UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos

DAYANE CRISTINA GOMES OKIYAMA

Simulação numérica da hidrodinâmica de biorreator em leito fixo para tratamento de vinhaça

Pirassununga

2014

DAYANE CRISTINA GOMES OKIYAMA

**Simulação numérica da hidrodinâmica de biorreator em leito
fixo para tratamento de vinhaça**

(Versão Corrigida)

Dissertação apresentada à Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de Concentração: Ciências da Engenharia de Alimentos.

Orientador: Prof. Dr. José Antonio Rabi

Pirassununga

2014

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

Serviço de Biblioteca e Informação da Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos da
Universidade de São Paulo

041s	<p>Okiyama, Dayane Cristina Gomes</p> <p>Simulação numérica da hidrodinâmica de biorreator em leito fixo para tratamento de vinhaça / Dayane Cristina Gomes Okiyama.-- Pirassununga, 2014.</p> <p>86 f.</p> <p>Dissertação (Mestrado) -- Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos - Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Biossistemas.</p> <p>Área de Concentração: Ciências da Engenharia de Alimentos.</p> <p>Orientador: Prof. Dr. José Antonio Rabi.</p> <p>1. Tratamento de efluentes 2. Tempo de detenção hidráulica 3. Meio poroso 4. Fluidodinâmica computacional 5. Método de Boltzmann em rede. I. Título.</p>
------	---

“Por vezes sentimos que aquilo que fazemos não é senão uma gota de água no mar. Mas o mar seria menor se lhe faltasse uma gota”

(Madre Teresa de Calcutá)

Para Alice e Willian, com todo o amor que sou capaz de sentir.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus pela persistência em me colocar no caminho certo e por ser fonte de força, ânimo e fé ao longo de toda a minha caminhada.

Agradeço a minha filha Alice pelos momentos mais felizes de toda a minha vida e por ser minha constante fonte de inspiração.

Agradeço ao meu marido Willian por me afagar, quando precisei de carinho, por conversar quando precisei de ouvidos, por me fazer sorrir quando queria chorar, por me animar quando parecia não mais ter energia, enfim, por me dar as mãos e andar ao meu lado.

Agradeço a minha família por ser minha fiel torcida.

Agradeço às minhas amigas, em especial à Marília por ser minha grande companheira desde a graduação.

Agradeço ao Prof. Dr. Rogers Ribeiro por acreditar no meu trabalho, por me apoiar em todos os momentos e por sempre estar disposto a me ajudar.

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. José Antonio Rabi pela generosidade, paciência e compreensão.

Agradeço ao Prof. Dr. Marcelo Zaiat e, ao agora doutor, Antônio Djalma N. Ferraz Júnior por contribuírem com o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço à toda comunidade FZEA/USP pela ajuda na realização desse sonho.

Agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo pela concessão da bolsa de mestrado.

“Na minha juventude, antes de andar errante, procurei abertamente a sabedoria em minhas preces. Diante do santuário eu a pedi, e até o fim vou procurá-la”

Eclesiástico 51:13

RESUMO

OKIYAMA, D.C.G. **Simulação numérica da hidrodinâmica de biorreator em leito fixo para tratamento de vinhaça**. 2014. 86 f. Dissertação (Mestrado) – Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos, Universidade de São Paulo, Pirassununga, 2014.

Oriunda da etapa de destilação do caldo da cana-de-açúcar, a vinhaça é um subproduto da produção de etanol. Apesar de seu difundido uso na agricultura canavieira como fertirrigação, sua disposição no solo tem sido questionada quanto a possíveis riscos ambientais. Uma destinação alternativa à vinhaça é seu tratamento anaeróbio, considerado bastante atrativo haja vista a possibilidade de recuperação de energia na forma de biogás, sem interferir em suas qualidades como biofertilizante. Entre os sistemas de tratamento anaeróbios, os reatores de leito fixo têm sido amplamente utilizados devido à sua estabilidade operacional. A modelagem abrangente destes tipos reatores tende a ser complexa de forma que o estudo dos escoamentos em seu interior do reator é vital. Neste contexto, o objetivo deste trabalho foi analisar e simular numericamente a hidrodinâmica de reator de leito fixo de fluxo ascendente tipo APBR (*anaerobic packed bed reactor*). Em termos gerais, os resultados obtidos por simulação foram confrontados tanto com os correspondentes valores experimentais como com aqueles obtidos a partir dos modelos uniparamétricos comumente usados para representar reatores não ideais. Para tanto, foram empregados dados pré-existentes de ensaios hidrodinâmicos conduzidos no início e no final da operação, com biorreator alimentado com solução-traçador na forma de degrau a vazões de 4,6 L/dia e 2,3 L/dia. Foram considerados os modelos de dispersão de pequena e grande intensidade bem como o modelo de tanques agitados em série. Quanto às simulações numéricas, foi usado o software de CFD (fluidodinâmica computacional) *COMSOL Multiphysics*® 4.3b. As curvas DTR obtidas via simulação e com base nos modelos para reatores não ideais foram confrontadas com as curvas obtidas experimentalmente. Para o reator operando com vazão de 2,3 L/dia, nenhum dos modelos propostos mostrou-se adequado quanto ao final da operação, em razão da incapacidade em representar o surgimento de picos de concentração que podem estar associados ao acúmulo de biomassa no interior do biorreator, mas também ao tipo de traçador utilizado para a realização do experimento. As demais curvas DTR sugerem que o reator em questão aproxima-se do tipo pistonado. O simulador CFD representou de forma bem adequada os dados experimentais em comparação com resultados obtidos a partir dos modelos para reatores não ideais. A simulação numérica de biorreatores para tratamento de efluentes mostrou-se, pois, capaz de fornecer informações mais detalhadas e precisas, geralmente úteis à engenharia do processo. Adicionalmente, foi implementado um simulador com base no método de Boltzmann em rede (*lattice Boltzmann method*, LBM) capaz de simular escoamento laminar

bidimensional em regime permanente no interior de um canal. No escopo de uma linha de pesquisa em simulação LBM de biosistemas agroindustriais, trata-se de um esforço inicial quanto à simulação LBM da hidrodinâmica de biorreatores para tratamento de efluentes em geral.

Palavras-chave: Tratamento de efluentes – Tempo de detenção hidráulica – Meio poroso – Fluidodinâmica computacional – Método de Boltzmann em rede

ABSTRACT

OKIYAMA, D.C.G. **Numerical simulation of hydrodynamics within fixed-bed bioreactor for vinasse treatment.** 2014. 86 p. Dissertation (M.Sc.) – Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos, Universidade de São Paulo, Pirassununga, 2014.

Resulting from sugarcane juice distillation, vinasse is a by-product from ethanol industry. Despite its widespread use as fertirrigation at crops, direct deposition of vinasse into soils has raised environmental issues. Alternatively, it may undergo anaerobic treatment, which is very attractive in view of energy recovery as biogas while preserving vinasse quality as biofertilizer. Among anaerobic treatment systems, fixed-bed reactors come forward due to their operational stability. Their comprehensive modeling is prone to be complex so that the study of fluid flows prevailing inside is fundamental. Accordingly, the goal of this work was to numerically analyze and simulate the hydrodynamics within a particular upflow fixed-bed reactor, namely anaerobic packed bed reactor. In general, results from simulations were compared with experimental counterparts as well as against results from well-known single-parameter models for non-ideal reactors. Existing data from hydrodynamic tests were then used, concerning operation at both start-up and shut-down and bioreactor stepwise feeding with tracer solution flow at 4,6 L/day and 2,3 L/day. Non-ideal reactor models comprised either low or high-dispersion together with continuous stirred-tank reactor model while COMSOL Multiphysics[®] 4.3b CFD (computational fluid dynamics) software was employed for simulations. Retention time distribution (RTD) curves from simulations and from model calculations were compared to experimental ones. For operation at 2,3 L/day flow, no models proved to be suitable as far as shut-down operation is concerned, due to biomass accumulation inside the bioreactor. Remaining RTD curves suggested that reactor behavior resembles plug-flow type. Compared to non-ideal reactor models, CFD simulations proved to properly reproduce experimental data while being able to provide detailed and accurate information for process engineering towards effluent treatment. Furthermore, a numerical simulator was implemented as based on the lattice Boltzmann method (LBM) in order to deal with two-dimensional steady-state laminar flow inside a channel. As part of research work on LBM simulation of agroindustrial biosystems, aforesaid simulator contributed to LBM simulation of hydrodynamics within bioreactors for wastewater treatment in general.

Keywords: Effluent treatment – Hydraulic retention time – Porous medium – Computational fluid dynamics – Lattice Boltzmann method

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Fluxograma do processo de produção de etanol e subprodução da vinhaça (adaptado de Christofolletti et al., 2013).	17
Figura 2. Curva-resposta típica à perturbação tipo degrau (adaptado de Levenspiel, 2000).	22
Figura 3. Curva F obtida a partir de ensaio com perturbação tipo degrau (adaptado de Levenspiel, 2000).	23
Figura 4. Anomalias de escoamento em reatores que se aproximam do tubular: (a) curva em posição correta; (b) aparecimento prematuro do traçador indicando canalização ou regiões de estagnação no reator; (c) recirculação do fluido no reator; (d) traçador aparece mais tarde que o esperado; (e) canalização por dois caminhos paralelos (adaptado de LEVENSPIEL, 2000).	26
Figura 5. Anomalias de escoamento em reatores que se aproximam de mistura completa: (a) curva na posição correta; (b) aparecimento prematuro do traçador indicando canalização ou região de estagnação no reator; (c) recirculação do fluido no reator; (d) traçador aparece mais tarde que o esperado; (e) tempo morto da instrumentação (adaptado de LEVENSPIEL, 2000).	26
Figura 6. Representação de escoamento tubular e de escoamento tubular disperso (LEVENSPIEL, 1974).	27
Figura 7. Condições de contorno para escoamento com grande dispersão (adaptado de LEVENSPIEL, 1974).	29
Figura 8. Escoamento em meio poroso: velocidade superficial e intersticial (adaptado de HOLDICH, 2002).	30
Figura 9. Estrutura básica da rede D2Q9 para simular escoamentos via LBM.	33
Figura 10. Descrição esquemática da técnica <i>bounce-back</i> , adaptado de Ziegler (1993).	35
Figura 11. Imagem ilustrativa da tela utilizada para separação do leito	36
Figura 12. Reator acidogênico de leito empacotado (APBR) usado nos experimentos. A. Características dimensionais do reator, em milímetro. B. Imagem ilustrativa do reator (adaptado de FERRAZ, 2013).	37
Figura 13. Cilindros de polietileno de baixa densidade utilizados para o empacotamento do leito....	37
Figura 14. Esquema do reator APBR submetido aos ensaios hidrodinâmicos.	38
Figura 15. Representação geométrica 2D do reator via software COMSOL Multiphysics® (em detalhe: representação 2D da tela de distribuição do escoamento).	40
Figura 16. Concentração de traçador na saída do reator: ensaios hidrodinâmicos no início e no final da operação para vazão de 4,6 L/dia.	43

Figura 17. Concentração de traçador na saída do reator: ensaios hidrodinâmicos no início e no final da operação para vazão de 2,3 L/dia.	44
Figura 18. Curva normalizada F da concentração de traçador na saída do reator: início e final da operação para vazão de 4,6 L/dia.	45
Figura 19. Curva normalizada F da concentração de traçador na saída do reator: início e final da operação para vazão de 2,3 L/dia.	45
Figura 20. Distribuição do tempo de detenção hidráulico para TDH teórico de 12 horas.	46
Figura 21. Distribuição do tempo de detenção hidráulico para TDH teórico de 24 horas.	46
Figura 22. Distribuição do tempo de residência adimensional: vazão de 4,6 L/dia.	47
Figura 23. Distribuição do tempo de residência adimensional: vazão de 2,3 L/dia.	47
Figura 24. Modelos para reatores não ideais ajustados ao reator APBR: início da operação, vazão de 4,6 L/dia.....	48
Figura 25. Modelos para reatores não ideais ajustados ao reator APBR: final da operação, vazão de 4,6 L/dia.....	49
Figura 26. Coeficiente de determinação (R^2) para linearização dos gráficos confrontando DTR normalizados dos modelos com valores DTR adimensionais obtidos experimentalmente para reator APBR com vazão de 4,6 L/dia: a. modelo de dispersão de pequena intensidade para o início da operação, b. modelo de dispersão de grande intensidade para o início da operação, c. modelo de tanque de mistura completa para o início da operação, d. modelo de dispersão de pequena intensidade para o final da operação, e. modelo de dispersão de grande intensidade para o final da operação.....	50
Figura 27. Modelos para reatores não ideais ajustados ao reator APBR: início da operação, vazão de 2,3 L/dia.....	51
Figura 28. Modelos para reatores não ideais ajustados ao reator APBR: final da operação, vazão de 2,3 L/dia.....	51
Figura 29. Coeficiente de determinação (R^2) para linearização dos gráficos confrontando DTR normalizados dos modelos com valores DTR adimensionais obtidos experimentalmente para reator APBR com vazão de 2,3 L/dia: a. modelo de dispersão de pequena intensidade para o início da operação, b. modelo de dispersão de grande intensidade para o início da operação, c. modelo de tanque de mistura completa para o início da operação, d. modelo de dispersão de pequena intensidade para o final da operação, e. modelo de dispersão de grande intensidade para o final da operação, f. modelo de tanque de mistura completa para o final da operação.	52
Figura 30. Malhas computacionais testadas para simular o reator APBR: a. <i>extremely coarse</i> (4146 elementos), b. <i>extra coarse</i> (4.989 elementos), c. <i>coarser</i> (5.972 elementos), d. <i>coarse</i> (9.299 elementos), e. <i>normal</i> (12.352 elementos), f. <i>fine</i> (16.494 elementos), g. <i>finer</i> (27.811 elementos).	54

Figura 31. Análise de sensibilidade de malha: concentração do traçador no ponto central na saída do reator $t = 45.000$ s (12,5 horas) em função do número de elementos da malha.	55
Figura 32. Comparação entre as alternativas propostas para representar o tubo de coleta real (3D) no modelo computacional 2D: valor médio obtido pela integral da concentração na saída, valor em $r = 0$ e valor em $r = R/2$	55
Figura 33. Perfis de concentração na saída: valores experimentais e simulados, vazão de 4,6 L/dia..	56
Figura 34. Perfis de concentração na saída: valores experimentais e simulados, vazão de 2,3 L/dia..	56
Figura 35. Distribuição do tempo de residência para valores experimentais e simulados: vazão de 4,6 L/dia.....	57
Figura 36. Distribuição do tempo de residência para valores experimentais e simulados: vazão de 2,3 L/dia.....	58
Figura 37. Variação da concentração de traçador no interior do reator ao longo do tempo. Da esquerda para a direita, as imagens se referem aos instantes: 702 s (0,195 h), 7020 s (1,95 h), 10044 s (2,79 h), 21060 s (5,85 h), 28080 s (7,8 h), 35100 s (9,75 h), 42606 s (11,835 h), 50130 s (13,925 h) e 84330 s (23,425 h).....	58
Figura 38. Perfil de velocidade na saída do reator nos instantes: a. 18 s, b. 90 s, c. 900 s, d. 90000 s.	59
Figura 39. Variação da concentração de traçador no interior do reator ao longo do tempo. Da esquerda para a direita, as imagens se referem aos instantes: 1404 s (0,39 h), 14040 s (3,9 h), 20088 s (5,58 h), 42120 s (11,7 h), 56160 s (15,6 h), 70200 s (19,5 h), 85212 s (23,67 h), 100260 s (27,85 h) e 168660 s (46,35 h).....	60
Figura 40. Perfil de velocidade na saída do reator nos instantes: a. 36 s, b. 180 s, c. 1800 s, d. 180000 s.	60
Figura 41. Distribuição do tempo de residência adimensional experimental e obtido via simulação após ajuste da porosidade ($\varepsilon = 0,543$): início da operação, vazão de 4,6 L/dia.....	61
Figura 42. Distribuição do tempo de residência adimensional experimental e obtido via simulação após ajuste da porosidade ($\varepsilon = 0,538$): final da operação, vazão de 4,6 L/dia.	61
Figura 43. Distribuição do tempo de residência adimensional experimental e obtido via simulação após ajuste da porosidade ($\varepsilon = 0,576$): início da operação, vazão de 2,3 L/dia.....	62
Figura 44. Coeficiente de determinação (R^2) para linearização dos gráficos confrontando DTR adimensionais simulados com valores obtidos experimentalmente para reator APBR com vazão de 4,6 L/dia: a. início da operação, b. fim da operação.....	62
Figura 45. Coeficiente de determinação (R^2) para linearização dos gráficos confrontando DTR adimensionais simulados com valores obtidos experimentalmente para reator APBR: vazão de 2,3 L/dia, início da operação.	63

Figura 46. DTR experimental, via modelagem clássica e via simulação: vazão de 4,6 L/dia, início da operação.....	63
Figura 47. DTR experimental, via modelagem clássica e via simulação: vazão de 4,6 L/dia, final da operação.....	64
Figura 48. DTR experimental, via modelagem clássica e via simulação: vazão de 2,3 L/dia, início da operação.....	64
Figura 49. Velocidade simulada no eixo central do canal, ao longo de toda sua extensão.....	66
Figura 50. Perfis de velocidade(componente axial) em diferentes posições do canal.....	67

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Variância adimensional e parâmetros de caracterização dos modelos de reatores não ideais.	48
Tabela 2. Parâmetros utilizados para simulação CFD do biorreator.	53
Tabela 3. Número de Reynolds modificado Re_{mp} para escoamento no biorreator sob diferentes condições.....	53
Tabela 4. Propriedades da água e da solução-traçador a 55°C (temperatura de operação do reator).	53
Tabela 5. TDH médio simulados obtidos a partir de diferentes porosidades numericamente ensaiadas.....	57
Tabela 6. Parâmetros para simulação LBM de escoamentoPoiseuille2Dem canal.	66

NOMENCLATURA

Abreviaturas

APBR	<i>Anaerobic packed bed reactor</i>
CFD	<i>Computational fluid dynamics</i>
CSTR	<i>Continuous stirred-tank reactor</i>
DQO	Demanda química de oxigênio
DTR	Distribuição do tempo de residência
GEE	Gases de efeito estufa
LBM	<i>Lattice Boltzmann method</i>
TDH	Tempo de detenção hidráulica
UASB	<i>Upflow anaerobic sludge blanket</i>

Símbolos latinos

A	Área
a	Razão entre a superfície total do leito e o seu volume
a_{ep}	Superfície específica da partícula
C	Concentração de traçador em base mássica
c_s	Velocidade do som na rede
$\mathcal{D}$	Coeficiente de difusão molecular
D_e	Diâmetro equivalente da partícula
D_x	Coeficiente de dispersão longitudinal
D_p	Diâmetro efetivo da partícula
E	Curva de distribuição do tempo de residência
F	Curva normalizada da concentração
$\vec{F}$	Força
f	Função de distribuição de partículas
f^{eq}	Função de distribuição de partículas no equilíbrio
k	Coeficiente de permeabilidade
L	Comprimento do reator
M	Concentração de traçador em base molar
m	Massa
mm	Massa molar

N	Número de reatores em série
P	Pressão
Q	Vazão volumétrica
Re	Número de Reynolds
R ²	Coeficiente de determinação
r	Raio
r _H	Raio hidráulico
t	Tempo
t _m	Tempo médio de residência
U	Velocidade intersticial
U ₀	Velocidade superficial do fluido
V	Volume
w	Fator de ponderação

Símbolos gregos

ε	Porosidade
μ	Viscosidade dinâmica
ν	Viscosidade cinemática
Θ	Tempo adimensional
ρ	Densidade
σ	Variância
τ	Tempo de detenção hidráulica médio teórico
Ω	Operador colisão

Subscritos

exp	Referente a valores experimentais
gd	Referente ao modelo de dispersão de grande intensidade
mp	Meio poroso
p	Referente à partícula
pd	Referente ao modelo de dispersão de pequena intensidade
relax	Referente à relaxação
sim	Referente a valores simulados
tmc	Referente ao modelo de tanques de mistura completa em série
Θ	Referente à análise adimensional
0	Valor inicial

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	16
2.1	VINHAÇA: DISPOSIÇÃO E TRATAMENTO	16
2.2	HIDRODINÂMICA DE BIORRETAORES.....	19
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	22
3.1	CARACTERIZAÇÃO TRADICIONAL DO ESCOAMENTO NÃO IDEAL EM REATORES	22
3.1.1	Curvas de distribuição do tempo de residência	22
3.1.2	Identificação de anomalias do escoamento pelas curvas DTR.....	24
3.1.3	Modelos para reatores não ideais.....	27
3.2	ESCOAMENTO EM MEIO POROSO	30
3.3	MÉTODO DE BOLTZMANN EM REDE.....	32
4	METODOLOGIA.....	36
4.1	ETAPA EXPERIMENTAL	36
4.1.1	Reator	36
4.1.2	Ensaio hidrodinâmico.....	37
4.2	CARACTERIZAÇÃO TRADICIONAL DO ESCOAMENTO NÃO IDEAL EM REATORES	38
4.2.1	Tratamento dos dados experimentais	38
4.2.2	Modelos para reatores não ideais.....	39
4.3	CARACTERIZAÇÃO DO ESCOAMENTO EM MEIO POROSO	39
4.4	SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO VIA MÉTODO DE BOLTZMANN EM REDE (LBM)	41
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	43
5.1	ETAPA EXPERIMENTAL	43
5.2	CARACTERIZAÇÃO TRADICIONAL DO ESCOAMENTO NÃO IDEAL EM REATORES	44
5.2.1	Tratamento dos dados experimentais	44
5.2.2	Modelos para reatores não ideais.....	47
5.3	SIMULAÇÃO CFD DO ESCOAMENTO EM MEIO POROSO	52

5.4	ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE OS ESTUDOS DE HIDRODINÂMICA AVALIADOS	65
5.5	SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO VIA MÉTODO DE BOLZTMANN EM REDE	66
6	CONCLUSÃO E DESENVOLVIMENTOS FUTUROS	68
7	REFERÊNCIAS	69

1 INTRODUÇÃO

O Brasil é o mais competitivo produtor de bioetanol de cana no mundo e, nos últimos anos, teve sua produção alavancada para suprir o mercado interno e externo em expansão. No entanto, o desenvolvimento do setor não foi acompanhado de ações mais estritas de controle ambiental, sendo muitas vezes questionada a sustentabilidade dessa atividade em função dos impactos ambientais que ela poderia gerar.

Dentre os resíduos agroindustriais gerados, a vinhaça, efluente originado da destilação do mosto para obtenção do etanol, pode representar um grave problema ambiental dependendo da forma como é disposta. Diversas são as alternativas para sua disposição, sendo a mais utilizada sua aplicação no solo como fertilizante no cultivo da cana (fertirrigação) por ser a mais simples e viável economicamente. Embora seja permitida por lei, esta aplicação não tem seus possíveis impactos ambientais claramente definidos e diversos estudos têm demonstrado que, dependendo da quantidade e da frequência com que é utilizada, ela pode ocasionar considerável contaminação no solo e no lençol freático.

Outra opção para o destino da vinhaça é o seu tratamento por digestão anaeróbia, que permite reduzir seu teor de matéria orgânica, mantendo a maioria dos seus nutrientes. Após a digestão, a vinhaça pode, pois, ser utilizada como fertilizante, porém com seu potencial de poluição acentuadamente reduzido. Além disso, a digestão anaeróbia também pode fornecer energia adicional para as biorrefinarias através da produção de biogás, o qual é rico em metano. Assim, este tratamento pode diminuir prejuízos ambientais, sendo eventuais aumentos de custo compensados pela utilização do biogás como fonte de energia.

Dentre os reatores usados para digestão anaeróbia, os de leito empacotado (APBR – *Anaerobic Packed Bed Reactor*) com fluxo ascendente são alternativas interessantes, visto que apresentam uma configuração simples e são de fácil operação. Neste tipo de reator, a biomassa é imobilizada no material suporte de forma a limitar sua perda, o que promove um aumento da atividade microbiana por unidade de volume do reator, em função do aumento da concentração de biomassa. Essas características resultam em baixos custos de construção e operação, tornando-se um modelo interessante para o tratamento de vinhaça.

O desempenho de reatores anaeróbios está fortemente relacionado com as suas características hidrodinâmicas, as quais permitem verificar problemas associados às falhas operacionais e/ou de projeto. A caracterização hidrodinâmica de um biorreator é a base para comparação entre as diferentes possibilidades de configurações.

Diversos estudos têm sido realizados para melhorar a compreensão da hidrodinâmica e degradação biológica em biorreatores de leito fixo. No entanto, o principal problema encontrado neste tipo de reator está relacionado com o entupimento devido à elevada quantidade de biomassa presente em seu interior, principalmente após longo período de operação. O aumento desse material biológico pode resultar na formação de “zonas mortas” ou “zonas estagnadas”, fazendo com que o líquido escoe através de caminhos preferenciais. Consequentemente, essas anomalias afetam o desempenho geral do reator em função da redução do volume reacional.

A hidrodinâmica de biorreatores para tratamento de águas residuárias tem sido investigada com base em modelos clássicos. Com o desenvolvimento da informática, a chamada fluidodinâmica computacional (CFD – *computational fluid dynamics*) desponta como uma alternativa, sobretudo apoiada por simuladores implementados com base em métodos de discretização em macroescala. Mais recentemente, técnicas numéricas em mesoescala, como método de Boltzmann em rede (LBM – *lattice Boltzmann method*), têm igualmente despertado o interesse acadêmico.

Neste contexto, o presente trabalho teve tem como objetivo estudar a hidrodinâmica no interior de biorreator em leito fixo para tratamento de vinhaça e desenvolver competências em modelagem e simulação de biorreatores para tratamento de efluentes. Para tanto, foram utilizados resultados de ensaios hidrodinâmicos realizados em reator APBR operado na Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo. Com base nos dados obtidos experimentalmente, o escoamento foi caracterizado e modelos clássicos (quais sejam, de dispersão longitudinal e de tanque de mistura completa em série) foram ajustados e usados para analisar o desvio da idealidade do reator. Posteriormente, utilizou-se o software comercial *COMSOL Multiphysics*® para modelar e simular o biorreator em questão, de forma que os valores simulados foram confrontados com os dados experimentais como também com aqueles avaliados via modelos tradicionais. Adicionalmente e em contribuição à linha de pesquisa em simulação LBM de processos e biosistemas agroindustriais (a cargo do orientador deste trabalho), foi simulado por este método o escoamento laminar bidimensional em regime permanente no interior de um canal.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 VINHAÇA: DISPOSIÇÃO E TRATAMENTO

Sendo o maior produtor mundial de cana-de-açúcar, estima-se que em 2011 o Brasil tenha produzido mais de 571 milhões de toneladas em uma área de aproximadamente 8,4 milhões de hectares. Atualmente, cerca de 51,7% da produção nacional de cana-de-açúcar é destinada para a fabricação de etanol (CONAB, 2012). O Brasil é o mais competitivo produtor de bioetanol e cana no mundo, com um mercado interno bem desenvolvido e crescente, estimulado principalmente pelo aumento das vendas de carros tipo “flex”. (IBETO; OFOEFULE; AGBO, 2011). Para que seja possível o suprimento deste mercado, a produção de bioetanol conta com o apoio do desenvolvimento de novas variedades de cana, clima favorável, solos férteis e tecnologias agrícolas (LEITE et al., 2009).

O etanol de cana-de-açúcar tem sido proposto por ser uma das melhores opções como substituinte dos combustíveis fósseis. Os resultados da análise do ciclo de vida apresentado por Macedo, Seabra e Silva (2008) e Seabra et al. (2011) indicaram que o etanol da cana-de-açúcar emite aproximadamente 80% menos gases de efeito estufa (GEE) do que a gasolina. Só no ano de 2003, a emissão de 27,5 milhões de toneladas de CO₂ equivalente foi evitada devido a substituição da gasolina pelo etanol (MACEDO, 2005).

No entanto, o aumento da produção de etanol de cana enfrentada pelo Brasil para suprir o mercado em expansão, bem como as exportações para outros países, tem levado a uma preocupação com a sua sustentabilidade. Entre os aspectos envolvidos, o de caráter ambiental tem ganhado destaque (GOLDEMBERG; COELHO; GUARDABASSI, 2008).

Neste contexto, a gestão e disposição dos resíduos agroindustriais têm recebido atenção por causa de sua descarga inadequada e indiscriminada no meio. Uma vez que cada tipo de efluente tem composição e impacto específicos sobre a biota, é essencial avaliar cada cenário (SRIVASTAVA; SAHAI, 1987).

Um efluente dos efluentes gerados é a vinhaça, líquido residual da produção de etanol, a qual pode constituir um grave problema ambiental dependendo da forma como é disposto (MORAES et al., 2014). A vinhaça é gerada na coluna de destilação de etanol após a fermentação do caldo de cana, um exemplo de fluxograma para obtenção da vinhaça pode ser observado na Figura 1. As usinas de cana-de-açúcar brasileiras produzem entre 10 a 15 litros de vinhaça para cada litro de etanol, dependendo do equipamento utilizado para a destilação (CORTEZ; MAGALHÃES; HAPPI, 1992). Este subproduto é normalmente um composto ácido (pH 3,5-5,0), de cor castanho escuro, com elevado

teor de matéria orgânica (demanda química de oxigênio - DQO: 50-150 g L⁻¹) e com desagradável odor para os seres humanos (ESPAÑA-GAMBOA et al., 2011).

Figura 1. Fluxograma do processo de produção de etanol e subprodução da vinhaça (adaptado de Christofolletti et al., 2013).

Diversas alternativas de emprego da vinhaça têm sido propostas como: reciclo para a etapa de fermentação, fertirrigação, concentração por evaporação, utilização para a produção de levedura, produção de energia e matéria prima para alimentação animal (ROBERTIELLO, 1982). Porém, entre todas as destinações citadas, a mais comum é a sua aplicação no solo como fertilizante para o cultivo da cana. Isso ocorre devido ao seu elevado teor de matéria orgânica e nutrientes. Do ponto de vista econômico, esta aplicação representa a solução mais barata e simples para disposição deste volumoso efluente. Embora seja uma solução permitida pela legislação ambiental brasileira, não se pode afirmar com segurança se tal ação resultará ou não em impactos ambientais. De acordo com Madejón et al. (2001), a aplicação da vinhaça no solo durante muitos anos pode elevar as concentrações de sais e o risco potencial de salinidade.

A utilização da digestão anaeróbia para o tratamento da vinhaça tem sido estudada como uma alternativa para sua destinação. Este tipo de tratamento permite que seu teor de matéria orgânica seja reduzido mantendo a maioria dos seus nutrientes tais como potássio, nitrogênio e fósforo, os quais são removidos apenas pelo metabolismo de assimilação para manutenção celular. O sulfato também pode ser removido da vinhaça por meio do processo anaeróbio que realiza sua redução para sulfeto (MORAES et al., 2014). O aumento da matéria orgânica no solo por fertirrigação dificulta a adsorção de sulfato na superfície do solo (ALVES E LAVORENTI, 2004), consequentemente podendo

ocorrer sua lixiviação (MOTAVALLI ET AL., 1993; DYNIA E CAMARGO, 1995). Assim, a remoção de sulfato de vinhaça por digestão anaeróbia pode beneficiar a fertirrigação, impedindo potenciais impactos ambientais causados por sua lixiviação (MORAES et al., 2014).

Dessa forma, a vinhaça pode ser usada para fertirrigação após digestão anaeróbia (VLISSIDIS e ZOUBOULIS, 1993; LONGO, 1994), diminuindo o risco de emitir uma quantidade considerável de gases de efeito estufa e/ou causar contaminação das águas subterrâneas (ESPAÑA-GAMBOA, 2011). A matéria orgânica biodegradável da vinhaça pode ser prontamente removida no reator anaeróbio, minimizando, assim, a lixiviação de metais e nutrientes devido à presença de compostos orgânicos solúveis. Além disso, a fonte orgânica exógena de elétrons da vinhaça não estaria disponível para a desnitrificação heterotrófica em solo, minimizando emissões de N_2O resultantes da desnitrificação incompleta (SÁNCHEZ-MARTÍN, 2008; CARMO, 2012).

A digestão anaeróbia também pode fornecer energia adicional para as biorrefinarias através de biogás, o qual é rico em metano (KAPARAJU, SERRANO, ANGELIDAKI, 2010; GRISI, YUSTA, DUFO-LÓPEZ, 2012). Seu uso apropriado para geração de energia pode também reduzir as emissões de GEE, pois evitaria a liberação de CH_4 biogênico, o qual apresenta um potencial poluente 22 vezes maior do que o do CO_2 para a atmosfera (IPCC, 2007). Com isso, o tratamento da vinhaça por digestão anaeróbia reduziria prejuízos ambientais sem aumento de custo, o qual seria compensado pela geração de biogás e possivelmente a venda de créditos de carbono.

No entanto, de acordo com Laime et al. (2011), a viabilidade econômica desta tecnologia é dificultada por ao menos dois fatores: a falta de valorização do biogás como combustível alternativo e a difusão bem sucedida da fertirrigação, a qual não é atualmente objeto de controle ambiental adequado. Além disso, a escassa investigação sobre a digestão anaeróbia da vinhaça aliada a abordagens empíricas tem levado a resultados insatisfatórios nos poucos reatores anaeróbios em larga escala que as indústrias tentaram implantar (MORAES et al., 2014). Neste sentido, Moraes et al. (2014) estudaram a viabilidade da digestão anaeróbia da vinhaça em biorrefinarias de cana-de-açúcar e concluíram que a adoção da digestão anaeróbia da vinhaça em biorrefinarias poderia levar a ganhos energéticos e ambientais, ampliando-se perspectivas econômicas e otimizando as plantas em termos de sustentabilidade.

Uma melhora na biotecnologia anaeróbia está vinculada à evolução de novas configurações de reatores que utilizam lodo imobilizado. Reatores de leito fluidizado/expandido, reatores de fluxo ascendente em manta de lodo (UASB) e reatores de leito fixo com fluxo ascendente e descendente são atualmente configurações bem aceitas de reatores anaeróbios; estes promovem a imobilização da biomassa no material suporte ou a auto imobilização do lodo na forma de grânulo no interior do reator (SPEECE, 1996.)

Nos reatores de leito fixo os microrganismos são imobilizados em algum tipo de suporte inerte para limitar a perda de biomassa e aumentar a atividade microbiana por unidade de volume do reator. Além disso, tem-se maior remoção de DQO em baixo TDH (tempo de detenção hidráulico) e melhor tolerância a toxicidade e a choques de carga orgânica (SATYAWALI e BALAKRISHNAN, 2008). O material suporte utilizado no reator proporciona uma maior superfície de contato para o crescimento de microrganismos, o efluente passa através do material suporte e os microrganismos anaeróbios vão se juntando de modo a formar um biofilme (STEYER et al., 1999; RAJESHWARI et al., 2000; BAEZ-SMITH, 2006).

O processo anaeróbio é baseado em fundamentos amplamente conhecidos de hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese. Além disso, requer modelos simples de reatores e baixo custo energético quando comparados com outras tecnologias. De uma forma geral, os reatores de leito empacotado (APBR – *Anaerobic Packed Bed Reactor*) apresentam configuração simples, não requerem agitação mecânica e nem aparatos de recirculação (quando não há necessidade de diluição). Essas características resultam em baixos custos de construção e operação, tornando-se um modelo interessante para o tratamento de vinhaça nas biorrefinarias (FERRAZ, 2013).

2.2 HIDRODINÂMICA DE BIORRETORES

A melhoria crescente na configuração dos biorreatores tem permitido melhor aproveitamento do volume útil das unidades de tratamento e melhora do desempenho e estabilidade do processo. No entanto, a maior parte das configurações de reatores anaeróbios existentes foi concebida com base em parâmetros empíricos selecionados para garantir o autocontrole do processo pela biomassa (NARDI, ZAIAT, FORESTI, 1999).

O desempenho de reatores anaeróbios é conhecido por ser intimamente relacionado com as suas características hidrodinâmicas. Além disso, estudos detalhados sobre os mecanismos hidráulicos em reatores biológicos permitem verificar os problemas associados às falhas operacionais e de projeto. Estes estudos proporcionam a base para a comparação entre as configurações de reatores distintos ou entre diferentes matrizes de imobilização (SWAINE, DAUGULIS, 1989)

Nas últimas décadas, vários estudos foram realizados para melhorar a compreensão da hidrodinâmica e degradação biológica em reatores de leito fixo (NIKOLAEVA et al., 2002; SILVA et al., 2002; LIMA, MOREIRA, ZAIAT, 2013; FERNANDES et al., 2013). No entanto, o principal problema com esta tecnologia é o entupimento do biorreator, que pode ocorrer quando a quantidade de biomassa é elevada, geralmente depois de um longo período de operação. Como resultado, parte do volume do reator pode funcionar como uma “zona morta” ou “zona estagnada”, fazendo com que o líquido flua através de caminhos preferenciais. Consequentemente, essas anomalias afetam o tempo de

retenção de substratos no reator bem como o grau de contato entre os substratos de entrada e a população bacteriana viável (CHIANG e DAGUE, 1992; SMITH, ELLIOT, JAMES, 1996).

Dependente da mistura líquida, o tempo de retenção afeta o desempenho do biorreator. Em escala industrial, as soluções mecânicas são usadas para reduzir esta obstrução tais como alta velocidade do líquido e características do material suporte. No entanto, o conhecimento do padrão de mistura em uma estação de tratamento com fluxo contínuo é indispensável para a otimização do desempenho e design do processo (SWAINE e DAUGULIS, 1998).

Fazolo et al. (2006) analisaram a cinética, transferência de massa e hidrodinâmica de um reator aeróbio de leito empacotado. A hidrodinâmica deste reator foi representada por 3-4 tanques de mistura completa em série, concluindo que os padrões de escoamento não foram influenciados pelas taxas de fluxo de ar e líquido. Méndez-Romero et al. (2011) estudaram a hidrodinâmica e a cinética de um reator anaeróbio de leito fixo com fluxo ascendente para o tratamento secundário de água residuárias de abatedouro. Neste caso, para vazões elevadas (110-204 mL/min) o reator apresentou comportamento de fluxo pistonado. No entanto, para baixas vazões (2,29-27,9 mL/min) a dispersão e a interação com zonas mortas aumentaram, aparecendo curtos-circuitos e fazendo com que o reator se comportasse como um tanque de mistura completa. Patil e Nagarnaik (2010) realizaram a análise da hidrodinâmica de um reator anaeróbio de filme e leito fixo operado em uma refinaria de petróleo para tempos de detenção hidráulica variando entre 0,5 e 5 dias. Os resultados demonstraram que o padrão de escoamento foi mais próximo do tipo pistonado e depende da intensidade de dispersão, sendo que a dispersão aumentava conforme se aumenta o TDH.

O estudo da hidrodinâmica de reatores para tratamento de águas residuárias com base em modelos clássicos está consolidado. Porém, existem alternativas que vem a melhorar essa análise na medida em que evocam modelos fenomenológicos e, portanto, baseados em princípios universais (em oposição a modelos tipo "*data-driven*"). Dentre as alternativas para simular sistemas envolvendo fenômenos de transporte, tem-se a fluidodinâmica computacional (CFD) com base em métodos de discretização em macroescala e, mais recentemente, técnicas em mesoescala como o método de Boltzmann em rede (LBM) (SUCCI, 2001; MOHAMAD, 2011).

Vale destacar que escoamentos em meios porosos são complexos e geralmente modelados em escala macroscópica utilizando modelos semi-empíricos como a lei de Darcy. Estudos experimentais de escoamentos em meio poroso também têm se restringidos à análise macroscópica, por exemplo, o monitoramento de efluente (GUO e THOMPSON, 2001) e estudos de dispersão de traçador em sistemas opticamente acessíveis (KOEHLER et al., 2000; STEVENSON et al., 2003).

Para análise de biorreatores de leito fixo em sistema de tratamento de efluentes, há poucos trabalhos usando CFD em macroescala (PARCO et al., 2007; BRANNOCK et al., 2010; GLUSZCZ et al., 2011). Esta técnica numérica permite simular escoamentos e, assim, compreender o acoplamento

entre hidrodinâmica, reações químicas e transferência de massa em sistemas de leito fixo (SULLIVAN et al., 2005). Apesar disso, existe dificuldade em atingir estabilidade numérica na presença de condições de contorno complexas, fazendo com que a aplicação de CFD convencional para alguns cenários se torne difícil (SULLIVAN et al., 2005).

Em contraste, o método LBM para simulação tem se mostrado preciso e eficiente para leito empacotados. Combinando abordagem em mesoescala e conceitos estatísticos, LBM se encontra bem estabelecido para simular escoamentos em meios porosos (LEAL, 2011). Grucelski e Pozorski (2013) realizaram simulações LBM para escoamento em um cilindro e em um meio poroso simples, avaliando para este último a queda de pressão, a permeabilidade e o coeficiente Forchheimer em função do número de Reynolds (Re). Comparados com relações empíricas (lei de Darcy-Forchheimer e correlação de Ergun), concluiu-se que a permeabilidade varia não apenas com as características geométricas do leito, mas também com o número de Reynolds.

Maier e Bernard (2010) estudaram o escoamento ao redor de uma esfera (isolada) e em um leito empacotado com esferas distribuídas aleatoriamente. Escoamentos uni e bifásicos em reator de leito fixo foram estudados por Mantle, Sederman e Gladden (2001) utilizando LBM e tratamento de imagens por ressonância magnética. Os dois métodos mostraram boa concordância entre si e indicaram que LBM apresenta resultados próximos dos obtidos experimentalmente. Trabalhos apresentando resultados numéricos para escoamento em meios porosos fazem comparações com a lei de Darcy (ROTHMAN, 1988; PAN, LUO, MILLER, 2006; KIM e GHIAASIAN, 2009), nos quais o coeficiente de permeabilidade é parâmetro usado para validar as simulações.

Apesar de estar difundido quanto à simulação numérica de escoamentos em meio poroso, não foram encontrados trabalhos aplicando LBM na investigação de biorreatores para tratamento de efluentes, seja em leito fixo ou não.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 CARACTERIZAÇÃO TRADICIONAL DO ESCOAMENTO NÃO IDEAL EM REATORES

3.1.1 Curvas de distribuição do tempo de residência

O escoamento ao longo de um reator ocorre de forma desigual. Os elementos de fluido em reatores podem percorrer diferentes rotas, permanecendo diferentes tempos de residência em seu interior. De forma geral, as curvas de distribuição do tempo de residência (DTR) informam qual o tempo de permanência no reator de moléculas individuais de fluido escoando. Elas são obtidas pela injeção de um composto inerte (traçador) na corrente de entrada do reator em determinado instante de tempo ($t = 0$) e pela medida de sua concentração na corrente de saída em função do tempo. Dois métodos de injeção de traçador são comumente utilizados, a saber: a injeção tipo pulso ou tipo degrau. Este último tipo foi utilizado nos experimentos referenciados neste trabalho.

A injeção tipo degrau consiste na introdução de corrente de solução-traçador na alimentação do reator, a qual é mantida durante todo o experimento. A concentração de traçador na corrente efluente do reator (curva-resposta) será, conseqüentemente, sempre crescente até que se atinja a concentração aplicada. A vantagem é que a concentração do traçador na entrada do reator não precisa ser conhecida; entretanto, algumas desvantagens são observadas tais como maior gasto de material utilizado como traçador e maior dificuldade no tratamento dos dados. Um exemplo de curva resposta obtida em ensaio com injeção tipo degrau é apresentada na Figura 2.

Figura 2. Curva-resposta típica à perturbação tipo degrau(adaptado de Levenspiel, 2000).

Os mesmos dados necessários à curva anterior são usados para gerar uma curva normalizada denominada curva F, mostrada na Figura 3. Tal curva é obtida a partir da equação (1):

$$F = \frac{C(t)}{C_0} \quad (1)$$

onde $C(t)$ é a concentração de traçador na saída do reator e C_0 é a concentração de alimentação.

Figura 3. Curva F obtida a partir de ensaio com perturbação tipo degrau (adaptado de Levenspiel, 2000).

A curva F não é manipulada diretamente para obtenção dos dados hidrodinâmicos do reator. Na prática, a curva F é transformada na curva DTR, denominada curva E, gerando uma resposta idêntica à obtida quando a injeção se dá na forma de pulso. Para tanto, é necessário relacionar a concentração na saída com a de entrada. Como na injeção do tipo degrau C_0 é constante, tem-se (LEVENSPIEL, 2000):

$$C(t) = C_0 \int_0^t E(t') dt' \quad (2)$$

Dividindo-se a equação (2) por C_0 , chega-se a:

$$\frac{C(t)}{C_0} = \int_0^t E(t') dt' \quad (3)$$

Como mostrado na equação (1), o termo $C(t)/C_0$ é igual a função F, dessa forma:

$$F = \int_0^t E(t') dt' \quad (4)$$

ou

$$E = \frac{dF}{dt} \quad (5)$$

Assim, a curva E pode ser obtida a partir de ensaio com injeção tipo degrau e, com base nela, demais parâmetros de interesse podem ser obtidos.

Um primeiro parâmetro que pode ser alcançado é o tempo de residência médio experimental (ou tempo de detenção hidráulica médio), conforme:

$$t_{m1} = \frac{\int_0^{\infty} t \cdot C(t) \cdot dt}{\int_0^{\infty} C(t) \cdot dt} \quad (6)$$

ou

$$t_m = \frac{\int_0^{\infty} t.E(t).dt}{\int_0^{\infty} E(t).dt} = \int_0^{\infty} t.E(t).dt \quad (7)$$

Se a curva for descrita para valores conhecidos de tempo t_i separados por intervalos de tempo Δt_i , tem-se que:

$$t_m = \sum t_i E_i \Delta t_i \quad (8)$$

Esse valor pode ser confrontado com o tempo de detenção hidráulica médio teórico τ , definido pela razão entre o volume do reator V e a vazão volumétrica Q supostamente constante:

$$\tau = \frac{V}{Q} \quad (9)$$

A variância σ^2 da curva E (indicando a dispersão da distribuição) também é de interesse. Trata-se de um parâmetro chave aos modelos hidrodinâmicos representando o escoamento não ideal. Esse parâmetro é calculado como:

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2.E(t).dt \quad (10)$$

Sendo a curva descrita para valores conhecidos de tempo t_i separados por intervalos de tempo Δt_i , tem-se que:

$$\sigma^2 = \sum (t_i - t_m)^2 E_i \Delta t_i \quad (11)$$

A forma adimensional da função DTR é igualmente importante aos estudos hidrodinâmicos. Denominada função E_θ , ela é definida como:

$$E_\theta = t_m.E \quad (12)$$

Essa função é sempre apresentada em termos do parâmetro θ definido como a razão entre o tempo de processo e o tempo de detenção hidráulica médio:

$$\theta = \frac{t}{t_m} \quad (13)$$

A função E_θ é utilizada principalmente para que as características de escoamento em reatores de diferentes capacidades possam ser comparadas entre si. De forma análoga, utiliza-se a variância na forma adimensional como sendo:

$$\sigma_\theta^2 = \frac{\sigma^2}{(t_m)^2} \quad (14)$$

3.1.2 Identificação de anomalias do escoamento pelas curvas DTR

Existem dois modelos de reatores que são considerados os extremos da idealidade, quais sejam, o reator de mistura perfeita e o reator com escoamento pistonado. O escoamento ideal em reatores de mistura perfeita é aquele em que a concentração está uniformemente distribuída, ou seja, cada unidade de volume do tanque tem e permanece o mesmo período de tempo dentro do

reator. No reator tubular ou fluxo pistonado (*plug flow*), todos os elementos do fluido têm o mesmo tempo de detenção hidráulica (TDH), não havendo deslocamento radial no reator. Tradicionalmente a caracterização da hidrodinâmica de um reator é realizada aplicando modelos que apresentem o correspondente desvio da idealidade (LEVENSPIEL, 2000).

O padrão de escoamento em um reator determina o modelo para representar o desempenho global do sistema e que auxiliará etapas de projeto, aumento de escala, simulação e otimização. Além disso, o equacionamento descrevendo o desempenho do reator baliza rotinas de operação ou permite obter parâmetros cinéticos para alimentar novos procedimentos de projeto e aumento de escala (LEVENSPIEL, 2000).

Para descrever adequadamente reatores não ideais alguns conceitos são usados, por exemplo, a distribuição do tempo de residência (DTR) e a quantidade da mistura. Esta última se refere ao estado de agregação do material que escoar e ao grau de mistura obtida no tanque reacional, que estão relacionados aos fenômenos de escoamento ocorrendo no interior dos equipamentos. Alguns fenômenos são descritos a seguir:

- *Curto circuito* – ocorre quando o fluido escoar através do equipamento sem percorrer todo seu interior, indicando deficiência de projeto e reduzindo a eficiência do dispositivo;
- *Escoamento preferencial* – ocorre quando parte do fluido escoar através do equipamento em tempo menor que por outras partes;
- *Zonas estagnantes* – são regiões no interior do equipamento onde o fluido aprisionado apresenta pouca interação com a região ativa. A troca de matéria entre estas regiões ocorre lentamente;
- *Zonas mortas* – são regiões no interior do equipamento isoladas ou inacessíveis, onde não há interação do fluido com as regiões ativas. Sendo assim, não ocorre troca de matéria entre as zonas mortas e a fração ativa do equipamento;
- *Reciclo* – ocorre quando parte do fluido é recirculada para a entrada ou no próprio interior do equipamento;
- *Retromistura* - ocorre quando parte do fluido apresenta movimento na direção contrária ao fluxo principal.

Esses fenômenos de escoamento são comuns em reatores reais e podem ser quantificadas em estudos hidrodinâmicos com a determinação da curva DTR (LEVENSPIEL, 2000). A análise dessas anomalias tem sido realizada apenas de forma qualitativa, através da inspeção visual da curva-resposta. Ainda assim, esta análise pode fornecer informações de extrema relevância ao estudo do reator. Exemplos de curvas que representam algumas destas anomalias podem ser observados para reatores que se aproximam do tubular na Figura 4 e para escoamento de reatores que se aproximam do mistura completa na Figura 5.

Figura 4. Anomalias de escoamento em reatores que se aproximam do tubular: (a) curva em posição correta; (b) aparecimento prematuro do traçador indicando canalização ou regiões de estagnação no reator; (c) recirculação do fluido no reator; (d) traçador aparece mais tarde que o esperado; (e) canalização por dois caminhos paralelos (adaptado de LEVENSPIEL, 2000).

Figura 5. Anomalias de escoamento em reatores que se aproximam de mistura completa: (a) curva na posição correta; (b) aparecimento prematuro do traçador indicando canalização ou região de estagnação no reator; (c) recirculação do fluido no reator; (d) traçador aparece mais tarde que o esperado; (e) tempo morto da instrumentação (adaptado de LEVENSPIEL, 2000).

3.1.3 Modelos para reatores não ideais

Tradicionalmente alguns modelos são empregados para representar desvios da idealidade em reatores, os quais são obtidos a partir de informações da curva DTR. Nesses casos, o referencial de estudo é o escoamento ideal e os modelos propostos procuram representar adequadamente os desvios da idealidade nas unidades reais (LEVENSPIEL, 2000).

A seguir são apresentados os modelos de dispersão longitudinal e o de tanque de mistura completa em série (CSTR - *Continuous Stirred-Tank Reactor*). São modelos simples, uniparamétricos e bem difundidos, que podem ser aplicados para escoamento turbulento em tubos, escoamento laminar em tubos muito longos (alta relação entre comprimento e diâmetro do tubo) e escoamento em leitos empacotados (LEVENSPIEL, 2000).

- Modelo de dispersão longitudinal

O modelo de dispersão longitudinal baseia-se no escoamento tipo pistonado que ocorre em reatores tubulares ideais. Quanto maior a dispersão, mais o modelo se afasta da idealidade. De uma forma geral, os modelos de dispersão são representados com base na analogia entre a mistura e o fenômeno de difusão decorrente da hidrodinâmica de sistemas reais (CABRAL, 1995). Na Figura 6 pode-se observar um exemplo de escoamento pistonado ideal e de um escoamento disperso.

Figura 6. Representação de escoamento tubular e de escoamento tubular disperso (LEVENSPIEL, 1974).

O modelo de dispersão longitudinal baseia-se na lei de Fick unidimensional, qual seja:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (15)$$

sendo D o coeficiente de difusão molecular. Tendo em mente a direção axial (de escoamento) em um reator, tal coeficiente é substituído pelo coeficiente de dispersão longitudinal D_x de forma que a equação diferencial acima é rescrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (16)$$

Assim, o coeficiente de dispersão longitudinal é o único parâmetro do modelo. Valor nulo de D_x se refere a escoamento ideal (pistonado); caso contrário, o modelo deve levar em conta essa dispersão.

A equação (16) pode ser escrita na forma adimensional considerando o tempo adimensional Θ definido na equação (13) e a coordenada adimensional z relacionada com a posição longitudinal x :

$$\Theta = \frac{t}{t_m} = \frac{z U_0}{L} \quad (17)$$

$$z = \frac{(U_0 t + x)}{L} \quad (18)$$

Com isso chega-se a expressão:

$$\frac{\partial C}{\partial \Theta} = \left(\frac{D_x}{U_0 L} \right) \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial C}{\partial z} \quad (19)$$

em que U_0 é a velocidade (dita superficial) do fluido, L é a comprimento do reator e o adimensional $D_x/(U_0 L)$ é denominado número de dispersão (que mede a intensidade da dispersão axial). Vale notar que este adimensional corresponde ao inverso do número de Peclet para transferência de massa, $Pe_m = U_0 L/D_x$, que compara os mecanismos de transporte por convecção ($U_0 L$) e por difusão (D_x) (BIRD et al., 1960). Convém, pois, interpretar os casos limites, a saber:

$D_x/(U_0 L) \rightarrow 0$ ($Pe_m \rightarrow \infty$): dispersão axial desprezível ($D_x \ll U_0 L$) e o escoamento tende ao tipo pistonado (*plugflow*);

$D_x/(U_0 L) \rightarrow \infty$ ($Pe_m \rightarrow 0$): dispersão axial elevada ($D_x \gg U_0 L$) e o escoamento tende à mistura completa.

Para dispersões de pequena intensidade, $D_x/(U_0 L) < 0,01$, tem-se pouca variação nas curvas de concentração de traçador. A solução da equação (19) se torna mais fácil, representada pela família de curvas gaussianas normalizadas, mediante simplificações para que estas curvas independam das condições de contorno impostas ao sistema. A solução adimensional $E_{\Theta, pd}$ é dada por:

$$E_{\Theta, pd} = t_m \cdot E(t) = \frac{1}{2 \sqrt{\pi D_x/(U_0 L)}} \exp \left[-\frac{(1-\Theta)^2}{4 D_x/(U_0 L)} \right] \quad (20)$$

Vê-se que o número de dispersão (número de Peclet) é parâmetro característico dessa curva, obtido a partir da variância:

$$\sigma_{\Theta, pd}^2 = 2 \left(\frac{D_x}{U_0 L} \right) = \frac{2}{Pe_m} \quad (21)$$

A dispersão é considerada de grande intensidade quando $D_x/(U_0 L) > 0,01$. Nestes casos, o perfil do traçador injetado passa a ser modificado de forma considerável. Segundo Levenspiel (1974), as condições de contorno (ponto de injeção do traçador e sua medição) influenciam a curva $E(t)$. Tais condições podem ser de tanque aberto ou fechado (Figura 7). A condição de tanque aberto indica que o escoamento é essencialmente o mesmo dentro ou fora do domínio de solução (reator). No caso de tanque fechado, o escoamento no interior do reator difere daquele em seu exterior, este último sendo “*plug flow*” com coeficiente de dispersão igual a zero.

Figura 7. Condições de contorno para escoamento com grande dispersão (adaptado de LEVENSPIEL, 1974).

Para a condição de contorno de tanque fechado não é possível obter uma expressão analítica para a curva E_{θ} , de forma que uma solução numérica deve ser obtida. Outra forma de obter esta expressão é pela avaliação da variância:

$$\sigma_{\theta}^2 = 2 \left(\frac{D_x}{U_0 L} \right) - 2 \left[\left(\frac{D_x}{U_0 L} \right) \right]^2 \left[1 - \exp \left(-\frac{U_0 L}{D_x} \right) \right] \quad (22)$$

Já para a condição de contorno de tanque aberto, a curva E_{θ} pode ser obtida de forma analítica e é representada pela equação:

$$E_{\theta, \text{gd}} = \frac{1}{2 \sqrt{\pi \theta \left(\frac{D_x}{U_0 L} \right)}} \exp \left[-\frac{(1-\theta)^2}{4 \theta \left(\frac{D_x}{U_0 L} \right)} \right] \quad (23)$$

O número de dispersão é obtido através da expressão:

$$\sigma_{\theta, \text{gd}}^2 = 2 \left(\frac{D_x}{U_0 L} \right) + 8 \left(\frac{D_x}{U_0 L} \right)^2 \quad (24)$$

- Modelo de tanques de mistura completa em série

Amplamente utilizado para caracterizar sistemas não ideais, o modelo de tanques de mistura completa em série possui um único parâmetro. O sistema é modelado e representado por uma série de tanques de igual volume perfeitamente agitados. O número N de reatores é o único parâmetro deste modelo, definido como:

$$N = \frac{1}{\sigma_{\theta}^2} \quad (25)$$

O valor de N é então substituído na equação base do modelo, qual seja:

$$E_{\theta, \text{tmc}} = \frac{N(N\theta)^{N-1}}{(N-1)!} \exp^{-N\theta} \quad (26)$$

3.2 ESCOAMENTO EM MEIO POROSO

Por meio poroso entende-se um material constituído por uma matriz sólida com vazios interconectados. A matriz sólida pode ser rígida (situação comum) ou sofrer pouca deformação. A interconectividade dos vazios (poros) permite o escoamento do fluido através do material. A porosidade ε é definida como a fração do volume total do meio que é ocupada por espaços vazios, restando a fração $(1 - \varepsilon)$ ocupada pela fase sólida (HOLDICH, 2002). Para um meio completamente preenchido por sólidos tem-se $\varepsilon = 0$, enquanto que $\varepsilon = 1$ se aplica para escoamento em meio livre. Para um meio isotrópico, ou seja, com as mesmas características em todas as direções, a porosidade superficial (fração de área vazia em relação à área total de uma seção transversal típica) é igual a ε (BEJAN e NIELD, 1992).

Sendo Q a vazão volumétrica de um fluido escoando em um leito poroso com área de seção transversal A , a velocidade superficial U_0 é dada por (HOLDICH, 2002):

$$U_0 = \frac{Q}{A} \quad (28)$$

Em um leito empacotado, a existência de partículas em seu interior reduz a área disponível para o escoamento. Dessa forma, para garantir a continuidade do escoamento em relação a entrada, o fluido terá que se espremer através de uma área menor, com isso a chamada velocidade intersticial U deverá ser maior que a velocidade superficial U_0 . Estas duas velocidades se relacionam por meio da equação de Dupuit-Forchheimer (BEJAN e NIELD, 1992):

$$U = \frac{U_0}{\varepsilon} \quad (29)$$

Um esquema das velocidades superficial e intersticial pode ser observado na Figura 8.

Figura 8. Escoamento em meio poroso: velocidade superficial e intersticial (adaptado de HOLDICH, 2002).

A porosidade é um parâmetro simples de se medir quando as densidades do sólido e do fluido são conhecidas (HOLDICH, 2002). A porosidade de um leito empacotado depende fortemente da natureza do material usado. Grânulos de vidro incompressíveis levam a empacotamentos com $\varepsilon \sim 0.45$ enquanto leitos com partículas de alumina chegam a atingir $\varepsilon \sim 0.75$. Materiais biológicos, como células de levedura, podem formar leitos empacotados com $\varepsilon \sim 0.9$ (ou superior).

Em um meio poroso, a exemplo de problemas envolvendo escoamento, deve ser considerada a perda de carga por forças viscosas e de arraste. No caso, convém saber o regime de escoamento no interior do meio, cuja determinação é feita utilizando o número de Reynolds modificado Re_{mp} para meio poroso, dado por:

$$Re_{mp} = \frac{D_e U_s \rho}{\mu} \quad (30)$$

em que D_e é o diâmetro equivalente da partícula utilizada para o empacotamento, U é a velocidade intersticial, ρ é a densidade do fluido e μ é a sua viscosidade.

Para determinar o diâmetro equivalente, inicialmente deve-se avaliar a superfície específica da partícula a_{ep} utilizada para empacotamento do leito, dada por:

$$a_{ep} = \frac{S_p}{V_p} \quad (31)$$

em que S_p é a área superficial da partícula e V_p é o seu volume. Para leitos empacotados com partículas não esféricas, tem-se:

$$a = a_{ep} \cdot (1 - \varepsilon) \quad (32)$$

sendo a a razão entre a superfície total do leito e o seu volume. A partir desse valor, define-se o raio hidráulico r_H como:

$$r_H = \frac{\text{volume de vazios disponível para escoamento}}{\text{superfície total molhada dos sólidos}} \rightarrow r_H = \frac{\varepsilon}{a} \quad (33)$$

Por fim, o raio hidráulico se relaciona com o diâmetro equivalente D_e conforme:

$$D_e = 4 \cdot r_H \quad (34)$$

Por sua vez, o raio hidráulico possui a seguinte relação com diâmetro efetivo da partícula D_p :

$$r_H = \frac{\varepsilon}{6(1-\varepsilon)} D_p \quad (35)$$

Com isso tem-se que:

$$D_p = r_H \times \frac{6(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \quad (36)$$

Conceitualmente, o número de Reynolds representa a relação entre as forças inerciais e as forças viscosas que atuam sob o fluido. Em meios porosos, o valor limite para escoamento laminar é $Re_{mp} = 2$, a partir do qual a turbulência se intensifica (HOLDICH, 2002). Para escoamento laminar, a lei de Darcy e a equação de Carman-Kozeny são válidas, conforme as definições a seguir.

A lei de Darcy é uma equação constitutiva que descreve o fluxo de um fluido através de um meio poroso. Em 1856, Henry Darcy demonstrou que a velocidade média U_0 de um fluido escoando em regime laminar em um leito poroso é diretamente proporcional ao gradiente de pressão ΔP e inversamente proporcional à distância percorrida L :

$$U_0 = \frac{k \Delta P}{\mu L} \quad (37)$$

Na equação (37), k é o coeficiente de permeabilidade do leito, sendo um escalar para um meio isotrópico. Sabendo que a permeabilidade depende apenas das propriedades físicas do leito poroso, Carman-Kozeny calcularam-na em termos de parâmetros geométricos conforme a equação:

$$k = \frac{D_p^2 \phi^3}{180 (1-\phi)^2} \quad (38)$$

a qual fornece resultados satisfatórios para meios compostos por partículas aproximadamente esféricas, com diâmetros efetivos dentro de uma faixa estreita (no caso de partículas com diâmetros diferentes). Esta equação não leva a resultados confiáveis para partículas desviando acentuadamente de forma esférica ou com grandes distribuições de tamanho. No entanto, ela é amplamente utilizada por ser a melhor expressão disponível (BEJAN e NIELD, 1992).

3.3 MÉTODO DE BOLTZMANN EM REDE

Historicamente, o método de Boltzmann em rede (LBM – *lattice-Boltzmann method*) originou-se como aprimoramento do modelo de gás em rede (*lattice-gas cellular automata*) (McNAMARA E ZANETTI, 1988; HIGUERA e JIMÉNEZ, 1989). LBM é um método em mesoescala por não se deter ao comportamento individual das partículas e por não usar uma abordagem contínua. Possui como ideia fundamental a caracterização do efeito global das partículas constituintes, abrindo mão do conhecimento individual delas quanto à posição e à velocidade.

LBM trata o sistema sólido ou fluido como um conjunto de partículas fictícias em um espaço discreto (sítios de uma rede) igualmente fictício. Essas partículas se deslocam de um sítio a outro ao longo de direções pré-definidas (conexões da rede), durante intervalos discretos de tempo. Ao chegarem a estes sítios, elas colidem entre si. Esses dois processos são denominados propagação (“*streaming*”) e colisão (“*collision*”), respectivamente.

Na etapa de colisão as partículas são reordenadas nos sítios, conservando-se tanto em número (massa) como em quantidade de movimento. Na etapa de propagação, responsável por transmitir pela rede as informações sobre a geometria e as condições de contorno, as partículas vão de um sítio ao vizinho através das conexões de rede, de acordo com suas velocidades. Submetendo tal dinâmica

de partículas aos princípios físicos de conservação, o comportamento macroscópico do sistema é simulado de forma adequada (SANTOS, 2000).

De acordo com a aplicação, o LBM utiliza diferentes redes, as quais são representadas pela notação $DnQm$, em que n indica o número de dimensões do problema e m se refere ao número (modelo) de velocidades da rede (LEAL, 2011). No presente trabalho, será usada a rede D2Q9 por ser adequada à simulação de escoamentos, cuja estrutura básica é mostrada na Figura 9.

Figura 9. Estrutura básica da rede D2Q9 para simular escoamentos via LBM.

Este modelo é descrito por oito vetores não nulos de velocidade, com as quais as partículas podem migrar para sítios vizinhos. Partindo do sítio central, as partículas podem migrar para cada vértice ou para cada ponto médio dos quadrados vizinhos. A nona velocidade refere-se às partículas que permanecem em repouso (velocidade nula) no sítio central (LEAL, 2011).

A quantidade de partículas que se deslocam ao longo de uma dada conexão de rede é dada pela função distribuição de partículas $f = f(\vec{r}, \vec{c}, t)$ (LEAL, 2011). Em um dado instante t , tal função fornece a probabilidade de encontrar partículas no entorno da posição $\vec{r}$ (ou seja, entre $\vec{r}$ e $\vec{r} + d\vec{r}$) com velocidades entre $\vec{c}$ e $\vec{c} + d\vec{c}$. Conhecida a função f , grandezas macroscópicas como densidade ρ , velocidade de escoamento $\vec{v}$ e energia interna u podem ser determinadas (VAN DER SMAN, 2007):

$$\rho(\vec{r}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{c}, t) d\vec{c} \quad (40)$$

$$\rho(\vec{r}, t) \vec{v}(\vec{r}, t) = \int \vec{c} f(\vec{r}, \vec{c}, t) d\vec{c} \quad (41)$$

$$\rho(\vec{r}, t) u(\vec{r}, t) = \int \frac{1}{2} v_0^2 f(\vec{r}, \vec{c}, t) d\vec{c} \quad (42)$$

em que $v_0 = \|\vec{v}_0\|$ é o módulo da velocidade peculiar definida como a velocidade $\vec{c}$ da partícula em relação à velocidade de escoamento $\vec{v}$, isto é, $\vec{v}_0 = \vec{c} - \vec{v}$ (MOHAMAD, 2011). Outra grandeza que pode ser avaliada é a pressão p conforme:

$$p = \rho c_s^2, \quad \rho(\vec{r}, t) [c_s^2 \mathbf{I} + \vec{v}(\vec{r}, t) \vec{v}(\vec{r}, t)] = \int \vec{c} \vec{c} f(\vec{r}, \vec{c}, t) d\vec{c} \quad (43)$$

sendo c_s a velocidade do som (de um gás ideal na rede) e $\mathbf{I}$ a matriz identidade.

A função de distribuição de partículas é regida pela equação de transporte de Boltzmann:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} f + \frac{\partial f}{\partial \vec{c}} \cdot \frac{\vec{F}}{m} = \Omega(f) \quad (44)$$

sendo m a massa das partículas sujeitas à ação de uma força externa $\vec{F}$. O chamado operador colisão

$\Omega = \Omega(f)$ será discutido logo adiante. Na ausência de forças externas ($\vec{F} = 0$), a equação anterior se

simplifica para:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} f = \Omega(f) \quad (45)$$

A solução desta equação não é trivial uma vez que $\Omega = \Omega(f)$. Visando simplificar o operador colisão, Bhatnagar, Gross e Krook (1954) introduziram uma aproximação, atualmente denominada BGK e bastante utilizada, pela qual o operador colisão é linearizado como:

$$\Omega(f) = \frac{f^{eq} - f}{\Delta t_{relax}} \quad (46)$$

em que Δt_{relax} é o tempo de relaxação e f^{eq} é a função de distribuição de partículas no equilíbrio

(QIAN, D'HUMIÈRES e LALLEMAND, 1992). Com isso, a equação (45) torna-se:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} f = \frac{f^{eq} - f}{\Delta t_{relax}} \quad (47)$$

A função distribuição de equilíbrio é calculada a partir das velocidades e densidades iniciais. Para simular escoamentos, tem-se a seguinte expressão (SUCCI, 2001):

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[1 + \frac{3}{c_i^2} (\vec{c}_i \cdot \vec{v}) + \frac{9}{2c_i^2} (\vec{c}_i \cdot \vec{v})^2 - \frac{3}{2c_i^2} (\vec{v} \cdot \vec{v}) \right] \quad (48)$$

sendo i a direção de propagação ao longo da rede e w_i os fatores de ponderação sujeitos à condição

de normalização $\sum_i w_i = 1$. Conforme a rede usada, a equação (48) evoca diferentes velocidades c_i e

fatores de ponderação w_i . Para a rede D2Q9 tem-se (WOLF-GLADROW, 2000):

$$c_0 = 0 \quad i = 0 \quad (49)$$

$$c_i = c \left[\cos\left(\frac{(i-1)\pi}{2}\right), \sin\left(\frac{(i-1)\pi}{2}\right) \right] \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (50)$$

$$c_i = \sqrt{2} c \left[\cos\left(\frac{(2i-1)\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{(2i-1)\pi}{4}\right) \right] \quad i = 5, 6, 7, 8 \quad (51)$$

$$w_i = \frac{4}{9} \quad i = 0 \quad (52)$$

$$w_i = \frac{1}{9} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (53)$$

$$w_i = \frac{1}{36} \quad i = 5, 6, 7, 8 \quad (54)$$

Em problemas de escoamento, as condições de contorno definem o modo como as partículas de fluido interagem com as paredes como também como o escoamento se comporta junto à(s) entrada(s) e à(s) saída(s) (LEAL, 2011). Em simulação LBM, a interação partícula-parede pode ser implementada por meio da chamada técnica *bounce-back*, a qual foi adotada no presente trabalho. Esta regra procura retratar o comportamento do fluido na imediação de objetos sólidos (obstáculos e paredes). Essencialmente, define-se que as partículas de fluido sejam refletidas, junto à interface, para os sítios de onde vieram com igual grandeza e sentidos opostos, como ilustra a Figura 10. A correspondente implementação computacional é discutida e apresentada em Mohamad (2011).

Figura 10. Descrição esquemática da técnica *bounce-back*, adaptado de Ziegler (1993).

4 METODOLOGIA

4.1 ETAPA EXPERIMENTAL

Os dados experimentais usados para validar as simulações foram obtidos a partir de pesquisas conduzidas junto ao Departamento de Hidráulica e Saneamento, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo. Em particular, foi estudado um biorreator anaeróbico de leito fixo para a etapa acidogênica do tratamento de vinhaça e os ensaios hidrodinâmicos são apresentados a seguir como foram descritos por Ferraz (2013).

4.1.1 Reator

Trata-se de um reator anaeróbico de leito empacotado (APBR – *Anaerobic Packed Bed Reactor*) construído em tubos de acrílico com diâmetro interno de 80 mm, diâmetro externo de 88 mm e 750 mm de comprimento. O reator possui os seguintes compartimentos: câmara de alimentação (C1 = 100 mm – 0,5L), câmara do leito (C2 = 500 mm – 2,5 L), câmara de coleta do efluente (C3 = 100 mm – 0,5 L), e câmara de coleta de gás (C4 = 50 mm – 0,25L), perfazendo um volume total de 3,5 L, excluindo-se o volume da câmara C4. O leito foi separado por telas de aço 24 inoxidável, com perfurações de 2 mm de diâmetro (Figura 11). A entrada do efluente ocorre por um tubo com 20 mm de diâmetro interno. O reator com suas respectivas dimensões pode ser observado na Figura 12.

Figura 11. Imagem ilustrativa da tela utilizada para separação do leito

O leito foi empacotado com diversos materiais usados para imobilização da biomassa. Porém, de acordo com Ferraz (2013), polietileno de baixa densidade forneceu melhor resultado com relação à remoção de matéria orgânica carbonácea e nutrientes, à estabilidade operacional e à produção de biogás. As partículas de polietileno de baixa densidade utilizadas para o empacotamento possuíam forma aproximadamente cilíndrica com comprimento igual a 5 mm e diâmetro de 4,5 mm, como mostra a Figura 13. Após o empacotamento do reator, determinou-se a porosidade máxima e mínima do leito.

Figura 12. Reator acidogênico de leito empacotado (APBR) usado nos experimentos. **A.** Características dimensionais do reator, em milímetro. **B.** Imagem ilustrativa do reator (adaptado de FERRAZ, 2013).

Figura 13. Cilindros de polietileno de baixa densidade utilizados para o empacotamento do leito.

4.1.2 Ensaios hidrodinâmicos

Os ensaios hidrodinâmicos foram conduzidos no início e no final da operação, ou seja, sem e com biomassa aderida, como forma de obter o tempo de detenção hidráulico real t_m e de avaliar a mudança no comportamento do escoamento. Foram analisados dois TDHs teóricos, $\tau = 12$ horas e $\tau = 24$ horas. As vazões para atender a estes TDHs foram avaliadas a partir da equação (9), considerando o volume útil do reator menor que o volume total devido ao espaço ocupado pelas partículas utilizadas para o empacotamento.

Para os ensaios hidrodinâmicos, o reator foi preenchido com água de abastecimento e em seguida alimentado com solução-traçador (10 mg/L de NaCl) na forma degrau. O efluente do reator foi monitorado pelo período equivalente a três vezes o TDH teórico, em intervalos de tempo de 162 e

324 segundos, para os TDHs teóricos de 12 e 24 horas, respectivamente. Esse monitoramento foi realizado no ponto de coleta indicado na Figura 14, visando determinar a curva C (concentração de traçador x tempo). Como o reator analisado era termofílico, tanto a solução-traçador como a água usada para preencher o reator estavam a 55°C (temperatura constante de operação do reator).

Figura 14. Esquema do reator APBR submetido aos ensaios hidrodinâmicos.

4.2 CARACTERIZAÇÃO TRADICIONAL DO ESCOAMENTO NÃO IDEAL EM REATORES

4.2.1 Tratamento dos dados experimentais

A partir dos valores usados para a curva C, obteve-se a curva normalizada F a partir da equação (1), a qual foi manipulada para obter a curva E via equação (5) a fim de fornecer a distribuição do tempo de residência. Mediante os valores de E, obteve-se o tempo de detenção hidráulica médio experimental tm_{exp} através da equação (8). Esses valores foram comparados com os TDHs teóricos. Determinou-se a variância da curva E utilizando a equação (11).

Por sua vez, os valores adimensionais da curva DTR (E_0), do tempo (Θ) e da variância (σ_0^2) foram determinados via equações (12), (13) e (14), respectivamente. Estes valores foram usados para comparar os dados experimentais com aqueles sugeridos pelos modelos para reatores não ideais e com aqueles obtidos via simulação, conforme discussão no próximo capítulo.

4.2.2 Modelos para reatores não ideais

- Modelo de dispersão longitudinal

A partir da variância adimensional da curva E, obteve-se o número de dispersão por meio da equação (21). Este número foi empregado na equação (20) para determinar os valores $E_{\Theta, pd}$ visando a devida comparação do modelo de dispersão de pequena intensidade com os valores experimentais. Em seguida, o modelo de dispersão foi ajustado sob a hipótese de grande intensidade com condição de contorno de tanque aberto. A partir da variância adimensional da curva E, obteve-se o número de dispersão via equação (24). Este número foi empregado na equação (23) para determinar os valores $E_{\Theta, gd}$ visando a comparação com os valores obtidos experimentalmente.

- Modelo de tanque de mistura completa em série

Para o ajuste deste modelo, calculou-se o número de reatores N a partir da equação (25), o qual foi usado na equação (26) para determinar os valores $E_{\Theta, tmc}$ a serem comparados com os dados experimentais.

4.3 CARACTERIZAÇÃO DO ESCOAMENTO EM MEIO POROSO

Para simular numericamente a operação do reator APBR, foi usado o módulo *Chemical Species Transport* (transporte de espécies químicas) do software *COMSOL Multiphysics*®. Especificamente, foi evocado o modelo *Transport of Diluted Species* (transporte de espécies diluídas) presente no pacote *Reacting Flow in Porous Media* (escoamento com reação em meio poroso), segundo uma abordagem em duas dimensões (2D) e regime transiente.

Para tanto, desenhou-se no próprio *COMSOL*® a geometria do sistema conforme a Figura 12, com adaptações necessárias a um modelo 2D. Para a devida representação da tela de distribuição (Figura 11), foi calculado o número necessário de perfurações em um corte diametral, mantendo-se o diâmetro de 2 mm destas perfurações no modelo computacional. Junto com a representação desta tela de distribuição (em detalhe), a Figura 15 mostra a representação 2D do reator simulado.

Foram avaliados parâmetros do modelo de escoamento em meio poroso e de caracterização da solução-traçador. Foram inicialmente empregadas as porosidades apresentadas no item 4.1.1, que foram posteriormente ajustadas para que os valores tm_{sim} simulados coincidisse o máximo possível com os valores experimentais. As equações (30) – (36) foram usadas para verificar o tipo de escoamento e seus resultados alimentaram a equação (38) determinando o coeficiente de permeabilidade do leito, necessário para as simulações.

Figura 15. Representação geométrica 2D do reator via software COMSOL Multiphysics® (em detalhe: representação 2D da tela de distribuição do escoamento).

Os valores da viscosidade e densidade da água foram pesquisados para a temperatura de operação do reator (55°C). A concentração molar M da solução-traçador foi calculada como:

$$M = \frac{C}{mm} \quad (55)$$

sendo C a concentração da solução em base mássica e mm a massa molar do cloreto de sódio. Para esta molaridade M , a difusividade do cloreto de sódio na água foi pesquisada para 55°C.

Como condição inicial, impôs-se que o reator estava preenchido com água de abastecimento. Como condições de contorno, considerou-se não escorregamento e impermeabilidade (fluxo nulo de espécie) junto às paredes, além de perfil de velocidade uniforme e concentração M na entrada do reator e pressão atmosférica na saída.

Determinou-se a velocidade superficial U_0 a partir da vazão volumétrica Q conforme a equação (28). Considerando que o modelo está em 2D e que a entrada do fluido se deu efetivamente por um tubo de alimentação, aplicou-se a seguinte relação:

$$U_0 \times D_{\text{reator}} = v_s \times D_{\text{tubo}} \quad (56)$$

Nesta equação, D_{reator} é o diâmetro interno do reator (câmara C1), v_s é a velocidade do fluido no tubo de alimentação (que antecede a câmara C1) e D_{tubo} é o diâmetro deste tubo. A velocidade v_s é imposta ao perfil de entrada necessário à condição de contorno.

Para todo e qualquer instante do processo, as simulações fornecem como resposta perfis de velocidade e de concentração em qualquer posição do reator. Como o objetivo principal é confrontar os valores simulados com os dados experimentais, foi monitorada a concentração de traçador na saída do reator ao longo do processo. As simulações foram realizadas para vazão de 4,6 L/dia (TDH teórico de 12 horas), porosidade intermediária de 0,505 e permeabilidade igual a $7,59 \times 10^{-8} \text{ m}^{-1}$.

Foi realizada a análise de sensibilidade de malha computacional a fim de verificar a quantidade de elementos finitos suficiente para simular o reator, mediante um compromisso entre precisão dos resultados e esforço computacional. Dentre as malhas pré-definidas pelo COMSOL Multiphysics® foram testadas as seguintes: *extremely coarse*, *extra coarse*, *coarser*, *normal*, *fine* e *finer* (em respeito à nomenclatura utilizada pelo software).

Em seguida, tendo em mente a comparação com os dados experimentais, foram avaliados três perfis de concentração simulados junto à saída do reator, a saber: perfil médio através da integral de linha em toda a saída, perfil referente à $r = 0$ (linha de centro) e perfil em $r = R/2 = D/4$.

Para simulações subsequentes do biorreator, estes estudos preliminares balizaram a escolha da malha mais adequada e do perfil de concentração junto à saída para comparação com os dados experimentais. Tanto para o início quanto para o final da operação foram adotadas porosidade ϵ e permeabilidade k tais que as simulações sugerissem valores tm_{sim} próximos dos experimentais.

4.4 SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO VIA MÉTODO DE BOLZTMANN EM REDE (LBM)

A tarefa do método LBM é resolver numericamente a equação de transporte de Boltzmann. Especificamente, a equação (47) é discretizada segundo a estrutura básica da rede fictícia, resultando em equações algébricas cuja evolução é feita em duas etapas, em consonância com a dinâmica das partículas. Na etapa de colisão, responsável pela evolução no tempo, as funções de distribuição de partículas são atualizadas (do instante t ao instante $t + \Delta t$) em todos os sítios da rede conforme:

$$f_k(x, t + \Delta t) = [1 - \omega]f_k(x, t) + f_k^{eq}(x, t) \quad (57)$$

Sendo $\omega = \Delta t / \Delta t_{relax}$ o chamado parâmetro de relaxação que surge no processo de discretização. Na etapa de propagação, referente à evolução no espaço, os resultados das colisões são transportados aos sítios vizinhos conforme:

$$f_k(x + \Delta x, t + \Delta t) = f_k(x, t + \Delta t) \quad (58)$$

A conexão entre o escoamento macroscópico e a dinâmica das partículas se dá via função de distribuição de equilíbrio f^{eq} e via parâmetro de relaxação. Enquanto a função f^{eq} é definida conforme a natureza do fenômeno de transporte (massa, energia ou quantidade de movimento), o parâmetro

ω estabelece o respectivo coeficiente de transporte. Para escoamentos, f^{eq} é dada pela equação (48) enquanto o parâmetro ω se relaciona com a viscosidade cinemática $\nu = \mu/\rho$ (MOHAMAD, 2011):

$$\frac{1}{\omega} = \frac{1}{2} + \frac{3\nu\Delta t}{(\Delta x)^2} \quad (59)$$

Como desenvolvimento inicial quanto à simulação LBM da hidrodinâmica do biorreator, foi implementado o código computacional para simular escoamento incompressível no interior de canal2D em regime permanente. Foi usada a rede D2Q9e conceitualmente o simulador LBM segue as orientações contidas em Mohamad (2011) quanto à implementação das etapas de colisão e propagação bem como quanto à imposição das condições iniciais e de contorno. Programado em linguagem FORTRAN padrão 90/95, o simulador é capaz de gerar perfis de velocidade para diferentes posições do canal, sendo que o correspondente código computacional é apresentado no APÊNDICE A.

Cabe aqui mencionar a realização de treinamento preliminar em simulação LBM para fins de familiarização ao método. Foram simulados processos envolvendo biosistemas agroindustriais, cujos resultados foram publicados em capítulo de livro internacional (OKIYAMA e RABI, 2013), além de trabalhos completos em congressos. Neste sentido, o presente projeto de pesquisa colaborou com a linha de pesquisa em simulação LBM iniciada pelo orientador (RABI, 2011).

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 ETAPA EXPERIMENTAL

Após o empacotamento do leito, a porosidade medida variou entre 0,47 e 0,54. Sabendo-se que o volume total do leito é igual a 2,5 litros e considerando uma porosidade intermediária de 0,52, o volume útil total do reator é de 2,3 litros. Para TDHs teóricos de 12 e 24 horas, as vazões resultam em 4,6 L/dia e 2,3 L/dia, respectivamente. Os resultados obtidos podem ser observados na Figura 16 (TDH = 12 horas) e na Figura 17 (TDH = 24 horas). Nestas e em figuras subsequentes, dados discretos (experimentais ou simulados) são representados por linhas contínuas para fins de visualização.

Figura 16. Concentração de traçador na saída do reator: ensaios hidrodinâmicos no início e no final da operação para vazão de 4,6 L/dia.

Pode-se observar que as Figuras 16 e 17 são típicas de injeção tipo degrau na medida em que a concentração máxima do traçador atinge o valor de entrada, após determinado tempo de operação. Na Figura 16, a curva obtida no início e no final da operação são praticamente coincidentes, o que indica que o crescimento da biomassa não afetou de forma significativa a hidrodinâmica do reator. O mesmo não é válido para a Figura 17 pois a curva obtida ao final da operação apresenta picos, que atingem valores superiores à concentração na entrada do reator. Esta curva indica que, para vazão de 2,3 L/dia, o traçador pode ficar acumulado na biomassa aderida ao material suporte provocando alterações nas respostas dos ensaios hidrodinâmica do reator.

Figura 17. Concentração de traçador na saída do reator: ensaios hidrodinâmicos no início e no final da operação para vazão de 2,3 L/dia.

5.2 CARACTERIZAÇÃO TRADICIONAL DO ESCOAMENTO NÃO IDEAL EM REATORES

5.2.1 Tratamento dos dados experimentais

Com os valores da concentração na saída e sendo conhecida a concentração do traçador, foi possível a obtenção da curva F , que nada mais é do que a curva normalizada da concentração. Tais curvas podem ser observadas na Figura 18 (reator com TDH teórico de 12 horas $\Leftrightarrow$ vazão 4,6 L/dia) e na Figura 19 (reator com TDH teórico de 24 horas $\Leftrightarrow$ vazão 2,3 L/dia).

A partir das curvas F , foram obtidas as respectivas curvas E (Figura 20), representando a distribuição do tempo de residência. A manipulação das curvas E forneceu os valores de tempo de detenção hidráulica médio experimental $t_{m_{exp}}$ para as condições estudadas. Para TDH teórico de 12 horas, foram obtidos $t_{m_{exp}} = 11,41$ horas para o início e $t_{m_{exp}} = 11,35$ horas para o fim da operação. Para TDH 24 horas, foram obtidos $t_{m_{exp}} = 24,04$ horas para o início e $t_{m_{exp}} = 33,57$ horas para o fim. Exceto para este último cenário (final da operação e vazão de 2,3 L/dia), nota-se pouca diferença entre TDH teórico e experimental. Isto se deve à adequação do valor atribuído à porosidade.

Os valores TDH experimentais permitem calcular o volume útil real do reator. Para operação com 4,6 L/dia no início da operação, o volume útil real foi de 2,2 litros, reduzindo-se para 2,175 litros no final da operação. Tal redução se deve ao acúmulo de biomassa no interior do reator.

Figura 18. Curva normalizada F da concentração de traçador na saída do reator: início e final da operação para vazão de 4,6 L/dia.

Figura 19. Curva normalizada F da concentração de traçador na saída do reator: início e final da operação para vazão de 2,3 L/dia.

Na Figura 21, a curva E para TDH teórico de 24 horas no final da operação apresenta diversos picos ao contrário das demais curvas (com único pico). Além disso, o tempo $t_{m_{exp}}$ experimentalmente obtido a esta curva resultou muito maior que o valor teórico. É possível que a redução da porosidade (causada pelo crescimento do biofilme nos interstícios) esteja associada à formação de regiões de acúmulo do traçador. Na medida em que tal acúmulo reduz a transferência de massa entre as zonas estagnadas e os principais canais de circulação, tem-se um aumento do tempo de residência médio. Adicionalmente, a existência de vários picos pode estar relacionada à recirculação interna do fluido.

Figura 20. Distribuição do tempo de detenção hidráulico para TDH teórico de 12 horas.

Figura 21. Distribuição do tempo de detenção hidráulico para TDH teórico de 24 horas.

Para os cenários em que o TDH teórico se aproximou do valor experimental, as variâncias das curvas $E(t)$ resultaram pequenas, quais sejam, $1,47 \text{ s}^2$ e $0,71 \text{ s}^2$ para o início e fim da operação com vazão de $4,6 \text{ L/dia}$, respectivamente, e $14,8 \text{ s}^2$ para o início da operação com vazão de $2,3 \text{ L/dia}$. Para o final da operação com vazão de $2,3 \text{ L/dia}$, a variância mostrou-se muito elevada 211 s^2 , resultado da divergência entre o TDH teórico e o experimental.

Em seguida, foram obtidas as curvas adimensionais E_0 em função de Θ , para as duas vazões testadas, no início e final da operação. As Figura 22 e 23 apresentam os correspondentes resultados, comparados adiante com as curvas sugeridas pelos modelos e aquelas obtidas via simulação CFD.

Figura 22. Distribuição do tempo de residência adimensional: vazão de 4,6 L/dia.

Figura 23. Distribuição do tempo de residência adimensional: vazão de 2,3 L/dia.

5.2.2 Modelos para reatores não ideais

Obtido a partir da variância adimensional σ_θ^2 , cada modelo tem um parâmetro característico para verificar de qual idealização o reator real (não ideal) se aproxima. Para os modelos de dispersão longitudinal de pequena ou de grande intensidade, trata-se do adimensional $D_x/(U_0L)$ referente à dispersão enquanto o modelo de tanques de mistura completa em série usa o número N de reatores. Estes parâmetros são apresentados na Tabela 1 para cada cenário de operação investigado.

Tabela 1. Variância adimensional e parâmetros de caracterização dos modelos de reatores não ideais.

Vazão e etapa da operação	Variância adimensional (σ_{θ}^2)	$D_x/(U_0L)$ pequena intensidade	$D_x/(U_0L)$ grande intensidade	N-CSTR em série
4,6 L/dia, início da operação	0.0113	0.0057	0.0054	89
4,6 L/dia, final da operação	0.0055	0.0028	0.0026	181
2,3 L/dia, início da operação	0.0256	0.0128	0.0119	40
2,3 L/dia, final da operação	0.1873	0.0936	0.0726	6

Os valores $D_x/(U_0L)$ resultaram inferiores a 0,01, tanto para o modelo de dispersão de pequena intensidade quanto para o de grande intensidade, indicando que a dispersão da curva resposta é pequena e simétrica (figuras a seguir). Escoamento no interior de reatores com número de dispersão desprezível, $D_x/(U_0L) \rightarrow 0$, tende ao regime tubular ideal. Isto é confirmado na medida em que foram obtidos valores muito elevados de N , tanto para o início quanto para o fim da operação, indicando assim desvio do padrão ideal de mistura completa e tendência a escoamento *plug flow*.

Uma vez calculados os parâmetros de caracterização, obteve-se a curva E_{θ} para cada modelo, para ser devidamente confrontada com a curva E_{θ} experimental. Para o reator operando com vazão de 4,6 L/dia, as Figuras 24 e 25 comparam as curvas E_{θ} respectivamente no início e no final da operação. Por inspeção visual, nenhum modelo se ajusta perfeitamente. Relativamente, os modelos de dispersão longitudinal são mais adequados do que o modelo CSTR em série (o qual sequer pôde ser visualizado na Figura 25).

Figura 24. Modelos para reatores não ideais ajustados ao reator APBR: início da operação, vazão de 4,6 L/dia.

Figura 25. Modelos para reatores não ideais ajustados ao reator APBR: final da operação, vazão de 4,6 L/dia.

Do ponto vista quantitativo, procurou-se estabelecer uma relação linear entre os valores de tempo de residência adimensional experimentais e aqueles sugeridos através dos modelos. A Figura 26 apresenta graficamente as relações obtidas junto com os coeficientes de determinação (R^2). Como esperado, os maiores valores de R^2 se referem ao modelo de dispersão longitudinal, sendo o menor valor aquele referente ao modelo de tanque de mistura completa para o início da operação (o valor para o final da operação não pôde ser calculado devido ao elevado número N).

De forma análoga, foram obtidas as curva E_θ segundo cada modelo para o reator operando com vazão de 2,3 L/dia, apresentadas nas Figuras 27 e 28 junto com os valores E_θ experimentais. Ao contrário da operação com 4,6 L/dia, os valores $D_x/(U_0L)$ referentes ao início da operação resultaram levemente superiores a 0,01, tanto para o modelo de dispersão de pequena como para o de grande intensidade. Isto indica que a curva resposta não é simétrica, como pode ser observado na Figura 27.

Ainda com relação ao início da operação, o número N de tanques em série resultou bastante elevado (Tabela 1); com isso, os modelos propostos concordam que o escoamento no interior do reator tende ao tipo pistonado ideal. Entretanto, a análise do reator com 2,3 L/dia de vazão ao final da operação é mais complicada visto que existem muitos picos, fazendo com que nenhum modelo se mostrasse devidamente adequado.

Figura 26. Coeficiente de determinação (R^2) para linearização dos gráficos confrontando DTR normalizados dos modelos com valores DTR adimensionais obtidos experimentalmente para reator APBR com vazão de 4,6 L/dia: **a.** modelo de dispersão de pequena intensidade para o início da operação, **b.** modelo de dispersão de grande intensidade para o início da operação, **c.** modelo de tanque de mistura completa para o início da operação, **d.** modelo de dispersão de pequena intensidade para o final da operação, **e.** modelo de dispersão de grande intensidade para o final da operação.

Novamente do ponto vista quantitativo, procurou-se estabelecer uma relação linear entre os valores de tempo de residência adimensional experimentais e aqueles sugeridos pelos modelos. A Figura 29 apresenta graficamente as relações obtidas junto com os coeficientes de determinação (R^2). Como esperado, para o início de operação o melhor coeficiente de determinação se refere ao modelo de dispersão de grande intensidade, mesmo assim indicando discrepância entre os dados experimentais e os obtidos pelo ajuste. Com relação ao final da operação, os valores muito pequenos destes coeficiente sugerem que os modelos não conseguem representar a hidrodinâmica do reator com elevada quantidade de biomassa aderida ao material suporte usado para o empacotamento

Figura 27. Modelos para reatores não ideais ajustados ao reator APBR: início da operação, vazão de 2,3 L/dia.

Figura 28. Modelos para reatores não ideais ajustados ao reator APBR: final da operação, vazão de 2,3 L/dia.

Independentemente da condição de operação analisada, os modelos para reator não ideal não representaram de forma adequada o reator APBR estudado. Isso pode ter ocorrido em função do traçador utilizado para a realização dos ensaios hidro dinâmicos, que não sendo devidamente adequado não permitiu que os modelos uniparamétricos se ajustassem adequadamente

Figura 29. Coeficiente de determinação (R^2) para linearização dos gráficos confrontando DTR normalizados dos modelos com valores DTR adimensionais obtidos experimentalmente para reator APBR com vazão de 2,3 L/dia: **a.** modelo de dispersão de pequena intensidade para o início da operação, **b.** modelo de dispersão de grande intensidade para o início da operação, **c.** modelo de tanque de mistura completa para o início da operação, **d.** modelo de dispersão de pequena intensidade para o final da operação, **e.** modelo de dispersão de grande intensidade para o final da operação, **f.** modelo de tanque de mistura completa para o final da operação.

5.3 SIMULAÇÃO CFD DO ESCOAMENTO EM MEIO POROSO

A Tabela 2 resume os parâmetros necessários às simulações CFD (via *COMSOL Multiphysics*®) do reator. Dentre eles, alguns dependem apenas das dimensões das partículas utilizadas para o empacotamento, outros dependem também da porosidade do leito, de modo que valores comuns às porosidades simuladas ($\varepsilon = 0,47$ e $\varepsilon = 0,54$) encontram-se em células mescladas.

A partir destes parâmetros, foi calculado o número de Reynolds modificado Re_{mp} via equação (30), com os resultados mostrados na Tabela 3. Como em todos os cenários tem-se $Re_{mp} < 2$, limiar indicado por Holdich (2002) para turbulência significativa, tem-se que o escoamento no interior do reator ocorre de forma laminar, condição necessária para não haver arraste de material biológico.

Tabela 2. Parâmetros utilizados para simulação CFD do biorreator.

Parâmetro	Valor	
	$\varepsilon = 0,47$	$\varepsilon = 0,54$
Área superficial da partícula (S_p)	$1,02 \times 10^{-4} \text{ m}^2$	
Volume da partícula (V_p)	$7,95 \times 10^{-8} \text{ m}^3$	
Superfície específica da partícula (a_{ep})	1289 m^{-1}	
Razão entre a superfície total do leito e o volume do leito (a)	683 m^{-1}	541 m^{-1}
Raio hidráulico (r_H)	$6,88 \times 10^{-4} \text{ m}$	$8,49 \times 10^{-4} \text{ m}$
Diâmetro equivalente da partícula (D_e)	$0,00275 \text{ m}$	$0,00340$
Diâmetro efetivo da partícula (D_p)	$0,00466 \text{ m}$	
Permeabilidade (k)	$5,34 \times 10^{-8} \text{ m}^2$	$1,08 \times 10^{-7} \text{ m}^2$

Tabela 3. Número de Reynolds modificado Re_{mp} para escoamento no biorreator sob diferentes condições.

Condições de operação do biorreator	Re_{mp}
vazão= 4,6 L/dia, porosidade = 0,47	0,688
vazão = 4,6 L/dia, porosidade =0,54	0,599
vazão = 2,3 L/dia, porosidade = 0,47	0,344
vazão = 2,3 L/dia ,porosidade = 0,54	0,300

Foi calculada a concentração molar da solução-traçador e para 55°C (temperatura de operação do reator) foram pesquisadas a difusividade do cloreto de sódio na água, a densidade e a viscosidade dinâmica da água, como constam na Tabela 4. Sendo 20 mm o diâmetro do tubo de injeção, as velocidades de escoamento (supostamente uniformes no tubo) resultaram em 4,24 m/s e 2,12 m/s para as vazões volumétricas de 4,6 L/dia e 2,3 L/dia, respectivamente.

Tabela 4. Propriedades da água e da solução-traçador a 55°C (temperatura de operação do reator).

Parâmetro	Valor
Densidade da água	986 kg/m^3
Viscosidade dinâmica da água	$5,01 \times 10^{-4} \text{ Pa.s}$
Concentração da solução traçador	$0,171 \text{ mol/m}^3$
Difusividade do NaClem água	$1.88 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$

Fonte: Fox e McDonald (2001).

Uma vez determinados os parâmetros necessários às simulações CFD, realizou-se a análise de sensibilidade de malha computacional. Para tanto, foi considerado o reator operando com vazão de

4,6 L/dia e porosidade de 0,47. As malhas testadas são mostradas na Figura 30, em que se observa o aumento gradativo do número de elementos finitos e consequente redução em seus tamanhos. Vê-se também maior concentração de elementos nas proximidades das paredes porque ali os gradientes são mais intensos, sendo necessário que a malha esteja mais refinada.

Foi monitorada a concentração do traçador no ponto central (isto é, em $r = 0$) junto à saída do reator, para o instante $t = 45.000$ s (12,5 horas). A Figura 31 apresenta a evolução da concentração em função do número de elementos da malha. Vê-se que o valor assintótico torna-se mais evidente a partir da malha (*normal*) com 12.352 elementos, a qual foi escolhida para simulações subsequentes.

Figura 30. Malhas computacionais testadas para simular o reator APBR: a. *extremely coarse* (4146 elementos), b. *extra coarse* (4.989 elementos), c. *coarser* (5.972 elementos), d. *coarse* (9.299 elementos), e. *normal* (12.352 elementos), f. *fine* (16.494 elementos), g. *finer* (27.811 elementos).

Em seguida, foram realizadas simulações a fim de identificar a forma adequada para monitorar a concentração de traçador, tendo em mente a representação do tubo de coleta real (3D) em um modelo computacional 2D. Foram testadas as seguintes alternativas: valor médio obtido pela integral da concentração na saída, valor em $r = 0$ e valor em $r = R/2$. Os resultados são vistos na Figura 32.

Figura 31. Análise de sensibilidade de malha: concentração do traçador no ponto central na saída do reator $t = 45.000$ s (12,5 horas) em função do número de elementos da malha.

Figura 32. Comparação entre as alternativas propostas para representar o tubo de coleta real (3D) no modelo computacional 2D: valor médio obtido pela integral da concentração na saída, valor em $r = 0$ e valor em $r = R/2$.

Dentre as alternativas testadas, os resultados na Figura 32 sugerem que a curva simulada em $r = 0$ (eixo central do reator) mais se assemelha ao comportamento real do tubo de coleta, na medida em que atinge o patamar da concentração inicial da solução-traçador tão rápido quanto os dados experimentais. Assim, nas simulações subsequentes, os valores experimentais referentes ao tubo de coleta foram comparados com os valores simulados nesta posição do modelo computacional.

A concentração na saída simulada para cada limite de porosidade, $\varepsilon = 0,47$ e $\varepsilon = 0,54$, é comparada com os dados experimentais para o reator operando com vazão de 4,6 L/dia (Figura 33) e 2,3 L/dia (Figura 34). Com base nestas concentrações simuladas, foram obtidos os valores F conforme o item 3.1.1; a partir destes valores, foram obtidas as curvas E conforme a equação (5); por fim, a partir destas curvas foram determinados os TDH simulados tm_{sim} conforme a equação (8).

Figura 33. Perfis de concentração na saída: valores experimentais e simulados, vazão de 4,6 L/dia.

Figura 34. Perfis de concentração na saída: valores experimentais e simulados, vazão de 2,3 L/dia.

Foram testadas diferentes porosidades a fim de encontrar um valor adequado de forma a obter um tempo $t_{m_{sim}}$ mais próximo possível do valor experimental $t_{m_{exp}}$. Na Tabela 5 encontram-se as porosidades simuladas e os respectivos valores $t_{m_{sim}}$ para o reator operando com 4,6 L/dia e 2,3 L/dia de vazão. Comparados com os valores $t_{m_{exp}}$ (item 5.2.1) as porosidades ajustadas forneceram tempos $t_{m_{sim}}$ simulados (Tabela 5) próximos aos valores experimentais.

Para vazão de 2,3 L/dia, a porosidade ajustada foi aproximadamente 3% maior que o limite superior calculado experimentalmente. Tal valor é aceitável visto que a diferença é pequena e que as medidas experimentais bem como as simulações estão sujeitas a pequenos erros. Não foi testada a

porosidade para o reator com vazão de 2,3 L/dia no final da operação porque o respectivo valor tm_{exp} não se mostrou confiável (item 5.2.1.).

Tabela 5. TDH médio simulados obtidos a partir de diferentes porosidades numericamente ensaiadas.

Porosidade testada		tm_{sim} (horas)
Vazão de 4,6 L/dia	$\epsilon=0,47$	10,46
	$\epsilon=0,54$	11,38
	$\epsilon=0,543$, ajustada para início da operação	11,41
	$\epsilon=0,538$, ajustada para final da operação	11,35
Vazão de 2,3 L/dia	$\epsilon=0,47$	21,11
	$\epsilon=0,54$	22,88
	$\epsilon=0,576$, ajustada para início da operação	24,06

Os valores $E(t)$ simulados são comparados com os valores experimentais para a vazão de 4,6 L/dia na Figura 35 e para a vazão de 2,3 L/dia na Figura 35. A sobreposição das curvas para início e final da operação na Figura 35 se justifica pela proximidade dos valores ajustados para a porosidade do reator com vazão de 4,6 L/dia (Tabela 5).

Figura 35. Distribuição do tempo de residência para valores experimentais e simulados: vazão de 4,6 L/dia.

Figura 36. Distribuição do tempo de residência para valores experimentais e simulados: vazão de 2,3 L/dia.

Para a porosidade ajustada no início da operação com vazão de 4,6 L/dia, a sequência de imagens na Figura 37 ilustra a evolução da concentração de traçador no interior do reator ao longo do tempo. Para este mesmo cenário, a Figura 38 apresenta a evolução dos perfis de velocidade junto à saída do reator.

Figura 37. Variação da concentração de traçador no interior do reator ao longo do tempo. Da esquerda para a direita, as imagens se referem aos instantes: 702 s (0,195 h), 7020 s (1,95 h), 10044 s (2,79 h), 21060 s (5,85 h), 28080 s (7,8 h), 35100 s (9,75 h), 42606 s (11,835 h), 50130 s (13,925 h) e 84330 s (23,425 h).

Figura 38. Perfil de velocidade na saída do reator nos instantes: a. 18 s, b. 90 s, c. 900 s, d. 90000 s.

Na Figura 37, vê-se que a câmara de alimentação (C1) apresenta uma zona morta nos cantos inferiores, o que não deve ser considerado um problema relevante por não consistir em parte ativa do biorreator. Nas regiões onde o escoamento não ocorre em meio poroso, câmara de alimentação (C1) e câmara de coleta do efluente (C3), a curvatura do perfil de concentração é mais acentuada. O mesmo não se repete na câmara do leito (C2) pois ali a resistência ao escoamento devido ao meio poroso proporciona maior dispersão, suavizando tal curvatura. Os perfis de velocidade observados na Figura 38 demonstram que o desenvolvimento ocorre rapidamente, mantendo-se constante até o instante final de monitoramento.

Analogamente, para a porosidade ajustada no início da operação com vazão de 2,3 L/dia, a Figura 39 ilustra a evolução da concentração de traçador no interior do reator ao longo do tempo enquanto a Figura 40 apresenta a evolução dos perfis de velocidade junto à saída do reator. Por inspeção visual, o reator se comportou de modo semelhante à operação com 4,6 L/dia de vazão.

Figura 39. Variação da concentração de traçador no interior do reator ao longo do tempo. Da esquerda para a direita, as imagens se referem aos instantes: 1404 s (0,39 h), 14040 s (3,9 h), 20088 s (5,58 h), 42120 s (11,7 h), 56160 s (15,6 h), 70200 s (19,5 h), 85212 s (23,67 h), 100260 s (27,85 h) e 168660 s (46,35 h).

Figura 40. Perfil de velocidade na saída do reator nos instantes: a. 36 s, b. 180 s, c. 1800 s, d. 180000 s.

Para os valores $E(t)$ obtidos após o ajuste da porosidade, foi realizada a análise adimensional via equações (12) e (13) conforme apresentado no item 3.1.1. Os valores obtidos são comparados com os dados experimentais nas Figuras 41 a 43, para os cenários simulados.

Figura 41. Distribuição do tempo de residência adimensional experimental e obtido via simulação após ajuste da porosidade ($\epsilon = 0,543$): início da operação, vazão de 4,6 L/dia.

Figura 42. Distribuição do tempo de residência adimensional experimental e obtido via simulação após ajuste da porosidade ($\epsilon = 0,538$): final da operação, vazão de 4,6 L/dia.

Figura 43. Distribuição do tempo de residência adimensional experimental e obtido via simulação após ajuste da porosidade ($\varepsilon = 0,576$): início da operação, vazão de 2,3 L/dia.

Do ponto vista quantitativo, procurou-se estabelecer uma relação linear entre os valores de tempo de residência adimensional experimentais e aqueles sugeridos pelas simulações. As Figuras 44 e 45 apresentam graficamente as relações obtidas junto com os coeficientes de determinação (R^2). Os valores destes coeficientes sugerem que o modelo computacional se mostrou adequado, sendo superiores aos valores R^2 obtidos para os modelos de reator não ideal (item 5.2.2), principalmente para o início da operação para as duas vazões estudadas.

Figura 44. Coeficiente de determinação (R^2) para linearização dos gráficos confrontando DTR adimensionais simulados com valores obtidos experimentalmente para reator APBR com vazão de 4,6 L/dia: **a.** início da operação, **b.** fim da operação.

Figura 45. Coeficiente de determinação (R^2) para linearização dos gráficos confrontando DTR adimensionais simulados com valores obtidos experimentalmente para reator APBR: vazão de 2,3 L/dia, início da operação.

Por fim, para cada cenário de operação estudado dispondo de modelo adequado de reator não ideal, as Figuras 46 a 48 comparam as curvas E_Θ obtidas via simulação CFD e aquelas obtida pelo melhor modelo clássico. Observa-se que o modelo computacional foi o que mais bem representa os dados experimentais, sobretudo para o início da operação.

Apesar disso, o modelo computacional teve sua aplicabilidade limitada no final da operação quando há crescimento acentuado de biomassa. Para a vazão de 4,6 L/dia, a curva DTR obtida por simulação foi próxima do modelo clássico de grande dispersão; para a operação com vazão de 2,3 L/dia, o modelo computacional não se mostrou adequado para representar os dados experimentais. O problema para representação pode estar associado ao tipo de traçador utilizado durante a etapa experimental, o qual pode não ter sido adequado impossibilitando que o modelo representasse os dados experimentais.

Figura 46. DTR experimental, via modelagem clássica e via simulação: vazão de 4,6 L/dia, início da operação.

Figura 47. DTR experimental, via modelagem clássica e via simulação: vazão de 4,6 L/dia, final da operação.

Figura 48. DTR experimental, via modelagem clássica e via simulação: vazão de 2,3 L/dia, início da operação.

5.4 ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE OS ESTUDOS DE HIDRODINÂMICA AVALIADOS

A hidrodinâmica no interior de biorreatores de leito fixo é um desafio principalmente devido ao crescimento da biomassa, que provoca alterações de modo a dificultar a caracterização adequada do escoamento. Isto ficou evidente com relação às curvas de concentração da solução-traçador no final da operação do reator, em especial para vazão de 2,3 L/dia. Ao implicar em baixa velocidade de escoamento, tal vazão faz com que não houvesse arraste de biomassa e provocou acúmulo do traçador no interior do reator, fato sugerido pela presença de picos de concentração na saída do reator sob tal condição operacional.

Para os demais cenários de operação, as curvas DTR obtidas não indicaram nenhuma anomalia de escoamento, estando os TDH experimentais bem próximos dos valores teóricos. As divergências foram atribuídas às pequenas variações na porosidade do leito.

Os ajuste dos modelos de reator não ideal contra os dados experimentais permitem de fato indicar o quão próximo o escoamento está dos extremos da idealidade, quais sejam, fluxo pistonado ou mistura perfeita. Entretanto, tais modelos não são capazes de a priori orientar mudanças na configuração do reator, pois dependem de dados experimentais para serem aplicados. Assim, tais modelos ajudam a compreender apenas o reator específico em que os ensaios são realizados. Para o reator APBR analisado nas diferentes condições de operação, os modelos clássicos apontaram que ele apresenta escoamento próximo ao *plug flow*, indicado pela avaliação qualitativa da curva DTR e pelo ajuste mais adequado do modelo de dispersão longitudinal.

Tendo em mente o coeficiente de determinação R^2 referente à linearização dos dados contra resultados experimentais, o modelo de dispersão de grande intensidade forneceu melhor ajuste, exceto para vazão de 2,3 L/dia ao final da operação. Neste último cenário, a análise dos parâmetros dos modelos indicou que o reator se aproxima do tipo mistura perfeita, mas isto não é conclusivo em função do baixo valor do correspondente R^2 após a linearização. Por sua vez, para vazão de 4,6 L/dia tanto para o início quanto para o final da operação, o modelo de dispersão de pequena intensidade mostrou-se interessante em função de sua relativa simplicidade.

5.5 SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO VIA MÉTODO DE BOLZTMANN EM REDE

Foi usada a rede bidimensional D2Q9 para simular o escoamento Poiseuille no interior de um canal. Os parâmetros utilizados no simulador LBM para tanto são apresentados a Tabela 6.

Tabela 6. Parâmetros para simulação LBM de escoamento Poiseuille 2D em canal.

Parâmetro	Valor
Densidade do fluido	800 kg/m ³
Viscosidade dinâmica	0,1 Pa.s
Velocidade de entrada no canal	0,1 m/s
Comprimento do canal	5 m
Largura do canal	0,2 m

Como resposta da simulação, obteve-se a velocidade no eixo central por toda a extensão do canal bem como os perfis de velocidade em 0%, 5%, 10%, 50% e 95% do comprimento total. Tais resultados são mostrados nas figuras a seguir.

Na Figura 49, visualiza-se o aumento da velocidade até atingir 1,5 vezes o valor da velocidade de entrada (supostamente uniforme), o que é esperado para escoamento Poiseuille em canal. Este aumento de velocidade no centro do duto está associado ao desenvolvimento do escoamento, o que pode ser confirmado na Figura 50. Conforme esperado, observa-se a deformação gradual do perfil até a distribuição parabólica. Ainda na Figura 49, verifica-se no final do canal a velocidade apresenta leve decaimento, provavelmente devido a imprecisões numéricas referentes à aplicação da condição de contorno de escoamento desenvolvido.

Figura 49. Velocidade simulada no eixo central do canal, ao longo de toda sua extensão.

Figura 50. Perfis de velocidade (componente axial) em diferentes posições do canal.

6 CONCLUSÃO E DESENVOLVIMENTOS FUTUROS

O uso do software *COMSOL Multiphysics*® para a simulação CFD do biorreator APBR mostrou-se adequado, fornecendo valores de concentração da solução-traçador na saída muito próximos aos valores experimentais. Após o devido ajuste na porosidade e consequentemente na permeabilidade do leito, os parâmetros R^2 referentes à linearização dos valores DTR simulados contra os valores reais foram bastante satisfatórios e melhores que os valores obtidos com base nos modelos para reator não ideal, em especial para o reator desprovido de material biológico em seu interior.

A exemplo dos modelos para reator não ideal, o software CFD não conseguiu se ajustar aos dados experimentais ao final da operação com vazão de 2,3 L/dia, indicando outros tipos de traçadores devem ser avaliados para que os valores obtidos experimentalmente possam ser melhor representados. Para operações com pouco material biológico, o software é uma ferramenta eficaz e versátil para simular reatores com leito fixo, podendo ser utilizado para testar diversas configurações e condições operacionais, com economia de tempo e recursos.

O simulador LBM desenvolvido para escoamento *Poiseuille* forneceu resultados satisfatórios indicando que o uso do LBM com modelo D2Q9 é adequado para tal finalidade.

Como desenvolvimentos futuros, é possível apontar para:

- Avaliação de diferentes tipos de traçadores a fim de permitir uma melhor representação no software *COMSOL Multiphysics*®, de forma a possibilitar mudanças nas configurações e condições de operação necessárias;
- Implementação do simulador LBM para escoamento em meio poroso com transporte de espécie.

7 REFERÊNCIAS

- ALVES, M. E., LAVORENTI, A. Sulfate adsorption and its relationships with properties of representative soils of the São Paulo State. **Brazil. Geoderma**, v.118, p.89-99, 2004.
- BAEZ-SMITH, C. Anaerobic digestion of vinasses for the production of methane in the sugar cane distillery. In: **SPRI Conference on Sugar Processing**, Loxahatchee, Florida, USA, p. 268-287, 2006.
- BHATNAGAR, P.L.; GROSS, E.P.; KROOK, E.M. A model for collision processes in gases: small amplitude processes in charged and neutral one-component system. **Physical Review**, v.94, p.511-525, 1954.
- BIRD, R.B.; STEWART, W.E.; LIGHTFOOT, E.N. Transport Phenomena, John Wiley & Sons, 1960.
- BRANNOCK, M.; LESLIE, G.; WANG, Y.; BUETEHORN, S. Optimising mixing and nutrient removal in membrane bioreactors: CFD modelling and experimental validation. **Desalination**, v.250, p.815-818, 2010.
- CABRAL, A. K. A. Caracterização hidrodinâmica de um reator anaeróbio horizontal de leito fixo (RAHLF). 1995. 86 f. Dissertação (Mestrado em Hidráulica e Saneamento) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 1995.
- CHIANG, C.F.; DAGUE, R. Effects of reactor configuration and biomass activity on the performance of upflow static media anaerobic reactor. **Water Environment Research**, v.64(2), p.141–8, 1992.
- CONAB – Companhia Nacional de Abastecimento. **Acompanhamento da Safra brasileira de cana-de-açúcar**, p. 19, 2012. Visto em: www.conab.gov.br. Data de acesso: 31 de outubro de 2013.
- CORTEZ, I.; MAGALHÃES, P.; HAPPI, J. **Principais subprodutos da agroindústria canavieira e sua valorização**. Revista Brasileira de Energia, v.2, p. 111-146.
- DYNIA, J. F.; CAMARGO, O. A. Adsorption and movement sulfate in cerrado Oxisol subjected to liming and phosphorus. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v.19, p.249–53, 1995.
- ESPAÑA-GAMBOA, E. et al. **Vinasses: characterization and treatments**. Waste Management & Research, v.29, p. 1235-1250, 2011.

FAZOLO, A.; PASOTTO, M.B.; FORESTI, E.; ZAIAT, M. Kinetics, mass transfer and hydrodynamics in a packed bed aerobic reactor fed with anaerobically treated domestic sewage. **Environmental Technology**, v.27, p.1125–1135, 2006.

FERNANDES, B.S.; SAAVEDRA, N.K.; MAINTINGUER, S.I.; SETTE, L.D.; OLIVEIRA, V.M.; VARESCHE, M.B.A.; ZAIAT, M. The Effect of Biomass Immobilization Support Material and Bed Porosity on Hydrogen Production in an Upflow Anaerobic Packed-Bed Bioreactor. **Applied Biochemistry and Biotechnology**, v.170, p.1348-1366, 2013.

FERRAZ JÚNIOR, A.D.N. **Digestão anaeróbia da vinhaça da cana de açúcar em reator acidogênico de leito fixo seguido de reator metanogênico de manta de lodo**. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

FOUST, A.S.; WENZEL, L.A.; CLUMP, C.W.; MAUS, L.; ANDERSEN, L.B. **Princípios das Operações Unitárias**. Ed. Guanabara Dois; 1982.

FOX, R. W.; McDONALD, A. T. **Introdução à Mecânica dos Fluidos. Quinta edição**, editora LTC, 2001

FRISCH, U.; D'HUMIÈRES, D.; HASSLACHER, B.; LALLEMAND, P.; POMEAU, Y.; RIVET, J-P. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. **Complex systems**; v.1, p.649–707, 1987.

FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. Lattice-gas automata for the Navier–Stokes equation. **Physical Review Letters**, v.56, p.1505–7, 1986.

GŁUSZCZ, P.; PETERA, J.; LEDAKOWICZ, S. Mathematical modeling of the integrated process of mercury bioremediation in the industrial bioreactor. **Bioprocess and Biosystems Engineering**, v. 34, p.275-285, 2011.

GOLDEMBERG, J.; COELHO, S. T.; GUARDABASSI, P. **The sustainability of ethanol production from sugarcane**. *Energy Policy*, v.36, p. 2086-2097, 2008.

GRISI, E.F.; YUSTA, J.M.; DUFO-LÓPEZ, R. Opportunity costs for bioelectricity sales in Brazilian sucro-energetic industries. **Applied Energy**, v.92, p.860-867, 2012.

GRUCELSKI, A.; POZORSKI, J. Lattice Boltzmann simulations of flow past a circular cylinder and in simple porous media. **Computers & Fluid**, v.71, p. 406–416, 2013.

GUO, G.; THOMPSON, K.E. Experimental analysis of local mass transfer in packed beds. **Chemical Engineering Science**, v.56, p.121-132, 2001.

HIGUERA, F.J.; JIMÉNEZ, J. Boltzmann approach to lattice gas simulations. **Europhysics Letters**; v.9, p.663–8, 1989.

HOLDICH, R. Fundamentals of Particle Technology. Loughborough University. Midland information Technology and Publishing, p.21-28, United Kingdom, 2002.

IBETO, C. N.; OFOEFULE, A. U.; AGBO, K. E. **A global overview of biomass potential for bioethanol production: a renewable alternative fuel**. Trends in Applied Sciences Research, vol. 6, p. 410 -425, 2011.

IPCC. **Intergovernmental Panel on Climate Change. IPCC fourth assessment report**. The Physical Science Basis; 2007

KAPARAJU, P.; SERRANO M, ANGELIDAKI I. Optimization of biogas production from wheat straw stillage in UASB reactor. **Applied Energy**, v.87, p.3779–83, 2010.

KAVIANY, M. Principles of Heat Transfer in Porous Media. Second edition, Springer, New York, 1999.

KIM, S.M.; GHIAASIAN, S.M. Numerical modeling of laminar pulsating flow in porous media. **Journal of Fluids Engineering**, v.131, p.141203–9, 2009

KOEHLER, S. A., HILGENFELDT, S.; STONE, H.A. A generalized view of foam drainage: experiment and theory. *Langmuir*, p.6327-6341, 2000.

LAIME, E. M.O.; FERNANDES, P.D.; OLIVEIRA, D.C.S.; FREIRE, E.A. Technological possibilities for the disposal of vinasse: a review. **Revista Trópica: Ciências Agrárias e Biológicas**, v.5, p.16–29, 2011.

LEAL, T.G. **Simulações LBM em geometrias complexas**. Dissertação – Departamento de Engenharia Mecânica. Universidade de Aveiro, Aveiro, 2011.

LEITE, R. C. C. et al. **Can Brazil replace 5% of the 2025 gasoline world demand with etanol?** Energy, vol. 34, p. 655-661, 2009.

LEVENSPIEL, O. **Engenharia das Reações Químicas**. 3ª edição. Edgard Blücher, São Paulo, 2000.

LEVENSPIEL, O. **Engenharia das reações químicas**. São Paulo: Edgar Blucher, 1974.

LIMA, D.M.F.; MOREIRA, W.K.;ZAIAT, M. Comparison of the use of sucrose and glucose as a substrate for hydrogen production in na upflow anaerobic fixed-bed reactor. **International Journal of Hydrogen Energy**, v.38, p.15074-15083, 2013.

LONGO, R. M. Effect of vinasse in natura and biodigested on properties of a soil cultivated with sugarcane. M.S. Thesis. Universidade Estadual de Campinas;1994.

MACEDO, I. C. **Sugarcane's Energy**: twelve Studies on Brazil Sugarcane Agribusiness and its Sustainability. União da Agroindústria Canvieira de São Paulo, São Paulo: p.195, 2005.

MACEDO, I. C.; SEABRA, J. E. A.; SILVA, J. E. A. R. **Greenhouse gasses emissions in the production and use of ethanol from sugarcane in Brazil**: the 2005/2006 averages and a prediction for 2020. Biomass and Bioenergy, v. 9, p. 582-595, 2008.

MADEJÓN, E.; LÓPEZ, R.; MURILLO, J. M.; CABRERA, F. Agricultural use of three (sugarbeet) vinasse composts: effect on crops and chemical properties of a Cambisol soil in the Guadalquivir river valley (SW Spain). **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v. 84, p. 55–65, 2001.

MANTLE, M. D.; SEDERMAN, A. J.; GLADDEN, L. F. Single- and two-phase flow in fixed-bed reactors: MRI flow visualisation and lattice-Boltzmann simulations.**Chemical Engineering Science**, v.56, p. 523-529, 2001.

MCNAMARA, G.R.; ZANETTI, G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. **Physical Review Letters**;61(20), p.2332–5, 1988

MÉNDEZ-ROMERO, D.C.; LÓPEZ-LÓPEZ, A.; VALLEJO-RODRÍGUEZ, R.; LEÓN-BECERRIL, E. Hydrodynamic and kinetic assessment of an anaerobic fixed-bed reactor for slaughterhouse wastewater treatment. **Chemical Engineering and Processing**, v.50, p.273–280, 2011.

MOHAMAD, A. A. **Applied Lattice Boltzmann Method for Transport Phenomena, Momentum, Heat and Mass Transfer**. Calgary: University of Calgary, 2007.

MORAES, B.S.; JUNQUEIRA, T.; PAVANELLO, L. G.; CAVALETT, O.; MANTELATTO, P.E.; BONOMI, A.; ZAIAT, M. Anaerobic digestion of vinasse from sugarcane biorefineries in Brazil from energy, environmental, and economic perspectives: Profit or expense. **Applied Energy**, v.113, p.825-835, 2014.

MOTAVALLI, P.P.; DUXBURY, J. M.; SOUZA, D. M. G. The influence of organic soil amendments on sulfate adsorption and sulfur availability in a Brazilian Oxisol. **Plant Soil**, v.154, p.301–8, 1993.

NARDI, I. R.; ZAIAT, M.; FORESTI, E. Influence of the tracer characteristics on hydrodynamic models of packed-bed bioreactors. **Bioprocess Engineering**, v.21, p.469-476, 1999.

NIELD, D. A.; BEJAN, A. **Convection in Porous Media**. Springer, New York, 1992.

NIKOLAEVA, S.; SÁNCHEZ, E.; BORJA, R.; TRAVIESO, L.; WEILAND, P.; MILÁN, Z. Treatment of piggery waste by anaerobic fixed bed reactor and zeolite bed filter in a tropical climate: a pilot scale study. **Process Biochemistry**, v.38(3), p.405–9, 2002.

OKIYAMA, D. C. G.; RABI, J. A. Lattice-Boltzmann Simulation of Transport Phenomena in Agroindustrial Biosystems. *Advances in Computational Modeling Research – Theory, Developments and Applications*, editor: Anna Belya Kora. New York: Nova Publisher, 2013.

PAN, C.; LUO, L.S.; MILLER, C.T. An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous media flow simulation. **Computers & Fluids**, v.35, p.898–909, 2006.

PARCO, V.; DU TOIT, G.; WENTZEL, M.; EKAMA, G. Biological nutrient removal in membrane bioreactors: denitrification and phosphorus removal kinetics. **Water Science and Technology**. v.56, p.125-134, 2007.

PATIL, S.B.; NAGARNAIK, P.B. Installation, startup and performance of up-flow Anaerobic Fixed Film Fixed Bed Reactor for oil refinery wastewater. **3rd International Conference on Emerging Trends in Engineering and Technology**, ICETET 2010; Goa; India; November 2010.

QIAN, Y.H.; D'HUMIÈRES, D.; LALLEMAND, P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. **Europhysics Letters**, v.17, p.479-484, 1992.

RABI, J. A. Modelagem e simulação de processos agroindustriais: cromatografia por afinidade bioespecífica, extração com fluido supercrítico, resfriamento rápido de alimentos de ²²²Rn para aproveitamento de fosfogesso. Tese (Livre Docência) – Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos, Universidade de São Paulo, Pirassununga, 2011.

RAJESHWARI, K.V.; BALAKRISHNAN, M.; KANSAL, A.; LATA, K.; KISHORE, V.V.N. State-of-the-art of anaerobic digestion technology for industrial wastewater treatment. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v.4, p.135–156, 2000.

ROBERTIELLO, A. **Upgrading of agricultural and agroindustrial wastes: the treatment of distillery effluents (vinasses)**. *Agricultural Wastes*, v 4, p. 387-395, 1982.

ROTHMAN, D.H. Cellular-automaton fluids; a model for flow in porous media. **Geophysics**, v.53, p.509–18, 1988.

SÁNCHEZ-MARTÍN, L.; VALLEJO, A.; DICK, J.; SKIBA, U. M. The influence of soluble carbon and fertilizer nitrogen on nitric oxide and nitrous oxide emissions from two contrasting agricultural soils. **Soil Biology & Biochemistry**, v. 40, p.142–51, 2008.

SANTOS, L.O.E. **Desenvolvimento de modelo de gás em rede para escoamento monofásico e bifásico**. Tese (Doutorado) – Departamento de Engenharia Mecânica. Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2000.

SATYAWALI, Y.; BALAKRISHNAN, M. Wastewater treatment in molasses-based alcohol distilleries for COD and color removal: A review. **Journal of Environmental Management**, v.86, p.481–497, 2008.

SEABRA, J. E. A. et al. **Life cycle assessment of Brazilian sugarcane products**: GHG emissions and energy use. *Biofuel, Bioproducts and Biorefining*, v.5, p.519-532, 2011.

SILVA, A.J.;VARESCHE, M.B.; FORESTI, E.; ZAIAT, M. Sulphate removal from industrial wastewater using a packed-bed anaerobic reactor. **Process Biochemistry**, v.37(9), p.927–35, 2002.

SMITH, J.M. Chemical Engineering Kinetics. 3rd edn. New York: McGraw-Hill 1981.

SMITH,L.C.;ELLIOT,D.J.;JAMES, A. Mixing in upflow anaerobic filters and its influence on performance and scale-up. **Water Research**, v.30(12), p.3061–73, 1996.

SPEECE, R. E. Anaerobic biotechnology for industrial wastewaters.Nashville: Archae Press 1996.

SRIVASTAVA, N.; SAHAI, R. **Effects of distillery waste on the performanceof *Cicer arietinum L.*** Environmental Pollution, v. 43, p.91-102, 1987.

STEVENSON, P.; SULLIVAN,S.P.;JAMESON,G.J.Short-time tracer development in two-dimensional rising froth. **Chemical Engineering Science**, v.58(22), p.5025-5043.

STEYER, J. P.; BUFFIÈRE, P.; ROLLAND, D.; MOLETTA, R. Advanced control of anaerobic digestion processes through disturbances monitoring. **Water Resource**, v.33, p.2059–2068, 1999.

SUCCI, S. **The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond**. New York: Oxford University Press, 2001.

SUCCI, S. **The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond**. Clarendon Press, Oxford, 2001.

SULLIVAN,S. P.;SANI,F.M.;JOHNS,M.L.;GLADDEN, L. F. Simulation of packed bed reactors using lattice Boltzmann methods. **Chemical Engineering Science**, v.60, p.3405-3418, 2005.

SWAINE, D. E.; DAUGULIS,A.J.Liquid residence time distributions in immobilized cell bioreactors. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 33, p. 604-612, 1989.

SWAINE,D.E.;DAUGULIS,A.J.Review of the liquid mixing in packed bed biological reactors. **Biotechnology Progress**, v.4(3), p.134–48, 1998.

VAN DER SMAN, R. G. M. Lattice Boltzmann simulation of microstructure. In: SABLANI, S.S.; RAHMAN, M.S.; DATTA, A.K.; MAJUDAR, A.R. Food and Bioprocess Modelling Techniques. Boca Raton: CRC, 2007.

VLISSIDIS, A.; ZOUBOULIS, A. I. Thermophilic anaerobic digestion of alcohol distillery wastewaters. **Bioresource Technology**; v.43, p.131–40, 1993.

WOLF-GLADROW, D. A. **Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models – An Introduction**. Springer – Verlag Berlin Heidelberg, 2000.

ZIEGLER, D. P. Boundary Conditions for Lattice Boltzmann Simulations. **Journal of Statistical Physics**, v. 71, n. 5/6, 1993.

APÊNDICE A

Código computacional FORTRAN 90/95 do simulador LBM para escoamento bidimensional em canal

➤ ROTINA PRINCIPAL

```

parameter (n=500, m=20)                ! dimensões do canal
real    f(0:8,0:n,0:m), feq(0:8,0:n,0:m) ! função de distribuição de partículas e função de equilíbrio
real    cx(0:8), cy(0:8), w(0:8)        ! velocidades e dimensões da rede
real    u(0:n,0:m), v(0:n,0:m), rho(0:n,0:m) ! velocidade-x, velocidade-y e densidade do fluido
real    Ma, Lx, Ly                      ! Número de Mach, comprimento e largura do canal

cx(:) = (/0.0, 1.0, 0.0, -1.0, 0.0, 1.0, -1.0, -1.0, 1.0/) ! componentes x da velocidade da rede D2Q9
cy(:) = (/0.0, 0.0, 1.0, 0.0, -1.0, 1.0, 1.0, -1.0, -1.0/) ! componentes y da velocidade da rede D2Q9
w(:) = (/4./9., 1./9., 1./9., 1./9., 1./9., 1./36., 1./36., 1./36., 1./36./) ! fatores de ponderação: 16/36, 4/36, 1/36

uo = 0.1                                ! velocidade de entrada (m/s)
rho0 = 800.                             ! densidade (kg/m³)
viscd = 0.1                             ! viscosidade dinâmica (Pa.s)
visck = viscd / rho0                    ! viscosidade cinemática (m²/s)
dx = 0.01                               ! distância entre sítios da rede na direção x (m)
dy = dx                                 ! distância entre sítios da rede na direção y (m)
dt = 0.01                               ! passo de tempo (s)
cs = dx / dt                            ! velocidade do som na rede (m/s)
Lx = n * dx                             ! comprimento do canal (m)
Ly = m * dy                             ! largura do canal (m)
Ma = uo / cs                            ! Número de Mach
Re = uo * Ly / visck                    ! Número de Reynolds

sumvelo = 0.0                           ! zerando (inicializando) somatório
omega = 1.0/(0.5 + 3.*visck/(cs*dx))      ! fator de relaxação: escoamento
mstep = 8000                             ! número de passos de tempo

print *, "***** UNIDADES SI *****"
print *, "Lx = ", Lx                      ! saída: comprimento do canal
print *, "Ly = ", Ly                      ! saída: largura do canal
print *, "rho = ", rho0                   ! saída: densidade
print *, "mu = ", viscd                   ! saída: viscosidade dinâmica
print *, "nu = ", visck                   ! saída: viscosidade cinemática
print *, "Uo = ", uo                      ! saída: velocidade de entrada
print *, "Cs = ", cs                      ! saída: velocidade do som na rede
print *, "Re = ", Re                      ! saída: número de Reynolds
print *, "Ma = ", Ma                      ! saída: número de Mach
print *, "dx = ", dx                      ! saída: distância entre sítios da rede na direção x
print *, "dy = ", dy                      ! saída: distância entre sítios da rede na direção y
print *, "dt = ", dt                      ! saída: passo de tempo
print *, "ohm = ", omega                  ! saída: fator de relaxação
print *, "Pressione qualquer tecla para continuar"
read *

do j = 0, m                              ! condições iniciais: densidade, vx, vy
  do i = 0, n

```

```

        rho(i,j) = rho0
        u(i,j) = 0.0
        v(i,j) = 0.0
    enddo
enddo

do j = 1, m-1                ! condições de contorno: entrada (não escorregamento para j=0 & j=m)
    u(0,j) = uo
    v(0,j) = 0.0
enddo

do i = 0, n                  ! condições de contorno: superior (m) & inferior (0) (não escorregamento)
    u(i,0) = 0.0
    v(i,0) = 0.0
    u(i,m) = 0.0
    v(i,m) = 0.0
enddo

do kk = 1, mstep
    call collision(u,v,f,feq,rho,omega,w,cx,cy,n,m)
    call streaming(f,n,m)
    call boundcond(f,n,m,uo)
    call calcrhov(f,rho,u,v,cx,cy,n,m)
    m2 = m/2
    print *, kk,v(0,m2),rho(0,m2),u(n,m2),v(n,m2),rho(n,m2)
enddo

call output(u,v,rho,uo,n,m)

end

```

! laço principal
! etapa de colisão
! etapa de propagação
! condições de contorno
! obtenção da velocidade do fluido
! ponto médio para registro (direção y)
! saída (tela): valores do ponto médio

! saída de valores (arquivo)

➤ SUBROTINA PARA ETAPA DE COLISÃO

```

subroutine collision(u,v,f,feq,rho,omega,w,cx,cy,n,m)
    real f(0:8,0:n,0:m), feq(0:8,0:n,0:m)
    real w(0:8), cx(0:8), cy(0:8)
    real rho(0:n,0:m), u(0:n,0:m), v(0:n,0:m)

    do i = 0, n
        do j = 0, m
            t1 = u(i,j)*u(i,j) + v(i,j)*v(i,j)
            do k = 0, 8
                t2 = u(i,j)*cx(k) + v(i,j)*cy(k)
                feq(k,i,j) = rho(i,j) * w(k) * (1.0 + 3.0*t2 + 4.50*t2*t2 - 1.50*t1)
                f(k,i,j) = omega*feq(k,i,j) + (1. - omega)*f(k,i,j)
            enddo
        enddo
    enddo

    return
end

```

! etapa de colisão

! função distribuição de partícula: rede D2Q9
! pesos, velocidades (x e y) da rede D2Q9
! densidade, velocidade (x e y) macroscópicas

! vetor velocidade: módulo
! velocidades de rede D2Q9
! produto escalar: v.c
! função de equilíbrio
! função de distribuição

➤ SUBROTINA PARA ETAPA DE PROPAGAÇÃO

```

subroutine streaming(f,n,m)           ! etapa de propagação

real f(0:8,0:n,0:m)                ! função de distribuição de partículas: escoamento

! Para fins de varredura --> direções 1 & 3:isoladas, direções 5, 6, 7, 8, além de 2 & 4 (obrigatórias): conjunta
! Regras de ouro:função progressiva <-> varredura regressiva & função regressiva <-> varredura progressiva

do j = 0, m                          ! varredura progressiva (irrelevante, poderia ser regressiva)
  do i = n, 1, -1                    ! varredura regressiva obrigatória
    f(1,i,j) = f(1,i-1,j)           ! f1: função progressiva horizontal (não há "componente" vertical)
  enddo

  do i = 0, n-1                      ! varredura progressiva obrigatória
    f(3,i,j) = f(3,i+1,j)           ! f3: função regressiva horizontal (não há "componente" vertical)
  enddo
enddo

do j = m, 1, -1                      ! varredura regressiva obrigatória
  do i = 0, n                        ! varredura progressiva (irrelevante, poderia ser regressiva)
    f(2,i,j) = f(2,i,j-1)           ! f2: função progressiva vertical (não há "componente" horizontal)
  enddo

  do i = n, 1, -1                    ! varredura regressiva obrigatória
    f(5,i,j) = f(5,i-1,j-1)         ! f5: função progressiva horizontal,progressiva vertical
  enddo

  do i = 0, n-1                      ! varredura progressiva obrigatória
    f(6,i,j) = f(6,i+1,j-1)         ! f6: função regressiva horizontal,progressiva vertical
  enddo
enddo

do j = 0, m-1                        ! varredura progressiva obrigatória
  do i = 0, n                        ! varredura progressiva (irrelevante, poderia ser regressiva)
    f(4,i,j) = f(4,i,j+1)           ! f4: função regressiva vertical (não há "componente" horizontal)
  enddo

  do i = 0, n-1                      ! varredura progressiva obrigatória
    f(7,i,j) = f(7,i+1,j+1)         ! f7: função regressiva horizontal,regressiva vertical
  enddo

  do i = n, 1, -1                    ! varredura regressiva obrigatória
    f(8,i,j) = f(8,i-1,j+1)         ! f8: função progressiva horizontal,regressiva vertical
  enddo
enddo

return
end

```

➤ SUBROTINA PARA CONDIÇÕES DE CONTORNO

```

subroutine boundcond(f,n,m,uo)        ! condições de contorno: função de distribuição de partículas

real f(0:8,0:n,0:m)                ! função de distribuição de partículas: escoamento

! fronteira oeste: entrada
do j = 0, m

```

```

    rhow = (f(0,0,j) + f(2,0,j) + f(4,0,j) + 2.*(f(3,0,j)+f(6,0,j)+f(7,0,j))) / (1. - uo)
    f(1,0,j) = f(3,0,j) + 2.*rho*uo/3.
    f(5,0,j) = f(7,0,j) + rhow*uo/6.
    f(8,0,j) = f(6,0,j) + rhow*uo/6.
enddo

! fronteira sul: bounce back junto à parede
do i = 0, n
    f(2,i,0) = f(4,i,0)
    f(5,i,0) = f(7,i,0)
    f(6,i,0) = f(8,i,0)
enddo

! fronteira norte: bounce back junto à parede
do i = 0, n
    f(4,i,m) = f(2,i,m)
    f(8,i,m) = f(6,i,m)
    f(7,i,m) = f(5,i,m)
enddo

! fronteira leste: saída
do j = 1, m
    f(1,n,j) = 2.*f(1,n-1,j) - f(1,n-2,j)
    f(5,n,j) = 2.*f(5,n-1,j) - f(5,n-2,j)
    f(8,n,j) = 2.*f(8,n-1,j) - f(8,n-2,j)
enddo

return
end

```

➤ SUBROTINA PARA AVALIAÇÃO DE GRANDEZAS MACROSCÓPICAS

subroutine calcrhov(f,rho,u,v,cx,cy,n,m)	! avaliação das variáveis macroscópicas
real f(0:8,0:n,0:m)	! função de distribuição de partículas: escoamento
real rho(0:n,0:m), u(0:n,0:m), v(0:n,0:m)	! fluido: densidade, velocidades (componentes x e y)
real cx(0:8), cy(0:8)	! velocidades da rede D2Q9
do j = 0, m	! varredura vertical
do i = 0, n	! varredura horizontal
ssum = 0.0	! inicialização do somatório para avaliar a densidade
do k = 0, 8	! varredura: direções da rede D2Q9
ssum = ssum + f(k,i,j)	! somatório p/ avaliar densidade: ssum = f0 + f1 + ... + f8
enddo	
rho(i,j) = ssum	! densidade do fluido na posição (i,j)
enddo	
enddo	
do i = 0, n	! varredura horizontal
do j = 0, m	! varredura vertical
usum = 0.0	! inicialização do somatório para avaliar a velocidade-x
vsum = 0.0	! inicialização do somatório para avaliar a velocidade-y
do k = 0, 8	! varredura: direções da rede D2Q9
usum = usum + f(k,i,j)*cx(k)	! somatório vx: usum = f0*c0,x + f1*c1,x + ... + f8*c8,x

```

        vsum = vsum + f(k,i,j)*cy(k) ! somatório vy: vsum = f0*c0,y + f1*c1,y + ... + f8*c8,y
    enddo

    u(i,j) = usum / rho(i,j)          ! velocidade-x na posição (i,j)
    v(i,j) = vsum / rho(i,j)          ! velocidade-y na posição(i,j)
enddo
enddo

do j = 0, m
    v(n,j) = 0.0                      ! correção p/ perfil desenvolvido de velocidade: direção y
enddo

return
end

```

➤ SUBROTINA PARA SAÍDA (REGISTRO) DE RESULTADOS

```

subroutine output(u,v,rho,uo,n,m)      ! saída de resultados: registro em arquivo

real u(0:n,0:m), v(0:n,0:m), rho(0:n,0:m)    ! velocidade em x, velocidade em y, densidade
real stf(0:n,0:m)                            ! função corrente

n5=  n/20
n10 = n/10
n50 = n/2
n95 = 95*n/100
m2 = m/2

open (8, file='excel_si.txt')           ! registro dos perfis de velocidade em x em posições distintas do duto
do j = 0, m
    write(8,50) j, u(0,j), u(n5,j), u(n10,j), u(n50,j), u(n95,j)
enddo

open (9, file='vmax.txt')               ! registro da evolução da velocidade máxima (velocidade no eixo central)
do i = 0, n
    write(9,50) i, u(i,m2)
enddo

50 format (I4, 6(2X,F11.8))

return
end

```