

II-034 - SIMULAÇÃO DA FORMAÇÃO DE BIOGÁS EM REATORES COM O AUXÍLIO DA FERRAMENTA DE FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Kelly Leiko Umeki⁽¹⁾

Graduanda em Engenharia Ambiental pela Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Campo Mourão. Bolsista de iniciação científica/CNPq.

Eudes José Arantes⁽²⁾

Engenheiro Civil pela Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo. Mestre e Doutor em Engenharia (Hidráulica e Saneamento) pela Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo. Professor da Universidade Tecnológica Federal do Paraná.

Christopher Yuity Kuroda⁽³⁾

Graduando em Engenharia Ambiental pela Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Campo Mourão. Bolsista de iniciação científica/Fundação Araucária.

Karina Querne de Carvalho⁽⁴⁾

Engenheiro Civil pela Universidade Estadual de Maringá. Mestre e Doutora em Engenharia (Hidráulica e Saneamento) pela Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo. Professora da Universidade Tecnológica Federal do Paraná.

Fernando Hermes Passig⁽⁵⁾

Engenheiro Sanitarista pela Universidade Federal de Santa Catarina. Mestre e Doutor em Engenharia (Hidráulica e Saneamento) pela Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo. Professor da Universidade Tecnológica Federal do Paraná.

Endereço⁽¹⁾: Rua Dos Expedicionários, 631 - Jardim Copacabana - Campo Mourão - Paraná - CEP: 87302-350 - Brasil - Tel: (44) 8436-8783 - email: kellyumeki@hotmail.com.

RESUMO

As ferramentas de fluidodinâmica computacional podem ser utilizadas em reatores, a fim de representar as principais características dos fenômenos envolvidos de forma a ajudar na quantificação e na localização das anomalias do escoamento, tornando-se importante o estudo de tal ferramenta. Este trabalho objetivou a simulação da geração de metano a partir do acetato dentro de um reator UASB executado por uma ferramenta CFD COMSOL Multiphysics, para então verificar as concentrações finais do gás metano e do acetato e a velocidade da reação. Quando as concentrações do acetato e do metano iniciam em 2 mols/m³ e zero observou-se que as concentrações finais atingiram 0,8 mols/m³ e 1,4 mols/m³ respectivamente. Os resultados da simulação ficaram próximos a estudos experimentais realizados anteriormente em outras pesquisas. As equações governantes para a solução numérica de problemas basearam-se nas "Equações de Navier-Stokes" e a expressão da taxa de reação e as constantes foram retiradas do modelo ADM1. O tempo máximo simulado foi de 1500 segundos.

PALAVRAS-CHAVE: Produção de metano, reator UASB, ferramenta CFD.

INTRODUÇÃO

De acordo com ZERBINI (2000), uma das principais alternativas hoje utilizadas para o tratamento de esgotos domésticos no Brasil tem sido o tratamento anaeróbio, principalmente através de reatores de manta de lodo. São várias as características favoráveis desses sistemas, entre elas o baixo custo, simplicidade operacional e baixa produção de sólidos.

Aliado a tais características estão o clima e as condições ambientais propícias do Brasil, que oferecem durante todo o ano temperaturas relativamente elevadas, acelerando o mecanismo de tratamento. Entretanto, mesmo com tantas características favoráveis e propícias, o tratamento anaeróbio demonstra grande dificuldade em produzir um efluente dentro dos padrões estabelecidos pela legislação ambiental do país.

Observa-se então, a grande necessidade do uso de sistemas de pós-tratamento de efluentes de reatores anaeróbios, adequando tal efluente aos requisitos da legislação ambiental. A função do pós-tratamento,

portanto, é complementar a remoção de matéria orgânica (DBO e DQO) que se inicia no reator anaeróbio e remove os nutrientes e patógenos que não foram removidos durante a fase inicial do tratamento (ZERBINI, 2000).

Em projeto de reatores, busca-se conhecer que capacidade, tipo de reator e que método de operação são os melhores em determinada tarefa. Como isso pode requerer que as condições no reator variem com a posição e com o tempo. Esta questão só pode ser respondida por uma integração adequada da equação de taxa para a operação. Isto pode ser difícil, devido a influência da temperatura e da composição do fluido reagente que podem variar ponto a ponto dentro do reator, dependendo do caráter exotérmico ou endotérmico da reação. Diversos autores indicam que são muitos fatores a ser considerados na estimação do desempenho de um reator. O principal problema no projeto de reatores é achar a melhor maneira de tratar estes fatores (LEVENSPIEL, 2010).

A simulação computacional torna possível simular em laboratório físico os fenômenos em projetos ou em protótipos, cujas escalas passam a ser fator limitante. Outra vantagem é permitir a visualização tridimensional do escoamento, facilitando o conhecimento das características do fluido (JANTIM NETO et al., 2008).

As ferramentas de fluidodinâmica computacional podem ser utilizadas em reatores, a fim de representar as principais características dos fenômenos envolvidos, de forma a ajudar na quantificação e na localização das anomalias do escoamento, tornando-se importante o estudo de tal ferramenta, já que as bibliografias neste assunto são escassas.

O objetivo deste estudo é simular a formação de metano a partir do acetato em reatores anaeróbios, sendo ele um dos ácidos voláteis intermediários mais importantes na formação do biogás que ocorre nos reatores UASB. A simulação foi realizada por meio da ferramenta fluidodinâmica computacional COMSOL Multiphysics, utilizando-se o módulo de reação, de transferência de massa por convecção e difusão e as equações de Navier-Stokes. Com uso dessa ferramenta determinaram-se as características do escoamento como velocidade e as concentrações do acetato e do gás metano.

MATERIAL E MÉTODOS

Segundo Hirsch (1998), as equações governantes para a solução numérica de problemas envolvendo escoamento de fluidos baseiam-se nas soluções de equações de conservação da continuidade, do movimento e da conservação da energia, desenvolvidas por modelos diferenciais aplicados aos fenômenos de transporte. Esses modelos de equacionamento são conhecidos como "Equações de Navier-Stokes", apresentados a seguir: partindo da aplicação da 2ª Lei de Newton a um elemento infinitesimal de volume de um fluido real, obtêm-se as forças de tensão normal, forças de tensão tangencial e as forças de campo. A somatória dessas forças nas direções x, y e z é dada pela Equação 1.

$$\Sigma \vec{F} = m \left(V_x \frac{\partial \vec{V}}{\partial x} + V_y \frac{\partial \vec{V}}{\partial y} + V_z \frac{\partial \vec{V}}{\partial z} + \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} \right) \quad (1)$$

Utilizando os operadores do cálculo vetorial, é possível decompor a Equação vetorial 1 em três equações na forma diferencial, uma para cada direção coordenada, conforme as equações 2, 3 e 4.

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho B_x = \rho \left(V_x \frac{\partial \vec{V}_x}{\partial x} + V_y \frac{\partial \vec{V}_x}{\partial y} + V_z \frac{\partial \vec{V}_x}{\partial z} + \frac{\partial \vec{V}_x}{\partial t} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho B_y = \rho \left(V_x \frac{\partial \vec{V}_y}{\partial x} + V_y \frac{\partial \vec{V}_y}{\partial y} + V_z \frac{\partial \vec{V}_y}{\partial z} + \frac{\partial \vec{V}_y}{\partial t} \right) \quad (3)$$

$$\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} + \rho B_z = \rho \left(V_x \frac{\partial \vec{V}_z}{\partial x} + V_y \frac{\partial \vec{V}_z}{\partial y} + V_z \frac{\partial \vec{V}_z}{\partial z} + \frac{\partial \vec{V}_z}{\partial t} \right) \quad (4)$$

A forma final da Equação de Navier-Stokes é:

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \rho (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = \rho B \cdot \vec{e} B - \nabla p + \frac{\mu}{3} \nabla (\nabla \cdot \vec{V}) + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad (5)$$

Onde B é a componente do campo considerado em determinada direção de um plano de coordenadas em três dimensões e ρ a massa específica do fluido em estudo. A Equação 5 é uma expressão geral para a descrição do movimento dos fluidos.

Para a aprendizagem do modelo de formação do metano a partir do ácido acético, foi utilizado o exemplo de deposição de carbono em catálise, que ocorre dentro dos reatores. Este exemplo é um modelo de reação que ocorre tanto no software COMSOL Multiphysics em conjunto com o COMSOL Reaction Engineering Lab, analisando a decomposição térmica do metano em hidrogênio e carbono sólido.

Após a aprendizagem da simulação, foi elaborado um modelo de simulação da formação do metano a partir da decomposição do acetato que ocorre dentro de um reator UASB. A reação química global do modelo em estudo está apresentada na equação estequiométrica 6.



Foi utilizado o COMSOL Reaction Engineering Lab para editar a fórmula da reação acima (equação 6) e então definir a equação a ser utilizada. A seguir, determinaram-se as concentrações iniciais do acetato e do metano. Na resolução dos passos foi estabelecido um tempo de 10^{-8} s, tolerância relativa de 10^{-6} e tolerância absoluta de 10^{-7} .

Para a taxa de reação foi utilizada a seguinte expressão com base no modelo ADM1 (Carvalho, 2006):

$$r = k_{A,Bac} \left(S_{ac} - (K_{a,ac} + S_{HCO_3}) - K_{a,ac} S_{ac} \right) \quad (7)$$

Onde, $k_{A,Bac} = 10^8$, $k_{a,ac} = 1,74 \cdot 10^{-5}$, S_{ac} = concentração do acetato.

O próximo passo foi exportar para o COMSOL Multiphysics, na dimensão 2D aplicando o modelo de convecção e difusão. A geometria seguiu o modelo piloto de reator em estudo na UTFPR - Campo Mourão, com altura de 80 cm e largura de 28 cm.

O valor da concentração de entrada do acetato foi baseado na tese de doutorado de Carvalho (2006). Os resultados obtidos naquele trabalho mostraram que a concentração do ácido volátil foi de 118 mgHAC.L⁻¹ para o afluente e 49 118 mgHAC.L⁻¹ para o efluente. Na solução informática escolheu-se o modelo estacionário da solução da equação de Navier Stokes para condição de fluido incompressível e o tempo máximo de 1500 segundos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O resultado da simulação da velocidade da reação onde o acetato é transformado em metano está apresentado a seguir na figura 1. O mesmo ocorrido no tutorial de aprendizagem pode ser observado na simulação da decomposição do acetato em metano. Próximo às paredes a velocidade é quase nula devido à existência da camada limite hidrodinâmica. Como esta reação ocorre dentro de um reator no formato de um tubo, o atrito causado pelas paredes do reator faz com que a velocidade do fluido tenda à zero nas paredes.

Na parte do leito onde as bactérias se alojam a velocidade é homogênea devido à porosidade do meio. Neste trecho não foi considerado a influência das paredes, por este motivo a velocidade não se torna nula. O tempo de simulação durou 1500 segundos.

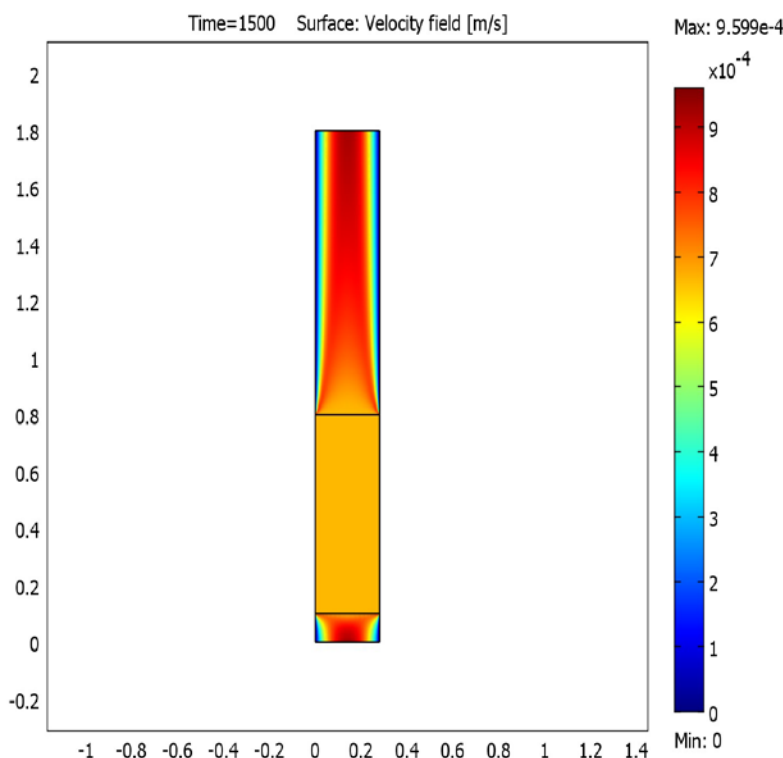


Figura 1. Velocidade da decomposição do acetato em metano [m/s].

As concentrações do acetato e do metano estão apresentadas na figura 2. A concentração inicial do acetato começa a diminuir na entrada do meio poroso, onde as bactérias a degradam em metano, diminuindo significativamente na saída, chegando-se ao valor aproximado de 0.8 mol/m^3 . Este resultado ficou próximo ao valor encontrado na tese de doutorado de Carvalho (2006), cuja concentração média do ácido acético do afluente do reator foi de $0,83 \text{ mol/m}^3$.

Para a concentração do metano, a simulação foi realizada com o tempo de 1400 segundos, com concentração inicial do metano igual a zero. Conforme a reação interage com as bactérias a produção de metano aumenta para 1 mol/m^3 atingindo seu valor final de 1.4 mol/m^3 .

Os resultados da simulação para a concentração do ácido acético ao longo do comprimento do reator para os tempos de 500, 1000 e 1500 segundos, são apresentados na figura 3. Verifica-se que a variação da concentração ocorreu de forma exponencial contínua estabilizando-se nos valores aproximados de 0.6 (figura 3a), 0.8 (figura 3b) e 1.0 mol/m^3 (figura 3c), respectivamente para os tempos de 500, 1000 e 1500 segundos. Para o resultado de 1500 segundos verifica-se que houve uma instabilidade numérica que provocou uma oscilação nos valores no final do gráfico.

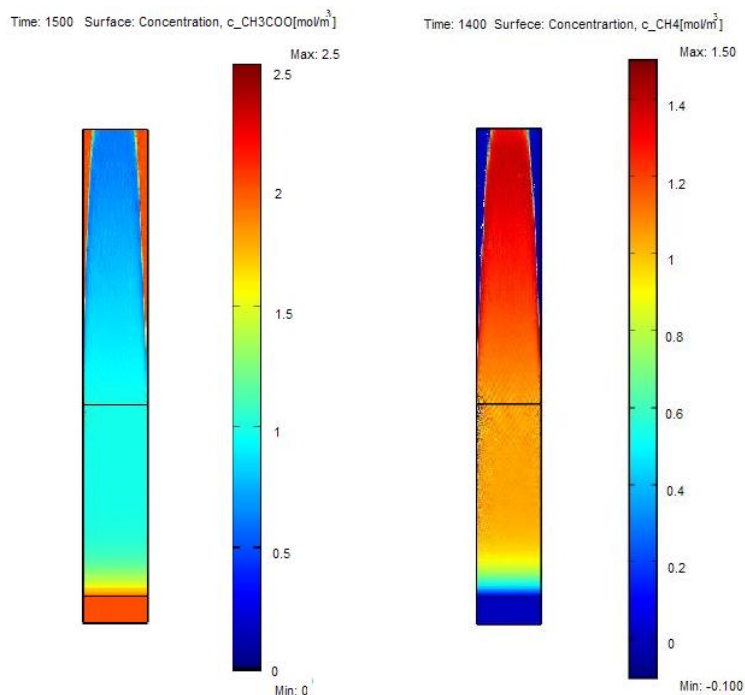


Figura 2. Concentração do acetato e concentração do CH₄ em [mol/m³].

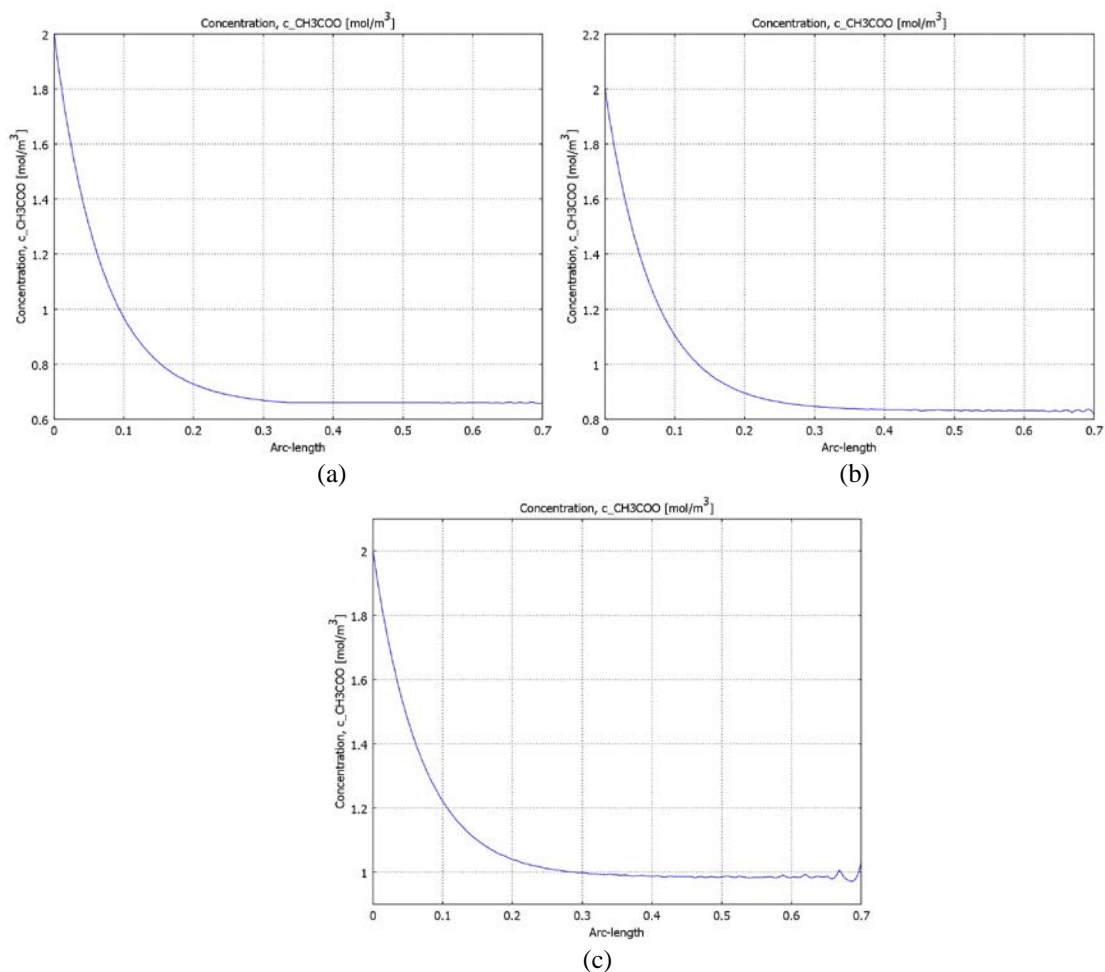


Figura 3. Concentração do acetato (a = 500 s, b = 1000 s, c = 1500 s).

A representação da formação de metano ao longo do reator é apresentada nos gráficos da figura 4. Verifica-se que a concentração de metano que se inicia com valor nulo é aumentada ao longo do reator estabilizando-se nos valores aproximados de 1.35, 1.18 e 1.13 mols/m^3 para os respectivos tempos de 500, 1000 e 1500 segundos. Para a concentração final do metano para o tempo de 1500 segundos verifica-se uma oscilação nos valores. Esta oscilação ocorreu provavelmente devido a uma instabilidade numérica no processo de solução nos modelos aplicados. Os resultados obtidos permitem avaliar uma estimativa da concentração final de metano resultante da degradação do ácido acético verificando-se uma concentração média final de aproximadamente 1.20 mols/m^3 de metano.

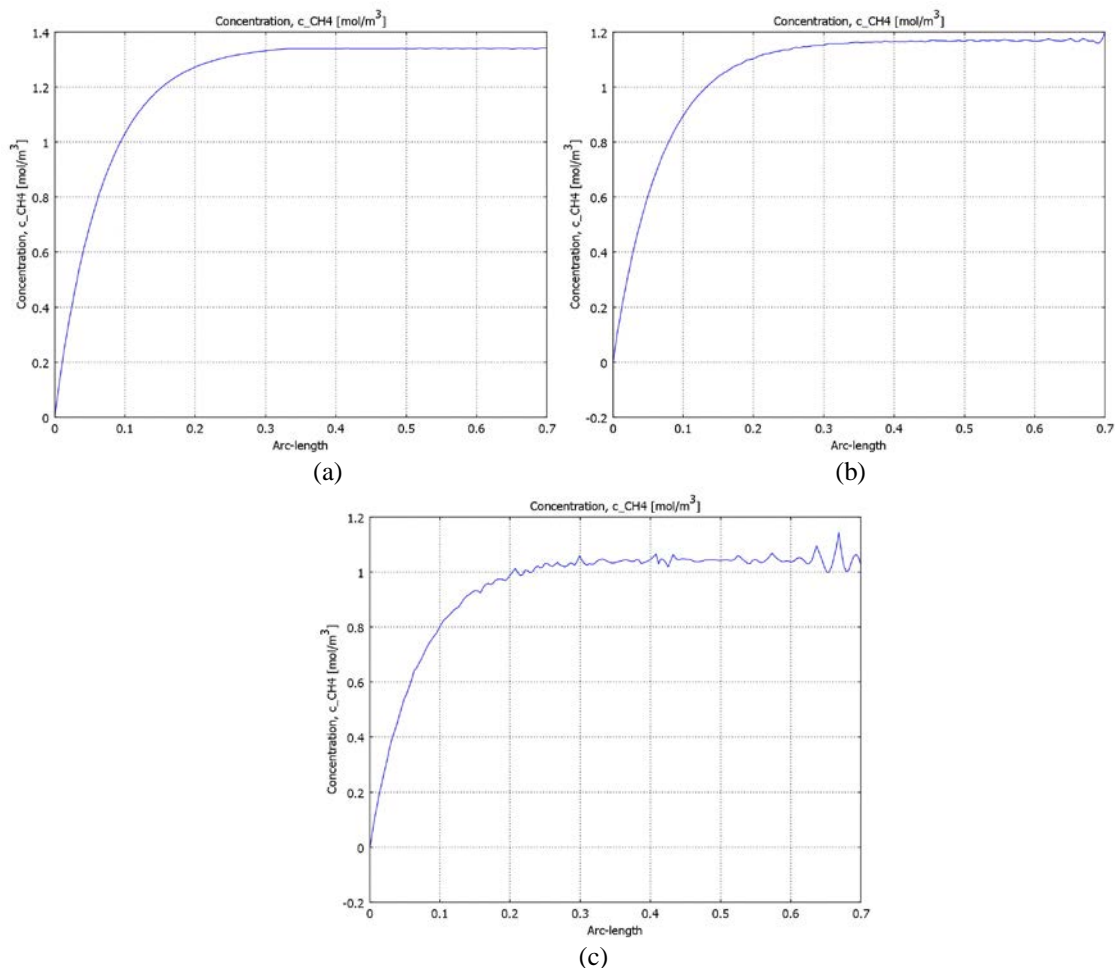


Figura 4. Concentração do metano (a = 500 s, b = 1000 s, c = 1500 s).

CONCLUSÕES

Os resultados obtidos na simulação da reação em que ocorre a degradação do acetato e formação do metano ficaram próximos de estudos experimentais realizados em outras pesquisas, provando que a simulação auxilia nos estudos das anomalias que ocorrem dentro dos reatores.

As simulações realizadas neste trabalho permitem verificar a possibilidade de aplicação da ferramenta de fluidodinâmica computacional como forma de estudo preliminar para projeto de reatores. Sendo assim, estudos futuros permitirão a aplicação desta ferramenta, considerando as reações de forma mais completa e ainda as condições hidrodinâmicas mais próximas dos modelos experimentais.

Em trabalho futuros serão simuladas outras reações para a formação de biogás, considerando as condições geométricas, com diferentes tipos de entrada e escoamento tridimensional.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. KHONDAKER, A.N. "Modeling the fate of drilling waste in marine environment - an overview", *Computers & Geosciences*, n. 26, pp. 531-540, 2000.
2. DIAS, Gerônimo Joaquim; COUTINHO, Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo; MARTINS, Renato Parkinson. **Modelagem Tridimensional Do Lançamento De Cascalhos De Perfuração De Poços De Petróleo Em Águas Profundas**. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE P&D EM PETRÓLEO E GÁS, 3º., 2005, Salvador. 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás. Salvador: 2005.
3. ZERBINI, Adriana Molina. **Identificação e análise de viabilidade de ovos de helmintos em um sistema de tratamento de esgotos domésticos constituído de reatores anaeróbios e rampas de escoamento superficial**. 2000. 143 f. Tese (Pós Graduação) - Curso de Saneamento, Meio Ambiente e Recursos Hídricos., Escola de Engenharia da UFMG, Belo Horizonte, 2000.
4. PIRES, E. C. et al. (2001). **Dynamic behaviour of UASB reactors submitted to cyclical loads**. In: CONGRESS ON ANAEROBIC DIGESTION, 9, Belgium, 2-6/ setembro, Proceedings. Antwerp, Technologisch Instituut vzw. P. 219-221.
5. CARVALHO, Karina Querne de. **Resposta dinâmica de reator UASB em escala piloto submetido a cargas orgânicas e hidráulicas cíclicas: modelos matemáticos e resultados experimentais**. 2006. 193 f. Tese (Doutorado) - EESC/USP, São Carlos, 2006.
6. REN, Ting-Ting et al. Hydrodynamics of Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactors. *Aiche Journal*, China, p. 516-528. 23 dez. 2008.
7. JANTIM NETO, Humberto et al. **Modelagem e simulação do comportamento de uma válvula de fluxo hidráulica com o uso de ferramenta de hidroinformática**. *Rev. Tecnol.* Fortaleza, v. 29, n. 2, p.224-232, dez. 2008.
8. HIRSCH, C. **Numerical computation of internal and external flows**. v. 1. New York: John Wiley & Sons, 1988. v. 1.
9. LOURENÇO, Aguinaldo Menegassi Pereira; CAMPOS, Cláudio Milton Montenegro. **Comportamento hidrodinâmico de um reator anaeróbio de manta de lodo (UASB) em escala de bancada operando com tempo de detenção hidráulica (TDH) de 12 horas**. *Ciênc. Agrotec*, Lavras, v. 33, n. 4, p.1139-1144, jul./ago. 2009.
10. AQUINO, Sérgio F. de; CHERNICHARO, Carlos A. L.. **Acúmulo de ácidos graxos voláteis (AGVs) em reatores anaeróbios sob estresse: causas e estratégias de controle**. *Engenharia Sanitaria e Ambiental*, Rio de Janeiro, n.2 vol.10, Apr./June 2005.
11. WANG, Xu et al. **CFD simulation of an expanded granular sludge bed (EGSB) reactor for biohydrogen production**. *International Journal Of Hydrogen Energy*, China, p. 9686-9695. 09out. 2009.
12. LEVENSPIEL, Octave. **Engenharia das reações químicas**. São Paulo. Editora Edgard Blücher LTDA, 3ª edição 2010.
13. CHERNICHARO, Carlos A. L. **Reatores Anaeróbios**. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental – UFMG, 2ª edição 2000.