and an inversely proportional relationship with the gas upflow velocity.

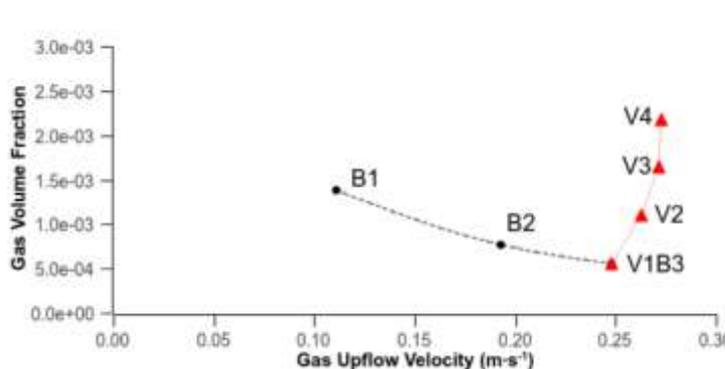


Figure 5 | Relation between gas volume fraction and gas upflow velocities for changes in gas flow rate and in bubble size. For the bubble sizes B1= 1 mm; B2 = 2 mm and B3=3 mm a gas velocity of $0.00112 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ was assumed. A fixed bubble size of 3 mm was assumed for the gas velocities: V1= $0.00112 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, V2= $0.00224 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, V3= $0.00336 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ and V4= $0.00448 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

CONCLUSION

Considering the results obtained in this study, it is possible to conclude that:

- The models proposed for the monophasic and two-phase simulations are suitable, considering the good agreement between simulations and analytical results;
- A constant bubble size of 3 mm was assumed, and the increment on the gas flow rate promoted an increase in the gas volume fraction and in the gas and liquid upflow velocities, showing a relationship between them.
- Considering a constant gas flow rate, as bubble size was increased in a UASB reactor, the gas volume fraction decreased and the gas upflow velocity increased, showing a relationship between bubble size and those parameters;

- The simulations showed that the gas induced an internal recirculation within the reactor, thus increasing the contact time between biomass and effluent.

NOTATION

A	Area
C_D	Drag Force Coefficient
CFD	Computational Fluid Dynamics
COD	Chemical Oxygen Demand
C_{vm}	Virtual Mass Coefficient
d	Diameter
f	Performance Parameter
\vec{F}_D	Drag force
\vec{F}_{lift}	Lift Force
\vec{F}_q	External Body Force
$\vec{F}_{td,q}$	Turbulent Dispersion Force.
\vec{F}_{vm}	Virtual Mass Force
GCI	Grid Convergence Index
h	Height
HRT	Hydraulic Retention Time
K_{pq}	Interphase Momentum Exchange Coefficient
P	Pressure
Q	Flow Rate
R	Reactor Radius
r_r	Refinement Ratio
Re	Reynolds Number
v	Upflow Velocity
UASB	Upflow Anaerobic Sludge Blanket
V	Volume
V_r	Velocity at a Radius r
v	Velocity
v_r	Relative Velocity
V_{max}	Maximum Velocity
V_m	Mean Velocity
VOL	Volumetric Organic Load

Greek Letters

α	Volumetric Fraction
ε	Relative Error
μ	Dinamic viscosity
ρ	Density
$\bar{\tau}$	Stress-Strain Tensor

Subscripts

p	Dispersed phase
q	Continuous phase
b	bubble
l	liquid
g	gas

REFERENCES

ANSYS. Fluent 16.2 Theory Guide. 2015

Bannari R., Kerdouss F., Selma B., Bannaria A. & Proulx, P 2008 Three-dimensional mathematical modeling of dispersed two-phase flow using class method of population balance in bubble columns. *Computers and Chemical Engineering*, **32**, 3224-3237.

Bastiani C., Beal L.L., Alba J.L., Torres A.P.R. & Souza M.P. 2016 Study of different forms of gas inlet and distribution in UASB reactors for the CFD simulation and PIV validation. In: *XXI Brazilian Congress of Chemical Engineering (COBEQ)*, Fortaleza, Ceará Brazil.

Baten J. M. V., Ellenberger J. & Krishna, R. 2003 Hydrodynamics of internal air-lift reactors: experiments versus CFD simulations. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. 42(10), 733-742.

Cheng Y. & Zhu J. X. 2005 CFD Modeling and Simulation of Hydrodynamics in Liquid-Solid Circulating Fluidized Beds. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **83**, 177-185.

Craig, K.J.; Nieuwoudt, M. N.; Niemand, L. J. 2013. CFD Simulation of Anaerobic Digester With Variable Sewage Sludge Rheology. *Water Research*, 47, 4485–4497.

Goodwin J. A. S. & Stuart J. B. 1994 Anaerobic digestion of malt whisky distillery pot ale using upflow anaerobic sludge blanket reactors. *Bioresource Technology*, 49(1), 75–81.

Kennedy K. J. & Lentz E. M. 2000 Treatment of landfill leachate using sequencing batch and continuous flow upflow anaerobic sludge blanket (UASB) reactors. *Water Research*, 34(14), 3640–3656

Lettinga G. & Pol W. H. 1991 UASB-Process Design for Various Types of Wastewaters. *Water Science and Technology*, 24(8), 87-107.

Lima M. G. S., Neto S. R. F., Lima A. G. B., Nunes F. C. B. & Gomes, L. A. 2011 Theoretical/Experimental Study of an Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor Treating Domestic Wastewater. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 9(A59).

Narnoli S. K. & Mehrotra I. 1997 Sludge Blanket of UASB Reactor: Mathematical Simulation. *Water Research*, 3(4), 715-726.

Pourtousi M., Ganesan P. & Sahu J. N. 2015 Effect of bubble diameter size on prediction of flow pattern in Euler–Euler simulation of homogeneous bubble column regime. *Measurement*, **76**, 255–270.

Roache P. J. 1994 Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies. *Journal of Fluids Engineering*, **116**, 405-413.

Rosa L. M., Maurina G. Z., Beal L. L., Baldasso C., Torres A. P. & Sousa M. P. 2015. Influence of Interfacial Forces on the Mixture Prediction of an Anaerobic Sequencing Batch Reactor (ASBR). *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, **32**(02), 531-542.

Samstag, R. W; Ducoste, J. J.; Griborio, A.; Nopens, I.; Batstone, D. J.; Wicks, J. D., Saunders, S.; Wicklein, E. A.; Kenny, G.; Laurent, J. 2016. CFD for wastewater treatment: an overview. *Water Science and Technology*, **74**, (03). 549-563.

Souza M. E. 1986 Criteria for the utilization, design and operation of UASB reactors. *Water science and technology*, **18**(12), 55-69.

Simcik M., Mota A., Ruzicka M. C., Vicente A. & Teixeira J. 2011 CFD simulation and experimental measurement of gas holdup and liquid interstitial velocity in internal loop airlift reactor. *Chemical Engineering Science*, **66**, 3268-3279.

Sivasubramanian V. & Prasad B. S. N. 2009 Effects of superficial gas velocity and fluid property on the hydrodynamic performance of an airlift column with alcohol solution. *International Journal of Engineering, Science and Technology* **1**(1), 245-253

Vial Ch., Lainé R., Poncin S., Midoux N. & Wild G. 2001 Influence of gas distribution and regime transitions on liquid velocity and turbulence in a 3-D bubble column. *Chemical Engineering Science*, **56**, 1085-1093

Tsuchiya K., Furumoto A., Fan L. & Zhang J. 1997 Suspension viscosity and bubble rise velocity in liquid-solid fluidized beds. *Chemical Engineering Science*. **52**(18), 3053-3066.

Wu M. M., Voice T. C. & Hickey R. F. 1992 Hydraulic characteristics of an upflow anaerobic sludge blanket UASB reactor with granular sludge In *Proceeds on 47th Industrial Waste Conference Purdue University Lewis Publishers*, 1st ed, West Lafayette, Indiana United States Of America, 425-436.

Role of the funding source

This study was sponsored by PETROBRAS (Brazilian Oil Company).

ARTIGO 3**CFD Simulation and PIV Validation of the gas/liquid behavior in an UASB reactor****Simulação do comportamento gás/líquido em um reator UASB através de CFD e validação experimental utilizando PIV**

Short title: UASB reactor gas/liquid CFD simulation and PIV validation

Abstract

As the world population increases, the need to develop more efficient wastewater treatment systems requires the use of new technologies. Software aided project and optimization of bioreactors and bioprocesses have become a matter of interest in recent years, especially due to the advance in the state of the art of computational resources. This work aimed to perform gas/liquid numerical simulations using the Fluent 16.2 software and to validate this model through PIV and Shadow Imaging techniques. Eulerian-Eulerian, laminar, tridimensional, transient simulations were carried out. The results for the mass imbalance for the gas and liquid phases, gas volumetric fraction, gas velocity, bubble size, liquid magnitude and upflow velocity and the velocity profiles for the liquid phase were successfully validated against experimental data. Concerning the dispersed phase, it was found a difference of 4.37% for the gas volumetric fraction between experiments and simulations. Simulated results showed a difference for the bubble mean velocity of 1.73% when compared with Shadow imaging results. No coalescence was observed along the experiments, and the flow regime was characterized as dispersed bubble flow. Regarding the liquid phase, it was found a difference of 3.2% for the mean velocity, between simulated and PIV results. Simulated and experimental velocity profiles showed a better agreement at the center of the reactor. Some differences were observed in those profiles, due to geometry simplifications assumed in order to get a better mesh. Considering the good agreement between simulation and experiments the model was considered validated.

Resumo

Conforme a população mundial aumenta, o desenvolvimento de sistemas de tratamento de efluentes mais eficientes requer o uso de novas tecnologias. O projeto e otimização de

biorreatores e bioprocessos auxiliados por *softwares* têm se tornado uma questão de interesse, em especial devido ao avanço no estado da arte quando se trata de recursos computacionais. O objetivo deste trabalho foi realizar simulações numéricas gás/líquido, utilizando o *software* Fluent 16.2, e validar experimentalmente o modelo computacional através de técnicas de PIV e *Shadow Imaging*. Foram realizadas simulações laminares, tridimensionais, transientes adotando uma abordagem Euleriana-Euleriana. Os resultados para o balanço de massa, a fração volumétrica de gás, a velocidade do gás, o tamanho de bolhas, a magnitude e a velocidade ascensional do líquido e os perfis de escoamento do líquido foram validados experimentalmente com êxito. Foi verificada uma diferença de 4,37% entre resultados numéricos e experimentais para a fração volumétrica de gás no reator. Quando comparados os resultados das simulações com os resultados obtidos através de *Shadow Imaging*, foi encontrada uma diferença de 1,73% para a velocidade média da bolha. Não foi verificada coalescência de bolhas nos experimentos realizados, e o escoamento foi caracterizado como de bolhas dispersas. Acerca da velocidade do líquido, foi encontrada uma diferença de 3,2% para a velocidade média, entre resultados de CFD e PIV. Os resultados numéricos e experimentais para os perfis de escoamento foram mais similares no centro do reator. Considerando a boa concordância entre resultados numéricos e experimentais, o modelo foi considerado validado.

Keywords:

Biogas; Biomass; CFD; Momentum transport; Multiphase flow; UASB.

Palavras-chave:

Biogás; Biomassa; CFD; Transporte de movimento; Escoamentos multifásicos; UASB.

1 INTRODUCTION

Anaerobic digestion based processes have become a popular kind of bioprocess for treating wastewaters, especially due to their ability to combine the efficient treatment of effluents and the generation of renewable energy. In the late 1970's a reactor known as UASB (Upflow Anaerobic Sludge Blanket) was developed and became widely popular, mainly due to its relatively simple design allied to high treatment efficiencies (SOUZA, 1986; LETTINGA and POL, 1991). Considering the current need for renewable energy sources as well the increase in the wastewater generation, the development of new technologies, which allow higher

treatment efficiencies and rates, has drawn the attention of researchers from different fields. Most of the works on that field use experimental studies to assess the influence of changes in the process control and operation e. g the use of recycle streams, series reactors, changes in the hydraulic retention time (HRT) (EL-SHEIKH et al., 2011; INTANOO et al., 2014; RIZVI et al., 2015; JUNIOR et al., 2016). Changes on the biomass source and the supplementation of the process aiming higher biogas production are also under study by some authors (JANKE et al., 2016; BARROS, DUDA and OLIVEIRA, 2016). Even though UASB reactors are considered simple in means of construction and operation, predicting the hydrodynamic behavior in biogas producing bioreactors is challenging considering that it consists of a complex multiphase flow, formed by a liquid, a solid and a gas phase. Nonetheless, the understanding of the hydrodynamic behavior in UASB reactors plays an important role in the improvement of these reactors technology. The biogas yield is dependent on the mixing quality within the reactor, once it induces to a higher contact time between biomass and wastewater. On the other hand, in cases where the upflow liquid velocity is low, the auto mixture within the system is promoted mainly due to the gas velocity. In other words, the gas/liquid momentum transfer in UASB reactors has an influence on the overall anaerobic process of the reactor. In general, the interfacial momentum transfer between a gas and a liquid can be due these three forces: drag (\vec{F}_D), lift (\vec{F}_{lift}) and virtual mass (\vec{F}_{vm}). The understanding of these interactions requires a deep knowledge of the flow and of the mathematical models applied. The development of more powerful computers, with higher processing capacity has been allowing the development of computational studies in order to have a better understanding of the hydrodynamics of bioreactors at a different level. This has led to the more frequent use of CFD tools to predict a wide range of processes, including bioprocesses. In this context, and considering the importance of the gas/liquid interactions in UASB reactors, this work aims to develop a two phase CFD model, using the commercial package Fluent 16.2, and to validate it through PIV techniques, using a small-scale UASB reactor.

2 METHODS

2.1 CFD MODEL

Considering that the main anaerobic reactions take place at the lower and middle parts of the reactor, the volume control for the simulations was assumed as showed in Figure 1. Due to the

need of a high mesh quality, simplifications concerning the influent distribution system were assumed; also the conical region of the reactor was not simulated. The commercial software ICEM CFD was used for the domain discretization through structured blocks meshing techniques, and hexahedral elements, in the three-dimensional space.

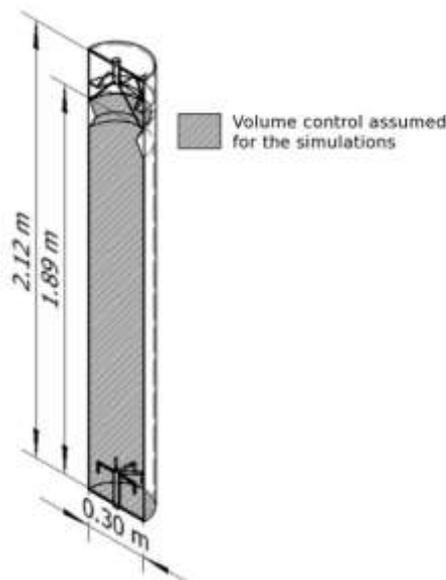


Figure 1 - Volume control assumed for the

Taking into consideration the work of Lima et al. (2011), which showed that the flow in a similar UASB reactor could be considered symmetric, as well as the computational costs implicated in simulating a full reactor, it was simulated only half of the reactor (longitudinal section). Aiming to obtain a mesh independent result for the simulations, a mesh independence study was performed. Thus, three meshes with different numbers of elements were generated: mesh 1 (1,035,064 elements), mesh 2 (528,000 elements) and mesh 3 (248,720 elements). The Grid Convergence Index (GCI) method, proposed by Roache (1994), was used to assess the mesh independence through the analysis of two performance parameters. Therefore, the volume upflow velocity for the gas and the gas volumetric fraction within the reactor were chosen as those parameters. Considering the GCI results as well as the computational costs involved (unpublished results), the mesh 2 (528,000 elements) was chosen for this study.

The commercial software package Fluent 16.2 was used in order to perform the numerical simulations. A two-phase, Eulerian-Eulerian (E-E) model was chosen for the simulations, which considers the flow as two interpenetrating continuous phases. In this approach, the mass and momentum conservation laws should be satisfied for each phase individually. This

approach was chosen due to the computational advantages of this model if compared with the Eulerian-Lagrangian (E-L) option. For the E-L model, higher is the dispersed phase volumetric fraction higher is the computational effort needed, while in the E-E approach, this effort remains constant. Even though the gas is present in a small volumetric fraction, in future works it is intended to add the solid fraction to the simulation of the UASB reactor, thus increasing significantly the dispersed phase volumetric fraction.

A Reynolds number of 7.45 was calculated using the designed mean upflow velocity for the liquid inside the UASB reactor ($2.525 \times 10^{-5} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$), the water properties at 293.15 K and the dimensions of the tubular section of the reactor (0.3 m of diameter). Thus, a laminar model was used to perform the simulations. The liquid phase was considered to be water at 293.15 K, and the standards properties from the software database were used. Considering the biogas as a mixture of 65% methane (CH_4) and 35% carbon dioxide (CO_2), the gas phase properties were calculated using the harmonic mean of their properties. Table 1 shows the physical properties used in the simulations for both: dispersed and continuous phase.

Table 1 - Physical properties of the fluids (293.15 K; 1 atm).

Property	Unit	Dispersed phase (biogas)	Continuous phase (liquid)
Dinamic viscosity (μ)	$\text{Kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	0.8578	998.2
Density (ρ)	$\text{Kg} \cdot \text{m}^{-3}$	1.1984×10^{-5}	1.003×10^{-3}
Bubble Size (d_b)	m	0.002*	-

* Narnoli and Mehrotra (1997).

Concerning the simulations, it was not considered the mass and energy transfer among the phases. The movement and mass conservation for each phase were governed by the following Fluid-Fluid moment conservation equation solved by Fluent (ANSYS, 2015):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -\alpha_q \nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) + (\vec{F}_q + \vec{F}_{D,q})) \quad (1)$$

and:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_p \rho_p) + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{v}_q) = 0 \quad (2)$$

where q is a continuous and p a dispersed phase, $\bar{\bar{\tau}}_q$ is the phase stress-strain tensor, P is the pressure, K_{pq} is the interphase momentum exchange coefficient, \vec{g} the gravity acceleration,

\vec{F}_q is an external body force, $\vec{F}_{D,q}$ is the drag force.

According to many authors, such as Lima et al. (2011), Cheng and Zhu (2005), Baten, Ellenberger and Krishna (2003) and Simcik et al. (2011), the drag force is the main responsible for the interfacial momentum transfer between the phases. Therefore, in this study, only the drag force was considered.

Depending on the kind of the flow and on the characteristics of the dispersed and continuous phases a correlation for the drag force coefficient (C_D) should be chosen. As the gas bubbles were spherical and the distribution was sparse, the model proposed by Schiller and Naumann (1933) was selected:

$$C_D = \begin{cases} 24 \left(\frac{1+0.15Re^{0.687}}{Re} \right) & Re \leq 1000, \\ 0.44 & Re > 1000, \end{cases} \quad (3)$$

where the Reynolds number for the bubble is calculated by:

$$Re = \frac{d_b |v_l - v_g| \rho_l}{\mu_l} \quad (4)$$

where the bubble diameter is the d_b , the liquid velocity the v_l , the liquid density the ρ_l and the gas velocity the v_g .

A liquid inlet velocity of $7.11 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ and a gas inlet velocity of $1.12 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ were assumed, resulting in a liquid flow rate of $6.43 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ and a gas flow rate of $4.15 \times 10^{-2} \text{ Nm}^3 \cdot \text{h}^{-1}$. At the gas outlet, a degassing boundary condition was used, thus allowing only the gas to flow through it. The absolute Pressure (P_{abs}) is the sum of the Pressure at the Outlet (P_{stat}) and the operation pressure (P_{ref}), as showed in Equation 5. Therefore, the pressure at the liquid outlet boundary was assumed to be 0 Pa, and an operation pressure of 101,325 Pa was used, thus the absolute pressure would correspond to the atmospheric pressure at the liquid outlet boundary.

$$P_{abs} = P_{stat} + P_{ref} \quad (5)$$

A symmetry boundary condition was assumed at the center of the reactor, the software assumes zero flux of all quantities across that type of boundary. A non-slipping boundary condition was assumed at the walls, it considers that the velocities at the walls in the X, Y and Z directions are equal to zero.

The CFD model is solved using the Phase Coupled SIMPLE algorithm in order to solve the velocity pressure coupled differential equations. Aiming to discretize the governing equations

into algebraic ones in the final solution, the Second Order Upwind scheme was used for the momentum and the QUICK for the volume fraction.

The adaptive time stepping method was used along the simulations, together with a maximum number of iterations per time step of 25. As convergence criteria, residuals of $1e^{-4}$ were adopted and the stability of some control variables was assessed. Transient simulations were performed.

2.2 EXPERIMENTAL METHOD

2.2.1 Reactor

For the experimental validation of the CFD model, the PIV technique was applied using a small-scale UASB reactor. It was previously designed for treating sugarcane vinasse with a chemical oxygen demand (COD) between 15,000 and 65,000 mg O₂ L⁻¹ (CORTEZ, FREIRE, and ROSILLO-CALLE, 1996) and thus generating biogas. A reactor 2.12 m high and with 0.3 m of diameter was used. A usable volume of 140 L was assumed. It was built in poly(methyl)methacrylate (PMMA), thus allowing an internal view of the flow within the reactor. The laser beam generated by the PIV can suffer some refraction effects when it reaches the curved wall of the UASB reactor. In order to reduce these effects, the reactor was placed in a hexahedral vessel, which was filled with tap water.

The liquid entered the reactor through a distributor with 8 pipes, placed at the bottom of the reactor, which was designed in order to generate a better mixing between gas and liquid as proposed by Bastiani et al. (2016) Four concentric rings were placed at the bottom of the reactor, where the gas was inserted. According to Bastiani et al. (2016), this was the alternative that showed the best results on mimicking the effect of the gas being generated inside the reactor. When using PIV techniques it is important to avoid turbid fluids, in order to achieve better results for the images of the flow fields. Therefore, the use of wastewater and biomass to generate the biogas on the reactor would have a strong interference on the results. The reactor was filled with tap water and the gas used for the experiments was compressed air at room temperature. The water flow was controlled using a hydraulic pump manufactured by Netzsch together with a frequency inverter (Weg – CFW 10). A liquid flow of 6.42 L·h⁻¹ was assumed. For the gas flow control, a rotameter, Applitech - 1900 in combination with a differential pressure controller was used to maintain a flow of 0.041 Nm³·h⁻¹.

2.2.2 Particle Image Velocimeter (PIV) and Shadowgraphy set up

In order to gather relevant and accurate data for the validation of the CFD model, a PIV system was used, which is a non-intrusive method that allows the flow visualization and the particle movement analysis. This method was used to assess the flow velocity and profile for the liquid phase. It consists in the illumination of a section of the flow in two near instants of time, using a laser. The position of tracing particles is then registered using two cameras, and the data is processed in specific software for the analysis of the flow. In this work, a stereoscopic 3D PIV acquired from LaVision was used. It consists of two cameras *ImagerProSX 5M*, with Nikon lenses. It was necessary the use of a 540 nm cut-off filter on the lenses, to avoid possible damages caused by the laser light scattering caused by bubbles. The laser generator used was the *Quantel Double-Pulsed Nd:YAG EverGreen EVG 00200*. Fluorescent 20-50 μm tracers were seed into the flow in order to allow the flow analysis. The images collected were processed in a computer using a processor Intel Xeon E5620, a video card *Zotac/NVIDIA GeForce GT 610*, operational system Windows 7 and a PTU (*Programmable Timing Unit*) VZ Trigger PTU V9.0. The DaVis 8.2.2 software was used for the images treatment and processing, in order to obtain flow fields. The PIV measurements were preceded by a calibration using a calibration plate. The plate was placed inside the reactor and then the cameras were focused on the center of the plate aiming to mark on the software three pre-determined points, in order to proceed with the software aided calibration. Following the calibration, the reactor was seed with the fluorescent particles. The images were collected using the configuration showed in Figure 2.

The cameras and the laser were placed in vertical rails, allowing capturing the images throughout all the reactor height. The cameras were placed at 60° and 120° within the reactor central longitudinal plane for the tridimensional results optimization, and the laser was placed in a position that it could lighten this plane. Considering that the reactor height was much bigger than the lenses capturing field, the reactor was divided into seven sections for the images capture. In order to measure the particle displacement, two images are captured for each camera, one for each laser pulse. The delay time between the laser pulses changed along the sections, considering that higher is the flow velocity smaller should be the delay time in order to allow a particle displacement of around 10 pixels between the two pulses. Aiming to obtain more precise results for the averaged vector field it is important to obtain as many images for each section as possible, allowing the producing of a high number of instantaneous

vector fields to calculate a better time averaged result.

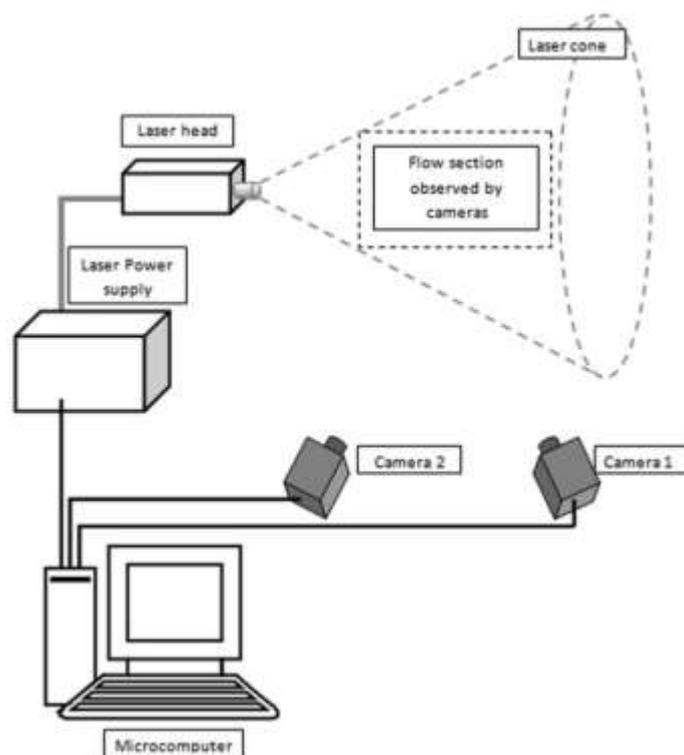


Figure 2 - Configuration of the PIV system used for experimental data

On the other hand, a high number of images demands a longer processing and post processing time. Therefore, it was decided to capture 200 images of the flow for each section of the reactor. For each image four frames were obtained, one frame each camera for each laser pulse, thus allowing the post processing of the images in order to obtain the instantaneous vector fields, that would be used to further calculate the time averaged vector fields. Aiming to gather data about the gas phase, the PIV system was changed to a Shadowgraphy configuration, which allows capturing the gas bubble size and velocity. The same hardware and software were used with a different configuration, but no tracer particles were fed into the reactor. Figure 3 shows a scheme of the Shadow Imaging system used in this work. The Shadowgraphy technique consists of a pulsed backlight illumination (a dispersed laser light obtained using a laser diffuser) which is aligned with a camera. The laser illuminates the reactor section in two different moments, and the camera captures the “shadow” of the particles of interest (the gas bubbles in this work) in each laser pulse.

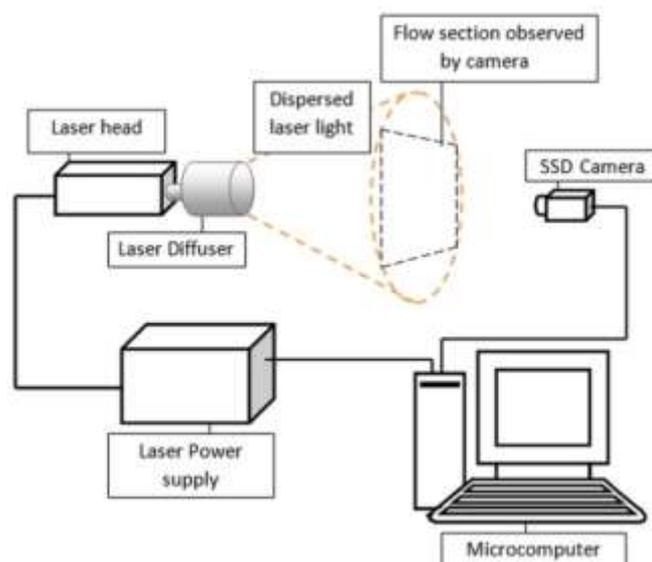


Figure 3- Configuration of the Shadowgraphy system used for experimental

Then the software is used to calculate the displacement of the observed bubbles between laser pulses obtaining information about bubbles velocity and position. Over this study, the Shadowgraphy measurement of 11 vertical positions was performed and the results were then tabulated.

3 RESULTS AND DISCUSSIONS

Considering the designed values for the gas flow rate and the liquid flow rate, the mass flow rate at the inlet for the gas and the liquid phases were calculated, using the density of each phase. Table 2 sums up the results for the mass flow rates and the mass imbalances for the analytical and computational cases. It shows a difference for the gas mass flow rate of 0.39% and for the liquid mass flow rate of 0.05% between simulated and analytical results at the inlet. It represents a not significant difference, thus showing that the model is suitable for the simulation. The calculated values for the mass imbalance results also presented a good result, considering the flow conditions.

Table 2 - Analytical and numerical results for the mass flow rate and the mass imbalance.

Phase	Analytical mass flow rate (inlet) (Kg/h)	Simulated mass flow rate (inlet) (Kg/h)	Simulated mass flow rate (outlet) (Kg/h)	Mass Imbalance (Kg/h)	Mass Imbalance (%)
Gas	0.03557	0.03543	0.03533	0.0001	0.28
Liquid	6.41343	6.41021	6.0924	0.31781	4.95

The simulation showed a gas volume fraction within the reactor of 0.0007627044. In order to validate this result, the volume of gas inside the reactor was experimentally determined. The amount of gas inside the reactor can be considered as the difference in the volume occupied by the fluids with and without the gas. Aiming to measure that, the pump of the liquid was turned on and the height of the reactor occupied by the liquid was measured. Then the gas was injected into the reactor and the height was measured again. The difference between those heights was used to calculate the volume occupied by the gas and thus the gas volumetric fraction. An amount of $9.47192 \times 10^{-5} \text{ Nm}^3$ of gas in the reactor was obtained or a volumetric fraction of 0.0007307548, a difference of 4.37% between experimental and simulated results. Considering that, it is possible to say that the numerical and experimental results for the gas volumetric fraction show a good agreement.

Considering the reactor dimensions and the gas and liquid flow rates, the superficial velocities were calculated using Equation 6:

$$U_{is} = \frac{Q_i}{A} \quad (6)$$

where U_{is} is the phase i superficial velocity ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$), Q_i is the phase i flow rate and A is the transverse area of the reactor. The gas superficial velocity calculated was $1.6 \times 10^{-4} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ and the liquid superficial velocity was $2.5 \times 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

Mishima and Ishii (1983) developed a flow transition criteria for upward two-phase flow in vertical tubes, and presented a flow-regime map based on the gas and liquid superficial velocities. Although a different tube diameter was used in the present study, it was observed a bubbly flow for the calculated superficial velocities, as shown in Figure 4, in accordance with the Mishima & Ishii (1983) flow-regime map. In bubble columns, it was observed by Chen, Reese and Fan (1994) and Díaz, Montes and Galán (2008) mainly two flow regimes: the dispersed bubble and the coalesced bubble flow regimes. Figure 4 shows the bubble distribution in a 70 x 60 mm region of the reactor, where is possible to visualize the dispersed bubble flow regime. The image was collected using shadowgraphy.

Concerning the Shadow Imaging experiments, the results for the bubble size for different vertical positions were obtained and are showed in Figure 5, together with their standard deviation. Results show that the diameter is not increased proportionally with the vertical position. Thus it is possible to conclude that there is no bubble coalescence within the reactor. According to Othman, Hamzan and Terry (2011) and Díaz, Montes and Galán (2008) at low U_{gs} there is no bubble coalescence due to the dispersed bubble regime.

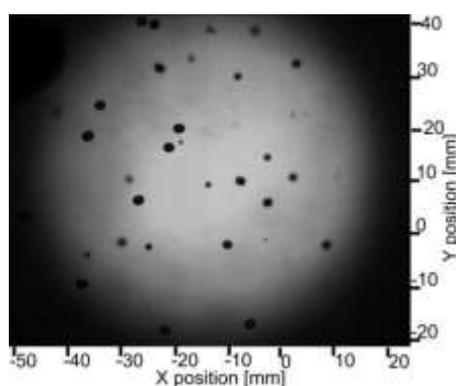


Figure 4 - Bubble distribution in a 70 x 60 mm region of the reactor.

Both, low gas and liquid flow rates within UASB reactors are a consequence of effluent COD, the reactor design and the organic loading applied. Higher is the COD to be removed in the treatment and the organic loading applied, higher is the HRT (hydraulic retention time) of the effluent, thus the liquid flow rate is reduced. On the other hand, the gas flow rate increases with higher COD and organic loading, due to the increment on the gas yield. Thus, the flow regime in UASB reactors is also a function of the aforementioned characteristics (COD, reactor design and organic loading).

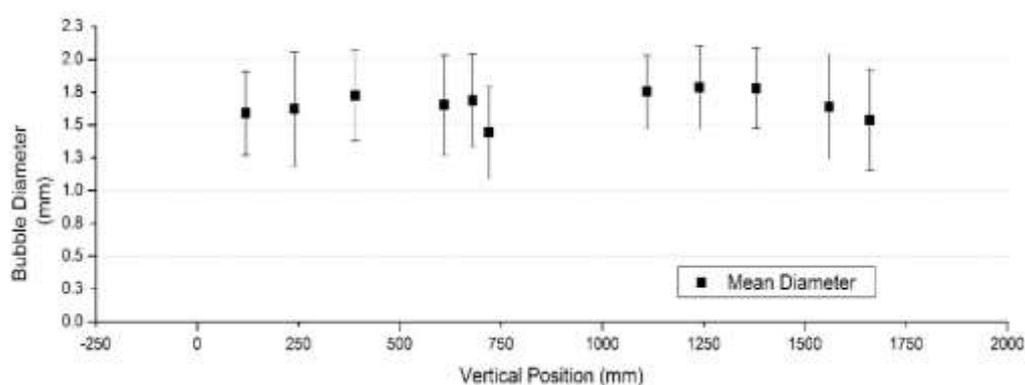


Figure 5 - Experimental results for the Bubble Size.

Considering the experimental results for all the reactor sections, the mean diameter observed was 1.64 mm and the mean velocity was 0.1619 m s^{-1} . The simulations using a fixed bubble size of 2 mm showed a time averaged velocity along 268s of simulation equal to $0.1915 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. In previous works developed by the author (unpublished results), three CFD simulations were performed using different bubble sizes: 1 mm, 2 mm and 3 mm. The same simulation settings previously presented in this work, as well as, the same reactor were used in this simulations. The results showed a correlation between bubble size and gas velocity that is presented in Equation 7:

$$v_g = 0.0686 d_b + 0.0466 \quad (R^2 = 0.9869) \quad 1 \text{ mm} \leq d_b \leq 3 \text{ mm} \quad (7)$$

where v_g is the gas velocity and d_b is the bubble diameter. A gas velocity of $0.1591 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ was obtained through Equation 7, for the mean experimental bubble diameter. A difference of 1.73% was found between simulated and experimental results for the bubble mean velocity, thus the numerical model was validated through the PIV results.

Regarding the liquid phase, the velocity profiles obtained from the PIV experiments for different vertical positions along the reactor were compared with the CFD results. Figure 6 shows the PIV and the CFD results for the mean velocity for a plane along the central axis. The PIV results do not go along the 300mm of the reactor diameter due to experimental limitations. Results show a better agreement at the center of the reactor, where the flow is downwards. The velocity profiles for both cases show an internal liquid recirculation at the center of the reactor. This recirculation is induced by the gas upward velocity, which accelerates the flow in the region close to the walls. The liquid superficial velocity is lower than the gas superficial velocity, thus a fraction of the liquid that reaches the top returns to the bottom of the reactor. In an UASB reactor, this would increase the contact time between biomass and effluent, increasing the reactor efficiency.

The time-averaged mean liquid velocity contours for the PIV and CFD results for the same region of the reactor ($z = 0$) are showed at Figures 7a and 7b. Due to experimental limitations, the results presented refer to a plane of 1.6 m of high and radius of 0.25 m at the center of the reactor for both cases, in order to allow the comparison of the results.

The central velocities are higher than the velocities close to the walls, due to the aforementioned recirculation. It is possible to see that the region with the higher velocities for the PIV results is at the bottom of the reactor, while for the CFD results it is at the top. It most likely happens due to the simplifications assumed for the liquid distribution at the center of the reactor, what can be also responsible for some variations in the velocity profiles (Figure 6), once the distribution system at the center causes some turbulence for both, liquid and gas. About the liquid mean velocity, the PIV results showed a value of $0.02341 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ while the CFD results reported a velocity of $0.02266 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, a difference of 3.2% between both results what shows a good agreement between experimental and numerical simulations.

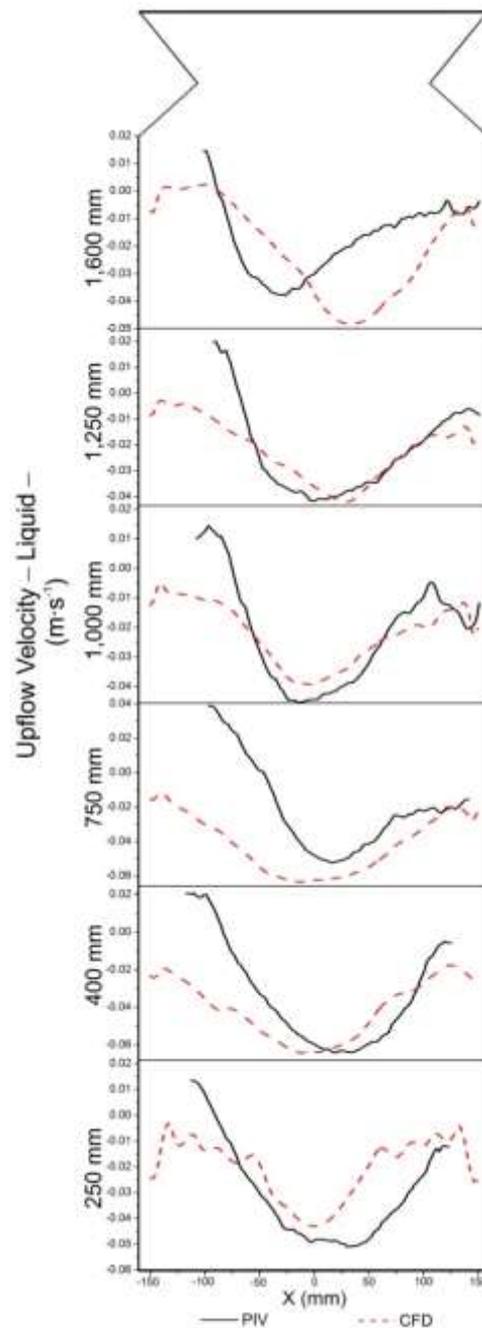


Figure 6 - Mean liquid velocity – PIV and CFD results along the X axis.

Due to the acceleration caused by the upward movement of the gas, followed by the internal circulation, the results for both, experimental and computational cases, showed a negative mean y velocity. It shows that the liquid recirculates with a higher velocity than it flows upwards. A y velocity of -0.020168 was observed for the PIV experiments, while CFD results reported a y velocity of $-0.02202 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, a value 9.18% higher than the experimental results.

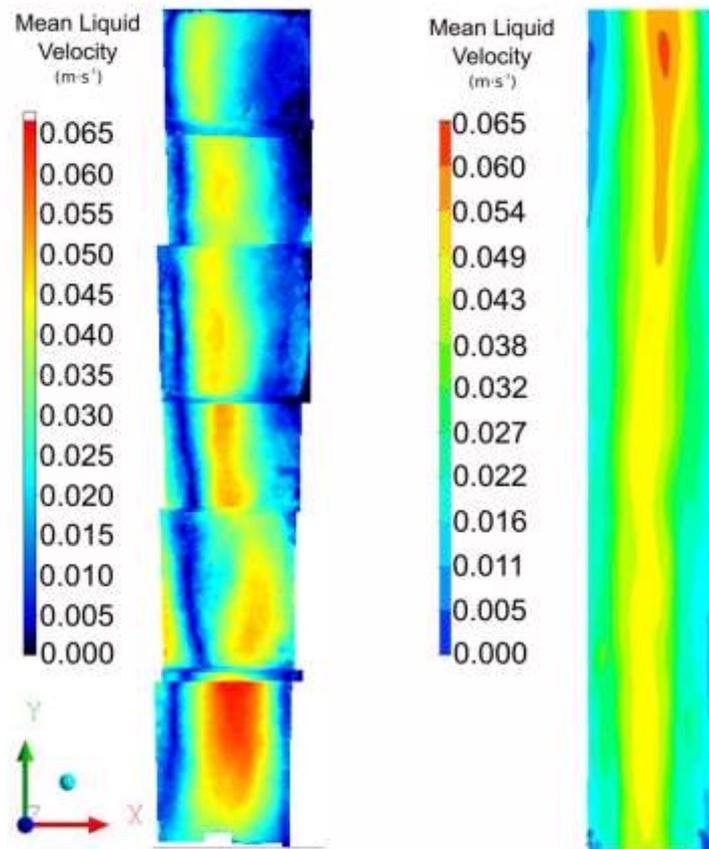


Figure 7 - Mean liquid velocity contours for a region of the reactor of 1.6 m x 0.25 m at $z=0$ for PIV and CFD results. (a) PIV (b) CFD.

The previously mentioned liquid internal recirculation is mainly driven by the gas upflow within the reactor. CFD contours for the gas volumetric fraction show the dispersed phase distribution along the reactor (Figure 8). The gas is mainly concentrated in the regions near to the walls, causing the area for the liquid to flow to be reduced and thus the liquid velocity to be higher than the calculated superficial velocity. While at the center of the reactor there is a smaller gas volumetric fraction, so the liquid flows downwards through that space (Figure 8a). At the top of the reactor, the gas is led by the deflectors towards its outlet, where it leaves the volume control (Figure 8b), as it is expected for UASB reactors.

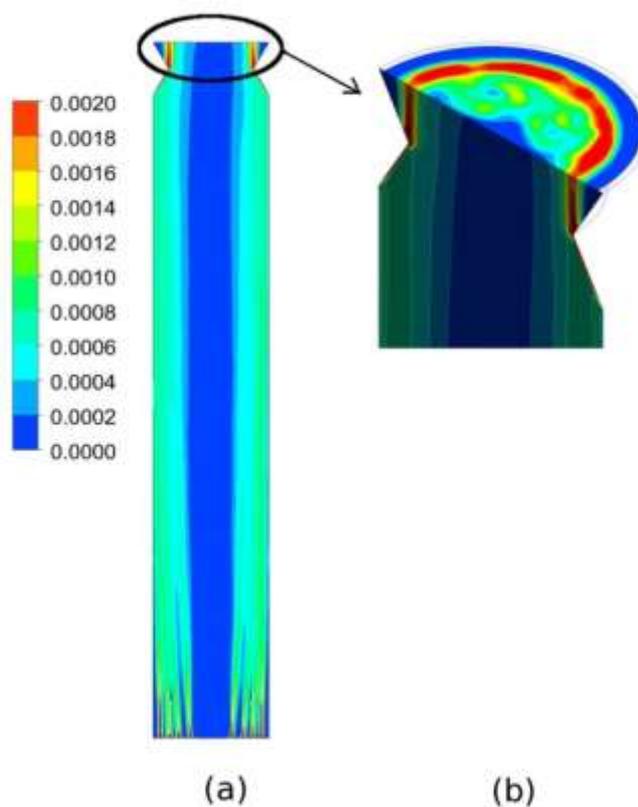


Figure 8 - Time Averaged Gas Volumetric Fraction. (a) Contours at $z=0$ (b) Gas outlet

Throughout this study, numerical and experimental result for different parameters were obtained, such as: mass imbalance for both phases, gas volumetric fraction, gas velocity, bubble size, liquid magnitude and upflow velocity and the velocity profiles for the liquid phase. Considering the complexity of the flow, the differences between numerical and experimental results presented over this study, are adequate to validate the numerical model, thus allowing further studies and optimizations.

4 CONCLUSION

According to the results presented in this study, one can conclude that the use of PIV techniques allowed the successful validation of the numerical model proposed for the simulation of the gas/liquid interactions in an UASB reactor. It was possible to notice that there was no bubble coalescence within the reactor. Furthermore, it was observed the existence of liquid internal recirculation, driven by the gas upflow within the reactor. Differences of less than 5% between numerical models and validation results were observed,

except for the upflow liquid velocity, which showed a difference of 9.18%.

The good agreement between simulation and validation results will allow the use of the described numerical model for further gas/liquid simulations, and the inclusion of the solid phase in forthcoming simulations of UASB reactors.

NOTATION

A	Area
C_D	Drag Force Coefficient
CFD	Computational Fluid Dynamics
COD	Chemical Oxygen Demand
d	Diameter
E-E	Eulerian-Eulerian
E-L	Eulerian-Lagrangian
\vec{F}_D	Drag force
\vec{F}_{lift}	Lift Force
\vec{F}_q	External Body Force
\vec{F}_{vm}	Virtual Mass Force
GCI	Grid Convergence Index
HRT	Hydraulic Retention Time
K_{pq}	Interphase Momentum Exchange Coefficient
P	Pressure
PIV	Particle Image Velocimetry
PMMA	Poly(methyl)methacrylate
Q	Flow Rate
Re	Reynolds Number
UASB	Upflow Anaerobic Sludge Blanket
U_{is}	Phase i Superficial Velocity
v	Velocity

Greek Letters

α	Volumetric Fraction
μ	Dynamic viscosity
ρ	Density
$\bar{\tau}$	Stress-Strain Tensor

Subscripts

p	Disperse phase
q	Continuous phase
b	Bubble
l	Liquid
g	Gas

5 REFERENCES

ANSYS. Fluent 16.2 Theory Guide. 2015

BATEN, J.M.V.; ELLENBERGER, J.; KRISHNA, R. Hydrodynamics of internal air-lift reactors: experiments versus CFD simulations. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 42, n.10, p.733-742, 2003.

BARROS, V. G.; DUDA, R. M.; OLIVEIRA, R. A. Biomethane Production From Vinasse in Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactors Inoculated With Granular Sludge. **Brazilian Journal of Microbiology**, v.47, p.628–639. 2016.

BASTIANI,C.; BEAL, L.L.; ALBA, J.L. ; TORRES, A.P.R; Souza, M.P. Study of different forms of gas inlet and distribution in UASB reactors for the CFD simulation and PIV validation. In: XXI Brazilian Congress of Chemical Engineering, XXI, Fortaleza, Ceará Brazil, 2014. **Anais ...** 2016.

CHEN, R.C., REESE, J. AND FAN, L.S. Flow structure in a three-dimensional bubble column and three-phase fluidized bed. **AIChE Journal**, v.40, p. 1093–1104. 1994.

CHENG, Y.; ZHU, J. X. CFD Modeling and Simulation of Hydrodynamics in Liquid-Solid Circulating Fluidized Beds. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v.83, p. 177-185, 2005.

CORTEZ, L. A. B.; FREIRE, W. J.; ROSILLO-CALLE, F. Biodigestion of vinasse in Brazil. **International Sugar Journal**, v. 100, n. 1196, p. 403-413, 1996.

DÍAZ, M.E.; MONTES, F.J.; GALÁN, M.A. Experimental study of the transition between unsteady flow regimes in a partially aerated two-dimensional bubble column. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 47 (9–10), p. 1867–1876. 2008.

EL-SHEIKH, M. A.; SALEH, H. I.; FLORA, J. R.; ABDEL-GHANY, M. R. Biological Tannery Wastewater Treatment Using Two-Stage UASB Reactors. **Desalination**, v.276, n.1-3, p.253–259, ago. 2011.

INTANOO, P.; RANGSANVIGIT, P.; MALAKUL, P.; CHAVADEJ, S. Optimization of Separate Hydrogen and Methane Production from Cassava Wastewater Using Two-Stage Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor (UASB) System Under Thermophilic Operation. **Bioresource Technology**, v.176, p.256–165, dez. 2014.

- JANKE, L.; LEITE, A. F.; BATISTA, K.; NIKOLAUSZ, M.; NELLES, M.; STINNER, W. Enhancing Biogas Production From Vinasse in Sugarcane Biorefineries: Effects of Urea and Trace Elements Supplementation on Process Performance and Stability. **Bioresource Technology**, v.217, p.10–20. 2016.
- JUNIOR, A. D. N. F.; KOYAMA, M. H.; JÚNIOR, M. M. A.; ZAIAT, M. Thermophilic anaerobic Digestion of Raw Sugarcane Vinasse. **Renewable Energy**, v.89, p.245–252, 2016.
- LETTINGA G. & POL W. H. UASB-Process Design for Various Types of Wastewaters. **Water Science and Technology**, v.2 4(8), p. 87-107. 1991.
- LIMA, M. G. S.; NETO, S. R. F.; LIMA, A. G. B.; NUNES, F. C. B.; GOMES, L. A. Theoretical/Experimental Study of an Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor Treating Domestic Wastewater. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, v.9, 2011.
- MISHIMA, K.; ISHII, M. Flow regime transition criteria for upward two-phase flow in vertical tubes. **Int. J. of Heat and Mass Transfer**, v. 27, p.723-737. 1983.
- NARNOLI, S. K.; MEHROTRA, I. Sludge Blanket of UASB Reactor: Mathematical Simulation. **Water Research**, v. 3, n. 4, p. 715-726, 1997.
- OTHMAN, N., HAMZAH, M.A. AND TERRY, A.M. 2011.The Hydrodynamics Studies of Bubbling Phenomena using High-Speed Camera: A Visual Observation. In: **NTC 2011: Nuclear Technical Convention, Malaysia**. 2011. Available at: https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=R N:44122683 (access on 08/02/17).
- ROACHE, P. J. Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies. **Journal of Fluids Engineering**, v.116, p. 405-413. 1994.
- RIZVI, H.; AHMAD, N.; ABBAS, F.; BUKHARI, I. H.; YASAR, A.; ALI, S.; YASMEEN, T.; RIAZ, M. Start-up of UASB Reactors Treating Municipal Wastewater and Effect of Temperature/Sludge age and Hydraulic Retention Time (HRT) on its Performance. **Arabian Journal of Chemistry**, v.8, n.6, p.780–786, nov. 2015
- SCHILLER, L.; NAUMANN, Z. “Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftbereitung”. **Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure**, v.77, p. 318-320.

1933.

SIMCIK, M.; MOTA, A.; RUZICKA, M.C.; VICENTE, A.; TEIXEIRA, J. CFD simulation and experimental measurement of gas holdup and liquid interstitial velocity in internal loop airlift reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 66, p. 3268-3279, 2011.

SOUZA, M. E. Criteria for the utilization, design and operation of UASB reactors. **Water science and technology**, v.18, n. 12, p. 55-69.1986.

ARTIGO 4

CFD study of interfacial momentum transfer between liquid/solid in the sludge bed of an UASB reactor

C. D. Bastiani*, J. L. Alba*, G.T. Mazzarotto*, S.R. Farias Neto**, A.P. Torres***, L. L. Beal*

* Environmental Technology Laboratory, Postgraduate Program in Engineering and Environmental Sciences, University of Caxias do Sul (PPGECAM-UCS), 1130, Francisco Getúlio Vargas St, Caxias do Sul, RS, Brazil

(E-mails: *camiladbastiani@gmail.com; jlalba@gmail.com; gtmazzarotto@ucs.br; llbeal@ucs.br*)

**Department of Chemical Engineering, Federal University of Campina Grande, 882, Aprígio Veloso St., Campina Grande, PB, Brazil,

(E-mail: *severino.rodrigues@ufcg.edu.br*)

*** Research and Development Center Leopoldo Américo Miguez de Mello, Petrobras, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ, Brazil

(Email: *aptores@petrobras.com.br*)

Abstract

This work presents a CFD study on the role that the sludge bed plays on the hydrodynamics of an Upflow Anaerobic Sludge Blanket (UASB) biogas producing reactor. Three different correlations for the drag force were used for estimating the interfacial momentum transfer between the liquid and solid phases. The results showed a similar behaviour when the Gidaspow and the Wen and Yu correlations were used. Experimental results using PIV imaging technique showed a good agreement between the Gidaspow model and the experiments. It was found that the solid plays an important role on the bottom region of the reactor, but does not have a major influence on the top region.

Keywords

CFD; UASB; Drag force coefficient; Multiphase Flow.

INTRODUCTION

The Upflow Anaerobic Sludge Blanket (UASB) reactor has been widely used for treating wastewaters with a large range of characteristics (Lettinga and Pol, 1991). It consists, of a liquid phase (the wastewater) moving from the bottom to the top through a sludge bed, formed by anaerobic sludge granules. The reactions between the biomass and the organic load present in the wastewater take place along this sludge bed, and biogas is formed. The aim of this study is to perform a CFD analysis on the liquid/solid interfacial momentum transfer in the sludge bed of a biogas producing UASB reactor, studying three different correlations for the drag coefficient estimation.

MATERIAL AND METHODS

The solid phase density was determined using the method described by the Standard methods for the examination of water and wastewater (Rice, et al., 2012). The solids particle size distribution was determined using a particle analyser HORIBA, model Partica LA-950-A. All the analyses were performed at 293.15 K. The liquid was considered tap water. Table 1 presents the physical characteristics for the two-phases assumed for the simulations.

Table 1 Physical properties of the two phases.

Property	Unit	Continuous phase (liquid)	Dispersed phase (sludge granules)
Density (ρ)	kg m^{-3}	998.2	1.050
Dinamic viscosity (μ)	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$	$1.003 \cdot 10^{-3}$	-
Diameter (d)	m	-	2

Eulerian-eulerian, transient, isothermal, laminar, 3D simulations were performed using the software Fluent 16.2. In the Eulerian–Eulerian approach, each phase is assumed to coexist at every point in space in the form of interpenetrating continua. The simulations were performed using a mesh with 528,000 hexahedral elements. For this study mass and energy transfer among the phases were neglected. The equations of each phase are governed by mass conservation and momentum equations. Considering that the sludge in UASB bioreactors is granular, the Kinetic Theory of Granular Flow (KTGF) was considered on the simulations. A packing limit of 0.6 and a sludge bed height of around 1/3 of the reactor were considered (0.63 m). The boundary conditions used at the simulations are presented in Table 2, no solids inlet was considered. For the simulations, the convergence was assessed through the residuals ($1e^{-3}$) and changes in the velocities and volumetric fractions were analysed. For the interfacial momentum transfer the lift and the virtual mass forces were neglected. The drag force was considered as the main source of interfacial momentum transfer. The Reference Operating Pressure used was 101,325 Pa.

Table 2 Boundary Conditions.

	Type	Value	Unit
Liquid Inlet	Velocity Inlet	0.00711	m s^{-1}
Liquid Outlet	Pressure Outlet	0*	Pa
Symmetry	Symmetry	-	-

* Considering that the absolute Pressure (P_{abs}) is the sum of the Pressure at the Outlet (P_{stat}) plus the operation pressure (P_{ref}), the outlet pressure was considered zero, so the P_{abs} will correspond to the atmospheric pressure at the outlet boundary condition, following the equation: $P_{\text{abs}} = P_{\text{stat}} + P_{\text{ref}}$

The drag coefficient (C_D) between the solid and the liquid was determined using three different correlations. The first was Syamlal and O'Brien (1989), which is recommended for cases where the solid shear stresses are defined per Syamlal et al. (1993). The second model used was the Wen e Yu (1966), which is more appropriated for diluted systems, according to Lahiri and Ghanta (2010). The model proposed by Gidaspow et al. (1992) was also tested. This model is recommended for dense fluidized bed, (Lahiri and Ghanta 2010), it consists of a combination of Wen e Yu (1966) model and the Ergun equation. Particle Image Velocimetry (PIV) was used to validate the models. The experiments were performed in a pilot scale UASB, with the same configuration of the used for the simulations. Polystyrene (PS) was used as the solid phase and tap water was used for the liquid phase.

RESULTS AND CONCLUSIONS

Unsteady results for 20s of flow between 180 s and 200 s were assessed. The results showed that the Gidaspow and the Wen and Yu models had similar numeric results and contours, while Syamlal and O'Brien presented higher velocities (Figures 1 and 2). The highest differences between these models for the liquid velocity were around 12%, and for the sludge velocity the difference reached 17%. On the other hand, the Syamlal and O'Brien model presented results up to 27% higher than the other two correlations, for the liquid velocities and 78% higher for the solid velocities. The similarities between the Gidaspow and the Wen

and Yu models can be explained by the fact that the Gidaspow model consists of an adaptation of the Wen and Yu model together with the Ergun Equation. The region of the reactor that presented the highest Reynolds number for the liquid was at the sludge bed for all the cases. This region is where mostly of the anaerobic reactions take place in and UASB reactor. Thus, it is possible to say that the mass transfer rate is increased in this region, due to the liquid/solid momentum exchange, favouring the biogas yield within the reactor. After leaving the sludge bed, the liquid velocity decreases. Thus, allowing better conditions for the biomass granules to settle down and return to the sludge bed. From these results, it is possible to say that the solid plays an important role on the liquid velocity up to some centimetres after it leaves the sludge bed. From Figures 3 and 4 it can be noticed that the Syamlal and O'Brien model leads to more homogenous results for the liquid and solid velocities.

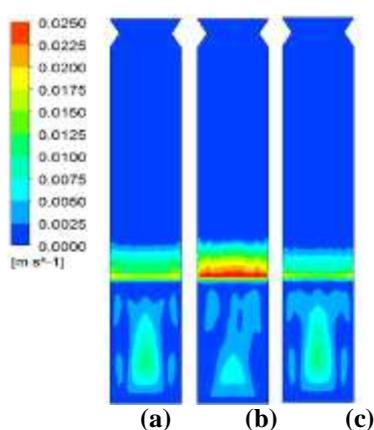


Figure 1. Contours of sludge velocity. (a) Gidaspow. (b) Syamlal and O'Brien (c) Wen and Yu

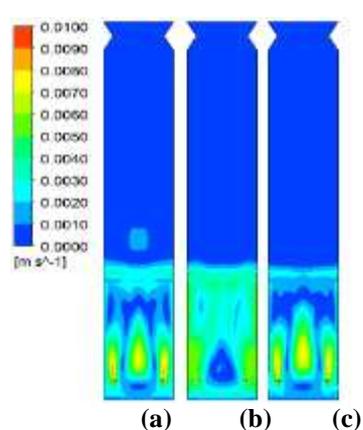


Figure 2. Contours of liquid velocity. (a) Gidaspow. (b) Syamlal and O'Brien (c) Wen and Yu

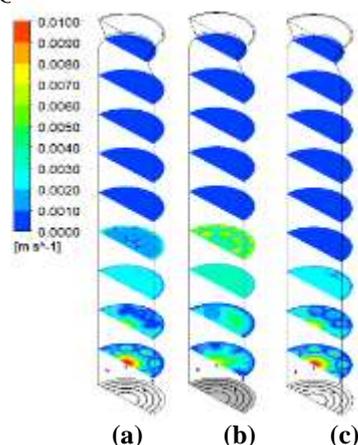


Figure 3. Contours of sludge velocity at different heights. (a) Gidaspow. (b) Syamlal and O'Brien (c) Wen and Yu.

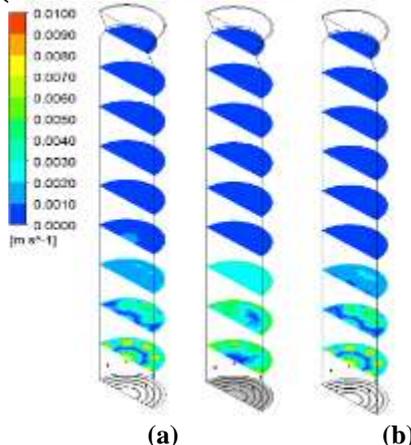


Figure 4. Contours of liquid velocity at different heights. (a) Gidaspow. (b) Syamlal and O'Brien (c) Wen and Yu.

Following the computational simulations, experiments were performed. Table 3 shows the liquid velocity results for a plane at the centre of the reactor for both, PIV experiment and the three simulations, and the difference between experimental and computational results.

Table 3. Results for the liquid mean velocity at the centre of the UASB reactor- PIV and CFD.

	Mean liquid velocity (m/s)	Difference from PIV (%)
PIV	0.000435557	-
Gidaspow	0.000494452	13.52
Syamlal and O'Brien	0.000305761	-29.80
Wen and Yu	0.000244470	-43.87

Along the experiments it was observed that the volume fraction was constant, there was no sludge wash out and the sludge bed was not fluidised. The same results were obtained on the simulations. As showed in Figure 5 the bed height of 0.63 did not change after the 200 s of simulation for any of the three cases.

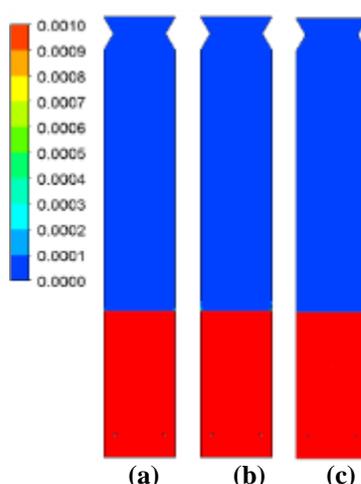


Figure 5. Contours of sludge volume fraction at 200s (unsteady results for the last 20s of simulation)
 (a) Gidaspow. (b) Syamlal and O'Brien (c) Wen and Yu.

Comparing numerical and experimental results it is possible to say that the results obtained using the Gidaspow model showed a better agreement. Thus this model was chosen for further simulations, where the gaseous phase will be introduced into the reactor.

From the present results, it is possible to say that, in the absence of the gas in this UASB reactor, the solid phase shows packed bed behaviour. Thus, one can conclude that the interfacial momentum transfer in this UASB reactor is mainly due to the gas/liquid interactions. Further studies intend to add the gas phase to the solid/liquid simulations, in a three-phase simulation.

ACKNOWLEDGEMENTS

The financial assistance provided by PETROBRAS is gratefully acknowledged.

REFERENCES

- Gidaspow, D., Bezburuah, R., Ding, J. 1992 Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds: Kinetic Theory Approach. In: *Eng. Found. Conf. on Fluidization*, 7, Brisbane.
- Lahiri, S. K., and Ghanta, K. C. 2010 Slurry Flow Modelling by CFD. *Chem. Ind. & Chem. Eng.* **16**(4), 295-308.

- Lettinga, G. and Pol, W. H. 1991 UASB-Process Design for Various Types of Wastewaters. *Wat. Sci. Tech.*, **24**(8), 87-107.
- Rice, E. W. Bridgewater, L. 2012 American Public Health Association; American Water Works Association; Water Environment Federation. (). *Standard methods for the examination of water and wastewater*. 22. ed. American Public Health Association.
- Syamlal, M., O'Brien, T. J. 1989 Computer Simulation of Bubbles in a Fluidized Bed. *AIChE Symposium Series*. **85**(70), 22-31.
- Syamlal, M., Rogers, W., O'Brien, T. J. (1993). *MFIX Documentation: Volume 1, Theory Guide*. Morgantown: U.S. Department of Energy, 82 p.
- Wen, C.Y., Yu, Y. H. 1966 Mechanics of Fluidization. *Chem. Eng. Prog. Symp. Series*, 62, 100-111.

ARTIGO 5

Three-Phase CFD Simulation and PIV Validation of a UASB reactor

Camila D' Bastiani ^{a*}, Jéferson Luis Alba^a, Gabriel Tomazzoni Mazzarotto^a, Severino Rodrigues de Farias Neto^b, Ana Paula Rodrigues Torres^c, Lademir Luiz Beal^a
E-mails: camiladbastiani@gmail.com*; jlalba@ucs.br; gtm101@hotmail.com;
severino.rodrigues@ufcg.edu.br; aptorres@petrobras.com.br; llbeal@ucs.br

^a Environmental Technology Laboratory, Postgraduate Program in Engineering and Environmental Sciences, University of Caxias do Sul (PPGECAM-UCS), 1130, Francisco Getúlio Vargas St, Caxias do Sul, RS, Brasil

* **Corresponding author**

^b Department of Chemical Engineering, Center for Science and Technology, Federal University of Campina Grande (UFCG), 882, Aprígio Veloso St., Campina Grande, PB, Brasil.

^c Research and Development Center Leopoldo Américo Miguez de Mello, Petrobras, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Abstract

The present work focused on performing solid/liquid and solid/liquid/gas CFD simulations of an UASB reactor. The model was validated through PIV experiments. Eulerian-Eulerian, laminar, three-dimensional, multiphase simulations were carried out using Fluent 16.2. A difference of 3.98% was found for the liquid mean velocity, between experimental and numerical results, thus validating the CFD model. The reactor was divided into four regions, according to its mixing conditions. Validation results showed differences between experimental and computational results less than 4% for the three-phase simulations. The gas injection increased the solid and liquid velocity magnitude in about eight times. However, the liquid axial velocity was reduced due to internal recirculation driven by the gas. Dead zones decreased from 44% (solid/liquid case) to 0.02% in the three-phase simulation. A pressure drop of 38 kPa was calculated between the bottom and the top in both cases.

Keywords

CFD; UASB; Multiphase Flow; PIV; Biogas.

1 INTRODUCTION

Upflow anaerobic sludge blanket (UASB) reactors stand out as a feasible option for treating a wide range of industrial and domestic wastewater (Lettinga and Pol, 1991; Yetilmezsoy and Sapci-Zengin, 2009; Dessi et al., 2016). Also, researches point out its ability to treat high organic load wastewaters, as vinasse, with efficiency up to 82% of COD (chemical oxygen demand) removal (Junior et al., 2016; Barros et al., 2016). Regarding its concept and operation, UASB reactors are considered relatively simple. They consist basically of a tank, with an anaerobic digestion compartment at the bottom, formed by a sludge bed and a sludge blanket, where the main reactions between the organic compounds and microorganisms take place, thus forming the sludge bed/sludge blanket. At the top, there is a three-phase separator. On the other hand, concerning its fluid dynamics, more complex questions should be addressed, as the interactions between the phases, and the interfacial forces involved in these interactions.

In UASB reactors the influent enters the reactor from its bottom and moves upwards. In the first section of the reactor, there is a sludge bed, where the main anaerobic reactions take place, and the organic load is converted into biogas, a mix of methane and carbon dioxide mainly. Small bubbles of gas are formed and coalesce in order to be able to move up to the end of the sludge bed, where they are then released. They are, in part, responsible for promoting a better mixing within the reactor. In the second section, there is the sludge blanket, with a smaller concentration of solids. The liquid in this section still carries some organic load that continues reacting and forming biogas. On the top of the reactor, there is the three phase separator that

consists of baffles that lead the biogas to enter the gas cap, where it is then collected. In the settling compartment the solids that remained in the liquid stream settle down and go back to the sludge bed while the liquid, a clean effluent, is removed from the top of the reactor. Due to its concept, anaerobic processes in UASB reactors are closely linked to its hydrodynamics, which plays a major role in improving the treatment performance (Jiang et al., 2014)

Considering the complex multiphase nature of the flow in UASB reactors, Computational Fluid Dynamics (CFD) arises as a powerful tool to optimize the reactor performance. A considerable number of studies focusing on the use of CFD applied to anaerobic digesters using a single phase or a two phase model can be found (Kerdouss et al., 2006; Craig et al., 2013; Dapelo et al., 2015). However, the role of the interaction among the three phases in the overall hydrodynamics of UASB reactors still lacks information, once works using CFD to model three phase UASB reactors are still scarce.

Lima et al. (2011) applied CFD to a three phase theoretical and experimental study aiming to investigate the pressure, velocity and volume fraction distribution of each phase involved in the drainage of a UASB reactor. Therefore, the interactions at the sludge bed were not object of this study. An increasing-sized CSTRs (ISC) model was used by Ren et al. (2009) to describe the hydrodynamics of a UASB reactor. Experimental results were used to validate the model with a good agreement between simulation and experiments. Furthermore, the granular sludge wash-out origin was addressed by Ruttithiwapanich et al. (2013), through a Eulerian-Eulerian three phase CFD model. A particle tracking study performed in an experimental reactor was used to validate the model.

As cited by Samstag et al. (2016), in recent years CFD has become widely used for

analysis of wastewater treatment problems, especially concerning hydraulic behavior. However, they mention that there is a need for researches that address the potential impacts of solid and gas phases on flow distribution. Meeting that need, this work aims to carry out two-phase (solid/liquid) and three-phase (solid/liquid/gas) CFD simulations of an UASB reactor and validate these models against experimental data obtained through PIV analysis of a small-scale reactor, in order to have a better understanding of the hydrodynamic behaviour of the liquid, solid and gas phases in UASB reactors, thus developing a CFD model that will allow further optimizations of similar reactors.

2 METHODS

2.1 Simulation Strategy

Aiming to obtain accurate results, this study was divided into two stages. On the first stage, the solid/liquid (S/L) flow was simulated and validated. Later, the gas was introduced and solid/liquid/gas(S/L/G) simulations were carried out

2.2 Numerical

Over this work, 3-D, transient, laminar, isothermal simulations were carried out using the Eulerian-Eulerian (E-E) approach to predict the flow field in a UASB reactor. Differently from the Eulerian-Lagrangian (E-L) approach, where the mass and momentum equations are solved separately for each particle, the E-E model deals with the phases as interpenetrating continuous phases in a control volume. In this approach, the space occupied by each phase is represented by the phasic volume fraction (α_i), and the mass and momentum conservation laws are satisfied for each phase. Thus, in cases where the dispersed phase volumetric fraction is not very low, a lower computational effort is required by the E-E approach in comparison with the

E-L approach, as the number of equations is not increased as the number of particles increases. For the two-phase simulations, one dispersed (solid) and one continuous phase (liquid) were assumed. Later on, the gas (g) was introduced in new simulations as a dispersed phase. Considering that isothermal conditions were assumed, the heat transfer among the phases was not considered. The mass transfer among the phases was also neglected. Thus, the mass and momentum conservation of the phases were governed solely by the following momentum conservation equation:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) - \alpha_q \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) + (\vec{F}_q + \vec{F}_{int})) \quad (1)$$

$$\vec{F}_{int} = \vec{F}_{D,q} \quad (2)$$

where q stands for the continuous phase and, p for the dispersed phases; \vec{g} is the gravity acceleration; P the pressure; $\bar{\tau}_q$ the phase stress tensor; K_{pq} the interfacial exchange coefficient; \vec{F}_q an external body force; \vec{F}_{int} the interfacial forces term and $\vec{F}_{D,q}$ the drag force (Ansys, 2015). Multiphase flows are complex, and computationally demanding. Thus, some considerations were made based on works from the literature, as well as on previous tests. Regarding the interfacial forces, authors had concluded that the drag force is the main responsible for the interfacial momentum exchange in multiphase flows (Baten et al., 2003; Chen et al., 2005; Cheng et al., 2005; Lima et al., 2010). Hence, only the drag force was considered in this work, which was calculated through Equation 3:

$$\vec{F}_{D,q} = C_D \frac{\pi}{4} d_p^2 \rho_q v_r^2 \quad (3)$$

where d_p is the dispersed phase diameter, ρ_q the continuous phase diameter, v_r the relative velocity and C_D a drag coefficient.

In order to determine the drag coefficient between the solid and liquid ($C_{D,sl}$) the model proposed by Gidaspow et al. (1992) was used:

$$C_{D,sl} = \frac{24}{\alpha_l Re_p} [1 + 0,15(\alpha_l Re_p)^{0,687}] \quad (4)$$

where α_l is the liquid volumetric fraction and the Reynolds of the particle (Re_p) is defined by:

$$Re_p = \frac{\rho_l d_s |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{\mu_l} \quad (5)$$

According to Lahiri and Ghanta (2010), the Gidaspow et al. (1992) is recommended for dense fluidized beds.

Considering the gas bubbles as dispersed spheres on the flow, the model proposed by Schiller and Naumann (1933) and presented in Equation 7, was chosen to determine the drag coefficient between the gas and liquid phases ($C_{D,gl}$):

$$C_{D,gl} = \begin{cases} 24 \left(\frac{1+0.15Re^{0.687}}{Re} \right) & Re \leq 1000, \\ 0.44 & Re > 1000, \end{cases} \quad (6)$$

where the Reynolds Number of the bubble is obtained through:

$$Re = \frac{d_b |v_g - v_l| \rho_l}{\mu_l} \quad (7)$$

where d_b is the bubble diameter; v_l the liquid velocity and v_g the gas velocity. The Schiller and Naumann (1933), model was also used to estimate the drag force coefficient between the gas and solid phases $C_{D,gs}$, as proposed by Yu et al. (2013) and Azargoshasb et al. (2015).

In UASB reactors, the solid phase is formed by the anaerobic granules. They are formed during the granulation process and can have different shapes and sizes. In this work, the physical characteristics of the material used in the experimental validation were assumed for the solid phase. Thus, spheres with 2 mm of diameter (d) and density (ρ) of 1,050 kg·m⁻³ were simulated as the solid phase.

For the solid phase modeling, the Kinetic Theory of Granular Flow (KTGF) was used

for both: two and three phase simulations. This theory predicts the particles collisions and the energy dissipation caused by the collisions, in Eulerian-Eulerian models. It is an extension of the Classical Kinetic Theory of Gases but applied to granular flows.

It is not expected the solid bed to fluidize, therefore particle-particle collisions are not expected to play a major role in the flow. Therefore, in order to eliminate previous convergence and instabilities problems, the granular viscosity and the granular bulk viscosity model were neglect. Partial differential equation model was used to estimate the granular temperature, and its activation improved the convergence. A sludge bed of 0.63 m with a volumetric fraction of sludge equal to 0.6 was assumed.

Biogas formed by a mixture of 35% of Carbon Dioxide (CO₂) and 65% of methane (CH₄) was considered as the gas phase. The biogas characteristics were calculated through the weighted average of the CO₂ and CH₄ properties. Thus, a density of 0.8578 kg·m⁻³, a dynamic viscosity (μ) of 1.1984 x10⁻⁵ kg·(m·s)⁻¹ and a bubble size of 2 mm were assumed. Tap water with a density of 998.2 kg·m⁻³ and a dynamic viscosity of 0.001003 kg·(m·s)⁻¹ was used as the continuous phase of the numeric model. The three phases were considered at 293.15 K and 1 atm. Table 1 sums up the boundary conditions used for the simulations. For both cases a reference operating pressure P_{ref} of 101,325 Pa was used, once the outlet pressure P_{stat} was considered zero, so the absolute pressure P_{abs} will correspond to the atmospheric pressure at the outlet boundary condition, following the equation:

$$P_{abs} = P_{stat} + P_{ref} \quad (8)$$

Table 1. Boundary Conditions.

	Simulation*	Type	Value	Unit
Liquid Inlet	S/L-S/L/G	Velocity Inlet	0.00711	m·s ⁻¹
Liquid Outlet	S/L-S/L/G	Pressure Outlet	0**	Pa
Gas Outlet	S/L/G	Degassing	-	-
Gas Inlet	S/L/G	Velocity Inlet	0.00112	m·s ⁻¹
Symmetry	S/L-S/L/G	Symmetry	-	-
Walls	S/L-S/L/G	No Slipping	-	-

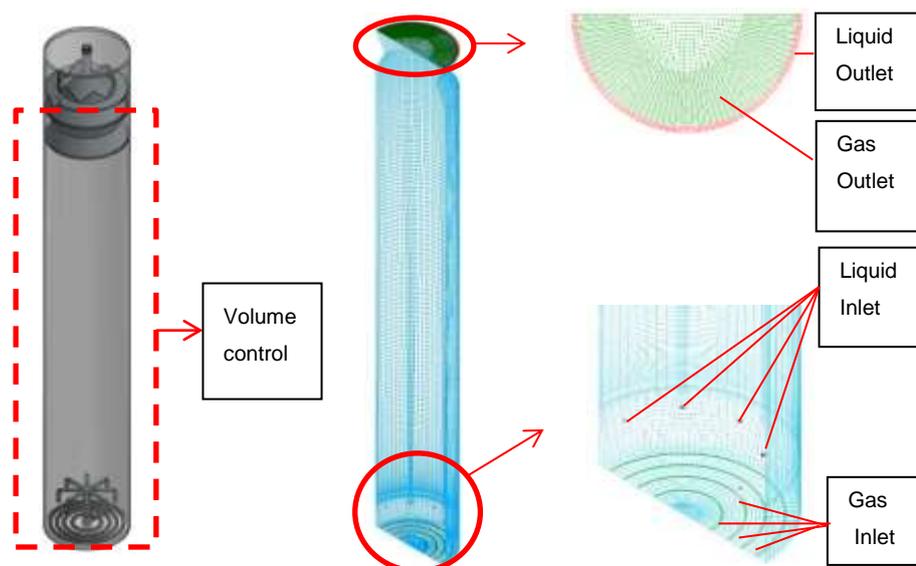
*Simulations where the boundary condition indicated was applied. S/L: Two-phase Solid/Liquid simulation. S/L/G: Three-phase, Solid/Liquid/Gas simulation.

For the numeric solution of the equations, the algorithm Phase Coupled SIMPLE was used in the pressure-velocity coupling. The spatial discretization of the equations into algebraic equations was performed using the following models: Green-Gauss Node Based (Gradients); Second Order Upwind (Momentum); QUICK (Volume Fraction); First Order Upwind (Granular Temperature). A fixed time stepping method was used in the simulations. A time step of 0.02 s was used to reach a steady simulation, and a time step of 0.0001 s was used at the convergence, with max. 25 iterations per time step. Monitors were created in order to assess the convergence, and the residuals were also monitored. Unsteady statistics for a period of 142 s were collected between 138 s and 280 s of simulations for the solid/liquid case. Concerning the three-phase case, unsteady results for 135 s were collected, between 100 s and 235 s.

Considering the goals of this study, the volume control was designed to include the region of the reactor between the bottom and the end of the gas deflector (entrance of the gas collector), as showed in Figure 1a. An UASB small scale reactor designed to treat vinasse (wastewater from the sugar alcohol industry) was used for this study. Previous mesh independence studies were carried out, using the Grid Convergence Index (GCI) method, proposed by Roache (1994). Thus, a mesh with 528,000 elements (Figure 1b), generated using blocking strategy

in the software ICEM CFD was chosen (results unpublished). The gas and liquid inlet and outlet regions are presented in the detail in Figure 1c.

Figure 1. UASB reactor used in the simulations. (a) Reactor designed and volume control chosen for the simulations. (b) 528,000 elements mesh. (c) Detail showing gas and liquid inlets.



2.3 Experimental

Aiming to validate the CFD model, a PIV system was used to collect data about the flow inside a small scale UASB reactor. PIV technique is known as a non-intrusive method, used to analyze characteristics of a flow. The PIV technique consists in adding tracers particles into the flow, assuming that its behavior will mimic the flow profile. Later, two laser pulses were fired with a short time gap between them and CCD cameras were used to capture the displacement of the particle between the laser pulses. A computer, using the DaVis 8.8.2 software, was then used to process and analyze the images acquired by the cameras. The results reported by the processing of the images showed information about the flow observed. For this work, a stereoscopic PIV (LaVision) was used. The system consists of a Quantel Double-Pulsed Nd:YAG EverGreen EVG 00200 laser, with a wavelength of 532 nm and two

CCD Cameras ImagerProSX 5M with Nikon lenses. Fluorescent 20-50 μm tracer particles were used in the solid/liquid/gas experiments and glass hollow microspheres were used as tracers for the solid/liquid experiments. The presence of gas bubbles can cause laser light scattering, which can cause damages to the cameras. Aiming to avoid possible damages, 540 nm cut-off filters were coupled to cameras when the gas was introduced. Additionally, a cylindrical lens was coupled in the laser, thus generating a laser cone, what reduces the chances of laser light scattering. The use of the cylindrical lens was not necessary for the solid/liquid experiments, thus a laser sheet was generated, instead of a laser cone. Figure 2 represents the PIV system configuration and the UASB reactor used for the solid/liquid experiments and Figure 3 the configuration used in the solid/liquid/gas experiments.

PIV cameras and the laser head were positioned in vertical aluminum rails, in order to reach all reactor height. The image collecting procedure was divided into five sections, once the cameras fields of view are much smaller than reactor height. It is known that higher is the number of images captured better are the results for the average vector fields. However, the time to process the images increases with the number of images. Considering that, it was decided to capture 200 images for each section, in order to obtain the instantaneous vector fields.

To obtain accurate PIV results, it was necessary to perform a pre-calibration and a software-aided calibration of the system. The pre-calibration consisted in positioning a specifically marked plate into the reactor, aligned with its longitudinal plane and focusing the two cameras on the same mark at the center of the plate, then the software-aided calibration was performed.

The laser head was positioned in order to illuminate the central longitudinal plane of

the UASB reactor and the cameras were placed in angles of 60° and 120° in relation to this plane.

Figure 2. PIV configuration for the solid/liquid system.

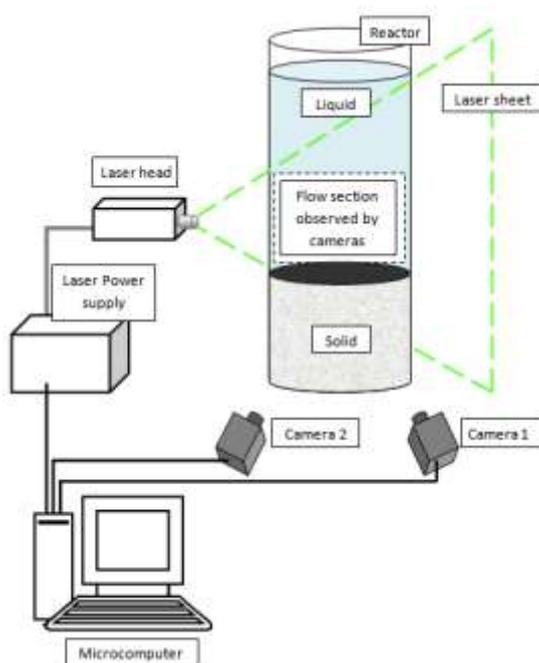
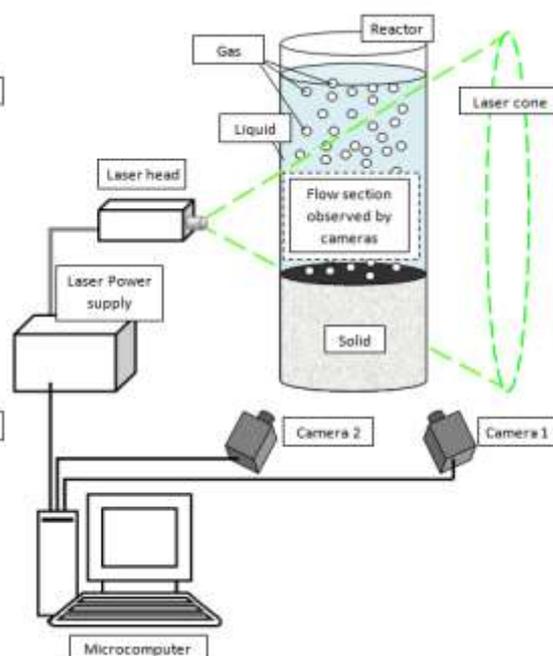


Figure 3. PIV configuration for the three phase system.



Every image consists of four frames: one frame for each laser pulse for each camera. The software calculates the particle displacement between the two laser pulses and correlates the two cameras frames in order to produce an instantaneous vector field of the flow.

2.2.2 Small Scale UASB Reactor

To experimentally simulate the flow in an UASB reactor, a small scale UASB was used. The reactor was built in poly(methyl) methacrylate (PMMA) in order to allow the internal flow visualization. It was built with 2.12 m height and 0.3 m diameter. A usable volume of 140 L was assumed. As known, the PIV laser could suffer refraction when crossing a curved wall, thus a hexahedral vessel was built, also in PMMA, and

the reactor was placed inside it. The volume between the reactor and the vessel was filled with tap water. The water inlet consists of a distributor with 8 pipes, which was placed at the bottom of the reactor, following the previous work of Maurina et al. (2014). The distributor was designed to promote a better mixing between phases inside the reactor. In order to allow the application of PIV to analyze the flow, tap water, compressed air and a transparent polymer (Polystyrene) were selected to experimentally simulate the phases inside the reactor. The water flow was controlled using a hydraulic pump manufactured by Netzsch together with a frequency inverter (Weg – CFW 10). A flow of $6.42 \text{ L}\cdot\text{h}^{-1}$ was assumed for the liquid. In order to simulate sludge granules inside UASB reactor, Polystyrene (PS) was selected because its characteristics are similar to anaerobic reactor granules characteristics. The material choice was preceded by the characterization of anaerobic sludge granules. A particle analyzer HORIBA, model Partica LA-950-A was used to analyze the size distribution of granules from a UASB reactor, treating wastewater from a food industry. A weighted average granule diameter of 1.55 mm was obtained. To estimate granules density the method described by the Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater (Rice and Bridgewater, 2012) was used. A mean granules density of $1,050 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ was obtained. According to the information provided by the manufacturer (Videolar/Innova), the PS density was $1,050 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. The particle analyzer was used to estimate the PS mean diameter, and the results showed a diameter of 2 mm. Aiming to mimic the gas phase in the UASB reactor, compressed air was used to represent the biogas generated. The air entered through four concentric rings, positioned at the bottom of the reactor. This was the best alternative to simulate the biogas production inside the reactor, as showed by Bastiani et al. (2016). A rotameter acquired from Applitech, model 1900 was

combined with a differential pressure controller to control the air flow. A constant flow of $0.041 \text{ Nm}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ was used.

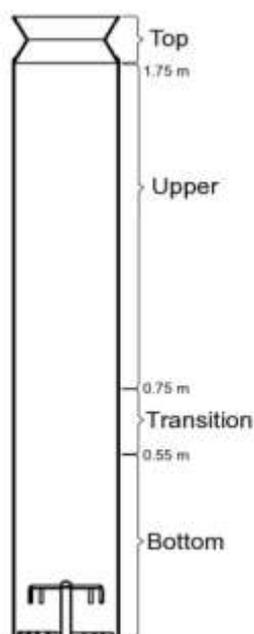
3 RESULTS AND DISCUSSIONS

3.1 Solid/Liquid

The first set of simulations accounted for the interactions between liquid and solid in the UASB reactor. Considering the designed UASB reactor and its operating conditions, an analytical liquid mass flow rate of $6.41343 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ was estimated at the inlet. Simulated results showed a liquid mass flow rate, at the inlet boundary, of $6.41021 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$, thus a small difference of 0.05% between analytical and simulated results was reported. At the outlet boundary, the liquid mass flow rate was $6.41016 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$, resulting in a mass imbalance for the liquid phase of $0.00005 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ or 0.00078%, a negligible difference. Concerning the solid phase, no wash-out was found due to the low liquid upflow velocity, and the sludge bed showed a behavior similar to packed beds. Thus, the major interactions between solid and liquid phase take place at the sludge bed in the absence of the gas.

Regarding the hydrodynamics of the system, it is possible to divide the small scale reactor into four regions: bottom, transition, upper and the top region as showed in Figure 4.

Figure 4. Four regions of the small scale reactor according to its hydrodynamics conditions.



The bottom region goes from the bottom of the small scale reactor up to the height of 55 cm. Over this region, the liquid moves upwards through the sludge bed, and its profile is influenced by the position of the liquid inlet distribution, thus, the velocity is higher nearby those regions (Figure 5a). Higher velocities are observed also at the center of the reactor, and a few recirculation streams are noticed in between the regions where the liquid moves downwards as showed in Figure 6.

Due to the solids high volumetric fraction, the area for the liquid to flow is reduced, thus in the bottom, the highest velocities for the liquid within the reactor are observed. A mean liquid upward velocity of $0.0034706 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ was calculated at the simulations for this region. The solids flow profile is driven by the liquid movement. However, the solid phase moves with a lower upward velocity due to its density, and the solid tends to settle down, as showed in Figure 5b The mean solid upward velocity calculated was $3.65616 \times 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, thus in this region, the solids are moving upwards.

Figure 5. Bottom region liquid and solid mean upflow velocity profiles at the heights: 5 cm; 15 cm; 25 cm; 35 cm 45 cm and 55 cm. (a) Liquid (b) Solid.

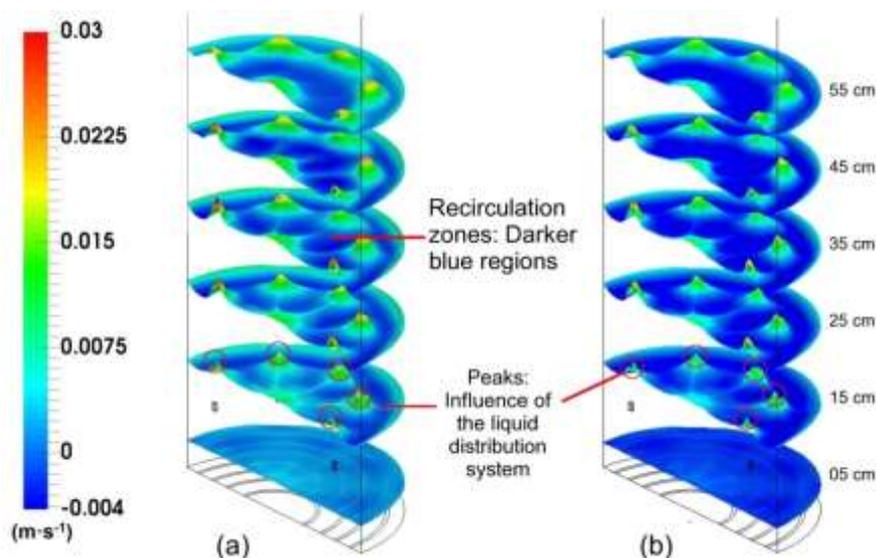
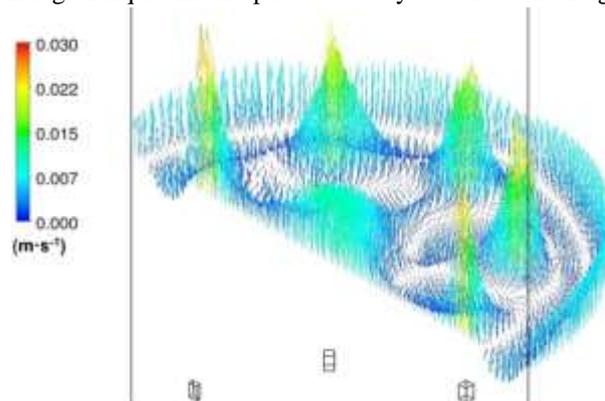


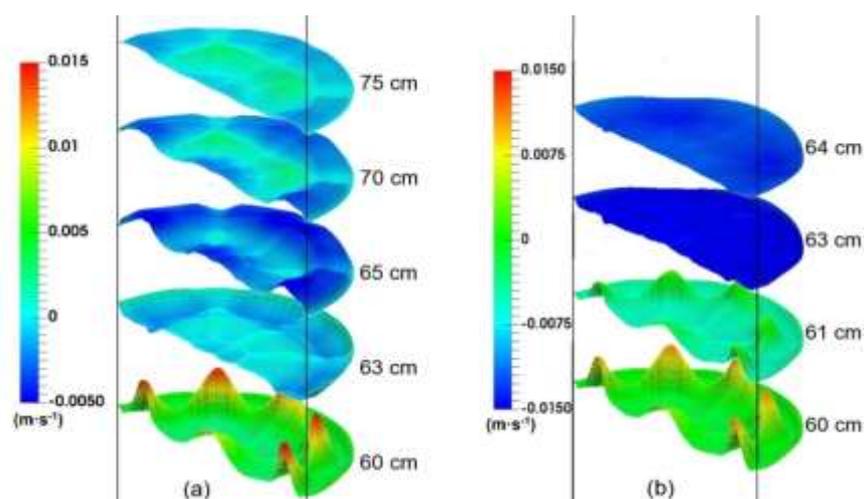
Figure 6. Bottom region liquid mean upflow velocity vectors at the heights of 25 cm.



The end of the sludge bed at 63 cm has caused a transition region between the heights of 55 cm and 75 cm, where the liquid flow changes from upwards (positive velocity) to downwards (negative velocity) and then at 75 cm it starts moving upwards again (Figure 7a). The mean liquid upflow velocity at the transition region reduced, in comparison with the bottom region, to $0.001196 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, once the liquid velocity reduces after leaving the sludge bed, due to an increase in the available area for the liquid flow. The solids showed a positive upflow velocity up to 60 cm, and then the solids acquired a downward profile, with negative velocity, up to the end of the sludge

bed at 63 mm. Figure 7b presents the profile at different heights for the solids velocity. In order to allow a better visualization of the flow profiles on the small velocity regions, a scale factor was used.

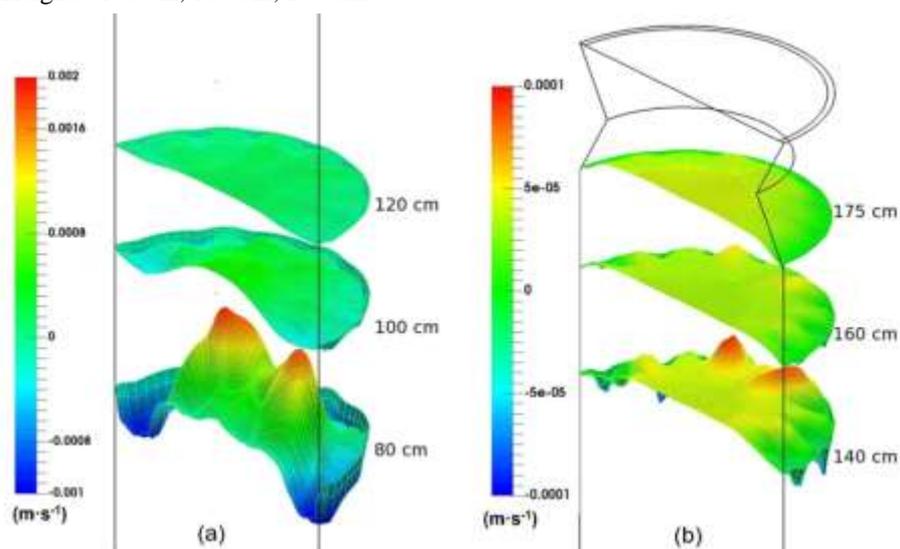
Figure 7. Transition region solid and liquid mean upflow velocity profiles. Scale factor: 5.
 (a) Liquid at the heights: 60 cm; 63 cm; 65 cm; 70 cm; 75 cm.
 (b) Solid at the heights: 60 cm; 61 cm; 63 cm; 64 cm.



The calculated mean liquid upflow velocity at the upper region was $4.930 \times 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Concerning the established particle diameter and density simulated in this study, there were no solids wash out to this region of the reactor, once the calculated solids volumetric fraction was zero. However, different results for the solids distribution along the reactor could be expected for cases when the solids density is smaller than the one considered in this study. The distribution system had a much minor influence in this region, as showed in Figure 8. However, the transition region led to higher liquid upflow velocities between the heights of 0.75 m and 1.20 m (Figure 8a), where the mean liquid upflow velocity was $9.161 \times 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. After this region, up to the end of the upper region (Figure 8b) the mean liquid upflow velocity reduced to $2.766 \times 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, a value 9.56% higher than the UASB designed upflow velocity of $2.525 \times 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. At the center of the reactor the liquid showed an upflow profile, and close to the walls there were recirculation streams up to the height of 1.50 m.

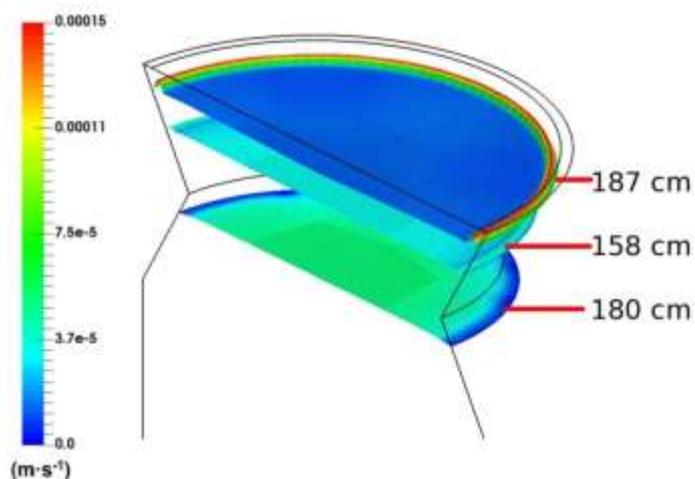
After this height, the flow presented a more developed profile, with fewer recirculation zones.

Figure 8. Upper region liquid mean upflow velocity profiles. (a) Higher velocities region. Scale factor: 5. Heights: 80 cm; 100 cm; 120 cm. (b) Lower velocities region. Scale factor: 500. Heights: 140 cm; 160 cm; 175 cm.



Finally, the top region comprises the flow through the three-phase separator (after 1.75 m), where the area is reduced, and therefore the liquid upflow velocity is increased up to $3.169 \times 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Few recirculation zones were observed at the top region as showed in Figure 9.

Figure 9. Top region liquid mean upflow velocity profiles at the heights: 180 cm; 185 cm; 187 cm. Scale factor: 50.



For the model validation, the PIV results for a plane 1.0 m height and 0.2 m of diameter, located at the center (longitudinal position) of the reactor, placed right above the end of the sludge bed were compared to the simulated results at the same location. A liquid mean velocity of $4.355 \times 10^{-4} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ was obtained in the PIV experiments, while calculated liquid mean velocity of $4.529 \times 10^{-4} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ was calculated at the CFD simulations. Considering a difference between experimental and simulated results of 3.98%, what is not significant given the complexity of the system, the model was considered validated.

3.2 Solid/Liquid/Gas

Two PIV experiments were performed and the averaged results were used for the CFD model validation. Due to experimental limitations, the PIV results for a plane located at the center of the reactor (longitudinal section), with dimensions of 1.0 m height and with 0.2 m of diameter, were compared with CFD results. Table 2 shows the validation results for two parameters: water upflow velocity and water velocity magnitude.

Table 2. Validation Results.

	PIV	CFD	Difference (%)
Water Upflow Velocity ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	-0.0153695	-0.0156785	-2.01
Water Velocity Magnitude ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	0.0186120	0.0179656	3.47

The differences between experimental and computational results were less than 4%. Thus, the validation results were considered satisfactory, given the complexity of the flow system. Therefore, allowing the following analysis on the overall UASB hydrodynamics behavior.

According to Ren et al. (2009), there is a discontinuity in the mixing behavior throughout a UASB reactor. This discontinuity was also noticed in the simulations

performed in this study and, therefore, the reactor could be divided again into the four regions mentioned in the Solid/Liquid simulations: bottom, transition, upper and top region.

The first flow feature that was observed was the gas influence on the liquid and solid flow. At the bottom of the reactor, it was possible to notice that the liquid distribution system influence on the solid distribution along the radial axis and on the solid and liquid flow pattern (as showed in Figures 5a and 5b) is replaced by the influence of the gas distribution system, once the gas inlet and upflow velocity is higher. Figures 10a and 10b depict the sludge volume fraction at different axial positions for both cases, where is possible to notice the aforementioned influences. At the bottom, the mean solids terminal velocity is $-4.939 \times 10^{-3} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. This velocity peaks at the transition region, where the granules are settling down with higher velocities, reaching $-1.872 \times 10^{-2} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, decreasing to $-1.2580 \times 10^{-2} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ at the upper region. Then, at the top region the velocity reaches its lowest value, $-7.133 \times 10^{-4} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, once there are almost no solids in this region. Solids mean terminal velocity was negative, indicating that the granules are returning to the sludge bed, as expected. Therefore the sludge volumetric fraction reduces along the axial position, as showed in Figure 11.

The absence of sludge or the presence of a very small volume fraction on the upper and top regions are in accordance with the results obtained by Ren et al. (2009) for a similar UASB reactor.

Figure 10. Sludge volumetric fraction at the axial positions: 20 cm; 30 cm; 40 cm and 55cm
(a)Solid/Liquid (b) Solid/Liquid/Gas.

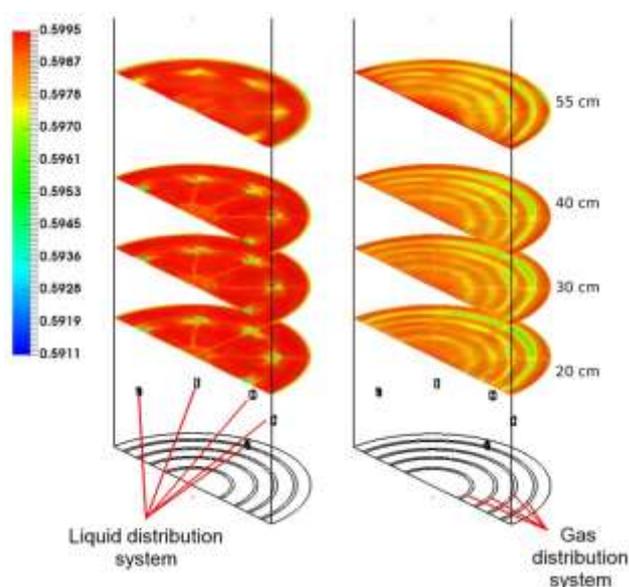
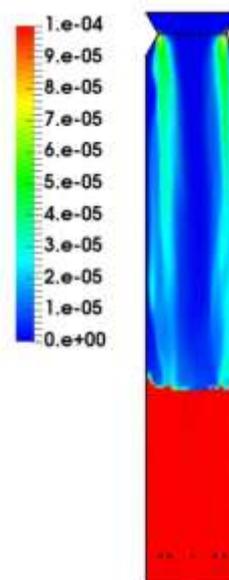
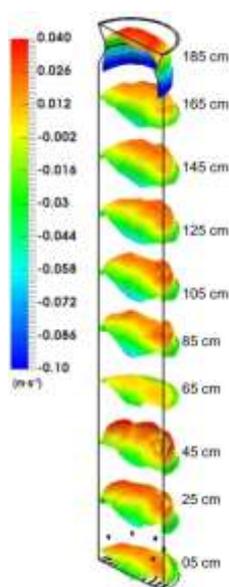


Figure 11. Sludge volumetric fraction at a plane on the centre of the reactor.



The gas injected into the reactor drove liquid recirculation along the axial position, as showed in Figure 12. Thus, the liquid moves upwards in the zones located above the gas distribution system, and downwards at the center and close to the reactor walls. There are few changes along the reactor for the liquid flow profile. However, there are differences in the average liquid velocity. At the bottom the down streams play an important role, thus the time-averaged upflow velocity is negative and equal to $-1.483 \times 10^{-3} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Contrary to what happened in the solid/liquid simulation, the upflow liquid velocity increased at the transition region to $5.87411 \times 10^{-3} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. At the upper region it increased again to $1.321 \times 10^{-3} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, and finally reaching its highest upflow velocity of $2.254 \times 10^{-3} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ at the top region, where the recirculation of liquid reduced.

Figure 12. Liquid upflow mean velocity profiles at the heights: 5 cm; 25 cm; 45 cm; 65 cm; 85 cm; 105 cm; 125 cm; 145; 165 cm; 185 cm.



Concerning the gas, at bottom region, shows its lowest mean velocity of $0.159\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$. After leaving the sludge bed, the gas velocity increases to $0.189\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ in the transition region. The gas distribution along the reactor height gets more homogeneous in the upper and top regions, and the gas inlet system has a smaller impact in these regions (Figure 13). The maximum gas velocity of $0.205\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ was noticed at the top region.

Over this study, it was possible to corroborate that at lower superficial liquid velocity, biogas production rate plays a major role in the flow patterns in UASB reactors, as stated by Ren et al. (2009).

Table 3 sums up the main flow characteristics along the reactor volume. Comparing the two cases, it is possible to notice that solid and liquid volume fraction decrease slightly in the three-phase simulation. Solid fraction decreases due to the sludge wash-out, and liquid in reason of the gas injection. The influence on the liquid and solid velocity magnitude in the reactor is also noticeable. Water and solid velocity

magnitudes increased about eight times. On the other hand, the recirculation generated by the gas introduction caused the averaged water axial velocity to reduce.

Figure 13. Gas upflow mean velocity profiles at the heights: 5 cm; 20 cm; 40 cm; 60 cm; 80 cm; 100 cm; 120 cm; 140 cm; 160 cm; 180 cm; 185 cm.

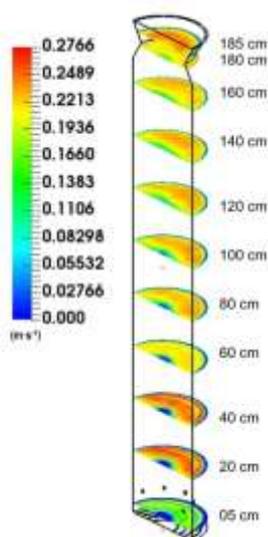


Table 3. Time-averaged results for the velocities and volume fraction within the reactor for the three phases.

	Case	Volume fraction	Velocity Magnitude ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	Axial Velocity ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)
Liquid	S/L	0.712756	0.0022082	0.00168079
	S/L/G	0.710485	0.0183447	6.79376e-005
Solid	S/L	0.287244	0.00191789	-0.00011899
	S/L/G	0.286942	0.0151905	-0.00864734
Gas	S/L	-	-	-
	S/L/G	0.0025725	0.181	0.181

* S/L: Simulations Solid/Liquid; S/L/G: Simulations Solid/Liquid/Gas

Regarding the mixing within the reactor, Ren et al. (2009) define the dead zones as the regions with the superficial liquid velocities less than 5% of the average velocity. Through CFD simulations of an UASB reactor, the authors found that 10% of the reactor volume could be considered as dead zones. Singh et al. (2006) determined the dead zones for an 8 L experimental reactor, operating at 32°C and at 20°C.

Results for the different temperatures showed, respectively, 10% and 11% of the volume as stagnant zones.

In the present work, for the case with only liquid and solid present in the reactor, it was found 44% of dead zones. For the three-phase case, the injection of gas led to a considerable reduction, with only 0.02% of the volume considered as dead zones. This effect is in accordance with the literature, which reports that the mixture in a UASB reactor is mainly driven by the biogas in cases where there is a high volumetric organic load being treated and a high volumetric biogas production is observed. This value may be lower than experimental values found in literature, because the gas distribution system is placed along the bottom of the reactor, thus generating a more homogenous mixing than in cases where the gas is generated along the sludge bed.

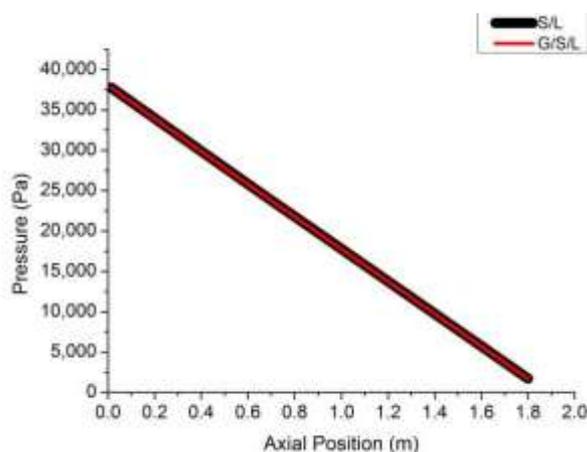
Ruttithiwapanich et al. (2013) investigated the cause of sludge wash-out in a UASB reactor. The authors mention that sludge wash-out within the reactor is originated when the liquid velocity overcomes solids terminal velocity. They also say that loss of sludge through the system outlet is a negative effect in UASB reactors. In the present work, the mean liquid upflow velocity of $6.794 \times 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ did not overcome the solids mean terminal velocity of $-8.647 \times 10^{-3} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Therefore, it was found a sludge wash-out of $1.13 \times 10^{-3} \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ of solids from the reactor. Considering the average liquid flow rate of $6.4216 \text{ L}\cdot\text{h}^{-1}$ used in the design of the reactor, it was calculated that a solids concentration of $179 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ was carried out from the reactor, according to the simulation results.

According to Lima et al. (2011), it is important to know the pressure drop in UASB reactors, for example to accurately design the pumping power necessary to feed the

reactor with the wastewater to be treated.

As showed in Figure 14, the results of this study presented a pressure drop (ΔP) in the order of 38 kPa between the reactor bottom and top, for the two and three-phase cases. Thus, it is possible to mention that the gas does not play an important role regarding the pressure drop in UASB reactors.

Figure 14. Pressure drop as a function of axial position in the UASB reactor for the two cases. S/L: Solid/Liquid. G/S/L: Gas/Solid/Liquid.



The results for the pressure drop presented in this work were very similar to the ones presented by Lima et al. (2011) which noticed a ΔP among the reactor inlet and outlet in the order of 35.2 kPa, for a 3,000 L UASB reactor, thereby reinforcing the reliability of the results presented in this work.

4 CONCLUSIONS

Throughout this study, two and three phase simulations of a UASB reactor were successfully developed and validated, with differences lower than 4% between experimental and computational results. It was noticed a discontinuity in the reactor mixing conditions in both (two and three phase) cases, what allowed to divide the reactor into four regions according to its hydrodynamics (bottom, transition, upper and top). Considering the results obtained from the solid/liquid simulations, one can conclude that:

- the low liquid superficial velocity did not overcome the solids superficial velocity along the reactor, thus there was no sludge wash-out and the solids behaved as a packed bed;
- the liquid distribution system played a major role in the flow profile at the bottom region of the reactor, but lost its interference in the upper region;
- the flow acquired a more developed profile at the upper region;

Regarding the solid/liquid/gas simulations it is possible to conclude that:

- the configuration of the gas distribution system played a major role on the overall flow profile for the three phases within the reactor at the lower regions, however, its influence was reduced at the upper and top regions;
- the gas injected into the reactor drove liquid recirculation along the axial position;
- at low liquid superficial velocity, biogas production plays a major role in the flow patterns in UASB reactors, its introduction increased liquid and solid velocity magnitudes in about eight times;

Finally, considering that the validation results were satisfactory, the proposed model can be used in other simulations for UASB reactors optimization.

NOTATION

C_D	Drag Force Coefficient
CFD	Computational Fluid Dynamics
COD	Chemical Oxygen Demand
CSTR	Continuous Stirred-Tank Reactor
d	Diameter (m)
E-E	Eulerian-Eulerian
E-L	Eulerian-Lagrangian
\vec{F}_D	Drag force
\vec{F}_{int}	Interfacial forces
\vec{F}_q	External Body Force
GCI	Grid Convergence Index
\vec{g}	Gravity acceleration ($m \cdot s^{-2}$)

K	Interphase Momentum Exchange Coefficient
KTGF	Kinetic Theory of Granular Flow
P	Pressure (Pa)
PIV	Particle Image Velocimetry
PMMA	Poly(methyl)methacrylate
PS	Polystyrene
Re	Reynolds Number
S/L	Solid/Liquid
S/L/G	Solid/Liquid/Gas
UASB	Upflow Anaerobic Sludge Blanket
v	Velocity ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)

Greek Letters

α	Volumetric Fraction of the phase
μ	Dynamic viscosity ($\text{kg}\cdot(\text{m}\cdot\text{s})^{-1}$)
ρ	Density ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)
$\bar{\tau}$	Stress-Strain Tensor

Subscripts

p	Disperse phase/Particle or bubble
q	Continuous phase
b	bubble
l	liquid
g	gas
gl	Referent to the gas/liquid interactions
s	solid
sl	Referent to the solid/liquid interactions

ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to acknowledge the financial assistance provided by PETROBRAS.

This work was supported by the Brazilian Oil Company (PETROBRAS).

5 REFERENCES

Lettinga, G. and Pol W. H., UASB-Process Design for Various Types of Wastewater. *Water Science and Technology*, 24(8), 87-107 (1991).

Yetilmezsoy, K. and Sapci-Zengin, Z., Stochastic modeling applications for the prediction of COD removal efficiency of UASB reactors treating diluted real cotton textile wastewater. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 23, 13-26, (2009).

Dessi, P., Jain, R., Singh, S., Seder-Colomina, M., Van Hullebusch, E. D., Rene, E. R., Ahammad, S. Z., Carucci, A. and Lens, P. N. L., Effect of temperature on selenium removal from wastewater by UASB reactors. *Water Research*, 94, 146-154, (2016).

Junior, A. D. N. F., Koyama, M. H., Júnior, M. M. A. and Zaiat, M., Thermophilic anaerobic Digestion of Raw Sugarcane Vinasse. *Renewable Energy*, 89, 245–252 (2016).

Barros, V. G., Duda, R. M. and Oliveira R. A., Biomethane Production From Vinasse in Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactors Inoculated With Granular Sludge. *Brazilian Journal of Microbiology*, 47, 628–639, (2016).

Jiang, J., Wu, J., Zhang, J., Poncin, S. and Li, H. Z., Multiscale hydrodynamic investigation to intensify the biogas production in upflow anaerobic reactors. *Bioresource Technology*, 155, 1-7 (2014).

Dapelo, D., Alberini, F. and Bridgeman, J., Euler-Lagrange CFD Modelling of unconfined gas mixing in anaerobic digestion. *Water Research*, 85, 497-511 (2015).

Craig, K.J., Nieuwoudt, M. N. and Niemand, L.J. CFD Simulation of Anaerobic Digester With Variable Sewage Sludge Rheology. *Water Research*, 47, 4485–4497 (2013).

Kerdouss, F., Bannari, A. and Proulx, P., CFD modeling of gas dispersion and bubble size in a double turbine stirred tank. *Chemical Engineering Science*, 61, 3313-3322. (2006).

Lima, M. G. S., Neto, S. R. F., Lima, A. G. B., Nunes, F. C. B. and Gomes, L. A., Theoretical/Experimental Study of an Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor Treating Domestic Wastewater. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 9 (2011).

Ren, T.T. , Mu, Y., Ni, B. J. and Yu, H. Q., Hydrodynamics of Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactors. *AIChE Journal*, 55, 516-528 (2009).

Ruttithiwapanich, T., Songkasiri, W. and Ruenglertpanyakul, W., Identification of granular sludge wash-out origin insides as Upflow Industrial-scale biogas reactor by the three phase flow model. *IERI Procedia*. 5, 245-251 (2013).

Samstag, R. W., Ducoste, J. J., Griborio, A., Nopens, I., Batstone, D. J., Wicks, J. D. , Saunders, S., Wicklein, E. A., Kenny, G. and Laurent, J., CFD for wastewater treatment: an overview. *Water Science and Technology*, 74 549-563(3), (2016).

ANSYS. *Fluent 16.2 Theory Guide* . 2015

Baten, J.M.V. , Ellenberger, J. and Krishna, R., Hydrodynamics of internal air-lift reactors: experiments versus CFD simulations, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 42(10), 733-742, (2003).

Chen, P., Sanyal, J. and Dudukovic, M. P., Numerical Simulation of Bubble Columns Flows: Effect of Different Breakup and Coalescence Closures. *Chemical Engineering Science*, 60, 1085-1101 (2005).

Cheng, Y. and Zhu, J.X., CFD Modeling and Simulation of Hydrodynamics in Liquid-Solid Circulating Fluidized Beds, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 83, 177-185 (2005).

Gidaspow, D., Bezburuah, R. and Ding, J., Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds: Kinetic Theory Approach. In: *Engineering Foundation Conference on Fluidization*, 7, Brisbane, 1992. Anais... New York: Engineering Foundation. 1992.

Lahiri, S. K. and Ghanta, K. C., Slurry Flow Modelling by CFD. *Chemical Industry & Chemical Engineering Quarterly*, 16 (4), 295-308 (2010).

Schiller, L. and Naumann, Z., Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftbereitung, *Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure*, 77, 318-320, (1933).

Yu, L., Ma, J., Frear, C., Zhao, Q., Dillon, R., Li, X. and Chen, S., Multiphase modeling of settling and suspension in anaerobic digester, *Applied Energy*, 111, 28-39, (2013).

Azargoshasb, H., Mousavi, S. M., Amani, T., Jafari, A. and Nosrati, M.M., Three-phase CFD simulation coupled with population balance equation of anaerobic syntrophic acidogenesis and methanogenesis reactions in a continuous stirred bioreactor. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 27, 207-217 (2015).

Roache, P.J., Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies, *Journal of Fluids Engineering*, 116, 405-413 (1994).

Maurina, G. Z., Rosa, L. M., Beal, L. L., Torres, A. P. and Sousa, M. P. Numerical Study of Different Inlet Configurations on the Fluid Dynamics of an Anaerobic Sequencing Batch Reactor. *Chemical Engineering Transactions*, 38, 127-132, (2014).

Rice, E. W. and Bridgewater, L., American public health association; American water works association; water environment federation. *Standard methods for the examination of water and wastewater*. 22. ed. Washington, Estados Unidos: American Public Health Association, 1389 p., 2012.

Bastiani, C. , Beal, L. L., Alba, J. L., Torres, A. P. R. and Souza, M. P., Study of different forms of gas inlet and distribution in UASB reactors for the CFD simulation and PIV validation. In: *XXI Brazilian Congress of Chemical Engineering (COBEQ)*, Fortaleza, Ceará Brazil, 2016.

Singh, K. S., Viraghavan, T., Bhattacharrya, D., Sludge Blanket Height and Flow Pattern in UASB Reactor: Temperature Effects. *Journal Environmental and Engineering*, 132, 895-900 (2006).

6 CONCLUSÕES

Um modelo computacional trifásico (sólido, líquido e gás) para o escoamento em um reator UASB foi desenvolvido e validado ao longo deste trabalho. Considerando os resultados obtidos, neste capítulo são discutidas as principais conclusões.

Os métodos utilizados na caracterização das fases levaram à obtenção de resultados similares aos encontrados na literatura, portanto é possível afirmar que a metodologia empregada foi eficaz. A caracterização dos grânulos de lodo anaeróbio permitiu a escolha do material Poliestireno como fase sólida na etapa de validação experimental dos resultados.

A simplificação da geometria permitiu a geração de malhas com melhor qualidade. Porém, a simplificação assumida na região de entrada do efluente pode ter tido impacto no perfil do escoamento do reator, uma vez que a existência do distribuidor de efluente poderia ter provocado regiões de turbilhonamento próximo a este. A malha com 528.000 volumes de controle apresentou resultados satisfatórios no teste de independência de malha com um custo computacional inferior a mais refinada, portanto é adequada às simulações que estão sendo realizadas.

O modelo computacional gás/líquido estimou a fração volumétrica de gás com uma diferença de 4,37% entre resultados experimentais e teóricos. Acerca da velocidade do gás, para o tamanho de bolha experimental foi verificada uma diferença de 1,77% entre modelo numérico e experimental. Devido à baixa vazão de gás, não foi verificada coalescência entre as bolhas nos experimentos. As simulações computacionais apresentaram velocidade média do líquido 3,10% menor que os resultados encontrados nos experimentos. Com relação à velocidade axial do líquido, a diferença foi maior, tendo sido encontrados resultados 9,18% maiores para as simulações em CFD em comparação com os resultados do PIV. Com relação aos perfis de escoamento, foram observados perfis similares entre resultados obtidos através de CFD e PIV, demonstrando uma semelhança maior para o escoamento no centro do reator. O sistema utilizado para a distribuição de gás no reator gerou recirculação interna de líquido, aumentando o tempo de contato entre as fases. Sendo assim, foi encontrada uma menor fração volumétrica de gás no centro do reator.

Acerca do modelo computacional sólido/líquido, estudos iniciais demonstram que a utilização do modelo de Gidaspow para o coeficiente de arraste levou a resultados mais próximos dos experimentais quando comparado com os modelos de Wen & Yu e Syamlal & O'Brien. Portanto, este modelo foi utilizado para a avaliação da transferência de quantidade de movimento entre as fases nas simulações sólido/líquido. Na validação do modelo computacional, foi verificado que os resultados de CFD apresentaram resultados 3,98% menores que os experimentais para a velocidade média do líquido no reator. Não foi observado arraste de lodo para fora do reator e a fase sólida apresentou comportamento de leito fixo, devido às baixas velocidades da fase líquida. O sistema de distribuição de líquido foi o responsável pelo perfil de velocidades das duas fases na região inferior do reator. Na região superior do reator, o escoamento apresentou perfil mais desenvolvido.

Nas simulações gás/líquido, a utilização apenas da força de arraste conduziu a resultados semelhantes aos apresentados pelas simulações que consideraram também a força de sustentação e massa virtual. Corroborando assim com dados de literatura que citam a força de arraste como sendo a principal força responsável pela transferência de quantidade de movimento entre as fases em reatores gás/líquido.

Com relação às alterações no tamanho de bolha, verificou-se que conforme o tamanho de bolha aumenta a fração volumétrica de biogás no reator reduz e a velocidade ascensional do gás aumenta, demonstrando uma relação entre o tamanho de bolha e estes parâmetros. Ao assumir um tamanho de bolha constante e aumentar a vazão de gás, observou-se um aumento na fração volumétrica de gás e nas velocidades ascensionais do gás e do líquido, promovendo uma maior agitação no sistema.

Por fim, nas simulações trifásicas a introdução do gás no reator fez com que o perfil do escoamento das fases sólida e líquida na região inferior sofresse a maior influência no sistema de distribuição de gás. Sendo assim, é possível afirmar que o perfil de escoamento no leito de lodo em reatores UASB está intimamente ligado à geração de biogás no reator. Nas regiões superiores, a distribuição de gás se torna mais homogênea, porém o gás continua sendo o principal promotor de mistura no sistema. A fase gasosa gerou recirculação interna de líquido na região central do sistema.

Tanto nas simulações sólido/líquido quanto nas simulações trifásicas, foi observada uma descontinuidade nas condições de mistura no reator UASB, o que permitiu dividir o reator em quatro regiões, de acordo com as condições hidrodinâmicas locais: região inferior, região de transição, região superior e topo.

Comparando as simulações gás/líquido e as simulações trifásicas, percebe-se que o leito de lodo levou a uma distribuição mais homogênea de gás no reator e também a uma fração volumétrica maior de biogás no reator, além de um aumento na velocidade média do líquido e uma redução na velocidade do gás.

Considerando os resultados obtidos é possível afirmar que em baixas velocidades superficiais de líquido, a produção de biogás desempenha papel principal nos perfis de escoamento em reatores UASB. No caso estudado, a introdução de gás aumentou em cerca de oito vezes a magnitude das velocidades das fases sólida e líquida.

Por fim, o modelo computacional desenvolvido e validado neste estudo pode ser usado posteriormente para otimizações no desempenho de reatores UASB.

7 RECOMENDAÇÕES

Tendo em vista os resultados e as conclusões do presente trabalho, e buscando uma acuracidade maior nas simulações, sugerem-se os seguintes estudos:

- incluir modelo de digestão anaeróbia, para que o biogás seja produzido no reator, de forma a melhorar a acuracidade das simulações;
- realizar simulações sólido/líquido avaliando a influência das outras forças interfaciais (força de sustentação e força e massa virtual);
- validar experimentalmente os dados referentes às zonas mortas dentro do reator utilizando uma metodologia adequada para tal;
- validar experimentalmente os resultados para a queda de pressão no reator trifásico.

8 REFERÊNCIAS

ANSYS. Fluent 16.2 Theory Guide . 2015

ARAUJO, W. R.; PEREIRA NETO, A. T.; TACIDELLI, A. R.; ALVES, J. J. N. Modelagem e Simulação Fluidodinâmica de um Secador Industrial de PVC Usando a Teoria Cinética de Fluxo Granular. In: Congresso Brasileiro de Engenharia Química, XX , Florianópolis, 2014. **Anais...** 2015.

AZARGOSHASB, H.; MOUSAVI, S.M.; AMANI, T.; JAFARI, A.; NOSRATI, M. Three-phase CFD simulation coupled with population balance equation of anaerobic syntrophic acidogenesis and methanogenesis reactions in a continuous stirred bioreactor. **Journal of Industrial and Engineering Chemistry**, v. 27, p. 207-217, 2015.

BANNARI, R.; KERDOUSS, F.; SELMA, B.; BANNARIA, A.; PROULX, P. Three-dimensional mathematical modeling of dispersed two-phase flow using class method of population balance in bubble columns. **Computers and Chemical Engineering**, v. 32, p. 3224-3237, 2008.

BARROS, V. G.; DUDA, R. M.; OLIVEIRA, R. A. Biomethane Production From Vinasse in Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactors Inoculated With Granular Sludge. **Brazilian Journal of Microbiology**, v.47, p.628–639. 2016.

BASTIANI,C.; BEAL, L.L.; ALBA, J.L. ; TORRES, A.P.R; Souza, M.P. Study of different forms of gas inlet and distribution in UASB reactors for the CFD simulation and PIV validation. In: XXI Brazilian Congress of Chemical Engineering, XXI, Fortaleza, Ceará Brazil, 2014. **Anais ...** 2016.

BATEN, J.M.V.; ELLENBERGER, J.; KRISHNA, R. Hydrodynamics of internal air-lift reactors: experiments versus CFD simulations. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**. v. 42, n.10, p.733-742, 2003.

BERGER, M. J.; Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Partial Differential Equations. **Journal of Computational Physics**, v.53, p.484–512. 1984.

BERGER, M.J.;COLELLA, P. Local Adaptive Mesh Refinement for Shock Hydrodynamics. **Journal of Computational Physics**, v.82, p.64–84. 1989.

BERTODANO, M. L.; LAHEY, R. T.; JONES, O. C. Phase distribution in bubbly two-phase flow in vertical ducts. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 20, n. 5, p. 805-818, 1994.

BRENNEN, C. E. **Fundamentals of Multiphase Flows**. Pasadena: Cambridge University Press, 2005. 410 p.

BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Secretaria de Produção e Agroenergia. **Estatísticas: Produção Brasileira de Etanol. 2016.**

Disponível em: <<http://www.agricultura.gov.br/desenvolvimento-sustentavel/agroenergia/estatistica>>. Acesso em: 10 de fev. 2016.

_____. Ministério do Interior. Portaria nº 158, de 03 de novembro de 1980. Dispõe sobre o lançamento de vinhoto em coleções hídricas e sobre efluentes de destilarias e usinas de açúcar. Brasília, DF, 1978.

_____. _____. Portaria nº 323, de 29 de novembro de 1978. Proíbe o lançamento de vinhoto em coleções de água. Brasília, DF, 1978.

_____. Ministério de Minas e Energia. **Análise de Conjuntura dos Biocombustíveis**. Rio de Janeiro, RJ, 2015, 57p.

CAMPBELL, M.; COSGROVE, J.A.; GREATER, C.A.; JACK, S.; ROCKLIFF, D. Review of LDA and PIV applied to the measurement of sound and acoustic streaming. **Optics & Laser Technology**, v. 32, p. 629–639, 2000.

CHANG, F. Y.; LIN, C. Y. Biohydrogen production using an up-flow anaerobic sludge blanket reactor. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 29, n. 1, p. 33-39, 2004.

CHEN, J. L.; ORTIZ, R.; STEELE, T. W. J.; STUCKEY, D. C. Toxicants inhibiting anaerobic digestion: A review. **Biotechnology Advances**, v. 32, n. 8, p. 1523–1534, 2014.

CHEN, P.; SANYAL, J.; DUDUKOVIC, M.P. Numerical Simulation of Bubble Column Flows: Effect of Different Breakup and Coalescence Closures. **Chemical Engineering Science**, v. 60, p. 1085-1101, 2005.

CHENG, Y.; ZHU, J. X. CFD Modeling and Simulation of Hydrodynamics in Liquid-Solid Circulating Fluidized Beds. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v.83, p. 177-185, 2005

CIOCAN, G. D.; ILIESCU, M. S. PIV Measurements Applied to Hydraulic Machinery: Cavitating and Cavitation-Free Flows. In: Cavazzini, G. **The Particle Image Velocimetry: Characteristics, Limits and Possible Applications**. Rijeka: InTech, 2012. p. 51-96.

CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. **Bubbles, Drops, and Particles**. New York: Academic Press, 1978. 380p.

CORNELISSEN, J. T.; TAGHIPOURA, F.; ESCUDIÉ, R.; ELLISA, N.; GRACE, J. R. CFD Modeling of a liquid–solid fluidized bed. **Chemical Engineering Science**, v. 62, p. 6334-6348, 2007.

CORTEZ, L. A. B.; FREIRE, W. J.; ROSILLO-CALLE, F. Biodigestion of vinasse in Brazil. **International Sugar Journal**, v. 100, n. 1196, p. 403-413, 1996.

CRAIG, K.J.; Nieuwoudt, M. N.; Niemand, L. J. CFD Simulation of Anaerobic Digester With Variable Sewage Sludge Rheology. **Water Research**, v.47, p.4485–4497. 2013.

DAPELO, D.; ALBERINI, F.; BRIDGEMAN, J. Euler-Lagrange CFD Modelling of unconfined gas mixing in anaerobic digestion. **Water Research**, v. 85, p. 497-511, 2015.

DING, J.; GIDASPOW, D. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. **AIChE journal**, v. 36, n. 4, p. 523-538, 1990.

EL-SHEIKH, M. A.; SALEH, H. I.; FLORA, J. R.; ABDEL-GHANY, M. R. Biological Tannery Wastewater Treatment Using Two-Stage UASB Reactors. **Desalination**, v.276, n.1-3, p.253–259, ago. 2011.

FARIA, A. A. A. **Fermentação Metanogênica Mesofílica de Melaço e Termofílica de Vinhaça em Reatores UASB**. 2014. 59 f. Dissertação (Mestrado em Microbiologia Agropecuária) – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias, Jaboticabal, 2014.

FERZIGER, J.H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics** 3. ed. Nova Iorque: Springer, 1997. 423 p.

FOX, R.; MCDONALD, A.; PRITCHARD, P. J. **Introduction to Fluid Mechanics**. 6 ed. USA: John Wiley & Sons, 2004. 789 p.

FUESS, L. T. **Potencial Contaminante e Energético da Vinhaça: Riscos de Contaminação ao Solo e Recursos Hídricos e Recuperação de Energia a Partir da Digestão Anaeróbia**. 2013. 161 f. Dissertação (Mestrado em Geociências e Meio Ambiente) – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Programa de Pós-Graduação em Geociências e Meio Ambiente, Rio Claro, 2013.

GIDASPOW, D.; BEZBURUAH, R.; DING, J. Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds: Kinetic Theory Approach. In: Engineering Foundation Conference on Fluidization, 7, Brisbane, 1992. **Anais...** New York: Engineering Foundation. 1992.

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

GRANT, I. Particle Image Velocimetry: a review. **Journal of Mechanical Engineering Science**, v. 211, p.55-76, 1997.

GRESCH, M.; BRAUN, D.; GUJER, W. Using reactive tracers to detect flow field anomalies in water treatment reactors. **Water Research**, v. 45, p. 1984-1994, 2011.

GUO, L.; ZHANG, D.; XU, D.; CHEN, Y. An experimental study of low concentration sludge settling velocity under turbulent condition. **Water Research**, v. 43, p. 2383-2390, 2009.

HAUKE, G. **An Introduction to Fluid Mechanics and Transport Phenomena**. Zaragoza, Spain: Springer, 2008. 296 p.

HIRSCH, C. **Numerical Computation of Internal and External Flows: Fundamentals of Numerical Discretization**. Vol. 1. Brussels : Wiley, 1988. 538 p.

HU, Y.; LIU, Z.; YANG, J.; JIN, Y.; CHENG, Y. Study on the reactive mixing process in an unbaffled stirred tank using planar laser-induced fluorescence (PLIF) technique. **Chemical Engineering Science**, v. 65, p. 4511-4518, 2010.

INTANOO, P.; RANGSANVIGIT, P.; MALAKUL, P.; CHAVADEJ, S. Optimization of Separate Hydrogen and Methane Production from Cassava Wastewater Using Two-Stage Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor (UASB) System Under Thermophilic Operation. **Bioresource Technology**, v.176, p.256–165, dez. 2014.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY (IEA). **World Energy Outlook 2012**. Paris, 2012. 668 p.

ISHII M. Two-fluid Model for Two-phase Flow. In: International Workshop on Two-phase Flow Fundamentals, 2. 1979. New York. **Anais...** New York: Rensselaer Polytechnic Institute, 1979.

ISHII, M.; ZUBER N., Drag Coefficient and Relative Velocity in Bubbly, Droplet and Particulate Flow. **AIChE Journal**, v.25, p. 834-854, 1979.

ITAIPU. **Produção Anual de Energia. 2016**. Disponível em: <[https://www.itaipu.gov.br/ energia/geracao](https://www.itaipu.gov.br/energia/geracao)>_Acesso em: 15 de abr. 2016.

JANKE, L.; LEITE, A. F.; BATISTA, K.; NIKOLAUSZ, M.; NELLES, M.; STINNER, W. Enhancing Biogas Production From Vinasse in Sugarcane Biorefineries: Effects of Urea and Trace Elements Supplementation on Process Performance and Stability. **Bioresource Technology**, v.217, p.10–20. 2016.

JENKINS, J. T.; SAVAGE, S. B. A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 130, p. 187–202, 1983.

JUNIOR, A. D. N. F.; KOYAMA, M. H.; JÚNIOR, M. M. A.; ZAIAT, M. Thermophilic anaerobic Digestion of Raw Sugarcane Vinasse. **Renewable Energy**, v.89, p.245–252, 2016.

KERDOUSS, F.; BANNARI, A.; PROULX, P. CFD modeling of gas dispersion and bubble size in a double turbine stirred tank. **Chemical Engineering Science**, v. 61, p. 3313-3322, 2006.

KILANDER, J.; BLOMSTRÖM, S.; RASMUSON, A. Spatial and temporal evolution of floc size distribution in a stirred square tank investigated using PIV and image analysis. **Chemical Engineering Science**, v. 61, p. 7651-7660, 2006.

KRISHNA, R.; URSEANU, M.I.; VAN BATEN, J.M.; ELLENBERGER, J. Influence of scale on the hydrodynamics of bubble columns operating in the churn-turbulent regime: experiments vs. Eulerian Simulations. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 4903-4911, 1999.

KYTHREOTOU, N.; FLORIDES, G.; TASSOU, S. A. A review of simple to scientific models for anaerobic digestion. **Renewable Energy**, v. 71, p. 701–714, 2014.

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.

LAIME, E. M. O.; FERNANDES, P. D.; OLIVEIRA, D. C. S; FREIRE, E. A. Possibilidades tecnológicas para a destinação da vinhaça: uma revisão. **Revista Trópica – Ciências Agrárias e Biológicas**. v.5, n. 3, p. 16-29, 2011.

LAHIRI, S. K.; GHANTA, K. C. Slurry Flow Modelling by CFD. **Chemical Industry & Chemical Engineering Quarterly**, v. 16, n. 4, p. 295-308, 2010.

LIMA, M. G. S. **Estudo Teórico e Experimental de um Reator Anaeróbio de Fluxo Ascendente e Manta de Lodo Tratando Águas Residuárias Domésticas**. 2008. 164 f. Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) - Universidade Federal de Campina Grande, Programa de Pós-Graduação em Engenharia De Processos, Campina Grande, 2008.

LIMA, M. G. S.; NETO, S. R. F.; LIMA, A. G. B.; NUNES, F. C. B.; GOMES, L. A. Theoretical/Experimental Study of an Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor Treating Domestic Wastewater. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, v.9, 2011.

LIU, Y. H.; He, Y. L.; Yang, S. C.; Li, Y. Z. The settling characteristics and mean settling velocity of granular sludge in upflow anaerobic sludge blanket (UASB)-like reactors. **Biotechnology letters**, v. 28, n. 20, p. 1673-1678, 2006.

LIU, J.; WANG, Y.; WAITE, T. D.; LESLIE, G. Saw-tooth spacer membrane filtration: Hydrodynamic investigation by PIV and filtration experiment validation. **Chemical Engineering and Processing**, v. 91, p. 23-34, 2015.

LUN, C.K.K.; SAVAGE, S.B.; JEFFREY, D.J.; CHEPURNIY, N. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flow field. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 140, p. 223–256, 1984.

LUNDBERG, Joachim; HALVORSEN, Britt M. A review of some existing drag models describing the interaction between phases in a bubbling fluidized bed. In: **Proc. 49th Scand. Conf. Simulation and Modeling, Oslo University College, Oslo, Norway**. 2008. p. 7-8.

LUO, H. P.; DAHHAN, M. H. A. Verification and Validation of CFD simulations for Local Flow Dynamics in a Draft Tube Airlift Bioreactor. **Chemical Engineering Science**, v. 66, p. 907-923, 2011.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: LTC, 2004. 453 p.

MARINI, F. **Simulação de um leito fluidizado aplicando a técnica CFD baseada na teoria cinética do escoamento granular**. 2008. 75 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, 2008.

MAURINA, G. Z. ; ROSA, L. M. ; BEAL, L. L. ; TORRES, A. P. ; SOUSA, M. P. Numerical Study of Different Inlet Configurations on the Fluid Dynamics of an Anaerobic Sequencing Batch Reactor. **Chemical Engineering Transactions**, v. 38, p. 127-132, 2014

MEI, R.; KLAUSNER, J. F. Shear Lift Force on Spherical Bubbles. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 15, p. 62-65, 1994.

MES, T.Z.D.; STAMS, A.J.M.; REITH, J. H.; ZEEMAN, G. Methane production by anaerobic digestion of wastewater and solid wastes. In: WIJFFELS, R. H.; BARTEN, H.; REITH, R. H. **Bio-methane & Bio-hydrogen: Status and Perspectives of Biological Methane and Hydrogen Production**. Holanda: Dutch Biological Hydrogen Foundation and the Netherlands Agency for Energy and the Environment. 2003. p. 58-95.

MICHELE, V., HEMPEL, D. C. Liquid flow and phase holdup — measurement and CFD modeling for two-and three-phase bubble columns. **Chemical Engineering Science**, v. 57, p. 1899 – 1908, 2002.

MORSI, S. A.; ALEXANDER A. J. An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 55, n.2, 1972.

PALADINO, E. E. **Estudo do escoamento multifásico em medidores de vazão do tipo pressão diferencial**. 2005. 263 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal de Santa Catarina, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2005.

PATANKAR, S.V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York: Hemisphere, 1980. 197 p.

POMPERMAYER, R.S.; JUNIOR, D. R. P. Estimativa do potencial brasileiro de produção de biogás através da biodigestão da vinhaça e comparação com outros energéticos. In: Encontro De Energia No Meio Rural, 3., 2000, Campinas. **Anais...** Campinas: Unicamp, 2000.

RAFFEL, M.; WILLERT, C. E.; WERELEY, S.; KOMPENHANS, J. **Particle Image Velocimetry**. Nova York: Springer, 1998. 253p.

RAMALHO, J.F.G.P.; AMARAL SOBRINHO, N.M.B. Metais pesados em solos cultivados com cana-de-açúcar pelo uso de resíduos agroindustriais. **Floresta e Ambiente**, v. 8, n. 1, p. 120-129. 2001.

RANADE, V. V. **Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering**. India: Academic Press, 2002. 452 p.

REN, T.T.; MU, Y.; NI, B. J.; YU, H. Q. Hydrodynamics of Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactors. **AIChE Journal**, v. 55, p. 516-528, 2009.

RICE, E. W.; BRIDGEWATER, L.; AMERICAN PUBLIC HEALTH ASSOCIATION; AMERICAN WATER WORKS ASSOCIATION; WATER ENVIRONMENT FEDERATION. **Standard methods for the examination of water and wastewater**. 22. ed. Washington, Estados Unidos: American Public Health Association, 2012. 1389 p.

RIZVI, H.; AHMAD, N.; ABBAS, F.; BUKHARI, I. H.; YASAR, A.; ALI, S.; YASMEEN, T.; RIAZ, M. Start-up of UASB Reactors Treating Municipal Wastewater and Effect of Temperature/Sludge age and Hydraulic Retention Time (HRT) on its Performance. **Arabian Journal of Chemistry**, v.8, n.6, p.780–786, nov. 2015.

ROACHE, P. J. Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies. **Journal of Fluids Engineering**, v.116, p. 405-413. 1994.

ROACHE, P. J. Verification of Codes and Calculations. **AIAA Journal**, v. 36 n. 5. p. 696 - 702. 1998

ROSA, E. S. **Escoamento Multifásico Isotérmico – Modelos de multifluidos e de mistura**. Porto Alegre – Bookman, 2012. 260 p.

RUTTITHIWAPANICH, T.; SONGKASIRI W.; RUENGLERTPANYAKUL, W. Identification of granular sludge wash-out origin insides as Upflow Industrial-scale biogas reactor by the three phase flow model. **IERI Procedia**. v. 5, p.245-251, 2013.

SAFLEY, L. M.; WESTERMAN, P. W. Performance of a Low Temperature Lagoon Digester. **Bioresource Technology**, v. 41, p. 167–175, 1992.

SAFFMAN, P.G. The lift on a small sphere in a slow shear flow. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 22, p. 385-400, 1965.

SAFFMAN, P.G. Corrigendum to ‘The lift on a small sphere in a slow shear flow’. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 31, p. 624, 1968

SAMSTAG, R. W.; DUCOSTE, J. J.; GRIBORIO, A.; NOPENS, I.; BATSTONE, D. J.; WICKS, J. D., SAUNDERS, S.; WICKLEIN, E. A.; KENNY, G.; LAURENT, J. CFD for

wastewater treatment: an overview. **Water Science and Technology**, v. 74, n. 3, p. 549-563, 2016.

SANTO, C. M.; DIONISIO, R.; CERQUEIRA, H.S.; SOUSA-AGUIAR, E. F.; MOR, M, D'AVILA, M. A. Three-Dimensional Gas-Liquid CFD Simulations in Cylindrical Bubble Columns. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, v. 5, 2007.

SCHILLER, L.; NAUMANN, Z. "Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftbereitung". **Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure**, v.77, p. 318-320. 1933.

SCHROEDER, A.; WILLERT, C. E. **Particle Image Velocimetry: New Developments and Recent Applications**. Göttingen: Springer-verlag, 2008. 513 p.

SILVA, J. L.; MORI, E. D.; SOCCOL, R.; D'ÁVILA, M. A.; MORI, M. Interphase Momentum Study in a Slurry Bubble Column. **Chemical Engineering Transactions**, v. 32, p. 1507-1512, 2013.

SILVA, W. P.; ALMEIDA, C. D. G. C.; ROLIM, M. M.; SILVA, E. F. F.; PEDROSA, E. M. R.; SILVA, V. G. R. Monitoramento da Salinidade de Águas Subterrâneas em Várzea Cultivada com Cana-de-Açúcar Fertirrigada com Vinhaça. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v.18, n.4, p.394–401. 2014

SIMCIK, M.; MOTA, A.; RUZICKA, M.C.; VICENTE, A.; TEIXEIRA, J. CFD simulation and experimental measurement of gas holdup and liquid interstitial velocity in internal loop airlift reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 66, p. 3268-3279, 2011.

SIMÕES, M. R. **Simulação Computacional de Escoamento Turbulento em Compressor Axial Utilizando Ferramenta de CFD**. 2009. 111 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia, Rio de Janeiro, 2009.

SOUZA, M. E. Criteria for the utilization, design and operation of UASB reactors. **Water science and technology**, v.18, n. 12, p. 55-69.1986.

SOUZA, M. E.; GARCIA, A. D. Utilização de digestores anaeróbios de fluxo ascendente para o tratamento de vinhoto. **Revista DAE**, n. 145, p. 200-201.1986.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. J. Computer Simulation of Bubbles in a Fluidized Bed. In: Fluidization and Fluid Particle Systems: Fundamentals and Applications. **Anais... AIChE Symposium Series**, v.85, n.70, p. 22-31. 1989.

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T. J. **MFIX Documentation: Volume 1, Theory Guide**. Morgantown: U.S. Department of Energy, 1993. 82 p.

SZYMANSKI, M. S. E.; BALBINOT R.; SCHIRMER, W. N. Biodigestão anaeróbia da vinhaça: aproveitamento energético do biogás e obtenção de créditos de carbono – estudo de caso. **Semina: Ciências Agrárias**, Londrina, v. 31, n. 4, p. 901-912, out./dez. 2010.

THOMPSON, J.F. A reflection on grid generation in the 90s: trends, needs and influences. In: International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations, 5. 1996. Mississippi. **Anais...** Mississippi: Mississippi State University, Abril 1996.

USEPA – UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY.
Multimedia technical support document for the ethanol-for-fuel industry: EPA 440/1-86/093. Washington, DC, USA: Office of the Water Regulations and Standards, USEPA.1986.

VAN HAANDELL, A.C.; LETTINGA, G. **Tratamento Anaeróbio de Esgotos.** 3.ed. Campina Grande: Editora ABES, 1994. 240 p.

VIANA, A.B. **Tratamento Anaeróbico de Vinhaça em Reator UASB Operado em Temperatura na Faixa Termofílica (55°C) e submetido ao aumento progressivo de Carga Orgânica.** 2006. 88 f. Dissertação (Mestrado em Hidráulica e Saneamento) - Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006.

WADELL, H. Volume, shape and roundness of quartz particles. **The Journal of Geology**, v.43, p. 250-280, 1935.

WANG, X.; JIA, X.; WEN, J. Transient CFD modeling of toluene waste gas biodegradation in a gas–liquid–solid three-phase airlift loop reactor by immobilized *Pseudomonas putida*. **Chemical Engineering Journal**, v. 172, p. 735-745, 2011.

WANG, Y.; ZHANG, Y.; WANG, J.; MENG, L. Effects of volatile fatty acid concentrations on methane yield and methanogenic bacteria. **Biomass and Bioenergy**, v. 33, p. 848-853, 2009.

WEN, C.Y.; YU, Y. H. Mechanics of Fluidization. **Chemical Engineering Progress Symposium Series. Series**, v. 62, p. 100-111, 1966.

WIJFFELS, R. H.; BARTEN, H.; REITH, R. H. **Bio-methane & Bio-hydrogen: Status and Perspectives of Biological Methane and Hydrogen Production.** Holanda: Dutch Biological Hydrogen Foundation and the Netherlands Agency for Energy and the Environment. 2003.165p.

WINKLER, M.K.H.; BASSIN, J.P.; KLEEREBEZEM, R.; VAN DER LANS, R.G.J.M.; VAN LOOSDRECHT, M.C.M. Temperature and salt effects on settling velocity in granular sludge technology. **Water Research**, v. 46. p. 5445 - 5451. 2016.

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.

XIAO, F.; LAM, K.M.; LI, X.Y.; ZHONG, R.S.; ZHANG, X.H. PIV characterization of flocculation dynamics and floc structure in water treatment. **Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects**, v. 379, p. 27-35, 2010.

XIAO, F.; LAM, K. M.; LI, X.; Investigation and visualization of internal flow through particle aggregates and microbial flocs using particle image velocimetry. **Journal of colloid and interface science**, v. 397, p. 163-168. 2013.

YADVIKA ; SANTOS H.; SREEKRISHNAN, T.R.; KOHLI S.; RANA, V. Enhancement of Biogas Production From Solid Substrates Using Different Techniques — a Review. **Bioresource Technology**, v. 95, p. 1–10, 2004.

YU, L.; MA, J.; FREAR, C.; ZHAO, Q.; DILLON, R.; LI, X.; CHEN, S. Multiphase modeling of settling and suspension in anaerobic digester. **Applied Energy**, v.111, p.28–39. 2013.

ZHONG, R.; XIAO, F.; LI, X.; CAI, Z. Effects of humic acid on physical and hydrodynamic properties of kaolin flocs by particle image velocimetry. **Water Research**, v. 45, pp. 3381-3990, 2011.

APÊNDICES

APÊNDICE A – PUBLICAÇÕES NÃO APRESENTADAS NOS RESULTADOS

STUDY OF DIFFERENT FORMS OF GAS INLET AND DISTRIBUTION IN UASB REACTORS FOR THE CFD SIMULATION AND PIV VALIDATION

C. BASTIANI¹, L.L. BEAL¹, J.L.ALBA¹, A.P.R.TORRES², M.P.SOUZA²

¹ Universidade de Caxias do Sul, Laboratório de Tecnologia Ambiental, Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciências Ambientais

² Centro de Pesquisa e Desenvolvimento Leopoldo Américo Miguez de Mello, Petrobras

E-mail para contato: camiladbastiani@gmail.com

RESUMO – *Computational Fluid Dynamics (CFD) applied to the study of wastewater treatment processes is a tool that is being explored in order to optimize the reactor's configuration. This study aimed to find the best configuration to mimic the effect of the biogas produced in UASB bioreactors, in order to validate CFD models using PIV (Particle Image Velocimeter) techniques. For this purpose three different configurations of gas inlet were simulated using the software Fluent. The simulations were carried out in a two phase (gas-liquid), laminar flow model, using eulerian-eulerian approach and two different geometries. In the first geometry the gas inlet was placed at the top of a liquid distribution system. Two configurations were simulated in the second geometry: the gas being fed through the same entrance of the liquid and the gas inlet through concentric rings placed at the bottom of the reactor. The velocity profiles showed that the option that uses concentric rings at the bottom was the best option, once it creates the best mixing conditions.*

1. INTRODUCTION

The equations to model the behavior of fluids in different environments have been described as results of experiments that are conducted by observation and

research, since mankind has started to study the fluids dynamics. One of the most relevant mathematical equations studied and written about the mechanics of fluids and the behavior of fluids movement are the Euler equations. In the nineteenth century with the deduction of the Navier-Stokes equations it became possible the modeling of compressible or incompressible fluids, turbulent or laminar flows with better accuracy. The difficulty to solve the Navier-Stoke and others groups of equations has been reduced since the advent and development of the computer and its processing capacity. Computational Fluid Dynamics (CFD) emerges as a third alternative to the study of the mechanics of fluids, through the use of computers to solve equations related to mass, energy and momentum transfer. Nowadays with faster computers and large processing capacity and storage, the simulations are increasingly closer to the real situation of the object of study. In this paper the object to be studied is an Up-flow Anaerobic Sludge Blanket (UASB).

The UASB is one of the kinds of reactor most used worldwide in the treatment of wastewater. It consists of a sludge bed in its bottom where the anaerobic process takes place and at the top there is a three-phase separator where the mixture gas-liquid-solid is separated. The process of removal of chemical oxygen demand (COD) and the energetic efficiency in the UASB reactor is due to two main processes: anaerobic microbiological processes and hydrodynamics. According to the study of Ren et al. (2009) the hydrodynamics of an UASB reactor can be described as a multi-CSTR reactor setup (continuous stirred-tank reactor) in series. In this case the hydraulic retention time (HRT) can be used to describe deviations from a CSTR or a plug-flow reactor (PFR).

However the mixing can be considered homogeneous inside these reactors. The dispersal coefficients vary at different heights of the reactor with a higher speed at the bottom of the reactor. At the top of the reactor the up flow velocity is lower. As well as the tendency of dispersion should decrease along the axis of the UASB, the size of the multi-CSTR should increase significantly. Because of the complexity of the hydrodynamic behavior in an UASB, there are not many studies of the hydrodynamics inside the reactor. A comparison of the hydrodynamics of the UASB with multi-CSTR or PFR reactor can be useful in order to compare and model validation, but is not the only approach that can be followed.

Considering that the mixing in an UASB reactor is a result of the liquid velocity, the biogas production as well as the granule characteristics, it is important to be careful when simulating these reactors in cases where the model validation will not be performed using an actual biogas producing reactor, but a model that does not produce biogas. In these cases it must be chosen a suitable way to mimic the production of biogas, and its effect on the reactor hydrodynamic both in the computational and in the experimental model. Thus, the aim of this study is to analyze with the CFD aid the decision about what is the best alternative to simulate the conditions of generation of gas and how it affects the hydrodynamics inside the UASB. In order to reach that objective, three reactors with the same operational conditions were simulated each one with a different gas inlet configuration.

2. MATERIAL AND METHODS

2.1 Experimental Reactor

The reactor where the simulations were carried out is a 140 L, pilot scale, UASB reactor, designed in order to be able to treat vinasse with a Chemical Oxygen Demand (COD) between 20,000 to 60,000 mgO₂.L⁻¹, which is the typical range of COD for this wastewater (Salomon and Lora, 2005). The design followed the method described in Souza (1986). The organic load was considered as the design parameter, and so the project was designed for two volumetric organic loading values as it was presented by Souza and Garcia (1986): 9.4 and 16.2 kgCOD.m⁻³.d⁻¹. Some characteristics of the UASB are shown in Table 1. The reactor is a 2.12 m high cylinder, with a diameter of 0.3 m. There are a settler, a gas deflector, a gas collector and weirs on the top of it. It was built in acrylic in order to allow further validations of the CFD model using PIV techniques. The Figure 1 shows the reactor and its dimensions.

Table 1: UASB calculated characteristics

	Result	unit
Flow Upward velocity	2.525e ⁻⁵	m.s ⁻¹
Biogas production	0.04148	m ³ .h ⁻¹
HRT	22.22	h

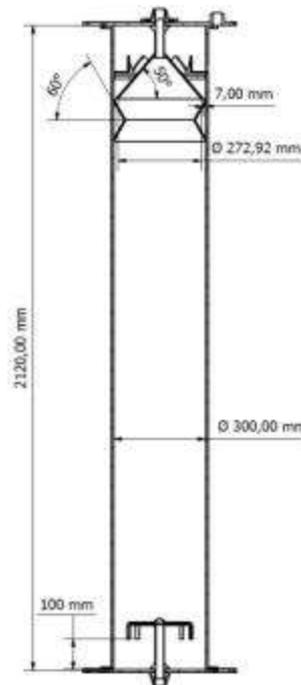


Figure 1: UASB reactor dimensions

2.2 Geometry and Mesh

The following simplifications were considered:

- the weirs and the very top of the reactor were not simulated, thus allowing a construction of a better mesh;
- it was considered that the reactor is symmetric, so it was drawn only half of it.

The software Inventor was used to draw the 3D geometry that is shown in Figure 2b. Geometry 1 (Figure 2a) has a gas inlet placed on the top of the effluent distributor and was used for simulation **a**. In Geometry 2 (Figure 2c) the gas inlets are concentric rings placed at the bottom of the reactor. It was used for simulations **b** where the gas is fed together with the liquid through the gas inlets and for simulation **c** where the gas is fed through the concentric rings at the bottom.

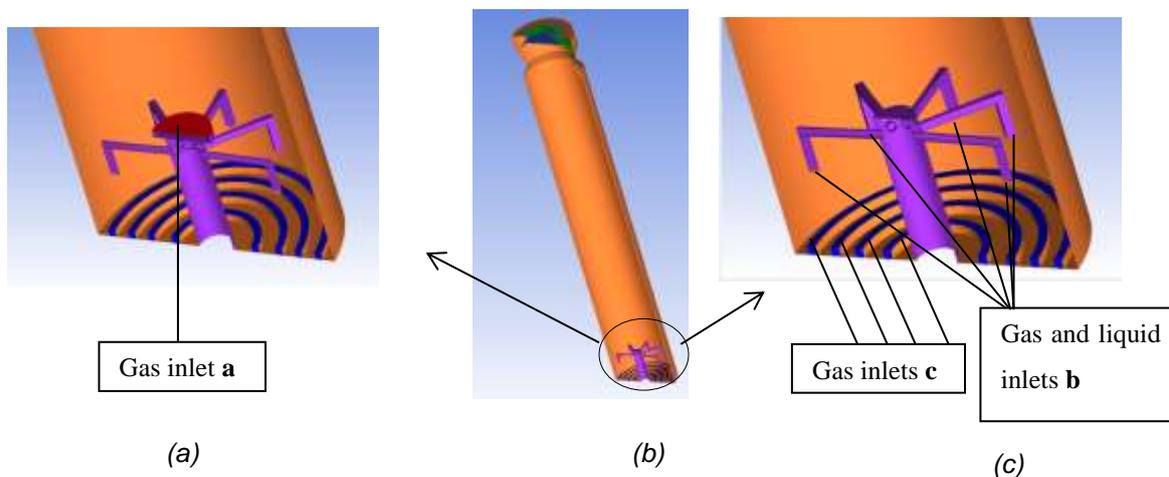


Figure 2: Geometry and inlets details.

The software used for meshing the reactor was ICEM CFD 16.2, from Ansys. It was used the blocking strategy for hexa meshing the geometry. Two meshes were built, in order to apply the three different options of gas inlet. There are 329.242 cells in Mesh 1 (Figure 3a) and 320.196 cells in Mesh 2 (Figure 3b).

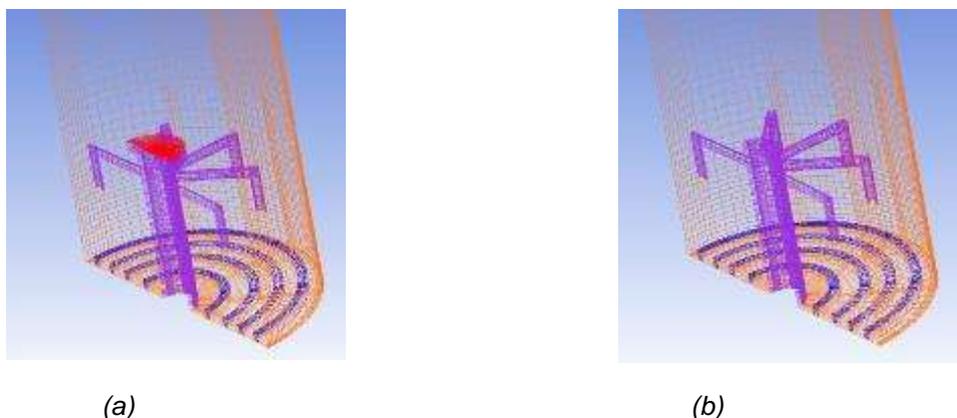


Figure 3: Inlet details of the mesh.

2.3 CFD Modeling

The software used for the simulations was Fluent, from Ansys. Three simulations with different gas inlet configurations were carried out along this study using the same physical model. The hydrodynamic of a multiphase gas-liquid flow was simulated using an Eulerian-Eulerian approach, it considers the flow as two interpenetrating continuous phases, and incorporates the concept of phasic volume fraction ($\alpha_{i,j}$) which represents the space occupied by each phase. The mass and

momentum conservation laws are satisfied for each phase individually in this model.

The volume of phase q (V_q) is defined by Equation 1 (ANSYS, 2015):

$$V_q = \int_V \alpha_q dV \quad (1)$$

Where:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_q = 1 \quad (2)$$

The movement of each phase was governed by the moment conservation equation. Along this study the mass and energy transfer among the phases was neglected. The Fluid-Fluid moment equation solved by Fluent is the following:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = & -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \overline{\overline{\tau}_q} + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \\ & + \sum_{p=1}^n (K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) + m_{pq} \vec{v}_{pq} - m_{qp} \vec{v}_{qp}) + (\overline{F}_q + \overline{F_{lift,q}} + \overline{F_{vm,q}} + \\ & \overline{F_{td,q}}) \end{aligned} \quad (3)$$

Considering two fluid phases q and p, and that \vec{g} is the acceleration due gravity, p is the pressure, $\overline{\overline{\tau}_q}$ is the phase stress-strain tensor, \vec{v}_{pq} and \vec{v}_{qp} are the interphase velocities, m_{pq} is the mass flow, K_{pq} is the interphase momentum exchange coefficient, \overline{F}_q is an external body force, $\overline{F_{lift,q}}$ is a lift force, $\overline{F_{vm,q}}$ is a virtual mass force and $\overline{F_{td,q}}$ is a turbulent dispersion force (ANSYS, 2015).

For this modeling, only the influence of drag force was considered. According to Lima (2011) this is the force that most affects the interfacial transference models. For this analysis the considerations made are described below:

- a) Laminar and transient regime;
- b) Two phase flow being formed by a continuous phase (liquid) and a dispersed phase biogas;
- c) The biogas produced is a mixture of 70% methane and 30% carbon dioxide;
- d) The interfacial momentum transfer between phases was based only on the drag force;
- e) The Eulerian model from Fluent was used as the Multiphase Model;
- f) The drag force was modeled using the Schiller-Naumann model, once this is a default model accepted for general use for all fluid-fluid pairs of

phases.

It is shown in the Table 2 the simulations and the volumetric fraction of gas at the gas feeding system in each case. The liquid velocity used was 0.00704 m.s^{-1} and the gas velocity 0.00163 m.s^{-1} in the three simulations. The outlet condition was Pressure Outlet, and it was considered only one outlet in order to simplify the simulation. In case "a", the biogas is fed through a circular shaped distributor which is positioned above the feed distribution system with upward flow. In case "b" biogas is fed together with the liquid inlet and flows downward. While in case "c" gas is fed through concentric rings at the bottom of the reactor, below the liquid inlet and with upward flow. The simulations were performed using a symmetric section of the UASB. With these simulations it was possible to analyze the hydrodynamics, preferential pathways of biogas and also dead zones that may exist inside the UASB reactor.

Table 2: Simulations and gas volume fraction

Mesh	Simulation	Gas Volumetric Fraction (Inlet)
1	a	1
2	b	0.1
2	c	1

The gas properties were calculated using the weighted average of the methane and carbon dioxide properties, and literature data. The physical properties of the fluids used in the simulations are summarized in Table 3.

Table 3: Physical properties of fluids

Property	Continuous phase (liquid)	Disperse phase (biogas)
Density (ρ) (kg.m^{-3})	998,2	0,869
Dinamic viscosity (μ) ($\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$)	0,001003	$1,18\text{e}^{-5}$
Diameter (d) (m)	-	0,003

S

ource: CO_2 and CH_4 data from KENT, 2012

An auto time stepping method was used, and the convergence criteria adopted was 10^{-4} for the maximum value of the residue. In the beginning, monophasic simulations were carried out for each case, adopting a residual value of 10^{-12} as convergence criteria, and then the two phase simulations were initialized using these data.

3. RESULTS AND DISCUSSION

In UASB reactors ideal mixture behavior is expected. It means that the gas should be uniformly distributed along the transverse section of the reactor. Aiming to have a good mixture preferential paths and dead zones should be avoided or reduced. Also, the gas-solid-liquid mixing is promoted by both, the movement caused for the up flow velocity of the liquid and the gas produced during the anaerobic digestion process. Both, liquid and biogas produced are responsible for the mixing, because the movement of them causes the movement of the biogranules. So, there will be a continuous movement between them where the Reynolds number will be a function of the mixing, it means, liquid upflow velocity, biogas upflow velocity and biogranule characteristics. Higher the mixture Reynolds number higher the mass transfer, since that the biogranule stress shear rate is not surpassed. In these conditions it is very important to represent properly the biogas production in the bioreactor. After the simulations it was possible to visualize the velocity profiles of the two phase flow inside the reactor as it is showed in Figure 4, a, b and c.

The simulation result for the case **a** indicates that when the gas is injected through a circular surface on the top of the wastewater distributor it creates a preferential pathway at the center of the reactor, thus the mixing is not favored in this configuration. In the simulation **b** it is considered that the gas inlet of the reactor takes place through the distributor, together with the liquid, at a volumetric fraction of 0.1. In this case it is possible to see that the gas follows some preferential pathways in the way towards the top of the reactor. However, the result presented in the simulation **c** does not show a profile where the flow follows a visible preferential pathway.

In the case **a** the gas goes straight to the top of the reactor, creating a single preferential pathway, thus leading to a difference in the mixing conditions in the radial direction. The larger is the radius poorer is the mixing, what is not admissible in a complete mixing system. As consequence of this effect, the gas Reynolds number gets higher once the transverse area occupied by the gas is smaller and the velocity is higher. Once the reactor performance depends on the mixing conditions, it is possible to say that its efficiency will be reduced in this configuration.

Even though the case **b** results shows an improvement when compared to case **a**, it is still possible to notice a significant amount of preferential pathways both for the liquid and for the gas.

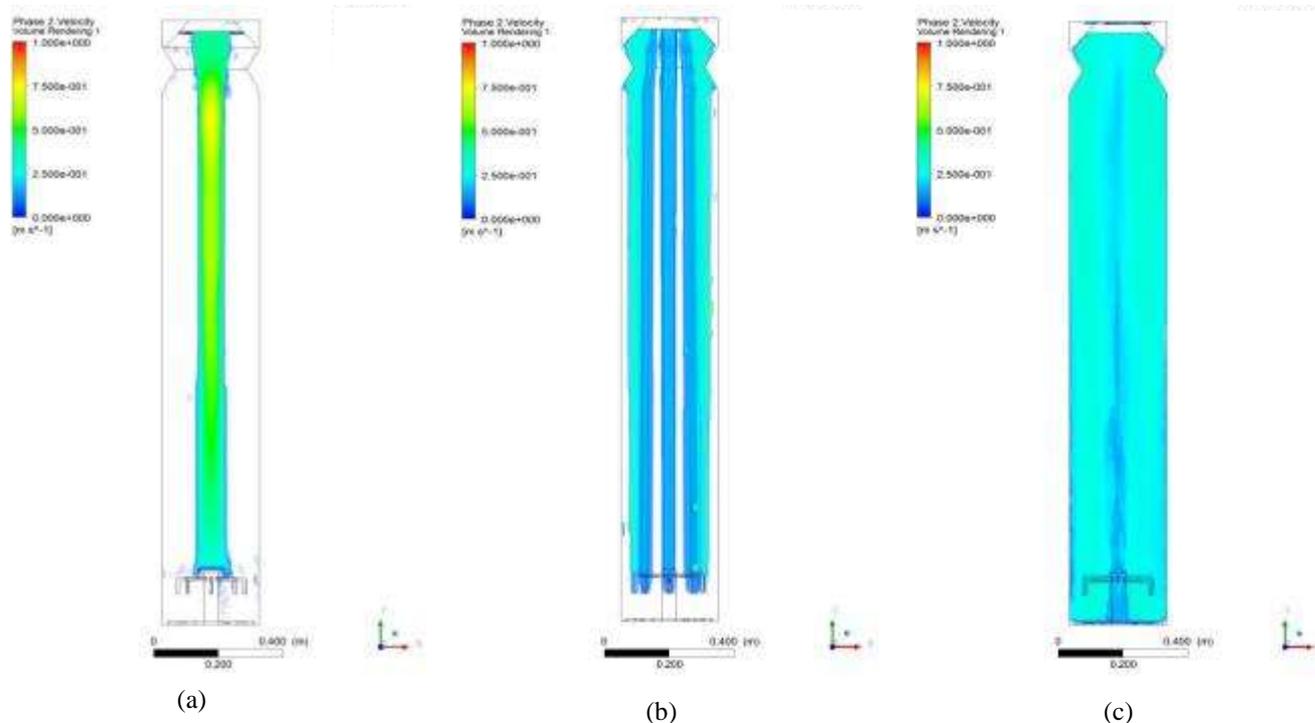


Figure 4: Velocity profiles.

Therefore, looking at the cases **a** and **b** it is possible to say that they do not represent what actually happens inside an UASB reactor. In particular, because the production of gas is uniform along the transverse section of the reactor, what does not happen in these two cases.

In the last case the mixing is more uniform, once the gas feeding is well distributed along the radial direction of the reactor, hence leading to a uniform Reynolds number for the mixing, once the transverse occupied by the gas area is larger and the gas velocity is slower.

Finally, analyzing the results it is clear that the best feeding biogas system is the one performed in the case **c**, because it represents better the biogas production along the bioreactor transverse section. In cases where there are high volumetric organic load of biodegradable COD in the reactor (as in the vinasse wastewater) the mixture is mainly due to the biogas produced rather than due the liquid input. That happens because in those cases the hydraulic residence time is higher, thus the

upflow velocity is lower and there is more gas being produced due to the higher availability of organic load.

In conclusion, it is possible to say after this study that for further researches that aim to assess the hydrodynamics of UASB reactor using laboratory or pilot scale reactors not producing biogas it is recommended to simulate the biogas production using gas inlet through concentric rings at the bottom of the bioreactor.

6. REFERENCES

ANSYS. Fluent 16.2 Theory Guide . 2015

KENT, J.A. Handbook of Industrial Chemistry and Biotechnology, Vol. 1, 12th edition, 2012, Sprinegr, USA, FL

LIMA, M. G. S.; NETO, S. R. F.; LIMA, A. G. B.; NUNES, F. C. B.; GOMES, L. A. Theoretical/Experimental Study of an Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor Treating Domestic Wastewater. *In. J. of Chem. Reactor Eng.*, v. 9, n.1. 2011.

REN, T.T.; MU, Y.; NI, B.J.; YU, H.Q. Hydrodynamics of Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactors. *AIChE Journal*, v. 55, Fevereiro de 2009, pg. 516-528.

SALOMON, K. R., LORA, E. E. S. Estimativa do Potencial de Geração de Energia Elétrica Para Diferentes Fontes de Biogás no Brasil. *Biomassa e Energia*, v. 2, n.1, p. 57 – 67, 2005.

SOUZA, M. E. Criteria for the utilization, design and operation of UASB reactors. *Water Sci. and Tech. J.* v.18, n. 12, p. 55-69.1986.

SOUZA, M. E. GARCIA, A. D. Utilização de digestores anaeróbios de fluxo ascendente para o tratamento de vinhoto. *Revista DAE*, n. 145, p. 200-201.1986

8

A Aplicação de Técnicas de Visualização de Fluxo por PIV na Otimização de Reatores para o Tratamento de Efluentes – Uma Revisão da Literatura Científica

*Nicole Mendonça de Freitas
Juliano Rodrigues Gimenez
Camila D’Bastiani*

8.1 INTRODUÇÃO

A visualização de fluxos em reatores para o tratamento de efluentes tem se tornado cada vez mais importante e necessária, com o foco na otimização dos processos, não somente sob o ponto de vista bioquímico, mas também físico. Com isto, a viabilização e aplicação de técnicas que sejam adequadas para tal fim têm sido uma busca relativamente recente no meio científico.

Embora existam diversas formas de visualizar partículas em fluxos, uma técnica relativamente nova vem adquirindo espaço nas pesquisas científicas nessa área: a velocimetria de partículas por imagens, também conhe-

cida como *Particle Image Velocimetry*, ou PIV. Essa técnica teve origem no início da década de 1980, onde, segundo Raffel *et alii* (1998), foram iniciadas as pesquisas e desenvolvidos os conceitos primários. Embora ainda pouco conhecida no Brasil, a velocimetria de partículas por imagem teve uma rápida evolução, que, conforme Grant (1997), se deu devido a pesquisas feitas em paralelo com técnicas de medição óptica, processamento de imagens, visualização de fluxo, entre outros.

Atualmente é possível perceber uma maior aceitação desta tecnologia na área científica, já que existem diversos artigos sobre esse assunto. As aplicações do PIV são diversas, incluindo áreas da biologia, da medicina, até as engenharias. No atual momento, a velocimetria de partículas por imagem é mais aplicada à mecânica dos fluidos em investigações de fluxos de ar e água. Estudos na área de visualização de fluxo afirmam que a velocimetria de partículas por imagem está cada vez mais abrangente, tendo uma vasta área de aplicações. Schroeder e Willert (2008) citam alguns campos de aplicação como biomedicina, indústria automobilística, aerodinâmica, fluxos supersônicos, aplicação naval, entre outros. Tem-se conhecimento também de aplicações na área ambiental, com foco no tratamento de efluentes, considerando-se o rápido crescimento da população que acaba por elevar o consumo de água e, conseqüentemente, aumenta a geração de efluentes. Assim, por mais que os processos e tecnologias para o tratamento de efluentes estejam evoluindo, é preciso atualizar-se constantemente, de forma a estar um passo à frente, podendo evitar possíveis impactos, ao invés de remediar os que já foram causados.

Embora a tecnologia de PIV seja de grande importância, ainda é considerada complexa, tanto em termos de aquisição quanto de tratamento e interpretação dos resultados. Basicamente, o equipamento compreende um conjunto de computador, câmeras fotográficas e luz laser, que devem trabalhar em conjunto para a realização de coleta de dados (figura 8.1). O princípio básico desta técnica se dá pelo uso de um plano de luz gerado através do laser, que vai incidir sobre partículas traçadoras inseridas no meio líquido em análise. As câmeras fotográficas auxiliam na tomada de imagens sequenciais que, juntamente com um *software* específico, permitem que linhas de fluxo do escoamento sejam traçadas para posterior análise de campos de velocidade, turbulência, vorticidade dentre outros fatores associados.

Este tipo de tecnologia fornece informações precisas das estruturas espaciais de um fluxo. Acaba por ser uma técnica única onde é possível capturar vórtices e estruturas de regiões instáveis do fluxo, onde antes seria muito difícil ou até impossível extrair informações relevantes.

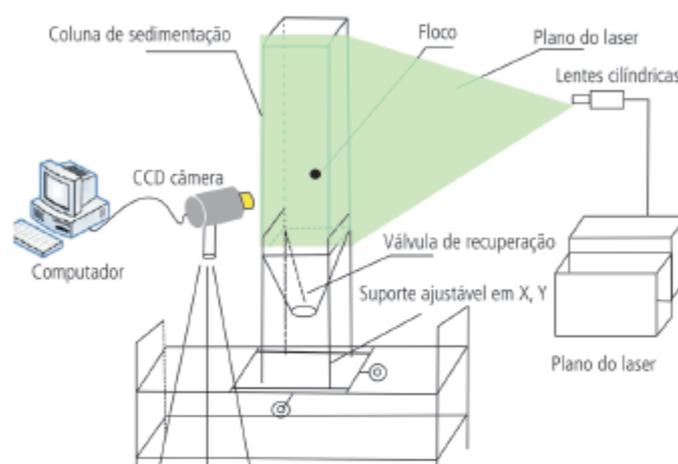


FIGURA 8.1 Exemplo de um esquema de montagem de um PIV aplicado à visualização de fluxos em uma coluna de sedimentação

FONTE: Xiao; Lam; Li (2013).

8.2 TECNOLOGIAS EXISTENTES

Por ser uma tecnologia recente, poucos são os fornecedores de equipamentos de PIV no mundo. No entanto, é possível destacar algumas importantes companhias que fabricam e comercializam o equipamento. A Dantec Dynamics é uma companhia da Dinamarca que fornece o equipamento e seus diferentes modelos. A empresa surgiu por volta de 1947 e começou a se especializar na área de medição de fluxos por volta de 1950, atualmente sua principal área de atuação é no desenvolvimento e vendas de sistemas integrados de medição para diagnósticos e pesquisa em fluidodinâmica, mecânica dos sólidos, microfluidos, tecnologia de combustão, entre outros (DANTEC DYNAMICS, 2015). Outra empresa bastante conhecida neste ramo é a Lavisvision, que foi fundada em 1989 na Alemanha, mas que atualmente possui filiais nos Estados Unidos da América, na França, na Inglaterra e em Singapura, e representantes comerciais em diversos países, incluindo o Brasil, atualmente representado pela Quantum Tech, em São Paulo (LAVISION, 2015). Embora essas duas empresas sejam bastante conhecidas, há ainda a TSI Inc., também conhecida por sua patente chamada Micro PIV, a qual é utilizada para fazer

medições em campos de velocidade micrométricos em fluxos com resolução espacial maior do que previamente possível (TSI INC., 2015). Também existe a Oxford Lasers, que surgiu em 1977 como uma das primeiras na Universidade de Oxford, na Inglaterra, a trabalhar de forma privada com tecnologia de laser e suas aplicações (Oxford Lasers, 2015).

De forma geral, os fornecedores oferecem o equipamento completo, em seu conjunto câmera-laser-computador-software (figura 8.2). No entanto, vale ressaltar que este tipo de tecnologia possui variações, onde é possível fazer análises da evolução temporal de cada ponto, ou medir campos de velocidade de partículas micrométricas, ou dos tipos: tomográfico, endoscópico e termográfico. As possibilidades são diversas e as aplicações seguem essa linha. Para avaliações em duas dimensões (2D) utiliza-se apenas uma câmera, sendo assim possível obter velocidades no plano XY. Quando da utilização de duas câmeras é possível se obter velocidades no campo XYZ, sendo essa opção denominada *stereo* PIV. A utilização de quatro câmeras possibilita a captura de velocidades em um volume XYZ, sendo essa técnica denominada PIV tomográfico. De todas essas opções, a mais utilizada no momento é a versão conhecida como *stereo* PIV, onde é feita uma análise de fluxo de campo estereoscópico, o que permite a reconstrução do deslocamento real da partícula dentro da área de medição.



FIGURA 8.2 Exemplo de um Stereo PIV em seu conjunto câmera-laser-computador.
FONTE: TSI Incorporated, (2015).

8.3 PIV APLICADO AO TRATAMENTO DE EFLUENTES

Levando em consideração que a geração de efluentes aumenta proporcionalmente com o crescimento populacional, é necessário avaliar e estudar novas opções tecnológicas que possam facilitar e auxiliar na solução de problemas decorrentes, especialmente os relacionados com a otimização dos processos de tratamento de efluentes. Dentre as atuais tecnologias existentes aplicadas à otimização de reatores para o tratamento de efluentes, vale ressaltar que a velocimetria de partículas por imagem (PIV) vem adquirindo espaço, pois, embora ainda seja difícil encontrar pesquisas nessa linha, alguns estudos já começam a surgir para mostrar resultados nesse ramo.

A técnica de PIV, quando aplicada a processos de tratamento de efluentes, auxilia na análise do comportamento hidrodinâmico, buscando estabelecer condições que venham favorecer tais processos. Assim, através desse equipamento é possível visualizar os fluxos internos que ocorrem durante as etapas de um tratamento e avaliar o que pode ser feito para sua otimização. As linhas de pesquisa ora encontradas na literatura científica têm sido direcionadas para processos de sedimentação, filtração por membranas, floculação e processos envolvendo lodos ativados.

Isso pode ser relacionado ao fato de que tais processos possuem micropartículas que devem se unir, formar flocos e sedimentar em condições ideais, e que, quando essas condições não são atendidas, todo o processo de tratamento é afetado, podendo não ocorrer de forma efetiva. Um processo de floculação, por exemplo, necessita condições ideais para que o floco possa ser formado. Assim, ao se projetar essas condições em um reator de laboratório e avaliar por meio de um equipamento PIV o que ocorre internamente em diferentes escalas, é possível analisar o momento em que as partículas se unem para formar o floco, analisar qual a velocidade ideal e quais são os fatores que podem desequilibrar o meio, além de outros fatores.

Por mais simples que possa parecer, ter conhecimento de tais condições pode permitir a futura otimização de processos de tratamento de efluentes e pode vir a responder algumas dúvidas ainda existentes sobre os mesmos. Dessa forma, as pesquisas nessa área vêm para auxiliar nessa busca por conhecimento de forma a projetar soluções para alguns problemas ainda existentes em processos desse tipo.

Para contribuir com futuros estudos nesta linha, procedeu-se uma busca sistematizada da literatura científica, acerca da aplicação de técnicas de

visualização de fluxo com o PIV, aplicadas na otimização de reatores destinados ao tratamento de efluentes. Essa busca foi realizada através do Portal de Periódicos da Capes, considerando um período de 10 anos, e com as seguintes palavras-chave: visualização de fluxo, PIV e tratamento de efluentes. Sob estes critérios, foi encontrado um total de seis artigos, conforme são explanados a seguir.

8.3.1 Publicações Científicas com a Aplicação de PIV ao Tratamento de Efluentes

Considerando os critérios de busca, encontrou-se um total de seis artigos referentes ao tema da pesquisa. Os títulos dos trabalhos encontrados foram os seguintes:

1. Spatial and temporal evolution of floc size distribution in a stirred square tank investigated using PIV and image analysis (KILANDER; BLOMSTRÖM; RASMUSON, 2006);
2. An experimental study of low concentration sludge settling velocity under turbulent condition (GUO *et alii*, 2009);
3. Effects of humic acid on physical and hydrodynamic properties of kaolin flocs by particle image velocimetry (ZHONG *et alii*, 2011);
4. Saw-tooth spacer for membrane filtration: Hydrodynamic investigation by PIV and filtration experiment validation (LIU *et alii*, 2015);
5. Investigation and visualization of internal flow through particle aggregates and microbial flocs using particle image velocimetry (XIAO; LAM; LI, 2013); e
6. PIV characterisation of flocculation dynamics and floc structure in water treatment (XIAO *et alii*, 2010).

Os artigos encontrados apresentam métodos e resultados de pesquisas utilizando técnicas de PIV aplicadas ao tratamento de efluentes, mais especificamente relacionadas com processos de sedimentação, filtração por membranas, floculação e processos envolvendo lodos ativados.

Os autores Kilander *et alii* (2006) apresentam a evolução do tamanho dos flocos em uma distribuição temporal e espacial em um tanque de base quadrada utilizando-se do PIV como um método não invasivo na busca por dados sobre a velocidade dos flocos, e a definição do seu tamanho. Dessa

forma, os autores puderam expor aplicações do equipamento, mostrando que tal tecnologia pode avaliar como se dá a formação de flocos em um processo de coagulação e floculação, permitindo inserir variáveis que permitam avaliar o ponto máximo que esse tipo de processo conseguiria suportar sem que haja impactos negativos no mesmo.

Muitos processos de tratamento encontram dificuldades para formar um bom floco que vá suportar os processos seguintes de forma efetiva. Pode-se dizer que em muitos casos o floco formado é de tamanho irregular ou é frágil demais, fazendo com que, ao invés de sedimentar, ele flote, ou com que ele se quebre e prejudique todo o tratamento, já que não há formação de flocos para sedimentação e/ou flotação.

Lisha Guo *et alii* (2009) utilizaram a velocimetria por imagem para analisar a sedimentação de partículas de lodo ativado sob condições turbulentas (figura 8.3). Os autores concluíram que, quando em condições de intensa turbulência, a influência do diâmetro dos flocos sobre a velocidade de sedimentação diminui. Tal estudo também permitiu verificar que a taxa de agregação e a taxa de quebra são dependentes da turbulência, do índice do volume de lodo, da velocidade de sedimentação, entre outros; e que para tais parâmetros é preciso fazer medições de forma direta, ao invés de usar funções e programas para isso. Dessa forma, ao se analisar um processo de sedimentação, é possível observar que, quando a velocidade está muito alta, o floco tende a quebrar e então o tratamento não funciona de forma eficaz, ou seja, nessa etapa, com uma alta turbulência, o diâmetro do floco pouco vai interferir, já que a agitação intensa da água irá quebrar o floco formado.

Da mesma forma, Runsheng Zhong *et alii* (2011) investigaram as mudanças estruturais durante a formação dos flocos e as influências que o ácido húmico tem com relação ao tamanho, à velocidade de sedimentação e à estrutura do floco. Os autores afirmam que o crescimento e a quebra de flocos devido ao cisalhamento do fluido podem ser visualizados em processos de coagulação e sedimentação em tratamentos de águas, já que grande parte dos processos de coagulação são realizados em misturas com agitação rápida, devendo sempre estar próximas de condições de turbulência a fim de garantir o crescimento acelerado de flocos através da mistura e da alta frequência de colisão entre as partículas. Nesta pesquisa, a distribuição do tamanho dos flocos durante os processos de crescimento, quebra e reconstituição foi feita utilizando o PIV. Cada floco teve sua velocidade de sedimentação medida através do PIV, objetivando gravar simultaneamente o tempo

de sedimentação e a distância para o floco atingir 25 cm na parte mais baixa da coluna de sedimentação. Por fim, Runsheng Zhong *et alii* (2011) concluíram que a velocimetria de partículas por imagem configura-se como uma ferramenta não invasiva eficiente para ser utilizada no registro da evolução da distribuição do tamanho do floco e das mudanças durante os processos de crescimento, quebra e reconstituição do mesmo. Além disso, o PIV pode fornecer informações sobre a morfologia e as estruturas do tamanho do floco e das mudanças durante os processos citados anteriormente.

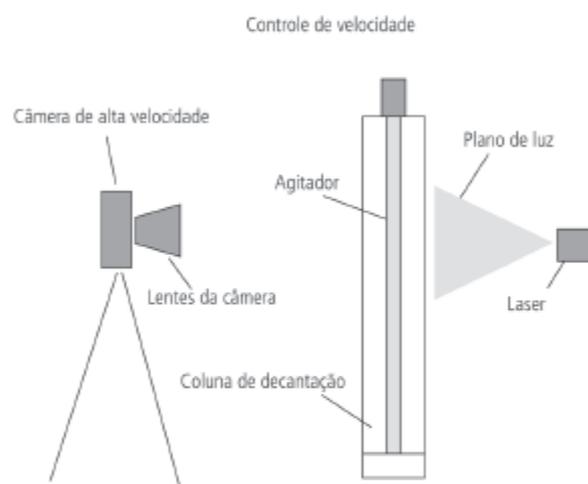


FIGURA 8.3 Representação esquemática da montagem de um PIV para tomada de imagens em uma coluna de sedimentação.

FONTE: Lisha Guo *et alii* (2009).

Liu *et alii* (2015) analisaram a necessidade de usar promotores de turbulência afim de amenizar o efeito de incrustação em membranas e aumentar a transferência de massa em um módulo de membranas. Assim, utilizando-se do PIV, a distribuição de velocidade em um canal estreito preenchido com espaçadores com filamentos cilíndricos foi investigada (figura 8.4). Os resultados obtidos foram comparados com cálculos numéricos, sendo que houve concordância entre os métodos. Além disso, foi observada a variação na direção da velocidade devido ao obstáculo proveniente do filamento e à injeção de bolhas. Os resultados foram analisados e os autores concluíram que, conforme a altura dos dentes do espaçador aumenta, o

tamanho das regiões de recirculação também aumenta. Propuseram então que o fluxo principal nas proximidades da superfície da membrana fosse intensificado, contribuindo para que houvesse melhor eficiência na filtração do modelo de membrana avaliada.

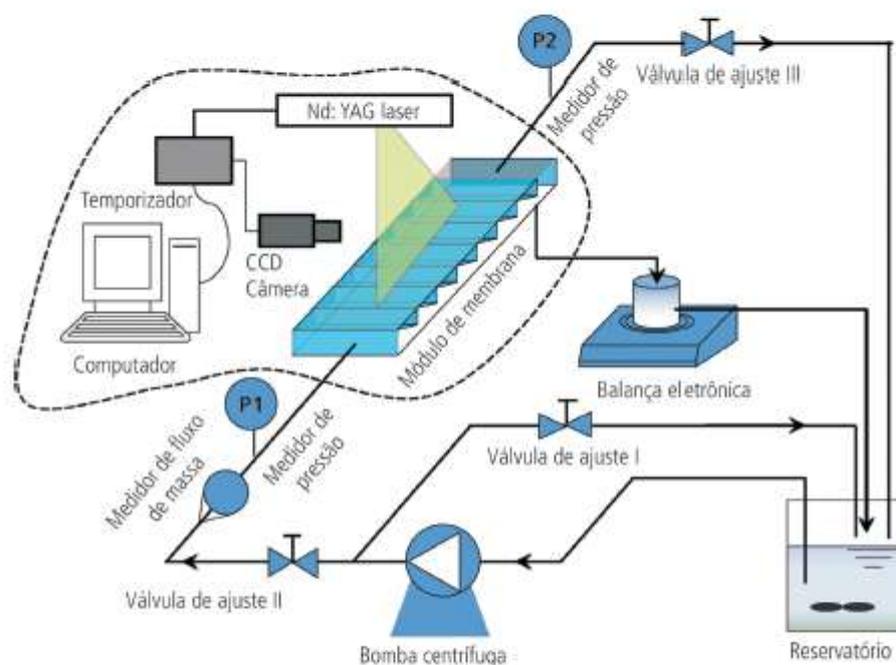


FIGURA 8.4 Representação esquemática do experimento.

FONTE: Liu *et alii* (2015).

No trabalho dos autores Xiao *et alii* (2013) é apresentada a técnica de velocimetria por imagem aplicada na investigação das propriedades hidrodinâmicas de grandes agregados de partículas floculadas, durante o processo de sedimentação da água tratada. As imagens obtidas usando o PIV foram analisadas a fim de detalhar o fluxo induzido pela queda das partículas. As linhas de fluxo geradas e examinadas (figura 8.5) promoveram provas experimentais diretas do fluxo interno de grandes agregados de partículas e flocos microbianos.



FIGURA 8.5 Determinação das linhas de fluxo através doPIV.

FONTE: Xiao *et alii* (2013)

A partir dessa imagem é possível analisar o caminho feito pelas partículas presentes na água em volta do floco formado pelo processo de floculação. Pode-se perceber que essas partículas seguem o que a teoria propõe, conforme representado pela figura 8.6. Dessa forma, pode-se dizer que através do PIV visualizaram-se fluxos de forma mais específica, podendo utilizar tais conclusões para otimizar os processos de floculação e sedimentação.

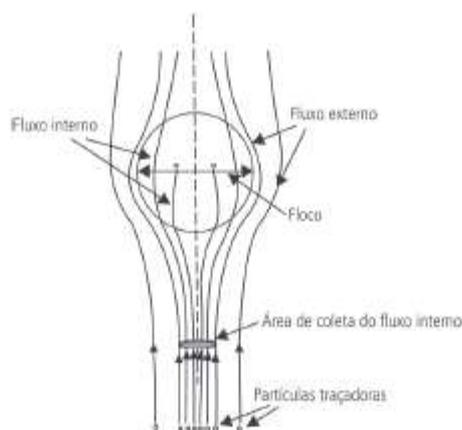


FIGURA 8.6 Representação da tendência das linhas de fluxo.

FONTE: Xiao *et alii* (2013).

Os autores Xiao *et alii* (2010) apresentam o PIV sendo aplicado na investigação de floculação para diferentes floculantes em diferentes amostras de

água. Agregando o PIV e a análise das imagens, a mudança na distribuição do tamanho das partículas pôde ser registrada (figura 8.7). O PIV foi usado para caracterizar os flocos de ácido húmico durante os processos de aglutinação, quebra e reconstrução (figura 8.8).

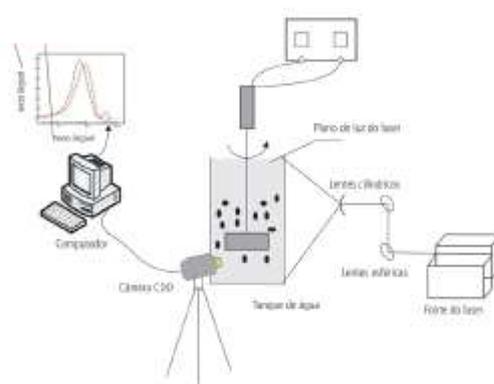


FIGURA 8.7 Diagrama esquemático do PIV com um sistema de análise de imagem.

FONTE: Xiao *et alii* (2010)

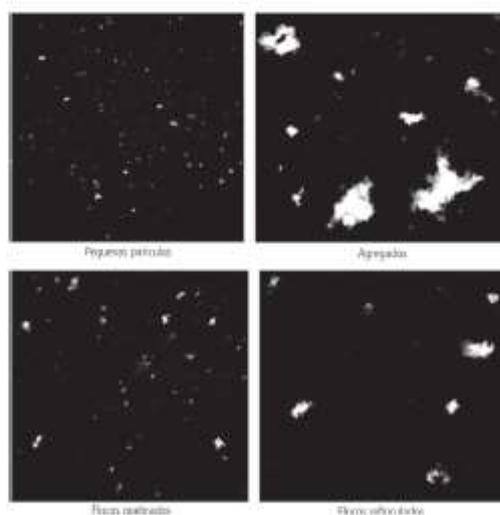


FIGURA 8.8 Exemplos de imagens do PIV durante o processo de aglutinação, quebra e reconstrução.

FONTE: Xiao *et alii* (2010).

Assim, os resultados do PIV mostraram uma formação contínua do floco e o crescimento nas amostras de água durante o processo de floculação química. Também mostraram que inicialmente os agregados têm uma ramificação, uma estrutura mais aberta que se torna mais compacta na presença de um cisalhamento mais forte. Um aumento na compactação do floco levaria a uma redução do tamanho do floco, o que explicaria o limite de reconstrução da maiorias dos flocos. É possível perceber que flocos quebrados têm maior dificuldade em formar estruturas mais resistentes, o que impede a formação de um bom floco para os processos seguintes à floculação.

8.4 CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

As pesquisas na área de velocimetria por imagem ainda estão sendo desenvolvidas no Brasil, e por ser um assunto que ainda está adquirindo espaço na área de fluidodinâmica computacional, isso faz com que a busca por dados nessa área tenha resultado em uma quantidade relativamente baixa de artigos publicados sobre o tema, destacando-se o fato ainda de que não foi possível encontrar nenhum artigo em língua portuguesa e nenhuma referência às pesquisas realizadas no Brasil. Verifica-se, no entanto, através dos resultados e conclusões apresentados pelos autores, que a técnica de velocimetria por imagem demonstra-se promissora principalmente pelo fato de utilizar-se de um método não invasivo para analisar o comportamento fluidodinâmico dos meios e estruturas estudadas, o que garante um resultado mais fidedigno em termos de comportamento de fluxos internos.

Os autores avaliaram situações onde a variação da velocidade e do tamanho das partículas pode influenciar na eficiência de processos de sedimentação, floculação, filtração por membranas e lodos ativados. Em alguns casos, como de intensa turbulência da água, por exemplo, foi encontrado que o diâmetro dos flocos não apresenta significativa influência na velocidade de sedimentação. Também foi possível perceber que é possível visualizar linhas de fluxo e então avaliar a tendência do mesmo dentro de um reator, podendo concluir de que forma isso pode interferir em processos de tratamento de águas e efluentes. Ao visualizar o comportamento de formação e movimentação de um floco, é possível criar hipóteses e avaliar melhorias

com vistas à estabilização do floco, aperfeiçoando então os processos de tratamento.

Com base nas pesquisas feitas, pode-se afirmar que o PIV é um método efetivo e que, por não ser invasivo, é de grande auxílio e importância para analisar casos onde é necessário avaliar velocidade de fluxos e de partículas, intensidades turbulentas, identificação de zonas mortas e curtos-circuitos em reatores, além de outros fatores. Todos estes elementos possibilitam a otimização de processos de tratamento de água e efluentes a partir da melhor compreensão do seu comportamento hidrodinâmico.

No cenário atual, verifica-se que outra aplicação importante das técnicas de PIV consiste na utilização dos resultados encontrados para a validação de modelos de fluidodinâmica computacional (CFD).

No entanto, embora a velocimetria de partículas por imagem seja de grande utilidade, é preciso ressaltar que é uma tecnologia de alto custo inicial e complexidade significativa, o que de certa forma limita a sua disseminação. Uma das complexidades envolvidas consiste na criação de condições que sejam iguais às de trabalho real (*scaledown* dos processos), ou seja, é necessário trabalhar com modelos reduzidos com escalas geométricas, cinemáticas e dinâmicas devidamente consideradas pelo projeto. Além disso, estes reatores devem ter paredes transparentes que permitam a passagem do plano de luz laser para a tomada das imagens, bem como, da mesma forma, o meio líquido também deve permitir a passagem desta luz.

Por fim, pode-se dizer que o PIV é uma tecnologia promissora na área de tratamentos de águas e efluentes, podendo ser de grande importância na otimização de processos que envolvem velocidade e tamanho de partículas, como floculação, sedimentação, filtração e lodos ativados, entre outros. Esses processos dependem da velocidade e do tamanho das partículas, ou agregados de partículas, para ocorrerem de forma eficaz, sendo que, ao compreender o comportamento dos mesmos, é possível que se faça uma análise visando otimizar tais processos, resultando em melhor eficiência.

Dessa forma, a aplicação da tecnologia de velocimetria por imagem, ou PIV, na otimização de reatores para o tratamento de efluentes constitui-se em um desafio atual a ser estudado e aperfeiçoado, havendo uma ampla gama de oportunidades de pesquisa. Este trabalho de revisão servirá como base introdutória para trabalhos de pesquisas a serem desenvolvidos onde a aplicação de técnicas de PIV aliadas a outras técnicas, como a CFD, servirá como meio de análise e otimização de biorreatores.

8.5 REFERÊNCIAS

BUCHHAVE, P. Particle Image Velocimetry – Status and Trends. *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 5, p. 586-604, 1992. Disponível em: <<http://www.science-direct.com/science/article/pii/089417779290016X>>. Acessado em: 20/04/2015.

DYNAMICS, Dantec. *Company history*. 2015. Disponível em: <<http://www.dantecdynamics.com/company-history>>. Acessado em: 02/09/2015.

GRANT, I. Particle Image Velocimetry: a review. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*. Edinburgh, v. 211, n., p. 55-76, 11 jun. 1997. Disponível em: <[http://wiki.epfl.ch/me301-tdm/documents/Cours/Mesures de vitesses de fluide/grant-1997-particle image velocimetry-a review.pdf](http://wiki.epfl.ch/me301-tdm/documents/Cours/Mesures%20de%20vitesses%20de%20fluide/grant-1997-particle%20image%20velocimetry-a%20review.pdf)>. Acessado em: 12/09/2015.

GUO, L. *et alii*. *An experimental study of low concentration sludge settling velocity under turbulent condition*. *Water Research*, v. 43, p. 2 383-2 390, 2009. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135409001353>>. Acessado em: 23/04/2015.

KILANDER, J.; BLOMSTRÖM, S.; RASMUSON, A. *Spatial and temporal evolution of floc size distribution in a stirred square tank investigated using PIV and image analysis*. *Chemical Engineering Science*, v. 61, p. 7 651-7 667, 2006. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250906005689>>. Acessado em: 23/04/2015.

LASERS, O. COMPANY. 2015. Disponível em: <<http://www.oxfordlasers.com/company/>>. Acessado em: 02/09/2015.

LAVISION. *La Vision – The Imaging Company*. 2015. Disponível em: <<http://www.lavision.de/en/company.php>>. Acessado em: 02/09/2015.

LIU, J. *et alii*. *Saw-tooth spacer membrane filtration: Hydrodynamic investigation by PIV and filtration experiment validation*. *Chemical Engineering and Processing*, v. 91, p. 23-34, 2015. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0255270115000598>>. Acessado em: 23/04/2015.

LOFRANO, G.; BROWN, J. *Wastewater management through the ages: A history of mankind*. *Science of the Total Environment*. 2010. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969710007564#>>. Acessado em: 21/04/2015.

PRASAD, A. K. *Particle Image Velocimetry: Current Science*. Newark, v. 79, n. 1, p. 51-60, 10 jul. 2000. Disponível em: <http://research.me.udel.edu/~prasad/papers/curr_sci_2000.pdf>. Acessado em: 15/09/2015.

RAFFEL, M.; WILLERT, C. E.; KOMPENHANS, J. *Particle Image Velocimetry: A Practical Guide*. Gottingen: Springer, 1998. 253 p. Disponível em: <<http://www.springer.com/us/book/9783540723073>>. Acessado em: 15/09/2015.

SCHROEDER, A.; WILLERT, C. *Particle Image Velocimetry: New Developments and Recent Applications*. Göttingen: Springer-verlag Berlin Heidelberg, 513 p., 2008.

TSI INC. *ABOUT TSI*. Disponível em: <<http://www.tsi.com/Company/>>. Acessado em: 02/09/2015.

XIAO, F. *et alii*. PIV characterisation of flocculation dynamics and floc structure in water treatment. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, v. 379, p. 27-35, 2010. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927775710006849>>. Acessado em: 08/05/2015.

XIAO, F.; LAM, K. M.; LI, X. Investigation and visualization of internal flow through particle aggregates and microbial flocs using particle image velocimetry. *Journal of colloid and interface science*, v. 397, p. 163-168, 2013. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979713000933>>. Acessado em: 08/05/2015.

ZHONG, R. *et alii*. *Effects of humic acid on physical and hydrodynamic properties of kaolin flocs by particle image velocimetry*. *Water Research*, v. 45, p. 3 381-3 990, 2011. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135411002697>>. Acessado em: 08/05/2015.

APÊNDICE B – COMPROVANTES DE SUBMISSÃO DE ARTIGOS

ARTIGO 2

From: **Water Science and Technology** <em@editorialmanager.com>
 Date: 2017-03-27 18:22 GMT-03:00
 Subject: Submission Confirmation for CFD Analysis on the effect of gas flow rate and bubble size on UASB reactors hydrodynamics
 To: LADEMIR LUIZ BEAL <lbeal@ucs.br>

Dear PROFESSOR AND RESEARCHER BEAL,

Your submission entitled "CFD Analysis on the effect of gas flow rate and bubble size on UASB reactors hydrodynamics" has been received and will now be peer reviewed for possible publication in the journal Water Science and Technology

You will be able to check on the progress of your paper by logging on to Editorial Manager as an author. The URL is <http://wst.edmgr.com/>.

You will shortly be notified of the reference number assigned to your submission.

Thank you for submitting your work to this journal.

Kind regards,

The Editorial Office
 Water Science and Technology

Action	Request Number	Title	Submit Date	Status Date	Current Status
View Submission Download Article Send Email	AT	CFD Analysis on the effect of gas flow rate and bubble size on UASB reactors hydrodynamics	27 Mar 2017	21 Mar 2017	Submitted to journal

ARTIGO 3

Scielo **engenharia sanitária e ambiental**

CASA SOBRE NÁVIGAR DO USUÁRIO NOTÍCIAS

Casa > usuário > Autor > Submissões Ativas

Submissões Ativas

ATIVO ARQUIVO

ID	ANO DO ENVIO	SEÇÃO	AUTORES	TÍTULO	SITUAÇÃO
179462	05-03	AT	D' Bastiani, Alia, Mazzanito, Ferraz...	CFD SIMULATION AND PIV VALIDATION OF THE GAS/LIQUID...	Aguardando designação

1 de 1 de 1 item

Iniciar nova submissão
 Clique aqui para iniciar os cinco passos do processo de submissão.

ADEP
 Av. Beira Mar, 216 - 13º Andar - Castelo
 20021-960 Rio de Janeiro - RJ - Brasil
 esa@abeo-dn.org.br

[ESA] Agradecimento pela Submissão

Entrada x



Equipe Editorial <noreply.ojs@scielo.org>

para mim ▾

Prezado(a) Srta. Camila D' Bastiani,

Acusamos o recebimento da submissão do seu manuscrito "CFD Simulation and PIV Validation of the gas/liquid behavior in an UASB reactor" para Engenharia Sanitária e Ambiental.

O sistema de avaliação é double blind review, onde não revela o nome do autor para o avaliador nem o nome do avaliador para o autor, adotado pelo Conselho Editorial para garantir a avaliação independente realizada por consultores ad hoc.

Os números anteriores da revista podem ser acessados pelo site:
http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_serial&pid=1413-4152&lng=pt&nrm=iso

Através da interface de administração do sistema, utilizado para a submissão, será possível acompanhar o progresso do documento dentro do processo editorial, bastando logar no sistema localizado em:

URL do Manuscrito:
<http://submission.scielo.br/index.php/esa/author/submission/179462>
 Login: camiladbastiani

Em caso de dúvidas, envie suas questões para este e-mail. Agradecemos mais uma vez considerar nossa revista como meio de transmitir ao público seu trabalho.

Equipe Editorial
 Engenharia Sanitária e Ambiental

...

ARTIGO 4



IWA World Conference on Anaerobic Digestion

—Towards a More Sustainable World



Beijing, China
17th-20th October, 2017



[My Page](#)

Personal Center

[Personal Information](#)
[Abstract Submission](#)
[Accompanying Person](#)
[Password Modification](#)

AD15 Secretariat
E-mail: AD_china2017@163.com

Registration Problems
E-mail: AD_china2017@chinastargroup.com

Abstract Submission

ID	Topic	Title	Author	Status	Accepted Result	Modify	Del
AD15-03-045	Anaerobic Technology for Resource Recovery including bioenergy recovery, nutrient recovery, biochemical recovery, reuse of effluent and digestate	Evaluation of methanogenic activity of sugarcane vinasse for different organic volumetric loads	Ladimir Luiz Beal	Submitted		Modify	Del
AD15-03-041	Anaerobic Technology for Resource Recovery including bioenergy recovery, nutrient recovery, biochemical recovery, reuse of effluent and digestate	CFD study of interfacial momentum transfer between liquid/solid in the sludge bed of an UASB reactor	Ladimir Luiz Beal	Submitted		Modify	Del

[Aguardando ad15.meeting.org...](#)

ARTIGO 5

From: **Brazilian Journal of Chemical Engineering** <onbehalfof+rgiudici+usp.br@manuscriptcentral.com>
 Date: 2017-04-04 14:35 GMT-03:00
 Subject: Brazilian Journal of Chemical Engineering - Manuscript ID BJCE-2017-0184
 To: camiladbastiani@gmail.com
 Cc: camiladbastiani@gmail.com, jalba@ucs.br, gtm101@hotmail.com, severino.rodrigues@ufcg.edu.br, aptorres@petrobras.com.br, ilbeal@ucs.br

04-Apr-2017

Dear Miss D' Bastiani:

Your manuscript entitled "Three-Phase CFD Simulation and PIV Validation of a UASB reactor" has been successfully submitted online and is presently being given full consideration for publication in the Brazilian Journal of Chemical Engineering.

Your manuscript ID is BJCE-2017-0184.

Please mention the above manuscript ID in all future correspondence or when calling the office for questions. If there are any changes in your street address or e-mail address, please log in to ScholarOne Manuscripts at <https://mc04.manuscriptcentral.com/bjce-scielo> and edit your user information as appropriate.

You can also view the status of your manuscript at any time by checking your Author Center after logging in to <https://mc04.manuscriptcentral.com/bjce-scielo>.

Thank you for submitting your manuscript to the Brazilian Journal of Chemical Engineering.

Sincerely,
 Brazilian Journal of Chemical Engineering Editorial Office

ScholarOne Manuscripts™ Camila D' Bastiani ▾ | Instructions & Forms | Help | Log Out

 **Brazilian Journal of Chemical Engineering**

Home | **Author**

Author Dashboard

Author Dashboard

- 1 Submitted Manuscripts >
- Start New Submission >
- Legacy Instructions >
- 5 Most Recent E-mails >

Submitted Manuscripts

STATUS	ID	TITLE	CREATED	SUBMITTED
ADM: Giudici, Renato Awaiting Admin Processing	BJCE-2017-0184	Three-Phase CFD Simulation and PIV Validation of a UASB reactor View Submission Cover Letter	04-Apr-2017	04-Apr-2017