

Universidade Federal de São Carlos
Departamento de Engenharia Química

Daniela Maria Koerich

**Avaliação do comportamento fluidodinâmico
líquido-sólido em biorreatores de leito
fluidizado utilizando técnicas de
fluidodinâmica computacional (CFD)**

São Carlos – SP

2018

Daniela Maria Koerich

**Avaliação do comportamento fluidodinâmico
líquido-sólido em biorreatores de leito
fluidizado utilizando técnicas de
fluidodinâmica computacional (CFD)**

Dissertação apresentada ao Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientação:

Prof.^a Dr.^a Gabriela Cantarelli Lopes (UFSCar),

Prof. Dr. Leonardo Machado da Rosa (FURB).

São Carlos – SP

2018

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE DANIELA MARIA KOERICH APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 20 DE SETEMBRO DE 2018.

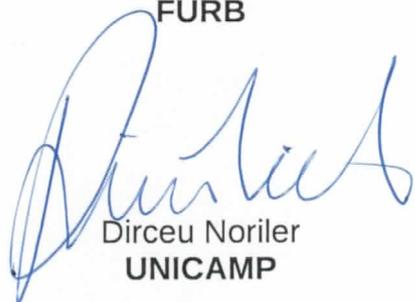
BANCA EXAMINADORA:


Gabriela Cantarelli Lopes
Orientadora, UFSCar


Rodrigo Béttega
UFSCar


Alberto Colli Badino Júnior
UFSCar


Leonardo Machado da Rosa
FURB


Dirceu Noriler
UNICAMP

Esta dissertação contou com o auxílio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), através do projeto número 830795/1999-5, usufruída no período de março de 2017 a setembro de 2018.

Resumo

Ações antrópicas têm promovido desafios tecnológicos, como por exemplo no tratamento de grandes quantidades de efluentes, o que pode ser realizado em biorreatores de leito fluidizado. Para o estudo destes biorreatores, técnicas numéricas como a fluidodinâmica computacional (CFD) podem ser aplicadas. No entanto, na maior parte da literatura disponível para sistemas multifásicos encontram-se aplicações para sistemas gás-líquido ou gás-sólido. Por outro lado, a dinâmica em biorreatores é dominada por interações entre as fases líquida e sólida. Assim, o objetivo deste trabalho foi avaliar o comportamento hidrodinâmico de um biorreator de leito fluidizado líquido-sólido utilizando técnicas de CFD. Para a condução das simulações, uma modelagem bifásica, Euleriana-Euleriana, transiente e turbulenta foi aplicada em uma geometria tridimensional, usando o código OpenFOAM. Foram estabelecidos modelos válidos para a simulação de sistemas envolvendo interações líquido-sólido em biorreatores de leito fluidizado com geometria afunilada. Resultados mostraram o efeito da força de sustentação na redistribuição das biopartículas. Ainda, o coeficiente de restituição não afetou significativamente a altura do leito fluidizado. A estimativa da força de arraste necessitou ser modificada, e uma dependência com o número de Reynolds da partícula promoveu boa concordância da altura do leito com dados experimentais de literatura. Utilizando o modelo validado, observou-se que o estudo foi conduzido no regime de leito parcialmente fluidizado. Em nenhum dos casos foi observada presença significativa de “zonas mortas”. Por fim, verificou-se que colisões entre partículas e tensão de cisalhamento (parâmetros que afetam a espessura do biofilme) ocorrem de forma concomitante. Desta forma, uma maior expansão do leito não está diretamente relacionada com menor incidência de colisões entre partículas. A intensidade de ambos os parâmetros pode ser atenuada com o aumento do ângulo do reator.

Palavras-chave: Fluidização líquido-sólido, biopartículas, forças interfaciais, biorreator anaeróbio de leito fluidizado, hidrodinâmica em reator afunilado, fluidodinâmica computacional.

Abstract

Anthropogenic actions have promoted technological challenges, for example, in the treatment of large quantities of wastewater, which can be done in fluidized bed bioreactors. For the study of these bioreactors, numerical techniques such as computational fluid dynamics (CFD) can be applied. However, in most of the literature available for multiphase systems, there are applications for gas-liquid or gas-solid systems. On the other hand, the dynamics in bioreactors is dominated by interactions between the liquid and solid phases. Thus, the aim of this study is to evaluate the hydrodynamic behavior of a liquid-solid fluidized bed bioreactor using CFD techniques. For the conduction of the simulations, a two-phase, Eulerian-Eulerian, transient and turbulent model was applied in a three-dimensional geometry, using the OpenFOAM code. Valid models have been established for the simulation of systems involving liquid-solid interactions, present in tapered fluidized bed bioreactors. Results showed the effect of the lift force on redistribution of bioparticles. Conversely, the coefficient of restitution did not affect significantly the height of the fluidized bed. The drag force estimate needed to be altered, and a dependency with the particles Reynolds number promoted good agreement of the fluidized bed height with experimental literature data. Using the validated model, it was observed that the study was conducted in the partially fluidized bed regime. None of the cases showed a meaningful presence of “dead zones”. Finally, it was noticed that both collisions between particles and shear stress (parameters that affect the biofilm thickness) occur concomitantly. Thus, greater bed expansion is not directly related to lower incidence of collisions between particles. The intensity of both parameters can be attenuated with the increased angle of the reactor.

Keywords: Liquid-solid fluidization, bioparticles, interfacial forces, anaerobic fluidized bed reactor (AFBR), hydrodynamics in a tapered reactor, computational fluid dynamics (CFD).

Lista de Figuras

| | | |
|-----|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.1 | Regimes de operação (a) leito fixo, (b) leito na mínima fluidização, (c) leito fluidizado homoganeamente, (d) leito heterogêneo, (e) regime de transporte (adaptado de Kunii e Levenspiel, 1991). | 30 |
| 3.2 | Diagrama de classificação de partículas de Geldart (adaptado de Kunii e Levenspiel, 1991). | 32 |
| 3.3 | (a) Fluidização de um leito de biopartículas e (b) detalhe de uma biopartícula. | 33 |
| 3.4 | Características de (a) biopartículas (adaptado de Nicolella <i>et al.</i> , 2000), (b) biofilme (adaptado de Zhou <i>et al.</i> , 2008), (c) e (d) ampliações de biopartículas com diferentes características superficiais (adaptado de Cresson, 2006). | 39 |
| 3.5 | Geometrias de biorreatores: (a) convencional, (b) afunilado de seção circular e (c) de seção quadrada. | 40 |
| 3.6 | Regimes de fluidização em TBRs (a) fixo, (b) parcialmente fluidizado, (c-e) fluidizado (adaptado de Peng e Fan, 1997). | 42 |
| 3.7 | Curvas de fluidização em TBRs (curva 1) e FBRs (curva 2) (adaptado de Shi <i>et al.</i> , 1984). | 43 |
| 3.8 | Evolução temporal de estudos publicados referentes a tratamento de efluentes (adaptado de Rosa <i>et al.</i> , 2017) | 49 |
| 4.1 | Biorreator afunilado (a) dimensões (adaptado de Huang e Wu, 1996), (b) geometria simulada, e (c) condições de contorno. | 58 |
| 4.2 | Procedimento para determinar a quantidade inicial de biopartículas no biorreator – (a) altura calculada, (b) volumes preenchidos e (c) correção da fração volumétrica. | 61 |

| | | |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 4.3 | Malhas com diferentes refinamentos (a-d) e detalhes próximos a (e) base e (f) topo do biorreator. | 63 |
| 6.1 | Variação da altura do leito ao longo do tempo. Valores instantâneos em tracejado e médios em linha cheia. | 83 |
| 6.2 | Altura de fluidização para partículas e biopartículas. | 84 |
| 6.3 | Concentração de biopartículas (a) desconsiderando, e (b) considerando a força de sustentação. | 85 |
| 6.4 | Influência da sustentação na altura do leito fluidizado. | 86 |
| 6.5 | Variação da tensão cisalhante no leito em função da abordagem turbulenta, para diferentes alturas nas velocidades de recirculação de (a) 0,0146, (b) 0,0405 e (c) 0,0782 m/s. | 90 |
| 6.6 | Alturas de leito fluidizado obtidas usando diferentes modelos de arraste. . . | 92 |
| 6.7 | Alturas de leito fluidizado obtidas usando o modelo de Gidaspow para diferentes velocidades de entrada: (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0405 m/s, (d) 0,0579 m/s, e (e) 0,0782 m/s. As linhas brancas marcam 20% de sólidos, e as linhas pretas marcam 5%. | 92 |
| 6.8 | Alturas de leito fluidizado preditas utilizando a correlação de Ergun e fatores de correção. | 94 |
| 6.9 | Expansão do leito predita utilizando o modelo de Ergun com $\eta = 10$, para as velocidades de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0405 m/s, (d) 0,0579 m/s, e (e) 0,0782 m/s. As linhas pretas marcam 5% de sólidos. . | 95 |
| 6.10 | Simulações considerando o ajuste da força de arraste utilizando o número de Reynolds da partícula como um fator de correção. | 97 |
| 6.11 | Alturas de leito fluidizado usando a correlação de Gidaspow ajustada para (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3, (d) Caso 4, (e) Caso 5, e (f) Caso 6. A área sombreada corresponde a 15% de variação dos dados experimentais. Pontos destacados em vermelho indicam as condições nas quais o biofilme foi formado e medido. | 99 |
| 6.12 | Altura de fluidização no modelo proposto para o Caso 1, com e sem simplificação geométrica | 103 |

| | | |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.13 | Curvas de fluidização do Caso 1 sob velocidades reduzidas (até 0,0146 m/s). Os marcadores indicam os valores simulados e o círculo representa o dado experimental. | 104 |
| 6.14 | Curvas de fluidização do Caso 1 sob diferentes velocidades (até 0,0782 m/s). Os marcadores indicam os valores simulados e os círculos representam os dados experimentais. | 104 |
| 6.15 | Campos de velocidade média das biopartículas, limitado pela velocidade de mínima fluidização e velocidade terminal, para os casos com velocidade de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0579 m/s, e (d) 0,0782 m/s. | 105 |
| 6.16 | Campo de fração volumétrica média de biopartículas, onde (a) é a condição inicial de máximo empacotamento (velocidade nula), e os demais os casos com velocidade de entrada de (b) 0,0146 m/s, (c) 0,0290 m/s, (d) 0,0579 m/s, e (e) 0,0782 m/s. | 107 |
| 6.17 | Campos de Reynolds da partícula, para as velocidade de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0579 m/s, e (d) 0,0782 m/s. | 108 |
| 6.18 | Campos de Reynolds, para as velocidade de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0579 m/s, e (d) 0,0782 m/s. | 109 |
| 6.19 | Campos de “zonas mortas”, destacadas na cor azul, para as velocidade de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0579 m/s, e (d) 0,0782 m/s, em diferentes alturas. | 110 |
| 6.20 | Campos de temperatura granular e máxima tensão cisalhante simuladas para as diversas velocidades do Caso 1, com velocidades de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0175 m/s, (c) 0,0202 m/s, (d) 0,0233 m/s, (e) 0,0290 m/s, (f) 0,0405 m/s, (g) 0,0579 m/s, (h) 0,0725 m/s, e (i) 0,0782 m/s. | 112 |
| 6.21 | Campos de temperatura granular e máxima tensão cisalhante simuladas para as diversas velocidades do Caso 4, com velocidades de entrada de (a) 0,0145 m/s, (b) 0,0203 m/s, (c) 0,0262 m/s, (d) 0,0321 m/s, (e) 0,0437 m/s, (f) 0,0552 m/s, e (g) 0,0727 m/s. | 113 |
| 6.22 | Campos de temperatura granular e máxima tensão cisalhante simuladas para as diversas velocidades do Caso 3, com velocidades de entrada de (a) 0,0344 m/s, (b) 0,0492 m/s, (c) 0,0845 m/s, (d) 0,1194 m/s, e (e) 0,1458 m/s. | 114 |

| | | |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.23 | Campos de temperatura granular e máxima tensão cisalhante simuladas para as diversas velocidades do Caso 6, com velocidades de entrada de (a) 0,0351 m/s, (b) 0,0496 m/s, (c) 0,0755 m/s, (d) 0,0871 m/s, e (e) 0,1014 m/s. | 115 |
| 6.24 | Campos de pressão de sólidos e máxima tensão cisalhante simuladas nas velocidades próximas àquelas da formação do biofilme, (a) Caso 1 (0,0233 m/s), (b) Caso 4 (0,0262 m/s), (c) Caso 3 (0,0344 m/s), e (d) Caso 6 (0,0351 m/s). | 118 |
| A.1 | Alturas de leito fluidizado em TBRs sob diferentes condições de operação (Wu <i>et al.</i> , 2009). | 138 |

Lista de Tabelas

| | | |
|-----|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 3.1 | Síntese dos modelos adotados em estudos publicados na literatura. | 55 |
| 4.1 | Parâmetros e condições operacionais. | 59 |
| 4.2 | Valores experimentais de altura para diferentes velocidades em cada caso apresentado por Wu <i>et al.</i> (2009). | 65 |
| 4.3 | Síntese das condições operacionais de cada caso. | 69 |
| 5.1 | Síntese dos modelos utilizados em cada caso. | 80 |
| 6.1 | Altura do leito e queda de pressão obtidos na simulação de diferentes malhas. | 81 |
| 6.2 | Influência das colisões na altura do leito fluidizado. | 87 |
| 6.3 | Tensões cisalhantes e altura do leito obtidas com diferentes modelos de tur- bulência. | 91 |
| 6.4 | Re_p resultante da simulação de cada caso, e desvios das alturas de leito experimentais. | 100 |

Nomenclatura

| | |
|------------|--------------------------------------------------------------------------------------|
| A | área [m ²] |
| Ar | número de Arquimedes [-] |
| b, C, k | constantes [-] |
| C_D | coeficiente de arraste [-] |
| C_L | coeficiente de sustentação [-] |
| Co | número de Courant [-] |
| ΔP | queda de pressão [Pa] |
| d | diâmetro [m] |
| e | coeficiente de restituição [-] |
| E | razão entre Sr e Re [-] |
| I | tensor de Kroenecker [-] |
| f | fator de atrito [-] |
| F_s | fator de segurança [-] |
| $F_{1,2}$ | funções peso no modelo SST $k-\omega$ [-] |
| g | aceleração da gravidade [m.s ⁻²] |
| G | módulo de elasticidade [kg.m ⁻¹ .s ⁻²] |
| H | altura do biorreator [m] |
| k | energia cinética turbulenta [m ² .s ⁻²] |
| k_p | coeficiente de difusão de energia granular [m ² .s ⁻¹] |
| M | termo de transferência de momento entre fases [kg.m ⁻² .s ⁻²] |
| N | número de volumes de controle [-] |
| n_p | número de biopartículas [-] |
| p | pressão [Pa] |

| | |
|-----------|------------------------------------------------------------------------|
| P | produção de energia cinética turbulenta [$\text{m}^2.\text{s}^{-3}$] |
| p_{obs} | ordem de convergência observada [-] |
| r | razão efetiva entre refinamentos de malha [-] |
| Re | número de Reynolds [-] |
| Re_p | número de Reynolds da partícula [-] |
| Sr | taxa de deformação adimensional [-] |
| t | tempo [s] |
| U | velocidade [$\text{m}.\text{s}^{-1}$] |
| u_τ | velocidade de fricção [$\text{m}.\text{s}^{-1}$] |
| V | volume [m^3] |
| y^+ | distância adimensional da parede [-] |
| wb | largura da base do biorreator [m] |

Letras gregas:

| | |
|----------------|---------------------------------------------------------------------|
| α | fração volumétrica [-] |
| β | coeficiente do modelo turbulência [-] |
| δ | espessura do biofilme [m] |
| ϵ | dissipação da energia cinética turb. [$\text{m}^2.\text{s}^{-3}$] |
| η | fator de correção para a força de arraste [-] |
| γ | dissipação de temperatura granular [$\text{m}^2.\text{s}^{-3}$] |
| $\dot{\gamma}$ | taxa de deformação ou de cisalhamento [s^{-1}] |
| κ | constante de Von Kàrmàn [-] |
| λ | viscosidade <i>bulk</i> [$\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1}$] |
| μ | viscosidade dinâmica [$\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1}$] |
| ω | vorticidade [s^{-1}] |
| Ω | magnitude da vorticidade [s^{-1}] |
| ρ | massa específica [$\text{kg}.\text{m}^{-3}$] |
| σ | constante do modelo k - ϵ [-] |
| τ | tensor de tensões [Pa.s] |
| θ | ângulo do biorreator [$^\circ$] |
| Θ | temperatura granular [$\text{m}^2.\text{s}^{-2}$] |
| ξ | constante da função de parede [-] |

Índices:

| | |
|-------------|---------------------------------|
| <i>biof</i> | biofilme |
| <i>biop</i> | biopartícula |
| <i>f</i> | fase fluida |
| <i>l</i> | fase líquida |
| <i>max</i> | (tensão de cisalhamento) máxima |
| <i>mf</i> | mínima fluidização |
| <i>ms</i> | material suporte (médio) |
| <i>msu</i> | umidade do material suporte |
| <i>n</i> | índice de expansão do leito |
| <i>p</i> | fase sólida/particulada |
| <i>r</i> | (velocidade) relativa |
| <i>t</i> | (velocidade, Reynolds) terminal |
| <i>T</i> | transposto |
| <i>w</i> | parede |

Abreviaturas:

| | |
|--------------|---------------------------------------------|
| <i>ASBR</i> | <i>Anaerobic Sequencing Batch Reactors</i> |
| <i>AFBR</i> | <i>Anaerobic Fluidized Bed Reactor</i> |
| <i>CFD</i> | <i>Computational Fluid Dynamics</i> |
| <i>DEM</i> | <i>Discrete Element Model</i> |
| <i>DNS</i> | <i>Direct Numerical Simulation</i> |
| <i>E – L</i> | <i>Euleriano-Lagrangeano</i> |
| <i>EGSB</i> | <i>Expanded Granular Sludge Bed Reactor</i> |
| <i>FBR</i> | <i>Fluidized Bed Reactor</i> |
| <i>GCI</i> | <i>Grid Convergence Index</i> |
| <i>HFA</i> | <i>Hot Film Anemometry</i> |
| <i>KTGF</i> | <i>Kinetic Theory of Granular Flow</i> |
| <i>LDV</i> | <i>Laser Doppler Velocimetry</i> |
| <i>LES</i> | <i>Large Eddy Simulation</i> |
| <i>PIV</i> | <i>Particle Image Velocimetry</i> |

RANS Reynolds Average Navier-Stokes
RSM Reynolds Stress Model
SBR Sequencing Batch Reactors
SST Shear Stress Transport
TBR Tapered Bed Reactor
UASB Upflow Anaerobic Sludge Bioreactors
VOF Volume of Fluid

Sumário

| | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1. <i>Introdução</i> | 25 |
| 2. <i>Objetivo</i> | 27 |
| 2.1 <i>Objetivo Geral</i> | 27 |
| 2.2 <i>Objetivos Específicos</i> | 27 |
| 3. <i>Fundamentação Teórica e Revisão Bibliográfica</i> | 29 |
| 3.1 <i>Fluidização Bifásica</i> | 29 |
| 3.2 <i>Biorreator de Leito Fluidizado</i> | 33 |
| 3.3 <i>Leitos Fluidizados em Geometria Convencional e Afunilada</i> | 38 |
| 3.4 <i>Fluidodinâmica Computacional (CFD)</i> | 43 |
| 3.4.1 <i>Simulação de Unidades de Tratamento Biológico de Efluentes</i> | 48 |
| 3.4.2 <i>Simulação de Leitos Fluidizados Líquido-Sólido</i> | 53 |
| 3.5 <i>Fechamento do Capítulo</i> | 56 |
| 4. <i>Materiais e Métodos</i> | 57 |
| 4.1 <i>Biorreator Anaeróbio de Leito Fluidizado Afunilado e Condições Operacionais</i> | 57 |
| 4.2 <i>Solução</i> | 61 |
| 4.3 <i>Malhas Numéricas</i> | 62 |
| 4.4 <i>Comparação com os Dados Experimentais</i> | 64 |
| 4.5 <i>Demais análises</i> | 65 |
| 4.6 <i>Fechamento do Capítulo</i> | 68 |
| 5. <i>Modelagem Matemática</i> | 71 |

| | | |
|-------|----------------------------------------------------------------------------|-----|
| 5.1 | Modelos de Força de Arraste | 74 |
| 5.1.1 | Fator de Atrito | 74 |
| 5.1.2 | Ergun | 75 |
| 5.1.3 | Wen-Yu | 75 |
| 5.1.4 | Gidaspow | 76 |
| 5.1.5 | Gibilaro | 76 |
| 5.2 | Turbulência | 77 |
| 5.2.1 | Modelo $k-\epsilon$ | 77 |
| 5.2.2 | Modelo <i>Shear Stress Transport</i> (SST) $k-\omega$ | 78 |
| 5.3 | Teoria Cinética do Escoamento Granular | 79 |
| 5.4 | Fechamento do Capítulo | 79 |
| 6. | <i>Resultados e Discussão</i> | 81 |
| 6.1 | Resultados Preliminares | 81 |
| 6.1.1 | Teste de Independência de Malha | 81 |
| 6.1.2 | Tempo de Simulação | 82 |
| 6.1.3 | Avaliação de Partículas e Biopartículas | 82 |
| 6.2 | Investigação das Equações de Fechamento | 83 |
| 6.2.1 | Influência da Força de Sustentação | 84 |
| 6.2.2 | Influência das Colisões entre Biopartículas | 87 |
| 6.2.3 | Avaliação da Modelagem da Turbulência | 88 |
| 6.2.4 | Avaliação dos Modelos de Arraste | 91 |
| 6.3 | Modificação de Modelos de Força de Arraste | 93 |
| 6.3.1 | Aumento da Estimativa da Força de Arraste | 93 |
| 6.3.2 | Dependência da Força de Arraste com um Número Adimensional | 96 |
| 6.3.3 | Validação do Ajuste Proposto | 98 |
| 6.4 | Avaliação Fluidodinâmica | 102 |
| 6.4.1 | Avaliação da Hipótese de Simetria | 102 |
| 6.4.2 | Curvas de Fluidização | 102 |
| 6.4.3 | Velocidades Características no Leito Fluidizado Afunilado | 105 |
| 6.4.4 | Hidrodinâmica das Fases | 106 |
| 6.4.5 | Influência da Hidrodinâmica sobre Colisões e Tensões Cisalhantes | 110 |

| | |
|------------------------------|-----|
| 7. Conclusões | 119 |
| Referências | 121 |
| Apêndice | 135 |
| A. Dados originais | 137 |

Introdução

Mudanças climáticas são uma preocupação atual. A emissão de poluentes, como por exemplo os poluentes originados pela queima de combustíveis fósseis é um dos fatores responsáveis. Uma alternativa para minimizar tais mudanças encontra-se na alteração da atual matriz energética, aumentando o uso de combustíveis limpos. Além disso, com o aumento populacional, associado aos padrões de consumo, há a necessidade de tratar continuamente grandes quantidades de efluentes gerados. Destes, há uma variedade de efluentes líquidos/sólidos, reconhecidos como fontes para a produção de biogás e/ou biohidrogênio.

O desejo de extrair energia do que é atualmente considerado como efluente tem promovido o uso cada vez maior de bioprocessos. Estes podem utilizar processos aeróbios, anaeróbios ou anóxicos. A vantagem do processo anaeróbio em relação ao aeróbio está numa menor geração de lodo e maior geração de biogás, principalmente metano e gás carbônico. Independente do processo, microrganismos são responsáveis pela conversão da carga orgânica contida no efluente, melhorando sua qualidade final.

Várias configurações podem ser adotadas para o tratamento de efluentes, incluindo sistemas de lodos ativados e suas variantes, reatores UASB (*Upflow Anaerobic Sludge Bioreactors*), reatores biológicos de membranas e reatores em batelada sequencial. Desde a década de 1980, tem aumentado o interesse em reatores anaeróbios de leito fluidizado, apesar da aplicação da fluidização existir desde 1556, estando presente em diversos processos da indústria química.

Reatores de leito fluidizado envolvem sistemas multifásicos (gás-sólido, líquido-sólido, ou gás-líquido-sólido). Inicialmente, aplicações desses reatores estavam limitadas a craqueamento catalítico, combustão, gaseificação, revestimento, granulação, secagem e outras aplicações físico-químicas estabelecidas. Por isso, a literatura ainda enfatiza a fluidização

em sistemas bifásicos gás-sólido. Contudo, os reatores de leito fluidizado também são utilizados no tratamento de efluentes, no qual sistema gás-sólido não é aplicável (Bello *et al.*, 2017), sendo bifásico (líquido-sólido) ou trifásico.

No sistema líquido-sólido, o regime de fluidização é mantido pela força de arraste associada ao movimento ascendente do fluido. A manutenção de operações com leitos fluidizados requer controle da velocidade superficial do efluente, o qual depende das características da biopartícula, as quais por sua vez são alteradas enquanto a comunidade microbiana evolui. Assim, além das dificuldades relacionadas à manutenção de culturas saudáveis, como em outros processos, há também dificuldades na manutenção do regime de fluidização.

Abordagens empíricas e semi-empíricas são tradicionalmente utilizadas no projeto e operação dessas unidades. Para otimizar a configuração de reatores e, em consequência melhorar a sua performance, é essencial conhecer a dinâmica das fases em seu interior. Nesse sentido, a fluidodinâmica computacional oferece diversas vantagens, como por exemplo fornecer valores locais para os parâmetros de processos. Com a aplicação de CFD, equipamentos industriais podem ser simulados empregando modelos baseados na termodinâmica, hidrodinâmica e cinética das reações. Processos podem ser visualizados através de resultados de simulações, antes de realizar experiências em escala real, poupando tempo e reduzindo custos (Wang *et al.*, 2010). Deste modo, pode-se adotar técnicas numéricas para o estudo de biorreatores de leito fluidizado a fim de obter um melhor entendimento do comportamento destes.

Apesar da sua importância, há uma carência de estudos numéricos relacionados com escoamentos líquido-sólido. Neste contexto, pretende-se nesta dissertação contribuir com uma análise hidrodinâmica de um biorreator anaeróbico de leito fluidizado. Dentre os diferenciais do presente estudo têm-se a geometria do reator (quadrada e afunilada), a qual acarreta em particularidades ao escoamento. Além deste, outro diferencial está na simulação de um leito fluidizado de partículas recobertas por biofilme (biopartículas) aplicado para o tratamento de efluentes, cujos resultados experimentais encontram-se disponíveis na literatura. As biopartículas simuladas encontram-se em uma faixa não usual de massa específica, quando comparados com demais estudos numéricos publicados.

Objetivo

2.1 Objetivo Geral

Modelar, simular e avaliar o comportamento de leitos fluidizados líquido-sólido em biorreatores afunilados com diferentes condições geométricas e operacionais utilizando a técnica da fluidodinâmica computacional.

2.2 Objetivos Específicos

De modo a atingir o Objetivo Geral é necessário obter um modelo adequado para as simulações. Assim, os seguintes objetivos específicos foram propostos:

- Avaliar a influência das interações entre fases;
- Avaliar diferentes modelos de arraste disponíveis na literatura;
- Desenvolver e calibrar um modelo para o arraste, considerando o caso em estudo;
- Validar este modelo em diferentes condições;
- Avaliar aspectos hidrodinâmicos do biorreator simulado;
- Contribuir com a literatura de sistemas líquido-sólido.

Fundamentação Teórica e Revisão Bibliográfica

Neste capítulo serão apresentados uma breve revisão de literatura relacionada com aspectos da fluidização, biorreatores de leito fluidizado e sua geometria, fluidodinâmica computacional e sua aplicabilidade.

3.1 Fluidização Bifásica

A fluidização é uma operação na qual os sólidos são mantidos em um estado com propriedades fluídas (*fluidlike*) através da suspensão dos sólidos no fluido (gás e/ou líquido). A maioria das aplicações industriais deste tipo de operação estão voltadas para o sistema gás-sólido (Kunii e Levenspiel, 1991).

De um modo geral, a fluidização gás-líquido-sólido engloba desde o regime de leito expandido até o regime de transporte, com velocidade terminal variando de 0,03 a 50 cm/s. Nestes sistemas é adequado fazer a classificação a partir de diferenças do comportamento hidrodinâmico. Isto compreende o tipo de operação, direção do escoamento, continuidade das fases e, principalmente, o estado do movimento da fase sólida (Fan, 1989).

De acordo com Kunii e Levenspiel (1991), o fenômeno da fluidização bifásica em um reator cilíndrico pode ser descrito da seguinte forma (Figura 3.1):

- Se um fluido em sentido ascendente passa através de um leito de partículas, à baixa vazão, o fluido apenas percola através dos espaços ‘vazios’ entre as partículas estacionárias, caracterizando o leito fixo (Figura 3.1a) (Kunii e Levenspiel, 1991). Neste regime, o leito fixo existe quando a força de arraste sobre as partículas induzida pelo escoamento do fluido é menor do que o peso efetivo das partículas no sistema (Fan, 1989). Com um aumento na vazão, as partículas se afastam e algumas poucas

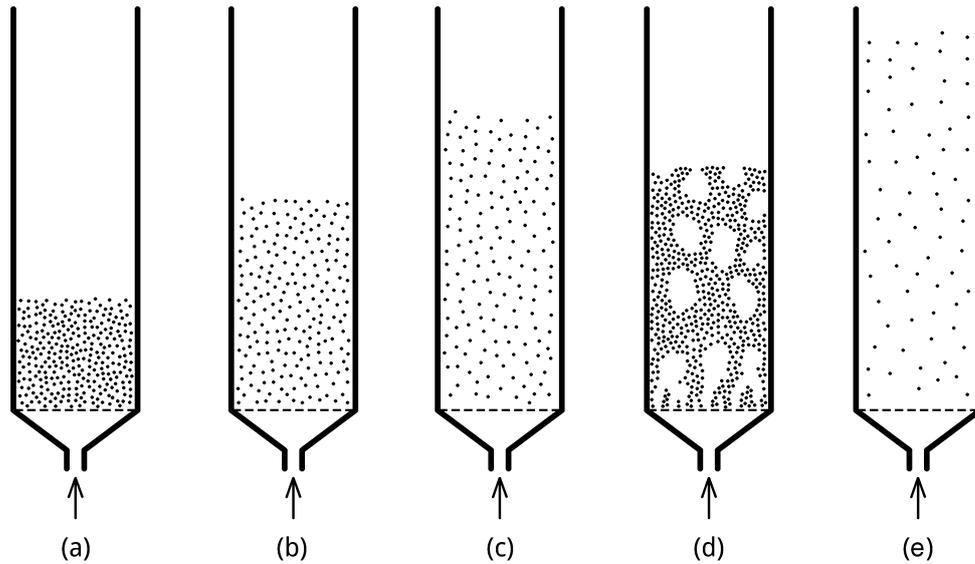


Figura 3.1: Regimes de operação (a) leito fixo, (b) leito na mínima fluidização, (c) leito fluidizado homogêneo, (d) leito heterogêneo, (e) regime de transporte (adaptado de Kunii e Levenspiel, 1991).

vibram e se movem em uma região restrita, caracterizando o leito expandido (Kunii e Levenspiel, 1991).

- Em velocidades maiores, atinge-se um ponto onde todas as partículas são suspensas pelo escoamento ascendente do fluido. Neste ponto, a força arraste entre as partículas e fluido equilibra o peso das partículas e o empuxo, e a queda de pressão (perda de carga) em qualquer seção do leito é equivalente ao peso do fluido e das partículas naquela seção. Aqui, o leito é considerado “fluidizado”, referindo-se ao leito fluidizado incipiente ou um leito fluidizado à mínima fluidização (Figura 3.1b).
- Em sistemas líquido-sólido, um aumento na vazão acima da mínima fluidização normalmente resulta em uma suave e progressiva expansão do leito. Instabilidades no escoamento são amortecidas e permanecem pequenas; heterogeneidade, ou grandes frações de líquido, não são observados sob condições normais. Este leito pode ser denominado de leito fluidizado ‘particular’, leito fluidizado homogêneo ou leito fluidizado suavemente (Figura 3.1c). Em sistemas gás-sólido, tais leitos podem ser observados somente em condições especiais, como partículas leves e finas com gás denso à alta pressão.
- Geralmente, sistemas gás-sólido comportam-se diferentemente de sistemas líquido-sólido, com o aumento da vazão acima da mínima fluidização. Em casos raros,

sistemas líquido-sólido podem se comportar como leitos “borbulhantes” (*bubbling beds*) apresentando grandes instabilidades, caminhos preferenciais de gás, agitação violenta, movimento intenso dos sólidos, e leito heterogêneo (Figura 3.1d). Isto ocorre somente com sólidos muito densos e fluidizados por líquidos de baixa densidade.

Tanto o leito fluidizado gás-sólido quanto o líquido-sólido são considerados “leitos densos”, enquanto houver um limite ou superfície do leito claramente definido.

- Com um aumento na velocidade do fluido, sólidos são carregados do leito (Figura 3.1e) (Kunii e Levenspiel, 1991). Se a velocidade for aumentada, além da velocidade terminal da partícula, a força de arraste irá exceder a força gravitacional atuando nas partículas. Estas serão arrastadas, até o ponto de extinguir o leito, onde haverá a fluidização “contínua” (Grady Jr. *et al.*, 2011), ou “regime de transporte” (Fan, 1989; Kunii e Levenspiel, 1991).

A “qualidade da fluidização”, ou a facilidade com que as partículas fluidizam, e as condições operacionais que sustentam a fluidização variam muito para sistemas gás-sólidos. Dentre os fatores que influenciam estão (Kunii e Levenspiel, 1991):

- tamanho dos sólidos;
- a distribuição de tamanhos dos sólidos;
- relação das massas específicas de sólido e fluido – normalmente, sistemas líquido-sólido fluidizam de forma homogênea, enquanto sistemas gás-sólidos apresentam heterogeneidade; contudo, padrões diferentes podem existir dependendo da relação entre as massas específicas;
- geometria do reator;
- dispositivos de entrada de gás;
- tipo de sólidos – se estes são de fluxo livre ou passíveis de aglomeração (como partículas finas e úmidas).

Muitos dos fatores que influenciam na qualidade de fluidização referem-se a propriedades das partículas. Uma classificação bastante utilizada para classificar sólidos de acordo com sua forma de fluidização correspondente é a classificação de Geldart de partículas

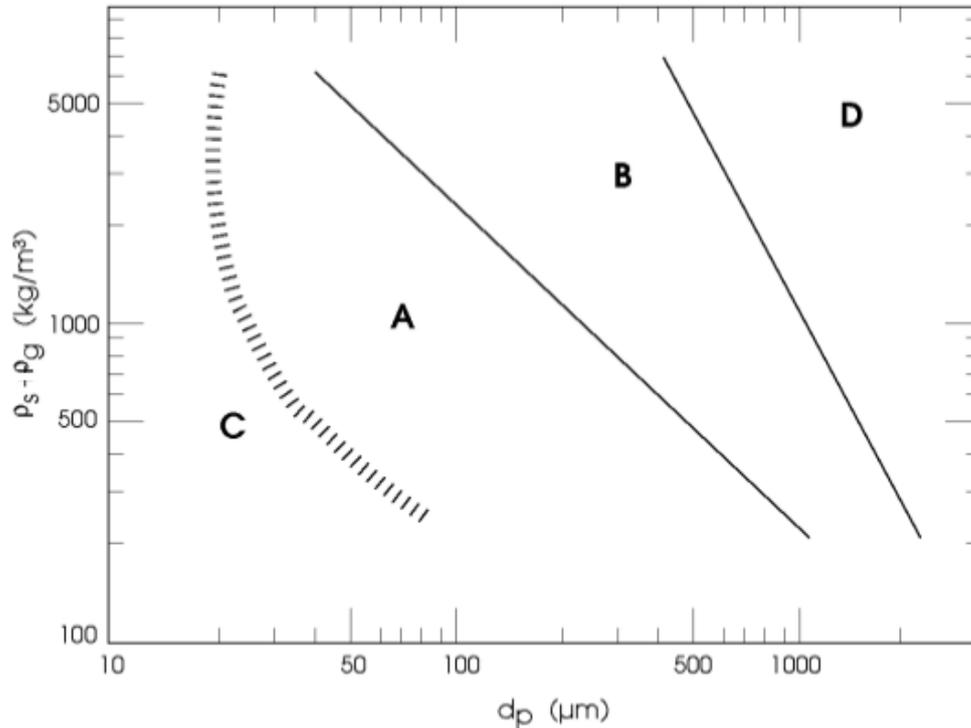


Figura 3.2: Diagrama de classificação de partículas de Geldart (adaptado de Kunii e Levenspiel, 1991).

(Figura 3.2). Para qualquer sólido de massa específica e tamanho médio da partícula conhecidas, esta classificação demonstra o tipo de fluidização esperada (Kunii e Levenspiel, 1991):

- Grupo C: leito de partículas com diâmetro pequeno, as quais são de difícil fluidização;
- Grupo A: partículas com tamanho médio pequeno e/ou baixa densidade ($< 1,4 \text{ g/cm}^3$), as quais fluidizam facilmente (*smooth fluidization*);
- Grupo B: compreende uma ampla faixa de tamanho e densidade de partículas, sendo a maioria com tamanho de $40 \text{ } \mu\text{m} < d_p < 500 \text{ } \mu\text{m}$ e densidade de $1,4 < \rho < 4 \text{ g/cm}^3$, estas fluidizam bem com vigorosa ação do fluido;
- Grupo D: partículas grandes e/ou densas, onde leitos profundos são difíceis de fluidizar, estes sólidos jorram (*spout*) facilmente, enquanto os sólidos de Geldart B não.

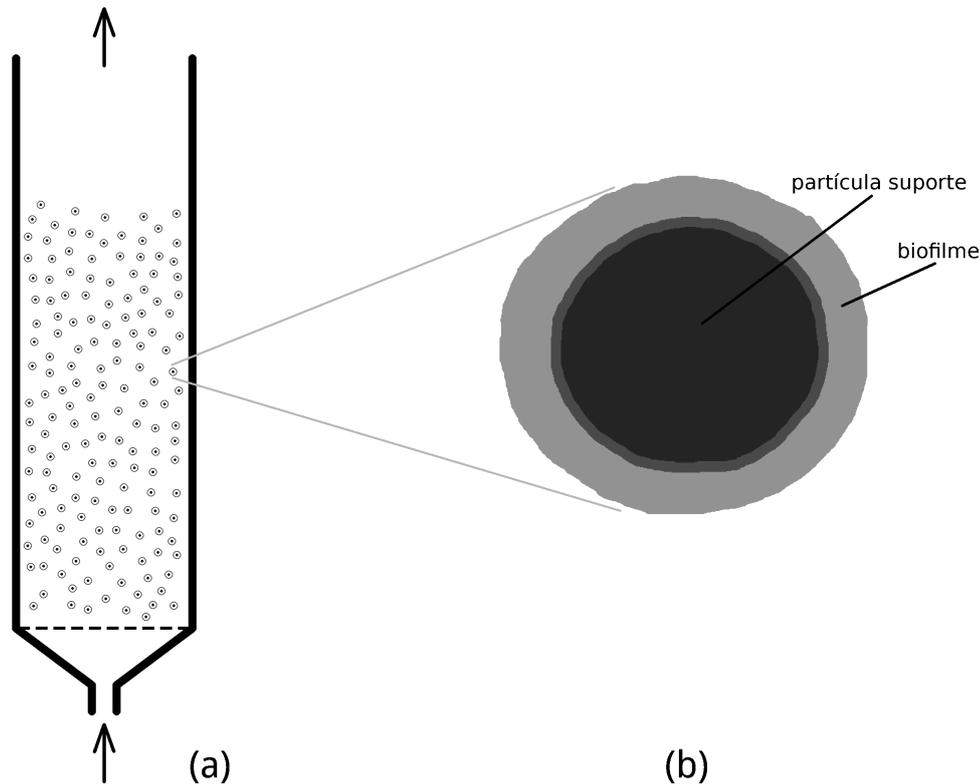


Figura 3.3: (a) Fluidização de um leito de biopartículas e (b) detalhe de uma biopartícula.

3.2 Biorreator de Leito Fluidizado

Na operação de um biorreator de leito fluidizado anaeróbio (*Anaerobic Fluidized Bed Reactor* – AFBR), o efluente é comumente alimentado na base do reator, movimentando-se na direção ascendente através do leito de biopartículas, as quais são caracterizadas por um material suporte recoberto por biofilme (camadas de células e lodo excretado). Tal movimento arrasta as biopartículas, causando uma expansão do leito (Figura 3.3). Microorganismos presentes no biofilme consomem o substrato, desta forma diminuindo a carga orgânica do efluente tratado. O crescimento do biofilme na superfície de cada material suporte e, conseqüente, alteração das características das biopartículas durante o curso da fluidização é uma das características do biorreator de leito fluidizado (Yang, 2003; Grady Jr. *et al.*, 2011).

As velocidades críticas para determinar a faixa de operação do biorreator de leito fluidizado são a velocidade mínima de fluidização e a velocidade terminal (Grady Jr. *et al.*, 2011; Bello *et al.*, 2017). A primeira delas é a velocidade mínima necessária para iniciar a fluidização das biopartículas; a segunda é a velocidade na qual estas são carregadas

junto com o escoamento do fluido. O conhecimento destas velocidades é importante para estabelecer o regime de fluidização, mantendo as biopartículas dentro do biorreator.

Além da velocidade superficial, a estabilidade do leito também está relacionada com as características do material suporte, sendo mais estável para maiores valores de tamanho e massa específica. Por exemplo, a sílica ($\rho=2.650 \text{ kg/m}^3$) costuma ser razoavelmente estável para uma ampla faixa de velocidades (Grady Jr. *et al.*, 2011). Em conjunto com a massa específica, as demais características desejáveis para partículas a serem utilizadas como material suporte para crescimento microbiano são (Atkinson *et al.* (1979):

- mínima variação de tamanho e forma;
- condições de superfície apropriadas para a imobilização de células;
- resistência à abrasão;
- baixo custo.

Os materiais suporte utilizados podem ser inorgânicos (areia, vidro, alumina, etc.) ou orgânicos (carvão ativado, carvão, polietileno, etc.) com tamanhos que variam de acordo com a aplicação de 0,1 a 6 mm. Para tratamento de efluentes, areia e carvão ativado são os materiais mais utilizados (Yang, 2003; Parthiban, 2012).

A rugosidade exterior de partículas de carvão ativado torna-as superiores à maioria dos outros meios no abrigo e fixação de microorganismos. Além disso, os sítios e elevações do carvão ativado permitem ao biofilme ser fixado firmemente às partículas, oferecendo alta resistência ao atrito (Parthiban, 2012).

Devido ao crescimento de microorganismos sobre o material suporte, as características de fluidização no biorreator são alteradas, por conta dos seguintes fatores (Yang, 2003; Grady Jr. *et al.*, 2011):

- alteração do tamanho da biopartícula;
- alteração da massa específica da biopartícula devido ao crescimento do biofilme;
- propriedades superficiais do biofilme que são diferentes daquelas das partículas limpas, conseqüentemente alterando a relação entre o coeficiente de arraste e número de Reynolds;

- crescimento de biofilme que pode alterar a esfericidade da partícula.

O biofilme começa a se formar quando alguns microorganismos são presos irreversivelmente às partículas de carvão ativado e os produtos do metabolismo (principalmente, polissacarídeos e proteínas) acumulam em torno delas. As partículas são totalmente cobertas pelo biofilme enquanto ele continua a crescer e mais metabólitos se acumulam. Por fim, um biofilme maduro é formado e o crescimento da espessura do biofilme é diminuído, devido à tensão de cisalhamento do escoamento líquido (Zhou *et al.*, 2008). As condições hidrodinâmicas necessárias para a obtenção de biofilmes mais finos são complexas e, por vezes, contraintuitivas (Grady Jr. *et al.*, 2011):

- biofilmes finos costumam apresentar alta taxa de desprendimento ¹, a qual também é elevada com o aumento da velocidade. Em contrapartida, biorreatores nesses casos são operados a baixas velocidades ($Re < 10$).
- menores velocidades acarretam numa menor expansão do leito e maior probabilidade de colisões entre biopartículas. Desta forma, menor velocidade também resulta em alta taxa de desprendimento.

Em termos práticos, independente dos fenômenos descritos acima, biofilmes mais espessos não necessariamente acarretam em maior biomassa ativa. Esta é uma das razões para que biorreatores de leito fluidizado comumente operem com biofilmes finos (Grady Jr. *et al.*, 2011).

Como visto, com o crescimento do biofilme na superfície do material suporte, as propriedades físicas das biopartículas, tais como tamanho, forma, e densidade são alteradas. Com isso, um decréscimo na densidade seca do biofilme é observado. Portanto, um biofilme espesso terá uma forma maior, mas uma densidade menor. Estas mudanças afetam diretamente o comportamento hidrodinâmico das biopartículas no biorreator de leito fluidizado (Ro e Neethling, 1991). Dependendo da espessura do biofilme e tipo de material suporte, valores de massa específica de biopartículas encontram-se na faixa de 1.100 a 1.500 kg/m³ (Nicolella *et al.*, 2000).

¹ A taxa de desprendimento específica é a razão entre a perda de biomassa no efluente final e biomassa mantida no material suporte. No estado estacionário, essa taxa é igual a taxa de crescimento médio do biofilme.

A massa específica da biopartícula, juntamente com o seu tamanho, afeta o grau de expansão do leito (Bello *et al.*, 2017). A relação entre expansão do leito (α), velocidade superficial (U) e velocidade terminal (U_t) é comumente obtida por meio da expressão de Richardson e Zaki (1954), a qual foi desenvolvida para partículas esféricas, lisas, rígidas e densas:

$$\frac{U}{U_t} = \alpha^n \quad (3.1)$$

Esta expressão apresenta o índice de expansão do leito (n) que pode ser estimado com o número de Reynolds terminal, resultando em uma dependência implícita com a velocidade terminal.

Diversos autores avaliaram as características de expansão do leito com crescimento anexo de microrganismos, os quais concordam que esta correlação pode ser aplicada somente com algumas restrições (García-Calderón *et al.*, 1998). Ngian e Martin (1980) avaliaram a correlação de Richardson e Zaki (1954) para biopartículas consideradas esféricas, pois o crescimento microbiano tende a preencher não-esfericidades. Os autores observaram que a velocidade terminal obtida por esta correlação, para diferentes tamanhos de biopartículas (partículas de carvão ($\rho = 1.180 \text{ kg/m}^3$) recobertas com biofilme), pode ter uma concordância satisfatória, mas a predição pode estar de 30 a 70% abaixo em relação aos dados experimentais, respectivamente para tamanhos de material suporte de 1,55 e 0,605 mm. Mulcahy e Shieh (1987) avaliaram um FBR com leito de esferas de vidro ($\rho = 2.420 \text{ kg/m}^3$) recobertos por biofilme com espessuras entre 40 a 1200 μm , encontrando que a expressão de Richardson e Zaki (1954) é adequada para prever a expansão do leito, desde que uma correção específica para biopartículas seja adotada para o cálculo do coeficiente de arraste e índice de expansão do leito (n).

Hermanowicz e Ganczarzyk (1983) foram os primeiros a atribuírem esta diferença à rugosidade e a não rigidez das biopartículas, avaliando um leito de areia ($\rho = 2.630 \text{ kg/m}^3$), recoberto por biofilme com espessuras variando de 1 a 77 μm . A justificativa dada foi que a correlação de Richardson e Zaki (1954) foi obtida a partir de resultados de partículas esféricas, lisas e rígidas; no entanto, biopartículas não podem ser consideradas dessa forma. Como consequência da rugosidade, sua superfície afeta a camada limite no entorno da biopartícula propiciando um aumento da força de arraste. Os autores também apresentaram uma analogia com o escoamento turbulento em um duto, onde o coeficiente de atrito au-

menta em função da rugosidade das paredes. Por fim, os autores ressaltam que a correlação de Richardson e Zaki (1954) para o cálculo da expansão do leito pode ser utilizada em leitos fluidizados biológicos somente se uma correção para o coeficiente de arraste for utilizada. Modificações para esta normalmente são feitas nas seguintes formas:

$$C_D = bRe_t^k \quad (3.2)$$

$$C_D = 24Re_t^{-1} + bRe_t^k \quad (3.3)$$

onde Re_t é o Reynolds terminal da partícula e as constantes b e k assumem diferentes valores de acordo com o ajuste de curva dos dados experimentais.

As correlações 3.2 e 3.3 foram definidas para uma faixa de $Re_p \leq 100$. Andalib *et al.* (2010) avaliaram esta última para faixas maiores de Re_p , observando um aumento significativo dos desvios entre experimental e valores calculados para $Re_p > 130$. Este também propôs uma correlação para o arraste baseada no número de Arquimedes, obtendo previsões para a velocidade terminal da partícula com desvios próximos a 10% dos valores experimentais, para uma faixa de $7 < Re_t < 300$ e $210 < Ar < 2,5 \times 10^5$.

Para a ampla maioria de casos, biopartículas estão no regime de escoamento intermediário ($1 < Re_p < 100$) (Nicolella *et al.*, 2000). Independente das partículas serem ou não recobertas por biofilme, problemas aumentam na avaliação de C_D baseadas nas características de expansão do leito nesta faixa, e modelos de arraste apresentam algum desvio quando o número de Reynolds da partícula encontra-se entre 0,2 e 500 (Gibilaro *et al.*, 1985).

O crescimento do biofilme em biopartículas aumenta o coeficiente de arraste em relação à partículas limpas, com mesmo diâmetro e densidade. Diferentes estudos considerando a presença de um biofilme obtiveram diferentes correlações para o coeficiente de arraste, sugerindo que a sua influência pode ser específica para cada caso (Grady Jr. *et al.*, 2011). Dessa forma, diferentes condições nos ensaios experimentais de cada estudo podem ter sido responsáveis pelas diferenças nas correlações propostas. Por exemplo, apesar de Hermanowicz e Ganczarczyk (1983) e Mulcahy e Shieh (1987) terem selecionado apenas partículas densas e esféricas ou com esfericidade de 0,99 para utilização como material suporte, estes estudos eram direcionados a tratamentos biológicos distintos, o que resultaria em microrganismos com funções e alterações morfológicas diferenciadas, em relação a sua espessura,

massa específica e forma da superfície (*surface shape*). A aplicabilidade do tratamento do estudo de Ngian e Martin (1980) era o mesmo de Mulcahy e Shieh (1987), portanto as comunidades microbianas eram similares. As principais diferenças neste último estudo eram o menor tamanho e massa específica do material suporte utilizados. Considerando que o período de aclimação pode ocorrer entre 2 a 6 meses, o estudo de Hermanowicz e Ganczarczyk (1983) minimizou a interferência devido ao crescimento microbiano, uma vez que este operou o biorreator pelo período de um ano, buscando atingir a condição estacionária. Por outro lado, Ngian e Martin (1980) obtiveram seus resultados experimentais em um período de aproximadamente um mês com variações quase diárias nas características do biofilme (espessura e densidade), demonstrando a sensibilidade da expansão do leito com o desenvolvimento do biofilme, apesar dos autores não proporem uma correlação para o arraste. De todo modo, reporta-se que o coeficiente de arraste de biopartículas é maior do que o coeficiente para esferas rígidas e lisas, ambas densas. Nicolella *et al.* (1999) estimaram a velocidade terminal de biopartículas e, relacionando com a literatura, reportaram que para valores de $Re_p \leq 100$:

$$\frac{C_{D,biopartículas}}{C_{D,partículas}} = 1,6 \quad (3.4)$$

A rugosidade da superfície é geralmente apontada como a principal causa desse incremento (Hermanowicz e Ganczarczyk, 1983; Mulcahy e Shieh, 1987; Nicolella *et al.*, 1999; Saravanan e Sreekrishnan, 2005; Grady Jr. *et al.*, 2011). Como pode ser observado na Figura 3.4, a superfície de biopartículas não é lisa (Nicolella *et al.*, 2000; Zhou *et al.*, 2008; Cresson, 2006).

3.3 Leitos Fluidizados em Geometria Convencional e Afunilada

Leitos fluidizados líquido-sólido, ao contrário de sistemas gás-sólidos, são caracterizados como leitos homogêneos (Kunii e Levenspiel, 1991). No entanto, a presença de elementos internos no sistema, tais como tubo anelar (*draft tubes*), trocadores de calor e aletas, ou geometrias irregulares como geometria afunilada, aumentam consideravelmente a complexidade dos fenômenos de transporte (Fan, 1989).

O conceito de biorreator afunilado (Figura 3.5b) foi introduzido por Scott e Hancher (1976). Dentre as justificativas, estava a atenuação das falhas observadas em leitos fluidizados convencionais (Figura 3.5a), tais como: uma faixa relativamente estreita de condições

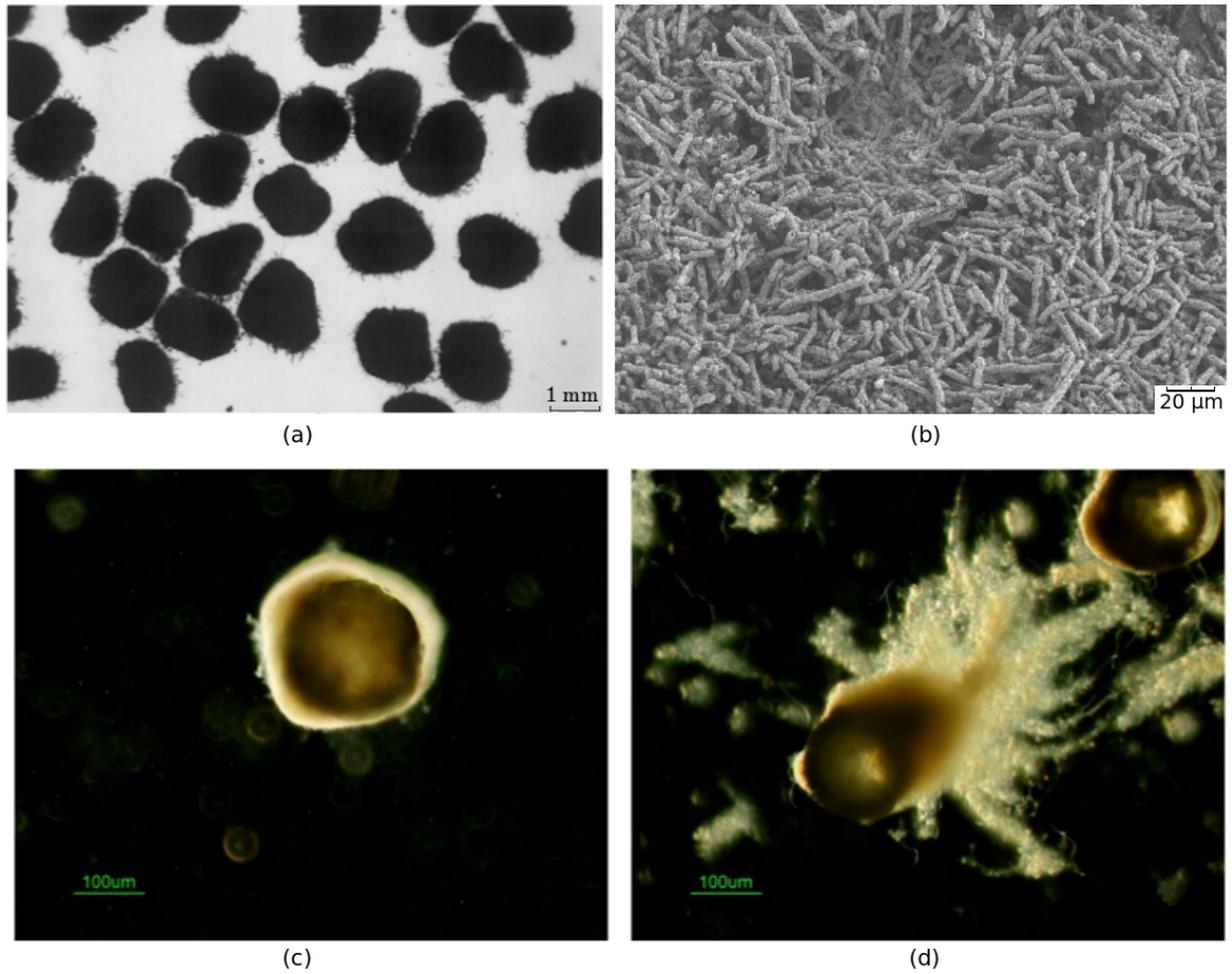


Figura 3.4: Características de (a) biopartículas (adaptado de Nicolella *et al.*, 2000), (b) biofilme (adaptado de Zhou *et al.*, 2008), (c) e (d) ampliações de biopartículas com diferentes características superficiais (adaptado de Cresson, 2006).

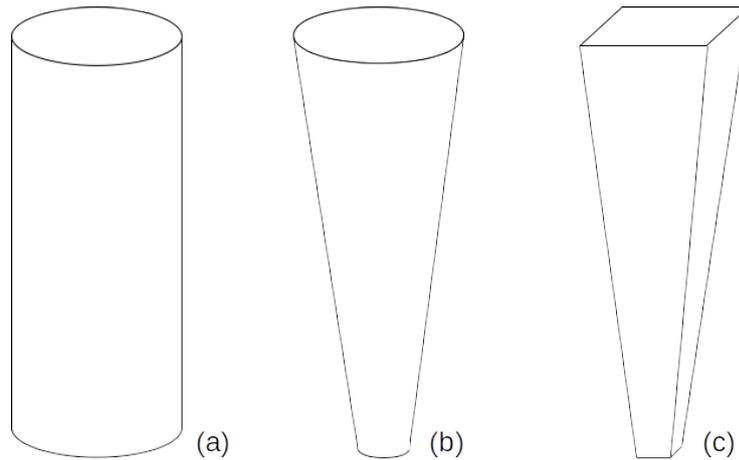


Figura 3.5: Geometrias de biorreatores: (a) convencional, (b) afunilado de seção circular e (c) de seção quadrada.

operacionais ótimas, com alta expansão do leito e baixa estabilidade; presença de retro-mistura (*backmixing*) especialmente próximo a região de entrada (Scott e Hancher, 1976).

Além disso, biorreatores de leito fluidizado convencionais (*fluidized bed reactors* – FBR) cilíndricos apresentam velocidade constante ao longo da altura, o que pode acarretar no arraste de (bio)partículas para fora do reator (*washout*) (Bello *et al.*, 2017; Parthiban, 2012), principalmente quando estas partículas têm sua densidade diminuída por conta do acúmulo de biofilme na sua superfície (Ngian e Martin, 1980). Dessa forma, o biorreator convencional de leito fluidizado costuma ser operado com contínua perda de biopartículas a partir do topo do leito, de forma a manter uma altura constante (Grady Jr. *et al.*, 2011). Por outro lado, biorreatores de leito fluidizado afunilados (*fluidized beds in tapered bioreactors* – TBR) oferecem como vantagem adicional o decréscimo da velocidade ascensional ao longo da altura. Isto naturalmente previne que as biopartículas sejam carregadas para fora do biorreator (Scott e Hancher, 1976).

A despeito de suas vantagens, o reator afunilado tem como principal desvantagem o seu projeto mecânico, uma vez que TBRs são mais difíceis de se construir com o ângulo desejado do que FBRs convencionais (Parthiban, 2012).

Apesar de (A)FBRs serem tradicionalmente cilíndricos, outras formas como colunas com seção quadrada (Figura 3.5c) também são utilizadas. Contudo, zonas mortas são encontradas mais frequentemente em colunas quadradas, onde essa ocorrência é promovida por conta das regiões dos cantos vivos. A presença de zonas mortas, por sua vez, inibe a mistura das partículas no reator (Bello *et al.*, 2017).

Tanto no leito fluidizado convencional quanto no afunilado, as biopartículas são suportadas pelo escoamento ascendente do fluido (gás e/ou líquido) (Fan, 1989). No entanto, as características hidrodinâmicas da fluidização em leitos cônicos/afunilados diferem daqueles de leito em coluna, devido a variação da velocidade superficial na direção axial do leito (Peng e Fan, 1997). Em leitos fluidizados afunilados, as biopartículas são estratificadas com baixa concentração no fundo e alta concentração no topo. Em contraste, no leito convencional, as concentrações de biopartículas são relativamente uniformes (Fan, 1989).

Em reatores afunilados, as regiões de leito fixo e fluidizado podem coexistir e um pico acentuado na queda de pressão/perda de carga pode ocorrer. Em velocidades reduzidas, o leito permanece fixo (Figura 3.6a). O leito fluidizado é formado quando as partículas no leito estão em um equilíbrio dinâmico, ou seja, a força de arraste do fluido e a força de empuxo (*buoyancy*), são exercidas na direção ascendente contra a força gravitacional que atrai as partículas no sentido descendente. A força de arraste é constante em qualquer posição do leito em coluna com partículas uniformes. No entanto, esta decresce na direção ascendente no leito afunilado por conta da redução na velocidade superficial do fluido (Peng e Fan, 1997). Assim, as partículas na parte inferior do leito irão fluidizar primeiro devido a maior velocidade nesta região (Figura 3.6b). A velocidade do meio de fluidização nesta região do leito pode ser maior que a velocidade terminal da partícula (Shi *et al.*, 1984). Por outro lado, as partículas na parte superior do leito permanecerão estáticas. Este fenômeno de fluidização parcial é específico para leito fluidizado afunilado. Ainda, estruturas centro anelar (*core-annulus*) também podem ser observadas com o acréscimo da velocidade e fluidização completa do leito (Figura 3.6c). O aumento da velocidade promove um regime de transição (Figura 3.6d) e velocidades superiores acarretam no desaparecimento da estrutura centro anelar (Figura 3.6e) (Peng e Fan, 1997).

Como pode-se ver na Figura 3.7, as curvas típicas de pressão-velocidade de leitos afunilados e de leitos em coluna diferem. A Figura 3.7 mostra ainda que a velocidade de fluidização (crítica – ponto C) em termos da velocidade superficial na base do biorreator, na qual as partículas da base começam a fluidizar, é maior do que a velocidade de mínima fluidização (ponto A). Dessa forma, a aplicação da mínima fluidização para coluna circular como velocidade superficial na base do leito afunilado resultaria em um leito fixo (ponto B). A perda de carga máxima no leito afunilado é maior que a perda de carga máxima (ΔP_{mf}) no leito em coluna. Assim, as relações hidrodinâmicas conhecidas para leitos em

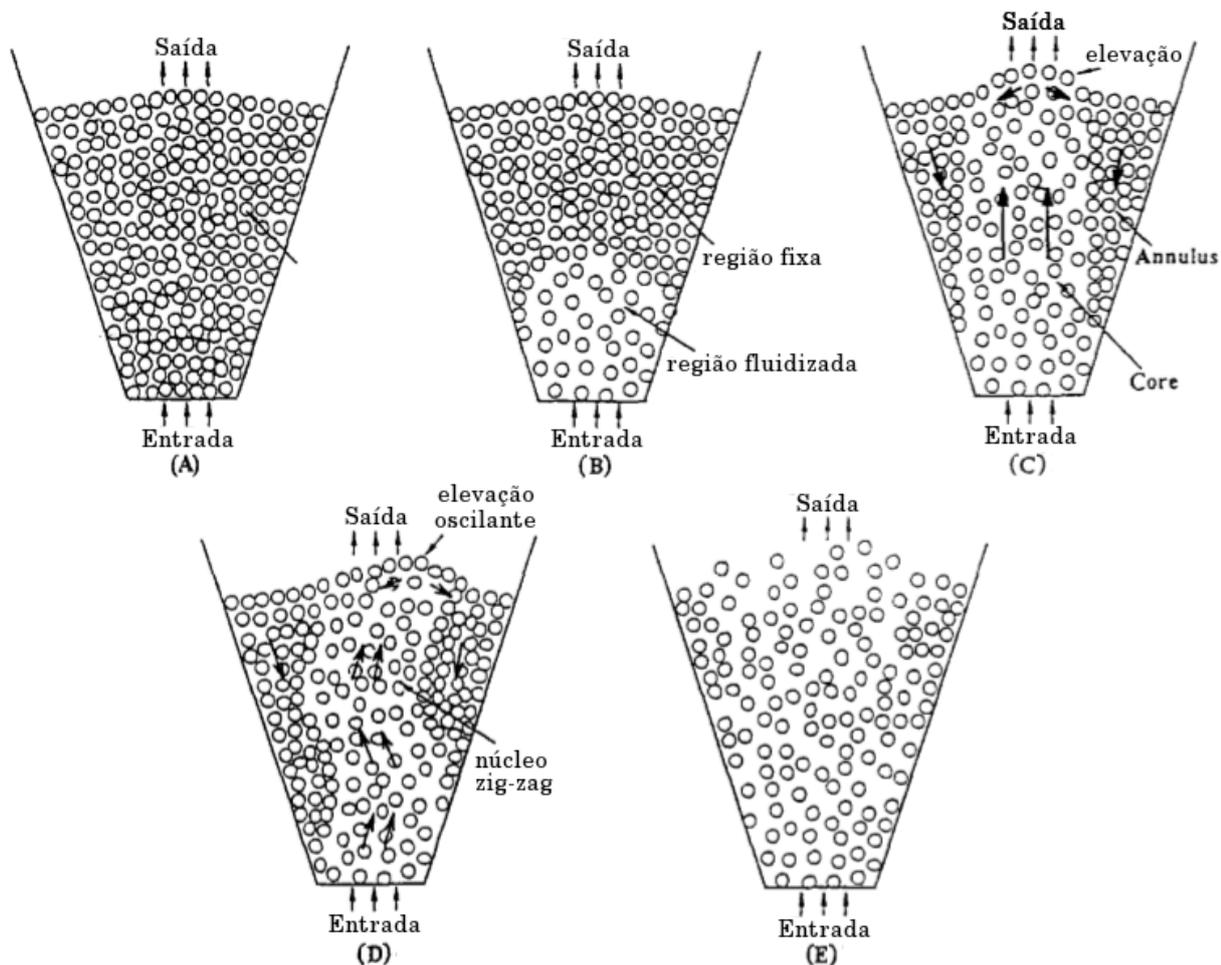


Figura 3.6: Regimes de fluidização em TBRs (a) fixo, (b) parcialmente fluidizado, (c-e) fluidizado (adaptado de Peng e Fan, 1997).

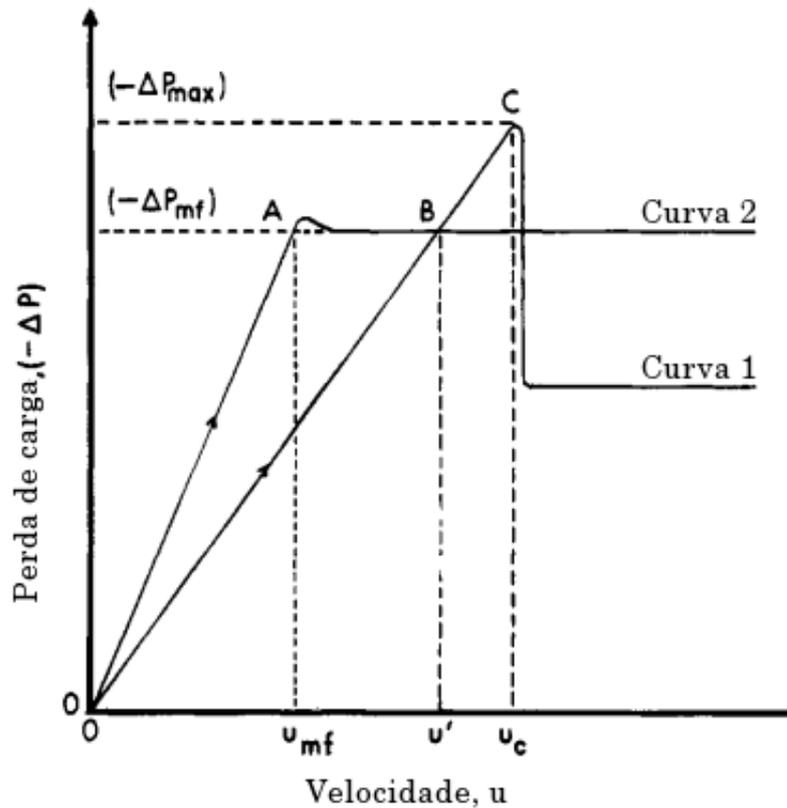


Figura 3.7: Curvas de fluidização em TBRs (curva 1) e FBRs (curva 2) (adaptado de Shi *et al.*, 1984).

coluna não são diretamente aplicáveis para leitos afunilados (Shi *et al.*, 1984).

3.4 Fluidodinâmica Computacional (CFD)

O objetivo de análises de CFD é obter um entendimento aprofundado do problema em consideração. Sob o ponto de vista de engenharia, o problema precisa alcançar a forma mais simples possível e que ainda descreva apropriadamente o sistema/fenômeno real. Como os resultados de simulação são frequentemente acompanhados por dados experimentais, a validade dos resultados e o objetivo geral da simulação precisam ser levados em conta (Maric *et al.*, 2014). Toda metodologia de simulação consiste de um procedimento de modelagem e de solução. Um modelo é uma representação matemática, um conjunto de equações do processo físico ou químico a ser predito ou simulado. Modelos geralmente negligenciam alguns fenômenos menos importantes ou menos influentes (Rusche, 2002). Por isto, apenas os parâmetros mais importantes do sistema simulado são mantidos considerando as hipóteses adotadas. Análise e redução do domínio da geometria

são frequentemente realizados, considerando a capacidade computacional e demais recursos (Maric *et al.*, 2014). O procedimento de solução especifica detalhes sobre como obter uma solução aproximada numericamente para as equações do modelo (Rusche, 2002).

Utilizando-se o método dos volumes finitos, o domínio do escoamento deve ser discretizado para aproximar a solução do modelo numericamente. A discretização espacial consiste na divisão do domínio do escoamento em uma malha numérica ou computacional, frequentemente com volumes e formas diferentes. Desta forma, a malha é um dos componentes mais importantes da simulação: problemas de convergência são frequentemente causados por uma malha de qualidade insuficiente (Maric *et al.*, 2014). Na medida em que se aumentam o número de pontos discretos em uma malha, chega-se mais próximo da solução exata (Patankar, 1980). Por outro lado, deve-se também obter uma malha numérica que permita a simulação do equipamento real sem um consumo excessivo dos recursos computacionais (Rosa, 2002). Por isso, realizam-se estudos sistemáticos de convergência de malha, que são os métodos mais comuns e diretos, e possivelmente constitui a técnica mais confiável para a quantificação da incerteza numérica. Apesar da desvantagem em requerer a geração de diversas malhas, essa abordagem pode ser usada para considerar de forma confiável a convergência de qualquer quantidade de interesse (Roache, 2009). Juntamente com a geração da malha, a solução ou processamento é normalmente a etapa que mais consome tempo da análise de CFD. Este tempo depende muito do modelo matemático, esquemas numéricos para aproximar a solução, bem como a geometria e malha. Isto se deve ao fato de, em simulações em CFD, as equações diferenciais serem substituídas por um sistema de equações algébricas/lineares que resultam em matrizes com um grande número de coeficientes.

Além da preocupação com a qualidade da malha, problemas multifásicos também oferecem uma complicação adicional, uma vez que há diferentes abordagens para a solução destes casos, adequadas para situações específicas. Por exemplo, há a abordagem VOF (*volume of fluid*), Euleriana-Euleriana e Euleriana-Lagrangeana, respectivamente usadas para: interfaces bem definidas resolvendo um único campo do escoamento, um campo para cada fase, ou resolvendo cada partícula ou parcela de fluido (Rosa *et al.*, 2017).

A abordagem Euleriana-Euleriana emprega equações de conservação de massa e movimento médios para descrever o movimento transiente de ambas as fases. No modelo de dois-fluidos, ambas as fases são descritas usando equações de conservação Eulerianas.

Cada fase é tratada como um contínuo, cada uma interpenetrante às demais e é representada por equações de conservação de valores médios no volume de controle. O processo de média de indicadores de fase introduz a fração volumétrica (α) no conjunto de equações, que é definida como a probabilidade de que certa fase esteja presente em um certo ponto no espaço e tempo (Rusche, 2002).

Devido à perda de informação associada ao processo de média, termos adicionais para a transferência de movimento entre as fases aparecem na equação média de movimento de cada fase, que requer fechamento. Este termo é conhecido como um termo de transferência médio interfásico, e leva em conta o efeito médio das forças atuando na interface entre a fase contínua e a discreta. O modelo de dois-fluidos é aplicável para todos os regimes de escoamento, incluindo regimes estratificados, dispersos ou intermediários, uma vez que a topologia do escoamento não é prescrita. No entanto, a formulação dos termos de transferência entre as fases e o modelo de turbulência bifásico são cruciais a esta metodologia, pois ela depende da natureza exata do escoamento (Rusche, 2002).

Quanto ao fechamento da turbulência, este problema surge da aplicação da decomposição de Reynolds nas equações instantâneas de transporte. Este processo fornece equações médias de transporte, bem como um tensor turbulento ou tensor de Reynolds, o qual pode ser estimado através de diferentes modelos (Bird *et al.*, 1962). Esta abordagem é conhecida como RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*), na qual todas as escalas turbulentas são modeladas. Há também a abordagem LES (*Large Eddy Simulation*), que modela dentro da escala de Kolmogorov e resolve as demais escalas e DNS (*Direct Numerical Simulation*) onde todas as escalas são resolvidas. Apesar desta última ser a técnica mais precisa para determinar as propriedades de escoamentos turbulentos, DNS é uma abordagem cara e impraticável para a aplicação em processos industriais (Rosa *et al.*, 2017). Felizmente, o nível de detalhes dado pela DNS não é necessário na maioria das aplicações de engenharia (Rusche, 2002).

A derivação dos termos de transferência interfásicos médios começa pelo termo de movimento instantâneo. Os principais componentes deste termo são devido às forças de arraste, sustentação e massa virtual atuando na interface das fases. A transferência de movimento entre as fases é determinado das forças instantâneas agindo na fase dispersa. Estas forças dependem da fração volumétrica (Rusche, 2002).

Há ainda a transferência de quantidade de movimento entre partículas. Para modelar

as interações entre partículas sólidas, há a teoria cinética do escoamento granular (*Kinetic Theory of Granular Flow – KTGF*), que foi desenvolvida como uma analogia à teoria cinética dos gases (Gidaspow, 1994). Neste assume-se que, sob certas condições de escoamento, as colisões entre partículas fornecem o principal mecanismo para o transporte das propriedades, tais como energia e movimento (Lun *et al.*, 1984). O modelo KTGF introduz o coeficiente de restituição por conta do comportamento não ideal das colisões entre sólidos. Este é um parâmetro relevante para a predição acurada de características hidrodinâmicas. Este coeficiente indica a quantidade de energia dissipada a partir das colisões inelásticas, as quais podem afetar a condutividade, viscosidade e temperatura granular (Wang *et al.*, 2013). Este valor basicamente depende das características das partículas. Para sistemas gás-sólido, valores entre 0,97 e 0,99 são recomendados (Wang *et al.*, 2013). No entanto, este coeficiente costuma ser um parâmetro ajustável na maioria das simulações em CFD, normalmente definidas por “experiência” (Du *et al.*, 2006). Isto é feito tanto com diferentes valores para cada tipo de interação (partícula-partícula e partícula-parede) (Huilin *et al.*, 2007), como um valor constante independente do tipo de interação (Cheng *et al.*, 2014), ou devido à presença de fluido intersticial (Liu *et al.*, 2016). Grima e Wypych (2011) mediram o coeficiente de restituição para carvão usando uma câmera de alta velocidade para analisar a velocidade antes e depois do impacto. Valores de 0,55 e 0,60 foram obtidos para colisões partícula-partícula e partícula-acrílico, respectivamente. No entanto, a presença de um biofilme no entorno de materiais suporte pode alterar seu coeficiente de restituição, o qual pode diferir dos valores medidos somente para partículas.

Na simulação de reatores multifásicos, atenção deve ser dada à modelagem dos fenômenos envolvidos. Em escoamentos gás-sólido, por exemplo, onde a fase dispersa possui massa específica muito maior que a da fase contínua, é observado que a força de arraste domina as demais forças interfaciais (Crowe, 2000). A turbulência e as interações entre partículas também desenvolve papéis importantes (Arastoopour, 2001; Rao *et al.*, 2012). Para sistemas gás-líquido, onde a fase dispersa possui uma massa específica muito menor que a da fase contínua, a influência de outras forças tais como a sustentação e a massa virtual também é observada (Pang *et al.*, 2010; Pang e Wei, 2011; Pourtousi *et al.*, 2014). Finalmente, em sistemas líquido-sólido, onde as propriedades das fases não são tão diferentes, há falta de dados referentes à magnitude das forças atuantes. Medições experimentais indicam que a componente radial do movimento das partículas em leitos fluidizados líquido-sólido pode

corresponder em até 30% da magnitude de velocidade (Carlos e Richardson, 1968), isto indica que a força de sustentação pode não ser desprezível. Na simulação destes sistemas, sólidos normalmente são tratados como partículas esféricas com o mesmo diâmetro. No entanto, partículas presentes em efluentes podem possuir características não usuais, tais como tamanhos relativamente grandes, distribuição ampla de tamanhos de partículas e formatos extremos. A rugosidade de biopartículas também pode afetar as interações entre as fases (Hermanowicz e Ganczarczyk, 1983). Como a influência tanto da superfície da partícula e da massa específica na perda de carga é calculada considerando valores efetivos destas quantidades (Ergun, 1952), mais informações sobre tais partículas irregulares são necessárias para corrigir a força de arraste, os modelos de tensão de sólidos e, com isso, reduzir incertezas (Yu *et al.*, 2013).

Como pode-se observar, a condução de simulações requer uma quantidade de informações a respeito dos fenômenos e fases presentes, mas também produz uma enorme quantidade de dados que devem ser tratados, analisados e discutidos no pós-processamento. Quando dados experimentais estão disponíveis para comparação dos resultados das simulações, aumenta-se a margem de confiança em relação aos resultados obtidos (Maric *et al.*, 2014). Sobre a comparação entre valores experimentais e numéricos, é importante ter as seguintes definições (Roache, 2009):

Calibração é a estimativa e ajuste de parâmetros e constantes de modelo para melhorar a concordância entre a saída do modelo e o conjunto de dados;

Verificação consiste em checar se o código computacional resolve as equações de um modelo de modo correto (procedimento matemático);

Validação é o processo de determinar o grau com que um modelo (e seus dados associados) é uma representação acurada do mundo real da perspectiva dos usos intencionados para o modelo (procedimento científico/engenharia).

Por fim, não há validação sem acompanhamento experimental. Por outro lado, é muito importante que os experimentos sejam projetados especificamente para uma validação, e com colaboração entre experimentalistas e modeladores (Roache, 2009).

3.4.1 Simulação de Unidades de Tratamento Biológico de Efluentes

A respeito de leitos fluidizados, a maior parte da literatura enfatiza sistemas bifásicos gás-sólido. Contudo, os reatores de leito fluidizado também são utilizados para tratamento de efluentes, no qual sistema gás-sólido não é aplicável (Bello *et al.*, 2017). Dessa forma, uma breve revisão envolvendo aplicação de CFD em diferentes processos adotados para o tratamento de efluentes são apresentados. Esta subseção foi adaptada do capítulo de livro de Rosa *et al.* (2017). Na subseção seguinte (3.4.2) são apresentados estudos que envolvem fluidização líquido-sólido não aplicados a sistema biológico.

O aumento no número de processos aplicados e/ou potencialmente aplicáveis ao tratamento de efluentes foi também acompanhado pelo aumento nos custos e complexidade operacional destes sistemas. As aplicações cobrem atualmente uma ampla faixa de resíduos (sólidos e líquidos), com características físico-químicas e reológicas completamente diferentes. Uma vez que a manutenção de sistemas biológicos operando durante um longo período de tempo na eficiência desejada depende do padrão de escoamento, o conhecimento sobre a reologia do efluente é necessária.

Modelos matemáticos estão disponíveis para fornecer uma melhor predição da dinâmica de biorreatores. Abordagens semi-empíricas são tradicionalmente utilizadas. Contudo, CFD tem sido aplicado em diversos processos para tratamento de efluentes. Uma justificativa do seu uso é que esta técnica é capaz de determinar resultados locais e completos quando comparado com abordagens puramente empíricas amplamente utilizadas. No entanto, CFD requer mais tempo comparado aos métodos tradicionais, uma vez que modelos empíricos e semi-empíricos fornecem predições mais rápidas. CFD requer mais tempo desde a geração de malha e análises, definição dos modelos a serem utilizados, assim como durante a solução do problema, os quais podem levar horas ou meses dependendo do tamanho e complexidade do problema, associado à capacidade computacional. O alto custo computacional requerido pode limitar a escolha dos modelos, os quais precisam ser simplificados de modo a resolver o problema.

Na Figura 3.8 é possível observar a evolução temporal de trabalhos publicados relacionados com o tratamento de efluentes em sua totalidade (experimental, simulação e CFD), simulações macroscópicas e microscópicas ², ou contendo apenas CFD (microscópica).

² Segundo Bird *et al.* (1962), no nível macroscópico um conjunto de equações (balanços macroscópicos) é elaborado para descrever como propriedades médias no sistema são alteradas por correntes de entrada

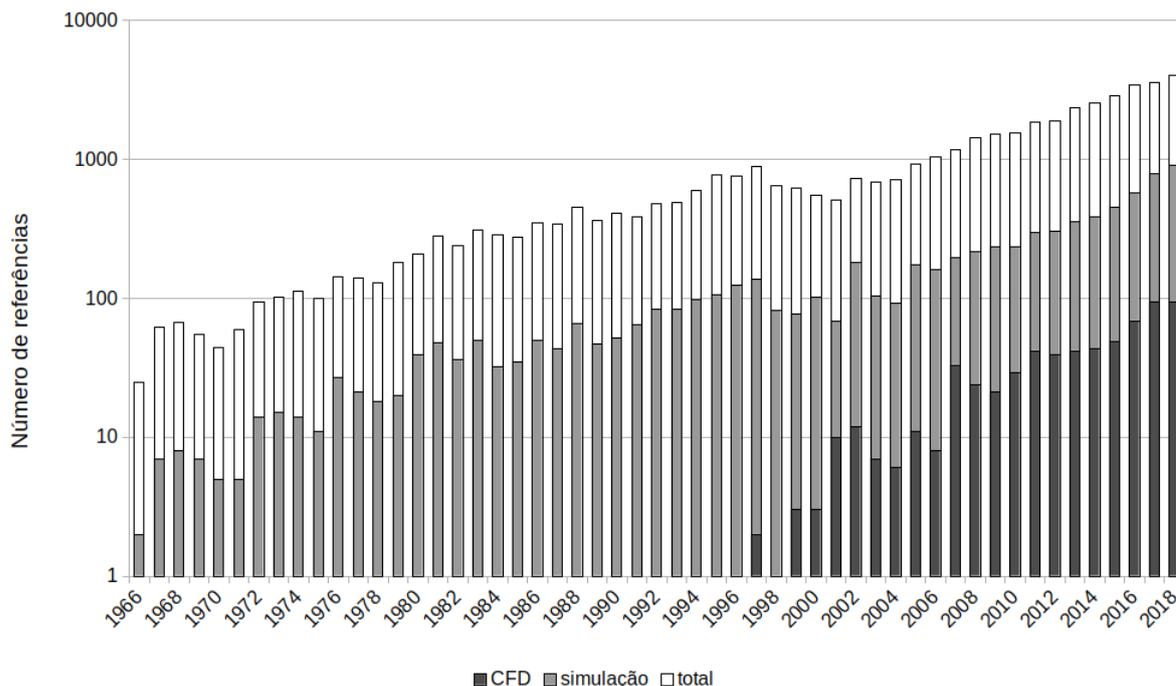


Figura 3.8: Evolução temporal de estudos publicados referentes a tratamento de efluentes (adaptado de Rosa *et al.*, 2017)

Como pode-se observar, há um aumento progressivo na quantidade de estudos publicados. Uma grande parte destes deve-se a estudos de simulação, desenvolvidos há mais de meio século. Nota-se um aumento relativamente recente nas publicações utilizando CFD, as quais foram resultado da maior disponibilidade de recursos computacionais e códigos de simulação. Para obter esta figura, diversas pesquisas foram feitas na base de dados do Science Direct com diferentes combinações de palavras-chave: SBR (*Sequencing Batch Reactors*), ASBR (*Anaerobic Sequencing Batch Reactors*), lagoas (aeradas, *wetlands*, etc.), biodigestores, FBR (*Fluidized Bed Reactor*), AFBR (*Anaerobic Fluidized Bed Reactor*), EGSB (*Expanded Granular Sludge Bed Reactor*), UASB (*Upflow Anaerobic Sludge Bioreactors*), simulação e CFD.

A simulação de diferentes processos envolve a modelagem de diferentes fenômenos. Por e saída. Nenhuma tentativa é feita para tentar entender os detalhes do sistema. No nível microscópico, examina-se o que está acontecendo em uma pequena região do equipamento, na qual a hipótese do contínuo é válida. Equações de transporte descrevem como as propriedades mudam nessa pequena região. No nível molecular, busca-se entender os fundamentos de mecanismos de transporte em termos de estrutura molecular e forças intermoleculares. Neste nível, a hipótese do contínuo não é válida. De acordo com essas definições, CFD encontra-se no nível microscópico.

exemplo, sistemas que envolvem o uso de membranas, plantas, e leitos fixos podem ser modelados delimitando uma região e tratando como meio poroso, de acordo com a lei de Darcy (Qi *et al.*, 2013). Para biorreatores com agitação mecânica, os quais englobam a maioria das aplicações de CFD em bioprocessos, a despeito dos elevados custos computacionais por conta dos impelidores, diferentes abordagens são adotadas, desde a consideração de reologias newtoniana ou não-newtoniana, ao cálculo de uma, duas ou mais fases, bem como a consideração de distribuição de tamanhos de partículas. No entanto, a maioria dos estudos envolvem escoamento monofásico, devido à dificuldade em simular escoamentos mais complexos, como gás-líquido, líquido-sólido, gás-líquido-sólido.

Comumente, a aplicação de abordagens bifásica ou trifásica é requerida para a simulação de sistemas envolvendo líquido (efluente a ser tratado), gás (ar aplicado em processos aeróbios e/ou biogás gerado no processo) e/ou sólido (biomassa fixa e/ou suspensa). Em baixas concentrações, diversos autores desconsideram o cálculo do movimento das partículas, reduzindo o número de fases e assim simplificando o problema a ser resolvido. A hipótese de que os sólidos suspensos tem o mesmo comportamento dinâmico da fase líquida pode justificar a consideração de ambos como uma única fase “mistura”. No entanto, a reologia desta mistura deve ser considerada, uma vez que a concentração de sólidos pode atribuir uma característica não-Newtoniana à fase (Wu e Chen, 2008; Wu, 2010, 2011; Lopez-Jimenez *et al.*, 2015; Sajjadi *et al.*, 2016). No caso de efluentes líquidos, a reologia é um fator que deve ser sempre levado em conta, principalmente quando se trata de resíduos com comportamentos reológicos distintos, como efluentes doméstico e industrial (Eshtiaghi *et al.*, 2013).

A aplicação do biorreator de leito fluidizado para o tratamento de efluentes, por meio da digestão anaeróbia, enquadra-se num sistema trifásico, onde a fase gás é produzida (biogás) na presença de substrato e biopartículas. Para fins de modelagem, segundo Hermanowicz e Ganczarzyk (1985) *apud* Grady Jr. *et al.* (2011) se a fase gás apresentar uma vazão relativamente pequena em relação a fase líquida, o sistema poderá ser tratado como bifásico. Esta restrição pode não ser válida para sistemas com alta produção de gás (Grady Jr. *et al.*, 2011), ou ainda, para tratamento aeróbio, no qual ocorre a injeção de ar para propiciar o consumo do substrato pelos microrganismos.

Quando mais de uma fase está presente, as interações entre elas devem ser modeladas. O movimento de cada fase pode ser predito com maior acurácia com o uso de modelos

adequados para as forças interfaciais presentes no sistema. A força de arraste, sendo a força dominante, é às vezes a única força interfacial considerada na simulação da fluidodinâmica de processos biológicos (van Baten *et al.*, 2003; Lopes e Quinta-Ferreira, 2007; Panneerselvam *et al.*, 2008). Contudo, outras forças, como sustentação e massa virtual, podem afetar significativamente o padrão do escoamento (Luo e Al-Dahhan, 2011; Rosa *et al.*, 2015).

A fim de obter resultados mais precisos para essas interações, o uso de abordagem Euleriana-Lagrangiana é por vezes adotada (Coughtrie *et al.*, 2013; Ghatage *et al.*, 2014), mas ainda assim alguns casos requerem mais estudos para obter a concordância numérica e experimental (Dapelo *et al.*, 2015).

Outro importante aspecto a ser considerado é a modelagem da turbulência. Esta importância se deve ao fato de que, apesar dos processos biológicos operarem a velocidades superficiais reduzidas, estes processos também podem operar em regimes turbulentos, como em grandes unidades ou com agitação mecânica. A importância de uma predição adequada da turbulência em processos biológicos é justificada por estes operarem em um balanço delicado: maior turbulência garante melhor contato entre as fases presentes, mas também promove maior tensão de cisalhamento, os quais devem ser mantidos dentro de um limite tolerável (Bridgeman *et al.*, 2008; Nurtono *et al.*, 2012; Koerich e Rosa, 2017). Nestas condições, por vezes é sugerido desconsiderar o uso de quaisquer modelos de turbulência (Hamidipour *et al.*, 2012). Os modelos RSM (Reynolds *Stress Model*) e *transition SST* (*Shear Stress Transport*) k-omega, ambos da abordagem RANS forneceram uma predição mais acurada da hidrodinâmica para um biorreator com agitação pneumática (Coughtrie *et al.*, 2013), sendo a abordagem LES também recomendada para esses sistemas (Pourtousi *et al.*, 2014). LES também foi aplicada em tanque pequeno (30×30cm) com agitação mecânica (Zadghaffari *et al.*, 2010), podendo ser impraticável em problemas de escala industrial.

Diversos estudos consideram apenas os aspectos fluidodinâmicos. Zima-Kulisiewicz *et al.* (2008) avaliaram um biorreator em batelada com agitação pneumática, observando que este possui comportamentos diferentes na parte inferior, meio e topo do reator. Observou-se também que a geometria interfere na tensão de cisalhamento global. A tensão de cisalhamento e *washout* foram avaliados numericamente em um ASBR determinando uma condição adequada para operação (Koerich e Rosa, 2017). Para esse mesmo sistema, ope-

rando a baixo número de Reynolds, Koerich e Rosa (2016) verificaram que regiões em regime de transição tiveram influência desprezível sobre o escoamento, indicando que é predominantemente turbulento. Maurina *et al.* (2014, a) estabeleceram que a recirculação em direção ascendente é mais eficiente e Maurina *et al.* (2014, b) estudaram a inclusão de diferentes dispositivos para alimentação de substrato, os quais podem promover maior turbulência. Uma grande preocupação está na determinação da presença de zonas mortas, seja utilizando agitação hidráulica (Lopez-Jimenez *et al.*, 2015; Sajjadi *et al.*, 2016; Mendoza *et al.*, 2011) ou agitação pneumática (Vesvikar e Al-Dahhan, 2005).

Não importa o quão confiável é o conjunto de métodos matemáticos, predições numéricas precisam ser comparadas com dados experimentais, de modo a validar os modelos utilizados. Assim, também é útil conhecer como os dados experimentais foram obtidos. Dentre os métodos disponíveis, há a Anemometria por Fio Quente (*Hot Film Anemometry* – HFA), Velocimetria por Efeito Doppler (*Laser Doppler Velocimetry* – LDV) e Velocimetria por Imagem de Partículas (*Particle Image Velocimetry* – PIV) (Trad *et al.*, 2016). Todos eles são capazes de medir o vetor de velocidade local e flutuações de velocidade. Assim é possível estimar propriedades do escoamento, tais como turbulência, taxa de deformação, tensão de cisalhamento e tensão de cisalhamento turbulenta. A vantagem do PIV e LDV é que ambas as técnicas são não-intrusivas, ao contrário do HFA que utiliza um sensor em contato com o fluido, o qual pode afetar o escoamento. Por outro lado, a desvantagem do PIV e LDV em relação ao HFA é a necessidade de transparência, o qual pode ser um fator limitante quando se leva em conta a aplicação em efluentes, com elevada turbidez.

Além disso, alguns aspectos observados por Rosa *et al.* (2017) devem ser ressaltados:

- Nem todos os artigos apresentam uma estimativa do erro associado as malhas. Na verdade, muitos nem mencionam ter realizado algum tipo de teste de sensibilidade de malha;
- Simplificações de geometria são utilizadas, muitos estudos propõe o uso de malha bidimensional, considerando simetria;
- Por outro lado, aspectos geométricos reconhecidos por alterar o campo de escoamento também são desconsiderados. Por exemplo, a não inclusão do fundo cônico, tratando como seção circular, na região de entrada do escoamento;

- Diversos trabalhos utilizam modelagem simplificada (redução de número de fases, modelo de turbulência mais simples), ou desconsiderando alguma força interfacial;
- Fase dispersa é incluída na fase contínua, alterando a reologia. No entanto, alguns reatores (como UASB) são projetados para operar com três fases distintas. Independente da configuração do biorreator, todas as fases precisam ser consideradas quando reações são inclusas;
- Alguns estudos incluem cinética microbiológica, mas a predominância é de estudos desconsiderando esta. Ainda assim, estes estudos são relevantes por indicarem estruturas do escoamento como caminhos preferenciais, zonas mortas, mas estes devem ser considerados estudos preliminares, uma vez que fenômenos importantes que alteram a fluidodinâmica ainda não estão inclusos no problema.

Por fim, para avaliar a validade dos modelos usados, estudos utilizando CFD devem fornecer detalhes dos procedimentos necessários para reproduzir os casos apresentados, os quais muitos vezes não estão inclusos.

3.4.2 Simulação de Leitos Fluidizados Líquido-Sólido

Estudos com simulação de leitos fluidizados líquido-sólido comumente consideram uma modelagem Euleriana-Euleriana ou Euleriana-Lagrangiana, incluindo a teoria cinética do escoamento granular para a fluidização de partículas densas e perfeitamente esféricas.

Panneerselvam *et al.* (2007) avaliaram a influência dos modelos de arraste entre fases, condições de entrada, refino de malha, sensibilidade com passo de tempo, bem como simulações bidimensionais e tridimensionais. Utilizando o modelo de arraste de Gidaspow, modelo de turbulência $k-\epsilon$ e sem KTGF, a concordância com dados experimentais ficou entre $\pm 7\%$.

Cornelissen *et al.* (2007) usaram as correlações de força de arraste de Gidaspow e Wen-Yu, e uma abordagem laminar justificada, segundo os autores, devido à falta de modelos e/ou constantes empíricas corretas. As colisões entre as partículas foram consideradas inelásticas e as forças de sustentação e massa virtual foram desconsideradas. Na faixa de velocidades avaliada, de 0,0085 to 0,110 m/s, e partículas de 1,13 mm com densidade de 2540 kg/m³, os resultados numéricos indicaram valores da porosidade total do leito dentro de 5% a partir dos resultados experimentais. Os resultados preditos para a expansão do

leito também foram comparados com a expressão de Richardson e Zaki, apresentando boa concordância. Zhang *et al.* (2012) simularam as mesmas condições, mas sem a inclusão do modelo KTGF e considerando a correlação de Gibilaro para a força de arraste. Com este modelo, uma melhor concordância foi obtida entre os valores simulados e experimentais para a expansão do leito, comparado aos resultados obtidos por Cornelissen *et al.* (2007). Ressalta-se que ambos os estudos compararam propriedades globais do leito fluidizado. A inclusão da força de massa virtual na modelagem foi avaliada por Huang (2011), usando esferas de vidro com 3 mm de diâmetro e 2500 kg/m³ de massa específica. Neste estudo, os efeitos da turbulência foram desconsiderados devido à baixa velocidade do fluido. Em escoamentos gás-sólido, segundo o autor, o efeito da massa virtual pode ser ignorado devido a grande razão entre as massas específicas das fases sólida e gás. No caso da fluidização líquido-sólido, onde esta razão está na ordem de 1, esta força tem sido usada para corrigir a transferência de quantidade de movimento entre as fases. Essa força não forneceu melhores resultados, mas mostrou efeitos significativos sobre os resultados de simulação.

Avaliando partículas com menor densidade do que os outros estudos (2173 kg/m³), Visuri *et al.* (2012) observaram que diferentes correlações para a força de arraste forneciam previsões significativamente diferentes, subestimando ou superestimando a altura do leito fluidizado, sendo que a correlação de Gibilaro forneceu resultados mais precisos para o caso. Estas diferenças foram associadas com as características dos sistemas estudados, nos quais os modelos foram desenvolvidos (gás-líquido ou gás-sólido). Os modelos de força de arraste utilizados nestes estudos consideraram partículas rígidas e lisas. Contrariamente, biopartículas são macias e tem superfície rugosa, assim como uma ampla faixa de baixas densidades. O coeficiente de arraste de biopartículas é reportado para ser maior do que em partículas rígidas e lisas (Nicolella *et al.*, 2000).

Dentre as demais condições e modelos avaliados na literatura, uma síntese é apresentada na Tabela 3.1. Nesta pode-se observar as abordagens mais comumente adotadas, como a inclusão ou não de efeitos da turbulência sobre o escoamento, a consideração ou não de colisões entre partículas, e o uso de partículas relativamente densas ($\rho > 2000$ kg/m³) na maioria dos trabalhos.

Tabela 3.1 - Síntese dos modelos adotados em estudos publicados na literatura.

| Autor (ano) | ρ_p [kg/m ³] | diâmetro [mm] | modelo de arraste | colisões | turbulência | observações |
|------------------------------------|----------------------------------|----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------|---------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|
| Panneerselvam <i>et al.</i> (2007) | 2500 | 1,00 3,00 | Gidaspow <i>et al.</i> (1983) Di Felice (1994) Syamlal e O'Brien (1988) | – | $k-\epsilon$ | |
| Cornelissen <i>et al.</i> (2007) | 2540 | 1,13 | Gidaspow <i>et al.</i> (1983) e Wen e Yu (1966) | KTGF | laminar | – |
| Gevrin <i>et al.</i> (20108) | 1140 2540 7780 | 6,35 3,00 4,50 | Wen e Yu (1966) | KTGF | laminar Simonin (1991) | Re_t : 785 a 3665 |
| Reddy e Joshi (2008) | – | 25,4 | – | – | laminar | malha ao redor das partículas |
| Reddy e Joshi (2009) | 1075 a 2803 | 0,8 a 3,95 | Joshi (1983) | KTGF | laminar | Re: 0,138 a 1718 |
| Huang (2011) | 2500 | 3,00 | Beetstra <i>et al.</i> (2007) Gidaspow <i>et al.</i> (1983) e Wen e Yu (1966) | KTGF | $k-\epsilon$ laminar | mistura binária massa virtual |
| Zhang <i>et al.</i> (2012) | 2540 3000 | 1,13 2,50 | Gibilaro <i>et al.</i> (1985) modificado | não | laminar | força adicional |
| Visuri <i>et al.</i> (2012) | 2173 | 1,51 | diversos | não informado | não informado | – |
| Vivacqua <i>et al.</i> (2013) | 2500 3800 | 1,85 0,55 | não informado | E-L | não informado | mistura binária, coeficientes de dispersão |
| Peng <i>et al.</i> (2014) | 2300 | 3,00 | Gidaspow <i>et al.</i> (1983) | não | não informado | frequência de colisões |
| Liu <i>et al.</i> (2016) | 7800 2540 7680 | 6,00 2,06 6,00 | Huilin <i>et al.</i> (2003) | DEM | não informado | massa virtual, coeficiente de restituição |
| Ye <i>et al.</i> (2018) | máximo 1500 | variável (PBE) | Syamlal e O'Brien (1988) | – | $k-\epsilon$ | para partículas úmidas hidrodinâmica, termodinâmica, cinética de cristalização |

3.5 *Fechamento do Capítulo*

Este capítulo apresentou uma breve revisão dos aspectos da fluidização (sem e com presença de biofilme), do biorreator de leito fluidizado convencional e afunilado, bem como aspectos da modelagem para fluidodinâmica computacional e sua aplicabilidade. Na operação do reator de leito fluidizado convencional, as velocidades de mínima fluidização e terminal são importantes para manter a qualidade da fluidização. No entanto, o reator afunilado pode apresentar mais de um regime de forma concomitante. Este também apresenta velocidade crítica (com máximo de pressão) acima da mínima fluidização e partículas com velocidades acima da terminal. Verificou-se também o aumento da quantidade de estudos envolvendo técnicas de CFD para unidades de tratamento de efluentes, apesar de ainda haverem relativamente poucos estudos envolvendo fluidização líquido-sólido – menos ainda se for considerada geometria afunilada e partículas pouco densas. Em aplicações de CFD com a abordagem Euleriana-Euleriana, equações de fechamento são necessárias, tanto para interações entre as fases, quanto para a turbulência. Dentre as forças interfaciais, a força de arraste é obtida a partir de correlações empíricas. Algumas são obtidas para partículas, gotículas, bolhas e, até mesmo, considerando biopartículas. Estas últimas indicam que o arraste para biopartículas é superior em relação a partículas limpas, lisas e densas. Por fim, a revisão da literatura reforça e justifica o objeto de estudo em primeiramente obter um modelo adequado para então analisar a fluidodinâmica de fluidização de biopartículas em um biorreator afunilado.

Materiais e Métodos

Uma análise baseada na modelagem e simulação por CFD pode normalmente ser resumida na definição do problema, modelagem matemática, pré-processamento e geração de malha, solução, pós-processamento e discussão de resultados. Alguns desses procedimentos devem ser realizados múltiplas vezes, de modo a finalmente obter os resultados com a qualidade desejada. Dessa forma, neste capítulo, os principais aspectos que envolvem a análise em CFD para o biorreator anaeróbio de leito fluidizado são apresentados. A modelagem matemática será apresentada no Capítulo seguinte.

4.1 Biorreator Anaeróbio de Leito Fluidizado Afunilado e Condições Operacionais

No presente estudo foram utilizados dados experimentais de literatura (Wu *et al.*, 2009), obtidos em bioreatores afunilados por um período de 5 meses. O critério usado para estabelecer o estado pseudo-estacionário foi de que a variação na concentração de substrato fosse inferior a 10% em testes realizados em triplicata, com duas amostragens semanais. Após esse período foram determinados o diâmetro das biopartículas e a espessura do biofilme. Nos casos bifásicos, a alimentação de substrato foi cessada e o líquido contido no biorreator foi continuamente recirculado até o consumo total de substrato. A partir disto, cada um dos experimentos foi operado com diferentes vazões de recirculação. Após esse período, medições de altura do leito foram realizadas de forma visual (utilizando uma régua).

Para avaliar numericamente estes casos, simulações foram conduzidas em um biorreator anaeróbio (afunilado) de leito fluidizado em escala de laboratório, com volume de trabalho

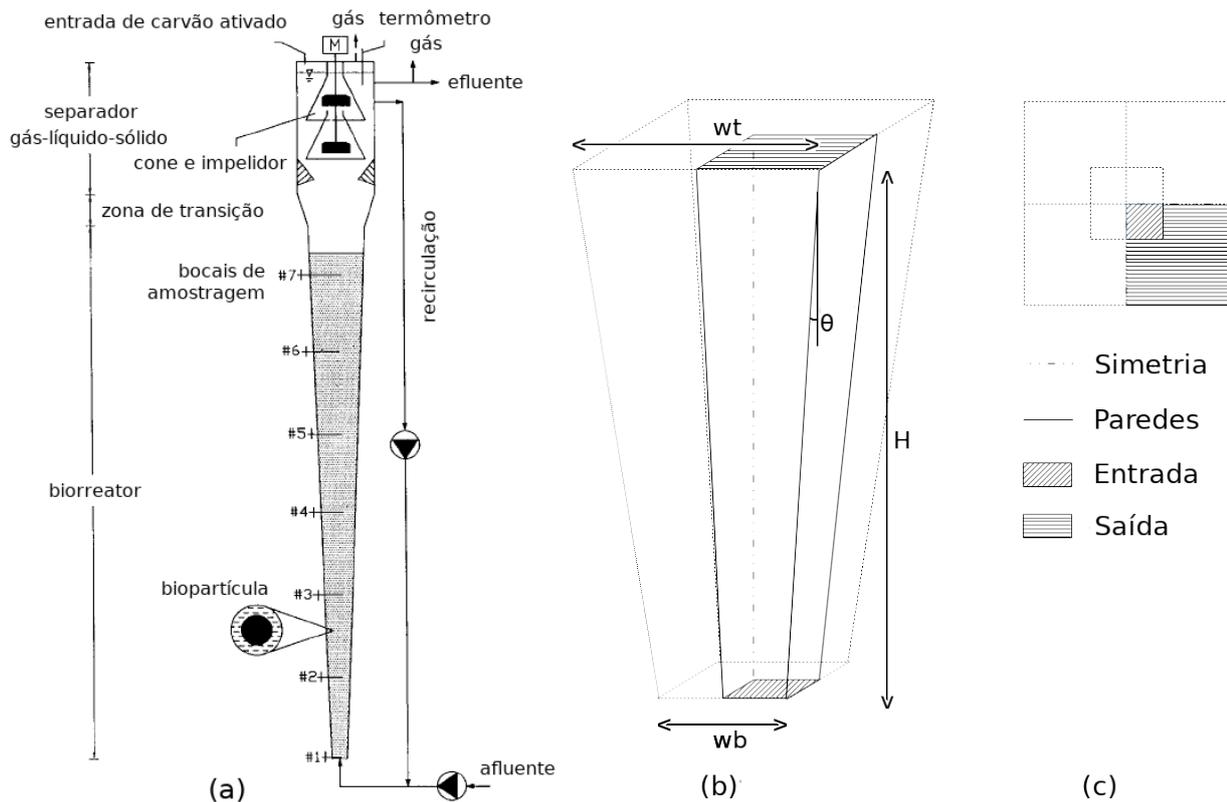


Figura 4.1: Biorreator afunilado (a) dimensões (adaptado de Huang e Wu, 1996), (b) geometria simulada, e (c) condições de contorno.

de 4 L (Figura 4.1a). Nos Casos 1, 2 e 3, especificados na Tabela 4.1, o biorreator possui dimensões de 1,295 m de altura (H), 0,024 m de largura na base (wb), 0,080 m de largura no topo (wt), e ângulo de inclinação nas paredes (θ) de aproximadamente $2,5^\circ$. Para os Casos 4, 5 e 6 (Tabela 4.1), as dimensões do biorreator são $H=0,895$ m, $wb=0,024$ m, $wt=0,103$ m e $\theta=5^\circ$. Uma abordagem bifásica (líquido-sólido), transiente e tridimensional foi considerada para simular inicialmente apenas $\frac{1}{4}$ da geometria, na qual condições de simetria foram aplicadas nas faces (Figuras 4.1b e 4.1c) de forma a representar o biorreator completo. Posteriormente, a geometria completa também foi usada. Dados obtidos a partir de experimentos bifásicos e trifásicos indicaram que a terceira fase (biogás gerado durante a digestão anaeróbia) tem pouca influência na altura do leito nas condições avaliadas por Wu *et al.* (2009) (Apêndice A). Por isto, a fase gás não foi incluída no presente estudo, no qual o foco foi realizar comparações com dados obtidos sem a formação de biogás, contendo apenas biopartículas e substrato. A não inclusão da fase gás no presente estudo não é considerada uma hipótese simplificadora, uma vez que foram utilizados dados experimentais de um sistema bifásico.

Tabela 4.1 - Parâmetros e condições operacionais.

| Caso | Ângulo do TBR | Espessura do biofilme [μm] | Massa específica da biopartícula [kg/m^3] | Class. Geldart | Faixa de velocidades de entrada [m/s] |
|------|---------------|-----------------------------------------|-------------------------------------------------------------|----------------|---------------------------------------------------------|
| 1 | 2,5 | 38 | 1420,06 | B | 0,0147 – 0,0783 |
| 2 | 2,5 | 73 | 1329,00 | B | 0,0293 – 0,0756 |
| 3 | 2,5 | 146 | 1216,64 | A | 0,0351 – 0,1451 |
| 4 | 5,0 | 39 | 1416,95 | B | 0,0147 – 0,0725 |
| 5 | 5,0 | 55 | 1371,55 | B | 0,0264 – 0,0727 |
| 6 | 5,0 | 83 | 1308,57 | A | 0,0351 – 0,1017 |

Fonte: adaptado de Wu *et al.* (2009).

O substrato foi composto por um efluente sintético contendo acetato, com $994,14 \text{ kg}/\text{m}^3$ de massa específica e $7,254 \times 10^{-4} \text{ kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$ de viscosidade. As biopartículas foram compostas de carvão ativado coberto por uma camada de biofilme (Wu *et al.*, 2009). Apesar dos grânulos de carvão ativado poderem apresentar uma esfericidade entre 0,7 e 0,9 (Kunii e Levenspiel, 1991), o crescimento de uma camada de biofilme pode alterar a esfericidade das biopartículas (Grady Jr. *et al.*, 2011). Como a esfericidade não foi reportada no ensaio experimental, esta não foi incluída na modelagem. No entanto, quaisquer efeitos da não-esfericidade são incorporados no modelo calibrado. Nas simulações propostas, todas as biopartículas foram consideradas esféricas. A despeito da distribuição de propriedades das biopartículas, no presente estudo também foram consideradas biopartículas idênticas, com o mesmo tamanho médio e densidade.

Em todos os casos, o substrato é alimentado através da base do biorreator. Todas as condições avaliadas no presente estudo foram obtidas de Wu *et al.* (2009) e estão resumidas na Tabela 4.1. Em todos os casos, as biopartículas presentes encontram-se no limiar entre as classificações A e B de Geldart, conforme Figura 3.2.

Para obter a densidade da biopartícula (ρ_{biop}), a seguinte expressão foi utilizada (Wu *et al.*, 2009):

$$\rho_{biop} = \frac{\rho_{msu} + \rho_{biof}[(1 + (2\delta/d_{ms}))^3 - 1]}{(1 + (2\delta/d_{ms}))^3} \quad (4.1)$$

onde ρ_{msu} é a densidade úmida do material suporte ($1.570 \text{ kg}/\text{m}^3$), ρ_{biof} é a densidade do biofilme ($1.050 \text{ kg}/\text{m}^3$ conforme Huang e Wu, 1996), δ é a espessura do biofilme (varia de acordo com o caso [m]) e d_{ms} é o diâmetro médio do material suporte ($6,33 \times 10^{-4} \text{ m}$).

Uma massa de 0,2 kg de partículas estava inicialmente presente no biorreator. Para garantir que exatamente essa quantidade estivesse presente no reator a ser simulado, o seguinte procedimento foi adotado em um *script*:

- calculou-se o número de partículas (n_p) referente a 0,2 kg de carvão ativado:

$$n_p = \frac{0,2/\rho_p}{(1/6)\pi d_p^3}$$

- esse número corresponde ao número de biopartículas; por isto, o volume de uma biopartícula (que difere para cada caso, devido às diferentes espessuras de biofilme apresentadas na Tabela 4.1) foi usado para calcular o volume de biopartículas (V_{bio}) referente à essa quantidade de partículas:

$$V_{bio} = n_p(1/6)\pi d_{bio}^3$$

- considerando que, na condição inicial, as biopartículas permanecem em repouso, o valor de 0,62 (máximo empacotamento) foi utilizado como sendo a fração volumétrica destas no leito fixo para o cálculo do volume do leito (V);

$$V = V_{bio}/0,62$$

- calculou-se a altura de um “tronco de pirâmide” (com ângulo e base correspondente ao biorreator afunilado simulado) o qual foi preenchido pelo volume do leito calculado (Figura 4.1a);

$$V_t = V + \frac{0,024/2}{\tan(\theta)} \frac{0,024^2}{3}$$

$$H = \left(\frac{3V_t}{(2\tan(\theta))^2} \right)^{1/3} - \frac{0,024/2}{\tan(\theta)}$$

- especificou-se a fração volumétrica de biopartículas (0,62) nessa região:
- verificou-se, em pós-processamento, qual a altura dos volumes de controle totalmente preenchidos com biopartículas pelo código (H' , Figura 4.1b). Isto foi necessário porque, dependendo do refinamento da malha, a fração de biopartículas poderia ser atribuída para uma altura um pouco menor do que a exata, ou um pouco maior. Tal aspecto foi observado ao simular malhas com diferentes graus de refino.

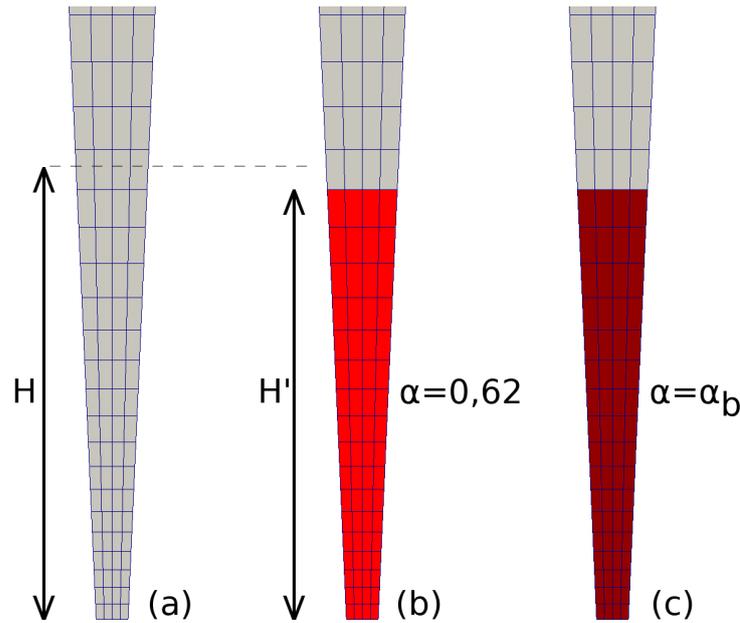


Figura 4.2: Procedimento para determinar a quantidade inicial de biopartículas no biorreator – (a) altura calculada, (b) volumes preenchidos e (c) correção da fração volumétrica.

- com a altura obtida no pós-processamento, foi recalculada a fração volumétrica de biopartículas que deveria preencher a altura do leito (Figura 4.1c).

$$V' = (H' + H_f)^3 (2 \tan(\theta))^2 / 3 - \frac{0,024/2}{\tan(\theta)} 0,024^2$$

$$\alpha_b = V_b / V'$$

Portanto, todas as simulações iniciaram a partir de uma altura inicial do leito, no qual garantiu-se que a mesma quantidade de biopartículas estivessem presente em todas as malhas, independente do nível de refinamento utilizado.

4.2 Solução

Para cada simulação, uma velocidade prescrita foi usada na base do biorreator, pressão atmosférica na saída e condição de não deslizamento nas paredes. A solução do conjunto de equações foi realizada utilizando o método dos volumes finitos disponível no OpenFOAM, versão 4.1. Como um dos procedimentos de análise requeria a precisão da interface do leito, um esquema de interpolação de segunda-ordem foi utilizado. Para o acoplamento pressão-velocidade, há diversos algoritmos disponíveis. Nestes é atribuído um campo de pressão inicial (inexato), com o qual é calculado o campo de velocidades. A equação da

continuidade é utilizada para corrigir o campo de pressão, bem como o campo de velocidade. Neste estudo foi utilizado o algoritmo PIMPLE que é uma mescla dos algoritmos SIMPLE¹ e PISO². Também foram consideradas nas simulações resíduos máximos de 10^{-6} como critério de convergência e passo de tempo adaptativo, de modo a manter o número de Courant (Co) abaixo de 0,9. Este número relaciona o passo de tempo (Δt), o tamanho de um volume de controle (Δx) e a velocidade (U) através da seguinte relação (Courant *et al.*, 1967):

$$Co = U \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (4.2)$$

Dessa forma, evitam-se instabilidades numéricas devido à dissociação da discretização espacial e temporal. Todos os cálculos numéricos com aplicação de simetria foram conduzidos em um processador Intel® Core™ i5-2430M com 2,40 GHz e 4 GB de memória RAM. Para a geometria completa, um processador Intel® Core™ i7-4790 com 3,60 GHz e 8 GB de memória RAM foi utilizado.

4.3 Malhas Numéricas

As dimensões do biorreator simulado foram apresentados na Figura 4.1. O programa “blockMesh” foi utilizado para elaboração das malhas numéricas. Para determinar o refinamento necessário para a simulação de $\frac{1}{4}$ do reator foram elaboradas quatro malhas com tamanhos de 1.170, 2.768, 5.625 e 14.700 volumes de controle e tamanhos característicos (espaçamento) médios dos volumes de controle de 9,3, 7,0, 5,5 e 4,0 mm, respectivamente. Uma razão de crescimento foi aplicada no eixo vertical de forma a manter os volumes com um formato praticamente cúbico ao longo da altura do biorreator (Figura 4.3). Estes também apresentaram valores y^+ em torno de 30 na região do leito, o que é adequado para a utilização do modelo de turbulência $k-\epsilon$ em conjunto a funções de parede.

Para determinar a malha ótima e o tempo de simulação, a velocidade mais alta do Caso 1 foi utilizada, de 0,0783 m/s. A estimativa do erro de discretização foi determinado

¹ algoritmo mais utilizado para solução de casos estacionários.

² algoritmo mais utilizado para solução de casos transientes.

³ y^+ é uma medida adimensional da distância a partir das paredes, definida a partir do perfil universal de velocidades no escoamento turbulento como $y^+ = u^*y/\nu$, e que é usado em funções de parede para estimar propriedades turbulentas.

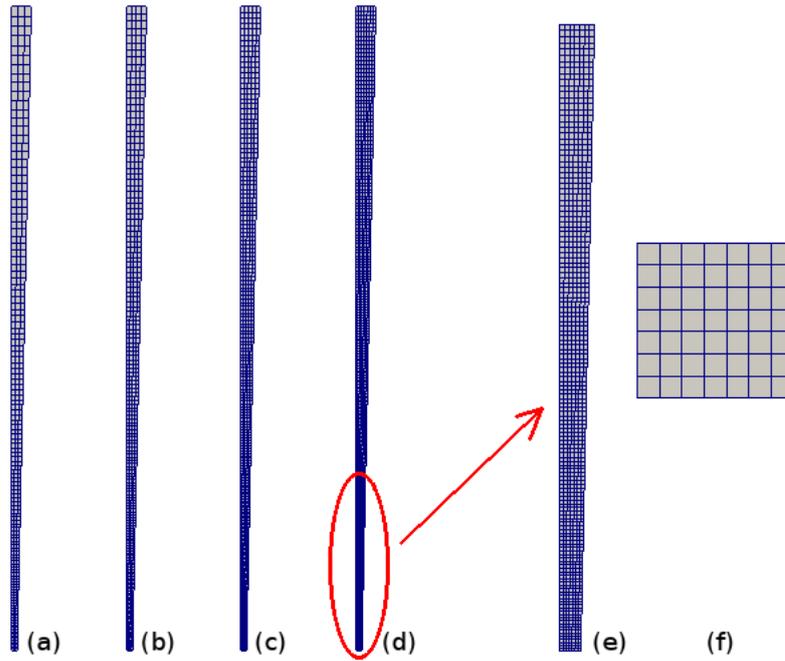


Figura 4.3: Malhas com diferentes refinamentos (a-d) e detalhes próximos a (e) base e (f) topo do biorreator.

utilizando o índice de convergência de malha (*grid convergence index* – GCI) baseado na extrapolação de Richardson (Roache, 1997), considerando variáveis locais e globais. Neste método, utilizando-se três malhas ou mais, a ordem de convergência observada (p_{obs}) é obtida segundo as expressões (Celik *et al.*, 2008):

$$p_{obs} = \frac{1}{\ln(r_{21})} |\ln(E_{32}/E_{21})| + q(p_{obs}) \quad (4.3)$$

$$q(p_{obs}) = \ln \left(\frac{r_{21}^{p_{obs}} - s}{r_{32}^{p_{obs}} - s} \right) \quad (4.4)$$

$$s = \text{sgn}(E_{32}/E_{21}) \quad (4.5)$$

Técnicas de solução usuais podem ser aplicadas para estimar o valor de p_{obs} . Neste estudo, foi utilizado o método da substituição direta. No sistema acima, E refere-se à diferença entre os resultados obtidos em simulação (por exemplo, $\phi_1 - \phi_2$), e r é uma razão efetiva entre refinamentos de malha, calculado como:

$$r = \left(\frac{N_1}{N_2} \right)^{1/3} \quad (4.6)$$

onde N_1 e N_2 representam o número de volumes das malhas 1 e 2, respectivamente. Com estes valores, o índice de convergência da malha fina é calculado com a seguinte equação

(Roache, 1997):

$$GCI_{fina} = F_s \frac{e_{21}}{r^{p_{obs}} - 1} \quad (4.7)$$

$$e_{21} = \left| \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right| \quad (4.8)$$

O uso de $F_s = 1,25$ é aplicado em estudos de convergência com um mínimo de 3 malhas para confirmar numericamente o valor de p_{obs} . Enquanto $F_s = 3$ é aplicado em estudos de convergência considerando apenas duas malhas, pois uma vez que p_{obs} não pode ser calculado, não há como demonstrar que as malhas estão dentro ou próximas da região assintótica (Roache, 2009). Segundo Sinclair *et al.* (2006) *apud* Roache (2009) os seguintes níveis de acurácia podem ser utilizados:

- excelente $< 1\%$
- bom $< 5\%$
- satisfatório $< 10\%$
- insatisfatório $\geq 10\%$

Para as análises utilizando o modelo de turbulência $k-\omega$, uma malha ainda mais refinada do que a malha ótima foi elaborada, contendo volumes menores junto às paredes, de modo a manter o valor de $y+ \approx 1$, desta forma evitando a necessidade de usar funções de parede. Estes volumes junto às paredes possuem tamanho característico de 0,2 mm, e médio de 1,7 mm, resultando em uma malha contendo 187,5 mil volumes de controle para $\frac{1}{4}$ da geometria.

Após a definição do refinamento das malhas, o escoamento foi simulado até 150 segundos sendo estabelecido um intervalo de tempo para a coleta de resultados médio temporais. Maiores detalhes são apresentados na seção de resultados preliminares.

4.4 Comparação com os Dados Experimentais

Todos os valores numéricos obtidos neste estudo foram comparados com os valores experimentais apresentados por Wu *et al.* (2009) (Apêndice A). Para a extração dos valores apresentados no gráfico do apêndice, o programa *WebPlotDigitizer* versão 4.1 foi utilizado.

Tabela 4.2 - Valores experimentais de altura para diferentes velocidades em cada caso apresentado por Wu *et al.* (2009).

| Caso 1 | | Caso 2 | | Caso 3 | |
|------------------|------------|------------------|------------|------------------|------------|
| velocidade [m/s] | altura [m] | velocidade [m/s] | altura [m] | velocidade [m/s] | altura [m] |
| 0,01458 | 0,43928 | 0,02930 | 0,71474 | 0,03437 | 0,83525 |
| 0,01746 | 0,45655 | 0,04096 | 0,77955 | 0,04919 | 0,87015 |
| 0,02025 | 0,48584 | 0,05245 | 0,83434 | 0,08452 | 0,97264 |
| 0,02328 | 0,50796 | 0,06403 | 0,89356 | 0,11945 | 1,05922 |
| 0,02903 | 0,54584 | 0,07560 | 0,94333 | 0,14584 | 1,14360 |
| 0,04052 | 0,63504 | | | | |
| 0,05792 | 0,71565 | | | | |
| 0,07253 | 0,81504 | | | | |
| 0,07828 | 0,85292 | | | | |
| Caso 4 | | Caso 5 | | Caso 6 | |
| velocidade [m/s] | altura [m] | velocidade [m/s] | altura [m] | velocidade [m/s] | altura [m] |
| 0,01446 | 0,28993 | 0,02626 | 0,38993 | 0,03509 | 0,57991 |
| 0,02035 | 0,30506 | 0,03791 | 0,42027 | 0,04965 | 0,60503 |
| 0,02623 | 0,33530 | 0,04957 | 0,45512 | 0,07555 | 0,64011 |
| 0,03212 | 0,34998 | 0,06104 | 0,48023 | 0,08711 | 0,66018 |
| 0,04368 | 0,40009 | 0,07270 | 0,51526 | 0,10144 | 0,67519 |
| 0,05525 | 0,42018 | | | | |
| 0,07269 | 0,46036 | | | | |

O conjunto de dados obtidos são apresentados na Tabela 4.2. Para fins de comparação, o critério utilizado no pós-processamento foi a altura mais elevada atingida pelo leito fluidizado, cuja interface (contorno/isosuperfície) foi correspondente à fração volumétrica de biopartículas igual a 0,05 (Cornelissen *et al.*, 2007).

4.5 Demais análises

As variáveis extraídas diretamente dos campos resultantes das simulações, bem como outros parâmetros, foram utilizados para calcular a queda de pressão, velocidades características, presença de zonas mortas, tensão de cisalhamento, tensão na parede e intensidade de colisões.

A queda de pressão foi definida como a diferença entre a pressão média na entrada do biorreator e a pressão média na saída do mesmo.

Para o cálculo das velocidades terminal e de mínima fluidização, as seguintes expressões foram usadas (Kunii e Levenspiel, 1991):

$$u_t = u_t^* \left[\frac{\mu_f(\rho_b - \rho_l)g}{\rho_l^2} \right]^{1/3} \quad (4.9)$$

onde ρ_b é sua massa específica da biopartícula e ρ_l é a massa específica do fluido. u_t é a velocidade terminal da biopartícula, que depende da seguinte relação:

$$u_t^* = \left[\frac{18}{(d_b^*)^2} + \frac{0,591}{(d_b^*)^{0,5}} \right]^{-1} \quad (4.10)$$

d_b^* relaciona-se com o diâmetro da biopartícula (d_b) através do número de Arquimedes,

$$d_b^* = Ar^{1/3} \quad (4.11)$$

o qual é definido por:

$$Ar = \frac{d_b^3 \rho_f (\rho_b - \rho_l) g}{\mu_l^2} \quad (4.12)$$

e

$$Ar = \frac{1,75}{\alpha_{mf}^3} Re_{p,mf}^2 + \frac{150(1 - \alpha_{mf})}{\alpha_{mf}^3} Re_{p,mf} \quad (4.13)$$

$$Re_{p,mf} = \sqrt{(33,7)^2 + 0,0408Ar} - 33,7 \quad (4.14)$$

Estimando um valor para α_{mf} que satisfaça as Equações 4.12 e 4.13, a velocidade de mínima fluidização (u_{mf}) é estimada por:

$$u_{mf} = \frac{d_b^2 (\rho_b - \rho_f) g}{150 \mu_l} \frac{\alpha_{mf}^3}{1 - \alpha_{mf}} \quad (4.15)$$

Para quantificação de zonas mortas, segundo Ren *et al.* (2009), estas são definidas como sendo as regiões onde a velocidade superficial do líquido é menor do que 5% da velocidade média do biorreator. Diferentemente do indicado na literatura, neste estudo definiu-se como zonas mortas as regiões com velocidades abaixo de 5% da velocidade média em uma determinada altura (e não em todo o biorreator), pois entendeu-se que este critério seria mais adequado para um biorreator afunilado.

Para estimar o número de Reynolds (Re) local no biorreator, a seguinte expressão foi utilizada:

$$Re = \frac{U_l \rho_l D_H}{\mu_l} \quad (4.16)$$

onde U_l e μ_l representam a velocidade e a viscosidade da fase fluida, respectivamente. Uma vez que o biorreator em estudo é afunilado, e com seção transversal quadrada, foi necessário calcular o diâmetro hidráulico (D_H) em cada altura do biorreator.

Diversos trabalhos em literatura apresentam valores para a tensão de cisalhamento suportada por microorganismos em diferentes condições (Fan, 1989; Zima-Kulisiewicz *et al.*, 2008; Ren *et al.*, 2009; Nurtono *et al.*, 2012). Para obter os campos de máxima tensão de cisalhamento τ_{max} , a seguinte expressão foi utilizada (Zima-Kulisiewicz *et al.*, 2008; Bannari *et al.*, 2011):

$$\tau_{max} = \mu_l \dot{\gamma} = \mu_l \max(\sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}) \quad (4.17)$$

onde σ representa os componentes da tensão cisalhante em diferentes direções, e $\dot{\gamma}$ representa a taxa de deformação ou taxa de cisalhamento.

A tensão na parede pode ser obtida com a Equação 4.18 em malhas suficientemente refinadas. Para malhas grosserias, no entanto, a tensão cisalhante pode ser obtida através de uma correlação, tal como a Equação 4.19

$$\tau_w = \mu_l \left. \frac{\partial u_l}{\partial \zeta} \right|_{\zeta} \quad (4.18)$$

$$\tau_w = \rho_l u_{\tau} \frac{u_l}{u^+} = \frac{\rho_l u_{\tau} u}{\frac{1}{\kappa} \ln(\xi y^+)} \quad (4.19)$$

onde ζ é a direção normal à parede, κ é a constante de Von Kàrmàn, igual a 0,41, ξ é uma constante igual a 9,8 para paredes lisas, e a velocidade de atrito u_{τ} é dada por:

$$u_{\tau} = C_{\mu}^{1/4} k^{1/2} \quad (4.20)$$

onde k representa a energia cinética turbulenta e C_{μ} é uma constante, igual a 0,09.

A intensidade de colisões entre partículas foi indiretamente avaliada através da pressão de sólidos e da temperatura granular, ambos já calculados no modelo KTGF (apresentado na Modelagem Matemática, a seguir). Quanto maior a concentração de partículas no leite, maior é a frequência de colisões entre elas, o que impede o seu movimento livre, resultando em um incremento nas flutuações de velocidade. Desta forma, o valor da temperatura granular (Θ) também foi utilizado para estimar a flutuação da velocidade das biopartículas (u'_b), através da definição:

$$\frac{3}{2} \Theta = \frac{1}{2} \langle u'_b \rangle^2 \quad (4.21)$$

4.6 *Fechamento do Capítulo*

Na Tabela 4.3 é apresentado um resumo de todas as condições simuladas descritas neste capítulo, com suas respectivas aplicações ao longo da seção de Resultados e Discussão.

Tabela 4.3 - Síntese das condições operacionais de cada caso.

| Caso | Ângulo do TBR | Massa específica da biopartícula [kg/m ³] | Diâmetro da biopartícula [m] | Coef. de restituição | Velocidades superficiais [m/s] | Seção relacionada |
|------|---------------|-------------------------------------------------------|------------------------------|--------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|
| 1 | 2,5 | 1420,06 | $7,09 \times 10^{-4}$ | 0,6, 0,7, 0,8, 0,9, sem KTGF [¹] | 0,01458, 0,01746, 0,02025, 0,02328, 0,02903, 0,04052, 0,05792, 0,07253, 0,07828 | 6 |
| 2 | 2,5 | 1329,00 | $7,79 \times 10^{-4}$ | 0,8 | 0,02930, 0,04096, 0,05245, 0,06403, 0,07560 | 6.3.3 |
| 3 | 2,5 | 1216,64 | $9,25 \times 10^{-4}$ | 0,8 | 0,03437, 0,04919, 0,08452, 0,11945, 0,14584 | 6.3.3, 6.4.5 |
| 4 | 5,0 | 1416,95 | $7,11 \times 10^{-4}$ | 0,8 | 0,01446, 0,02035, 0,02623, 0,03212, 0,04368, 0,05525, 0,07270 | 6.3.3, 6.4.5 |
| 5 | 5,0 | 1371,55 | $7,43 \times 10^{-4}$ | 0,8 | 0,02626, 0,03791, 0,04956, 0,06104, 0,07270 | 6.3.3 |
| 6 | 5,0 | 1308,57 | $7,99 \times 10^{-4}$ | 0,8 | 0,03509, 0,04965, 0,07555, 0,08711, 0,10145 | 6.3.3, 6.4.5 |

¹ diferentes valores do coeficiente de restituição foram utilizados apenas na seção 6.2.2. Nas demais simulações foi utilizado o valor de 0,8.

Modelagem Matemática

Neste capítulo serão apresentados os modelos utilizados na simulação do biorreator de leito fluidizado, considerando um escoamento bifásico e transiente elaborado com as seguintes hipóteses:

- fases consideradas como fluidos contínuos;
- processo isotérmico;
- viscosidade do fluido constante (fluido Newtoniano);
- escoamento transiente, mas as propriedades das biopartículas não variam com o tempo;
- densidade do biofilme constante e igual para todas as biopartículas;
- espessura do biofilme uniforme para todas as biopartículas;
- diâmetro igual para todas as biopartículas;
- biopartículas esféricas;
- colisões entre as biopartículas modelada segundo a KTGF;
- transferência de quantidade de movimento devido à massa virtual insignificante;
- hidrodinâmica simétrica;
- turbulência modelada utilizando-se o conceito de viscosidade dos turbilhões (hipótese de Boussinesq);

- fases tratadas como fluidos interpenetrantes (abordagem Euleriana-Euleriana).

Na abordagem Euleriana-Euleriana foi considerada uma fase contínua (efluente) e uma fase dispersa (biopartículas). Desta forma, as equações de continuidade e movimento foram calculadas para cada uma das fases:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l U_l) = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_p \rho_p) + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p U_p) = 0 \quad (5.2)$$

onde α representa a fração volumétrica, ρ é a massa específica, e U é o vetor de velocidade. Os índices l e p representam as fases líquida e sólida, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l U_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l U_l U_l) = \nabla \cdot (\alpha_l \mu_l (\nabla U_l + (\nabla U_l)^T)) + \alpha_l \rho_l g - \alpha_l \nabla p - M \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_p \rho_p U_p) + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p U_p U_p) = \nabla \cdot (\alpha_p \mu_p (\nabla U_p + (\nabla U_p)^T)) + \alpha_p \rho_p g - \alpha_p \nabla p - \nabla p_p + M \quad (5.4)$$

onde p e g são respectivamente a pressão termodinâmica e a gravidade. μ_l é a viscosidade efetiva da fase líquida, que é a soma da sua viscosidade molecular e turbulenta. μ_p e p_p são respectivamente a viscosidade e a pressão da fase particulada, ambas estimadas pela teoria cinética do escoamento granular (Seção 5.3). M é a transferência de quantidade de movimento interfacial entre as fases. As forças interfaciais consideradas foram a de arraste (*drag*) e de sustentação (*lift*) (Equações 5.5, 5.6 e 5.7).

$$M = M_L + M_D U_r \quad (5.5)$$

onde U_r é a velocidade relativa entre as fases, e as forças de arraste e sustentação são dadas por:

$$M_D = \alpha_p \frac{3 C_D |U_r| \rho_l}{4 d_p} \quad (5.6)$$

$$M_L = \alpha_p C_L \rho_l U_r \times (\nabla \times U_p) \quad (5.7)$$

Nas Equações 5.6 e 5.7, os coeficientes C_D e C_L são estimados através do uso de correlações empíricas. Diversos modelos estão disponíveis para modelar a força de sustentação em bolhas. No entanto, biopartículas sólidas possuem deformação limitada, diferente de bolhas que podem apresentar as mais diferentes formas e, por este motivo o modelo de Legendre e Magnaudet (1997) (Equação 5.8) foi usado para estimar a força de sustentação atuando sobre partículas sólidas. A correlação de Legendre e Magnaudet (1997) foi derivada de soluções analíticas para a força de sustentação atuando sobre esferas de viscosidade arbitrárias movendo-se em um escoamento cisalhante de baixo número de Reynolds, aplicando um procedimento de expansão assintótica combinada. Soluções foram obtidas para os casos de escoamento com número de Reynolds tendendo a zero e tendendo ao infinito. Assim, no modelo de Legendre e Magnaudet (1997), o coeficiente C_L é composto pelas contribuições de baixo Reynolds e alto Reynolds ($C_{L,lowRe}$ e $C_{L,highRe}$, respectivamente), tornando o modelo adequado para uma ampla faixa de números de Reynolds. O coeficiente de sustentação usado no presente estudo é expresso como:

$$C_L = 2,25 \left(2 - \exp(2,92d_p^{2,21})\right) \sqrt{C_{L,lowRe}^2 + C_{L,highRe}^2} \quad (5.8)$$

Na Equação 5.8, $C_{L,lowRe}$ e $C_{L,highRe}$ referem-se aos coeficientes da força de sustentação à baixo e alto número de Reynolds, respectivamente. Eles são definidos como segue:

$$C_{L,lowRe} = \frac{6}{\pi^2 \sqrt{Re_p} Sr_p} \left(\frac{2,255}{(1 + 0,2E^{-2})^{1,5}} \right) \quad (5.9)$$

$$C_{L,highRe} = \frac{1}{2} \left(\frac{1 + 16/Re_p}{1 + 29/Re_p} \right) \quad (5.10)$$

A taxa de deformação adimensional (Sr_p), o número de Reynolds (Re_p) das partículas e a razão entre esses números (E) foram calculados usando as Equações 5.11, 5.12 e 5.13 respectivamente:

$$Sr_p = \frac{|w|d_p}{|U_r|2} \quad (5.11)$$

$$Re_p = \frac{|U_r|\rho_l d_p}{\mu_l} \quad (5.12)$$

$$E = \frac{Sr_p}{Re_p} \quad (5.13)$$

5.1 Modelos de Força de Arraste

Pouco é conhecido sobre a força que um fluido exerce sobre partículas individuais. Por esta razão, têm-se recorrido a dados empíricos tanto para a perda de carga ou velocidade terminal de partículas em sedimentação. Isto resultou em um grande número de relações empíricas para a força de arraste (Beetstra *et al.*, 2007). No presente estudo, as correlações de Ergun (1952), Wen e Yu (1966), Gidaspow *et al.* (1983) e Gibilaro *et al.* (1985) foram usadas para estimar a força de arraste. Deve ser enfatizado que estas correlações foram desenvolvidas e/ou calibrados para predição do comportamento de escoamentos gás-sólido. Também foi utilizada a correlação de Haaland (1983) para a predição do fator de atrito para escoamento em tubos rugosos, a qual poderia ser aplicável ao escoamento de um líquido ao redor de uma biopartícula também rugosa. Uma breve descrição destes é apresentada a seguir.

5.1.1 Fator de Atrito

A força exercida por um fluido em movimento sobre uma superfície sólida (F_k) é proporcional a uma área característica (A) e uma energia cinética (K) por unidade de volume:

$$F_k = AKf \quad (5.14)$$

no qual a constante de proporcionalidade f é chamado de fator de atrito. Esta definição do fator de atrito foi dada por Fanning (1877), e é também chamado de coeficiente de arraste (C_D), utilizado para o cálculo da força de arraste (Bird *et al.*, 1962).

Há diferentes correlações empíricas para estimar o valor de f em tubos lisos (para escoamento laminar e turbulento) e para tubos rugosos. Para este último caso há equações implícitas (Colebrook, 1939) e explícitas (Haaland (1983), Equação 5.15) para a estimativa do fator de atrito. Para a utilização em CFD expressões explícitas são mais adequadas.

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -3,6 \log_{10} \left[\frac{6,9}{Re} + \left(\frac{k/d_{biop}}{3,7} \right)^{10/9} \right] \quad (5.15)$$

onde k é a rugosidade assumido como $\frac{1}{2}$ da espessura do biofilme (Tabela 4.1) e d_{biop} é o diâmetro da biopartícula (Tabela 4.3), ambos para o Caso 1.

5.1.2 Ergun

Ergun e Orning (1949) propuseram uma equação geral para prever a perda de carga em leitos fixos. Na correlação de Ergun, a perda de energia total é atribuída aos efeitos viscosos e cinéticos. A equação geral foi posteriormente adaptada (Ergun, 1952), incluindo os coeficientes de 150 e 1,75 para os termos viscosos e cinéticos, respectivamente. O modelo de Ergun é expresso como uma função da propriedade das fases e velocidade relativa entre elas:

$$M_D = 150 \frac{\alpha_p^2 \mu_l}{\alpha_l d_p^2} + 1,75 \frac{|U_p - U_l| \alpha_p \rho_l}{d_p} \quad (5.16)$$

As constantes do modelo foram determinadas usando dados experimentais com vários tamanhos de esferas, areia, coque pulverizado e os seguintes gases: CO₂, N₂, CH₄ e H₂ (Ergun, 1952). A equação de Ergun é considerada válida para condições de fluidização. Assim, a equação pode ser reescrita como uma função de arraste aplicável para modelo de dois-fluidos (*two-fluid model*) (Enwald *et al.*, 1996).

5.1.3 Wen-Yu

O modelo de Wen-Yu é uma extensão do modelo de Richardson-Zaki para predição da perda de carga em leitos particulados (Gidaspow *et al.*, 1983). Eles consideraram que a força de arraste atuando na partícula em uma mistura relativamente densa de gás-sólido é maior do que a força atuando em uma partícula isolada (Wen e Yu (1966) *apud* Wen e Galli (1971)). Em geral, quando a faixa de fração volumétrica encontra-se entre 0,6 e 1,0, o coeficiente de arraste aumenta com o acréscimo da concentração de partículas (Wen e Galli, 1971).

No modelo de Wen-Yu, a força de arraste é estabelecida usando a seguinte expressão:

$$M_D = \frac{3}{4} C_D \frac{|U_p - U_l| \alpha_p \rho_l}{d_p} f(\alpha) \quad (5.17)$$

no qual $f(\alpha)$ mostra o efeito da presença de outras partículas no entorno e atua como uma correção da usual lei de Stokes para a queda livre de uma única partícula (Gidaspow *et al.*, 1983), e o valor de C_D depende do número de Reynolds da partícula,

$$\begin{cases} Re_p \leq 1000, & C_D = \frac{24}{Re_p}(1 + 0,15Re_p^{0,687}) \\ Re_p > 1000, & C_D = 0,44 \end{cases} \quad (5.18)$$

onde o número de Reynolds é obtido de acordo com a Equação 5.12.

5.1.4 Gidaspow

Gidaspow *et al.* (1983) estiveram entre os primeiros autores a utilizar CFD para resolver sistemas de leito fluidizado. Neste estudo, a força de arraste em regimes densos (definido por Wen-Yu como $\alpha_l < 0,8$ segundo Gidaspow *et al.* (1983)), é estimada a partir de uma expressão baseada na lei de Ergun (Equação 5.16). Para regimes diluídos, uma expressão baseada no modelo de Wen-Yu é adotada. Na Equação 5.17, $f(\alpha)$ é então definida como:

$$f(\alpha) = \alpha_l^{-2,65} \quad (5.19)$$

5.1.5 Gibilaro

Gibilaro *et al.* (1985) propuseram uma correlação para a perda de carga baseada em considerações teóricas aplicadas a leitos de esferas de vidro com alta porosidade, envolvidas por: (i) ar, (ii) mistura de ar-óleo, e (iii) glicerol:

$$M_D = \left(\frac{17,3}{\alpha_l Re_p} + 0,336 \right) \frac{\rho_l U_r}{d_p} \alpha_p \alpha_l^{-2,8} \quad (5.20)$$

Todos os parâmetros são funções das propriedades do fluido e partículas, e este modelo é aplicável para todas as condições de escoamento, de laminar a turbulento. Este tem um critério preditivo para o início do comportamento de aglomerados, tanto para sistemas gás-sólido quanto líquido-sólido (Gibilaro *et al.*, 1985). Boa concordância foi observada entre essa relação e dados experimentais. Contudo, estas predições não são confiáveis no regime de escoamento intermediário, onde somente tendências qualitativas são respeitadas.

5.2 Turbulência

De acordo com as condições avaliadas, o número de Reynolds dos casos simulados é significativo na base do biorreator, cujos valores podem ser tão elevados quanto 3000. Como o esperado para uma geometria afunilada, o aumento da seção ao longo da altura causa um decréscimo na velocidade do fluido e, portanto, um decréscimo no valor do número de Reynolds local. Apesar disso, a presença de biopartículas no biorreator promove a manutenção dos vórtices turbulentos (por conta da formação de ondas e/ou pela flutuação das biopartículas), tornando difícil a relaminarização do escoamento. Assim, um modelo para considerar o efeito da turbulência foi incluído. Diversos modelos estão disponíveis para considerar a natureza turbulenta do escoamento. Dentre estes, modelos isotrópicos tendem a subestimar a turbulência no reator. Contudo, o escoamento predito com um modelo que demanda menor custo computacional, k - ϵ , é qualitativamente próximo ao escoamento predito por um modelo anisotrópico (Koerich e Rosa, 2016). Portanto, o k - ϵ foi utilizado na maior parte deste estudo. O modelo SST k - ω também foi utilizado, com malhas mais refinadas para avaliar o escoamento sem o uso de funções de parede.

5.2.1 Modelo k - ϵ

O modelo k - ϵ usa duas equações de transporte: uma para a energia cinética turbulenta (k) e outra para a taxa de dissipação (ϵ), expressas nas Equações 5.21 e 5.22 respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_l k) + \nabla \cdot (\rho_l U_l k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P^k - \rho_l \epsilon \quad (5.21)$$

Aqui, σ_k é uma constante e P^k refere-se à produção de energia cinética turbulenta:

$$P^k = \mu_t \nabla U_l \cdot (\nabla U_l + \nabla U_l^T)$$

A equação na qual define a dissipação da energia cinética turbulenta é escrita na seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_l \epsilon) + \nabla \cdot (\rho_l U_l \epsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon 1} P^k - C_{\epsilon 2} \rho_l \epsilon) \quad (5.22)$$

Considerando k e ϵ , a viscosidade turbulenta pode ser estimada usando a Equação 5.23:

$$\mu_t = \rho_l C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (5.23)$$

As constantes usadas no modelo k - ϵ são dadas por Launder e Spalding (1974): $C_\mu = 0,09$, $C_{\epsilon 1} = 1,44$, $C_{\epsilon 2} = 1,92$, $\sigma_k = 1,0$ e $\sigma_\epsilon = 1,30$.

5.2.2 Modelo Shear Stress Transport (SST) k - ω

O modelo SST k - ω (Menter, 1994) é baseado nos modelos k - ϵ e k - ω para a modelagem da turbulência. Este modelo fornece previsões acuradas para o início da separação do escoamento sob gradiente de pressão adverso. As equações originais dos modelos k - ω e k - ϵ são multiplicados por funções peso:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla \cdot (\rho U k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k3}} \right) \nabla k \right] + P^k - \beta' \rho k \omega \quad (5.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \nabla \cdot (\rho U \omega) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 1}} \right) \nabla \omega \right] + (1 - F_1) \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega + \alpha_3 \frac{\omega}{k} P^k - \beta_3 \rho \omega^2 \quad (5.25)$$

Os coeficientes deste novo modelo são combinações lineares dos coeficientes correspondentes dos modelos subjacentes:

$$\phi_3 = F_1 \phi_1 + (1 - F_1) \phi_2$$

A viscosidade turbulenta é calculado por:

$$\mu_t = \rho \frac{0,31k}{\max(0,31\omega; \Omega F_2)}$$

onde Ω é a magnitude da vorticidade:

$$\Omega = (2\Omega_{ij}\Omega_{ij})^{1/2}$$

As funções peso F_1 e F_2 são críticas para o sucesso do método. Sua formulação é baseada na distância da superfície mais próxima e nas variáveis de escoamento:

$$F_1 = \tanh \left[\min \left(\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}; \frac{500\nu}{\omega y^2} \right); \frac{4\rho k}{CD_{k\omega} \sigma_\omega y^2} \right)^4 \right]$$

$$F_2 = \tanh \left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta'\omega y}, \frac{500\nu}{\omega y^2} \right)^2 \right]$$

onde y é a distância da parede, e $CD_{k\omega}$ é dado por:

$$CD_{k\omega} = \max \left(\frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2}\omega} \nabla k \nabla \omega; 1, 0 \times 10^{10} \right)$$

Os coeficientes do modelo são: $\beta' = 0,09$, $\alpha_1 = 5/9$, $\beta_1 = 0,075$, $\sigma_{k1} = 2$, $\sigma_{\omega 1} = 2$, $\alpha_2 = 0,44$, $\beta_2 = 0,0828$, $\sigma_{k1} = 1$ and $\sigma_{\omega 2} = 1/0,856$.

5.3 Teoria Cinética do Escoamento Granular

A Teoria Cinética do Escoamento Granular (*Kinetic Theory of Granular Flow* – KTGF) foi utilizada para considerar o efeito da colisão de partículas no escoamento. Este modelo modifica as propriedades do escoamento, tais como pressão de sólidos, viscosidade, e temperatura granular (Gidaspow, 1994). Usando o modelo KTGF, há uma equação de transporte adicional para a temperatura granular (Θ):

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_p \rho_p \Theta) + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \Theta U_p) \right] = -(p_p I + \alpha_p \tau_p) : \nabla U_p + \nabla \cdot (k_p \nabla \Theta) - \gamma - 3M\Theta \quad (5.26)$$

O coeficiente de difusão para a energia granular (k_p) é dado por:

$$k_p = \frac{150\rho_p d_p \sqrt{\Theta\pi}}{384(I+e)g_0} \left[1 + \frac{6}{5}\alpha_p g_0 (1+e) \right]^2 + 2\rho_p \alpha_p^2 d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} \quad (5.27)$$

e a dissipação da energia de flutuação devido as colisões inelásticas (γ) é expressa como:

$$\gamma = 3(1-e^2)\alpha_p^2 \rho_p d_p g_0 \Theta \left[\frac{4}{d_p} \left(\sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} \right) - \nabla u_p \right] \quad (5.28)$$

A pressão de sólidos (p_p), por sua vez, é expressa como:

$$p_p = \alpha_p \rho_p \Theta + 2(1+e)\alpha_p^2 \rho_p g_0 \Theta \quad (5.29)$$

5.4 Fechamento do Capítulo

Na Tabela 5.1 é apresentado um resumo dos modelos descritos neste capítulo, com suas respectivas aplicações ao longo da seção de Resultados e Discussão.

Tabela 5.1 - Síntese dos modelos utilizados em cada caso.

| Caso | Turbulência | Colisões | Sustentação | Arraste | Seção relacionada | |
|------|---------------------------------|---------------|-------------------------------------|----------------------------------------------------|-------------------------|-----------------|
| 1 | k- ϵ | KTGF | Legendre-Magnaudet | Ergun | 6.1 | |
| | | | Legendre-Magnaudet, sem sustentação | Ergun | 6.2.1 | |
| | | KTGF, laminar | Legendre-Magnaudet, | Ergun | 6.2.2 | |
| | k- ϵ , SST k- ω | KTGF | Legendre-Magnaudet | Ergun | 6.2.3 | |
| | k- ϵ | KTGF | Legendre-Magnaudet | Ergun Gidaspow Wen-Yu Gibilaro Haaland | 6.2.4 | |
| | | | | Ergun* η | 6.3.1 | |
| | | | | Ergun* Re_p | 6.3.2 | |
| | | | | Gidaspow* Re_p ¹ | 6.3.2, 6.3.3, 6.4 | |
| | 2 | k- ϵ | KTGF | Legendre-Magnaudet | Gidaspow* Re_p | 6.3.3 |
| | 3 | k- ϵ | KTGF | Legendre-Magnaudet | Gidaspow* Re_p | 6.3.3, 6.4.5 |
| 4 | k- ϵ | KTGF | Legendre-Magnaudet | Gidaspow* Re_p | 6.3.3, 6.4.5 | |
| 5 | k- ϵ | KTGF | Legendre-Magnaudet | Gidaspow* Re_p | 6.3.3 | |
| 6 | k- ϵ | KTGF | Legendre-Magnaudet | Gidaspow* Re_p | 6.3.3, 6.4.5 | |

¹ Este modelo também foi avaliado em uma malha completa, sem a consideração de simetrias.

Resultados e Discussão

6.1 Resultados Preliminares

Nesta subseção serão apresentados os resultados obtidos na simulação do Caso 1 (Tabela 4.3), considerando para as forças interfaciais os modelos de Ergun (1952) e Legendre e Magnaudet (1997) (Tabela 5.1).

6.1.1 Teste de Independência de Malha

A malha ótima foi determinada pela avaliação do Índice de Convergência de Malha (*Grid Convergence Index* – GCI) para a altura do leito e queda de pressão (conforme descrito em Materiais e Métodos, nas Seções 4.4 e 4.5), obtidas para a maior velocidade disponível para o Caso 1. Primeiramente, simulações foram conduzidas com diferentes graus de refinamento. Os resultados obtidos (no tempo de 130 segundos) são apresentados na Tabela 6.1. A partir desses resultados foi estabelecido que a malha composta de 14.700 volumes de controle é adequada para prever o escoamento do leito fluidizado, com valores de GCI de $7,58 \times 10^{-4}$ (0,076%) e $4,39 \times 10^{-5}$ (0,004%), respectivamente para a fração volumétrica de biopartículas e queda de pressão.

Tabela 6.1 - Altura do leito e queda de pressão obtidos na simulação de diferentes malhas.

| Malha | Volumes | Altura do Leito [m] | Queda de Pressão [Pa] |
|-------|---------|---------------------|-----------------------|
| 1 | 1170 | 0,53217 | 12966 |
| 2 | 2768 | 0,55699 | 12943 |
| 3 | 5625 | 0,56639 | 12931 |
| 4 | 14700 | 0,56871 | 12928 |

A malha numérica com 5.625 volumes de controle também apresentou baixos valores de GCI, de 0,020697 (2,07%) para a fração volumétrica e 0,0022944 (0,23%) para queda de pressão. No entanto, devido a natureza do presente estudo, uma malha mais refinada com GCI “excelente” (página 64) foi escolhida de forma a obter valores mais precisos das variáveis de interesse. Além do mais, a ordem global de acurácia (*global order accuracy* – p) da malha de 14.700 volumes de controle ficou entre 6,339 e 6,386, enquanto a malha de 5.625 volumes de controle teve valores p entre 2,9355 e 1,7311. Para este parâmetro (p) um valor maior ou igual a 2 indica uma superconvergência (Roache, 2009). O mesmo refinamento foi adotado nas simulações com a geometria completa. Posteriormente a malha ótima foi ainda mais refinada a fim de manter o valor do y^+ próximo às paredes de aproximadamente 1, para as simulações utilizando o modelo de turbulência SST $k-\omega$ em $\frac{1}{4}$ da geometria.

6.1.2 Tempo de Simulação

Após a definição do refinamento da malha ótima, foram simulados até 150 segundos de escoamento. Na Figura 6.1 observa-se a altura do leito ao longo do tempo, considerando valores médios (a partir de 50 segundos) e instantâneos. Qualitativamente, a altura varia nos instantes iniciais, porém após aproximadamente 50 segundos, a altura oscila em torno de um valor constante. Para quantificar essas oscilações e estabelecer o tempo de cálculo dos valores médios, foram calculados desvios dos valores de altura (instantânea e média), desvios estes calculados em relação à média obtida em 150 segundos. Ainda na Figura 6.1, a análise dos valores médios temporais indica que 130 segundos de simulação foram adequados para atingir o escoamento estável, no qual as oscilações nos valores médios ficaram na ordem de 10^{-4} . Estes valores médios foram calculados a partir de 50 segundos de escoamento, sendo os últimos 80 segundos utilizados para o cálculo dos valores médios.

6.1.3 Avaliação de Partículas e Biopartículas

Inicialmente, cabe mencionar que o código Euleriano-Euleriano disponível no OpenFOAM, apesar de ser genérico para duas fases Eulerianas, possui modelos de arraste e sustentação calibrados para casos gás-sólido e gás-líquido, assim como outros códigos de CFD. Dessa forma, uma etapa preliminar foi realizada para verificar se o comportamento esperado fisicamente em um sistema líquido-sólido ocorreria também no caso simulado. Assim, foram simulados em diferentes condições a fluidização de partículas e de biopartículas.

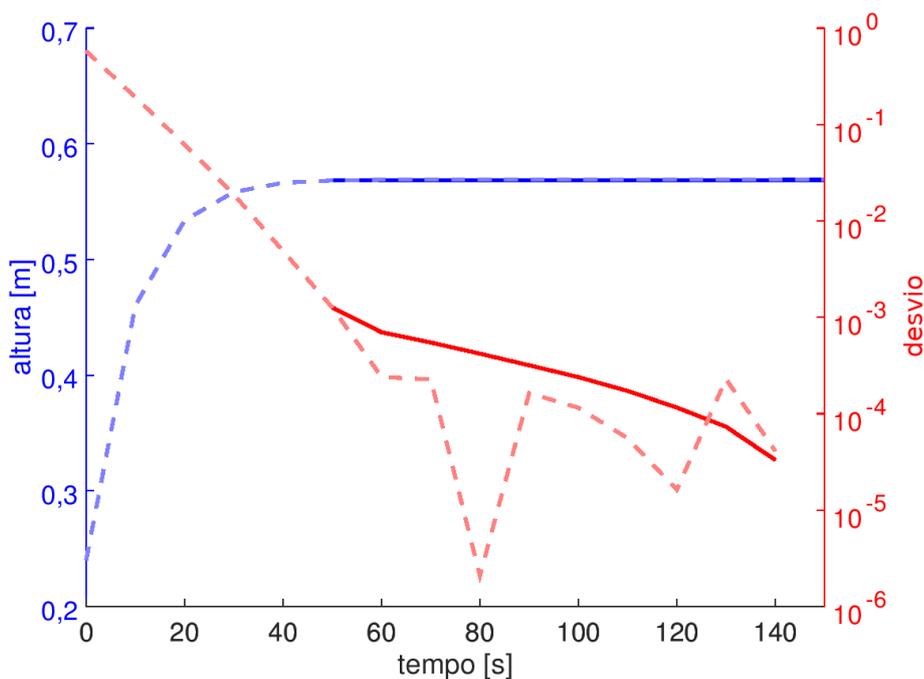


Figura 6.1: Variação da altura do leito ao longo do tempo. Valores instantâneos em tracejado e médios em linha cheia.

A Figura 6.2 mostra os resultados obtidos. Nesta figura, cada marcador na linha representa a simulação de uma velocidade de entrada a partir da faixa reportada para o Caso 1. Aqui, uma vez que biopartículas apresentam uma menor densidade e maior diâmetro (comparando valores apresentados na Tabela 4.3 com a massa específica das partículas), era esperado uma altura maior do leito a ser atingida em relação à partículas sem o biofilme. Este comportamento foi observado, verificando que o código é capaz de produzir resultados coerentes aos esperados para sistema líquido-sólido.

No entanto, como mencionado na Revisão Bibliográfica, deve-se corrigir a força de arraste para biopartícula. Esta pode ser uma das razões dos resultados preditos com biopartículas não terem apresentado boa concordância quantitativa com os dados experimentais.

6.2 Investigação das Equações de Fechamento

Conforme mencionado previamente neste trabalho, a abordagem Euleriana-Euleriana requer a necessidade de equações de fechamento para estimar a transferência de quantidade de movimento entre as fases. Além disso, ao contrário dos demais sistemas onde

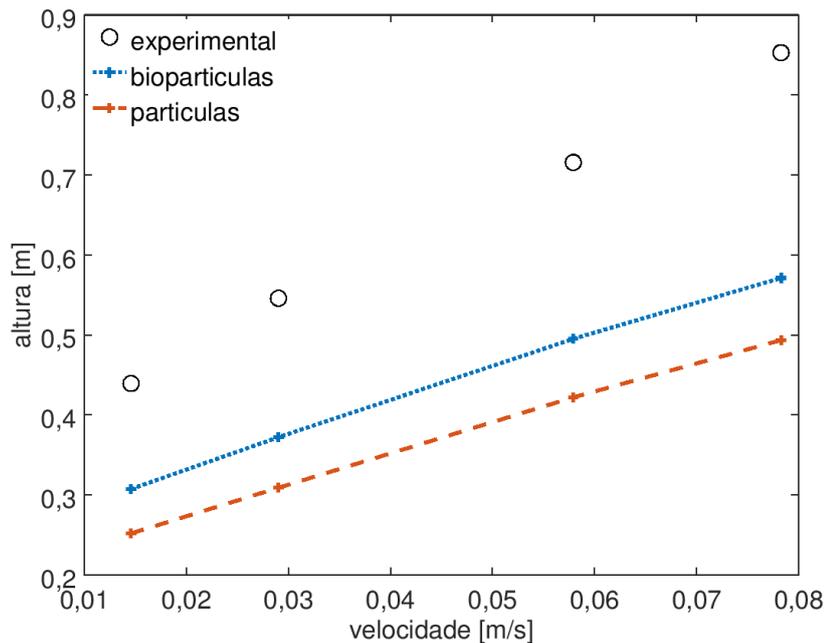


Figura 6.2: Altura de fluidização para partículas e biopartículas.

as forças dominantes são conhecidas, em sistema líquido-sólido não há investigações suficientes nesse sentido. Dessa forma, a seguir é investigada a importância/necessidade de se considerar a força de sustentação, a influência do coeficiente de restituição sobre as colisões entre partículas e também a adequação de diferentes correlações para a força de arraste para o escoamento líquido-sólido. Cabe ressaltar que nesse sistema a diferença entre as massas específicas das fases é relativamente pequena, o que o diferencia dos demais sistemas (gás-líquido e gás-sólido), nos quais essa diferença é muito maior. Ainda, como nos casos considerados a massa específica da fase dispersa é maior do que a da fase contínua, prosseguiu-se com a adequação de modelos de arraste gás-sólido, para os quais a fase dispersa também é a mais densa. Os modelos utilizados para a obtenção dos resultados apresentados a seguir encontram-se definidos na Tabela 5.1. As condições do Caso 1, avaliadas nesta seção, encontram-se definidas na Tabela 4.3.

6.2.1 Influência da Força de Sustentação

Em biorreatores de leito fluidizado, as biopartículas permanecem suspensas (fluidizadas) no fluido devido a força de arraste, associada com o movimento ascendente do efluente (Grady Jr. *et al.*, 2011; Rosa *et al.*, 2017). Contudo, a força de sustentação também foi

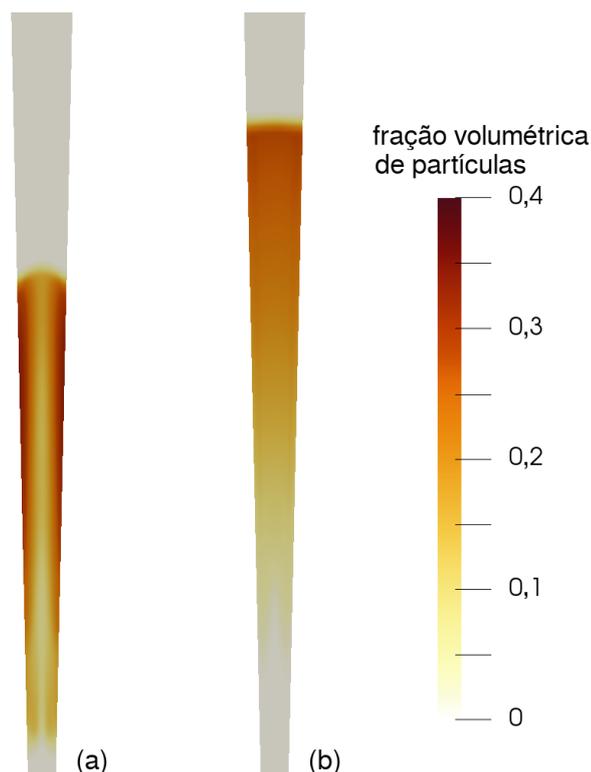


Figura 6.3: Concentração de biopartículas (a) desconsiderando, e (b) considerando a força de sustentação.

avaliada de forma a determinar sua influência na fluidodinâmica. A maioria dos modelos disponíveis para a força de sustentação foram desenvolvidos para escoamentos gás-líquido. O modelo considerado aqui foi de Legendre e Magnaudet (1997) para escoamentos com sólidos.

A inclusão da força de sustentação associada à correlação de Ergun resultou em um padrão de escoamento muito diferente em relação ao predito sem a força de sustentação, como ser observado na Figura 6.3. O escoamento pode oscilar dentro do biorreator, mas junto às paredes, a velocidade é nula; e, a partir das paredes, a velocidade aumenta. Assim, a força de sustentação não é nula nesta região: quaisquer partículas presentes sofrem a ação desta força, que é orientada na direção do gradiente de velocidade. Como visto na Figura 6.3a, sem a consideração da força de sustentação, houve uma maior concentração de biopartículas próximo às paredes, o que promoveu um caminho preferencial de fluido no centro do biorreator. A inclusão da força de sustentação causou um movimento das biopartículas que estavam próximo às paredes na direção do centro do biorreator, tornando o leito fluidizado mais homogêneo (Figura 6.3b). A magnitude deste movimento

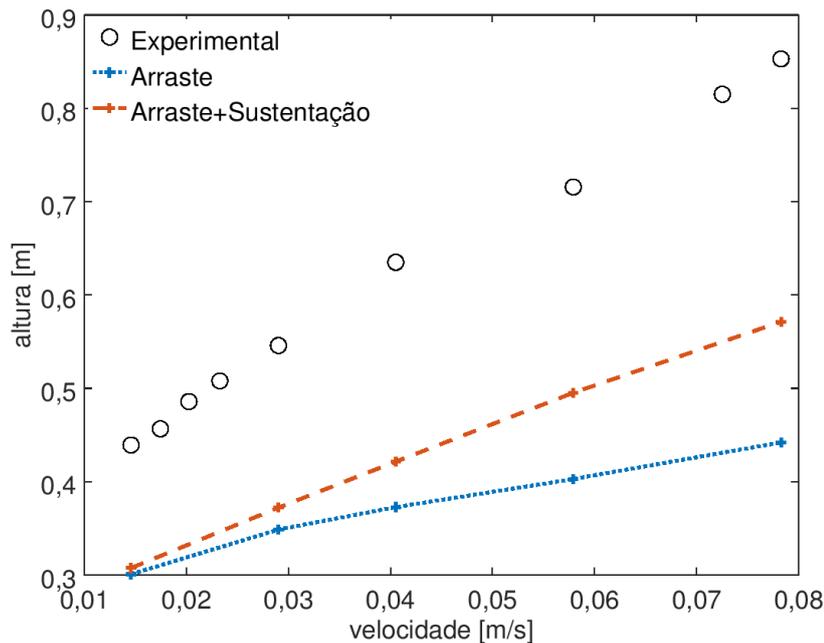


Figura 6.4: Influência da sustentação na altura do leito fluidizado.

foi primeiramente reportado na literatura como sendo significativo para leitos fluidizados líquido-sólido (Carlos e Richardson, 1968). Sem um caminho preferencial, o movimento ascendente do fluido atuou sobre uma quantidade maior de biopartículas, agora presentes no seio do reator, as quais foram carregadas com o leito fluidizado, aumentando a sua altura.

Em todas as vazões consideradas, a inclusão da força de sustentação resultou em maiores alturas em relação às obtidas desconsiderando esta força. Como pode ser notado na Figura 6.4, nas menores velocidades (0,0146 e 0,0290 m/s), a força de sustentação teve pouca influência na altura do leito. Ambas as simulações propiciaram variações similares da altura do leito com a velocidade do escoamento. Por outro lado, o uso da correlação de Ergun, sem a consideração desta força, resultou numa menor inclinação da curva para velocidades acima de 0,0290 m/s. Em velocidades maiores, a influência da força de sustentação foi mais representativa, alcançando alturas cada vez mais elevadas do que as obtidas sem o uso da força de sustentação para velocidades maiores.

Apesar da influência da força de sustentação na fluidodinâmica, a inclusão desta força não foi suficiente para fornecer uma boa concordância entre os valores simulados e os dados experimentais das alturas de leito fluidizado.

Tabela 6.2 - Influência das colisões na altura do leito fluidizado.

| Velocidade [m/s] | Altura do leito [m] | | | | |
|------------------|---------------------|--------|--------|--------|--------|
| | sem KTGF | e=0,6 | e=0,7 | e=0,8 | e=0,9 |
| 0,0146 | 0,2994 | 0,3067 | 0,3071 | 0,3075 | 0,3076 |
| 0,0290 | 0,3644 | 0,3716 | 0,3719 | 0,3722 | 0,3724 |
| 0,0405 | 0,4056 | 0,4205 | 0,4209 | 0,4215 | 0,4219 |
| 0,0579 | 0,4715 | 0,4939 | 0,4943 | 0,4952 | 0,4961 |
| 0,0782 | 0,5475 | 0,5702 | 0,5707 | 0,5712 | 0,5716 |

6.2.2 Influência das Colisões entre Biopartículas

As colisões entre as biopartículas também foram investigadas por meio da variação do coeficiente de restituição, de forma a investigar o quanto da homogeneização na Figura 6.3 foi somente devido a força de sustentação. Devido à ausência de um valor experimental para o coeficiente de restituição do carvão ativado, assim como para biopartículas, diferentes valores foram atribuídos para verificar a sua influência na expansão do leito fluidizado.

A Tabela 6.2 apresenta as alturas de leito fluidizado obtidas para diferentes velocidades de entrada, tanto desconsiderando quanto considerando as colisões entre biopartículas, respectivamente, sem a inclusão do modelo KTGF ou incluindo este com a adoção de diferentes valores para o coeficiente de restituição na faixa de 0,6 a 0,9.

Os valores simulados obtidos com e sem o modelo KTGF indicaram que as colisões entre biopartículas tiveram pequena influência (<5%), significando que, para as condições avaliadas, o movimento das partículas calculado assumindo as colisões entre partículas forneceu pequenos desvios a partir do movimento predito considerando as partículas apenas como uma fase Euleriana. Mesmo assim, este efeito não é desprezível, o qual justifica a inclusão do KTGF nas simulações. A partir da comparação das alturas preditas com diferentes valores para o coeficiente de restituição é possível verificar que este parâmetro tem pouca influência na expansão do leito. Apesar de todos os desvios nas alturas serem positivos, a maior alteração observada foi de apenas 0,4214%, entre as alturas preditas usando valores de coeficiente de restituição de 0,6 e 0,9. Também não foi observada nenhuma tendência significativa em relação a influência do coeficiente de restituição a diferentes velocidades: apesar da altura do leito aumentar com o incremento do coeficiente de restituição, este aumento é insignificante. Considerando experimentos físicos, a pequena influência do co-

eficiente de restituição deve-se a existência de um líquido intersticial entre as partículas sólidas, o qual pode reduzir o efeito das colisões entre as biopartículas. De acordo com Liu *et al.* (2016), na fluidização líquido-sólido, partículas interagem com o líquido ao redor, levando a uma maior dissipação de energia em nível de partículas. Além disso, partículas com pouca inércia, tais como as biopartículas avaliadas aqui, podem ser facilmente influenciadas pelo efeito do fluido intersticial. Assim, o modelo KTGF atuou de acordo com o comportamento observado experimentalmente.

Uma vez que não houve influência significativa do coeficiente de restituição nos resultados preditos para a altura do leito, outros parâmetros foram avaliados. Para o valor de $e = 0,8$, o leito fluidizado simulado nas diferentes velocidades (Tabela 6.2) apresentou frações máximas de biopartículas entre 0,31 e 0,51 (apenas na interface a fração era de 5%). Apesar da alta concentração de sólidos, o uso do modelo KTGF resultou valores de Θ aparentemente baixos (entre $5,63 \times 10^{-4}$ e $3,60 \times 10^{-3}$) os quais, convertidos em flutuações de velocidade das biopartículas (Equação 4.21), aponta para valores relativamente elevados, entre 0,0411 e 0,1038 m/s. Desta forma, o modelo KTGF, considerando o coeficiente de restituição igual a 0,8, foi adotado nas simulações remanescentes.

6.2.3 Avaliação da Modelagem da Turbulência

Uma vez que o biorreator possui largura relativamente pequena, verificou-se a necessidade de avaliar a abordagem utilizada para estimar propriedades turbulentas junto às paredes. Pode-se utilizar um modelo de turbulência junto com uma função de parede, que possui a vantagem de necessitar menos refinamento nesta região, ou pode-se utilizar uma malha mais refinada e resolver o escoamento junto à parede desde a sub-camada viscosa, sem o uso de funções. Além disso, a turbulência pode afetar a distribuição de partículas, e com isso a altura do leito fluidizado. Por esta razão foi avaliado o uso de um maior refino junto às paredes e empregado outro modelo de turbulência (SST $k-\omega$), visto que modelos como o $k-\epsilon$ não tem boa predição nesta região. Isto resultou numa malha com maior quantidade de volumes de controle, que comparado com a malha ótima, necessitou de aproximadamente 50 vezes mais tempo de máquina para realização das simulações, considerando $\frac{1}{4}$ do reator.

Portanto, foram utilizados os modelos de turbulência $k-\epsilon$ associado a função de parede, e SST $k-\omega$ calculando a camada viscosa para avaliar sua influência na predição da máxima

tensão cisalhante do líquido (Equação 4.17). Os resultados obtidos com estes modelos são apresentados na Figura 6.5, para diferentes velocidades e alturas. Pode-se notar que, para a velocidade de 0,0146 m/s (Figura 6.5a), as tensões cisalhantes previstas pelos modelos ficaram muito próximas nas maiores alturas, onde há menor influência do leito de bio-partículas, exceto por pequenas diferenças próximo às paredes. Na menor altura, onde o leito está mais concentrado, as tensões previstas ficaram próximas no meio do reator, mas as diferenças aumentam com a proximidade da parede. Isto pode ser devido à abordagem adotada (resolver ou modelar a sub-camada viscosa), mas estas diferenças também podem ser devido ao refinamento utilizado: como o modelo SST $k-\omega$ exige o uso de valores de $y^+ \approx 1$ na sub-camada viscosa para evitar o uso de funções de parede, há uma quantidade maior de volumes em todo o biorreator, favorecendo a obtenção de resultados mais precisos. Por outro lado, o modelo $k-\epsilon$ exige volumes de controle com $y^+ > 30$ nesta região, que resulta em uma malha mais grosseira porém adequada para o uso de funções de parede. Para as velocidades 0,0405 e 0,0782 m/s (Figuras 6.5b e 6.5c), observa-se um comportamento similar, com tensões similares no meio do reator, e diferenças significativas próximo às paredes.

Como visto, há diferenças nas predições obtidas com os diferentes modelos para a tensão cisalhante, principalmente próximo às paredes. Por isto, também foram avaliados os valores da tensão de cisalhamento exatamente na parede, obtidos utilizando as Equações 4.18 e 4.19 para os modelos $k-\omega$ e $k-\epsilon$, respectivamente. Estes valores são apresentados na Tabela 6.3. Nota-se que os valores de tensão ficaram muito mais elevados na parede quando resolvendo o escoamento sem funções de parede, confirmando as tendências apresentadas na Figura 6.5. Os valores elevados da tensão indicam gradientes elevados de velocidade próximo às paredes (de acordo com a Equação 4.18), o que afeta o perfil de velocidade do líquido. Mesmo com diferenças na velocidade próxima às paredes, nota-se também que isto pouco afetou na altura do leito fluidizado, os quais ficaram muito próximos com ambos os modelos. Desta forma, verifica-se que o uso do modelo $k-\epsilon$ com funções de parede traz desvios aos demais resultados obtidos, mas optou-se pelo uso deste devido ao menor tempo de simulação, mantendo a precisão nas alturas previstas para o leito fluidizado, conforme objetivo deste estudo.

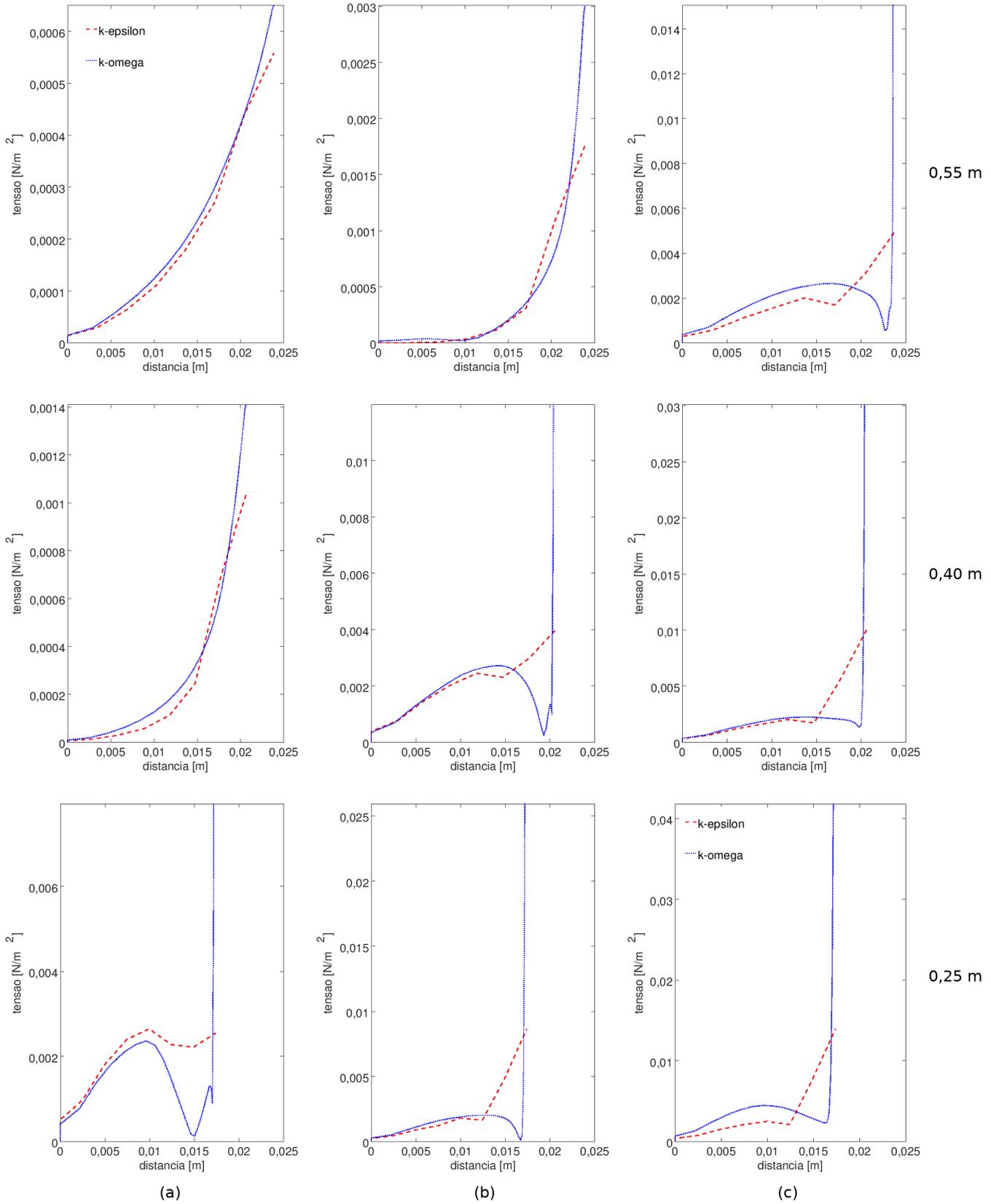


Figura 6.5: Variação da tensão cisalhante no leito em função da abordagem turbulenta, para diferentes alturas nas velocidades de recirculação de (a) 0,0146, (b) 0,0405 e (c) 0,0782 m/s.

Tabela 6.3 - Tensões cisalhantes e altura do leito obtidas com diferentes modelos de turbulência.

| velocidade [m/s] | tensão na parede [N/m ²] | | altura do leito [m] | |
|---------------------|--------------------------------------|------------------------|---------------------|----------------|
| | $k-\epsilon$ | SST $k-\omega$ | $k-\epsilon$ | SST $k-\omega$ |
| 0,0146 | $2,106 \times 10^{-5}$ | $1,631 \times 10^{-4}$ | 0,3074 | 0,3089 |
| 0,0290 | $4,331 \times 10^{-5}$ | $1,754 \times 10^{-4}$ | 0,3722 | 0,3752 |
| 0,0405 | $5,035 \times 10^{-5}$ | $1,646 \times 10^{-4}$ | 0,4215 | 0,4259 |
| 0,0579 | $4,812 \times 10^{-5}$ | $2,127 \times 10^{-4}$ | 0,4952 | 0,5007 |
| 0,0782 | $6,513 \times 10^{-5}$ | $4,387 \times 10^{-3}$ | 0,5712 | 0,5760 |

6.2.4 Avaliação dos Modelos de Arraste

As correlações de Haaland (1983), Ergun (1952), Gidaspow *et al.* (1983), Gibilaro *et al.* (1985) e Wen e Yu (1966) foram consideradas para avaliar sua influência na predição das alturas do leito para o Caso 1. Em todas as simulações, o modelo de Legendre e Magnaudet (1997) foi incluído para o cálculo da força de sustentação, devido a sua significativa influência nos resultados apresentado na Seção 6.2.1.

Como pode ser observado na Figura 6.6, as alturas do leito fluidizado preditas utilizando o modelo de Wen-Yu foram levemente maiores do que as alturas resultantes dos demais modelos. A correlação de Haaland resultou nas menores alturas do leito, o qual manteve-se oscilando em torno de 0,26 m, indicando que a força de arraste obtida com este modelo foi insuficiente para promover a expansão do leito. Este resultado pode ser justificado devido à desconsideração do efeito de população neste modelo e, também pela ausência de uma interface bem definida das biopartículas na abordagem Euleriana-Euleriana. Dentre as demais, as alturas preditas com a correlação de Gibilaro foi significativamente menor, com desvios de 33,58 a 46,7% em relação aos dados experimentais.

As alturas preditas utilizando as correlações de Ergun e Gidaspow ficaram bastante próximas (Figura 6.6). Gidaspow estabeleceu o seu modelo a partir dos modelos de Ergun e Wen-Yu, considerando cada modelo de acordo com a sua faixa de diluição (Gidaspow *et al.*, 1983). De acordo com a Figura 6.7, a maior parte do leito encontra-se no regime denso, justificando as alturas preditas usando as correlações de Gidaspow e Ergun ficarem próximas.

A partir dos resultados obtidos, foi possível observar que nenhum dos modelos prediz satisfatoriamente a fluidização de biopartículas. Comparando as alturas do leito fluidizado

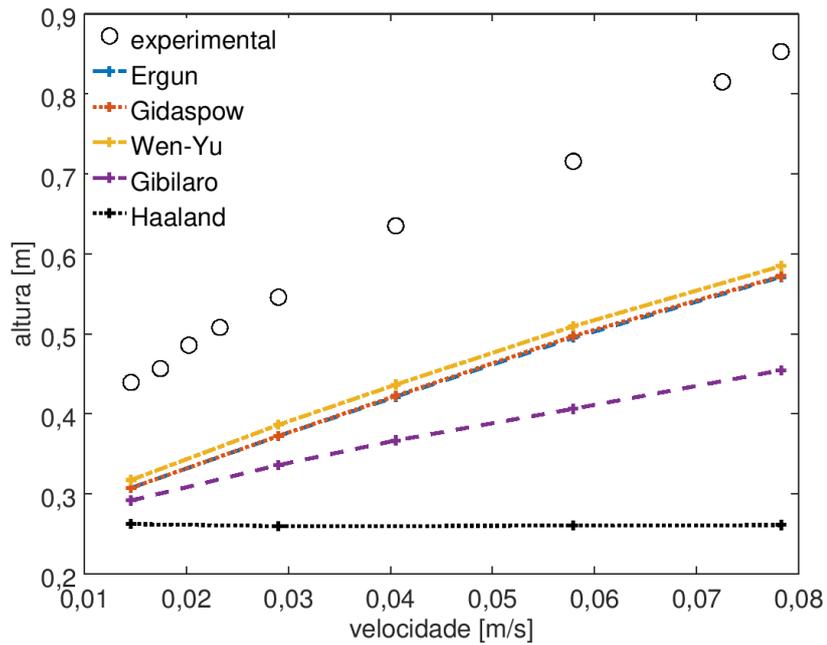


Figura 6.6: Alturas de leito fluidizado obtidas usando diferentes modelos de arraste.

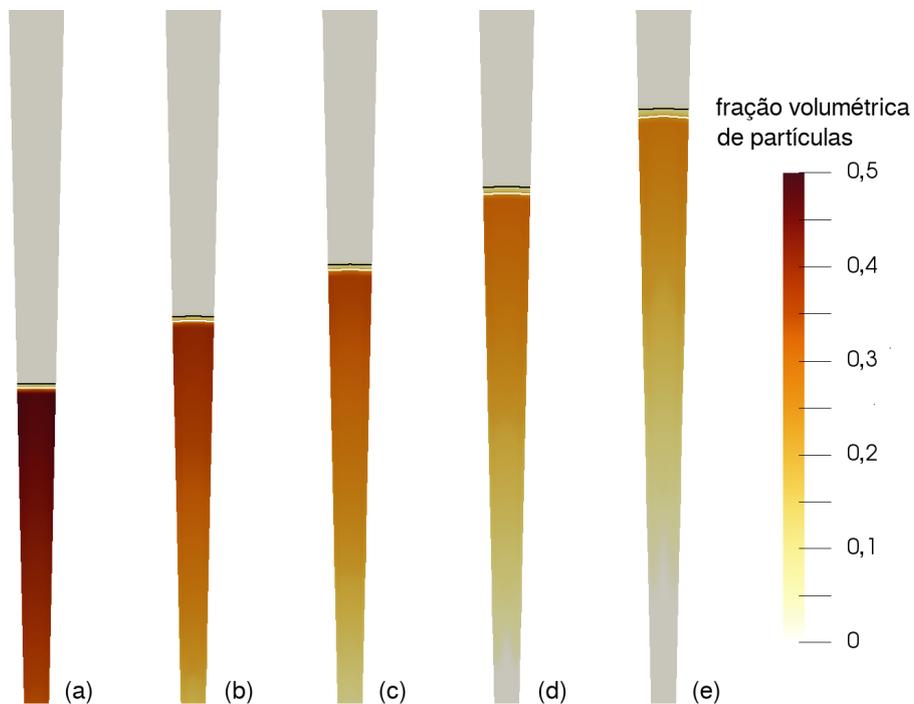


Figura 6.7: Alturas de leito fluidizado obtidas usando o modelo de Gidaspow para diferentes velocidades de entrada: (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0405 m/s, (d) 0,0579 m/s, e (e) 0,0782 m/s. As linhas brancas marcam 20% de sólidos, e as linhas pretas marcam 5%.

experimentais com os resultados obtidos utilizando os modelos de Ergun e Gidaspow, os desvios ficaram entre 30,51 e 33,63%. Ressalta-se que outras correlações da literatura, calibradas para sistemas gás-líquido, por exemplo a correlação de Schiller-Naumann, foram também avaliadas em um estudo preliminar. Estas forneceram previsões piores, com alturas menores do que as ilustradas na Figura 6.6.

6.3 Modificação de Modelos de Força de Arraste

6.3.1 Aumento da Estimativa da Força de Arraste

A partir dos resultados obtidos, os quais demonstraram a falta de precisão dos modelos originalmente desenvolvidos para escoamento gás-sólido na predição do escoamento líquido-sólido com biopartículas, foi verificada a necessidade de obter um modelo mais adequado. Uma vez que as alturas preditas ficaram abaixo dos valores experimentais, primeiramente foi verificado o quanto da força de arraste deveria ser aumentada de forma a fornecer valores melhores para as alturas do leito fluidizado. Para este propósito, foi decidido modificar o modelo de Ergun, já que este é um modelo clássico obtido para leito fixo e amplamente utilizado para sistemas de leito fluidizado (Enwald *et al.*, 1996). Além do mais, como pode ser observado na Figura 6.7, o leito fluidizado encontra-se no regime denso.

Foi decidido implementar uma correção para toda a expressão de Ergun, por meio de um fator constante, ao invés de cada termo (viscoso e cinético) isoladamente. Correções para cada termo também são encontrados na literatura para sistema gás-líquido (Finn e Galvin, 2017). No entanto, também é reportado na literatura que o coeficiente de arraste para biopartículas é proporcional ao coeficiente de arraste de uma esfera rígida e lisa por um fator de 1,6 (Nicoletta *et al.*, 1999), ou mesmo 2,3 para biogrânulos (Saravanan e Sreekrishnan, 2005). Desta forma, a correção de arraste avaliada é expressa na Equação 6.1, na qual o fator η assume diferentes valores:

$$M_D = \eta \left(150 \frac{\alpha_p^2 \mu_l}{\alpha_l d_p^2} + 1,75 \frac{|U_p - U_l| \alpha_p \rho_l}{d_p} \right) \quad (6.1)$$

Resultados da predição das alturas do leito do Caso 1 mostraram que mesmo um aumento de até 60% ($\eta = 1,6$, como o ajuste reportado para o coeficiente de arraste para biopartículas) não foi suficiente para atingir uma boa concordância com os dados experimentais (Figura 6.8). Assim, valores ainda maiores ($\eta = 2, 5$ e 10) também foram

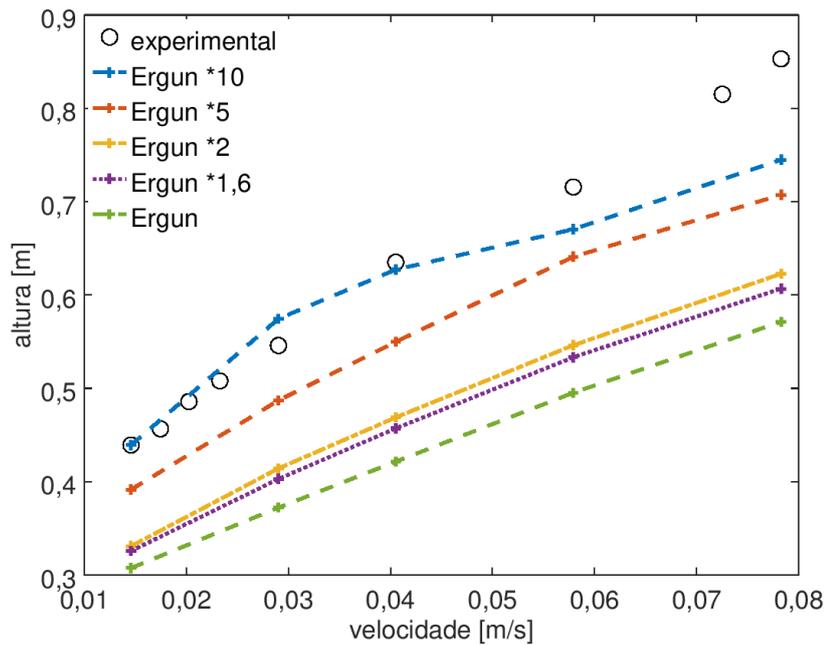


Figura 6.8: Alturas de leito fluidizado previstas utilizando a correlação de Ergun e fatores de correção.

avaliados. Porém, os resultados previstos usando uma força de arraste de 2 e 5 vezes maior, mantiveram o mesmo comportamento dos resultados obtidos considerando uma força de arraste de 1,6 vezes maior. Dentre estes resultados, pode ser notado que a força de arraste 5 vezes maior forneceu uma tendência muito similar aos dados experimentais. Um aumento de 10 vezes da força de arraste forneceu uma boa aproximação quantitativa com os dados experimentais em baixas velocidades. No entanto, seu incremento também resultou numa pobre concordância quantitativa e qualitativa para as velocidades maiores que 0,04 m/s.

A pobre concordância obtida com o maior incremento da força de arraste pode estar relacionada ao fato de que esta alteração, juntamente com o aumento da velocidade, resultou numa força de arraste tão elevada que as biopartículas foram arrastadas para maiores alturas. Assim, o leito ficou diluído nas maiores velocidades (Figura 6.9) e a região contendo 5% de biopartículas (critério usado para definir a altura do leito) ficou situado em uma altura menor do que a esperada, não seguindo a mesma tendência das curvas obtidas com os menores fatores de correção.

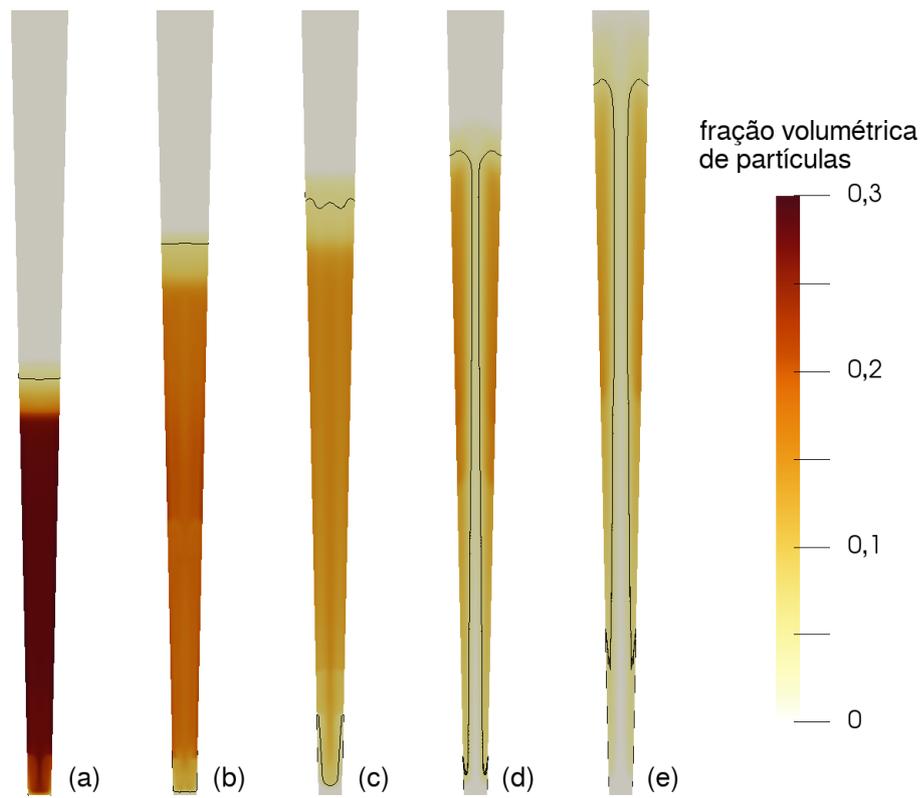


Figura 6.9: Expansão do leito predita utilizando o modelo de Ergun com $\eta = 10$, para as velocidades de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0405 m/s, (d) 0,0579 m/s, e (e) 0,0782 m/s. As linhas pretas marcam 5% de sólidos.

6.3.2 Dependência da Força de Arraste com um Número Adimensional

Considerando que o incremento de 60% para a força de arraste reportado na literatura, assim como valores maiores atribuídos, foram inadequados para prever as alturas do leito fluidizado, uma segunda abordagem para ajustar o modelo foi adotado para simular o Caso 1. Um grande número de experimentos conduzidos com partículas isométricas (partículas esféricas ou na forma de um poliedro regular) indicam que o valor do coeficiente de arraste depende apenas do número adimensional de Reynolds e da esfericidade (Turton e Levenspiel, 1986). Dessa forma, o número de Reynolds da partícula foi considerado para o ajuste do modelo de arraste. Isto promove um aumento da força de arraste proporcional ao quadrado do número de Reynolds, a qual pode ser relacionado à primeira contribuição inercial para a força de arraste. Quando tanto a fração volumétrica de sólidos quanto o número de Reynolds são pequenos, os efeitos convectivos e de “escudo” (*shielding*) contribuem para a força de arraste. Estes valores variam de acordo com as condições do escoamento, e para uma alta razão entre a concentração de partículas e o número de Reynolds, a força relacionada ao efeito das interações hidrodinâmicas entre partículas é proporcional a Re^2 (Kaneda, 1986). Hill *et al.* (2001) também reportaram este comportamento para baixos números de Reynolds. A necessidade de um melhor ajuste para a força de arraste também foi observada por conta dos resultados fornecidos pelo modelo de Ergun, no qual o maior fator de correção apresentou uma boa aproximação com os dados experimentais nas menores velocidades, mas aumentando erroneamente a força de arraste com o aumento da velocidade do fluido. Por outro lado, a velocidade relativa entre as fases usada na Equação 5.12 não deve aumentar linearmente com a velocidade do fluido.

Um aumento com um valor de $\eta = 10$ forneceu uma boa concordância à baixas velocidades (até 0,04 m/s), como pode ser visto na Figura 6.8. Nos resultados obtidos também foi observado que o número de Reynolds da partícula (Re_p) é aproximadamente 10 próximo à interface do leito, assim reforçando a hipótese da dependência do arraste com este número adimensional. Dessa forma, o número de Re_p local foi utilizado como um fator de incremento para a correlação original do Ergun. A correlação avaliada é expressa na Equação 6.2.

$$M_D = Re_p \left(150 \frac{\alpha_p^2 \mu_l}{\alpha_l d_p^2} + 1,75 \frac{|U_p - U_l| \alpha_p \rho_l}{d_p} \right) \quad (6.2)$$

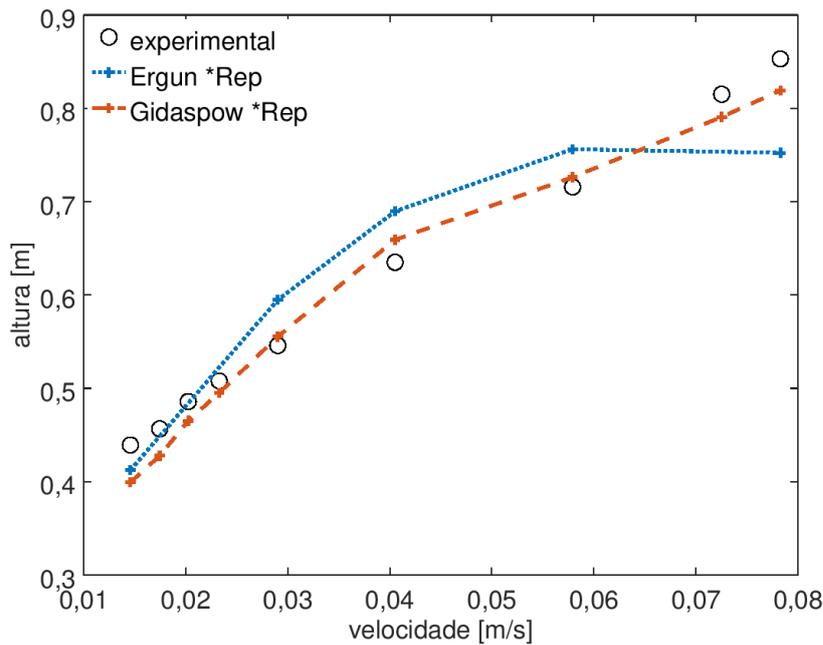


Figura 6.10: Simulações considerando o ajuste da força de arraste utilizando o número de Reynolds da partícula como um fator de correção.

Como pode ser observado na Figura 6.10, esta nova formulação manteve as boas aproximações entre os resultados experimentais e simulados para as menores velocidades, até 0,06 m/s.

Tanto o modelo de Ergun com o maior fator de correção ($\eta = 10$), e o Ergun associado com o número de Reynolds da partícula, foram capazes de prever somente as menores velocidades, mas falharam nas maiores velocidades. Com estes modelos, as maiores velocidades resultaram em um leito fluidizado excessivamente diluído. Assim, foi avaliado se o modelo de Gidaspow poderia ser uma alternativa adequada, uma vez que este considera dois modelos em sua formulação, de acordo com a concentração/diluição das partículas no sistema: para regiões densas, a Equação 6.2 é utilizada, caso contrário, em regiões diluídas a força de arraste é estimada a partir da Equação 6.3 (baseada no modelo de Wen e Yu (1966)).

$$M_D = Re_p \frac{3}{4} C_D \frac{|U_p - U_l| \alpha_p \rho_l}{d_p} f(\alpha) \quad (6.3)$$

Os resultados obtidos a partir do ajuste do modelo de Gidaspow mostraram uma melhora significativa em relação aos resultados preditos com o ajuste do modelo de Ergun

(Equação 6.1), ambos considerando a influência do número de Reynolds da partícula (Figura 6.10). A partir da velocidade de 0,06 m/s, os desvios observados com o modelo de Ergun ajustado foram de até 12%, enquanto o uso do modelo do Gidaspow ajustado reduziu este desvio para 4%, em relação aos dados experimentais. Ressalta-se ainda que, apesar de algumas referências na literatura mencionarem que o modelo do Gidaspow pode apresentar instabilidades numéricas devido a uma transição abrupta entre os modelos (Ergun e Wen-Yu), isto não foi observado no presente estudo. A separação do escoamento em concentrações densa e diluída, no modelo do Gidaspow, foi um fator decisivo para a melhora dos resultados preditos quando considerado uma ampla faixa de velocidades, reforçando a influência do grupo adimensional para a fluidização de biopartículas.

Os resultados obtidos sugerem que a força de arraste atuando na fluidização de biopartículas tem uma dependência extra do número de Reynolds. A correlação de Ergun, quando ajustada, forneceu melhores previsões para as alturas de leito fluidizado, comparado à correlação de Ergun com o fator de correção, com o incremento de dez vezes. A correlação de Gidaspow ajustada forneceu boa concordância com as alturas experimentais para todas as faixas de velocidade, sob as condições consideradas. Uma justificativa para a boa previsão do modelo de Gidaspow, corrigido, pode ser também devido à presença de diferentes regimes de escoamento em operação no reator afunilado.

6.3.3 Validação do Ajuste Proposto

As condições remanescentes de Wu *et al.* (2009) (Tabela 4.3) foram utilizadas para validar o ajuste proposto. Primeiro, os casos com o mesmo TBR (com ângulo de $2,5^\circ$) foram simulados, considerando biopartículas com diferentes espessuras de biofilme. Em seguida, os casos com ângulo de 5° foram também simulados. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 6.11, no qual uma área sombreada corresponde à 15% de confiança, na ausência de informações sobre erros experimentais de Wu *et al.* (2009).

Em geral, os resultados preditos nas simulações apresentaram boa concordância qualitativa com os valores experimentais. Quantitativamente, as alturas preditas para os leitos fluidizados também apresentaram boa concordância. Observou-se que, apesar do ajuste ter sido proposto para o Caso 1, a concordância com as alturas experimentais foram ainda melhores para o Caso 2 (Figura 6.11b), a despeito das diferentes densidades das biopartículas. Em ambos os casos, os maiores desvios relativos foram encontrados nas menores veloci-

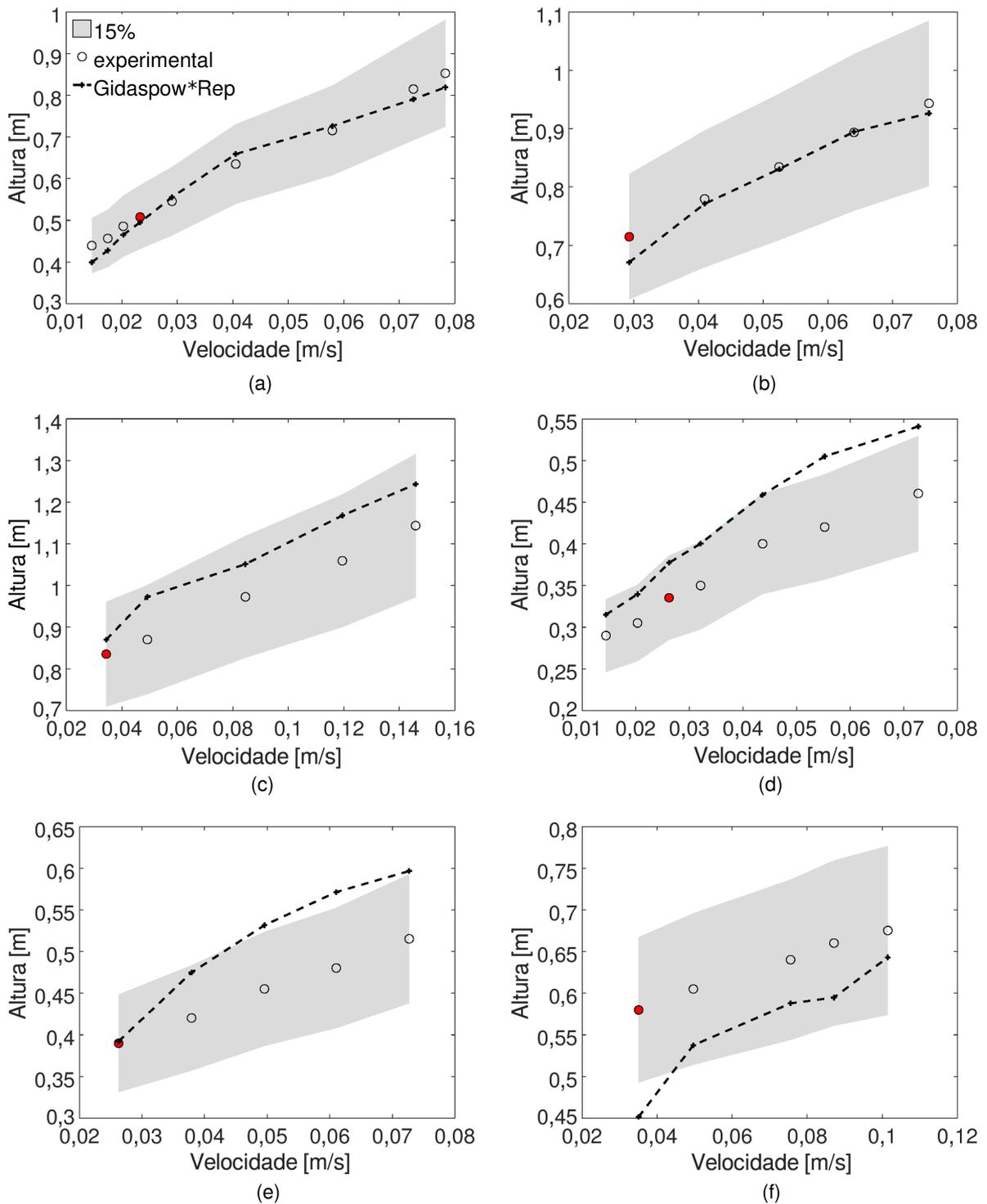


Figura 6.11: Alturas de leito fluidizado usando a correlação de Gidaspow ajustada para (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3, (d) Caso 4, (e) Caso 5, e (f) Caso 6. A área sombreada corresponde a 15% de variação dos dados experimentais. Pontos destacados em vermelho indicam as condições nas quais o biofilme foi formado e medido.

Tabela 6.4 - Re_p resultante da simulação de cada caso, e desvios das alturas de leito experimentais.

| Caso | ρ_b/ρ_f | Re_p (leito) | Re_p (interface) | desvio [%] | desvio médio [%] |
|------|-----------------|----------------|--------------------|--------------|------------------|
| 1 | 1,428 | 5,14 – 7,12 | 7,24 – 8,75 | 1,47 – 9,09 | 2,459 |
| 2 | 1,337 | 5,94 – 6,85 | 6,70 – 9,13 | 0,11 – 6,14 | 1,864 |
| 3 | 1,224 | 6,12 – 6,98 | 6,93 – 8,98 | 4,13 – 11,76 | 8,585 |
| 4 | 1,425 | 4,03 – 7,29 | 7,13 – 7,63 | 8,65 – 20,17 | 14,165 |
| 5 | 1,380 | 5,05 – 7,15 | 7,37 – 8,01 | 0,58 – 18,96 | 13,018 |
| 6 | 1,316 | 5,53 – 6,82 | 8,05 – 7,85 | 4,67 – 22,11 | 11,221 |

dades. Os desvios foram maiores para o Caso 3 (Figura 6.11c). Ressalta-se que há uma grande diferença entre as condições dos Casos 1 e 3: no primeiro, a espessura do biofilme é de $38 \mu\text{m}$, enquanto no Caso 3 a espessura é de $146 \mu\text{m}$, resultando na menor densidade dentre todos os casos avaliados. Ambas as relações entre as densidades e os desvios são apresentados na Tabela 6.4.

Os Casos 1 e 4 apresentam condições similares: as faixas de velocidade avaliadas eram muito próximas e as biopartículas têm praticamente as mesmas espessuras de biofilme, 38 e $39 \mu\text{m}$. Somente a geometria do biorreator foi diferente, com ângulos de $2,5$ e 5° . Assim, esperava-se que os desvios permanecessem próximos. Contudo, houve uma diferença maior para o Caso 4 (Figura 6.11d). O ângulo maior no TBR de 5° forneceu uma maior redução da velocidade do líquido ao longo da altura do biorreator. Observou-se que as simulações forneceram valores menores para a altura do leito fluidizado, quando comparadas às alturas observadas no TBR com $2,5^\circ$ (Caso 1), porém maiores do que os valores observados experimentalmente, o que indica que a força de arraste para este caso ficou superestimada. Esta mesma tendência foi observada nas alturas simuladas para o Caso 5 (Figura 6.11e). No entanto, o oposto foi observado para o Caso 6 (Figura 6.11f), no qual as alturas simuladas ficaram abaixo das alturas experimentais. Cabe lembrar que as biopartículas presentes nos Casos 3 e 6 pertencem ao grupo A de Geldart, enquanto todas as demais pertencem ao grupo B (Tabela 4.1), o que pode contribuir para os desvios observados.

Valores médios do número de Reynolds da partícula no leito fluidizado e na sua interface (com 5% de biopartículas) são apresentados na Tabela 6.4. Os valores presentes nesta tabela representam valores médios de Re_p no leito fluidizado e na interface do leito para a faixa de velocidade de cada caso. Em todos os casos, há variações no número de Reynolds

da partícula. A boa concordância obtida nos Casos 1 e 2, em toda a faixa de velocidades avaliada indica que o uso de um fator constante para o aumento da força de arraste pode não ser adequado. Resultados preditos para o Caso 3, o qual apresentou a menor razão de densidades, mostrou também uma boa concordância com os dados experimentais, demonstrando a adequação da modificação proposta para a força de arraste. As alturas preditas para os Casos 4 e 5 apresentaram os maiores desvios quando comparados aos dados experimentais. Mesmo assim, todos os casos tiveram uma predição com desvios médios dentro de 15%.

Em geral, uma boa concordância foi observada na predição de todas as condições experimentais medidas por Wu *et al.* (2009). Os desvios observados podem ser atribuídos a:

- imprecisões nos valores das alturas obtidas experimentais;
- variações no desenvolvimento do biofilme, também acarretando em:
 - ampla distribuição de espessuras de biofilme;
 - ampla variação da densidade do biofilme.
- simulações comumente utilizam somente valores médios;
- rearranjo das partículas próximo ao ponto de mínima fluidização pode também dificultar a predição das condições de mínima fluidização no regime de escoamento intermediário (Gibilaro *et al.*, 1985), definido como $1 < Re_p < 100$ (Nicolella *et al.*, 2000).

Devido aos fatores mencionados, a correção proposta neste estudo foi considerada adequada para a predição do leito fluidizado com biopartículas sob diferentes condições operacionais.¹

¹ Parte dos resultados apresentados até aqui foram aceitos no dia 31 de Julho de 2018 e publicados na revista Powder Technology, v339, p.90-101, na forma de artigo intitulado *Investigation of phases interactions and modification of drag models for liquid-solid fluidized bed bioreactors* (<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.07.102>).

6.4 Avaliação Fluidodinâmica

Nesta seção é apresentada a análise dos resultados obtidos com o modelo proposto (Gidaspow e adimensional). Primeiramente, a influência da simplificação da geometria foi avaliada. Posteriormente, análises mais detalhadas de campos hidrodinâmicos são apresentadas. Por fim, as características hidrodinâmicas que podem interferir no desenvolvimento do biofilme são consideradas.

6.4.1 Avaliação da Hipótese de Simetria

Os resultados apresentados nas subseções anteriores foram obtidos adotando-se a hipótese de simetria, ou seja, utilizando $\frac{1}{4}$ da geometria para a qual condições de simetria foram aplicadas nas faces (Figuras 4.1b e 4.1c). Esta simplificação foi útil para a obtenção de um modelo de arraste, requerendo menor custo computacional. Para avaliar as condições hidrodinâmicas do biorreator, a partir desta seção optou-se por apresentar resultados obtidos na simulação de uma geometria completa, sem planos de simetria.

Na Figura 6.12 foram incluídas as predições da altura de fluidização no biorreator completo, juntamente com as alturas obtidas considerando simetria, apresentadas na etapa de validação (Figura 6.11a, do Caso 1). A finalidade foi de observar se nas condições avaliadas o ajuste se mantém válido. De forma quantitativa, esta variação entre as duas predições ficou entre 3,5 e 5,0%, sendo que os resultados obtidos com o uso de ambas as malhas apresentaram, em geral, boa concordância com os valores experimentais.

6.4.2 Curvas de Fluidização

A partir desta seção, todos os resultados do Caso 1 (exceto a última subseção) foram obtidos com a geometria completa.

Como apresentado na revisão, as curvas de fluidização diferem para coluna cilíndrica e afunilada. Na Figura 6.13 e 6.14, são apresentadas as alturas do leito equivalentes à diferentes velocidades. Foram consideradas as velocidades avaliadas por Wu *et al.* (2009), bem como velocidades inferiores. Nesta Figura observa-se a expansão do leito com o aumento da velocidade. As menores velocidades são apresentadas de forma mais detalhada, em outra escala, na Figura 6.13, onde até 0,00146 m/s o leito encontra-se no regime fixo (acompanhada do aumento da perda de carga); a partir da velocidade 0,00365 m/s o

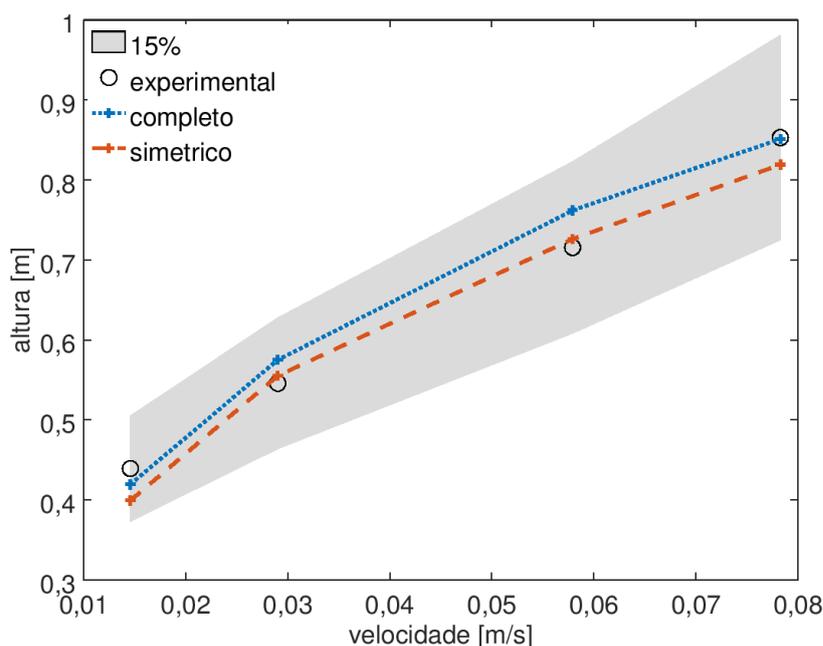


Figura 6.12: Altura de fluidização no modelo proposto para o Caso 1, com e sem simplificação geométrica

leito aparenta estar fluidizado. Uma vez que há um acréscimo na altura do leito e uma “aparente” tendência da pressão para atingir um valor constante. Porém, observando as maiores velocidade na Figura 6.14 têm-se um aumento da altura com o decréscimo da pressão.

Na Figura 6.14 também é apresentada a perda de carga em função da velocidade superficial do fluido. Nesta, observa-se o mesmo perfil descrito por Shi *et al.* (1984) para reatores afunilados (Figura 3.7), onde ocorre um aumento da pressão com o aumento da velocidade. Há um pico da pressão, o qual pode estar relacionado com a velocidade crítica. Posteriormente, observa-se um declínio desta com o aumento da velocidade, que tende para um valor, mas não chega a ficar estável/constante. Dessa forma, os experimentos foram conduzidos nessa região de declínio da perda de carga (a partir de 0,01458 m/s) – este declínio também foi reportado experimentalmente. Nessas condições há o regime de leito parcialmente fluidizado, onde diferentes regimes (fixo/fluidizado) podem coexistir em um reator afunilado.

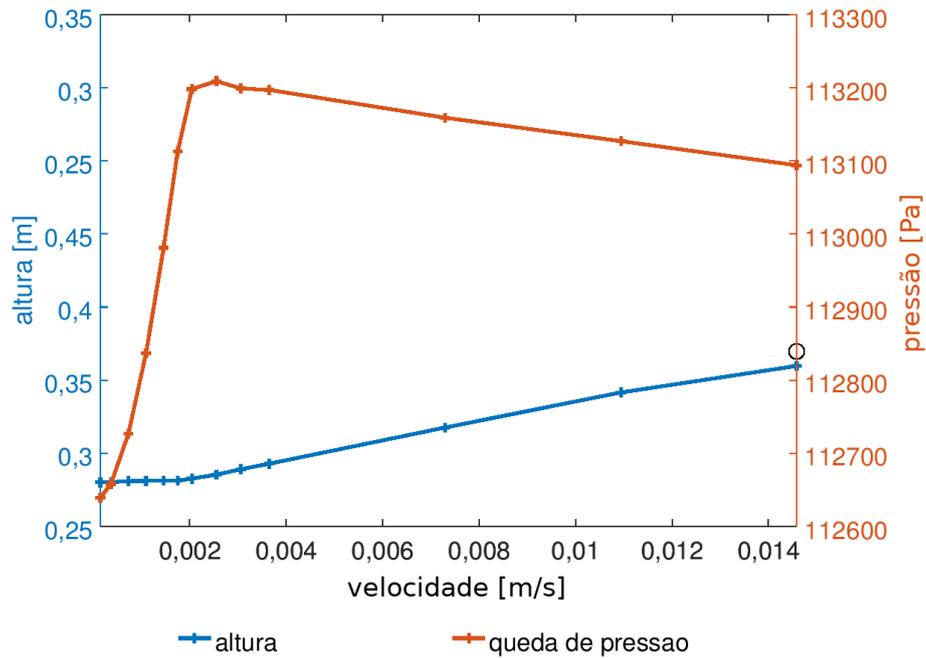


Figura 6.13: Curvas de fluidização do Caso 1 sob velocidades reduzidas (até 0,0146 m/s). Os marcadores indicam os valores simulados e o círculo representa o dado experimental.

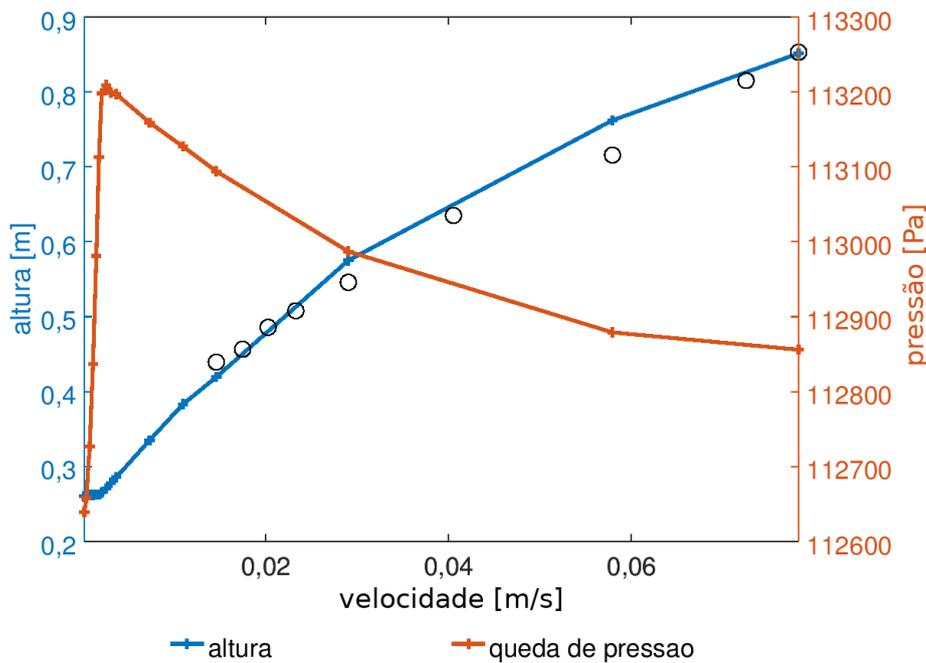


Figura 6.14: Curvas de fluidização do Caso 1 sob diferentes velocidades (até 0,0782 m/s). Os marcadores indicam os valores simulados e os círculos representam os dados experimentais.

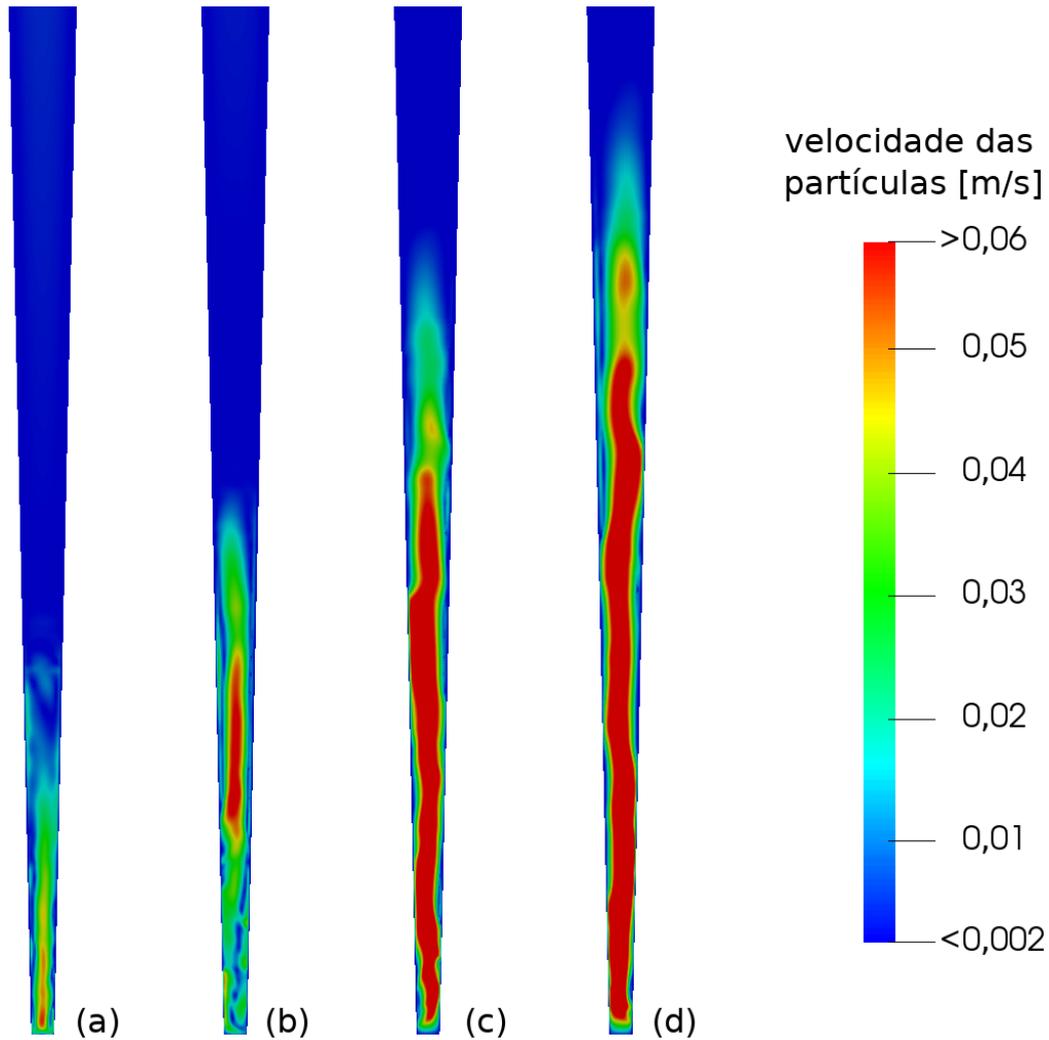


Figura 6.15: Campos de velocidade média das biopartículas, limitado pela velocidade de mínima fluidização e velocidade terminal, para os casos com velocidade de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0579 m/s, e (d) 0,0782 m/s.

6.4.3 Velocidades Características no Leito Fluidizado Afunilado

Nesta seção, os campos de velocidade média das partículas foram limitados com as velocidades de mínima fluidização (0,001764 m/s) e terminal (0,058673 m/s) calculadas com as Equações 4.9 a 4.15. Como descrito por Shi *et al.* (1984), no reator afunilado há partículas que podem ultrapassar a velocidade terminal na região inferior. Dessa forma, buscou-se evidenciar a presença destas. A partir da Figura 6.15, observa-se que:

1. na menor velocidade há uma pequena região com partículas que atingiram a velocidade terminal, apenas próxima à entrada;
2. com o aumento da velocidade, essa região está mais acentuada ao centro do reator,

com a presença de partículas que permaneceram na mínima fluidização na região de entrada;

3. observam-se velocidades de biopartículas acima da velocidade superficial de entrada de líquido, devido às regiões onde o fluido é acelerado;
4. nas maiores velocidades, é predominante a existência de partículas com velocidade terminal até alturas elevadas, mesmo com decréscimo da velocidade no topo.

Uma vez observado que partículas que atingiram a velocidade terminal estão presentes no reator, buscou-se analisar também a fração volumétrica de partículas. Conforme a Figura 6.16, nas menores velocidades, observa-se que o leito fluidizado permanece bem definido na porção inferior do reator. Segundo Kunii e Levenspiel (1991), o leito é denso quando a superfície do leito está definida – conforme observado na figura. Com o aumento da velocidade, o leito permanece definido, apesar de um pouco menos concentrado na superfície. Também foi observado que partículas são arrastadas a partir da região de entrada e, por isso, há uma menor concentração nesta. Na velocidade de 0,0782 m/s isto foi acentuado, de modo que o leito atinge alturas mais elevadas (conforme já observado na Figura 6.10).

6.4.4 Hidrodinâmica das Fases

De acordo com a revisão, biopartículas comumente estão na faixa de $1 < Re_p < 100$ (Nicolella *et al.*, 2000). A partir da Figura 6.17 observa-se a concordância destes campos simulados com o reportado em literatura. Considerando que o Re_p leva em conta a velocidade relativa entre as fases, um maior Re_p indica uma maior diferença entre as velocidades das fases. Por esta razão, verifica-se os maiores valores de Re_p na base e a sua diminuição ao longo da altura do biorreator. Estes valores aumentam com o acréscimo da velocidade de entrada, atingindo um valor máximo de Reynolds da partícula (Re_p) igual a 23 na menor velocidade, e 108 na maior velocidade localizados na base do biorreator. Em todos os casos, observam-se valores de Re_p de aproximadamente 10 no leito de biopartículas. Cabe lembrar que este valor de $Re_p \approx 10$ no leito fluidizado é o valor com o qual a força de arraste está sendo aumentada. De modo similar, resultados obtidos com $\eta = 10$ também forneceram resultados melhores para a altura do leito, quando comparado às predições dadas por modelos disponíveis.

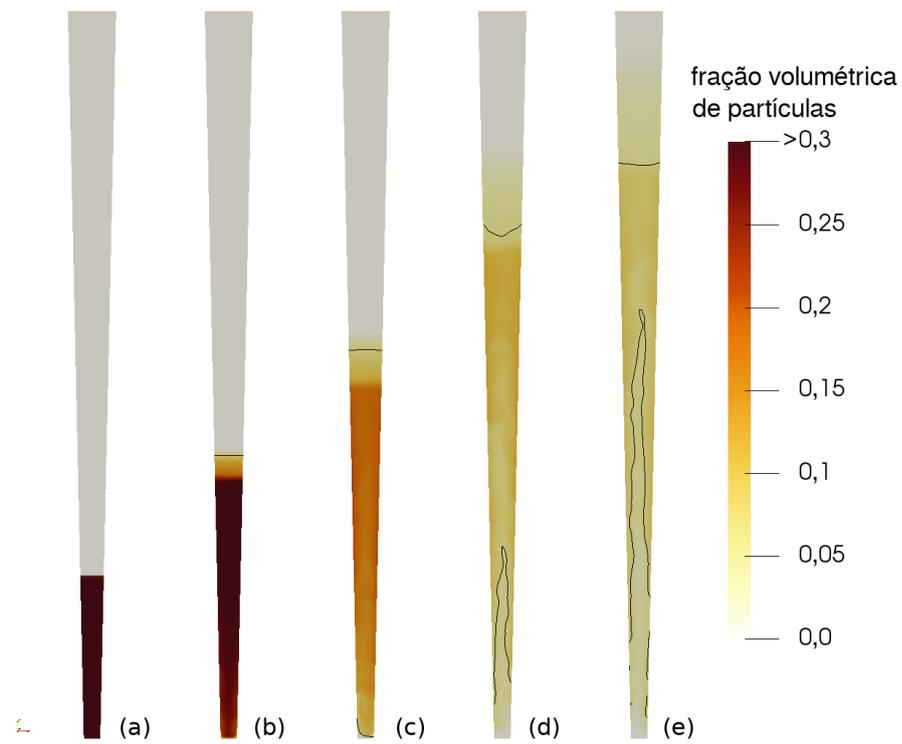


Figura 6.16: Campo de fração volumétrica média de biopartículas, onde (a) é a condição inicial de máximo empacotamento (velocidade nula), e os demais os casos com velocidade de entrada de (b) 0,0146 m/s, (c) 0,0290 m/s, (d) 0,0579 m/s, e (e) 0,0782 m/s.

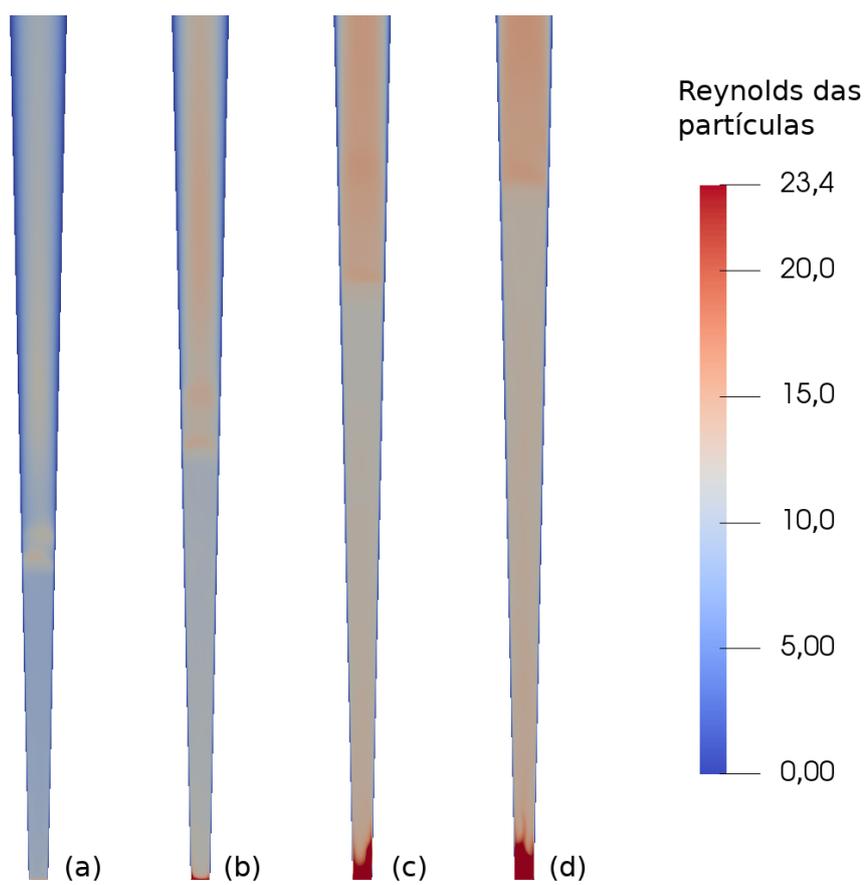


Figura 6.17: Campos de Reynolds da partícula, para as velocidade de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0579 m/s, e (d) 0,0782 m/s.

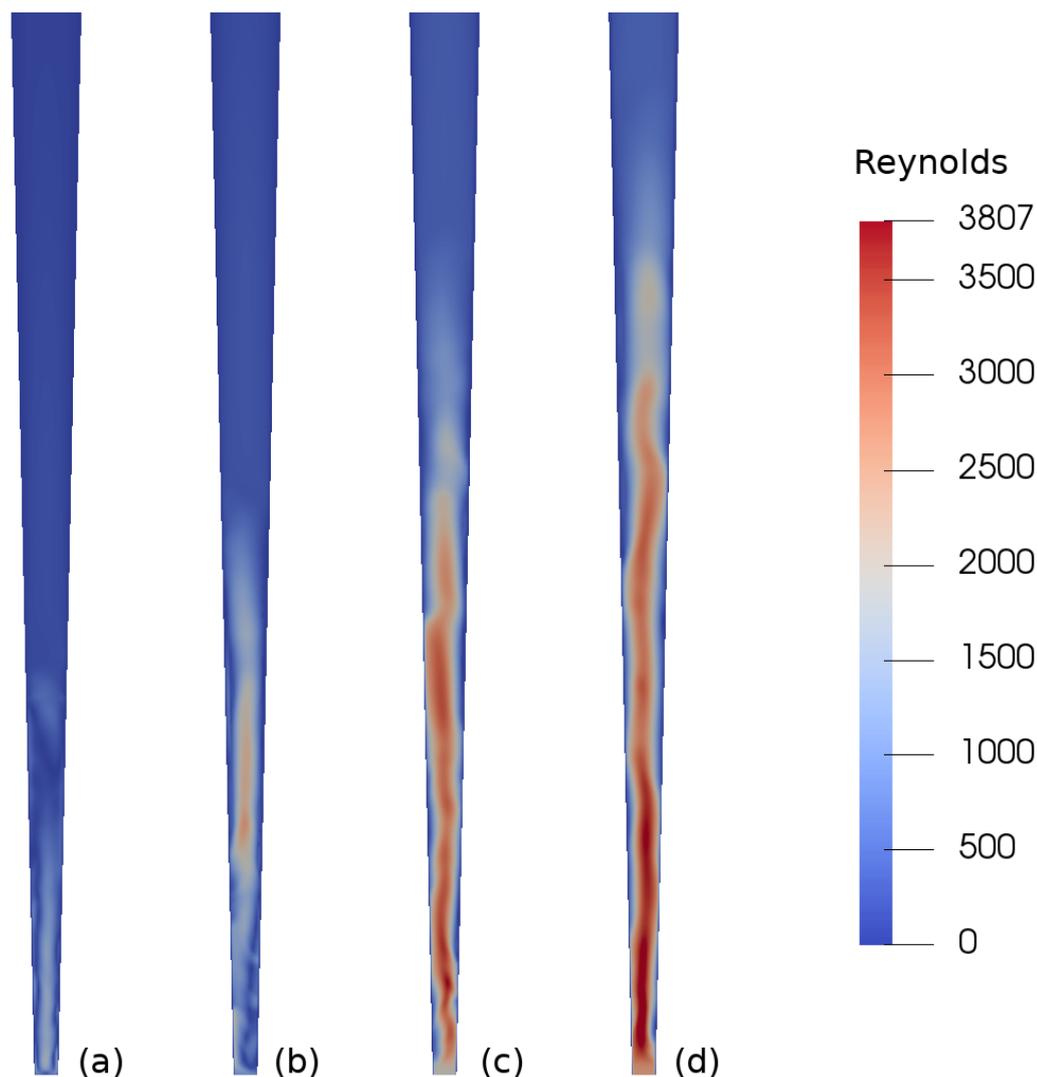


Figura 6.18: Campos de Reynolds, para as velocidade de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0579 m/s, e (d) 0,0782 m/s.

De forma análoga, o Reynolds da fase líquida também aumenta com o acréscimo de diferentes velocidades (Figura 6.18). Na menor velocidade de entrada, observa-se que está predominantemente abaixo de 1000, exceto por uma linha central na região de entrada. De um modo geral, como esperado nesse tipo de biorreator afunilado, a velocidade é maior na base e diminui ao longo da altura. Isto é refletido pelo número de Reynolds, que apresenta o mesmo comportamento. Nas maiores velocidades aplicadas, o leito é predominantemente turbulento, podendo atingir Reynolds de 3800 na base, e entre 2000 e 3000 no topo do leito. Desse modo, justifica-se o uso de um modelo para a turbulência, uma vez que encontra-se na literatura a consideração de regime laminar para a simulação de leitos fluidizados líquido-sólido.

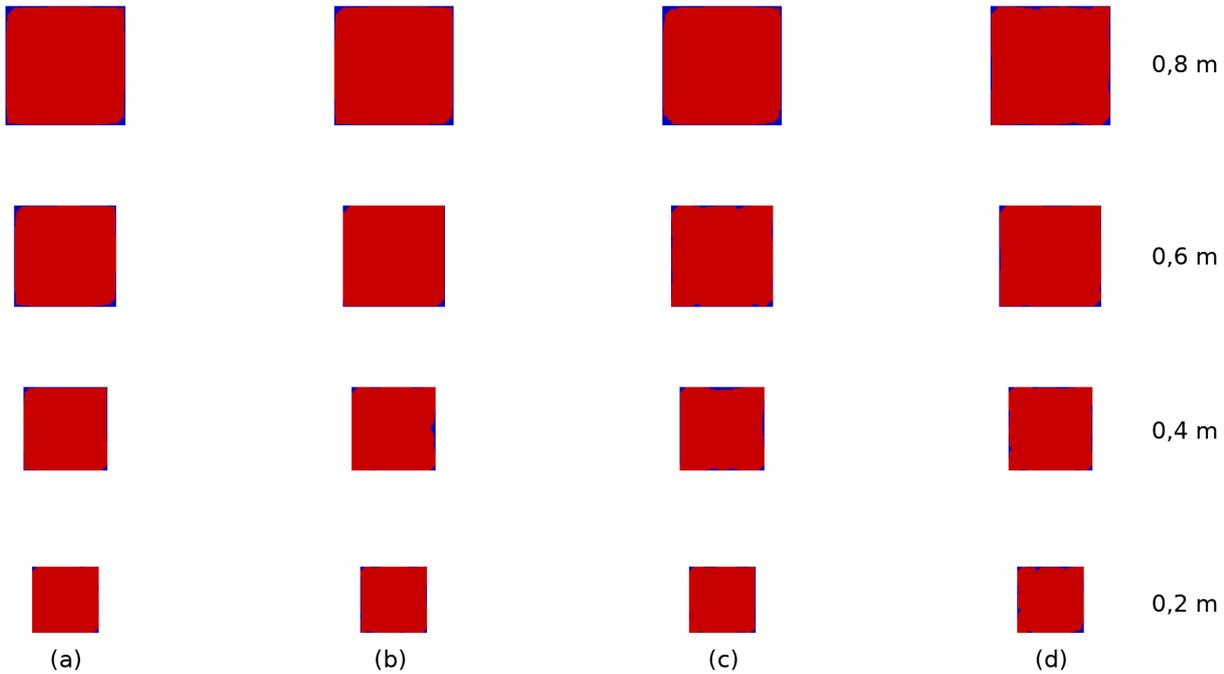


Figura 6.19: Campos de “zonas mortas”, destacadas na cor azul, para as velocidade de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0290 m/s, (c) 0,0579 m/s, e (d) 0,0782 m/s, em diferentes alturas.

O número de Reynolds também é indiretamente relacionado ao grau de mistura no biorreator. Assim, é interessante avaliar a presença de “zonas mortas” (Seção 4.5), as quais costumam ser relacionadas com bioprocessos e também foram reportadas como característica de reatores com seção quadrada em relação à circular (Bello *et al.*, 2017). A partir da Figura 6.19 observa-se que nenhum dos casos, mesmo aqueles com Reynolds reduzido, apresentou regiões significativas de zonas mortas (apresentadas em azul) no leito. Apenas nas paredes isto ocorre, mas neste caso a velocidade é nula devido a condição de não-deslizamento. Com base nas observações feitas para o campo de Reynolds (Figura 6.18), pode-se inferir que o movimento predominantemente turbulento no biorreator minimiza a presença de zonas mortas.

6.4.5 Influência da Hidrodinâmica sobre Colisões e Tensões Cisalhantes

Nesta seção é apresentada uma análise qualitativa de três parâmetros: a tensão de cisalhamento da fase contínua, que refere-se à tensão entre porções de fluido com diferentes velocidades, a temperatura granular (Θ), a qual é uma medida das flutuações de velocidade das partículas (que podem ser significativas, conforme avaliado na Seção 6.2.2), e a pressão de sólidos (p_p), a qual pode ser relacionada com colisões entre partículas. Para esta análise,

os Casos 1 e 4, e Casos 3 e 6 (que possuem condições experimentais similares) foram comparados entre si, analisando resultados já obtidos em simulações considerando condições de simetria. Os demais casos (2 e 5) não foram comparados, por apresentarem diferentes condições experimentais, como exemplo, diferença na concentração de substrato, que poderiam interferir nas características do biofilme. Como estes casos envolvem diferenças na disponibilidade/limitação de substrato, há grande influência na atividade microbiana, invalidando quaisquer observações conclusivas entre estes casos (2 e 5).

Considerando os Casos 1 e 4 (Figuras 6.20 e 6.21), pode-se observar que:

1. para menores velocidades a temperatura granular (Θ) é mais pronunciada na superfície do leito. Estas também estão presentes em todo o leito com menor intensidade. Já a tensão de cisalhamento é maior na entrada do reator e próximo à parede, e diminui ao longo da altura. Cabe ressaltar que os valores obtidos para a tensão de cisalhamento nas paredes chega a ser 7 vezes maior, quando utilizando o modelo SST $k-\omega$ sem funções de parede. No entanto, para comparações qualitativas, considerou-se que estes resultados obtidos com o modelo $k-\epsilon$ estão adequados;
2. com um aumento da velocidade, Θ não está mais pronunciado apenas na superfície do leito, estando bem distribuído ao longo do leito, exceto na região de entrada. A tensão de cisalhamento mantém o comportamento esperado, maior na entrada e paredes.
3. nas maiores velocidades, ambos os parâmetros são predominantes em todo o leito, com maior intensidade na base.

Comparando com o Caso 4, observa-se um comportamento análogo nas menores velocidades. No entanto, nas maiores velocidades (acima de 0,05 m/s), uma menor intensidade de ambos os parâmetros é observada para o Caso 4, o qual pode estar relacionado com o ângulo do reator, que foi aumentado para 5° enquanto o caso anterior era $2,5^\circ$. O efeito do ângulo do biorreator sobre Θ e τ pode ser melhor observado considerando os Casos 3 e 6 (Figuras 6.22 e 6.23, respectivamente), os quais apresentam velocidades maiores. Também nota-se o aumento da intensidade de ambos os parâmetros com o incremento da velocidade.

Conforme a literatura, as colisões e tensões são parâmetros relacionados ao controle da espessura do biofilme, de modo que este não cresça de forma demasiada. Por isso,

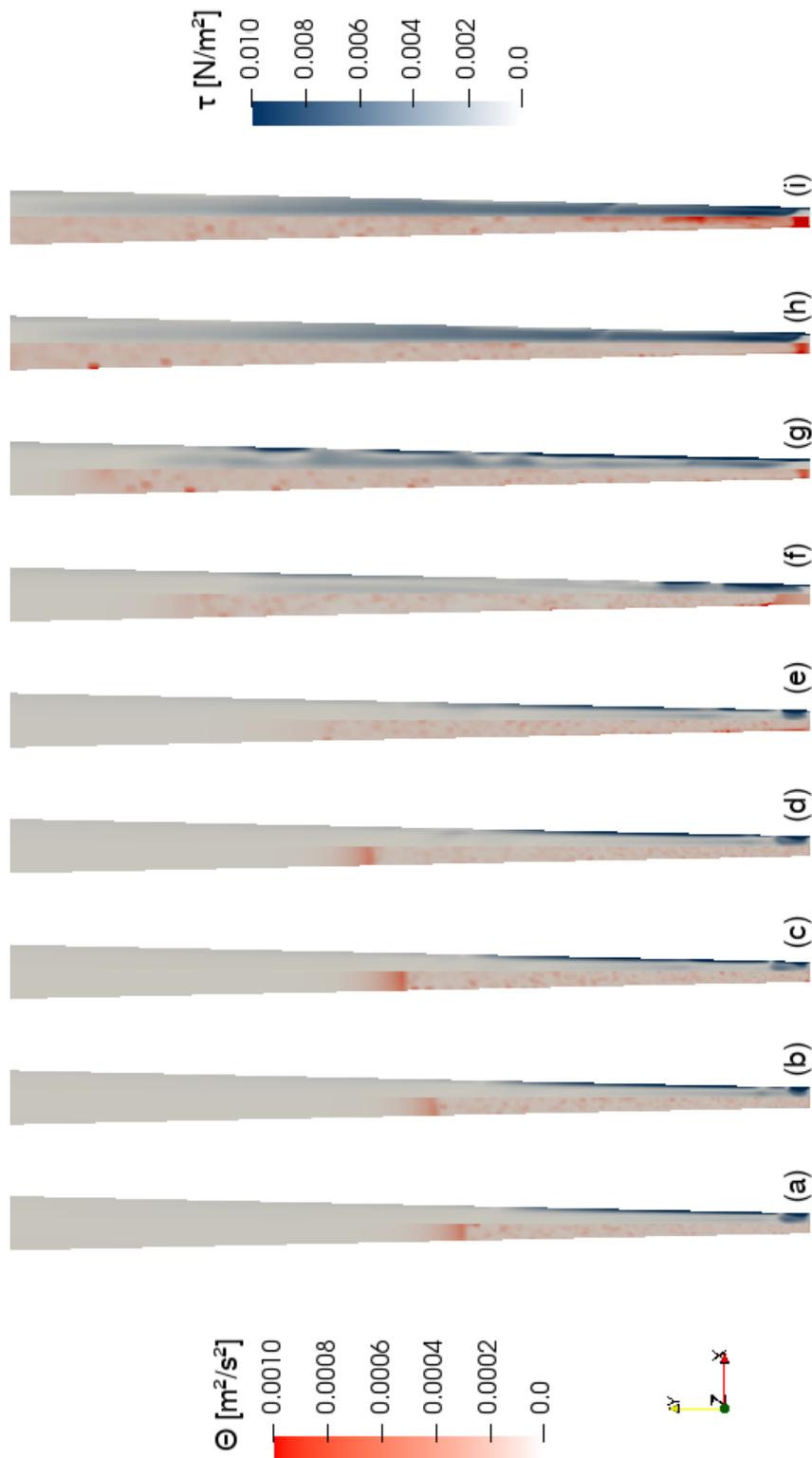


Figura 6.20: Campos de temperatura granular e máxima tensão cisalhante simuladas para as diversas velocidades do Caso 1, com velocidades de entrada de (a) 0,0146 m/s, (b) 0,0175 m/s, (c) 0,0202 m/s, (d) 0,0233 m/s, (e) 0,0290 m/s, (f) 0,0405 m/s, (g) 0,0579 m/s, (h) 0,0725 m/s, e (i) 0,0782 m/s.

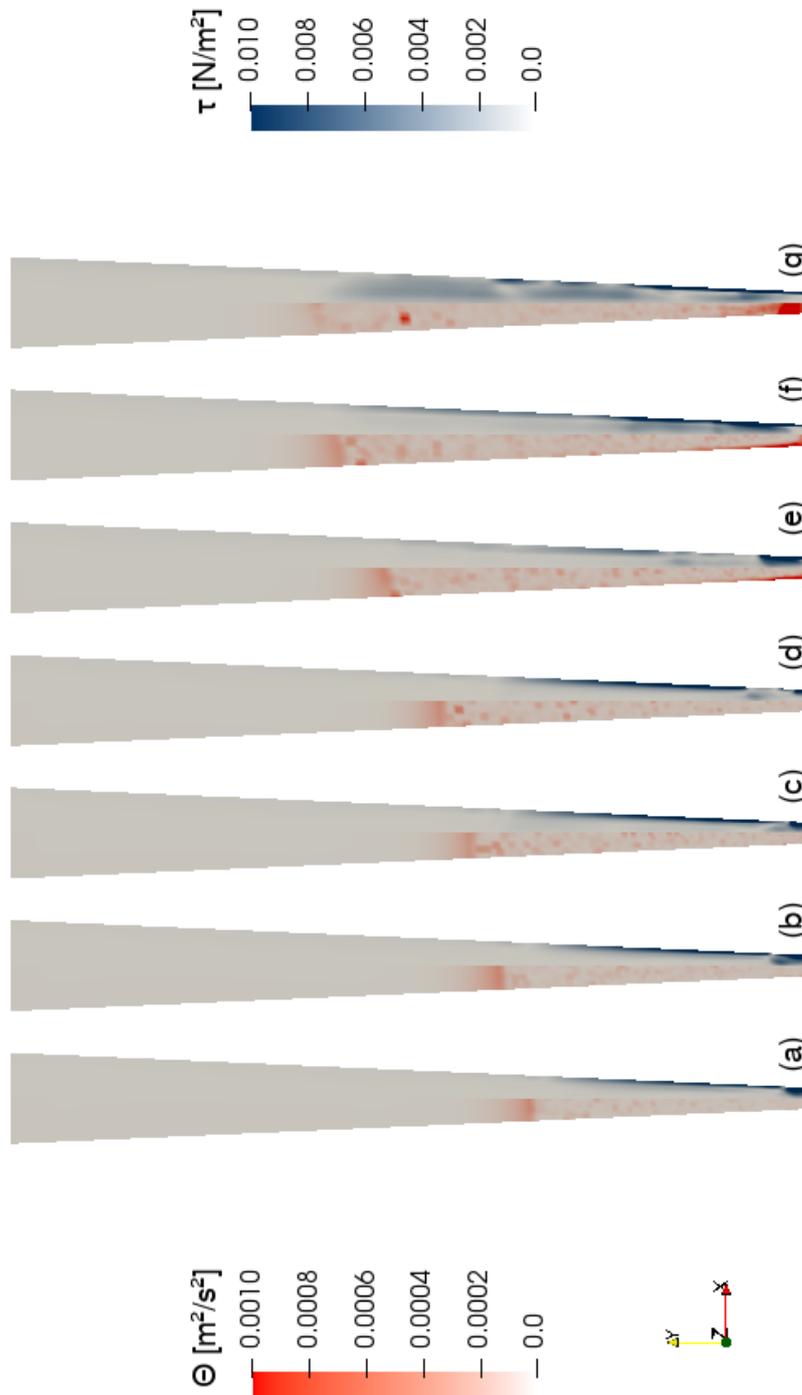


Figura 6.21: Campos de temperatura granular e máxima tensão cisalhante simuladas para as diversas velocidades do Caso 4, com velocidades de entrada de (a) 0,0145 m/s, (b) 0,0203 m/s, (c) 0,0262 m/s, (d) 0,0321 m/s, (e) 0,0437 m/s, (f) 0,0552 m/s, e (g) 0,0727 m/s.

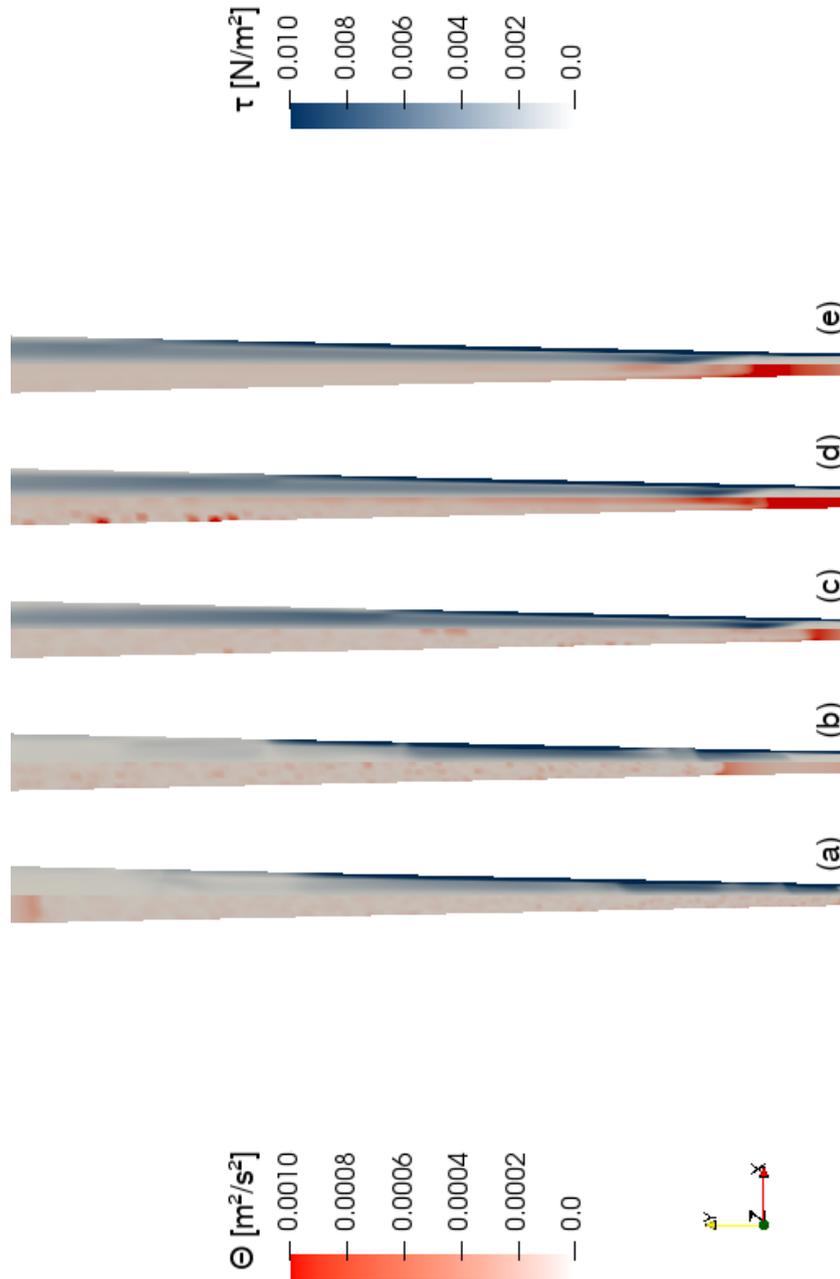


Figura 6.22: Campos de temperatura granular e máxima tensão cisalhante simuladas para as diversas velocidades do Caso 3, com velocidades de entrada de (a) 0,0344 m/s, (b) 0,0492 m/s, (c) 0,0845 m/s, (d) 0,1194 m/s, e (e) 0,1458 m/s.

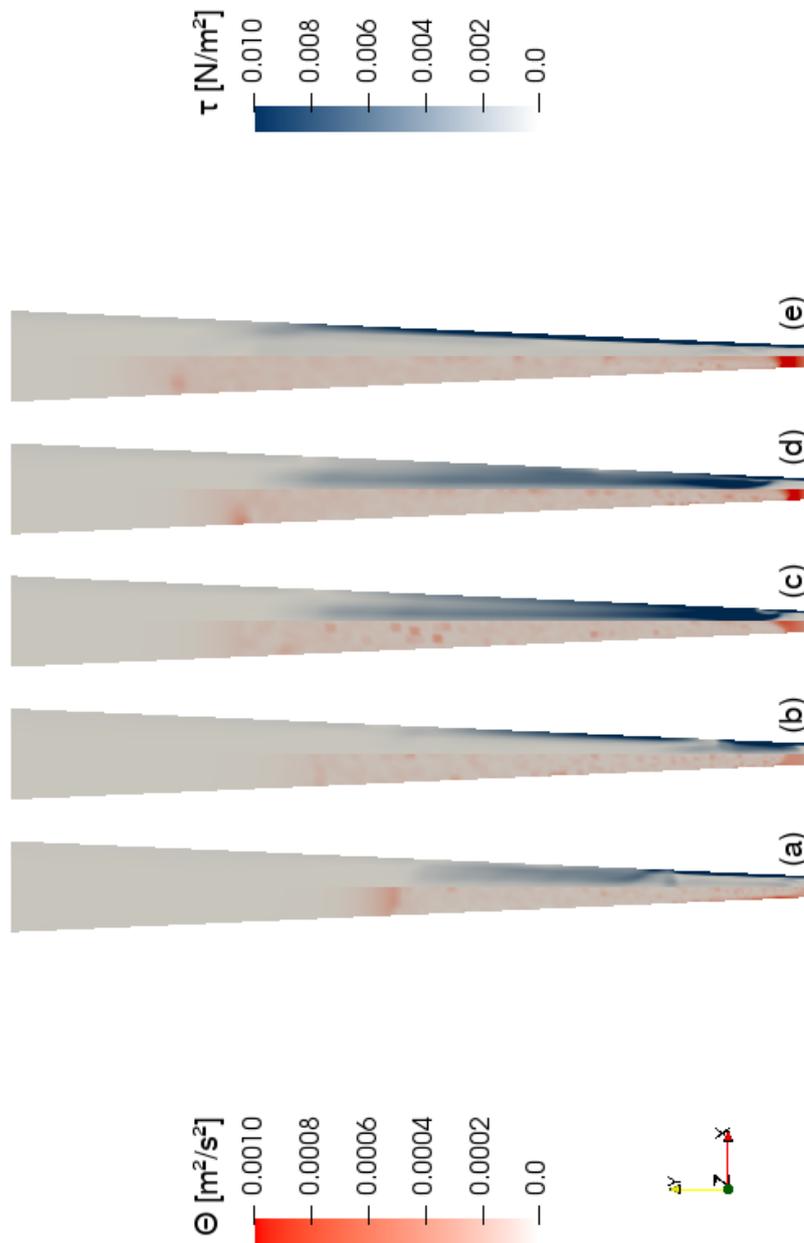


Figura 6.23: Campos de temperatura granular e máxima tensão cisalhante simuladas para as diversas velocidades do Caso 6, com velocidades de entrada de (a) 0,0351 m/s, (b) 0,0496 m/s, (c) 0,0755 m/s, (d) 0,0871 m/s, e (e) 0,1014 m/s.

os Casos 1, 4, 3 e 6 foram avaliados nas condições hidrodinâmicas mais próximas às utilizadas na formação do biofilme, considerando como parâmetros a temperatura granular (Θ), a pressão de sólidos (p_p) e a tensão de cisalhamento (τ). Considerando os Casos 1 e 4, especificamente para as velocidades de 0,0233 m/s (Figura 6.20d) e 0,0262 m/s (Figura 6.21c), respectivamente, nota-se uma similaridade entre os campos de Θ e τ preditos, o que explica a proximidade entre as espessuras de biofilme – 38 μm e 39 μm . Ainda, avaliando a pressão de sólidos (Figuras 6.24a e 6.24b) nota-se a mesma similaridade dos campos, corroborando o efeito das colisões na espessura do biofilme.

Considerando os Casos 3 e 6 (Figuras 6.22a e 6.23a), as intensidades de tensão de cisalhamento (τ) são mais elevadas para o Caso 3 em relação ao Caso 6. Os campos de temperatura granular (Θ), que indica as flutuações de velocidade, mostram-se similares, apresentando um valor máximo no topo do leito. Uma vez que valores mais expressivos para Θ foram observados em uma região com menor concentração de partículas (5% em volume), onde as colisões devem ser menos intensas, buscou-se um parâmetro mais adequado para a avaliação das colisões entre partículas. Para tal, a pressão de sólidos (p_p) foi adotada. Avaliando-se este parâmetro, percebe-se uma certa similaridade entre os campos (Figuras 6.24c e 6.24d), exceto pela base do biorreator, onde a influência deste parâmetro é observada no Caso 3, mas não ocorre no Caso 6. Com isto, tanto a pressão de sólidos quanto a tensão de cisalhamento são mais pronunciadas no Caso 3. Dessa forma, os valores de espessura reportados por Wu *et al.* (2009) (146 e 86 μm) estão em desacordo com os campos obtidos por CFD. Uma vez que, maior intensidade de colisões e tensões resultariam em biofilmes mais finos, e menores intensidades em biofilmes mais espessos. Talvez uma das razões para as diferenças observadas nas predições seja a possibilidade da espessura do biofilme ter variado ao longo dos ensaios hidrodinâmicos (experimentais), conforme também inferido por Wu *et al.* (2009). Essa hipótese é reforçada observando-se a Figura 6.11: para as condições experimentais destacadas em vermelho, nas quais o biofilme foi desenvolvido, observou-se em geral uma excelente concordância entre a altura do leito predito numericamente e medido experimentalmente. Em algumas situações, a variação dos ensaios hidrodinâmicos resultou em um aumento nos desvios entre estas alturas de leito, o que sugere a interferência das condições hidrodinâmicas sobre a manutenção do biofilme, que não foi medido experimentalmente e por isto não pôde ser incorporada às simulações. Desta forma, reforça-se a necessidade de conduzir estudos experimentais mais

controlados, visando corroboração numérica.

Ainda de acordo com a literatura, Wu *et al.* (2009) apontam que uma maior expansão do leito diminui as colisões entre as partículas devido à maior distância entre estas. Isto não foi observado nas simulações e pode estar relacionado ao fato que a expansão do leito é acompanhada do aumento da velocidade, com isto aumentando a transferência de quantidade de movimento em interações líquido-líquido (tensão cisalhante), bem como nas interações sólido-sólido (maior frequência de colisões entre partículas).

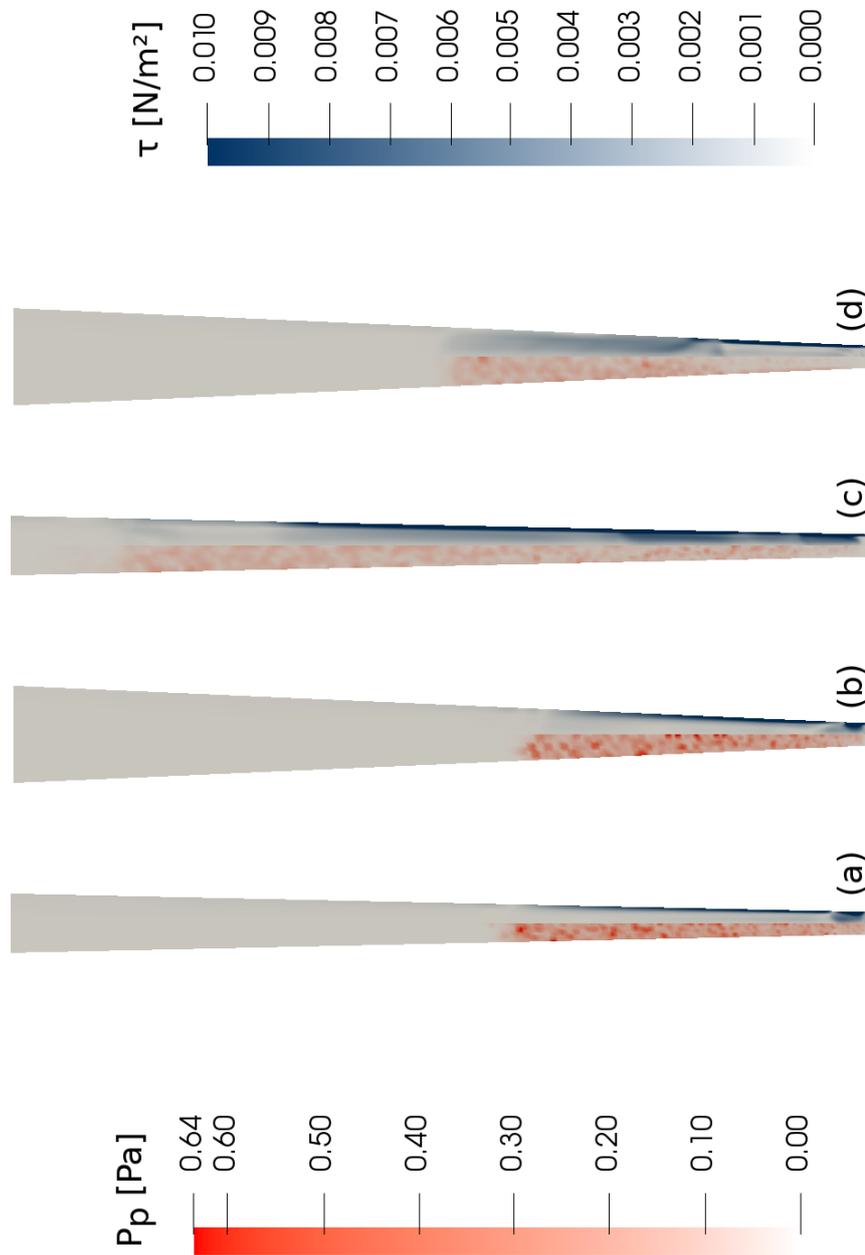


Figura 6.24: Campos de pressão de sólidos e máxima tensão cisalhante simuladas nas velocidades próximas àquelas da formação do biofilme, (a) Caso 1 (0,0233 m/s), (b) Caso 4 (0,0262 m/s), (c) Caso 3 (0,0344 m/s), e (d) Caso 6 (0,0351 m/s).

Conclusões

Neste estudo, dois biorreatores anaeróbio afunilado de leito fluidizado com seção quadrada foram simulados sob diferentes condições, de modo a avaliar o comportamento hidrodinâmico. Todas as simulações foram conduzidas utilizando uma malha com baixo grau de incerteza numérica, de forma a minimizar erros devido ao refinamento de malha.

A redistribuição das biopartículas ao longo da direção radial causada pela força de sustentação indica que esta força é importante na modelagem deste sistema. Isto tornou o leito mais homogêneo e, como uma consequência, o leito fluidizado simulado alcançou alturas mais elevadas. Verificou-se também que as colisões entre biopartículas, modelada segundo o modelo KTGF, afeta o escoamento, alterando sensivelmente a altura predita para o leito fluidizado. Apesar disso, diferentes coeficientes de restituição apresentaram pouca influência neste parâmetro.

Dentre as correlações disponíveis para o arraste, nenhuma das consideradas (Ergun, Gidaspow, Wen-Yu e Gibilaro) foi capaz de prever as alturas do leito fluidizado afunilado com biopartículas, sob as condições avaliadas. Esta é uma das principais observações do presente estudo. Simulações numéricas forneceram melhor concordância para as alturas do leito fluidizado somente com um aumento na força de arraste. Dentre as alternativas avaliadas, o uso do modelo de Gidaspow ajustado foi um fator decisivo para a melhoria dos resultados preditos para uma ampla faixa de velocidades, demonstrando uma dependência extra com o número de Reynolds da partícula.

As curvas de fluidização obtidas com o modelo validado indicam que o estudo foi conduzido no regime de leito parcialmente fluidizado, onde regimes fixos e fluidizados apresentam-se de forma concomitante, sendo característico em seção/geometria afunilada.

Esta geometria também acarreta em outra particularidade corroborada numericamente,

na qual as biopartículas podem atingir velocidades superiores à velocidade terminal na região inferior do reator. Apesar de haverem biopartículas com velocidade acima da terminal, o leito ainda mantém-se definido, principalmente nas menores velocidades.

Com relação aos campos de Reynolds, observou-se uma grande variação do seu valor ao longo da altura do reator, bem como entre os diferentes casos simulados. No entanto, em nenhuma das condições foi observada presença significativa de “zonas mortas”.

As colisões entre partículas e tensão de cisalhamento, as quais são parâmetros relacionados à manutenção da espessura do biofilme, foram avaliadas qualitativamente. Estas indicam que ambos os fenômenos ocorrem de forma concomitante, com maior intensidade com o aumento da velocidade superficial de entrada. Desta forma, uma maior expansão do leito não está diretamente relacionada com menor incidência de colisões entre partículas, como reportado pela literatura. No entanto, a intensidade de ambos os parâmetros podem ser atenuados com o aumento do ângulo do reator, se este for de interesse, uma vez que, o espessamento do biofilme pode ser mantido pelas tensões/colisões.

Por fim, a despeito das dificuldades inerentes à aplicação da técnica de CFD, esta demonstrou capacidade de fornecer dados relevantes para um melhor entendimento do comportamento de sistemas complexos. Diversas simulações foram necessárias para estabelecer um modelo adequado, com o qual foi possível obter dados completos da hidrodinâmica do biorreator. O comportamento deste sistema complexo pode então ser avaliado em diferentes condições operacionais, o que é útil na definição de condições adequadas ao processo.

Referências Bibliográficas

- Andalib, M., zhu, J., Nakhla, G., 2010. Terminal Settling Velocity and Drag Coefficient of Biofilm-Coated Particles at High Reynolds Numbers *AICHE Journal*, v. 56. <https://doi.org/10.1002/aic.12184>
- Andrews, G.F., Tien, C., 1979. The expansion of a fluidized bed containing biomass. *AICHE Journal*, v.25. <https://doi.org/10.1002/aic.690250421>
- Atkinson, B., Black, G.M., Lewis, P.J.S., Pinches, A., 1979. Biological particles of given size, shape, and density for use in biological reactors. *Biotechnology and Bioengineering* v.21. <https://doi.org/10.1002/bit.260210206>
- Arastoopour, H., 2001. Numerical simulation and experimental analysis of gas-solid flow systems: 1999 Fluor-Daniel Plenary lecture. *Powder Technology*, v119. [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(00\)00417-4](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(00)00417-4)
- Bannari, R., Bannari, A., Selma, B., Proulx, P., 2011. Mass transfer and shear in an airlift bioreactor: Using a mathematical model to improve reactor design and performance. *Chemical Engineering Science* v66. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.01.038>
- Bello, M.M., Abdul Raman, A.A., Purushothaman, M., 2017. Applications of fluidized bed reactor in wastewater treatment – A review of the major design and operational parameters. *Journal of Cleaner Production*. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2016.09.148>
- Beetstra, R., van der Hoef, M.A., Kuipers, J.A.M., 2007. Drag force of intermediate Reynolds number flow past mono- and bidisperse arrays of spheres. *AICHE Journal*, v53. <https://doi.org/10.1002/aic.11065>

- Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N. Transport Phenomena. New York: Wiley, 1962.
- Bridgeman, J., Jefferson, B., Parsons, S., 2008. Assessing floc strength using CFD to improve organics removal. *Chemical Engineering Research and Design*, v86. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2008.02.007>
- Carlos, C.R., Richardson, J.F., 1968. Solids movement in liquid fluidised beds – I. Particle velocity distribution. *Chemical Engineering Science*, v23. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(68\)80016-8](https://doi.org/10.1016/0009-2509(68)80016-8)
- Celik, I.B., Ghia, U., Roache, P.J., Freitas, C.J., Coleman, H., Raad, P.E., 2008. Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications. *Journal of Fluids Engineering*, v. 130 / 078001-3
- Colebrook, C.F., 1939 Turbulent flow in pipes, with particular reference to the transition between the smooth and rough pipe laws. *Journal of the Institute of Civil Engineers London*, v11.
- Coughtrie, A.R., Borman, D.J., Sleigh, P.A., 2013. Effects of turbulence modelling on prediction of flow characteristics in a bench-scale anaerobic gas-lift digester. *Bioresource technology*, v138. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2013.03.162>
- Courant, R., Friedrichs, K., Lewy, H., 1967. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM journal*, v11.
- Cheng, Y., Zhang, W., Guan, G., Fushimi, C., Tsutsumi, A., Wang, C.H., 2014. Numerical studies of solid–solid mixing behaviors in a downer reactor for coal pyrolysis. *Powder Technology*, v253. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2013.11.042>
- Cornelissen, J.T., Taghipour, F., Escudíé, R., Ellis, N., Grace, J.R., 2007. CFD modelling of a liquid–solid fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, v62. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.07.014>
- Cresson, R., 2006. Etude du démarrage de procédés intensifs de méthanisation: Impact des conditions hydrodynamiques et de la stratégie de montée en charge sur la formation et l'activité du biofilm. Tese de Doutorado, Université de Montpellier, França.

- Crowe, C.T., 2000. On models for turbulence modulation in fluid-particle flows. *International Journal of Multiphase Flow*, v26. [https://doi.org/10.1016/S0301-9322\(99\)00050-6](https://doi.org/10.1016/S0301-9322(99)00050-6)
- Dapelo, D., Alberini, F., Bridgeman, J., 2015. Euler-Lagrange CFD modeling of unconfined gas mixing in anaerobic digestion. *Water Research*, v85. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2015.08.042>
- Di Felice, R., 1994. The voidage functions for fluid-particle interaction system, *International Journal of Multiphase Flow* v20.
- Du, W., Bao, X., Xu, J., Weu, W., 2006. Computational fluid dynamics (CFD) modeling of spouted bed: Influence of frictional stress, maximum packing limit and coefficient of restitution of particles. *Chemical Engineering Science*, v61. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.02.028>
- Enwald, H., Peirano, E., Almstedt, A.E., 1996. Eulerian Two-Phase Flow Theory Applied to Fluidization. *International Journal of Multiphase Flow*, v22. [https://doi.org/10.1016/S0301-9322\(96\)90004-X](https://doi.org/10.1016/S0301-9322(96)90004-X)
- Ergun, S., Orning, A., 1949. Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds. *Industrial & Engineering Chemistry*, v41. <http://doi.org/10.1021/ie50474a011>
- Ergun, S., 1952. Fluid flow through packed columns. *Chemical Engineering Progress*, v48.
- Eshtiaghi, N., Markis, F., Yap, S.D., Baudez, J.C., Slatter, P., 2013. Rheological characterisation of municipal sludge: A review. *Water Research*, v47. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2013.07.001>
- Fan, L.S., 1989. *Gas-Liquid-Solid Fluidization Engineering*, Butterworth-Heinemann, Boston.
- Fanning, J.T., 1877. *A practical treatise on the hydraulic and water supply engineering*, Van Nostrand, New York.
- Finn, J.R., Galvin, J.E., 2017. Calibration of Drag Models for Mesoscale Simulation of Gas-Liquid Flow through Packed Beds. *Chemical Engineering Science*, v172. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.07.022>

- Fullmer, W.D., Liu, G., Lin, X., Hrenya, C.M., 2017. Clustering instabilities in sedimenting fluid–solid systems: critical assessment of kinetic-theory-based predictions using direct numerical simulation data. *Journal of Fluid Mechanics*, v823. <https://doi.org/10.1017/jfm.2017.295>
- García-Calderón, D., Buffière, P., Moletta, R., Elmaleh, S., 1998. Influence of biomass accumulation on bed expansion characteristics of a down-flow anaerobic fluidized-bed reactor. *Biotechnology and Bioengineering*, v57. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0290\(19980120\)57:2<136::AID-BIT2>3.0.CO;2-O](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0290(19980120)57:2<136::AID-BIT2>3.0.CO;2-O)
- Gevrin, F., Masbernat, O., Simonin, O., 2008. Granular pressure and particle velocity fluctuations prediction in liquid fluidized beds *Chemical Engineering Science*, v63. <http://doi.org/10.1016/j.ces.2008.01.031>
- Ghatage, S.V., Peng, Z., Sathe, M.J., Doroodchi, E., Padhiyar, N., Moghtaderi, B., Joshi, J.B., Evans, G.M., 2014. Stability analysis in solid-liquid fluidized beds: Experimental and computational. *Chemical Engineering Journal*, v256. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2014.06.026>
- Gibilaro, L.G., Di Felice, R., Waldram, S.P., Foscolo, P.U., 1985. Generalized friction factor and drag coefficient for fluid-particle interactions. *Chemical Engineering Science*, v40. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(85\)80116-0](https://doi.org/10.1016/0009-2509(85)80116-0)
- Gidaspow, D., Seo, Y.C., Ettehadieh, B., 1983. Hydrodynamics of fluidization: Experimental and theoretical bubble sizes in a two-dimensional bed with a jet. *Chemical Engineering Communications*, v22. <https://doi.org/10.1080/00986448308940060>
- Gidaspow, D., 1994. *Multiphase flow and fluidization: Continuum and kinetic theory description*. Academic Press, San Diego.
- Grady Jr, C.P.L., Daigger, G.T., Love, N.G., Filipe, C.D.M., 2011. *Biological wastewater treatment*, third ed. CRC Press, Boca Raton.
- Grima, A.P., Wypych, P.W., 2011. Development and validation of calibration methods for discrete element modelling. *Granular Matter*, v13. <https://doi.org/10.1007/s10035-010-0197-4>

- Haaland, S.E., 1983. Simple and explicit formulas for the friction factor in turbulent pipe flow. *Journal of Fluids Engineering*, v105(1).
- Hamidipour, M., Chen, J., Larachi, F., 2012. CFD study on hydrodynamics in three-phase fluidized beds-application of turbulence models and experimental validation. *Chemical Engineering Science*, v78. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2012.05.016>
- Hermanowicz, S.W., Ganczarczyk, J.J., 1983. Some fluidization characteristics of biological beds. *Biotechnology and Bioengineering*, v25. <https://doi.org/10.1002/bit.260250512>
- Hermanowicz, S.W., Ganczarczyk, J.J., 1985. Mathematical modeling of biological packed and fluidized bed reactors. In *Mathematical models in biological waste water treatment*, Jorgensen, S.E. e Gromiec, M.J., eds. Elsevier, Amsterdam, p. 473-524.
- Hill, M.J., Koch, D.L., Ladd, A.J., 2001. Moderate-Reynolds-number flows in ordered and random arrays of spheres.- *Journal of Fluid Mechanics*, v448. <https://doi.org/10.1017/S0022112001005948>
- Huang, X., 2011. CFD Modeling of liquid–solid fluidization: Effect of drag correlation and added mass force. *Particuology*, v9. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2011.03.005>
- Huang, J.S., Wu, C.S., 1996. Specific Energy Dissipation Rate for Fluidized-Bed Bioreactors. *Biotechnology and Bioengineering*, v50.
- Huilin, L., Yunhua, Z., Ding, J., Gidaspow, D., Wei, L., 2007. Investigation of mixing/segregation of mixture particles in gas–solid fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, v62. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.08.031>
- Huilin, L., Gidaspow, D., Bouillard, J., Wentie, L., 2003. Hydrodynamic simulation of gas–solid flow in a riser using kinetic theory of granular flow. *Chemical Engineering Journal*, v95(1-3). [https://doi.org/10.1016/S1385-8947\(03\)00062-7](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(03)00062-7)
- Joshi, J.B., 1983. Solid–liquid fluidized beds: some design aspects. *Chemical Engineering Research and Design*, v61.
- Kaneda Y., 1986. The drag on a sparse random array of fixed spheres in flow at small but finite Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics* v.167.

- Khan, M.J.H., Hussain, M.A., Mansourpour, Z., Mostoufi, N., Ghasem, N.M., Abdullah, E.C., 2014. CFD simulation of fluidized bed reactors for polyolefin production – A review. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, v20. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2014.01.044>
- Kim, S.D., Kang, Y., 1997. Heat and mass transfer in three-phase fluidized-bed reactors - an overview. *Chemical Engineering Science*, v52. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(97\)00269-8](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(97)00269-8)
- Koerich, D.M., Rosa, L.M., 2016. Numerical evaluation of the low reynolds turbulent flow behaviour in a bioreactor. *International Journal of Simulation and Process Modelling*, v11. <https://doi.org/10.1504/IJSPM.2016.075081>
- Koerich, D.M., Rosa, L.M., 2017. 122 Optimization of bioreactor operating conditions using computational fluid dynamics techniques. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v95. <https://doi.org/10.1002/cjce.22635>
- Kunii, D., Levenspiel, O., 1991. *Fluidization Engineering*, Second ed. Butterworth-Heinemann, Boston.
- Lauder, B.E., Spalding, D.B., 1974. *The numerical computation of turbulent flows*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v3.
- Legendre, D., Magnaudet, J., 1997. A note on the lift force on a bubble or a drop in a low-Reynolds-number shear flow. *Physics of Fluids*, v9. <https://doi.org/10.1063/1.869466>
- Liu, G., Yu, F., Lu, H., Wang, S., Liao, P., Hao, Z., 2016. CFD-DEM simulation of liquid-solid fluidized bed with dynamic restitution coefficient. *Powder Technology*, v304. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.08.058>
- Lopes, R.J.G., Quinta-Ferreira, R.M., 2007. Trickle-bed CFD studies in the catalytic wet oxidation of phenolic acids. *Chemical Engineering Science*, v62. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.08.085>
- Lopez-Jimenez, P.A., Escudero-Gonzalez, J., Montoya Martinez, T., Fajardo, V., Nana, M., Gualtieri, C., 2015. Application of CFD methods to an anaerobic digester: The

- case of ontinyent WWTP, Valencia, Spain. *Journal of Water Process Engineering*, v7. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2015.05.006>
- Lun, C.K.K., Savage, S.B., Jeffrey, D.J., Chepuruiy, N., 1884. Kinetic theories for granular flow: Inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flow-field. *Journal of Fluid Mechanics*, v140. <https://doi.org/10.1017/S0022112084000586>
- Luo, H.P., Al-Dahhan, M.H., 2011. Verification and validation of CFD simulations for local flow dynamics in a draft tube airlift bioreactor. *Chemical Engineering Science*, v66. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.11.038>
- Maurina, G.Z., Rosa, L.M., Beal, L.L., Baldasso, C., Gimenez, J.R., Torres, A.P., Sousa, M.P., 2014. Effect of Internal Recirculation Velocity in an Anaerobic Sequencing Batch Reactor (ASBR). *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v31. <https://doi.org/10.1590/0104-6632.20140314s00002895>
- Maurina, G.Z., Rosa, L.M., Beal, L.L., Della Giustina, S.V., 2014. Simulacion de un reactor anaerobio discontinuo utilizado para la produccion de hidrogeno mediante dinamica de fluidos computacional. *Informacion Tecnologica*, v25. <https://doi.org/10.4067/S0718-07642014000400004>
- Maurina, G.Z., Rosa, L.M., Beal, L.L., Torres, A.P., 2014. Numerical study of different inlet configurations on the fluid dynamics of an anaerobic sequencing batch reactor. *Chemical Engineering Transactions*, v38. <https://doi.org/10.3303/CET1438022>
- Maric, T., Hopken, J., Mooney, K., 2014. The OpenFOAM technology primer. Sourceflux, Duisburg.
- Mendoza, A.M., Montoya Martínez, T., Montañana, V.F., Amparo, P., Jiménez, L., 2011. Modeling flow inside an anaerobic digester by CFD techniques. *International Journal of Energy and Environment*, v2. ISSN 2076-2909.
- Menter, F.R., 1994. Two equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications, *AIAA Journal*, v32.
- Mulcahy, L.T., Shieh, W.K., 1987. Fluidization and reactor biomass characteristics of the denitrification fluidized bed reactor. *Water Research*, v21. [https://doi.org/10.1016/0043-1354\(87\)90193-X](https://doi.org/10.1016/0043-1354(87)90193-X)

- Nicolella, C., van Loosdrecht, M.C.M., Di Felice, R., Rovatti, M., 1999. Terminal Settling velocity and bed-expansion characteristics of biofilm-coated particles. *Biotechnology and Bioengineering*, v62. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0290\(19990105\)62:1<62::AID-BIT8>3.0.CO;2-U](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0290(19990105)62:1<62::AID-BIT8>3.0.CO;2-U)
- Nicolella, C., van Loosdrecht, M.C.M., Heijnen, J.J., 2000. Wastewater treatment with particulate biofilm reactors. *Journal of Biotechnology*, v90. [https://doi.org/10.1016/S0168-1656\(00\)00229-7](https://doi.org/10.1016/S0168-1656(00)00229-7)
- Ngian, K., Martin, W.R.B., 1980. Bed expansion characteristics of liquid fluidized bed particles with attached microbial growth. *Biotechnology Bioengineering*. v22. <https://doi.org/10.1002/bit.260220906>
- Nurtono, T., Nirwana, W.O.C., Anwar, N., Nia, S.M., Widjaja, A., Winardi, S., 2012. A computational fluid dynamics (CFD) study into a hydrodynamic factor that affects a bio-hydrogen production process in a stirred tank reactor. *Procedia Engineering*, v50. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2012.10.028>
- Panneerselvam, R., Savithri, S., Surender, G.D., 2007. CFD based investigations on hydrodynamics and energy dissipation due to solid motion in liquid fluidised bed. *Chemical Engineering Journal*, v132. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2007.01.042>
- Panneerselvam, R., Savithri, S., Surender, G.D., 2008. CFD modeling of gas-liquid-solid mechanically agitated contactor. *Chemical Engineering Research and Design*, v86. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2008.08.008>
- Pang, M., Wei, J., Yu, B., 2010. Numerical study of bubbly upflows in a vertical channel using the Euler–Lagrange two-way model. *Chemical Engineering Science*, v65. <https://doi.org/10.1016/j.ces.20.10.09.008>
- Pang, M., Wei, J., 2011. Analysis of drag and lift coefficient expressions of bubbly flow system for low to medium Reynolds number. *Nuclear Engineering and Design*, v241. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2011.03.046>
- Parthiban, R., 2012. Anaerobic Wastewater Treatment in Tapered Fluidized Bed Reactor, in: Rao, D.G., Senthilkumar, R., Anthony Byrne, J., Feroznome S. (Ed.), *Wastewater Treatment: Advanced Processes and Technologies*. CRC Press, Boca Raton, pp. 211-238.

- Patankar, S.V., 1980. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. McGraw-Hill, New York.
- Peng, Y., Fan, L.T., 1997. Hydrodynamic characteristics of fluidization in liquid-solid tapered beds. *Chemical Engineering Science*, v52.
- Peng, Z., Ghatage, S.V., Doroodchi, E., Joshi, J.B., Evans, G.M., Moghtaderi, B., 2014. Forces acting on a single introduced particle in a solid-liquid fluidised bed *Chemical Engineering Science*, v116. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2014.04.040>
- Pourtousi, M., Sahu, J.N., Ganesan, P., 2014. Effect of interfacial forces and turbulence models on predicting flow pattern inside the bubble column. *Chemical Engineering and Processing*, v75. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2013.11.001>
- Qi, W.K., Guo, Y.L., Xue, M., Li, Y.Y., 2013. Hydraulic analysis of an upflow sand filter: Tracer experiments, mathematical model and CFD computation. *Chemical Engineering Science*, v104. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.09.035>
- Rao, A., Curtis, J.S., Hancock, B.C., Wassgreen, C., 2012. Numerical Simulation of Dilute Turbulent Gas-Particle Flow with Turbulence Modulation. *AIChE Journal*, v58. <https://doi.org/10.1002/aic.12673>
- Reddy, R.K., Joshi, J.B., 2008. CFD modeling of pressure drop and drag coefficient in fixed and expanded beds. *Chemical Engineering Research and Design* v86. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2007.12.007>
- Reddy, R.K., Joshi, J.B., 2009. CFD modeling of solid-liquid fluidized beds of mono and binary particle mixtures. *Chemical Engineering Science* v64. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2009.05.004>
- Richardson, J.F., Zaki, W.N., 1954. Sedimentation and fluidization: Part 1. *Trans. Instn. Chem. Engrs.* v32.
- Ren, T.T., Mu, Y., Liu, L., Li, X.Y., Yu, H.Q., 2009. Quantification of the shear stresses in a microbial granular sludge reactor. *Water Research*, v43. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2009.07.019>
- Ren, T.T., Mu, Y., Ni, B.J., Yu, H.Q., 2009. Hydrodynamics of Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactors. *AIChE Journal* v55. <https://doi.org/10.1002/aic.11667>

- Ro, K.S., Neethling, J.B., 1991. Biofilm Density for Biological Fluidized Beds. *Research Journal of the Water Pollution Control Federation*, v63. <http://www.jstor.org/stable/25044060>
- Roache, P.J., 1997. Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics. *Annual Review in Fluid Mechanics*, v29. <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.29.1.123>
- Roache, P.J., 2009. *Fundamentals of verification and validation*. Hermosa Publishers, New Mexico.
- Rosa, L.M. *Simulação de Reações Químicas e Consumo de Calor em Reatores Riser*. Dissertação de Mestrado, Universidade de Campinas, Campinas, 2002.
- Rosa, L.M., Koerich, D.M., Della Giustina, S.V., 2017. The use of CFD in design and optimization of wastewater treatment units: A review, in: Collins, M. (Ed.), *Organic waste: Management strategies, environmental impact and emerging technologies*. Nova Science Publishers, New York, pp. 71-140.
- 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*, v32. <https://doi.org/10.1590/0104-6632.20150322s00003300>
- Rusche, H. *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*. Tese de Doutorado, Imperial College, University of London, 2002.
- Sajjadi, B., Aziz, A., Raman, A., Parthasarathy, R., 2016. Fluid dynamic analysis of non-newtonian flow behavior of municipal sludge simulant in anaerobic digesters using submerged, recirculating jets. *Chemical Engineering Journal*, v298. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2016.03.069>
- Saravanan, V., Sreekrishnan, T.R., 2005. Hydrodynamic study of biogranules obtained from an anaerobic hybrid reactor. *Biotechnology and Bioengineering*, v91. <https://doi.org/10.1002/bit.20567>
- Scott, C.D., Hancher, C.W., 1976. Use of a tapered fluidized bed as a continuous bioreactor. *Biotechnology and Bioengineering*, v18. <https://doi.org/10.1002/bit.260181006>

- Shi, Y.F., Yu, Y.S., Fan, L.T., 1984. Incipient fluidization condition for a tapered fluidized bed. *Industrial Engineering Chemistry Fundamentals*. v23. <https://doi.org/10.1021/i100016a018>
- Simonin O., 1991. Prediction of the dispersed phase turbulence in particle-laden jets. *Gas-Solid Flows ASME FED*. v121.
- Sinclair, G.B., Beisheim, J.R., Sezer, S., 2006. Practical convergence-divergence checks for stresses from FEA. *International ANSYS users conference and exposition, Pittsburgh*.
- Syamlal, M., O'Brien, T.J., 1988. Simulation of granular layer inversion in liquid fluidised beds, *International Journal of Multiphase Flow* v14.
- Trad, Z., Fontaine, J.P., Larroche, C., Vial, C., 2016. Multiscale mixing analysis and modeling of biohydrogen production by dark fermentation. *Renewable Energy*, v98. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2016.03.094>
- Turton, R., Levenspiel, O., 1986. A short note on the drag correlation for spheres. *Powder Technology*, v47. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(86\)80012-2](https://doi.org/10.1016/0032-5910(86)80012-2)
- van Baten, J. M., Ellenberger, J., Krishna, R., 2003. Hydrodynamics of internal air-lift reactors: Experiments versus CFD simulations. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v42. [https://doi.org/10.1016/S0255-2701\(02\)00076-4](https://doi.org/10.1016/S0255-2701(02)00076-4)
- Vesvikar, M.S., Al-Dahhan. M., 2005. Flow pattern visualization in a mimetic anaerobic digester using CFD. *Biotechnology and Bioengineering*, v89. <https://doi.org/10.1002/bit.20388>
- Visuri, O., Wierink, G.A., Alopaeus, V., 2012. Investigation of Drag Models in CFD Modeling and Comparison to Experiments of Liquid–solid Fluidized Systems. *International Journal of Mineral Processing*, v104–105. <https://doi.org/10.1016/j.minpro.2011.12.006>
- Vivacqua, V., Vashisth, S., Prams, A., Hébrard, G., Epstein, N., Grace, J.R., 2009. Experimental and CPFD study of axial and radial liquid mixing in water-fluidized beds of two solids exhibiting layer inversion *Chemical Engineering Science* v95. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2013.03.011>

- Wang, J., van der Hoef, M.A., Kuipers, J.A.M., 2009. Why the two-fluid model fails to predict the bed expansion characteristics of Geldart A particles in gas-fluidized beds: A tentative answer. *Chemical Engineering Science*, v64. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.09.028>
- Wang, X., Ding, J., Guo, W.Q., Ren, N.Q., 2010. Scale-up and optimization of biohydrogen production reactor from laboratory-scale to industrial-scale on the basis of computational fluid dynamics simulation. *International Journal of Hydrogen Energy*, v35. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.07.060>
- Wang, Q., Lu, J., Yin, W., Yang, H., Wei, L., 2013. Numerical study of gas–solid flow in a coal beneficiation fluidized bed using kinetic theory of granular flow. *Fuel Processing Technology*, v111. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2013.01.009>
- Wen, C.Y., Galli, A.F., 1971. Dilute phase systems, in: Davidson, J.F., Harrison, D. (Eds.), *Fluidization*. Academic Press, London, pp. 677-710.
- Wen, C.Y., Yu, Y.H., 1966. *Mechanics of fluidization*. The Chemical Engineering Progress Symposium Series, v162.
- Wu, B., Chen, S., 2008. CFD simulation of non-Newtonian fluid flow in anaerobic digesters. *Biotechnology and Bioengineering*, v99. <https://doi.org/10.1002/bit.21613>
- Wu, C.S., Huang, J.S., Reiko, O., 2009. Hydrodynamics of tapered anaerobic fluidized beds for metabolic gas production. *Chemical Engineering Journal*, v148. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2008.08.030>
- Wu, B., 2010. CFD simulation of mixing in egg-shaped anaerobic digesters. *Water Research*, v44. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2009.10.040>
- Wu, B., 2011. CFD investigation of turbulence models for mechanical agitation of non-newtonian fluids in anaerobic digesters. *Water Research*, v45. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2010.12.020>
- Yang, W.C., 2003. *Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems*, first ed. Marcel-Dekker, Inc., New York.

- Ye, X., Gao, Y., Cheng, J., Chu, D., Ye, Z.-L., Chen, S. Numerical simulation of struvite crystallization in fluidized bed reactor *Chemical Engineering Science* v176. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.10.048>
- Yu, L., Ma, J., Frear, C., Zhao, Q., Dillon, R., Li, X., Chen, S., 2013. Multiphase modeling of settling and suspension in anaerobic digester. *Applied energy*, v111. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.04.073>
- Zadghaffari, R., Moghaddas, J.S., Revstedt, J., 2010. Large-eddy simulation of turbulent flow in a stirred tank driven by a Rushton turbine. *Computers and Fluids*, v39. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.03.001>
- Zhang, K., Wu, G., Brandani, S., Chen, H., Yang, Y., 2012. CFD Simulation of Dynamic Characteristics in Liquid–solid Fluidized Beds. *Powder Technology*, v227. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2012.01.030>
- Zhang, K., Guan, Y., Yao, X., Li, Y., Fan, X., Brandani, S., 2013. Two- and three-dimensional computational studies of liquid–solid fluidization *Powder Technology* v235. <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2012.09.046>
- Zhou D., Wang H., Bi, X., Dong S., 2008. Biofilm Performance in an Aerobic Fluidized Bed Reactor During the Start-Up Period. *Bioinformatics and Biomedical Engineering*, <https://doi.org/10.1109/ICBBE.2008.1105>
- Zima-Kulisiewicz, B.E., Díez, L., Kowalczyk, W., Hartmann, C., Delgado, A., 2008. Biofluid mechanical investigations in sequencing batch reactor (SBR). *Chemical Engineering Science*, v63. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.09.048>

Apêndice

Apêndice A

Dados originais

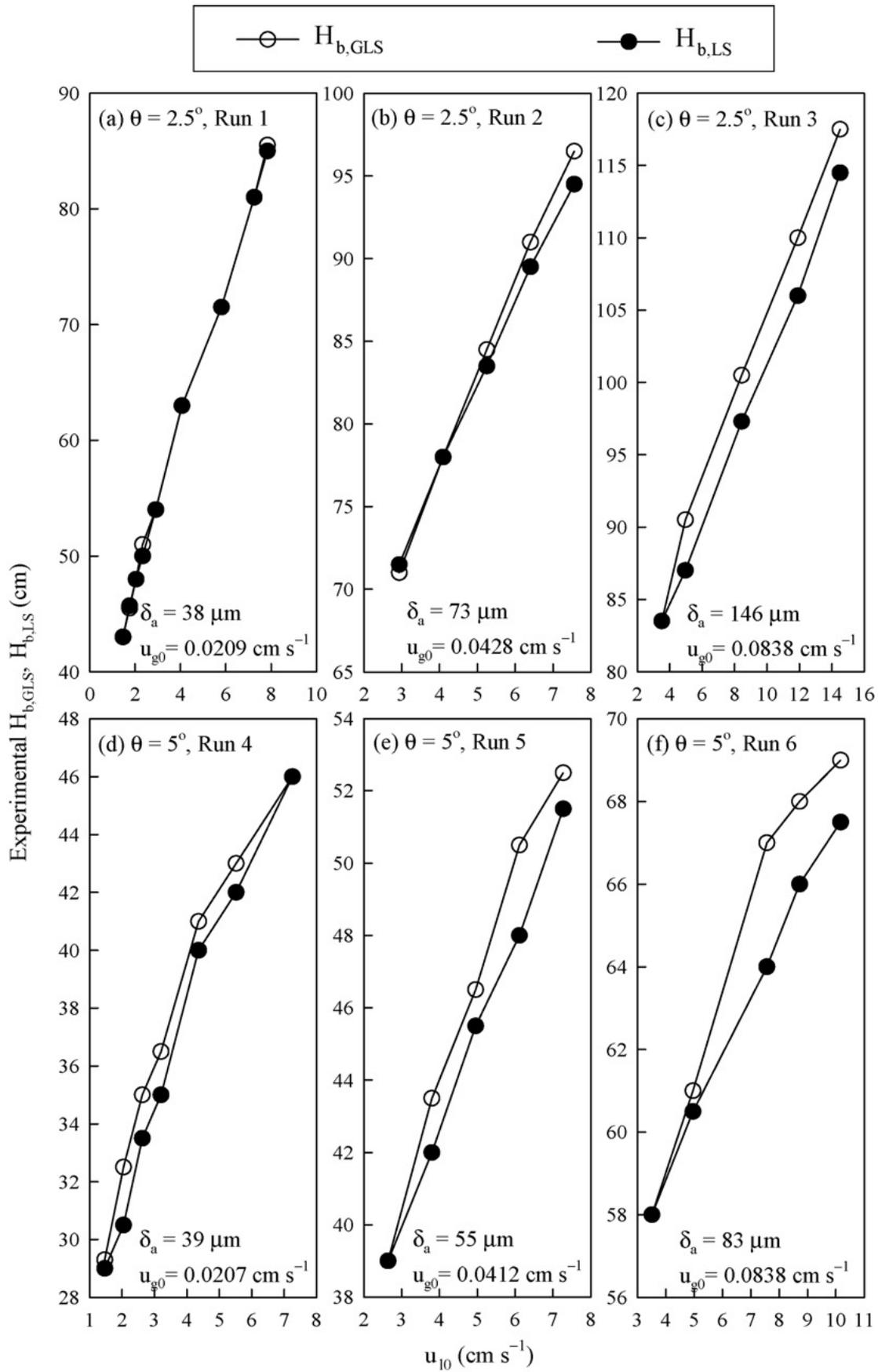


Figura A.1: Alturas de leito fluidizado em TBRs sob diferentes condições de operação (Wu *et al.*, 2009).