

XI-116 - MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO COMPORTAMENTO TÉRMICO DE UM REATOR ANAERÓBICO EM BATELADA PARA A PRODUÇÃO DE BIOGÁS

Pedro Henrique de Lima Gomes⁽¹⁾

Engenheiro de Energias pela Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira. Mestrando em Ciências Físicas Aplicadas pela Universidade Estadual do Ceará.

Ismael Italo Barbosa Maciel⁽²⁾

Graduando em Física pela Universidade Estadual do Ceará.

Anderson Honório de Brito Pontes⁽³⁾

Químico e Mestre em Ciências Físicas Aplicadas pela Universidade Estadual do Ceará.

João Batista Furlan Duarte⁽⁴⁾

Doutor em Física pela Universidade Federal do Ceará. É docente da Universidade de Fortaleza e do Programa de Pós-Graduação em Informática Aplicada. Líder do grupo de pesquisa em Tecnologia da Combustão e do grupo de pesquisa em Petróleo, Gás e Sistemas de Energia, e outros.

Mona Lisa Moura de Oliveira⁽⁵⁾

Doutora em Engenharia Mecânica pelo Instituto Superior Técnico de Lisboa. É docente adjunta do curso de Física e coordenadora do Laboratório de Conversão Energética e Emissões Atmosféricas, membro do conselho LAIS - Laboratórios Associados de Inovação e Sustentabilidade da Universidade Estadual do Ceará. Docente do Programa de Pós-graduação em Tecnologia e Gestão Ambiental do IFCE-Fortaleza, e etc.

Endereço⁽¹⁾: Universidade Estadual do Ceará, Av. Dr. Silas Munguba, 1700 – Campus do Itaperi - Fortaleza - Ceará - CE – CEP: 60.714.903 - Brasil - Tel: (85) 3101.9904 - e-mail: phenrique.lima@aluno.uece.br.

RESUMO

Os combustíveis tem sido uns dos vilões da sociedade moderna, sobretudo por conta das emissões atmosféricas. Desta forma, o aproveitamento de fontes alternativas de energia menos poluentes, como o biogás, vem ganhando atenção do setor energético (industrial e transportes). O seu processo de produção é influenciado por variáveis como a temperatura, que influencia parâmetros cinéticos (como a taxa de crescimento máxima das bactérias) e a agitação que pode diminuir zonas mortas do meio, aumentar o contato entre a biomassa e os substratos, e ainda, pode evitar a estratificação térmica. Nesse contexto, a distribuição de temperatura em um reator em batelada, destinado à produção de biogás, operando com e sem agitação foi investigada através de simulações CFD utilizando-se ferramentas do software ANSYS® *Fluent Academic Release* R1. Nesse processo de simulação foi desenvolvido um CAD 3D e uma malha computacional a partir da região de interesse; foram definidas condições iniciais, de contorno e modelos físicos e numéricos utilizadas na etapa de solução. Os resultados das simulações foram suficientes para um entendimento inicial de como se dá a distribuição da temperatura em cada ponto de medição analisado. Dentre os pontos analisados, a base cônica e a tampa apresentaram os menores valores de temperatura, enquanto o fluido interno e a parede cilíndrica os maiores valores. Quando comparadas as simulações com e sem agitação percebeu-se que o cenário com agitação apresentou uma maior transferência de calor entre a parede cilíndrica e o fluido interno do reator, e manteve ainda uma temperatura uniforme no interior do reator, porém com um valor abaixo do obtido experimentalmente. Além disso, fez com que os fluidos estagnados próximos à tampa e a parede cilíndrica fossem transportados para outras regiões do reator, mantendo assim uma distribuição de temperatura mais adequada e favorável ao processo de digestão anaeróbica.

PALAVRAS-CHAVE: Reator tipo batelada, Produção de biogás, Comportamento térmico, CFD.

INTRODUÇÃO

O uso de combustível fóssil como fonte de energia é o principal responsável pelo aumento acentuado das emissões de gases de efeito estufa (CO₂, CFCs, CH₄ e outros) (DRUMM *et al.*, 2014). De forma a contornar essa problemática, os países estão buscando fontes de energias alternativas, estando dentre elas a biomassa (MOHAMMADREZAEI; ZAREEI; BEHROOZI-KHAZAEI, 2018). Essa fonte de energia pode ser utilizada

para a produção de biogás, a partir da digestão anaeróbica de dejetos animais e resíduos orgânicos de diferentes origens (DOMINGUES, 2010).

O processo de produção de biogás é altamente dependente da variação de temperatura e de outras variáveis, no sentido de que compromete diretamente a termodinâmica das reações, modifica a velocidade específica de utilização de substratos, e até pode reduzir a produção de gás devido à inibição microbiana (NESHAT, 2017; GIACOBBO, 2013). Outra variável influente no processo e na variação da temperatura é a agitação do meio, que segundo Berrio *et al.* (2015), é responsável pela diminuição das zonas mortas do meio, da melhor interação entre os substratos e por evitar a estratificação térmica do reator. Em certas circunstâncias são utilizados reatores automatizados como biodigestores, e devido a isso suas características são absorvidas, tais como a capacidade de aquecer e agitar o meio reacional automaticamente (SHARAFAN, 2015).

A forma estática ou dinâmica dos fluidos tem seu comportamento descrito por um conjunto de equações diferenciais parciais, as quais são baseadas na conservação de massa, energia, momentum linear e angular (REYNOL, 2008). A Fluidodinâmica Computacional (CFD) faz uso de tais equações para simular numericamente o escoamento de fluidos, a transferência de calor e de seus fenômenos relacionados (SHARAFAN, 2015; KESSLER, 2016). Essa ferramenta pode vir a usar diferentes métodos numéricos para esse fim, dentre eles podemos destacar o método numérico da diferença finita, do elemento finito e do volume finito (SADINO-RIQUELME, 2018). O seu uso garante a redução de tempo e custo de novos projetos, uma vez que os novos projetos são simulados sem que seja necessária a realização experimental, e ainda, possibilita o estudo de sistemas sob condições perigosas, além dos limites normais de desempenho (JUNIOR, 2017; NOVAIS, 2011).

O processo de simulação CFD ocorre em três etapas, sendo a primeira responsável pela geração da geometria de interesse, da malha obtida pelo método de discretização e pela definição dos modelos matemáticos relacionados aos fenômenos em estudo; A segunda correspondente à transformação das equações diferenciais parciais em algébricas e a sua resolução iterativa em busca da convergência (REYNOL, 2008); A terceira é o momento no qual os resultados são analisados e visualizados a através de gráficos vetoriais, de contorno, por distribuição de diferentes escalares e vetores. Nesse estudo, a simulação CFD se faz necessária para compreensão da distribuição de temperatura em um reator automatizado destinado a produção de biogás provindo de dejetos suínos.

OBJETIVOS

Esse trabalho tem como objetivo principal avaliar via simulação CFD a distribuição de temperatura no interior de um reator em batelada destinado à produção de biogás diante de cenários com e sem agitação.

METODOLOGIA: REATOR E FERRAMENTAS COMPUTACIONAIS

O reator em estudo foi fabricado em aço inox, possui um volume útil de aproximadamente 11,7 L, funciona em sistema de regime de batelada e possui um sistema autônomo de coleta de dados. A Figura 1 apresenta o reator e seu sistema de instrumentação elétrica e eletrônica que coleta informações relacionadas às condições do processo reacional (*e.g.*, a digestão anaeróbica), sendo mensuradas os dados referentes à temperatura, pressão e pH do meio. Se tratando das ferramentas computacionais, utilizou-se para criação do CAD do reator o software livre *FreeCAD* e para a modelagem e simulação CFD o software ANSYS® *Fluent Academic Release R1*, que inclui aplicativos como o *Design Modeler*, *Meshing* e *Fluent*.

METODOLOGIA: AQUISIÇÃO DE DADOS DE TEMPERATURA E MATERIAIS

As temperaturas correspondentes às partes constituintes do reator (como tampa, base cônica e parede cilíndrica) foram mensuradas a partir de termopares tipo K, produzidos pela *National Instruments*, acoplados a dispositivos de entrada de temperatura tipo USB-TC01, e esses a um computador. Já as leituras da temperatura interna do reator foram medidas através de um sensor tipo RTD (PT100), localizado sobre a tampa do reator e próximo à parede cilíndrica (raio 0,102 m). Esse dispositivo possui uma haste (elemento sensor) que fica

interna ao reator e em contato com o fluido em seu interior. Os dados de temperatura foram coletados ao longo de um período de tempo de 6 horas.



Figura 1. Reator automatizado e seu sistema de instrumentação de aquisição de dados (PONTES, 2018).

De forma a realizar uma análise térmica inicial utilizou-se água como meio de transferência de calor, visto que é uma prática comum em estudos dessa natureza (NOVAIS, 2011). Os valores usados e relacionados às propriedades físicas da água e do aço foram adquiridos através da base de dados do software CFD. Esse fluido foi escolhido devido à facilidade de obtenção e por suas propriedades já serem bem conhecidas. De forma a diminuir a complexidade do problema em análise, esse estudo considerou apenas os fenômenos de transporte de calor associado à condução e convecção. É válido ressaltar que perdas de calor em geral não foram levadas em consideração. A Tabela 1 apresenta as propriedades da água, em condições normais de pressão e temperatura (1 atm e 25°C), e do aço utilizado na fabricação do reator.

Tabela 1 – Propriedades físicas dos materiais.

Propriedades	Unidade	Materiais	
		Água	Aço
Densidade	kg/m ³	998,2	8030
Viscosidade dinâmica	kg/m.s	0,00089	-
Massa molar	kg/kmol	18,02	-
Condutividade térmica	W/m.K	0,6069	16,27
Calor específico	J/kg.K	4181,7	503

METODOLOGIA: DESENVOLVIMENTO DO ESTUDO EM CFD

Geralmente a metodologia usada nas simulações de CFD envolve várias etapas como visto anteriormente, estando dentre elas: a definição do problema que se quer estudar; a etapa de pré-processamento que abrange a geração da geometria de interesse, a malha computacional, definição de aspectos numéricos e físicos (condições iniciais, de contorno e os modelos matemáticos); a etapa de solução destinada às equações de transporte sobre cada subdomínio presente na malha computacional; e por último, a etapa de pós-processamento para análise e visualização dos dados simulados (DAZA, 2017; SILVA, 2017).

Obtida através do *software FreeCAD*, a geometria de interesse refere-se à região interna do reator ocupada pelo fluido a ser estudado e tem como base o CAD 3D do reator em questão. As geometrias de interesse empregadas nas simulações divergem principalmente pela presença ou não do agitador. A geometria utilizada na análise estacionária (sem agitação) abrangeu apenas metade da geometria de interesse, uma vez que o princípio de simetria foi utilizado por questões de tempo e custo computacional. A Figura 2 apresenta em detalhes a geometria de interesse para os cenários sem (A1) e com agitação (A2), as dimensões do agitador mecânico de pás inclinadas a 45° (B1) e as dimensões da parede cilíndrica e da base cônica (B2). O agitador possui um modelo único de seu projeto, não sendo encontrado na literatura outro igualmente até o presente momento.

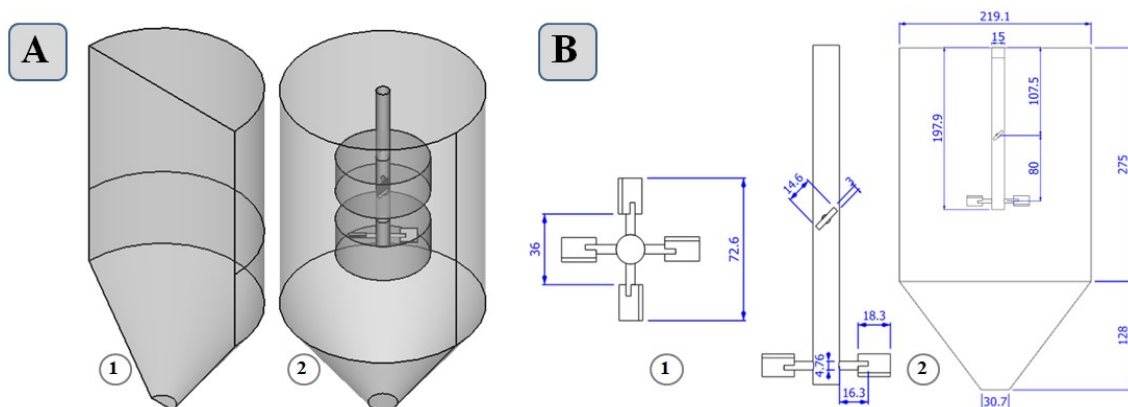


Figura 2. Geometria de interesse utilizada no cenário sem agitação (A1) e com agitação (A2); Dimensões do agitador (B1) e da geometria de interesse completa (B2).

A malha computacional foi criada a partir da geometria de interesse no aplicativo *Meshing* do software ANSYS® *Fluent Academic Release R1*. A sua obtenção partiu da ferramenta *mesh* do atual aplicativo, que tem como base o método de discretização em volumes finitos. O tempo de execução da simulação está diretamente relacionada ao número de volumes de controle e a sua dimensão, pois quanto maior o número de volumes maior será o esforço computacional (NOVAIS, 2011). A malha gerada nesse estudo foi composta por 155009 e 142167 volumes do tipo tetraédrico para os domínios rotativo e estacionário, respectivamente. Detalhes dos elementos nas superfícies dos domínios estacionário e rotativo são apresentados na Figura 3. A malha gerada é de alta qualidade, pois um valor médio de $0,81 \pm 0,14$ foi obtido para a métrica *Element Quality* que possui um range que vai de 0 a 1. Ainda, foi observado que a malha gerada não possui conexões incorretas entre os volumes da malha, pois não há valor negativo para o volume mínimo.

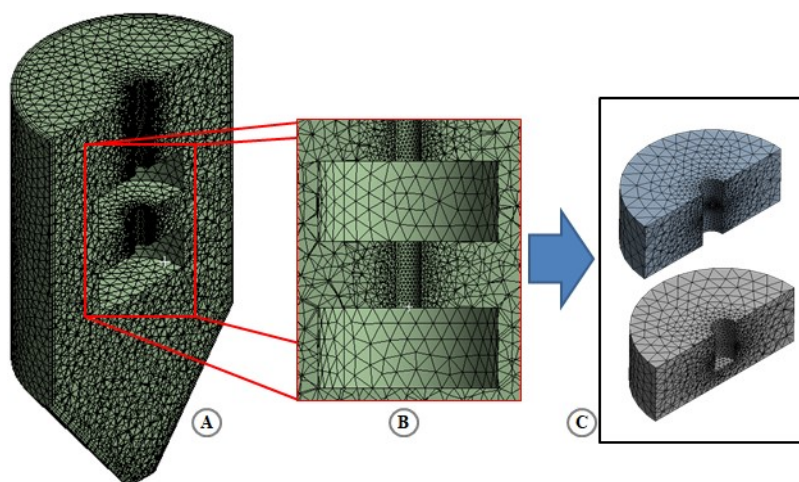


Figura 3 – Plano transversal da malha referente aos domínios estacionário (A), região do domínio rotativo (B) e domínios rotativos (C).

Para que o problema físico proposto possa ser solucionado, condições de contorno devem ser definidas, e estas devem ser embasadas em considerações e suposições apropriadas já que é peça chave para uma simulação CFD bem sucedida. Além disso, possibilita a resolução precisa das equações governantes (continuidade, quantidade de movimento e energia) e torna a solução mais próxima do processo físico avaliado. As condições de contorno têm como finalidade determinar de onde começa o problema e aonde se pretende chegar (DAZA, 2017; MOURA, 2018; VERGEL, 2013). Essas condições são adotadas com base em resultados de pesquisas anteriores que descreveram os fenômenos físicos de um determinado problema, a exemplo, em estudos de reatores de mistura não isotérmicos (PRADA; NUNHEZ, 2017). Segundo Vergel (2013) e Prada (2015) algumas condições de contorno são comuns e sempre aparecem em simulações dessa natureza. Para o presente estudo, estas condições foram aplicadas na interface entre domínios (rotativo e estacionário), pás e eixo, tampa, base cônica e parede cilíndrica do reator.

No cenário sem agitação, o modelo de viscosidade de caráter laminar utilizado em conjunto com o modelo de energia, se fez necessária para que a utilização de condições de contorno térmicas e transferência de calor fossem consideradas na simulação. Além disso, esse modelo permite a atuação de fenômenos devido à condução, convecção, radiação, difusão de espécies, dissipação viscosa, calor da reação química e quaisquer outras fontes de calor volumétrico definido (ANSYS, 2013a).

No cenário com agitação, que ocorre durante 3 minutos a cada 2h, o modelo de energia aplicado teve o mesmo objetivo descrito no cenário sem agitação. O modelo de viscosidade turbulenta *Shear Stress Transport SST* foi usado com intuito de levar em consideração o aquecimento devido à dissipação viscosa no interior do reator, devido ao elevado valor de RPM utilizado. Já abordagem *Multiple Frames of Reference* foi usada para que as equações de movimento incorporem os termos de aceleração adicionais que ocorrem devido à transformação que há na interface dos domínios estacionário e rotativo, pois o reator é dividido em uma porção interna que envolve o impulsor e gira em relação ao resto do tanque (domínio rotativo), e outra que contém as demais partes restantes do reator (domínio estacionário) (ANSYS, 2017; VERGEL, 2013). Vale ressaltar que a interface entre os fluidos no interior do reator foi desconsiderada para evitar uma simulação multifásica de imediato, sendo assim, o espaço vazio a cima da superfície livre do fluido predominante foi ocupada por água. A Tabela 2 a seguir descreve as condições de contorno gerais aplicadas aos diferentes locais do reator. O cenário sem agitação empregou a condição de não escorregamento e de temperatura local constante, enquanto que o cenário com agitação utilizou todas na simulação.

Segundo Daza (2017) todas as simulações partem de valores iniciais ou nulos para variáveis de campo de velocidade, pressão e temperatura, e param no momento em que um perfil de fluxo desenvolvido e/ ou uma temperatura estacionária são atingidos. Nesse estudo, manteve-se uma temperatura inicial constante ao longo do tempo para as partes do reator, e as condições relacionadas às variáveis de campo de velocidade e pressão relativa, iniciaram com valores nulos em ambos cenários. Já a temperatura inicial foi considerada como sendo a menor temperatura registrada no reator ao longo das 6 horas de teste. Os valores iniciais de temperatura utilizados podem ser observados na tabela da Figura 5b, na coluna intitulada de base cônica.

Tabela 2 – Condições de contorno utilizadas nos cenários com e sem agitação. * As condições de contorno térmicas possuem os mesmos valores expressos na tabela da Figura 5b para o respectivo local.

Local	Condição	Descrição
Interface entre domínios	Interface fluida-fluida	Mudança do sistema de referência
Pás e eixo	Parede rotativa	Velocidade de 600 rpm
Parede cilíndrica, tampa e base cônica	Não escorregamento; Temperatura local constante*.	Parede lisa; Velocidade nula

Tais modelos físicos são baseados nos princípios da conservação de massa, momento e energia para o escoamento dos fluidos em tanques de mistura. As equações pertinentes a esses fenômenos são apresentadas na Figura 4 em sua forma geral (SILVA, 2017; DAZA, 2017), para ambos os cenários simulados. Quando a equação de quantidade de movimento é utilizada, deve-se escolher a formulação de velocidade adequada ao problema a ser analisado. Nesse estudo, a formulação de velocidade relativa foi utilizada devido ao fluxo na maior parte do domínio está em movimento e pela ausência de defletores ocasionarem um grande raio de arraste do fluido envolta do agitador. Portanto, a equação de quantidade de movimento utilizada no cenário com agitação, formulada para expressar as velocidades relativas como variáveis dependentes possuem quatro termos de aceleração adicionais, são eles: a aceleração de Coriolis, a aceleração centrípeta, e os termos referentes à mudança instável da velocidade de rotação e velocidade linear. Além disso, a equação de energia é escrita em termos da energia interna relativa (E_r) e da entalpia total relativa (H_r) (ANSYS, 2013b).

<p>Conservação de Massa</p> $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \nabla) = S_m$	<p>Conservação de Momento</p> $\frac{\partial}{\partial t}(\rho \nabla) + \nabla \cdot (\rho \nabla \nabla) = -\nabla p + \nabla \cdot (\tau) + \rho \bar{g} + \bar{F}$	<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; width: 20px; margin: 0 auto;">A</div>
<p>Conservação de Energia</p> $\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\nabla (\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \bar{J}_j + (\tau_{eff} \cdot \nabla) \right) + S_h$		
<p>Conservação de Massa</p> $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \nabla_r = 0$	<p>Conservação de Momento</p> $\frac{\partial}{\partial t}(\rho \nabla_r) + \nabla \cdot (\rho \nabla_r \nabla_r) + \rho(2\bar{\omega} \times \nabla_r + \bar{\omega} \times \bar{\omega} \times \bar{r} + \bar{\alpha} \times \bar{r} + \bar{\alpha}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau_r + \bar{F}$	<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; width: 20px; margin: 0 auto;">B</div>
<p>Conservação de Energia</p> $\frac{\partial}{\partial t}(\rho E_r) + \nabla \cdot (\rho \nabla_r H_r) = \nabla \cdot (k \nabla T + \tau_r \cdot \nabla_r) + S_h$		

Figura 4 – Equações de transporte baseadas nos princípios da conservação de massa, momento e energia para os cenários sem (A) e com agitação (B) (ANSYS, 2013b; ANSYS, 2013c; ANSYS, 2013d).

Para esse estudo o solucionador baseado em pressão e o algoritmo SIMPLEC do tipo segregado foram utilizados, pois aceleram a convergência do modelo e consomem menos recursos computacionais. O esquema de discretização espacial padrão *Least Squares Cell Based* foi escolhido para discretizar os termos de convecção e difusão nas equações de conservação de momento, para isso usou-se o conceito de gradiente. A discretização das equações de transporte foi realizada através da discretização *upwind* de segunda ordem, assim como, o esquema de interpolação de pressão. No que diz respeito à validação das simulações, utilizaram-se dados experimentais fornecidos pelos autores e pela literatura.

RESULTADOS E DISCUSSÃO: DADOS DE TEMPERATURA

Os dados experimentais de temperatura, apresentados na Tabela da Figura 5B, retornaram valores específicos para cada região analisada. O período de tempo analisado totalizou um valor de 20000 segundos, contabilizados a cada 5 segundos, como pode ser visto no gráfico da Figura 5A. A base cônica foi à região que apresentou a menor temperatura dentre todas, seguida da região correspondente à tampa do reator. A parede cilíndrica, onde se localiza a resistência elétrica tipo níquel-cromo, é a responsável por fornecer calor ao fluido no interior do reator a uma taxa de geração de calor de 0,0351 W/m³. O fluido interno, assim como a parede cilíndrica, detém os maiores valores de temperatura. Tendo em vista que a temperatura interna no reator não alcançava a temperatura de ebulição da água, supôs que vapores d'água e bolhas não foram gerados a ponto de elevar a pressão a altos níveis, sendo assim, a pressão foi desconsiderada da simulação.

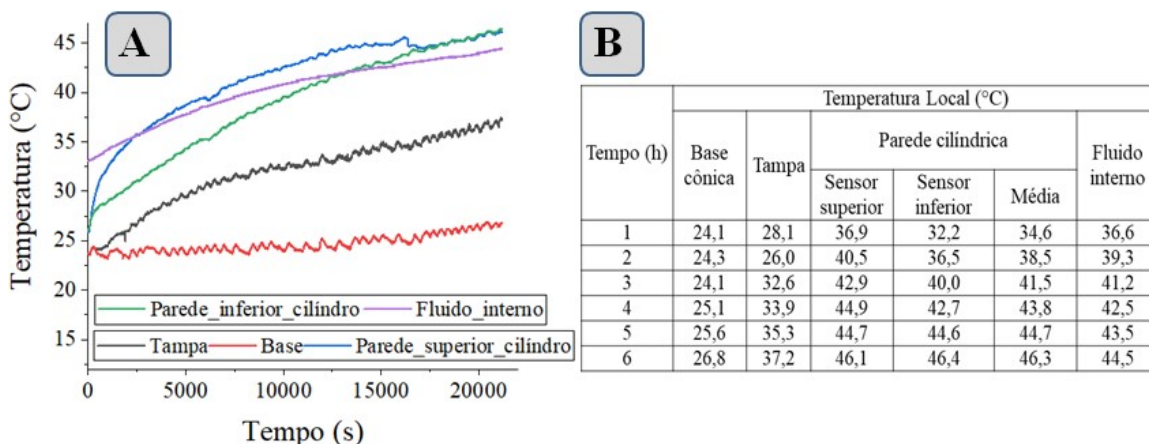


Figura 5 – Gráfico (A) e tabela (B) da distribuição de temperatura para os diferentes locais do reator para as 6 horas de teste.

RESULTADOS E DISCUSSÃO: VALIDAÇÃO DA SIMULAÇÃO

Para validar resultados numéricos relacionados aos fenômenos de escoamento como a formação de vórtices, evolução temporal da velocidade e propriedades de turbulência em escoamento, comumente é usado o método *Particle Image Velocimetry* (PIV) e/ou o *Laser Doppler Anemometry* (LDA) (LAURENZI, 2008; NOVAIS, 2011). Nesse estudo, alguns desses fenômenos foram avaliados via CFD, pois afetam o comportamento da temperatura do fluido contido no reator, porém não foram possíveis de validação por falta de dados experimentais para o referido reator. A validação aqui descrita refere-se apenas a distribuição de temperatura no interior do reator para os cenários descritos.

As simulações foram realizadas para um cenário com e sem agitação, tendo em vista que o reator permanece 97,5% do tempo sem agitação. Em um processo industrial se busca constantemente pela eficiência, portanto, um sistema de mistura deve manter os sólidos em suspensão a um custo mínimo de tempo e energia (BANKS, 2013). A simulação empregada para o cenário sem agitação resultou na distribuição de temperatura descrita pela Figura 6A e 6B abaixo. A Figura 6A demonstra gráficos de contorno para as diferentes regiões de temperatura no reator ao longo do tempo analisado. Já a Figura 6B trás a distribuição de temperatura no reator a partir de um gráfico de linha, onde podemos verificar o valor da temperatura para diferentes alturas.

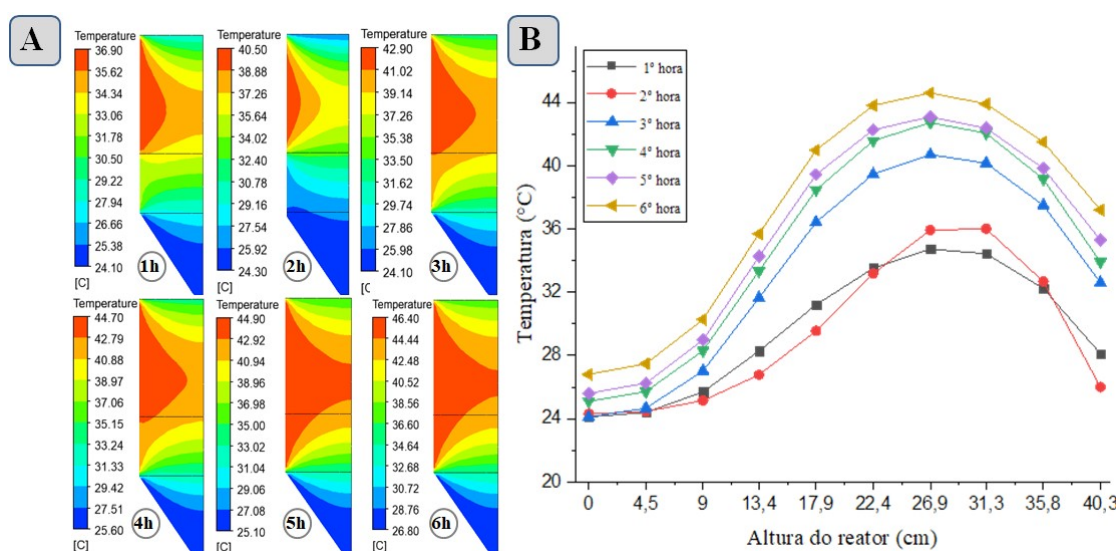


Figura 6 – Gráficos de contorno (A) e de linha (B) dos dados de temperatura simulada ao longo do reator no cenário sem agitação para cada hora de teste.

Por meio da Figura 6 foi possível observar que os dados simulados seguem um comportamento similar aos dados experimentais, onde a base cônica e a tampa apresentam as menores temperaturas, em contraste a temperatura da parede cilíndrica e das regiões próximas que apresentam os maiores valores. Esse comportamento ocorre devido à parede cilíndrica ser responsável por fornecer calor ao fluido no interior do reator, enquanto as demais partes apenas trocam calor da água para o ar ambiente. Essas perdas de calor não foram levadas em consideração nesse momento, mas devem ser posteriormente mensuradas e quantificadas para que o balanço energético não seja afetado negativamente, pois devido a sua composição metálica tais perdas podem ser potencializadas. Em regiões onde não há isolamento térmico (tampa e base) as trocas de calor podem gerar gradientes de temperatura, que segundo Giacobbo (2013) podem causar modificações na dissociação de compostos químicos e na termodinâmica das reações, reduzindo assim a produção de gases devido à inibição microbiana do processo de digestão anaeróbica. Observando a Figura 6B, percebe-se que a temperatura cresce a partir de alturas mais baixas (base cônica) e atinge seu máximo na região superior do cilindro, entre as alturas 22,4 cm e 31,3 cm, provavelmente devido ao gradiente de temperatura gerado entre a parede e o fluido interno.

De forma a verificar a precisão dos dados simulados em função da realidade dos dados experimentais, foi realizada uma regressão linear entre ambos os dados, e como meio de comparação usou-se os dados da temperatura do fluido presente no interior do reator. O gráfico apresentado na Figura 7 trás esse

comportamento ao longo das 6 horas de simulação, e ainda, demonstra os dados médios, gerados a partir dos dados simulados e experimentais, e seus respectivos desvios padrões.

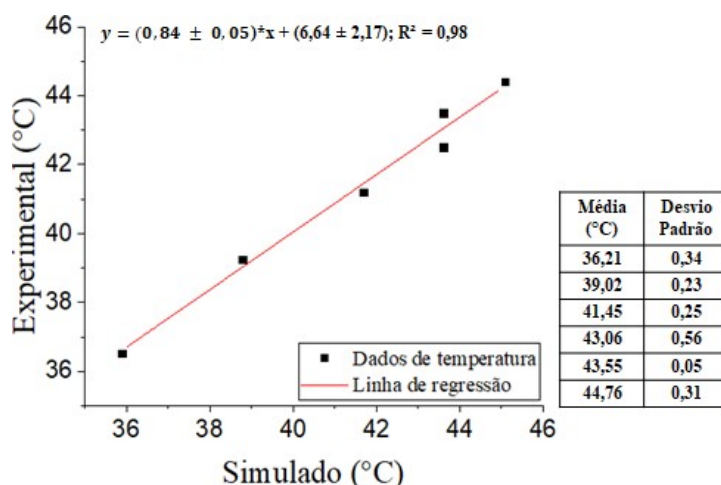


Figura 7 – Modelo de regressão linear gerado entre os dados simulados e experimentais para a temperatura interna do reator no cenário sem agitação.

Ao analisar o comportamento gráfico da Figura 7 acima percebemos que os dados simulados se aproximam dos experimentais, e por consequência apresentam um baixo desvio padrão. A ótima aproximação dos dados reflete com precisão, por exemplo, a transferência de calor do fluido interno para as superfícies sem aquecimento (tampa e base), uma vez que tais regiões não possuem nenhum agente isolante do meio externo. A partir desses resultados pode-se dizer que a configuração da simulação é apropriada ao problema em estudo e que a simulação descreveu fielmente a temperatura na região analisada, porém ainda não se pode afirmar a realidade da distribuição de temperatura interna em sua totalidade, pois é necessário um maior número de pontos de temperatura nessa região para que se comprove em detalhes tal distribuição.

A simulação baseada no cenário com agitação resultou na distribuição de temperatura do gráfico de contorno das Figuras 8A2 e 8B2, que diz respeito à distribuição de temperatura da parede cilíndrica do reator, e nas Figuras 8CI e 8CII que representam o campo vetorial da velocidade tangencial e global, respectivamente, para um plano transversal simétrico do reator. Essa simulação teve como base os dados de temperatura experimental da sexta hora. Analisando as Figuras 8A2, percebe-se claramente a diferença que a agitação faz na distribuição da temperatura da parede cilíndrica, pois quando o meio reacional é agitado camadas de fluidos estagnadas sob a superfície do reator e próximos da parede cilíndrica são afetadas, sendo movidas para outras regiões de diferentes temperaturas. Em contraste, a Figura 8A1 apresenta uma temperatura constante em toda a superfície da parede, variando apenas nas regiões próximas a tampa e no encontro da parede com a base.

Ao avaliar as Figuras 8B1 e 8B2, nota-se que a agitação causa uma distribuição da temperatura nas direções axial e radial ao longo do reator, que pode ser reafirmado pela forma do campo vetorial da velocidade tangencial e global nas Figuras 8CI e 8CII, respectivamente. A presença da agitação manteve a temperatura do fluido praticamente uniforme no interior do tanque, o que já era de se esperar tendo em vista que a agitação visa à homogeneização do meio reacional, porém com um valor muito abaixo do obtido experimentalmente. Esse desvio pode ter ocorrido devido às configurações de tempo da simulação, uma vez que foi simulado apenas um terço do tempo (um minuto) de agitação, que em termos computacionais equivale a 300 etapas de tempo de 0,2 segundos ao longo de 8 horas de interação computacional. Acredita-se que seja necessário um ajuste em tais parâmetros para que a simulação atinja o valor de temperatura desejado em cada região do reator, e ainda, torne a simulação fidedigna aos dados experimentais. De forma a melhorar o modelo de simulação é esperado que a utilização de um maior número de pontos de medição de temperatura seja suficiente para comprovar e afirmar com precisão a distribuição de temperatura.

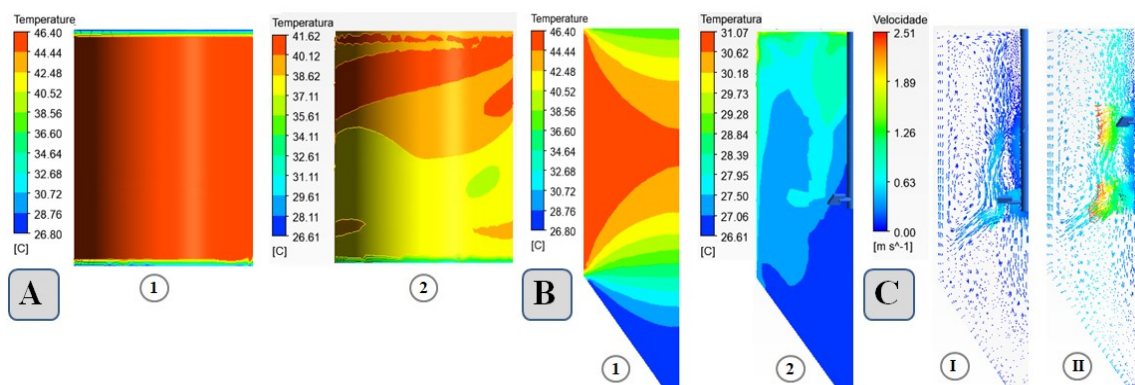


Figura 8 – Gráficos de contorno da parede cilíndrica para o cenário sem agitação (A1) e para o cenário com agitação (A2); Gráfico de contorno do plano transversal simétrico do reator sem agitação (B1) e com agitação (B2); Campo vetorial da velocidade tangencial (CI) e global (CII) da água apresentado no plano transversal simétrico do reator para o cenário com agitação.

De forma a comparar os cenários sem e com agitação, e perceber a influência da agitação nos dados de temperatura em variadas regiões do reator, foram comparados dados de temperatura para as secções transversais de raios 10,95 cm (9A), 10,20 cm (9B) e 0,75 cm (9C), respectivamente, na parede, próximo à parede e ao agitador. As Figuras 9A, 9B e 9C trazem essa comparação em detalhes.

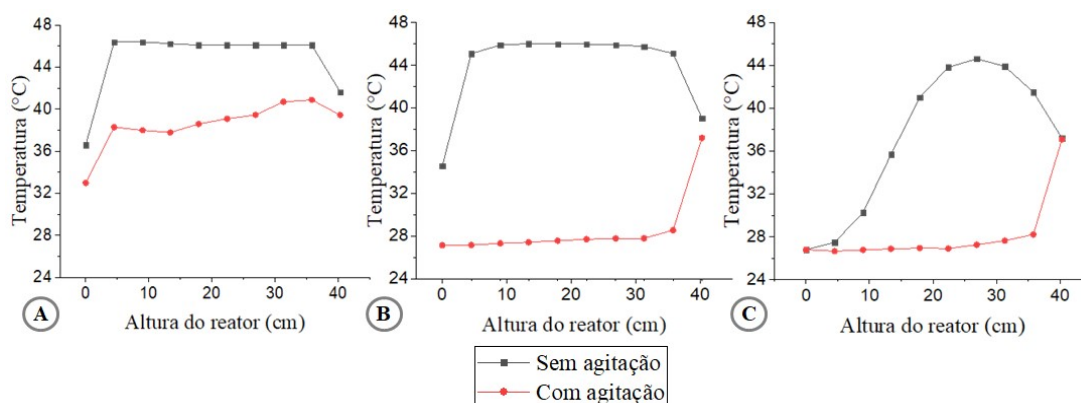


Figura 9 – Temperatura da secção transversal para os raios 10,95 cm (A), 10,20 cm (B) e 0,75 cm (C) para os cenários sem e com agitação.

Verificando a Figura 9 juntamente com a Figura 8B2, percebe-se que sob as pás do agitador e próximo ao fundo da base do reator há uma menor taxa de transferência de calor, isso pode ser explicado através das Figuras 8CI e 8CII, que demonstram a existência de velocidades axiais e radiais de menor magnitude nessas regiões. Tal comportamento diverge do observado em regiões acima do agitador, próximo ao seu eixo e nas regiões adjacentes a parede cilíndrica. Ainda, observa-se que os dados de temperatura do cenário com agitação são menores em relação ao cenário sem agitação. Esse comportamento deveria ocorrer, porém, com uma menor intensidade, sendo aceitável um valor não inferior a menor temperatura registrada no cenário sem agitação.

As temperaturas da parede na altura do agitador se tornaram inferiores com o seu funcionamento, como se pode ver ao comparar as Figuras 8B1 e 8B2 e por meio do gráfico da Figura 9B, mas especificamente entre 21,5 cm e 29,5 cm de altura. Tal conduta ocorre devido à velocidade de fluxo ser maior nessa região, e por consequência causa uma maior taxa de transferência de calor por convecção forçada. Já as temperaturas registradas nas proximidades da tampa são provenientes das correntes de convecção gerada pelo agitador, que movem as camadas de fluidos aquecidos próximo à parede em direção à tampa. Com esse comportamento as camadas de fluidos mais densos e de menor temperatura se concentram entorno da base do reator, abaixo da altura de 12,8 cm. Contudo, a queda de temperatura nas variadas regiões do reator, causadas pela agitação, se da pela exposição de camadas internas estagnadas próximas a parede, devido à estratificação térmica, e ainda, graças à transferência de calor entre regiões de baixa e alta temperatura.

As simulações forneceram indicativos do comportamento térmico do reator para contendo água como fluido de trabalho, para que posteriormente dejetos suínos diluídos venham a ser utilizados e um novo comportamento térmico venha ser observado. A temperatura é de alta relevância no processo de DA, pois segundo Banks e Heaven (2013) influência parâmetros cinéticos desse processo, como a taxa de crescimento máxima das bactérias, a constante de meia-saturação, o rendimento de crescimento e a taxa de decaimento. A uniformidade e a estabilidade da temperatura também são exigências do processo, já que variações da ordem de apenas um ou dois graus foram relatadas como tendo um efeito adverso à produção de biogás (GOMES, 2013; WEF, 1998). Nesse estudo, o valor máximo de temperatura (48 °C) ficou entre a faixa mesofílica e a termofílica, já que na literatura não há um intervalo fixo para estas duas faixas de temperatura. Vale ressaltar que os organismos metanogênicos podem crescer em uma ampla faixa de temperatura, porém a faixa entre 35 – 40 °C é considerada ótima (MADIGAN *et al.*, 2010).

É válido mencionar que Pontes (2018) utilizou o presente reator, em uma codigestão anaeróbica envolvendo a casca da castanha de caju e dejetos suínos, e uma digestão anaeróbica de dejetos suínos, ambos realizados a uma temperatura 37 °C durante um período de 20 dias. Na codigestão e digestão, foram obtidos 0,57 (0,22% de CH₄) e 0,43 (10,35% de CH₄) litros de biogás por dia, respectivamente. Segundo Bhalla *et al.* (2012), o teor de metano pode ser elevado ao se utilizar um valor de temperatura em condições termofílicas, porém deve se atentar as questões descritas anteriormente para que a produção não seja prejudicada ou até mesmo parada antes do tempo previsto, para ambos os cenários descritos nesse trabalho. Vale ressaltar que a quantificação indireta do biogás a partir da pressão interna do reator pode passar a falta impressão de que o sistema está gerando mais gás, conforme cita Pereira (2017), porém, com a estabilização da temperatura pode-se verificar o real aumento do volume de biogás gerado a partir da pressão interna do reator, já que dispensa o efeito ocorrido pela expansão do biogás existente no reator.

CONCLUSÕES

O estudo descrito acima foi de grande relevância para o entendimento inicial da distribuição de temperatura ao longo do reator nos cenários com e sem agitação. A partir da análise dos dados experimentais, correspondente à distribuição da temperatura em cada ponto de medição analisado, observou-se que a base cônica e a tampa possuem a menor e a segunda menor temperatura dentre todas as partes do reator, e o fluido interno e a parede cilíndrica os maiores valores de temperatura.

Os resultados da simulação para o cenário sem agitação concordam com os dados experimentais, indicando que a base cônica e a tampa detêm as menores temperaturas, enquanto a parede cilíndrica e as regiões próximas possuem os maiores valores. A distribuição de temperatura observada varia tanto na direção axial como radial ao longo do reator. As regiões de baixa temperatura favorecem a estratificação térmica e a redução da temperatura interna do reator, mostrando que estas regiões devem ser devidamente isoladas do meio externo.

O cenário com agitação favoreceu a transferência de calor no sentido da parede cilíndrica para o fluido interno do reator, e se intensificou na altura do agitador. Através da temperatura apresentada pela tampa e a base do reator pode se dizer que estes locais são responsáveis por diminuir a temperatura nas suas proximidades da mesma forma como previsto pelo cenário sem agitação. A presença da agitação manteve a temperatura do fluido praticamente uniforme no interior do reator, porém com um valor muito abaixo do obtido experimentalmente. Quando se comparam os cenários simulados percebeu-se que a agitação poderia ser a responsável por mover camadas de fluidos estagnadas próximas à tampa e a parede cilíndrica para as demais regiões do reator. As regiões sob o agitador e próximas ao fundo do reator apresentaram velocidades axiais e radiais de menor magnitude, ao contrario do observado em regiões sobre o agitador, próximas a parede cilíndrica e a seu eixo.

Esse trabalho é um estudo preliminar, portanto, várias questões devem ser exploradas posteriormente em um nível maior de detalhes, são elas: a aferição da temperatura a partir de uma maior quantidade de pontos distribuídos ao longo do reator; o aumento do tempo de simulação; o refino da malha gerada e a busca pela independência de malha; a avaliação da distribuição da temperatura no reator contendo dejetos suínos diluídos como fluido de trabalho, e outras questões que se fizerem relevantes ao estudo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ANSYS® *Fluent Academic, Release 18.1*, Sistema de Ajuda, capítulo 12 (Modeling Heat Transfer) item 12.2.1 (Solving Heat Transfer Problems) do guia de usuário, ANSYS, Inc., 2017a.
2. ANSYS® *Fluent Academic, Release 15.0*, Sistema de Ajuda, capítulo 5 (Heat Transfer) item 5.1 (Introduction) do guia de teoria, ANSYS, Inc., 2013a.
3. ANSYS® *Fluent Academic, Release 15.0*, Sistema de Ajuda, capítulo 2 (Flows with Moving Reference Frames) item 2.2.1.1 (Relative Velocity Formulation) do guia de teoria, ANSYS, Inc., 2013b.
4. ANSYS® *Fluent Academic, Release 15.0*, Sistema de Ajuda, capítulo 1 (Basic Fluid Flow) item 1.2 (Continuity and Momentum Equations) do guia de teoria, ANSYS, Inc., 2013c.
5. ANSYS® *Fluent Academic, Release 15.0*, Sistema de Ajuda, capítulo 5 (Heat Transfer) item 5.2.1.1 (The energy equation) do guia de teoria, ANSYS, Inc., 2013d.
6. BANKS, C. J.; HEAVEN, S. Optimisation of biogas yields from anaerobic digestion by feedstock type. In: WELLINGER, A.; MURPHY, J.; BAXTER, D. **The biogas handbook science, production and applications**. Philadelphia: Woodhead Publishing, 2013. cap. 6, p. 131-165.
7. BERRIO, Juan Carlos *et al.* CFD modelling of biogas mixing in an anaerobic digester used in wastewater treatment. In: XXVIII Congreso Colombiano de Ingeniería Química. **Memorias**. Bogotá: Acic, 2015.
8. BHALLA, A. *et al.* Improved lignocellulose conversion to biofuels with thermophilic bacteria and thermostable enzymes. **Bioresource Technology**, v. 128, p. 751-759, 2013.
9. DAZA, Silva Marina Araujo. **Nusselt number correlation for a jacketed stirred tank using computational fluid dynamics**. 2017. 107 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2017.
10. DOMINGUES, C. A. **Energia sustentável- nova geração de energia elétrica**. 2010. 41 f. Monografia (Especialização) - Curso em Gestão Ambiental, Universidade Candido Mendes, Niterói, 2010.
11. DRUMM, F. C. *et al.* Poluição atmosférica proveniente da queima de combustíveis derivados do petróleo em veículos automotores. **Revista eletrônica em gestão, educação e tecnologia ambiental – REGET**. v. 18, p. 66-78, Abr. 2014.
12. GIACOBBO, Giovana. **Influência da variabilidade da temperatura ambiente na codigestão anaeróbia de dejetos de bovinocultura de leite e cama de aviário**. 2013. 30 f. TCC (Graduação) - Curso de Tecnologia em Biocombustíveis, Universidade Federal do Paraná, Palotina, 2013.
13. GOMEZ, Claudius da C. Biogas as an energy option: an overview. In: WELLINGER, A.; MURPHY, J.; BAXTER, D. **The biogas handbook science, production and applications**. Philadelphia: Woodhead Publishing, 2013. cap. 1, p. 1-16.
14. JUNIOR, E. J. D.; CASTRILLO, L. S. **Análises Computacionais usando ANSYS**. Pernambuco: Poli/upe, 2017. 2 p. Disponível em: <goo.gl/WB8LYL>. Acesso em: 24 out. 2018.
15. KESSLER, Martin. **Fluidodinâmica computacional: o que é?** 2016. Disponível em: <goo.gl/YzMkXe>. Acesso em: 23 out. 2018.
16. LAURENZI, F. *et al.* Experimental and computational analysis of immiscible liquid-liquid dispersions in stirred vessel. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 87, p.507-514, dez. 2008.
17. MADIGAN, Michael T. *et al.* **Brock Biology of Microorganisms**. 13. ed. Londres: Pearson Education TLD, 2010. 1152 p.
18. MOHAMMADREZAEI, Rashed; ZAREEI, Samira; BEHROOZI-KHAZAEI, Nasser. Optimum mixing rate in biogas reactors: Energy balance calculations and computational fluid dynamics simulation. **Energy**, v. 159, p.54-60, set. 2018.
19. MOURA, Vitor Furtado de. **Análise térmica computacional via CFD Openfoam**. 2018. 98 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, Espírito Santo, 2018.
20. NESHAT, S. A. *et al.* Anaerobic co-digestion of animal manures and lignocellulosic residues as a potent approach for sustainable biogas production. **Renewable And Sustainable Energy Reviews**, v. 79, p.308-322, nov. 2017.
21. NOVAIS, Ângela Maria Correia Oliveira. **Estudo da Transferência de Massa em Reactores Agitados para a Produção de Biopolímeros**. 2011. 62 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Química, Universidade do Porto, Porto, 2011.
22. PONTES, Anderson Honório de Brito. **Automatização de um biorreator para avaliação da codigestão de biomassas**. 2018. 128 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Mestrado Acadêmico em Ciências Físicas Aplicadas, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Estadual do Ceará, Fortaleza, 2018.

23. PRADA, Ronald Jaimes; NUNHEZ, José Roberto. Numerical prediction of a nusselt number equation for stirred tanks with helical coils. **Aiche Journal**, v. 63, n. 9, p.3912-3924, 10 maio 2017.
24. PRADA, Ronald Jaimes. **Obtenção de correlações de Nusselt em reatores de tanque agitado através da Fluidodinâmica Computacional (CFD)**. 2015. 160 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2015.
25. REYNOL, Alvaro. **Modelagem e Simulação de Micromisturadores**. 2008. 206 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Química, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008.
26. RODRIGUES, J. A. D. *et al.* Influence of agitation rate on the performance of an anaerobic sequencing batch reactor containing granulated biomass treating low-strength wastewater. **Advances in Environmental Research**, vol. 7, p. 405-410, 2003.
27. SADINO-RIQUELME, C. *et al.* Computational fluid dynamic (CFD) modelling in anaerobic digestion: General application and recent advances. **Critical Reviews In Environmental Science And Technology**, v. 48, n. 1, p.39-76, 2 jan. 2018.
28. SHARAFAN, Alend. **CFD simulation of the agitated batch**. 2015. 58 f. Dissertação (Masters) - Department of Mechanical Engineering, Czech Technical University In Prague, Prague, 2015.
29. SILVA, Maira Puridade Marques da. **Obtenção de uma correlação para o número de Nusselt com o uso da Fluidodinâmica Computacional (CFD) para um tanque de mistura com serpentinas helicoidais agitado por dois impelidores tipo Rushton**. 2017. 110 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2017.
30. VERGEL, José Luis Gomez. **Estudo da Influência da Malha Computacional, Modelos de Turbulência e Aspectos Numéricos da Modelagem CFD em Impelidores PBT usando Malhas Não estruturadas**. 2013. 157 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Eng. Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2013.
31. WEF. Design of Wastewater Treatment Plants. **Manual of Practice**. Water Environment Federation. Alexandria, 4ª ed. n. 8, vol. 3, 1998.