



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE
ESCOLA DE QUÍMICA E ALIMENTOS - EQA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA - PPGEQ

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA HIDRODINÂMICA E
TRANSFERÊNCIA DE OXIGÊNIO EM UM BIORREATOR
UTILIZANDO CFD**

THIAGO ROBERTO ALMEIDA

RIO GRANDE – RS

2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE
ESCOLA DE QUÍMICA E ALIMENTOS - EQA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA - PPGEQ

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA HIDRODINÂMICA E
TRANSFERÊNCIA DE OXIGÊNIO EM UM BIORREATOR
UTILIZANDO CFD**

THIAGO ROBERTO ALMEIDA

Dissertação de Mestrado
apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Engenharia Química da Universidade
Federal do Rio Grande, como requisito à
obtenção do título de Mestre em Engenharia
Química.


Orientador: Prof. Dr. Cezar Augusto Da Rosa

RIO GRANDE – RS

2018

APROVAÇÃO

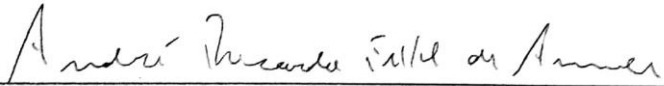
Dissertação defendida por Thiago Roberto Almeida e aprovada em 13 de abril de 2018, pela Comissão Examinadora constituída pelos professores:



Prof. Dr. César Augusto da Rosa – FURG



Prof. Dr. Jeferson Ávila Souza – FURG



Prof. Dr. André Ricardo Felkl de Almeida – UNIPAMPA

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho ao meu pai Edilnei (*in memoriam*) por ter me ensinado as primeiras letras, por ter sido meu primeiro professor, e a minha mãe, Zoraide, pela constante e incondicional dedicação para que meus sonhos se tornem realidade.

AGRADECIMENTOS

A minha família pelo apoio incondicional durante todos estes anos, em especial a minha mãe, Zoraide, por me mostrar que nenhuma adversidade é grande o suficiente para impedir que um sonho seja alcançado e a meu pai, Edilnei, de quem sinto falta todos os dias, por me ensinar que o estudo é o caminho para que a sabedoria prevaleça frente a ignorância que o Homem insiste em cultivar.

A minha melhor amiga e namorada, Nájila, pelo constante amor e carinho, apoio diário e por não me deixar esmorecer nos momentos de dificuldade. Obrigado por valorizar, no mínimo que faço, tudo aquilo que sou.

Aos amigos da saudosa Sala de Atendimento, por tornarem aqueles dias penosos em momentos mais leves e sorridentes, mostrando que não importa o que temos na vida, mas sim quem temos em vida.

Aos colegas e amigos de mestrado, por compartilharem comigo os instantes de aprendizado e conhecimento próprio e, mesmo que indiretamente, me ensinarem a crescer nas diferenças.

Ao meu orientador, Cezar, pelos ensinamentos, pela competência, paciência e por nortear minhas ideias durante este caminhar.

Aos professores, profissionais e integrantes do Laboratório de Controle Ambiental (LCA) da Escola de Química e Alimentos pela contribuição para o desenvolvimento do trabalho.

A aqueles professores que, de alguma maneira, contribuíram com seus ensinamentos para que o objetivo se tornar-se realidade.

Ao PPGEQ da FURG, pela oportunidade de crescimento profissional e pessoal, e convivência com profissionais competentes de todas as áreas.

A CORSAN, pelo apoio financeiro e pela oportunidade de trabalhar com um tema que possa trazer melhorias para o dia a dia do ser humano.

Enfim, deixo aqui meu agradecimento a todas as pessoas que, de alguma maneira, e a sua maneira, contribuíram para que este caminho que escolhi traçar pudesse ser concluído.

“Isto é para os loucos. Os desajustados. Os rebeldes. Os causadores de problemas. Os que, definitivamente, não se encaixam. Aqueles que veem as coisas de forma diferente. Eles não curtem as regras e não respeitam o status quo. Você pode citá-los, discordar deles, glorificá-los ou difamá-los. Mas a única coisa que você não pode fazer é ignorá-los. Porque eles mudam as coisas. Eles impulsionam a raça humana para frente. Enquanto alguns os veem como loucos, nós vemos gênios. Porque as pessoas que são loucas o suficiente para pensarem que podem mudar o mundo, são as que de fato o fazem.”

(Rob Siltanen e Ken Segall)

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo apresentar um estudo da hidrodinâmica e da transferência de massa envolvidos no processo de aeração promovido em um biorreator de escala laboratorial, através da utilização de ferramentas computacionais e modelagem matemática. Tal estudo se justifica ao apresentar modelos para o aprimoramento do processo de aeração, com ênfase nos fenômenos hidrodinâmicos do cenário proposto, assim como na transferência de oxigênio. Fez-se uso de ferramentas e conhecimentos da Fluidodinâmica Computacional (CFD), ramo da ciência que busca o aperfeiçoamento e melhor compreensão da relação entre as variáveis de um sistema, através da predição quantitativa e/ou qualitativa, fazendo-se uso de softwares computacionais baseados em modelagem matemática. A modelagem foi realizada utilizando a formulação VOF (*Volume of Fluid*), com a adição de equações extras de transporte de grandezas escalares e relações adicionais para o cálculo do coeficiente local de transferência de massa. Para a solução do conjunto de equações do modelo matemático foi utilizado o software FLUENT 14.5, este presente no conjunto de ferramentas de simulação e modelagem ANSYS Workbench. Foram utilizadas funções (denominadas UDF's – *User Defined Function*) para incorporar o cálculo do coeficiente de transferência de massa entre os meios líquido e gasoso, bem como a área interfacial, além da análise de diferentes correlações para o cálculo de tal coeficiente. Os resultados obtidos através da modelagem foram comparados com dados obtidos de maneira experimental e mostraram-se promissores para a previsão do comportamento hidrodinâmico do cenário, assim como para a previsão das taxas de transferência de oxigênio no biorreator.

Palavras-chave: Fluidodinâmica Computacional; Transferência de Massa; Modelagem matemática.

ABSTRACT

This work aims to present a study of the hydrodynamics and mass transfer involved in the aeration process developed in a laboratory scale bioreactor through the use of computational tools and mathematical modeling. This project is justified to present mathematical models for the improvement of the aeration process, with emphasis on the hydrodynamics phenomena of the proposed scenario as well as an oxygen transfer. We used Computational Fluid Dynamics (CFD) tools and knowledge, a branch of science that seeks to improve and better understand the relationship between the variables of the system, through quantitative and/or qualitative prediction, using computational software based on mathematical modeling. The modeling was performed using the Volume of Fluid (VOF) formulation, with the additions for the calculation of the local mass transfer coefficient. For set the equations solution of the mathematical model the software FLUENT 14.5 was used, which is present in the ANSYS Workbench simulation and modeling toolset. The User Defined Functions (UDF) were used to incorporate the calculation of the mass transfer coefficient between the liquid and gaseous phases and the interfacial area, as well as the analysis of different correlations for the calculation of the local oxygen transfer coefficient. The results obtained by the modeling were compared with data obtained experimentally. It was promising for the hydrodynamics behavior prediction of the scenario, even as for the prediction of the oxygen transfer rates in the bioreactor.

Keywords: Computational Fluid Dynamics. Mass Transfer. Mathematical Modeling.

SUMÁRIO

ÍNDICE DE TABELAS	XIII
ÍNDICE DE QUADROS	XIV
NOMENCLATURA	XV
1. INTRODUÇÃO	18
2. OBJETIVOS	20
2.1 Objetivos Específicos	20
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	21
3.1 Aeração em processos de tratamento de efluentes	21
3.1.1 Tipos de equipamentos de aeração	21
3.1.2 Aeração superficial mecânica e caracterização dos equipamentos.....	22
3.2 Fundamentos da transferência de oxigênio.....	24
3.3 Consumo de oxigênio.....	26
3.4 Fluidodinâmica Computacional	27
3.4.1 Métodos de Discretização.....	29
3.4.2 Malha computacional.....	31
3.4.2.1 Tipos de configuração da malha computacional	31
3.4.3 Modelos de turbulência	34
4. MÉTODO EXPERIMENTAL E MODELAGEM MATEMÁTICA	36
4.1 Procedimento experimental.....	36
4.2 Equações da Conservação da Massa e Quantidade de Movimento	37
4.3 Modelo de Turbulência $k-\varepsilon$ Padrão.....	39
4.4 Equação de Transporte Escalar	41
4.5 Transferência de massa entre fases.....	42
4.6 Geometria e malha computacional	44
4.7 Condições de contorno, iniciais e de operação	46
5. RESULTADOS	49
5.1 Resultados experimentais	49
5.2 Hidrodinâmica	51
5.3 Transferência de Oxigênio na Rotação de Referência	54
5.3.1 Ajustes Matemáticos nos Modelos de Transferência	57
5.4 Transferência de Oxigênio na Rotação de 100 rpm	59
5.5 Transferência de Oxigênio na Rotação de 200 rpm	62

6. CONCLUSÕES.....	65
7. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	68
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	69

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Representação dos aeradores de (a) eixo vertical e (b) eixo horizontal	23
Figura 2: Interfaces envolvidas na transferência de oxigênio do ar ambiente para o efluente	25
Figura 3: Esquema genérico das reações biológicas previstas para uma cultura de microorganismos aeróbicos em um processo com lodo ativado	27
Figura 4: Técnicas utilizadas no estudo de mecânica dos fluidos.....	28
Figura 5: Representação do máximo e mínimo comprimento da face de um volume triangular	31
Figura 6: Exemplo de malha estruturada.....	32
Figura 7: Exemplo de malha não-estruturada	33
Figura 8: Visualização da (a) estação de controle biológico e (b) estação de acoplagem do vaso de 5L.....	36
Figura 9: (a) vista lateral da geometria; (b) vista isométrica da geometria; (c) vista isométrica das pás da região de rotação do aerador	44
Figura 10: Malha computacional (a) vista lateral do domínio computacional, (b) da região de rotação e (c) do conjunto de pás e defletores.....	45
Figura 11: Curvas geradas a partir dos dados experimentais para as três rotações de análise	50
Figura 12: Gráfico de contornos para a fração volumétrica do efluente	51
Figura 13: Gráfico de contornos 3D do sistema bifásico para o domínio computacional	52
Figura 14: Gráfico de vetores velocidade no âmbito do (a) domínio computacional e da (b) região de rotação.....	53
Figura 15: Gráfico de contornos para a turbulência presente no interior do biorreator	54
Figura 16: Gráficos de contorno para o $k_L \cdot a$ dos Modelos (a) I e (b) II, utilizando equações originais	56
Figura 17: Gráficos de contorno para o $k_L \cdot a$ dos Métodos (a) I e (b) II com equações ajustadas e simulações com defletores	58
Figura 18: Gráficos de contorno para o $k_L \cdot a$ dos Métodos (a) I e (b) II em 100 rpm e simulação com presença de defletores.....	60
Figura 19: Gráficos de contorno para o $k_L \cdot a$ dos Métodos (a) I e (b) II em 100 rpm e simulação com ausência de defletores	61
Figura 20: Gráficos de contorno para o $k_L \cdot a$ dos Métodos (a) I e (b) II em 200 rpm e simulação na presença de defletores.....	63

Figura 21: Gráficos de contorno para o $k_L \cdot a$ dos Métodos (a) I e (b) II em 200 rpm e simulação com ausência de defletores 64

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1: Valores das constantes do modelo $sk-\epsilon$	40
Tabela 2: Fatores de sub-relaxação utilizados no FLUENT	47
Tabela 3: Dados experimentais de oxigênio dissolvido	49
Tabela 4: Equações das curvas para cada rotação	50
Tabela 5: Coeficientes de transferência de massa experimentais para as rotações de 100, 150 e 200 rpm.....	50
Tabela 6: Coeficiente local de transferência de oxigênio experimental e condições de operação do experimento na rotação de 150 rpm	55
Tabela 7: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos, com equações originais	55
Tabela 8: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos, com equações originais, em cenário sem a presença de defletores.....	57
Tabela 9: Coeficiente local de transferência de oxigênio experimental e condições de operação do experimento com rotação de 100 rpm	59
Tabela 10: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos em cenário de 100 rpm e com a presença de defletores.....	59
Tabela 11: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos em cenário de 100 rpm com ausência de defletores.....	60
Tabela 12: Valores de $k_L \cdot a$ ao longo do tempo, para o Método II, na rotação de 100 rpm	62
Tabela 13: Coeficiente local de transferência de oxigênio experimental e condições de operação do experimento com rotação de 200 rpm.....	62
Tabela 14: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos em cenário de 200 rpm e com a presença de defletores.....	62
Tabela 15: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos em cenário de 200 rpm e na ausência de defletores	63

ÍNDICE DE QUADROS

Quadro 1: Principais características dos aeradores superficiais fixos de eixo vertical.....	23
Quadro 2: Comparativo entre malhas estruturada e não-estruturada.....	33
Quadro 3: Vantagens e desvantagens dos principais modelos de turbulência.....	35
Quadro 4: Métodos de Solução para o sistema proposto no estudo	47

NOMENCLATURA

Abreviaturas:

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DBO	Demanda Biológica de Oxigênio
ETE	Estação de Tratamento de Efluentes
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MVF	Método dos Volumes Finitos
OD	Oxigênio Dissolvido
OTR	<i>Oxygen Transfer Rate</i>
OUR	<i>Oxygen Uptake Rate</i>
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
RNG	<i>Re-Normalisation Group</i>
RSM	<i>Reynolds Stress Model</i>
SST	<i>Shear Stress Transport</i>
UDF	<i>User Defined Function</i>
UDS	<i>User Defined Scalar</i>
URANS	<i>Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
VC	Volume de Controle
VOF	<i>Volume of Fluid</i>

Símbolos:

\dot{m}	Vazão mássica	MT^{-1}
\vec{v}	Vetor velocidade	LT^{-1}
\vec{A}	Vetor área superficial	L^2
a	Área superficial	L^2
C_μ	Constantes experimentais adimensionais	-
C_{O_2}	Concentração de oxigênio	ML^{-3}
$C_{O_2}^*$	Concentração de saturação do oxigênio em água	ML^{-3}
Dab	Coefficiente de difusividade da espécie “a” em “b”	L^2T^{-1}

d_{bs}	Diâmetro médio de Sauter das bolhas	L
\vec{F}	Soma das forças interfaciais aplicada em um corpo	
g	Gravidade	LT ⁻²
G_b	Energia cinética turbulenta gerada pela flutuabilidade	
G_k	Geração de energia cinética turbulenta	
He	Constante de Henry	L ² T ⁻²
k	Energia cinética	ML ² T ⁻²
k_L	Coefficiente de transferência de massa	LT ⁻¹
$k_L a$	Coefficiente de transferência de massa local	T ⁻¹
N_{faces}	Número de faces	-
P	Pressão	ML ⁻¹ T ⁻²
q_{O_2}	Taxa específica de consumo de oxigênio	MT ⁻¹
$q_{O_2máx}$	Taxa específica máxima de consumo de oxigênio	MT ⁻¹
R^2	Coefficiente de determinação	-
Re	Número de Reynolds	-
S	Termo fonte	-
Sc	Número de Schimidt	-
Sh	Número de Sherwood	-
V	Volume da célula	L ³
X	Concentração de microorganismo	ML ⁻³
Y_M	Dilatação flutuante em turbulência compressível	

Subscritos:

p	Fase “p”
q	Fase “q”
t	Turbulento
f	Face
g	Gasoso
$máx$	Máximo

Símbolos Gregos:

Γ_{ϕ}	Coeficiente de difusão para o termo “ ϕ ”	
μ	Viscosidade	$ML^{-1}T^{-1}$
μ_{τ}	Viscosidade Turbulenta	$ML^{-1}T^{-1}$
α	Fração Volumétrica	-
ε	Taxa de Dissipação da Energia Cinética Turtulenta	L^2T^{-3}
ρ	Massa Específica	ML^{-3}
σ	Constante de Prandtl	-
β	Coeficiente de expansão termal	θ^{-1}
ω	Dissipação Específica Turbulenta	T^{-1}

1. INTRODUÇÃO

Frente a atual necessidade de manter uma gestão responsável dos recursos hídricos, os efluentes urbanos e industriais necessitam de tratamentos adequados que visam estabelecer uma determinada qualidade, imprescindível para o reaproveitamento da água. Em processos que envolvem tratamento de efluentes, um dos principais desafios do setor é aliar um plano de operação que atenda todas as demandas regulatórias e de qualidade, mantendo os custos operacionais tão baixos quanto o possível. Segundo Fayolle et al. (2007) e Karpinska e Bridgeman (2016) a etapa de aeração de uma estação de tratamento de efluentes (ETE) pode representar até 75% do custo energético requerido pela planta. O aperfeiçoamento desta objetiva conter os excessos com investimentos e operação, sem deixar de garantir um tratamento eficiente.

Sistemas que promovem agitação tem, em suma, a função de homogeneizar o meio líquido, assim como abastecer com oxigênio a água de tratamento, a fim de que todas as reações biológicas envolvidas ocorram. Aeradores de superfície são ferramentas mecânicas de funcionamento simples e fácil manutenção, relativa confiabilidade, uma vez que promovem uma alta taxa de transferência de oxigênio e possuem uma boa capacidade de mistura. Tais equipamentos são projetados para aerar o ambiente de tratamento e, com isso, promover o crescimento de micro-organismos aeróbicos reduzindo a demanda biológica de oxigênio (DBO). Além disso, a aeração eleva a dissolução do oxigênio em água, criando uma maior área de contato, representada por parâmetros como eficiência de transferência de oxigênio e eficiência da transferência global (ISSA, 2013; SPERLING, 2007).

Softwares de fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) são ferramentas de modelagem e simulação que permitem o desenvolvimento e aperfeiçoamento de diferentes ambientes de análise, tanto no âmbito industrial quanto acadêmico. Tal instrumento, ao longo dos anos, já provou sua eficiência e precisão, além de sua versatilidade, uma vez que pode ser aplicado em diferentes situações, como, por exemplo, problemas de hidrodinâmica e termodinâmica. A fim de otimizar processos e desenvolver novos conceitos de tratamento, instrumentos computacionais são cada vez mais utilizados na análise e tratamento de águas residuais. Estes instrumentos se tornam uma alternativa de melhor custo/benefício, uma vez que o investimento para a obtenção de resultados experimentais pode ser elevado (Norton et al., 2007).

A CFD é amplamente empregada em estudos de aperfeiçoamento de sistemas de aeração, pois permite a predição e a análise meticulosa das características fluidodinâmicas, assim como de todos os parâmetros envolvidos no estudo (FAYOLLE et al., 2007). Trabalhos realizados nos últimos anos evidenciam a aplicação de ferramentas numéricas e de simulação para otimização do processo de aeração. Se destacam os estudos de Fayolle et al. (2007), onde foram analisadas as características fluidodinâmicas e de transferência de oxigênio em tanques aerados, e de Cockx et al. (2001), onde estes estabeleceram uma análise dos coeficientes de transferência de massa, global e local. Já o estudo de Wei et al. (2012), manteve foco na distribuição hidrodinâmica em tanques de aeração. Mais recentemente, ferramentas de simulação computacional também foram utilizadas por Karpinska e Bridgeman (2016), que propuseram um estudo com diferentes abordagens, monofásicas e multifásicas, comumente utilizadas em análises CFD para tanques de aeração.

Devido à limitação de estudos específicos utilizando aeradores superficiais fixos e motivado pela constante busca de métodos que visam aperfeiçoar o processo de aeração, este trabalho propõe um estudo da aplicação de ferramentas avançadas de engenharia em um biorreator, de escala laboratorial, através da análise dos diferentes parâmetros que envolvem o processo, em especial as variáveis envolvidas na transferência de massa. Portanto, o objetivo deste trabalho é estudar a hidrodinâmica e transferência de oxigênio em um biorreator a fim de, através da validação do(s) modelo(s) analisado(s) neste estudo, torná-lo aplicável a uma bacia de aeração presente em uma ETE.

2. OBJETIVOS

Este trabalho possui como objetivo central a realização do estudo da hidrodinâmica e do processo de transferência de oxigênio envolvidos no fenômeno de aeração em um biorreator de escala laboratorial. Tal estudo objetiva analisar o comportamento hidrodinâmico em um cenário multifásico, assim como a realização do estudo preditivo do processo de transferência de massa no cenário proposto.

2.1 Objetivos Específicos

A fim de que o objetivo central do estudo seja concluído, é necessário que se somem ao trabalho algumas etapas vitais para a implementação do estudo hidrodinâmico e de transferência de massa no reator de bancada. Tais objetivos são apresentados nos itens que se seguem:

- definições a respeito da abordagem e ferramentas a serem aplicadas no estudo;
- modelar a geometria do ambiente a ser simulado;
- gerar a malha computacional;
- estudar os modelos fluidodinâmicos disponíveis e escolher os que melhor se adequam ao cenário proposto;
- implementar a hidrodinâmica do sistema bifásico, através da escolha e aplicação dos modelos de turbulência e de fases, além dos parâmetros envolvidos na fluidodinâmica do sistema;
- analisar e especificar as condições iniciais e de contorno;
- definir, para o modelo bifásico, das funções específicas para o cálculo da taxa de transferência de oxigênio do ar ambiente para o meio líquido;
- geração e aplicação das funções específicas, UDF, para a transferência de massa, e
- análise e discussão dos resultados obtidos, através de comparativo com dados experimentais.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesta seção é apresentada uma análise teórica a respeito dos aspectos envolvidos para a fundamentação do estudo hidrodinâmico e de transferência de massa aplicados neste trabalho.

3.1 Aeração em processos de tratamento de efluentes

Segundo Sperling (2007), quando determinado efluente apresenta deficiência de oxigênio, há uma tendência natural do meio deficiente de gás buscar o equilíbrio. Por essa razão, é necessário criar alternativas para acelerar a transferência de oxigênio, em um nível que permita que a taxa de gás seja suficiente para promover o crescimento microbiano. É neste cenário, de obtenção de uma maior taxa de transferência de oxigênio, que a etapa de aeração é fundamental em processos de tratamento de efluentes.

Além da função de potencializar a transferência de oxigênio, sistema que promovem agitação tem a função de manter a homogeneidade da mistura que compõe o efluente, através da constante agitação. O movimento das pás do aerador promove a dispersão do líquido, mantendo as bolhas o maior tempo possível dentro do domínio de aeração, ocasionando um maior tempo de residência das bolhas (ISSA, 2013).

Dentre os desafios encontrados para uma operação satisfatória dos aeradores, o principal diz respeito ao requerimento energético desta etapa. Segundo Fayolle *et al.* (2007), Karpinska e Bridgeman (2016) e Xiao *et al.* (2014) o processo de aeração pode representar um montante de 60 a 75% dos custos com energia para operação da planta de tratamento de efluentes. Torna-se, então, necessário o aprimoramento desta etapa, aliando uma operação que atenda todas as demandas regulatórias e de qualidade com o menor custo energético possível.

3.1.1 Tipos de equipamentos de aeração

Dentre os tipos de equipamentos de aeração voltados para o tratamento de efluentes, duas categorias se destacam, a aeração por difusão e a aeração mecânica. A aeração via difusores é caracterizada pela inserção de ar pressurizado abaixo da superfície do efluente. Nessa operação a transferência de massa ocorre tanto na zona de dispersão dentro do tanque, ocasionada pelo movimento das bolhas, quanto na zona superficial do efluente, ocasionada pela turbulência do meio. Já a aeração mecânica superficial tem como principal característica o fato de que o oxigênio que é assimilado pelo efluente prover da atmosfera, através da agitação das pás presentes na região de rotação do aerador (ISSA, 2013).

De acordo com Jenkins (2013), cada tipo de equipamento utilizado para aeração possui suas vantagens e desvantagens, e existem diferentes fatores que influenciam na escolha de tais equipamentos. Dentre estes fatores se destacam o consumo de energia, a complexidade de operação, o custo do equipamento, seu tempo de vida e os requerimentos com manutenção. Thakre et al. (2008) afirma que a categoria de aeradores mais utilizada são os equipamentos mecânicos, uma vez estes apresentam melhor eficiência aliada a um baixo custo operacional e de manutenção.

Aeradores mecânicos são divididos em dois grupos, os de eixo vertical e os de eixo horizontal. Essa divisão é baseada nas características físicas e de operação dos aeradores. Ambos os grupos possuem uma subdivisão, onde os equipamentos são classificados entre aeradores superficiais e submersos (THAKRE et al., 2008). De acordo com Huang et al. (2009), aeradores mecânicos superficiais são os mais utilizados em estações biológicas de tratamento de efluentes muito em vista da sua versatilidade, sua simplicidade de instalação e operação, além de satisfatória confiabilidade. Este trabalho focará em equipamentos de agitação mecânicos superficiais, uma vez que tais ferramentas são similares ao aerador presente no biorreator.

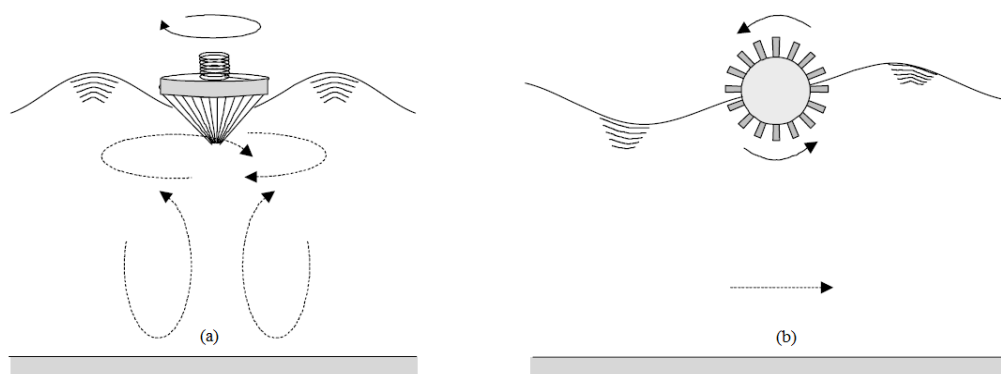
3.1.2 Aeração superficial mecânica e caracterização dos equipamentos

Sperling (2007) define que os mecanismos de aeração superficial mais comumente empregados para tratar efluentes são classificados de acordo com a disposição do eixo de rotação, podendo este ser vertical ou horizontal. Assim, tal classificação é apresentada como:

- aeradores com eixo vertical
 - baixa rotação, fluxo radial;
 - alta rotação, fluxo axial, e
- aeradores com eixo horizontal
 - baixa rotação.

Na Figura 1 são apresentados os aeradores de eixo vertical e horizontal.

Figura 1: Representação dos aeradores de (a) eixo vertical e (b) eixo horizontal



FONTE: SPERLING (2007)

Aeradores fixos de eixo vertical, em baixa rotação, são os tipos mais antigos de equipamentos que geram fluxo radial de maneira ascendente. Estes aparatos consistem em um conjunto de lâminas, ou pás, fixadas em uma bandeja ou diretamente no eixo de rotação, onde são imersas no líquido a ser tratado (ISSA, 2013). A potência requerida por estes dispositivos, segundo Sperling (2007), varia entre 5 HP e 100 HP, podendo, em casos especiais, atuar fora desta faixa. O Quadro 1, ainda de acordo com Sperling (2007), apresenta as principais características dos aeradores fixos superficiais de baixa rotação, com fluxo radial.

Quadro 1: Principais características dos aeradores superficiais fixos de eixo vertical

Características	Aplicação	Vantagens	Desvantagens
O fluxo do líquido na bacia é radial em relação ao eixo de rotação; a velocidade de rotação está, em geral, entre 20-60 rpm.	Lodo ativado ou similares; digestores aeróbicos; unidades de aeração grandes, com profundidades superiores a 5 metros.	Alta taxa de transferência de oxigênio; boa capacidade de mistura; flexibilidade quanto ao design da bacia; fácil manutenção.	Custo inicial relativamente alto, em relação a outros tipos de aeradores; necessidade de uma manutenção meticulosa dos redutores.

FONTE: SPERLING (2007)

Os principais componentes que integram este sistema de aeração são o motor, redutores, impelidor e, ainda, uma vez que o equipamento é fixo, pontes ou plataformas (SPERLING, 2007). De um modo geral, os parâmetros característicos analisados na aeração

superficial são a transferência de oxigênio do ar para o efluente, a extensão da agitação e o consumo de energia requerido pelo equipamento (ISSA, 2013). A transferência de oxigênio, em plantas que utilizam lodo ativado, é determinado e potencializado através da variação de diferentes parâmetros, tais como:

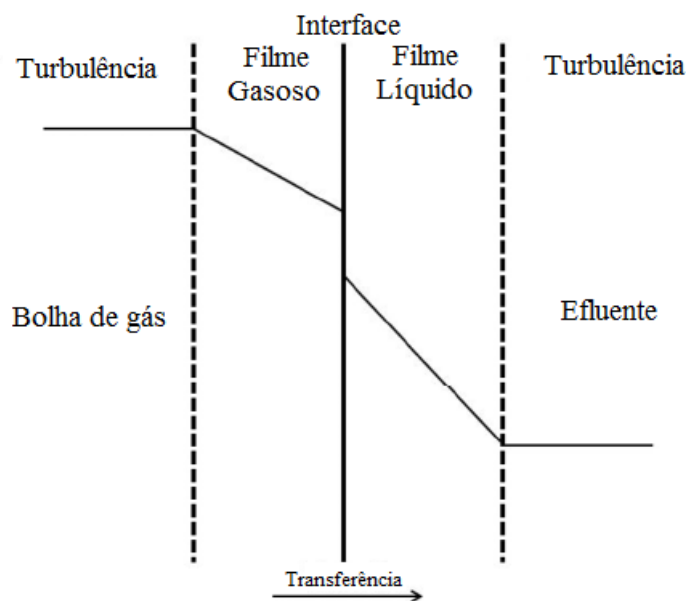
- liga-desliga de determinados aeradores;
- variação da velocidade de rotação dos aeradores;
- variação da submersão através de atuação no nível do vertedor de saída, e
- variação da submersão através de atuação no nível do eixo do aerador.

3.2 Fundamentos da transferência de oxigênio

A transferência de oxigênio em processos que envolvem o tratamento de efluentes é, segundo Kirk e Szita (2013), o parâmetro mais importante na etapa de aeração, uma vez esta ser indispensável para o crescimento biológico e, com isto, fundamental para o consumo da matéria orgânica presente no efluente. A transferência de oxigênio em ETE que operam com lodo ativado se apresenta como um processo complexo e desafiador, uma vez que envolve uma gama considerável de variáveis. É necessário a aplicação de conhecimentos em processos biológicos, químicos, físicos e hidrodinâmicos (HENKEL, 2010).

A transferência de oxigênio em um sistema bifásico ocorre devido à falta de equilíbrio entre a fase líquida e a fase gasosa, ou seja, a transferência de oxigênio do ar ambiente para o efluente irá ocorrer devido a deficiência de oxigênio no meio líquido. Esse fenômeno decorrerá até que o sistema atinja o equilíbrio. Segundo Henkel (2010) a interface presente na fronteira gás/líquido pode ser dividida em interface líquida, interface gasosa e superfície de interface, conforme visualizado na Figura 2.

Figura 2: Interfaces envolvidas na transferência de oxigênio do ar ambiente para o efluente



FONTE: Adaptado de Pittors et al. (2014)

Além de apresentar as interfaces da transferência de oxigênio, a Figura 2 representa o modelo mais usual para demonstrar transferência de massa, de um meio gasoso para um meio líquido: a Teoria dos Dois Filmes. Este modelo, proposto por Lewis e Whitman em 1924, parte do pressuposto que a resistência à transferência de oxigênio do ar ambiente para o efluente é uma fina região, ou filme, relativamente estagnada na interface, onde assume-se que as concentrações dos dois fluidos estão em equilíbrio. Essa consideração realizada para o equilíbrio na interface, embora amplamente utilizada, pode não ser válida para casos onde há turbulência interfacial (LEWIS E WHITMAN, 1924; SEADER et al., 2011; CORRÊA, 2006).

Em 1935, Higbie propôs um modelo de transferência de massa mais realista, onde o conceito da interface estagnada, descrita na teoria Teoria dos Dois Filmes, é substituído por turbilhões de *Boussinesq*. Essa teoria, segundo Seader et. al. (2011), afirma que o turbilhão formado pelo fluxo turbulento se move do fluido para a interface e nela permanece por um período de tempo suficiente para que a difusão molecular ocorra, em uma direção normal a interface. Após um período de tempo, esse turbilhão deixa a interface para se misturar ao fluxo mássico. Com isso, a interface, de maneira alternada, possui características estáticas e de movimento, ou seja, a turbulência gerada se estende a interface entre os fluidos. Esta teoria é amplamente aplicada para interfaces onde há ocorrência de bolhas e gotículas (SEADER et al., 2011).

Uma terceira teoria, dentre as principais, se destaca, a Teoria da Renovação Superficial. Em 1951, Danckwerts sugeriu melhorias a Teoria da Penetração, dentre elas a substituição da teoria de que o turbilhão permanece por um tempo constante na interface dos líquidos. Danckwerts supôs que, por causa da turbulência, o tempo de contato dos fluidos na interface estaria aleatoriamente distribuído, ou seja, supôs que a probabilidade de um turbilhão existente na interface ser substituído por um novo turbilhão é independente de sua idade ou tempo de atuação (SEADER et al., 2011; CORRÊA, 2006).

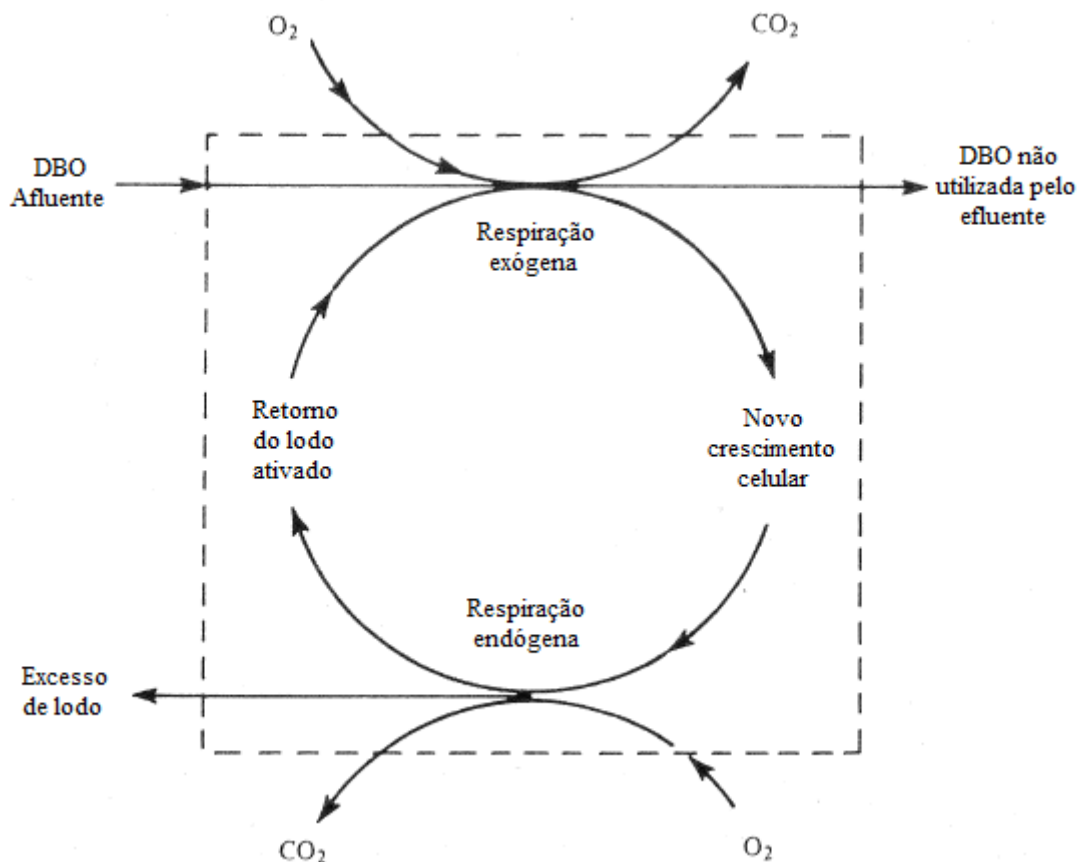
3.3 Consumo de oxigênio

Uma segunda etapa envolvida no processo de transferência de massa é de grande importância no tratamento de efluentes, o consumo de oxigênio dissolvido no meio líquido. Tal consumo é determinado pela atividade dos microorganismos presentes no efluente, ou seja, neste caso é definido pela respiração microbiana.

O consumo se desenvolve em duas principais fases, a respiração exógena e a respiração endógena. A primeira se caracteriza quando o consumo de oxigênio se dá pela degradação da carga orgânica externa a célula microbiana, ou seja, consiste na energia necessária para manter as funções das células microbianas. Já a respiração endógena é definida como consumo de oxigênio ocasionado pela degradação de substrato presente no interior do microorganismo, ou seja, esta fase é caracterizada pela degradação do substrato (ANDREOTTOLA et al., 2005).

Segundo Garcia-Ochoa et al. (2010) o consumo de oxigênio pela cultura de microorganismos é uma etapa subsequente a transferência de oxigênio do ar ambiente para o meio líquido, sendo este consumo um processo mais lento que a transferência. Na Figura 3 é apresentado um esquema das reações esperadas para uma cultura aeróbica.

Figura 3: Esquema genérico das reações biológicas previstas para uma cultura de microorganismos aeróbicos em um processo com lodo ativado



FONTE: VIESSMAN Jr. et al. (2009)

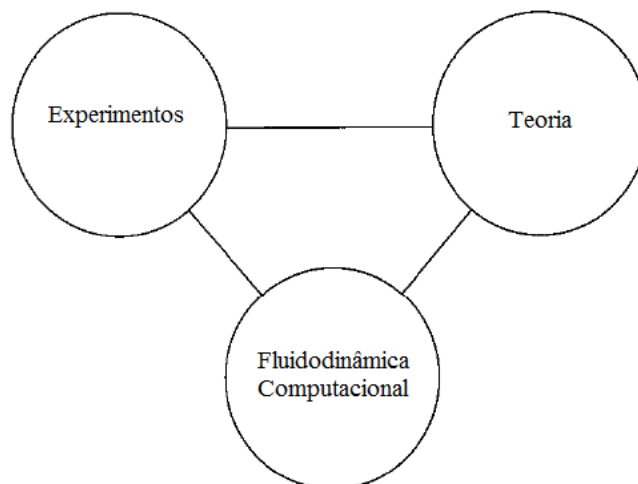
Segundo Viessman et al. (2009), ao se analisar a Figura 3, percebe-se que a demanda biológica de oxigênio, DBO, é removida do processo através da assimilação de oxigênio (respiração exógena) pelos micro-organismos e as novas células formadas são reduzidas através da respiração exógena. O excesso de crescimento microbiano é retirado do sistema juntamente com o excesso de lodo. Continuamente oxigênio é adicionado ao processo a fim de manter a atividade microbiana.

3.4 Fluidodinâmica Computacional

A fim de simular a transferência de massa envolvida neste trabalho, utilizou-se ferramentas de Fluidodinâmica Computacional, ou CFD. De acordo com Samstag *et al.* (2016), a CFD teve seu uso, acadêmico e industrial, iniciado na década de 40 e pode ser considerada a terceira técnica utilizada no estudo e desenvolvimento de todos os aspectos envolvidos na mecânica dos fluidos, conforme demonstrado na Figura 4. Rosa (2002) define CFD como sendo um ramo da ciência que busca a otimização e uma melhor compreensão da relação entre as variáveis de um sistema e/ou processo através de sua predição quantitativa e/ou qualitativa.

Para tal, recorre-se a softwares computacionais baseados em modelagem matemática, onde estes permitem simular o ambiente de interesse.

Figura 4: Técnicas utilizadas no estudo de mecânica dos fluídos



FONTE: Adaptado de Anderson (1995)

CFD é um recurso que apresenta algumas vantagens frente aos métodos experimentais de análise, como uma considerável redução do tempo e custos de um projeto em desenvolvimento e, ainda, permite uma obtenção de resultados com um vasto detalhamento. Porém, o uso de técnicas experimentais não deixa de ser importante, uma vez que os dados obtidos através de um trabalho experimental funcionam como uma ferramenta de comparação com os resultados obtidos com o método numérico, possibilitando, assim, obter o nível de coerência dos dados encontrados na simulação (ROSA, 2002).

Ravi (2013) esclarece alguma das vantagens e as limitações, frente a outros métodos, da utilização de CFD para a realização de simulações computacionais. Dentre as vantagens se destacam que as simulações computacionais possuem um custo relativamente barato (em comparação com outros métodos), onde tal custo tende a diminuir a medida que as ferramentas computacionais se tornam mais poderosas. Além disso, dependendo do caso, as simulações podem ser realizadas em um curto intervalo de tempo e a aplicação da CFD fornece um variado conjunto de parâmetros, além de permitir o controle do processo, fornecendo a capacidade de isolar fenômenos específicos. Dentre as limitações desse método está que as soluções são dependentes de modelos físicos oriundos de processos reais. Invariavelmente, ao se utilizar recursos computacionais na resolução de equações, erros numéricos são introduzidos. Por fim, a limitação do método CFD mais significativa é que a precisão da solução é diretamente

dependente da qualidade das informações iniciais e das condições de contorno oferecidas ao modelo numérico.

Nos últimos anos diferentes pesquisadores utilizaram fluidodinâmica computacional como método de estudo em seus trabalhos. No âmbito do tratamento de águas residuais se destacam os trabalhos de Fayolle et al. (2007), que utilizaram ferramentas CFD para estudar a otimização da aeração em processos de lodo ativado em tanques de aeração que fazem uso de difusores de bolhas e misturadores axiais. Já Moullec et al. (2009) apresentaram um estudo CFD completo de um sistema gás-líquido, levando em consideração a hidrodinâmica, transferência de massa e reações biológicas ocorridas em um reator piloto utilizando lodo ativado. Um terceiro estudo se destaca, realizado por Elqotbi et al. (2013) utilizou CFD para modelar um sistema bifásico em um biorreator de mistura através do uso de solução segregada do modelo Euler-Euler.

Para Sayma (2009), o conceito básico do método CFD é encontrar resultados para uma determinada quantidade de fluxo em um determinado número de pontos dentro do domínio de estudo. Estes pontos estão interligados através de uma malha computacional. O sistema de equações diferenciais é, então, convertido, através de alguns procedimentos, em um sistema de equações algébricas. Tais procedimentos são conhecidos como métodos de discretização, dentre os quais se destacam o método de diferenças finitas, o método de volumes finitos e, ainda, o método de elementos finitos.

3.4.1 Métodos de Discretização

Um passo importante quando se está lidando com equações parciais é desenvolver o uso correto pela substituição por equações algébricas, a fim de proporcionar estabilidade, consistência e precisão (HEINZL, 2007). O método das diferenças finitas (MDF) é o método mais antigo utilizado para solucionar numericamente equações diferenciais parciais, introduzido por Euler no século XVIII, e é considerado o método de discretização mais indicado quando se trabalha com geometrias “simplistas”, que não possuem delimitações complexas nas fronteiras (FERZIGER & PERIC, 2002). Essa tendência a aplicabilidade em geometrias de menor complexidade é uma desvantagem significativa quando o estudo é aplicado em problemas mais complexos.

O ponto de partida do MDF é a equação da conservação na sua forma diferencial. Uma vez que o domínio de estudo está coberto por uma malha, cada ponto desta malha conterà

uma equação aproximada, substituindo as derivadas parciais por aproximações em termos de valores das funções nos nós da malha. Com isso, obtêm-se uma equação algébrica por nó de malha (GONÇALVES, 2007). De acordo com Ferziger & Peric (2002), para se obter as aproximações de primeira e segunda derivadas da variável em função das coordenadas são utilizadas expansões em séries de Taylor.

Diferentemente do método das diferenças finitas, o método dos volumes finitos (MVF) utiliza como diretriz inicial a equação da conservação na sua forma integral. O domínio da função é subdividido num número finito de volumes (chamados volumes de controle – VC), dispostos lado a lado, onde a equação da conservação é aplicada para cada subdivisão. No centro de cada VC encontra-se o nó computacional referente ao volume em questão, no qual são calculados os valores das variáveis de estudo (FERZIGER & PERIC, 2002). O fato de as propriedades serem integradas dentro do VC torna o método conservativo. As integrais de volume e superfície são aproximadas fazendo-se uso de fórmulas de quadratura. Segundo Gonçalves (2007), a escolha do método de quadratura dependerá da análise adequada do processo de estudo. Como resultado, obtêm-se, assim, uma equação algébrica para cada VC. De acordo com Silva Junior (2012), esse método de discretização está sendo amplamente difundido e utilizado devido a qualidade dos resultados obtidos e também devido a sua propriedade conservativa, ou seja, as propriedades são conservadas através do Volume de Controle (VC).

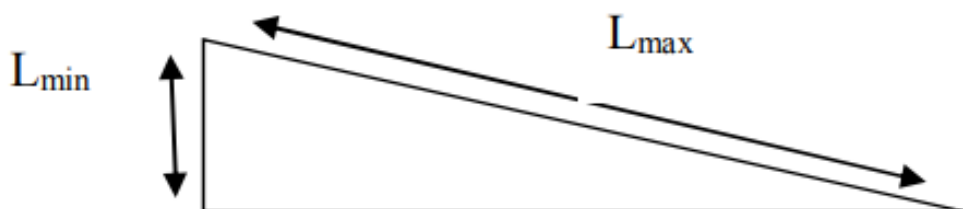
Já o terceiro método, o dos elementos finitos (MEF), é similar ao método dos volumes finitos. A diferença se dá que as equações do método dos elementos finitos são multiplicadas por uma função antes de serem integradas sobre o domínio de estudo, onde tal função é chamada de *função peso* (GOLÇALVES, 2007). Na sua forma mais simplificada, a solução do MEF é aproximada usando uma função linear com os elementos de uma maneira que esses garantam a continuidade da solução através das fronteiras dos elementos. O resultado final obtido com a aplicação deste método é um conjunto de equações algébricas não lineares.

O método de volumes finitos pode ser aplicado para qualquer tipo de malha envolvida, motivo pelo qual este se adapta a geometrias “ditas complexas”, ou seja, geometrias que apresentam maior complexidade nas fronteiras ou nos elementos que compõem o modelo geométrico. De acordo com Ferziger e Peric (2002), uma aproximação utilizando MVF é, talvez, a de compreensão mais simples, uma vez que todos os termos que precisam ser aproximados possuem significado físico.

3.4.2 Malha computacional

Segundo Singh (2016) o processo que envolve a geração da malha é determinante para o andamento do estudo, uma vez que a qualidade da malha gerada atua de forma direta no tempo de processamento da simulação numérica, assim como na convergência e qualidade dos resultados. Alguns fatores atestam a qualidade de uma malha computacional, sendo que os principais são a razão de aspecto e o ângulo de ortogonalidade entre os elementos da malha. A razão de aspecto é definida como a razão entre os máximo e mínimo comprimento das faces dos volumes. A Figura 5 apresenta a representação dessa razão.

Figura 5: Representação do máximo e mínimo comprimento da face de um volume triangular



FONTE: Singh (2016)

De acordo com Singh (2016) é desejável que o valor de razão de aspecto seja próximo de 1, ou seja, o menor possível, a fim de assim evitar problemas de mau condicionamento da malha. Se a razão de aspecto for muito elevada, a solução do problema irá divergir ou poderá apresentar problemas de execução, sendo necessário assim um controle rígido sobre este parâmetro.

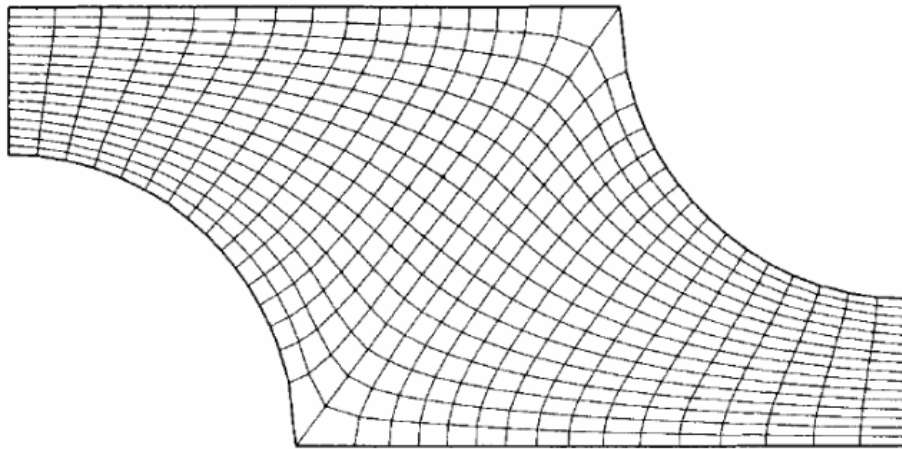
Já ângulo de ortogonalidade pode ser definido, segundo Singh (2016), como o ângulo presente entre as faces de elementos ou volumes ou entre as arestas de elementos ou volumes vizinhos. Para elementos quadriláteros o ângulo ideal é de 90° , porém é aceitável que este encontre-se na faixa de 45° a 135° . Já para elementos de faces triangulares o valor ideal é de 60° , porém há uma flexibilidade para valores desse ângulo, sendo aceitável este estar entre 20° e 120° . Ângulos fora destas faixas indicadas irão intensificar as fontes de erros de discretização e, com isso, dificuldades para a convergência do problema.

3.4.2.1 Tipos de configuração da malha computacional

Malhas computacionais podem ser classificadas quanto ao tipo de estrutura e disposição dos volumes que a compõe, podendo ser estruturadas ou não-estruturadas. Malhas estruturadas são identificadas pela regularidade de seus volumes, assim também como pela

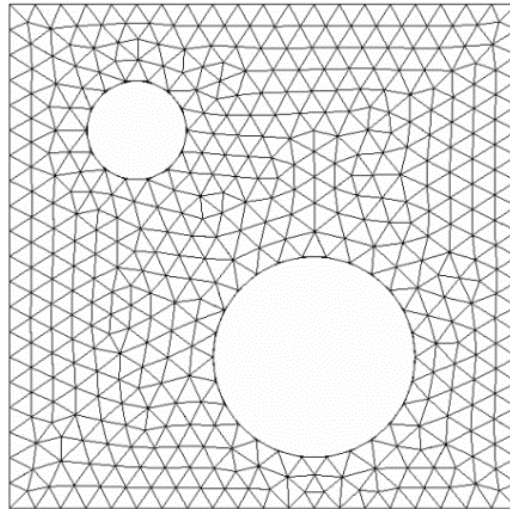
numeração dos volumes, sendo estas compostas por elementos quadriláteros, para malhas 2D, e hexaédricos, para malhas 3D. Em malhas que apresentam uma configuração estruturada a numeração dos volumes que compõe a malha segue uma estrutura fixa onde o número de cada volume é consecutivo ao volume vizinho. Esse método de numeração consecutiva é um facilitador na hora de programar um código, diminuindo o número de acessos a memória trazendo, assim, agilidade para a convergência do problema (MELCONIAN, 2014). A representação de uma malha estruturada pode ser analisada na Figura 6.

Figura 6: Exemplo de malha estruturada



FONTE: GONÇALVES (2007)

Já malhas não-estruturadas são caracterizadas pela irregularidade e são adequadas para geometrias mais complexas, uma vez que este tipo de malha se adapta aos diferentes tipos de limitações decorrentes das fronteiras que compõe o domínio de estudo. Segundo Gonçalves (2007), este tipo de malha pode ser utilizada com qualquer tipo de discretização, porém é indicada para aproximações que utilizam os métodos de volumes ou elementos finitos. A Figura 7 apresenta um exemplo da disposição de uma malha não-estruturada.

Figura 7: Exemplo de malha não-estruturada

FONTE: GONÇALVES (2007)

O Quadro 2 apresenta um comparativo entre as malhas estruturada e não estruturada.

Quadro 2: Comparativo entre malhas estruturada e não-estruturada

	Malha Estruturada	Malha Não-Estruturada
Flexibilidade geométrica	-	+
Malha móvel	-	+
Adaptação da malha	-	+
Computação paralela	-	+
Computação viscosa	+	-
Requerimentos de memória	+	-
Requerimentos de CPU	+	-

FONTE: SINGH (2016); KOOMULLIL et al. (2008)

Analisando o Quadro 2, os símbolos “+” e “-” indicam o quanto, por exemplo, a configuração estruturada é, respectivamente, superior ou inferior em relação a não-estruturada. Assim, malhas não-estruturadas apresentam vantagem frente as estruturadas quando se está lidando com geometrias complexas, de agudas limitações geométricas, uma vez que estas se adequam mais facilmente as limitações fronteiriças do domínio computacional. Além disso, as não-estruturadas possuem uma melhor eficácia de adaptação a eventuais refinamentos, possuem melhor capacidade de operar como malha móvel, reparando os elementos de má qualidade de maneira local. Já no caso de problemas de divergência entre blocos, na fronteira, malhas não-

estruturadas podem apresentar eventuais problemas de interpolação que precisam ser solucionados a fim de que os princípios de conservação sejam alcançados de maneira apropriada.

Em contrapartida, malhas estruturadas possuem melhor eficiência em cenários viscosos, uma vez que podem ser aplicadas em células que possuem uma razão de aspecto elevada. Além disso, esta configuração demanda elevada capacidade de memória e processamento, ou seja, maior requerimento com esforço computacional, ocasionando assim um maior tempo de simulação (KOOMULLIL et al, 2008).

3.4.3 Modelos de turbulência

Os principais e mais utilizados modelos de turbulência presentes nos softwares CFD são os que se fundamentam nas equações médias de Reynolds (do inglês RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes*). Tais métodos se baseiam em um processo estatístico de média temporal das equações de conservação, a partir do qual é calculado o tensor de Reynolds, uma vez que todas as informações espectrais são perdidas. (POLEY, 2014).

Escoamentos de natureza turbulenta são caracterizados por campos de velocidade flutuantes, sendo estas flutuações o transporte de quantidades como, por exemplo, quantidade de movimento, energia, massa e concentração de espécies. O software FLUENT fornece diferentes alternativas para a escolha do modelo de turbulência que melhor se adequa ao ambiente de simulação, dentre os quais se destacam os modelos do grupo $k-\varepsilon$, *Reynolds Stress Model* (RSM) e os modelos do grupo $k-\omega$. De acordo com Bridgeman et al. (2009), os modelos do grupo $k-\varepsilon$ são o padrão ($sk-\varepsilon$, do inglês *standard k-ε*), o renormalizado (RNG $k-\varepsilon$) e o $k-\varepsilon$ realizável. Tais modelos envolvem a resolução dos parâmetros energia cinética (k) e taxa de dissipação desta energia cinética (ε). Já os modelos que caracterizam o grupo $k-\omega$, que tem como parâmetros característicos a energia cinética e a taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta (ω), são o padrão ($sk-\omega$) e o *Shear Stress Transport* (SST $k-\omega$).

O Quadro 3 apresenta um comparativo entre as vantagens e desvantagens envolvidas nas principais características dos modelos citados.

Quadro 3: Vantagens e desvantagens dos principais modelos de turbulência

Modelo	Vantagens	Desvantagens
<i>sk-ε</i>	Simple e completo; excelente performance para diferentes tipos de fluxos; bem estabelecido acadêmica e industrialmente; robusto, econômico e de precisão satisfatória.	Possui uma performance insatisfatória para alguns cenários; assume, localmente, uma turbulência isotrópica.
RNG <i>k-ε</i>	Melhor performance para fluxos giratórios e de alta tensão.	Possui uma estabilidade inferior ao <i>sk-ε</i> .
<i>k-ε</i> realizável	Adequado para jatos planares e arredondados; fluxos limitados por paredes.	Não recomendado para usos em cenários com múltiplos quadros de referência (MRF).
<i>sk-ω</i>	Adequado para a aplicação em gradientes de pressão e separação de fluxo induzida por pressão.	A separação induzida por pressão é, normalmente, predita para ser excessiva e precoce.
SST <i>k-ω</i>	Adequado para fluxos isolados e fluxos totalmente turbulentos.	Menos adequado para fluxos de cisalhamento.
RSM	Cálculos precisos das propriedades médias envolvidas no fluxo, assim como todas as propriedades de tensão de Reynolds.	Elevada exigência de processamento; dificuldade de convergência; confiabilidade, em termos de pressão/deformação e taxa de dissipação, limitada.

FONTE: adaptado de BRIDGEMAN et al. (2009).

O modelo *k-ε* padrão, ou *standard k-ε (sk-ε)*, desenvolve uma modelagem semi-empírica da energia cinética e de sua taxa de dissipação e é válido para fluxos turbulentos totalmente desenvolvidos e os efeitos da viscosidade molecular são insignificantes. Tal modelo, segundo Karpinska e Bridgeman (2016) é robusto, econômico em termos de esforço computacional, e possui uma precisão satisfatória, sendo, dentre os disponíveis no software, o mais adequado para o cenário proposto.

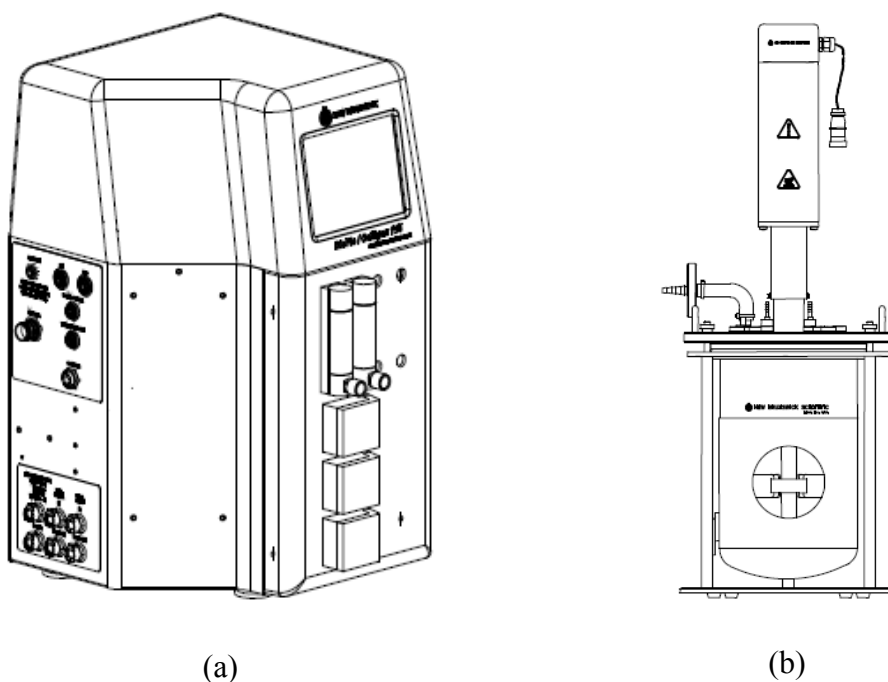
4. MÉTODO EXPERIMENTAL E MODELAGEM MATEMÁTICA

4.1 Procedimento experimental

Para validação do estudo proposto é necessário a comparação dos dados simulados com dados obtidos de maneira experimental. Este trabalho utiliza como domínio computacional um vaso de vidro com volume útil de 5 litros, sendo preenchido com 4 litros de água, líquido escolhido para simular o efluente em tratamento. Todas as propriedades da fase líquida, como, por exemplo, massa específica e viscosidade, necessárias para o andamento do trabalho são referentes a água em sua fase líquida. O vaso está acoplado a uma estação de controle biológico BioFlo New Brunswick (CelliGen 115). A estação em si não faz parte do domínio computacional, uma vez que não influencia na simulação do cenário. Tal equipamento é importante apenas para aquisição de dados e controle do processo experimental.

A taxa de transferência de oxigênio, do ar ambiente para o efluente líquido, foi determinada experimentalmente para três condições de agitação 100, 150 e 200 rpm. Inicialmente o oxigênio presente no efluente foi removido através do borbulhamento de nitrogênio (N_2) até que a percentagem de oxigênio dissolvido (%OD) fosse próximo de zero. Após o borbulhamento de N_2 foi interrompido e iniciou-se a agitação do efluente através do acionamento do rotor do agitador. A estação de controle e o reator são apresentados na Figura 8.

Figura 8: Visualização da (a) estação de controle biológico e (b) estação de acoplamento do vaso de 5L



FONTE: Adaptado de Manual de Operação do New Brunswick BioFlo®/CelliGen® 115

4.2 Equações da Conservação da Massa e Quantidade de Movimento

Para um cenário de fluxo turbulento e transiente, predominante neste trabalho, as equações governantes que predominam são as equações médias de Reynolds (URANS, do inglês *Unsteady Reynolds Average Navier-Stokes*). Neste trabalho empregou-se a formulação VOF (*Volume of Fluid*) para simular o escoamento das duas fases. Este modelo multifásico é o que melhor se adequa as exigências do estudo, uma vez que os dois fluidos presentes no projeto são imiscíveis, resultando assim em uma região interfásica bem definida (Karpinska e Bridgeman, 2016). Partindo do princípio da imiscibilidade, os campos para todas as variáveis e propriedades de cada fase são compartilhados, através de valores médios. O movimento fluidodinâmico na interface é monitorado através da solução da equação da continuidade dada pela Equação 1.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) = S_m \quad (1)$$

onde ρ é a massa específica, \vec{v} o vetor velocidade e S_m é o termo fonte, que representa o escoamento mássico e/ou qualquer fonte definida pelo usuário.

A Equação 1 é a forma geral que representa a conservação da massa e é válida tanto para escoamentos incompressíveis quanto compressíveis. Para um sistema bifásico e determinada fase primária “ q ” a Equação 1 toma a forma apresentada pela Equação 2.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \quad (2)$$

onde α_q é a fração volumétrica da fase “ q ” no volume de controle, ρ_q é a massa específica da fase “ q ”, \vec{v}_q é a velocidade da fase “ q ”. Já \dot{m}_{pq} indica a transferência de massa da fase “ p ” para a fase “ q ”, \dot{m}_{qp} indica a transferência de massa da fase “ q ” para a fase “ p ” e S_{α_q} é o termo fonte.

No termo fonte da equação, S_{α_q} , para cada fase, pode ser especificada uma constante ou uma fonte definida pelo usuário. Já a fração de volume referente a fase primária é calculada através de uma restrição, representada pela Equação 3.

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (3)$$

Para cada fase envolvida no cenário proposto, de uma mistura binária, um determinado valor de α é atribuído, valor este dependente da quantidade da fase em questão no

volume de controle. Assim, para uma mistura binária “ q ” e “ p ”, a variável α obedecerá a restrição descrita na Equação 4.

$$\alpha_q + \alpha_p = 1 \quad (4)$$

Para cada volume de controle presente no sistema, a Equação 3 determina que a soma da fração volumétrica de cada fase totaliza 1. Para cada fase adicional inserida no cenário de simulação, uma nova variável é adicionada ao sistema: a fração volumétrica desta fase no volume computacional (ANSYS Fluent Manual, 2013; Ratkovich, 2010). Portanto, uma vez que o modelo VOF emprega a fração volumétrica como método de monitoramento na região entre fases, três condições são possíveis:

- $\alpha_q = 0$, a célula computacional está vazia (da fase “ q ”);
- $\alpha_q = 1$, a célula computacional está cheia (da fase “ q ”), e
- $0 < \alpha_q < 1$, a célula computacional contém a fase “ q ” juntamente com outra(s) fase(s).

Para o modelo VOF uma única equação de conservação do movimento é solucionada ao longo do domínio, onde o campo velocidade resultante é compartilhado entre as fases envolvidas (ANSYS Fluent Manual, 2013; Karpinska e Briedgeman, 2016; Ratkovich, 2010). Tal equação, na sua forma geral, é representada pela Equação 5.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla(\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla(\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (5)$$

onde p representa a pressão estática, τ o tensor de deformação e \vec{F} representa o conjunto de forças externas que atuam no sistema.

A Equação 5 quando aplicada a um sistema bifásico tendo como fase primária “ q ” e fase secundária “ p ” apresenta forma descrita pela Equação 6.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -\alpha_q \nabla p + \nabla \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (\vec{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \vec{v}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{v}_{qp}) + \vec{F} \quad (6)$$

onde \vec{R}_{pq} representa a força interativa entre as fases. Esta força é dependente da fricção, pressão, coesão e outros efeitos presentes na região interfásica do sistema. O software FLUENT simplifica essa interação através da Equação 7.

$$\sum_{p=1}^n \vec{R}_{pq} = \sum_{p=1}^n K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) \quad (7)$$

onde K_{pq} ($=K_{qp}$) é o coeficiente de transferência de movimento na interface.

O tensor deformação para a fase “ q ” pode ser calculado utilizando a Equação 7.

$$\bar{\tau}_q = \alpha_q \mu_q (\nabla \vec{v}_q + \nabla \vec{v}_q^T) + \alpha_q \left(\lambda_q - \frac{2}{3} \mu_q \right) \nabla \vec{v}_q \bar{I} \quad (7)$$

onde μ_q e λ_q são a viscosidade de *shear* e de *bulk* para a fase “ q ”, respectivamente. Já \bar{I} representa o tensor de unidade.

A equação do movimento é dependente da fração volumétrica de cada fase, através das propriedades viscosidade (μ) e massa específica (ρ). Tais propriedades são determinadas pela presença de determinada fase em cada volume de controle. Assim, considerando um sistema bifásico “ q ” e “ p ”, onde a fase primária é “ q ”, a massa específica média para cada célula pode ser calculada através da Equação 8.

$$\rho = \alpha_q \rho_q + (1 - \alpha_q) \rho_p \quad (8)$$

De maneira geral, para um sistema de “ n ” fases, a massa específica média é determinada pela Equação 9.

$$\rho = \sum \alpha_q \rho_q \quad (9)$$

Todas as outras propriedades envolvidas na modelagem, como a viscosidade, por exemplo, são determinadas da mesma maneira.

4.3 Modelo de Turbulência k - ε Padrão

As equações que caracterizam o modelo sk - ε são as que solucionam os parâmetros energia cinética e taxa de dissipação, sendo as Equações 10 e 11 características desse modelo.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho k v_i) = \frac{\rho}{\rho x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \varepsilon u_i) = \frac{\rho}{\rho x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \quad (11)$$

onde k representa a energia cinética e ε a taxa de dissipação desta energia. O termo Y_M representa a contribuição da dilatação flutuante em turbulência compressível. G_k representa a geração de energia cinética turbulenta, ocasionada pela atuação dos gradientes de velocidade média. Já o termo G_b corresponde a energia cinética turbulenta gerada devido aos efeitos da

flutuabilidade. S_k e S_ε são termos fontes. Todos estes três termos, Y_M , G_k e G_b podem ser calculados, respectivamente, através das Equações 12, 14 e 15.

$$Y_M = 2\rho\varepsilon M_t^2 \quad (12)$$

onde M_t corresponde ao número de Mach turbulento, calculado pela Equação 9.

$$M_t = \sqrt{\frac{k}{a^2}} \quad (13)$$

onde “ a ” é definida como a velocidade do som.

$$G_k = -\rho \overline{v'_i v'_j} \frac{\partial v_j}{\partial v_i} \quad (14)$$

onde v_i e v_j são os componentes velocidade nas direções “ i ” e “ j ”.

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (15)$$

onde Pr representa o número de Prandtl turbulento, que para o modelo $sk-\varepsilon$ o valor padrão é de 0,85; g_i a componente do vetor gravidade na direção “ i ”; já o coeficiente de expansão termal, dado por β , é calculado pela Equação 16.

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \quad (16)$$

Os termos $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ e $C_{3\varepsilon}$ são constantes médias experimentais adquiridas nos estudos de Lauder e Spalding (1972). Seus valores podem ser aplicados, de maneira satisfatória, para diferentes tipos de fluxos. Já os termos σ_k e σ_ε são números de Prandtl turbulentos. Tanto as constantes quanto os números de Prandtl assumem os valores apresentados na Tabela 1, sendo estes dados amplamente utilizados. Tais valores, se julgado necessário, podem ser modificados para outros valores no software FLUENT.

Tabela 1: Valores das constantes do modelo $sk-\varepsilon$

Coefficiente	Valor
$C_{1\varepsilon}$	1,44
$C_{2\varepsilon}$	1,92
C_μ	0,09
σ_k	1,0

σ_ε	1,3
----------------------	-----

FONTE: Launder e Spalding, 1972; Markatos (1986)

Já a viscosidade turbulenta, μ_t , é determinada através de uma relação que combina os termos energia cinética e taxa de dissipação, demonstrado pela Equação 17.

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (17)$$

onde C_μ representa uma constante cujo valor é especificado na Tabela 3.

4.4 Equação de Transporte Escalar

A conservação de massa de Oxigênio Dissolvido (OD) no efluente foi modelada através do uso de transporte de grandezas escalares, chamadas de UDS (*User Defined Scalars*) no software FLUENT 14.5. A fim de tornar possível a solução da equação de transporte de maneira numérica, o software FLUENT usa uma técnica de integração da equação de transporte sobre cada volume de controle presente no domínio computacional, produzindo assim uma equação discreta que expressa a Lei da Conservação. Assim, para um volume de controle “ V ”, determinada quantidade escalar “ ϕ ” e para determinada fase “ q ”, temos que a Equação 18 representa a equação do transporte na sua forma integral.

$$\int_V \frac{\partial \alpha_q \rho_q \phi_q}{\partial t} dV + \oint \alpha_q \rho_q \phi_q \vec{v}_q \cdot d\vec{A} = \oint \alpha_q \Gamma_{\phi_q} \nabla \phi_q \cdot d\vec{A} + \int_V S_{\phi_q} dV \quad (18)$$

onde \vec{v} é o vetor velocidade; \vec{A} o vetor referente a área superficial; Γ_ϕ o coeficiente de difusão para o termo “ ϕ ”.

Na Equação 19, que representa a forma discreta da Equação 14, a primeira parcela corresponde ao termo temporal, a segunda parcela é o termo convectivo, a terceira corresponde ao termo difusivo e a última parcela da equação é o termo fonte.

$$\frac{\partial \alpha \rho \phi}{\partial t} V + \sum_f^{N_{faces}} \alpha \rho_f \vec{v}_f \phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^{N_{faces}} \alpha \Gamma_\phi \nabla \phi_f \cdot \vec{A}_f + S_\phi V \quad (19)$$

onde N_{faces} é o número de faces que envolvem a célula do volume de controle; ϕ_f é o valor da grandeza “ ϕ ” através da face “ f ”; $\rho_f \vec{v}_f \cdot \vec{A}_f$ é o fluxo mássico pela face “ f ”; V é o volume da célula.

4.5 Transferência de massa entre fases

A transferência de massa na aeração se dá a partir de um balanço material para o oxigênio, onde neste contem a transferência do oxigênio (*OTR*, do inglês *Oxygen Transfer Rate*) do ar para o efluente e, além disso, o consumo de oxigênio (*OUR*, do inglês *Oxygen Uptake Rate*), promovido pelos microrganismos. A fim de visualizar os processos de transferência e consumo do gás, é realizado um balanço de massa para o oxigênio. Este balanço é definido pela Equação 20.

$$\frac{dO_2}{dt} = OTR - OUR = k_L a (C_{O_2}^* - C_{O_2}) - q_{O_2} X \quad (20)$$

onde a representa a área interfacial, k_L é o coeficiente local de transferência de oxigênio, $C_{O_2}^*$ é a concentração de saturação do oxigênio em água, C_{O_2} é a concentração de oxigênio do tempo t , q_{O_2} é a taxa específica de consumo de oxigênio e X representa a concentração de microorganismo.

A parcela referente ao consumo de oxigênio, *OUR*, será numa neste estudo, uma vez que o foco se dá na transferência de oxigênio. O termo fonte da equação da conservação da massa, representado na Equação 1, é representado pela transferência de oxigênio do ar para o efluente, modelado pela Equação 21.

$$S_q = k_L a (C_{O_2}^* - C_{O_2}) \quad (21)$$

A concentração de saturação do oxigênio, dada na Equação 22, é modelada através da correlação de Henry, que, de forma mais generalizada, proporciona uma relação de equilíbrio através do uso da constante de Henry (*He*).

$$C_{O_2}^* = \frac{y_e P_G}{He} \quad (22)$$

Já a área interfacial pode ser calculada através de uma equação fornecida por Ökzan *et al.* (2015), onde estes estabelecem que “ a ” pode ser calculada para cada célula através do gradiente do volume vazio, ou seja, do gradiente do volume da fase gasosa presente na célula. A Equação 23 representa tal equação.

$$a = \sqrt{\left(\frac{\partial \alpha_g}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \alpha_g}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \alpha_g}{\partial z}\right)^2} \quad (23)$$

onde “x”, “y” e “z” representam as coordenadas cartesianas e α_g a fração volumétrica da fase gasosa.

Durante o estudo preliminar outras correlações foram utilizadas para a predição da área interfacial, porém todas se mostraram inadequadas. Concluiu-se que as divergências das soluções foram ocasionadas pela dependência destas equações, representadas pelas Equações 24 e 25, em relação ao diâmetro de bolha, parâmetro este que assume papel secundário em cenários que se utilizam de equipamentos de agitação superficial mecânicos. Em vista disso, a Equação 23, usada para o cálculo da área interfacial, foi a que melhor se adequou ao cenário proposto no estudo, uma vez que esta não é uma correlação dependente do diâmetro de bolha e, em consequência disso, atingiu a convergência.

$$a = \frac{6}{d_{bs}} \frac{\alpha_G}{1-\alpha_G} \quad (24)$$

onde α_G é a fração volumétrica do componente gasoso.

$$a = 6 \frac{V_{total}}{d_{bs}} \quad (25)$$

onde V_{total} é o volume total de bolhas formadas.

Para definição do modelo que irá simular a transferência de oxigênio do meio gasoso para o líquido, foi proposto um estudo comparativo entre dois métodos de análise de transferência de massa com dados obtidos de maneira experimental. Ambos os métodos foram ajustados para um cenário com rotação de 150 rpm. No primeiro modelo, proposto por Hasegawa e Kasagi (2001), referido como Método I, o coeficiente de transferência de massa, k_L , é função do adimensional de Schmidt e da viscosidade turbulenta, μ_τ , conforme a Equação 26.

$$k_L = 0,15 * Sc^{-0,5} \mu_\tau \quad (26)$$

O número de Schmidt pode ser encontrado através da correlação característica, representada pela Equação 27.

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_{ab}} \quad (27)$$

onde μ é a viscosidade, ρ é a massa específica e D_{ab} é o coeficiente de difusividade da espécie “a” em “b”.

Já o segundo modelo testado, referido como Método II, utiliza uma correlação genérica para o cálculo do coeficiente de transferência de massa (ANSYS Fluent UDF Manual, 2013), onde k_L é definido como função do número de Sherwood (Sh), do coeficiente de difusividade e do diâmetro médio de Sauter das bolhas formadas pelo movimento do aerador (d_{bs}). O cálculo do k_L para tal método é dado pela Equação 28.

$$k_L = \frac{Sh D_{ab}}{d_{bs}} \quad (28)$$

Para a correlação de Sherwood foi utilizada o modelo estabelecido por Hughmark (1967), onde este estabelece uma correção para o modelo de Ranz-Marshall. Assim, a Equação 29 representa a equação referente ao número de Sherwood.

$$Sh = 2 + 0,6Re^{0,5}Sc^{1/3}, \text{ para } 0 \leq Re \leq 776,06 \quad (29)$$

Para este segundo método de estudo, o diâmetro médio das bolhas formadas foi determinado através da Equação 30, onde esta é uma correlação que relaciona a área superficial com o volume de bolhas esféricas. Já o Número de Reynolds foi obtido através da Equação 31.

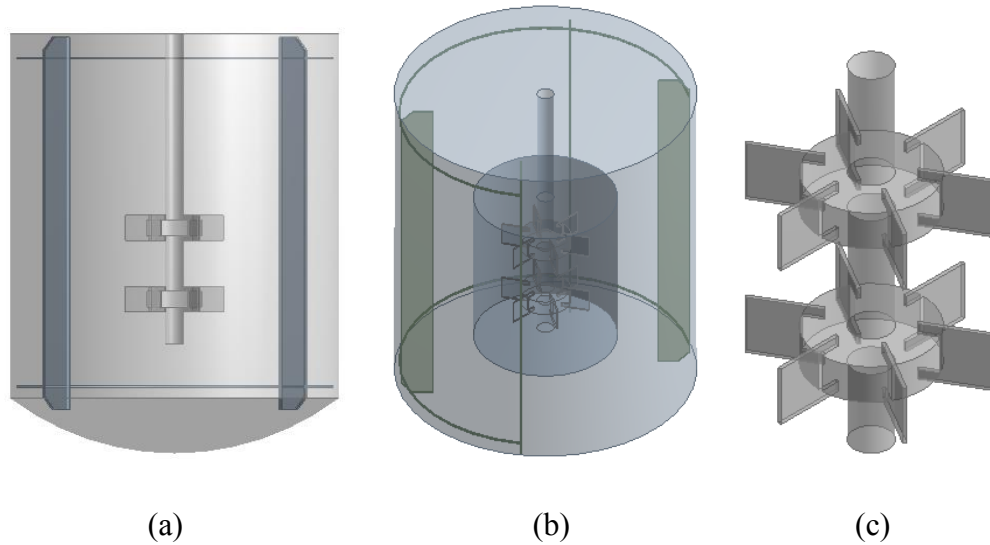
$$d_{bs} = \frac{6}{a} \quad (30)$$

$$Re = \frac{\rho d_{bs} v}{\mu} \quad (31)$$

4.6 Geometria e malha computacional

O desenvolvimento da geometria do domínio de estudo, primeira etapa do pré-processamento, foi realizado no software DesignModeler, presente no ANSYS Workbench 14.5. Tal ferramenta é baseada em modelos CAD, permitindo definir, modelar e editar a geometria do ambiente a ser simulado. A Figura 9 apresenta a geometria do vaso, dos defletores e da região de rotação.

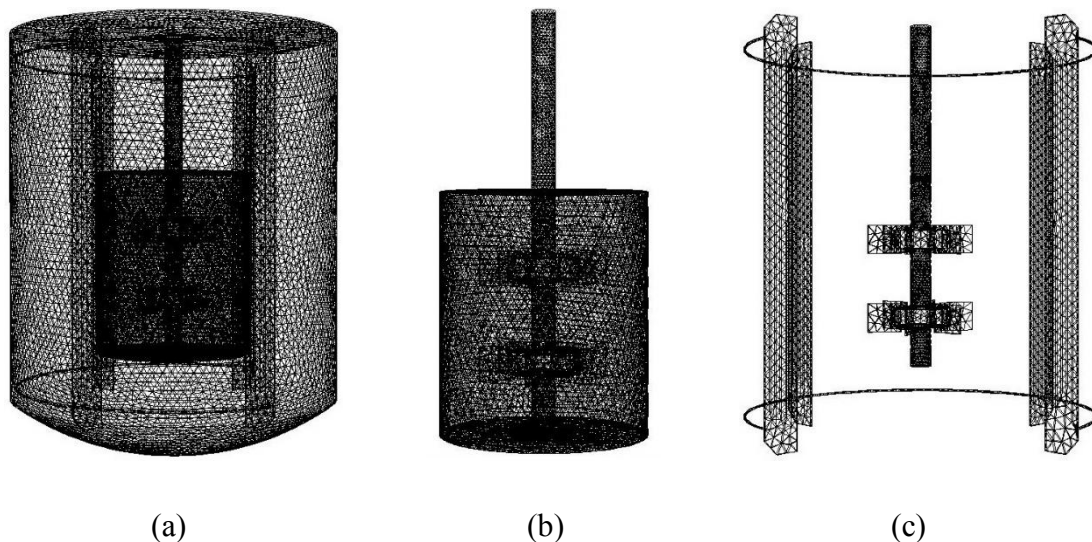
Figura 9: (a) vista lateral da geometria; (b) vista isométrica da geometria; (c) vista isométrica das pás da região de rotação do aerador



Já a malha computacional foi gerada no software MESH, sendo esta uma malha não-estruturada e em sua grande parte composta por tetraedros. Na região de rotação estabelecida para este estudo foi realizado um refinamento da malha, a partir dos recursos presentes no software. Este refinamento foi julgado necessário uma vez que ocorreram problemas de divergência da simulação e uma das soluções encontradas para seguimento do trabalho foi a realização de um refinamento na região de rotação do domínio.

Uma vez que ocorre o movimento constante de estruturas sólidas do domínio computacional, no caso dos componentes presentes região de rotação da geometria, é necessário o uso de uma malha adaptativa, ou móvel, uma vez que esta característica se ajusta a problemas de maior complexidade. A malha computacional pode ser visualizada na Figura 10.

Figura 10: Malha computacional (a) vista lateral do domínio computacional, (b) da região de rotação e (c) do conjunto de pás e defletores



A malha, em sua totalidade, apresentou 486.957 células, número este considerado satisfatório para o caso. Esse número de células é dado como suficiente para o cenário proposto uma vez que a solução atingiu a convergência. Além disso, Elqotbi et al. (2013) realizou estudo utilizando equipamento similar onde a malha computacional gerada no estudo apresentou um número máximo de, aproximadamente, 360.000 células. Foi utilizado vaso de mesma capacidade e dimensões e com a presença de defletores, porém com apenas um conjunto de lâminas no impelidor.

4.7 Condições de contorno, iniciais e de operação

As condições de contorno são necessárias para a resolução das equações governantes do processo. No FLUENT, as condições de contorno estão associadas as zonas e não as faces ou células de maneira individual. Assim, para este trabalho, a velocidade de rotação do impelidor foi definida para os cenários de análise que são propostos neste estudo, sendo as velocidades angulares especificadas em 100, 150 e 200 rpm. A operação do biorreator se deu de maneira contínua. A gravidade foi fixada em 9,81 m/s².

Outras condições de contorno necessárias foram definidas e estas são as condições de parede, relacionadas ao contato do fluido com as paredes tanto do vaso quanto da região de movimento. Foi adotada a condição *non-slip* (não escorregamento), onde esta indica que o fluido se adere à parede e se move com a mesma velocidade da parede, se esta estiver se movendo (ANSYS Fluent UDF Manual, 2013). A Equação 32 define a condição de não escorregamento em paredes estáticas.

$$u = v = w = 0 \quad (32)$$

onde u , v e w são velocidades nas direções x , y e z , respectivamente.

Quando se está modelando fluxos turbulentos utilizando o modelo de turbulência k - ε padrão, deve-se fornecer as condições de contorno para a energia cinética, k , e para sua taxa de dissipação, ε . Nas paredes do domínio computacional, as condições para k e ε são atendidas de maneira automática pelo software, porém as condições que necessitam ser informada são as de entrada, como velocidade e pressão, por exemplo.

Para a zona de topo da geometria, foi usada a condição relacionada a pressão do sistema. No software FLUENT esta condição de contorno é chamada de *pressure inlet*, onde consiste na entrada e saída de pressão através da zona que foi especificada. Condições de

contorno para pressão requerem que seja especificado a pressão manométrica, ou de Gauge, na região onde a condição deve ser aplicada.

O passo de tempo das simulações computacionais realizadas foi fixado em 5,0E-04 segundos. Este valor foi o máximo permitido sem que houvesse problemas com divergência na solução. Para o desenvolvimento do sistema proposto diferentes métodos de solução foram utilizados para resolver os parâmetros requeridos. O Quadro 4 apresenta os métodos de solução para o cenário proposto neste estudo.

Quadro 4: Métodos de Solução para o sistema proposto no estudo

Acoplamento pressão-velocidade ($p-v$)	SIMPLE	
Gradiente	<i>Least Square Cell Based</i>	
Pressão	PRESTO!	
Discretização Espacial	Momento	<i>Upwind</i> de Segunda Ordem
	Fração Volumétrica	<i>Geo-Reconstruction</i>
	Energia Cinética Turbulenta	<i>Upwind</i> de Primeira Ordem
	Taxa de Dissipação Turbulenta	<i>Upwind</i> de Primeira Ordem
Formulação Transiente	<i>Upwind</i> de Primeira Ordem	

Os fatores de sub-relaxação, ou fatores de relaxamento implícito, são utilizados no solver baseado em pressão (*pressure-based solver*) e tem a função de proporcionar estabilidade para a solução, a fim de a convergência seja alcançada. Estes fatores precisam ser definidos de maneira adequada uma vez que podem tornar mais demorada a convergência da solução. O software FLUENT possui valores padronizados para os fatores de sub-relaxação que se adequam a maioria dos casos, porém, se necessário, podem ser modificados em casos específicos. A Tabela 2 apresenta os valores dos fatores de sub-relaxação utilizados.

Tabela 2: Fatores de sub-relaxação utilizados no FLUENT

Pressão	0.3
Densidade	1.0
Forças de atuação no corpo	1.0

Momento	0.3
Energia Cinética Turbulenta	0.8
Taxa de Dissipação Turbulenta	0.8
Viscosidade Turbulenta	1.0

Fatores de sub-relaxação iguais a 1 indicam que o valor deste fator é nulo. Já valores menores que 1 indicam que há sub-relaxação. Apesar de o uso destes fatores aumentar o tempo para a solução convergir, há um ganho significativo de estabilidade e redução de oscilações na solução computacional.

5. RESULTADOS

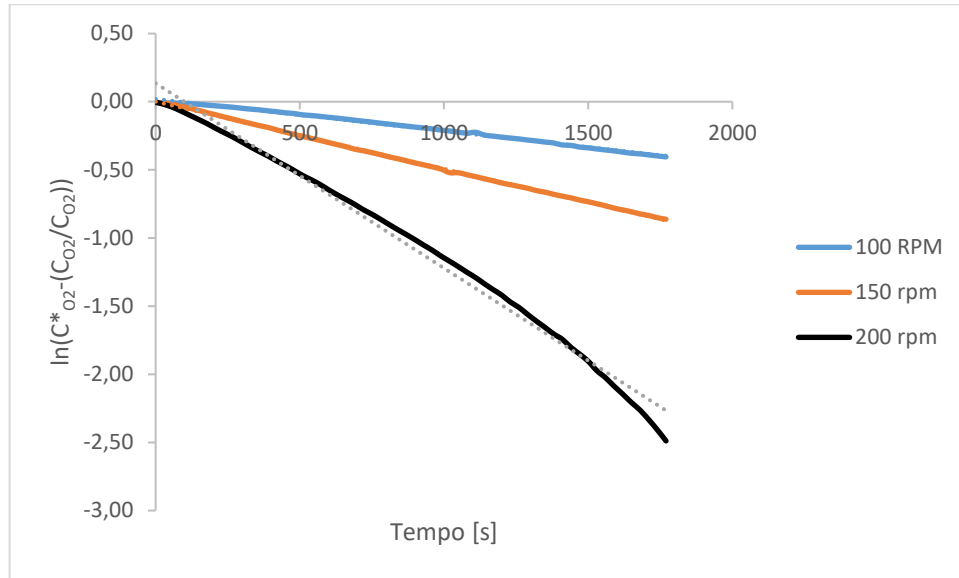
5.1 Resultados experimentais

Dados de oxigênio dissolvido, em %, foram coletados a cada 30 segundos, utilizando um eletrodo de OD. Os dados obtidos experimentalmente são apresentados na Tabela 3.

Tabela 3: Dados experimentais de oxigênio dissolvido

Tempo [s]	Oxigênio Dissolvido [%]		
	100 rpm	150 rpm	200 rpm
0	1,0	0,7	0,2
30	0,9	1,0	2,0
60	1,0	1,9	4,1
90	1,2	3,3	6,8
120	1,5	4,8	9,6
150	1,9	6,2	12,3
180	2,5	7,8	15,0
210	3,0	9,2	17,9
240	3,5	10,7	20,5
270	4,0	12,1	23,0
300	4,7	13,5	25,7
330	5,3	14,8	28,3
360	5,8	16,1	30,7

A função exponencial gerada pela integração da Equação 21, considerando o $k_L \cdot a$ constante, foi linearizada e ajustada aos dados experimentais, onde o coeficiente angular da reta resultante corresponde ao $k_L \cdot a$. As curvas geradas no tratamento dos dados experimentais através da linearização da função exponencial são apresentadas na Figura 11.

Figura 11: Curvas geradas a partir dos dados experimentais para as três rotações de análise

As curvas apresentadas na Figura 11, após a linearização da equação para o cálculo do coeficiente local de transferência de massa, fornecem equações lineares que caracterizam cada curva formada. A Tabela 4 apresenta estas equações, assim como seu tratamento estatístico.

Tabela 4: Equações das curvas para cada rotação

Rotação	Equação	R ²
100 rpm	$y = -2.36E^{-04} * x + 2.04E^{-02}$	0.9959
150 rpm	$y = -5.00E^{-04} * x + 2.06E^{-04}$	0.9995
200 rpm	$y = -1.36E^{-03} * x + 1.35E^{-01}$	0.9893

A partir do comportamento das curvas e dos dados obtidos através da análise das curvas da Figura 11, assim como das equações geradas pela linearização da Equação 21, tem-se os valores médios de coeficiente local de transferência de massa experimental, apresentados na Tabela 5.

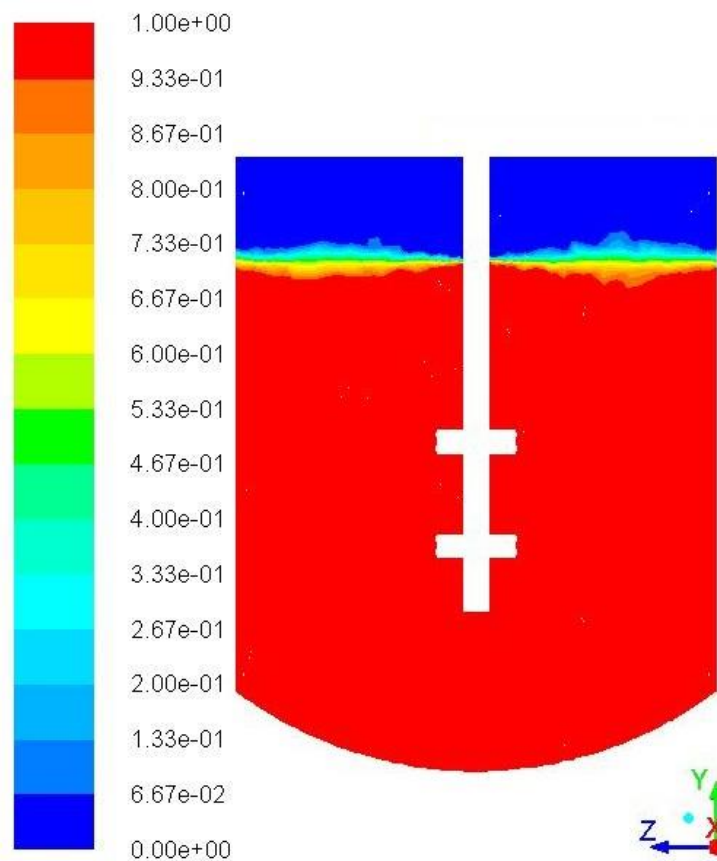
Tabela 5: Coeficientes de transferência de massa experimentais para as rotações de 100, 150 e 200 rpm

100 rpm	150 rpm	200 rpm
2,36E-04 s ⁻¹	5,00E-04 s ⁻¹	1,36E-03 s ⁻¹

5.2 Hidrodinâmica

A hidrodinâmica, desenvolvida no software FLUENT 14.5, foi composta por uma tomada de decisões que formaram o pacote hidrodinâmico do sistema. De maneira inicial, toda a hidrodinâmica foi desenvolvida para a rotação de 150 rpm, tendo um tempo de simulação de aproximadamente 15 minutos, período esse julgado suficiente para que a hidrodinâmica do sistema se tornasse estável. A Figura 11 apresenta a atuação da hidrodinâmica em termos de fração volumétrica do efluente, em um plano de corte bidimensional, no plano Z e Y do eixo de coordenadas.

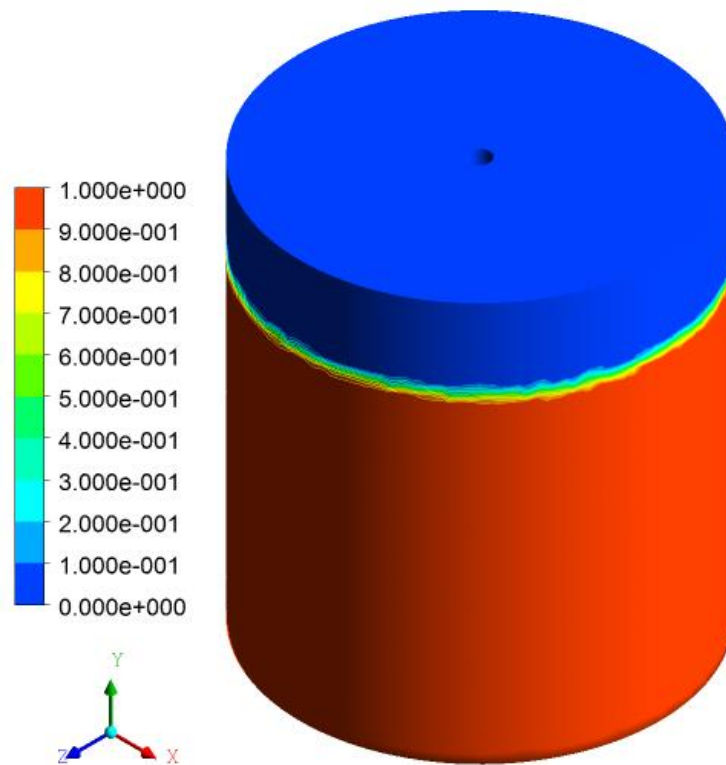
Figura 12: Gráfico de contornos para a fração volumétrica do efluente



A faixa da fração volumétrica da fase efluente varia de 0 a 1, na qual uma fração volumétrica nula determina que não há efluente no volume de controle, ou seja, só há a ocorrência de ar ambiente e para uma fração volumétrica equivalente a 1 somente efluente compõe o volume de controle. Nota-se na Figura 10 que as duas fases do sistema estão bem definidas, sendo a parcela em azul referente ao ar ambiente e a porção em vermelho referente a fase líquida. Essa distinção entre as fases está diretamente relacionada a imiscibilidade que há entre o ar e o efluente, condição essa necessária para aplicação do modelo VOF, segundo

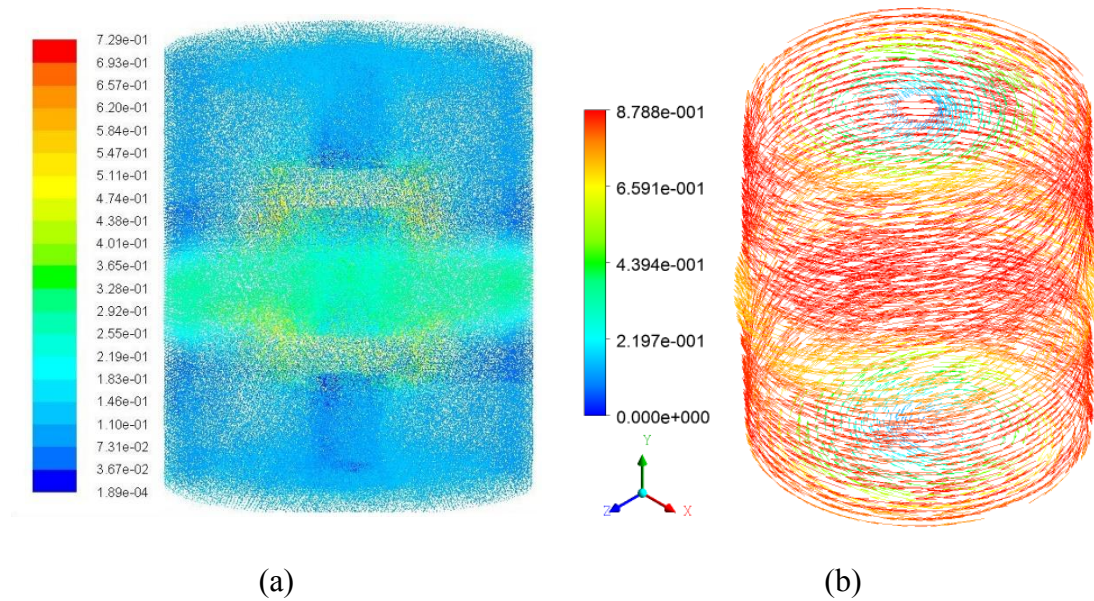
Karpinska e Bridgeman (2016). Já a faixa que se encontra em tonalidade diferente das duas mencionadas refere-se a faixa de transição entre fases, região em que ocorre a transferência de oxigênio do meio gasoso para o líquido. O movimento fluidodinâmico desta região é constantemente monitorado, através da solução da equação da continuidade (Eq. 1), principal aspecto do modelo VOF, conforme especificado por Ratkovich (2010). Esse monitoramento constante foi essencial para a análise de dados, uma vez que é nessa região interfásica que ocorre a transferência de massa entre o ar e o efluente. A Figura 13 apresenta a visualização, em três dimensões, das fases presentes no domínio computacional.

Figura 13: Gráfico de contornos 3D do sistema bifásico para o domínio computacional



A hidrodinâmica do sistema também é representada pela atuação da velocidade da mistura binária. Uma representação dos vetores velocidade para o domínio computacional e para a região de rotação é dada pela Figura 13.

Figura 14: Gráfico de vetores velocidade no âmbito do (a) domínio computacional e da (b) região de rotação

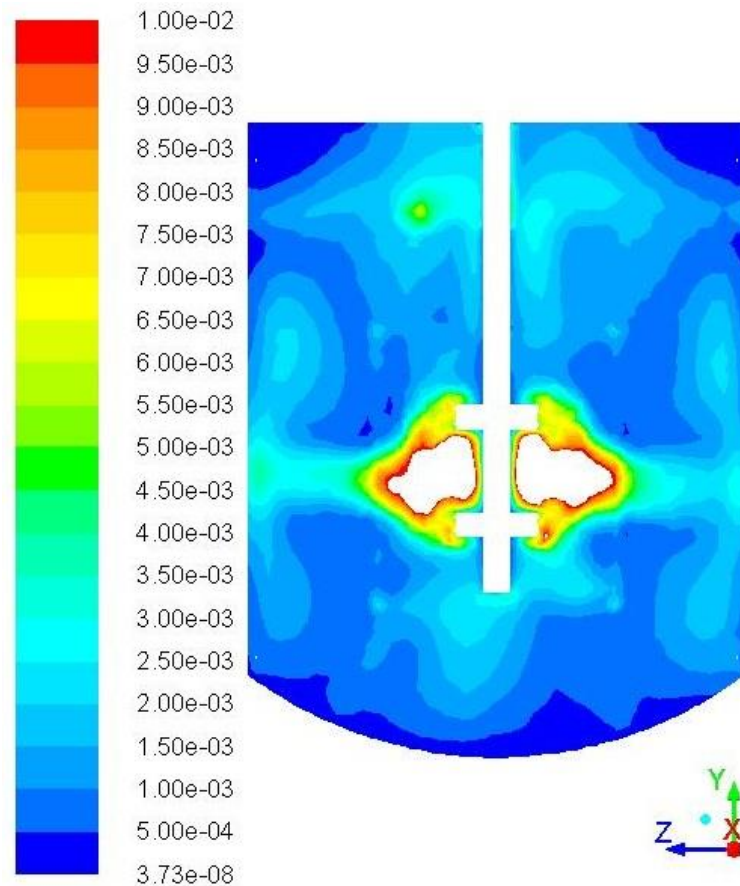


A Figura 14a é uma representação dos vetores velocidade no âmbito do domínio computacional, em uma vista lateral, e conforme a escala lateral da Figura 14a os vetores em tom azul são de menor velocidade e os em tom vermelho os de maior velocidade. Nota-se que na região de rotação presente no interior do biorreator a amplitude das cores indica uma maior velocidade, uma vez que é nesta região que se encontra a atuação do conjunto de pás do impelidor.

Já a Figura 14b representa a análise do vetor velocidade na região de rotação do conjunto de pás do impelidor. O tom em vermelho, conforme indica a escala, representa as maiores velocidades na região. Já vetores em tom azul indica que a velocidade é nula. A região onde a velocidade é nula, conforme a Figura 14b, é na região central encontrada no topo, ponto onde se encontram a parede do eixo do impelidor. Através desta figura pode-se notar que há uma região em tom amarelado, que indica velocidades intermediárias entre a máxima e mínima. Esta velocidade intermediária diz respeito a região presente entre cada conjunto de pás.

A atuação do modelo de turbulência $k-\varepsilon$ é dada através da análise dos contornos de turbulência no domínio computacional. A Figura 15 representa o gráfico de contornos para a turbulência no interior do biorreator.

Figura 15: Gráfico de contornos para a turbulência presente no interior do biorreator



As velocidades mais baixas dentro do biorreator, visualizadas através da paleta de cores da escala da figura, associadas a análise do gráfico de contorno da energia cinética turbulenta representado pela Figura 15, indicam que há pontos de baixa mistura dentro do domínio computacional. Estes pontos estão localizados, principalmente, na zona inferior do biorreator, assim como nos cantos superiores.

5.3 Transferência de Oxigênio na Rotação de Referência

Como citado previamente, a rotação de 150 rpm foi definida como a rotação de referência para os ajustes dos modelos. Esta escolha se baseou no fato de esta ser uma rotação intermediária as três rotações escolhidas como variantes nos cenários propostos. Assim, fazendo-se uso de métodos descritos nas seções anteriores, ambos modelos foram simulados no cenário proposto, através da criação de códigos computacionais que foram compilados no software FLUENT. Na rotação proposta para os ajustes e com o vaso tendo um volume ocupado pela fase líquida de 4 litros, foi fornecido um coeficiente médio de transferência de oxigênio, apresentado na Tabela 6.

Tabela 6: Coeficiente local de transferência de oxigênio experimental e condições de operação do experimento na rotação de 150 rpm

Condições de operação	$k_L * a$ [s^{-1}]
Velocidade de rotação em 150 rpm	
Volume ocupado pela fase líquida de 4 litros	5,00E-04
Experimento com defletores	

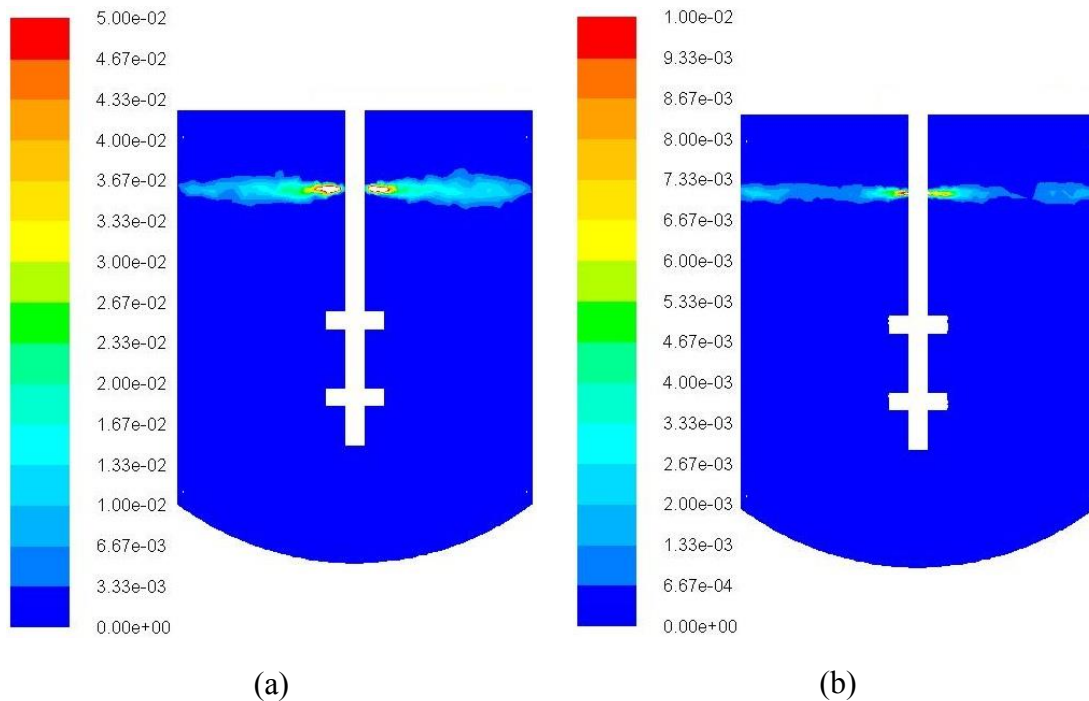
Em uma análise preliminar, utilizando as equações descritas na seção de Modelagem Matemática, pode-se, através de recursos fornecidos pelo software FLUENT, computar os valores médios referentes ao coeficiente de transferência de oxigênio para ambos os métodos. Estes valores são apresentados na Tabela 7.

Tabela 7: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos, com equações originais

$k_L * a$ Método I [s^{-1}]	$k_L * a$ Método II [s^{-1}]
4,51E-04	6,72E-06

Pode-se notar que os valores apresentados na Tabela 7 que, em ambos os métodos, o $k_L * a$ determinado pelas simulações diverge do coeficiente adquirido no método experimental. Em adição a análise dos valores médios de $k_L * a$ simulado e experimental, é apresentado um comparativo entre os gráficos de contorno referentes ao coeficiente de transferência de oxigênio, onde pode-se visualizar a amplitude alcançada pelos valores de $k_L * a$. A Figura 16 apresenta os gráficos de contorno para ambos os modelos atuando com suas equações originais.

Figura 16: Gráficos de contorno para o k_L*a dos Modelos (a) I e (b) II, utilizando equações originais



Através da análise de ambos os gráficos de contorno apresentados na Figura 16, pode-se notar que na Figura 16 (a), do Método I, a amplitude atingida pelos valores de k_L*a é maior em relação a da Figura 16 (b), indicando, de maneira preliminar, que o Método I possui uma melhor capacidade no quesito transferência de oxigênio. Além disso os valores nas escalas de cada gráfico evidenciam que, em ambos os métodos, há divergência quando comparados com os valores médios presentes na Tabela 7, existindo, assim, a necessidade de ajuste nas equações. A diferença entre a amplitude do k_L*a mostrada no gráfico de contorno da Figura 16 não é, de maneira inicial, um aspecto importante, uma vez que as equações necessitam de ajuste. Tal parâmetro terá uma melhor visualização e indicação de real capacidade de transferência de oxigênio após as modificações requeridas em ambos os modelos matemáticos.

Uma segunda análise foi realizada, onde o ambiente de simulação aconteceu sob as mesmas condições da simulação do ambiente de referência, porém, esta análise foi executada sem a presença dos defletores no domínio computacional. Tal análise se justifica em comparar a influência da ausência e da presença de defletores no comportamento do coeficiente de transferência de oxigênio. Os valores do k_L*a médio para ambos os métodos sem a utilização dos defletores, com as equações originais, são apresentados na Tabela 8.

Tabela 8: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos, com equações originais, em cenário sem a presença de defletores

$k_L * a$ Método I [s ⁻¹]	$k_L * a$ Método II [s ⁻¹]
2,70E-03	9,00E-05

5.3.1 Ajustes Matemáticos nos Modelos de Transferência

Uma vez que foi determinado que as equações características dos Métodos I e II não se mostraram adequadas para o cenário proposto, uma correção nestas equações foi proposta a fim de se obter melhor desempenho para o cenário de referência, 150 rpm e volume líquido de 4 litros.

Para ambos os métodos os ajustes necessários foram implementados através da verificação dos valores de coeficiente local de transferência de oxigênio. Uma vez estabelecida a hidrodinâmica do cenário proposto, ou seja, quando o sistema se tornou estável em termos hidrodinâmicos, o software FLUENT permite que o valor de $k_L * a$ seja obtido de maneira instantânea, sendo que foi modificada a função relativa a transferência de oxigênio.

Uma vez comprovada a divergência nos valores simulados e experimental dos coeficientes local de transferência de oxigênio, foi proposto a aplicação de duas equações, se necessário, representadas pelas Equações 32 e 33, para ajuste das equações dos modelos. Estas equações de ajuste foram aplicadas até que o valor do coeficiente local de transferência de massa fosse o mais próximo possível do valor experimental.

$$Ajuste = \frac{Ajuste\ Anterior}{\left(\frac{k_{L^a} simulado}{k_{L^a} experimental}\right)}, \text{ se } k_L * a \text{ experimental} < k_L * a \text{ simulado} \quad (32)$$

$$Ajuste = \frac{Ajuste\ Anterior}{\left(\frac{k_{L^a} experimental}{k_{L^a} simulado}\right)}, \text{ se } k_L * a \text{ experimental} > k_L * a \text{ simulado} \quad (33)$$

Uma vez que o $k_L * a$ simulado é menor que o experimental, a Equação 33 é aplicada, obtendo-se um novo valor de ajuste, onde o valor resultante é substituído na equação característica do Método I. Este novo valor é substituído pelo valor numérico presente no produto da Equação 26. Assim, após uma sequência de ajustes realizados, chegou-se a Equação 34.

$$k_L = 0,1663 * Sc^{-0,5} \mu_\tau \quad (34)$$

Com a equação ajustada o Método I foi novamente simulado onde foi obtido um $k_L * a$ igual a 5,01E-04, valor este julgado próximo do valor experimental, uma vez que o erro relativo entre os valores simulado e experimental foi de aproximadamente 0,3%.

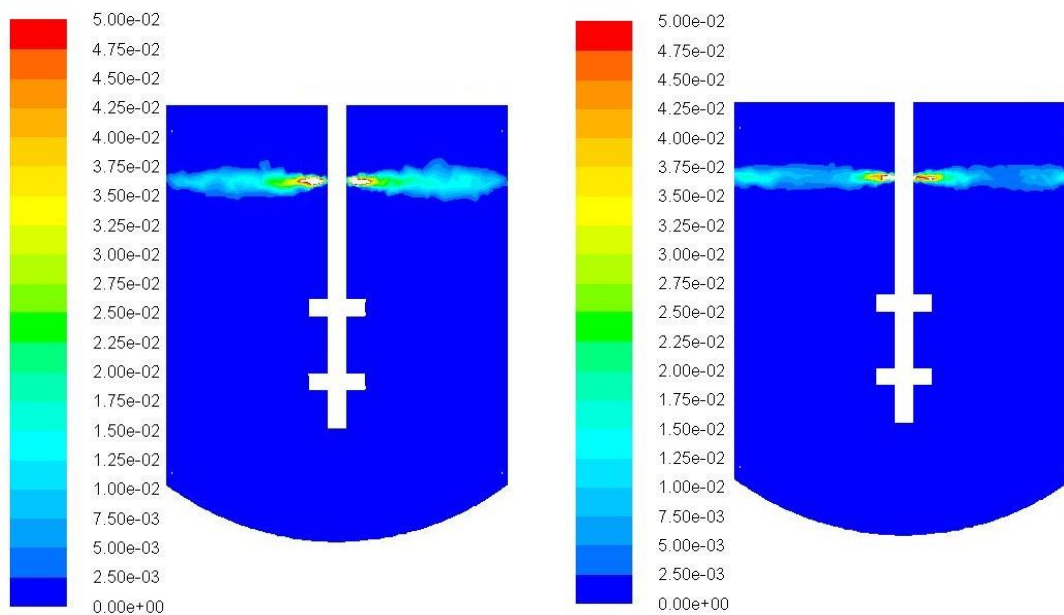
O mesmo procedimento foi realizado para o Método II. Este método possui como equação característica a correlação de Sherwood, dada pela Equação 29. O valor a ser modificado através dos ajustes a serem realizados é a parcela numérica que compõe o produto entre os números de Reynolds e de Schimidt.

Da mesma maneira realizada para o Método I, os ajustes necessários foram implementados através da verificação dos valores de coeficiente local de transferência de oxigênio. O primeiro ajuste realizado no modelo foi a substituição do valor numérico presente na Equação 34 pelo valor de $k_L * a$ obtido na primeira simulação. Também, da mesma maneira, foi utilizada a Equação 32 para os ajustes subsequentes e, a equação ajustada que apresentou um valor de $k_L * a$ que melhor se aproximou do valor experimental é dada pela Equação 35.

$$Sh = 2 + 4,515Re^{0,5}Sc^{1/3}, \text{ para } 0 \leq Re \leq 776,06 \quad (35)$$

Na Figura 17 são apresentados os gráficos de contorno do coeficiente local de transferência de oxigênio para ambos os métodos, aplicando as equações características ajustadas.

Figura 17: Gráficos de contorno para o $k_L * a$ dos Métodos (a) I e (b) II com equações ajustadas e simulações com defletores



(a)

(b)

O coeficiente local de transferência de oxigênio resultante da aplicação da Equação 35 é igual a $5,06E-04 \text{ s}^{-1}$, valor este que possui um erro relativo, em relação ao k_L*a experimental, de aproximadamente 1%, este considerado aceitável. Ambos os métodos estão com o mesmo tempo de simulação e a diferença entre na amplitude do k_L*a no gráfico de contorno indica que o Método II é mais efetivo, em relação ao Método I, em termos de transferência de oxigênio. A partir dos dados de k_L*a apresentados pelas novas equações, os ajustes em ambos os métodos se mostraram satisfatório e, assim, foram aplicados nos cenários propostos com rotações de 100 e 200 rpm.

5.4 Transferência de Oxigênio na Rotação de 100 rpm

A primeira análise realizada após o ajuste dos modelos foi em um cenário de baixa rotação, 100rpm, em relação a rotação de referência. O coeficiente médio de transferência de oxigênio obtido experimentalmente é apresentado na Tabela 9.

Tabela 9: Coeficiente local de transferência de oxigênio experimental e condições de operação do experimento com rotação de 100 rpm

Condições de operação	$k_L*a \text{ [s}^{-1}\text{]}$
Velocidade de rotação em 100 rpm	
Volume ocupado pela fase líquida de 4 litros	2,36E-04
Experimento com defletores	

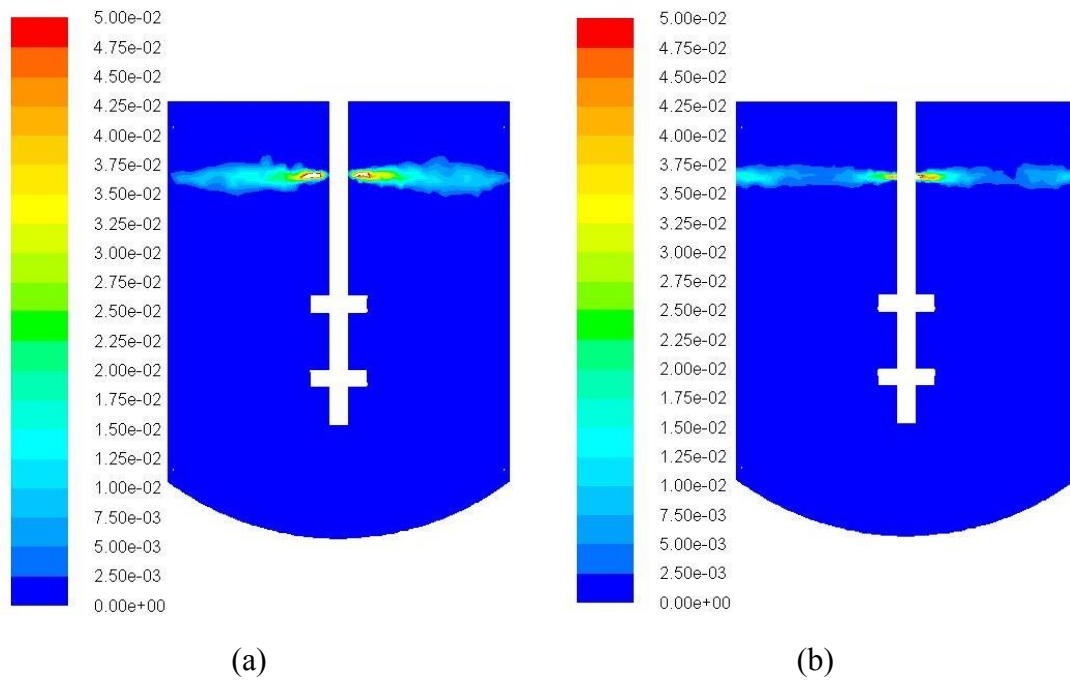
No decorrer das simulações na rotação de 100 rpm, os instantes iniciais foram descartados da análise a fim de que a simulação se tornasse estável após a mudança de rotação. Os resultados obtidos de k_L*a no cenário com defletores são apresentados na Tabela 10.

Tabela 10: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos em cenário de 100 rpm e com a presença de defletores

$k_L*a \text{ Método I [s}^{-1}\text{]}$	$k_L*a \text{ Método II [s}^{-1}\text{]}$
4,67E-04	3,61E-04

A análise dos gráficos de contornos de ambos os métodos, com a presença de defletores é mostrada na Figura 18.

Figura 18: Gráficos de contorno para o k_L*a dos Métodos (a) I e (b) II em 100 rpm e simulação com presença de defletores



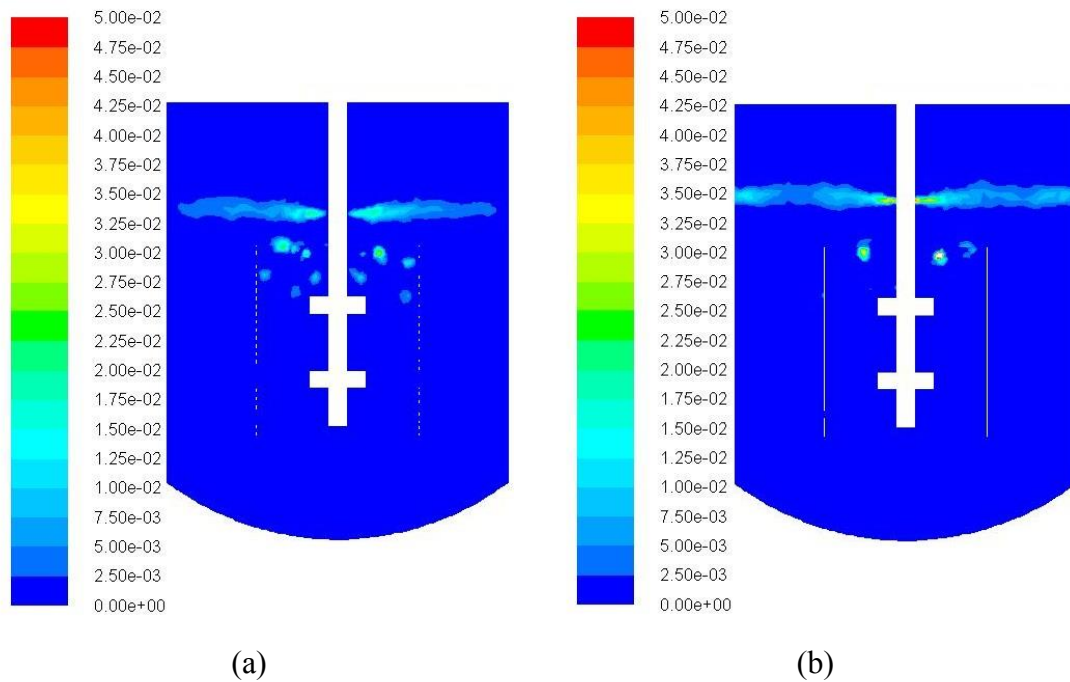
É possível notar que os contornos do gráfico do Método I possuem uma maior amplitude em relação ao segundo método, evidenciando a discrepância nos valores apresentados na Tabela 10. O estudo sem os defletores foi realizado e os dados computados a respeito do coeficiente médio de transferência de oxigênio são apresentados na Tabela 11.

Tabela 11: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos em cenário de 100 rpm com ausência de defletores

k_L*a Método I [s^{-1}]	k_L*a Método II [s^{-1}]
1,70E-04	1,40E-04

Os valores médios dos coeficientes de transferência de oxigênio na rotação de 100 rpm e na ausência de defletores são menores em relação aos valores médios obtidos nas simulações com defletores, conforme comparativo entre os dados das Tabelas 10 e 11. A Figura 19 apresenta os gráficos de contorno de ambos os métodos para o cenário sem defletores

Figura 19: Gráficos de contorno para o $k_L \cdot a$ dos Métodos (a) I e (b) II em 100 rpm e simulação com ausência de defletores



Através da análise dos resultados numéricos e gráficos de ambos os métodos, nos cenários com e sem defletores destaca-se o indicativo de que, para a rotação de 100 rpm utilizando defletores, no cenário com defletores há uma maior capacidade de transferência de oxigênio. Apesar de os valores apresentados na Tabela 11 divergirem do valor experimental, os resultados são coerentes para o tempo de simulação de ambos os métodos. A divergência visível entre os valores se deve ao tempo de simulação não ser extenso, porém, com um tempo maior a tendência é que estes valores venham a convergir. O destaque nesta rotação é o Método II, uma vez que este apresenta uma melhor aproximação, ao longo do tempo, em relação ao valor experimental, conforme Tabela 12.

Tabela 12: Valores de k_L*a ao longo do tempo, para o Método II, na rotação de 100 rpm

Tempo [s]	k_L*a [s⁻¹]
0	3,74E-04
30	3,71E-04
60	3,67E-04
90	3,64E-04
120	3,61E-04

5.5 Transferência de Oxigênio na Rotação de 200 rpm

A última análise computacional proposta para este estudo foi com um cenário em que a velocidade angular do impelidor foi fixada em 200 rpm. Os dados obtidos neste cenário foram comparados com o obtido experimentalmente, apresentado na Tabela 13.

Tabela 13: Coeficiente local de transferência de oxigênio experimental e condições de operação do experimento com rotação de 200 rpm

Condições de operação	k_L*a [s⁻¹]
Velocidade de rotação em 200 rpm	
Volume ocupado pela fase líquida de 4 litros	1,36E-03
Experimento com defletores	

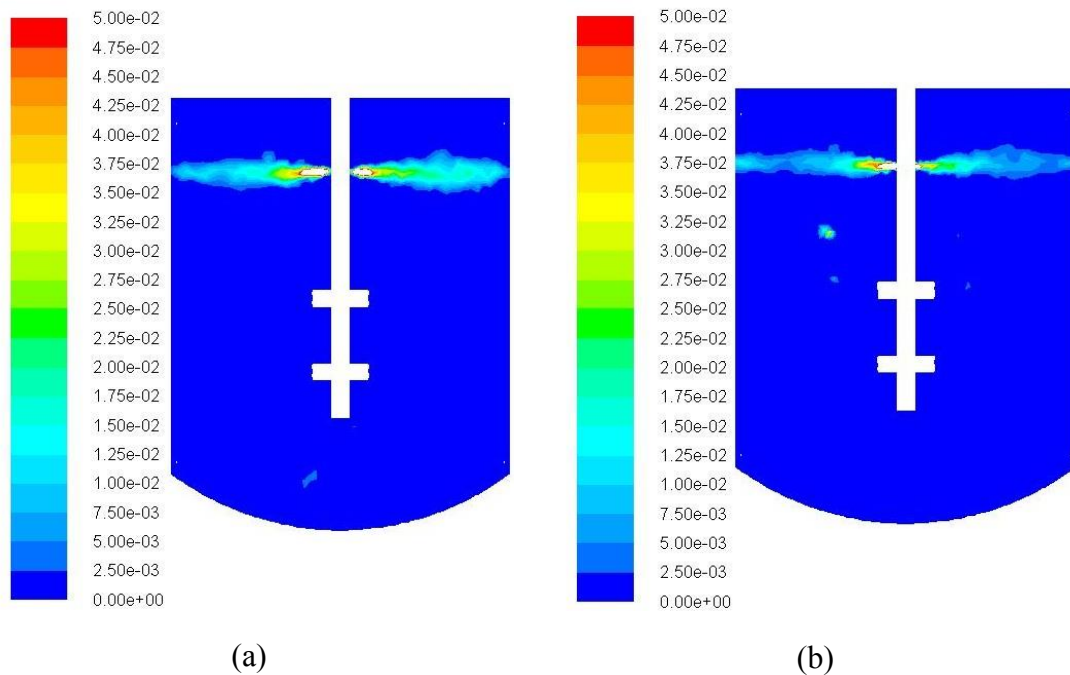
Ambos os métodos foram simulados nas mesmas condições especificadas no método experimental e os valores médios de coeficiente de transferência de oxigênio obtidos, com a presença dos defletores, são apresentados na Tabela 14.

Tabela 14: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos em cenário de 200 rpm e com a presença de defletores

k_L*a Método I [s⁻¹]	k_L*a Método II [s⁻¹]
6,25E-04	3,48E-04

Em relação ao valor experimental, ambos os dados obtidos de k_L*a divergem de maneira aguda. Essa grande diferença pode, também, ser verificada na amplitude do coeficiente local de transferência de oxigênio presente nas curvas de contorno da Figura 20.

Figura 20: Gráficos de contorno para o k_L*a dos Métodos (a) I e (b) II em 200 rpm e simulação na presença de defletores



Na segunda análise do cenário de 200 rpm, com a simulação sem os defletores, também foi verificada divergência de valores quando há a comparação com os dados obtidos nas simulações com defletores. Os valores de k_L*a em 200 rpm sem os defletores são apresentados na Tabela 15.

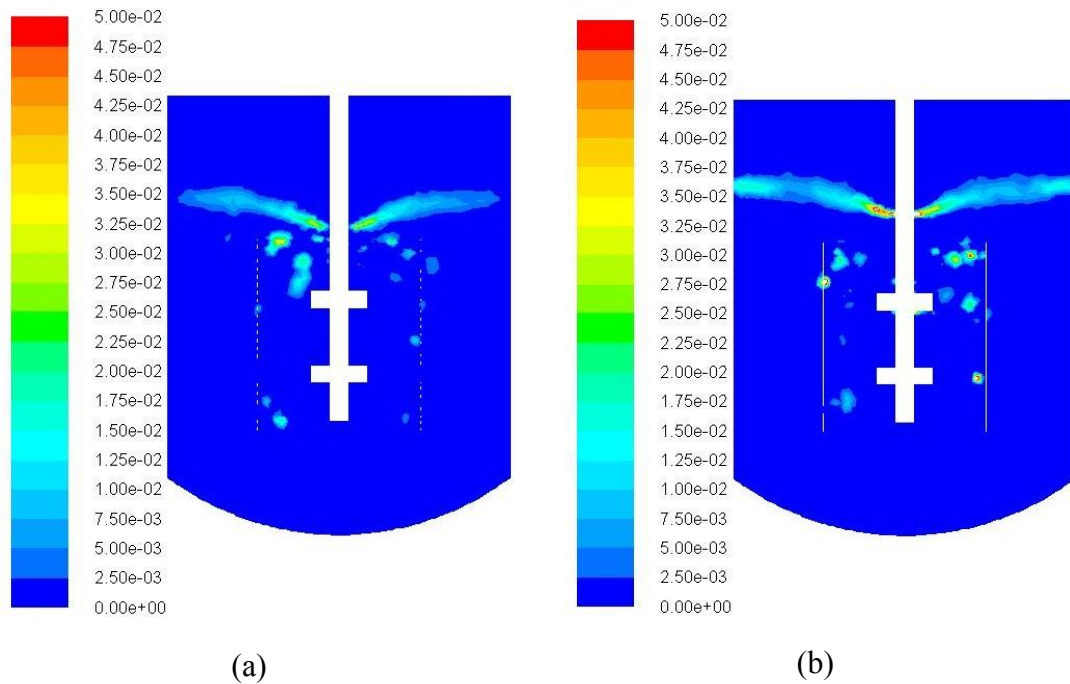
Tabela 15: Coeficientes de transferência de oxigênio para ambos os métodos em cenário de 200 rpm e na ausência de defletores

k_L*a Método I [s ⁻¹]	k_L*a Método II [s ⁻¹]
4,36E-04	6,48E-04

De maneira similar ao cenário com defletores, as curvas de contorno presentes na Figura 19 também enfatizam as diferenças apresentadas na Tabela 15. O valor médio de k_L*a do Método I com defletores é maior que o valor obtido na simulação sem defletores, indicando que a ausência do equipamento proporciona uma maior capacidade de transferência de oxigênio.

Em contrapartida, o Método II com defletores apresenta um valor maior de k_L*a que no cenário sem defletores, sugerindo, assim, uma maior capacidade de transferência de massa quando há a ausência do equipamento.

Figura 21: Gráficos de contorno para o k_L*a dos Métodos (a) I e (b) II em 200 rpm e simulação com ausência de defletores



Através das análises realizadas no cenário de 200 rpm com defletores, comparando-as com os dados experimentais, é possível afirmar que ambos os métodos matemáticos propostos para simular a transferência de oxigênio no domínio computacional não apresentaram resultados satisfatórios não sendo, assim, adequados para aplicação em alta rotação.

6. CONCLUSÕES

Primeiramente foram realizadas as decisões pertinentes para o início do trabalho, através das definições das abordagens de estudo e escolha das ferramentas computacionais. A geometria estabelecida no software DesignModeler é idêntica a geometria física do equipamento experimental, reator biológico BioFlo New Brunswick (CelliGen 115), onde fazem parte do domínio computacional seu vaso, impelidor e defletores. A malha computacional gerada apresentou, após refinamento na região de rotação, número satisfatório de células, totalizando 486.957. Dentre as características da malha computacional estão que esta é móvel, uma vez que a região de rotação do impelidor está em constante movimento, e a faixa do tamanho dos elementos que compõem a malha está entre 5,00E-05 m e 1,00E-02 m.

Um estudo teórico-prático estabeleceu as decisões referentes a hidrodinâmica do cenário proposto. Dentre estas decisões se destacam a escolha do modelo de turbulência, sendo definido o $k-\varepsilon$ padrão, modelo de comprovada precisão e econômico em termos de esforço computacional, além de se adequar melhor a geometrias complexas, caso do cenário deste projeto. Somando-se a isto foi determinado como modelo de fases VOF, *Volume of Fluid*, como o modelo que simulou o escoamento entre fases. Esta formulação foi a que melhor se adequou ao estudo uma vez que é baseado no princípio da imiscibilidade entre fases, resultando assim numa região interfásica bem definida, permitindo um melhor monitoramento da zona onde ocorre a transferência de massa.

A proposta de estabelecer um comparativo entre dois modelos matemáticos para a transferência de oxigênio com dados obtidos de maneira experimental foi efetuada. Este comparativo se deu através do cálculo preditivo do coeficiente local de transferência de massa. Primeiramente foi determinado um cenário de referência para a simulação computacional, sendo fixadas a velocidade angular do impelidor, 150 rpm, e o volume de líquido no vaso, 4 litros. A escolha dessa rotação de referência se baseou no simples fato de ser uma rotação intermediária as propostas para este estudo. Água líquida foi escolhida como fase primária do cenário e, conseqüentemente, ar atmosférico como fase secundária. Todas as propriedades necessárias para os cálculos que envolvem a fase líquida do estudo são referentes a água em seu estado líquido. Além disso, duas análises foram realizadas em cada cenário de rotação, sendo elas com e sem a presença de defletores.

Ambos os modelos para transferência de oxigênio, com e sem defletores, apresentaram resultados de $k_L \cdot a$ médio divergente dos resultados experimentais. Como isso, as

equações características originais dos dois modelos foram ajustadas, no cenário de referência, a fim de se obter convergência nos resultados. Uma vez estabelecida a hidrodinâmica do sistema, os ajustes foram executados através da verificação do valor de $k_L \cdot a$, fornecido de maneira instantânea pelo software. As modificações nas equações se deram até que os valores simulados fossem próximos dos dados experimentais. O coeficiente local de transferência de oxigênio simulado com as equações ajustadas para o Método I e Método II, com defletores, foi de, respectivamente, $5,01E-04 \text{ s}^{-1}$ e $5,06E-04 \text{ s}^{-1}$. A referência experimental foi de $5,00E-04 \text{ s}^{-1}$. O desempenho das simulações foi julgado satisfatório, uma vez que o erro relativo foi de, aproximadamente, 0,3 % para o Método I e 1% para o Método II, ambos considerados aceitáveis.

No cenário de 100 rpm ambos os métodos forneceram valores de $k_L \cdot a$ que não se aproximaram do valor experimental. Através de um comparativo com análises sem o uso de defletores no domínio computacional pode-se observar que para esta rotação ambos os métodos propostos obtiveram uma capacidade de transferência de oxigênio maior que na análise sem a presença dos defletores. Apesar dos valores de $k_L \cdot a$ simuladores serem diferentes do valor de referência, o experimental, notou-se na análise dos dados uma tendência desses valores convergirem com um tempo de simulação maior, com destaque para o Método II nesta rotação. Esta formulação apresentou uma melhor aproximação e o comportamento do coeficiente médio de transferência de oxigênio tende a convergir para o valor de referência, o experimental.

No cenário de 200 rpm, simulação com alta velocidade angular, os dados obtidos com a análise de ambos os métodos com defletores foram insatisfatórios uma vez que houve relevante discrepância entre os valores simulados e o dado experimental. Porém, a aplicação do Método I na presença de defletores apresentou maior capacidade de transferência de massa em relação ao cenário onde os defletores estão ausentes. Já com a aplicação do Método II na simulação sem defletores o valor de $k_L \cdot a$ foi superior ao do cenário com defletores, indicando que para a formulação de tal método é dispensável o uso do equipamento.

Assim, é possível afirmar que os modelos de transferência de oxigênio utilizando os Métodos I e II, para a rotação de 200 rpm, necessitam de um estudo mais amplo para serem utilizados na predição da transferência de oxigênio do ar ambiente para o meio líquido. Porém, o Método II para a rotação de 100 rpm se mostrou promissor uma vez que seus dados possuem a tendência para convergir com dados obtidos experimentalmente. Em três dos quatro cenários propostos para análise a capacidade de transferência de oxigênio, utilizando o equipamento

defletor, foi substancialmente elevada, relevando a importância deste equipamento nas simulações.

7. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para continuidade deste trabalho ou como sugestões para trabalhos realizados na área, alguns aspectos são importantes e estão devidamente listados abaixo. São eles:

- Analisar o comportamento do $k_L \cdot a$ de ambos os métodos em um tempo de simulação maior, a fim de descartar de maneira definitiva os modelos que divergirem dos dados experimentais. Além disso, comparar estas simulações com maior tempo com simulações sem o equipamento defletor, a fim de comparar os cenários em relação a capacidade de transferência de oxigênio;
- Incorporação do estudo e do modelo matemático referente ao consumo de oxigênio promovido pela atividade microbiana;
- Estudo da viabilidade da aplicação dos parâmetros e modelos matemáticos utilizados neste trabalho em uma bacia de aeração de uma estação de tratamento de efluentes a fim de simular e aperfeiçoar o mecanismo visando a otimização do processo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Ansys Fluent UDF Manual, Ansys Inc., 2009. Disponível em: < <https://www.sharcnet.ca/Software/Fluent6/index.htm> >

ANDERSON, J. D. **Computational fluid dynamics: the basics with applications**. New York: McGraw-Hill, 1995. xxiv, 547 p. ISBN 0070016852

ANDREOTTOLA, G. et al. **Método respirométrico para o monitoramento de processos biológicos**. *Engenharia Sanitária e Ambiental*, v. 10, p. 14-23, 2005. ISSN 1413-4152. Disponível em: < http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1413-41522005000100003&nrm=iso >.

BRIDGEMAN, J.; JEFFERSON, B.; PARSONS, S. A. **Computational Fluid Dynamics Modelling of Flocculation in Water Treatment: A Review**. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, v. 3, n. 2, p. 220-241, 2009/01/01 2009. ISSN 1994-2060. Disponível em: < <https://doi.org/10.1080/19942060.2009.11015267> >.

COCKX, A. et al. **Global and local mass transfer coefficients in waste water treatment process by computational fluid dynamics**. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 40, n. 2, p. 187-194, 2001/02/01/ 2001. ISSN 0255-2701. Disponível em: < <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0255270100001380> >.

CORRÊA, L. C. **Controle do Processo da Transferência de Oxigênio em Corpos Hídricos**. 2006. 81 (Dissertação (Mestrado)). Departamento de Hidráulica e Saneamento - Programa de Pós-Graduação em Ciências da Engenharia Ambiental, Universidade de São Paulo, São Paulo.

FAYOLLE, Y. et al. **Oxygen transfer prediction in aeration tanks using CFD**. *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 24, p. 7163-7171, 2007/12/01/ 2007. ISSN 0009-2509. Disponível em: < <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250907006367> >.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. **Computational methods for fluid dynamics**. 3rd, rev. Berlin; New York: Springer, 2002. xiv, 423 p. ISBN 3540420746

GARCIA-OCHOA, F. et al. **Oxygen uptake rate in microbial processes: An overview**. *Biochemical Engineering Journal*, v. 49, n. 3, p. 289-307, 2010/05/15/ 2010. ISSN 1369-703X. Disponível em: < <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1369703X10000380> >.

GONÇALVES, N. D. F. **Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas**. 2007. 71 (Dissertação (Mestrado)). Departamento de Matemática Aplicada / Departamento de Matemática Pura, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, Porto.

HASEGAWA, Y.; KASAGI, N. **The Effect of Schimidt Number on Air-Water Interface Mass Transfer**. 4ª Conferência Internacional de Fluxos Multifásicos, 2001. Nova Orleans, Louisiana, EUA.

HEINZL, R. **Concepts for Scientific Computing**. 2007. 158 (Tese (Doutorado)). Faculdade de Engenharia Elétrica e Tecnologia da Informação, Universidade Técnica de Viena, Viena.

HENKEL, J. **Oxygen Transfer Phenomena in Activated Sludge**. 2010. 179 (Tese (Doutorado)). Engenharia Civil e Geodesia, Universidade Técnica de Darmstadt, Darmstadt.

HUANG, W.; WU, C.; XIA, W. **Oxygen Transfer in High-Speed Surface Aeration Tank for Wastewater Treatment: Full-Scale Test and Numerical Modeling**. Journal of Environmental Engineering, v. 135, n. 8, p. 684-691, 2009.

HUGHMARK, G. A. **Mass and heat transfer from rigid spheres**. AIChE Journal, v. 13, n. 6, p. 1219-1221, 1967. ISSN 1547-5905. Disponível em: < <http://dx.doi.org/10.1002/aic.690130638> >.

ISSA, H. M. **Characterization and improvement of a surface aerator for water treatment**. 2013. Tese (Doutorado). Instituto National Politécnico de Toulouse.

JENKINS, T. E. **Aeration control system design: a practical guide to energy and process optimization**. First edition. Hoboken, New Jersey: John Wiley and Sons, Inc., 2014. xxii, 491 pages ISBN 9781118389980 (hardback).

KARPINSKA, A. M.; BRIDGEMAN, J. **CFD-aided modelling of activated sludge systems – A critical review**. Water Research, v. 88, n. Supplement C, p. 861-879, 2016/01/01/ 2016. ISSN 0043-1354. Disponível em: < <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135415303365> >.

KIRK, T. V.; SZITA, N. **Oxygen transfer characteristics of miniaturized bioreactor systems**. Biotechnology and Bioengineering, v. 110, n. 4, p. 1005-1019, 2013. ISSN 1097-0290. Disponível em: < <http://dx.doi.org/10.1002/bit.24824> >.

LEWIS, W. K.; WHITMAN, W. G. **Principles of Gas Absorption**. Industrial & Engineering Chemistry, v. 16, n. 12, p. 1215-1220, 1924/12/01 1924. ISSN 0019-7866. Disponível em: < <https://doi.org/10.1021/ie50180a002> >.

MARKATOS, N. C. **The mathematical modelling of turbulent flows**. Applied Mathematical Modelling, v. 10, n. 3, p. 190-220, 1986/06/01/ 1986. ISSN 0307-904X. Disponível em: < <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0307904X86900454> >.

MELCONIAN, M. V. **Modelagem Numérica e Computacional com Similitude e Elementos Finitos: Desenvolvimento de Equação Preditiva para o Cálculo da Força de Retenção em Freios de Estampagem**. 1ª Edição. São Paulo: Blucher, 2014.

NORTON, T. et al. **Applications of computational fluid dynamics (CFD) in the modelling and design of ventilation systems in the agricultural industry: A review**. Bioresource Technology, v. 98, n. 12, p. 2386-2414, 2007/09/01/ 2007. ISSN 0960-8524. Disponível em: < <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852406006092> >.

ÖZKAN, F. et al. **Numerical investigation of interfacial mass transfer in two phase flows using the VOF method**. Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, v. 10, n. 1, p. 100-110, 2016/01/01 2016. ISSN 1994-2060. Disponível em: < <https://doi.org/10.1080/19942060.2015.1061555> >.

PITTOORS, E.; GUO, Y.; W. H. VAN HULLE, S. **MODELING DISSOLVED OXYGEN CONCENTRATION FOR OPTIMIZING AERATION SYSTEMS AND REDUCING OXYGEN CONSUMPTION IN ACTIVATED SLUDGE PROCESSES: A REVIEW**. Chemical Engineering Communications, v. 201, n. 8, p. 983-1002, 2014/08/03 2014. ISSN 0098-6445. Disponível em: < <https://doi.org/10.1080/00986445.2014.883974> >.

POLEY, I. M. **Modelagem e Simulação CFD de Reações de Transesterificação em Tanques com Agitação Mecânica**. 2014. 80 (Dissertação (Mestrado)). Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais / Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Minas Gerais, Minas Gerais.

RAVI, P. R. **Numerical Study of Crystallization Process Using CFD Tools**. 2013. 44 (Dissertação (Mestrado)). Department of Chemical Engineering, National Institute of Technology, Routkela.

RATKOVICH, N. R. **Understanding hydrodynamics in Membrane Bioreactor systems for wastewater treatment: Two-phase empirical and numerical modelling and experimental validation**. 2010. 223 (Tese (Doutorado)). Ghent University, Bélgica.

ROSA, L. M. D. **Simulação de reações químicas e consumo de calor em risers**. 2002. Dissertação (Mestrado). [s.n.]

SAMSTAG, R. W. et al. **CFD for wastewater treatment: an overview**. Water Science and Technology, v. 74, n. 3, p. 549-563, 2016. Disponível em: < <http://wst.iwaponline.com/content/ppiwawst/74/3/549.full.pdf> >.

SAYMA, A. **Computational Fluid Dynamics**. 1ª. Ventus Publishing ApS, 2009. ISBN 9788776814304.

SEADER, J. D.; HENLEY, E. J.; ROPER, D. K. **Separation process principles: chemical and biochemical operations**. 3rd. Hoboken, NJ: Wiley, 2011. xxvi, 821 p. ISBN 9780470481837 (hardback). Disponível em: < Cover image <http://catalogimages.wiley.com/images/db/jimages/9780470481837.jpg> >.

SINGH, L. **Mesh Generation: A Critical Review**. International Journal of Mechanical, Aerospace, Industrial, Mechatronic and Manufacturing Engineering, v. 4, n. 6, p. 7, Junho 2016. ISSN 2321-3051.

SPERLING, M. V. **Basic principles of wastewater treatment**. London: IWA Publishing, 2007. ISBN 9781843391623

THAKRE, S. B.; BHUYAR, L. B.; DESHMUKH, S. J. **Effect of Different Configurations of Mechanical Aerators on Oxygen Transfer and Aeration Efficiency with respect to Power Consumption**. International Journal of Mechanical, Aerospace, Industrial, Mechatronic and Manufacturing Engineering, v. 14, p. 170 - 178, 2008. Disponível em: < <http://waset.org/publications/14042> >.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method**. Harlow: Longman Scientific & Technical, 1995. ISBN 0582218845

VIANA, E. D. C. **Simulação Numérica de Escoamentos com Condições de Contorno Dependentes do Tempo na Entrada do Domínio de Cálculo**. 2005. 183 (Dissertação

(Mestrado)). Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira, Universidade Estadual Paulista, Ilha Solteira.

VISSMAN, W. **Water supply and pollution control**. 8th. Upper Saddle River, NJ: Pearson Prentice Hall, 2009. xviii, 843 p. ISBN 9780132337175.

WEI, W. L.; ZHAO, X. J.; LIU, Y. L. **3D Simulation of Gas–Liquid Two-Phase Flow in an Aeration Tank**. *Advanced Materials Research*, v. 482-484, p. 637-642, 2012. ISSN 1662-8985.

XIAO, K. et al. **Engineering application of membrane bioreactor for wastewater treatment in China: Current state and future prospect**. *Frontiers of Environmental Science & Engineering*, v. 8, n. 6, p. 805-819, December 01 2014. ISSN 2095-221X. Disponível em: < <https://doi.org/10.1007/s11783-014-0756-8> >.