

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**O PAPEL DE MODELOS DE TURBULÊNCIA NA MODELAGEM DE UM
BIORREATOR COM MEMBRANAS**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

VINÍCIUS DA COSTA ÁVILA

PORTO ALEGRE
2017

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**O PAPEL DE MODELOS DE TURBULÊNCIA NA MODELAGEM DE UM
BIORREATOR COM MEMBRANAS**

VINÍCIUS DA COSTA ÁVILA

Dissertação de Mestrado apresentada como
requisito parcial para obtenção do título de
Mestre em Engenharia.

Área de concentração: Pesquisa e
Desenvolvimento de Processos

Orientadores:

Prof^a. Dr^a. Isabel Cristina Tessaro

Prof. Dr. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo

PORTO ALEGRE
2017

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *O Papel de Modelos de Turbulência na Modelagem de um Biorreator com Membranas*, elaborada por Vinícius da Costa Ávila, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:

Prof^a. Aline Dettmer, D^a. Sc.

Prof. Alvaro Luiz De Bortoli, D. Sc.

Prof. Evandro Steffani, D. Sc.

*"Do not go where the path may lead, go instead
where there is no path and leave a trail."*

(Ralph Waldo Emerson)

Agradecimentos

Agradeço, com imenso orgulho e emoção, a todos estiveram ao meu lado nesse percurso.

À minha família, por todo o amor que recebi.

À minha mãe, que, como de costume, não mediu esforços em fornecer seu apoio incondicional e ao meu padrasto, que fez o mesmo em relação a nós dois e que me ensinou a ter serenidade e força.

À minha irmã, que me ensinou a aceitar os desvios que surgem no caminho e ao meu pai, que demonstrou que basta vontade para escolher qual trilha retomar;

À minha avó Amail, que mesmo em memória, me lembrou de momentos de paz e do carinho ao próximo.

À Érica, que me ensinou a olhar dentro de mim mesmo.

Aos professores Isabel e Nilo, que têm sido como mãe e pai na minha carreira, pela orientação no desenvolvimento desse trabalho, pelos ensinamentos e conhecimentos compartilhados, por me ajudarem a encontrar em mim mesmo a paixão pela pesquisa e pelo ensino, por acreditarem no meu desenvolvimento e na minha capacidade, por me fazerem acreditar em mim mesmo, pela evolução e crescimento que me proporcionaram e pela aceitação

e sugestão de ideias e planos incríveis onde eu pude e poderei aplicar o que tenho aprendido em prol da ciência e de outras pessoas.

À professora Isabel pelo carinho, compreensão e preocupação com meu bem-estar.

Ao professor Nilo pelas ideias trocadas, estímulos e entusiasmo.

Aos colegas do LAFCA, Adam, Andréia, Carolina, Paulo e Vitor, pelos ensinamentos, risos e momentos compartilhados.

Aos colegas do LASEM, pela amizade, conhecimento e auxílio.

Aos demais amigos, colegas, professores e funcionários do departamento, cujas menções individuais estenderiam muito essa lista e possivelmente, devido à grande quantidade de pessoas, deixaria alguém de fora, obrigado por todo o apoio e acolhimento.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro e ao Centro Nacional de Supercomputação (CESUP) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS).

Resumo

O mercado de biorreatores com membranas (BRMs) têm exibido alto crescimento. Contudo, o *fouling* diminui o desempenho desses sistemas drasticamente. A aeração promove a mitigação do *fouling*, mas possui alto custo operacional (de até 70% do total da demanda energética) e é utilizada de forma otimizada apenas 10% das vezes, gerando a necessidade de estudos sobre a hidrodinâmica em BRMs. Ferramentas de dinâmica de fluidos computacional (CFD) são úteis para esse tipo de análise. Um dos primeiros passos para encontrar uma solução apropriada em simulações numéricas é propor uma modelagem correta. Dentre os fenômenos a serem modelados, os efeitos da turbulência são provavelmente um dos mais importantes; porém, nenhum artigo que comparasse previsões com base na escolha de modelo de turbulência para simulações de sistemas BRM foi encontrado. Dessa forma, o objetivo desse trabalho foi verificar a importância da escolha do modelo de turbulência para simulações de biorreatores com membranas através de CFD. Para isso, as previsões obtidas de velocidade local próxima às superfícies das membranas e de tensão cisalhante nessas superfícies para duas taxas de aeração, 5 e 15 m³/h, empregando dois modelos de turbulência, $k-\epsilon$ com funções de parede para alto (aR) e para baixo número de Reynolds (bR) e $k-\omega$ SST (*Shear Stress Transport*) com funções de parede automáticas, na análise de um sistema BRM foram comparadas entre si e com dados experimentais e simulados disponíveis na literatura. Os perfis temporais da velocidade e da tensão cisalhante exibiram alta variabilidade no período das oscilações em certos pontos, exigindo um longo tempo de escoamento para a convergência das variáveis locais. Identificou-se a necessidade de outorgar maior importância à definição do intervalo de tempo de coleta de dados experimentais, de modo a adquirir médias representativas do perfil dinâmico das variáveis e destes perfis serem também analisados para comparações mais definitivas entre resultados de simulações e medições experimentais. As diferenças, entre as medições experimentais da literatura e previsões, obtidas pelas simulações deste trabalho foram, no geral, de ordem similar ou menores que as obtidas pelas simulações na literatura. Além disso, maior atenção deve ser dada à escolha da estratégia de modelagem de turbulência, visto que houve alta sensibilidade das previsões, que variaram em até 21,6% dependendo dessa escolha.

Palavras-chave: biorreator com membranas; *fouling*; aeração; turbulência; CFD.

Abstract

Membrane bioreactors (MBR) market has been showing high growth rates over recent years. However, membrane fouling drastically reduces MBR overall performance. Aeration promotes fouling mitigation, but at a high operational cost (up to 70% of the MBR energy demand) and it is optimally employed only in 10% of the cases. This created the need of studies focused on MBR hydrodynamic. Computational fluid dynamics (CFD) is a useful tool for hydrodynamic analysis. One of the first steps in finding a proper solution for numerical simulation is proposing a correct modelling. Among the phenomena to be modelled for MBR simulations, turbulence effects are probably one of the most important; nevertheless, no paper comparing the predictions based on the turbulence model choice for MBR simulations was found. In sight of that, this work aimed to verify the relevance of the choice of turbulence model for MBR simulations through CFD. Predictions of local velocities near membranes surfaces and of local shear stress on those surfaces, for two aeration rates (5 and 15 m³/h), employing $k-\epsilon$ with wall functions for high (aR) and low (bR) Reynolds number and $k-\omega$ SST with automatic wall functions, on the analysis of a MRB system, were compared between each other and with experimental and simulated data available in the literature. The velocity and shear stress temporal profiles showed oscillations with highly variable periods in some points, which required a long process real time to verify the local variables convergence. It was identified the need to give more importance to the definition of the time interval for experimental data collection in order to acquire reliable temporal means; also, one must properly analyze the temporal profiles for more definitive comparisons between predictions and experimental measurements. The differences, between experimental data and predictions, obtained through this work simulations were, in general, of similar order or smaller than the ones reported in the literature. Besides, more attention must be given to the turbulence modelling choices, since the predictions obtained here were highly sensitive to those choices, showing differences up to 21,6% among them.

Keywords: membrane bioreactor; fouling; aeration; turbulence; CFD.

Sumário

Agradecimentos	ix
Resumo	xi
Abstract	xiii
Lista de Figuras	xvii
Lista de Tabelas	xix
Lista de Símbolos	xxi
Introdução	1
1.1 Motivação e Objetivos.....	1
1.2 Estrutura da Dissertação	5
Fundamentos Teóricos e Revisão Bibliográfica	6
2.1 Biorreatores com membranas	6
2.1.1 Conceitos básicos de biorreatores com membranas	6
2.1.2 Aeração em biorreatores com membranas	8
2.2 Turbulência	9
2.2.1 Conceitos básicos de turbulência.....	9
2.2.2 Fundamentos da modelagem da turbulência	10
2.2.3 Tratamento da turbulência em regiões de parede	16
2.3 CFD aplicado a biorreatores com membranas	20
Metodologia	27
3.1 Sistema experimental e geração de malha	27
3.2 Modelos	32
3.3 Simulações	35
3.4 Tratamento dos dados.....	35
Resultados	37
4.1 Dinâmica do escoamento e convergência das simulações.....	37
4.2 Convergência de malha	40
4.3 Comparação de predições e medições experimentais	42
4.3.1 Velocidade do gás.....	43
4.3.2 Tensão cisalhante.....	44
Conclusões e sugestões para trabalhos futuros	53
5.1 Conclusões	53
5.2 Sugestões para trabalhos futuros.....	54
Referências Bibliográficas	55

Lista de Figuras

- Figura 2.1:** Configurações de um biorreator com membranas: (a) externo e (b) submerso. Fonte: adaptado de Judd; Judd, 2011. 7
- Figura 2.2:** Definição da média e da flutuação turbulenta das variáveis: (a) velocidade e (b) pressão. Fonte: White, 2009. 11
- Figura 2.3:** Distribuições típicas de (a) tensão e (b) velocidade em escoamentos turbulentos próximo a uma parede. Fonte: adaptado de White, 2009. 16
- Figura 2.4:** Verificação experimental da lei da parede para o perfil de velocidade adimensional em escoamentos turbulentos próximo à parede. Fonte: adaptado de White, 2009. 18
- Figura 3.1:** Esquema do BRM estudado por Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012). 29
- Figura 3.2:** Vistas frontal (VF), lateral (VL) e superior (VS) do BRM estudado por Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012). 29
- Figura 3.3:** Localização das medições de tensão cisalhante nos módulos de membrana. (a) vista perspectiva dos planos de medição, (b) vista frontal dos locais de medição de tensão em cada plano (linhas ABC, DEF, GHI, e JKL em 'y' 1,57, 1,08, 0,59, e 0,10 m, respectivamente, e colunas ADGJ, BEHK e CFIL em 'x' 0, 0,18 e 0,36 m, respectivamente). Fonte: adaptado de Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012). 30
- Figura 3.4:** Vista superior do BRM estudado por Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012) com a localização das medições de velocidade das bolhas em 'y' 1,82 m (pontos 1, 2, 3, e 4, 5, 6 em 'x' 0, 0,18 e 0,36 m, respectivamente). 30
- Figura 3.5:** Sensores utilizados nas medições experimentais. (a) Sensor para medição de tensão e (b) fibra na qual se encontra recoberto. (c) Sensor para medição de velocidade. Fonte: adaptado de Fulton *et al.* (2011). 31
- Figura 4.1:** Evolução temporal da velocidade da fase gás predita pelo modelo $k-\omega$ SST com a malha M2 para baixa vazão de aeração no ponto 3 com um período relativo à dinâmica das bolhas indicado na figura. 38
- Figura 4.2:** Evolução temporal da velocidade da fase gás predita pelo modelo $k-\omega$ SST com a malha M2 para baixa vazão de aeração nos Pontos (Pt) 1 a 6, representados na Figura 3.4. 39
- Figura 4.3:** Evolução temporal da tensão cisalhante global sobre as membranas predita pelo modelo $k-\omega$ SST com a malha M2 para baixa vazão de aeração em (a) escala normal e (b) em escala logarítmica para o eixo x. 41
- Figura 4.4:** Evolução temporal da tensão cisalhante global sobre as membranas predita pelo modelo $k-\omega$ SST para baixa vazão de aeração para três refinamentos de malha. . 42
- Figura 4.5:** Comparação dos perfis de tensão cisalhante (Pa) sobre a superfície das membranas para três estratégias de modelagem de turbulência, dados experimentais (EXP) e simulados na literatura (SIM) (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012) para baixa vazão de aeração nos três planos de medição. Valores de tensão nas regiões entre os pontos de medição foram obtidos por interpolação linear. 50

Figura 4.6: Comparação dos perfis de tensão cisalhante (Pa) sobre a superfície das membranas para três estratégias de modelagem de turbulência, dados experimentais (EXP) e simulados na literatura (SIM) (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012) para alta vazão de aeração nos três planos de medição. Valores de tensão nas regiões entre os pontos de medição foram obtidos por interpolação linear. 51

Lista de Tabelas

Tabela 2.1: Aspectos da modelagem e características dos sistemas utilizados na literatura sobre simulações fluidodinâmicas de sistemas BRM em ordem cronológica.	24
Tabela 3.1: Características das malhas utilizadas para o estudo de independência de malha.	32
Tabela 3.2: Constantes dos modelos de turbulência	33
Tabela 3.3: Condições de contorno para a fração volumétrica da fase gás e para as velocidades das fases	34
Tabela 4.1: Testes de convergência (independência) da malha. Comparação da tensão cisalhante média global sobre as membranas para três malhas com refinamentos distintos.....	42
Tabela 4.2: Valores de velocidade local do gás para taxas de aeração baixa e alta e pontos de medição 3 e 6 para as três estratégias de modelagem de turbulência e dados experimentais.	43
Tabela 4.3: Comparação da tensão cisalhante (Pa) sobre a superfície das membranas para três estratégias de modelagem de turbulência, dados simulados da literatura e dados experimentais (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012) para baixa vazão de aeração.	46
Tabela 4.4: Comparação da tensão cisalhante (Pa) sobre a superfície das membranas para três estratégias de modelagem de turbulência, dados simulados da literatura e dados experimentais (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012) para alta vazão de aeração.	47
Tabela 4.5: Comparação da tensão cisalhante média global (Pa) na superfície das membranas para as três estratégias de modelagem da turbulência, dados simulados da literatura e dados experimentais (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012), para duas taxas de aeração.	52

Lista de Símbolos

a_1	constante da Equação 2.18	-
B	constante empírica da Equação 2.15	-
c_1	constante da Equação 2.19	kg/m^3
C_1, C_2	constantes da Equação 2.9	-
C_{ss}	concentração de sólidos suspensos	kg/m^3
C_μ	constante da Equação 2.10	-
g_i	componente i do vetor gravidade	m/s^2
k	energia cinética da turbulência	m^2/s^2
l	comprimentos característicos da turbulência	m
l_m	comprimento de mistura	m
l_{plm}	percurso livre médio	m
\bar{M}_φ	termo de transferência de momento médio entre fases da fase φ	$kg/(m^2 \cdot s^2)$
\underline{n}	vetor normal	-
\bar{p}	média temporal da pressão	Pa
\bar{R}_φ^{ef}	tensor de Reynolds efetivo médio da fase φ	Pa
\underline{s}	vetor tangente	-
x_i, x_j, x_k	vetores posição em notação tensorial	m
u_i, u_j, u_k	vetores velocidade em notação tensorial	m/s
u'_i, u'_j, u'_k	vetores das flutuações de velocidade em notação tensorial	m/s
\underline{u}_φ	vetor velocidade da fase φ	m/s
$\bar{u}_i = U_i, \bar{u}_j = U_j$	médias temporais dos componentes do vetor velocidade	m/s
v_m	velocidade de mistura	m/s
y^+	comprimento adimensional	-
U^+	velocidade adimensional	-
U^*	velocidade de fricção	m/s
v_t	velocidade térmica	m/s

Letras Gregas

α_φ	fração volumétrica da fase φ	-
β	constante da Equação 2.17	-
β^*	constante da Equação 2.16	-
γ	constante da Equação 2.17	-
δ	espessura da camada limite	m
ϵ	taxa de dissipação de energia da turbulência	m^2/s^3
κ	constante empírica da Equação 2.15	-
μ	viscosidade dinâmica do fluido	$Pa \cdot s$
μ_t	viscosidade dinâmica turbulenta	$Pa \cdot s$
ν	viscosidade cinemática do fluido	m^2/s
ν_t	viscosidade cinemática turbulenta	m^2/s
ρ	massa específica do fluido	kg/m^3
σ_ϵ	constante da Equação 2.9	-
σ_k	constante da Equação 2.7 e Equação 2.16	-
$\sigma_\omega, \sigma_{\omega 2}$	constantes da Equação 2.17	-
τ	tensão cisalhante	Pa
τ_w	tensão cisalhante na parede	Pa
τ_{xy}	componente xy da tensão cisalhante	Pa
ω	taxa de dissipação de energia da turbulência específica	$1/s$
ω_{log}	taxa de dissipação de energia da turbulência específica da região logarítmica	$1/s$
ω_{vis}	taxa de dissipação de energia da turbulência específica da região viscosa	$1/s$

Siglas

aR	função de parede para alto número de Reynolds
bR	função de parede para baixo número de Reynolds
BRM	Biorreator com Membranas
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i> (Dinâmica de Fluidos Computacional)

DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i> (Simulação Numérica Direta)
EL	Euler-Lagrange
EE	Euler-Euler
Eu	Eulerian
GAMG	<i>Geometric Algebraic Multi-Grid</i> (Multi-Grid Algébrico-Geométrico)
LES	<i>Large Eddies Simulation</i> (Simulação dos Grandes Eddies)
MF	Microfiltração
NS	Navier-Stokes
PBE	<i>Population Balance Equation</i> (Equação de Balanço Populacional)
PISO	<i>Pressure-Implicit Split-Operator</i>
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes (Média de Reynolds de Navier-Stokes)
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i>
SST	<i>Shear Stress Transport</i>
VOF	<i>Volume of Fluid</i> (Volume de Fluido)

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação e Objetivos

Biorreatores com membranas (BRMs) combinam a digestão biológica de matéria orgânica com a separação de substâncias indesejáveis por membranas permoseletivas para tratar efluentes, gerando um produto clarificado e desinfetado. Os BRMs surgiram comercialmente em 1969, com o propósito de tratar águas residuais em navios. Na década de 80, o governo japonês começou a fornecer incentivos para o desenvolvimento desses sistemas em indústrias e, na primeira metade da década de 90, já existiam três principais sistemas BRM, localizados no Japão e nos Estados Unidos. Devido à preocupação crescente com a poluição de corpos d'água e com a escassez de recursos hídricos, surgiu a necessidade do aprimoramento de tecnologias limpas. Dessa forma, na segunda metade dos anos 90, começou a se observar um crescimento notável no número de itens (desde membranas a sistemas BRM completos) relacionados à essa tecnologia; somavam-se pelo menos 10 itens de 7 países. Até 2011, foram lançados pelo menos outros 33 itens relacionados a sistemas de biorreatores com membranas (JUDD; JUDD, 2011).

Atualmente, sistemas BRM foram implementados em mais de 200 países e seu mercado global está bem estabelecido, com altas taxas de crescimento. O mercado de BRMs cresceu à

taxa de aproximadamente 12% durante a primeira década desse século. Além disso, BRMs são usados como sistemas majoritários no tratamento de água em diversos locais do mundo (JUDD; JUDD, 2011). O rápido crescimento desse mercado foi o resultado de avanços tecnológicos, redução no custo das membranas e vantagens dos BRMs em relação a sistemas de tratamento convencional de efluentes. Essas vantagens consistem em maior eficiência, produção de água com qualidade muito maior e capacidade de trabalhar com maiores concentrações de lodo devido à melhor digestão biológica. Além disso, o tratamento de efluentes por BRMs necessita menos etapas operacionais e isso se traduz em necessidade de espaço físico consideravelmente menor.

Contudo, um problema conhecido e persistente no uso de biorreatores com membranas é a ocorrência de *fouling*, que consiste na formação de incrustações na membrana e limita a aplicação de BRMs. Características da membrana e da biomassa, condições operacionais e aspectos da geometria têm um efeito sinérgico sobre o *fouling*. Além de diminuir o tempo de vida útil da membrana, essas incrustações aumentam a pressão e/ou diminuem o fluxo, dependendo do modo de operação. Por esses motivos, o *fouling* gera a necessidade de interrupções operacionais frequentes de modo a submeter os módulos de membrana a um processo de limpeza. Os processos de limpeza típicos compreendem: (i) inversão do fluxo (*backflushing*), com ar ou permeado, a taxas 1 a 3 vezes maiores que o fluxo direto; (ii) interrupção temporária da permeação (relaxação); e (iii) limpeza química com bases, ácidos e/ou oxidantes, *in* ou *ex situ*.

Um processo frequentemente utilizado, no lugar de processos típicos de limpeza ou em conjunto com os mesmos, é a aeração, que pode ser empregada durante a operação do BRM, sem necessitar de interrupções. Nesse caso, a transferência de quantidade de movimento das bolhas de ar para o líquido e para as superfícies das membranas promove a diminuição do *fouling* e uma melhor mistura do fluido no sistema.

Apesar da importância da hidrodinâmica multifásica em BRMs ser reconhecida por mais de vinte anos, as indústrias e a comunidade científica ainda não compreendem completamente os efeitos cisalhantes induzidos pelas bolhas de ar nos biorreatores com membranas. Judd (2011) enfatiza que a relação entre fluxo, permeabilidade e cisalhamento atualmente pode somente ser obtida por meio de dados empíricos ou heurísticas. O alto custo operacional associado à limpeza por aeração é um problema recorrentemente mencionado; a

aeração consome até 70% do total da demanda de energia para sistemas BRM e é apenas utilizada de forma otimizada 10% das vezes (BÖHM *et al.*, 2012). Adicionalmente, é usual a ocorrência de distribuições heterogêneas de bolhas no sistema, o que normalmente resulta em uma distribuição heterogênea do *fouling* sobre as superfícies das membranas, dependendo da geometria do sistema (LIU *et al.*, 2015).

Esses fatores evidenciam a necessidade de desenvolver conhecimento mais amplo e profundo dos efeitos da aeração e da hidrodinâmica como um todo nesses sistemas. Porém, normalmente não é factível a obtenção de certos dados experimentais, como valores de tensão cisalhante e de velocidade próximos às membranas. Esse desafio se origina da presença de escoamento multifásico altamente turbulento, de geometrias não triviais e da natureza transiente dos processos em BRMs. Além disso, as medições experimentais podem ser destrutivas, invasivas, demoradas e caras. Portanto, para estudar a hidrodinâmica de BRMs, diversos pesquisadores têm utilizado ferramentas de dinâmica de fluidos computacional (CFD, *Computational Fluid Dynamics*), a qual se baseia em análises numéricas para resolver problemas de escoamento de fluidos (AMINI *et al.*, 2015; BRANNOCK *et al.*, 2010, 2009; BRANNOCK; WANG; LESLIE, 2010; BUETEHORN *et al.*, 2011; KANG *et al.*, 2008; LIU *et al.*, 2015, 2016; PRIESKE; DREWS; KRAUME, 2008; RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012; WANG *et al.*, 2010; WEI *et al.*, 2013; YAN *et al.*, 2015, 2016; ZAMANI; LAW; FANE, 2013).

Assim, apesar do crescente número de publicações (entre 2011 e 2015, houve um aumento maior que três vezes no número médio de publicações nesse tema por ano quando comparado com o período de 2000 a 2004, por exemplo), ainda há muito a ser estudado dada a importância da hidrodinâmica no controle do *fouling*. De toda a literatura consultada sobre biorreatores com membranas, mais de 25% trata de *fouling* e, destes, 82% se concentram nos últimos 10 anos e 53% nos últimos 5 anos; todavia, apenas 4,3% estuda a hidrodinâmica nesses sistemas. Adicionalmente, apesar de ser crescente o número de publicações sobre biorreatores com membranas nos últimos anos no Brasil, não há nenhuma publicação brasileira relacionada à hidrodinâmica nesses sistemas; enquanto que existem 59 chinesas, 55 estadunidenses, 36 inglesas, 30 australianas, 29 alemãs, 27 canadenses, 27 francesas, 26 belgas, 20 italianas, entre outras (SCOPUS, 2016). É evidente a necessidade do desenvolvimento de pesquisa e de tecnologia relacionadas ao uso de CFD em BRMs no Brasil.

Um dos primeiros passos para encontrar uma solução apropriada para simulações numéricas é propor uma modelagem correta, já que os resultados da simulação e sua confiabilidade podem ser sensíveis à escolha dos modelos. De modo a se obter informações da hidrodinâmica de BRMs através de CFD, diversos fenômenos podem ser modelados, como filtração, vibração das fibras de membrana, reologia do lodo, turbulência do escoamento, tamanho e colisões de bolhas, formação de *fouling*, entre outros, cada qual necessitando de uma estratégia específica de modelagem. Como será visto no Capítulo 2, apesar dos avanços recentes na simulação numérica de escoamentos em BRMs, especialmente estudando os efeitos de parâmetros físicos sobre o cisalhamento na membrana, praticamente não há foco na adequabilidade de modelos.

Dentre os fenômenos mencionados, os efeitos da turbulência são provavelmente um dos mais importantes e, conseqüentemente, a escolha do modelo de turbulência pode ser um ponto crítico para a simulação de BRMs, principalmente devido à falta de uma teoria geral para a turbulência. Por exemplo, Ratkovich *et al.* (2009) atribuiu a superestimação dos resultados de suas simulações à inexatidão de sua modelagem da turbulência. A maioria dos artigos sobre modelagem e simulação de BRMs utilizam o modelo de turbulência $k-\epsilon$ e suas variações (Capítulo 2); contudo, nenhuma explicação detalhada foi fornecida para essas escolhas. Ademais, a maioria desses artigos não detalha como foi tratada a modelagem do escoamento próximo às paredes, onde diversos modelos de turbulência têm baixo desempenho devido ao predomínio das forças viscosas.

O modelo $k-\omega$ de turbulência e suas variações têm sido empregados em simulações de colunas de bolhas (CHERNYSHEV; SCHMIDT, 2013; RIERA; ZEPPIERI; DERJANI-BAYEH, 2014) devido a sua exatidão na resolução de escoamentos na camada limite. Já que biorreatores com membranas têm comportamento hidrodinâmico diferente e único devido à presença dos módulos de membranas, o desempenho desse modelo em BRMs deve também ser estudado.

Apesar de saber-se que a turbulência exerce grande influência no comportamento do escoamento, não encontramos nenhum artigo que avaliasse o desempenho e a confiabilidade das predições baseado na escolha de modelo de turbulência para simulações de sistemas BRM. Dessa forma, o objetivo desse trabalho foi verificar a importância da escolha do modelo de turbulência para simulações de biorreatores com membranas através de CFD. Para isso, as

predições obtidas para duas taxas de aeração empregando dois modelos de turbulência na análise de um sistema BRM foram comparadas. Os modelos avaliados foram o modelo $k-\epsilon$ com funções de parede para alto e para baixo número de Reynolds e o modelo $k-\omega$ SST (*Shear Stress Transport*). Os resultados de velocidade local próxima às superfícies das membranas e a tensão cisalhante nessas superfícies foram usados como base da análise na comparação entre os modelos e com dados experimentais e simulados disponíveis na literatura.

1.2 Estrutura da Dissertação

No Capítulo 2, serão revistos e aprofundados conceitos básicos de biorreatores com membranas e de turbulência, temas centrais desse trabalho. Além disso, será apresentado o estado da arte sobre o estudo da hidrodinâmica nesses biorreatores por fluidodinâmica computacional.

A metodologia será abordada no Capítulo 3. O sistema físico utilizado para as simulações será descrito, assim como as malhas computacionais geradas. Os modelos, condições de contorno e parâmetros das simulações empregados serão apresentados. Eventuais simplificações serão justificadas neste capítulo, embasando-se na revisão realizada no Capítulo 2.

No Capítulo 4, serão apresentados e discutidos os resultados obtidos. Será exibida a validação dos dados numéricos obtidos nesse trabalho com dados experimentais e numéricos da literatura e os resultados gerados pelas diferentes estratégias de modelagem utilizadas serão comparados entre si.

Por fim, no Capítulo 5, serão apresentadas as conclusões obtidas até o momento e sugestões para estudos futuros. Serão descritos sucintamente os principais problemas e resultados encontrados no curso desse trabalho e se traçará as considerações finais em relação aos mesmos.

Capítulo 2

Fundamentos Teóricos e Revisão Bibliográfica

Neste capítulo serão apresentados inicialmente os conceitos e as peculiaridades do funcionamento de biorreatores com membranas. Em seguida, as características da turbulência e o desenvolvimento dos primeiros modelos para resolução de escoamentos turbulentos, apresentados na literatura, serão abordados. Os modelos de turbulência mais utilizados atualmente e o tratamento da camada limite para escoamentos turbulentos também serão discutidos. Por fim, será apresentado o estado da arte referente ao estudo da hidrodinâmica de biorreatores com membranas através de fluidodinâmica computacional.

2.1 Biorreatores com membranas

2.1.1 Conceitos básicos de biorreatores com membranas

O termo biorreatores com membranas (BRMs) aplica-se a todo processo de tratamento de água residual em que estejam combinados uma membrana permeável e um processo biológico (JUDD; JUDD, 2011). Um BRM pode ser descrito simplificadaamente como um reator contendo lodo ativado, composto por bactérias responsáveis pela digestão biológica dos compostos orgânicos da corrente de alimentação, equipado com módulos de membrana. Na

grande maioria dos casos, há o consumo de oxigênio por esses microrganismos e, portanto, existe uma entrada de ar localizada próxima à base desse reator.

Em BRMs, normalmente, se utilizam membranas de material polimérico com tamanho de poros entre 0,1 e 10 μm , classificadas como membranas de microfiltração (MF). Através da aplicação de um gradiente de pressão de 0,5 a 2 bar (para esse tipo de membrana), as membranas são capazes de reter bactérias e sólidos suspensos, resultando num lodo mais concentrado e numa corrente de água clarificada e esterilizada, chamada de permeado. De modo a se obter uma quantidade razoável de permeado, diversas membranas são utilizadas em conjunto, agrupadas em módulos. Para membranas planas, os módulos podem ser do tipo placa-e-quadro ou do tipo espiral; para membranas cilíndricas, os módulos podem ser do tipo fibra-oca, capilares ou tubulares. Em BRMs, são mais utilizadas as membranas planas em módulos do tipo placa-e-quadro e as membranas cilíndricas em módulos do tipo fibra-oca.

A operação dos BRMs, quanto ao processo de separação, depende primeiramente da localização dos módulos de membranas em relação ao processo biológico. Dessa forma, podem ser classificados majoritariamente em externo ou submerso. Uma representação esquemática dessas configurações é exibida na Figura 2.1.

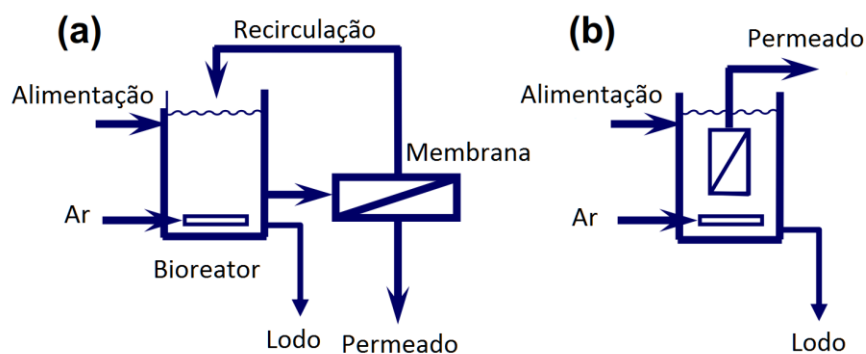


Figura 2.1: Configurações de um biorreator com membranas: (a) externo e (b) submerso. Fonte: adaptado de Judd; Judd, 2011.

Na configuração externa, uma bomba deve transportar a solução a ser filtrada para o módulo de membranas e altas velocidades tangenciais são requeridas de modo a minimizar o aumento da concentração de solutos próximo à superfície da membrana e, desta forma, evitar a diminuição do fluxo durante o processo. Contudo, a pressão necessária para o bombeamento resulta em um maior consumo energético, comparado com a configuração submersa. Além

disso, apesar de altas velocidades tangenciais auxiliarem a evitar a formação de incrustações, altos fluxos induzem a um maior grau de *fouling* e a uma menor permeabilidade. Nessa configuração, normalmente a limpeza das membranas é feita por meios químicos e, devido à localização externa do módulo, a manutenção do sistema é facilitada (JUDD; JUDD, 2011).

No sistema de biorreatores com membranas submersas, existe menor consumo energético e maior permeabilidade, comparado com a configuração externa. Na configuração com membranas submersas, a superfície externa das membranas está em contato com o conteúdo do biorreator e também com as bolhas do sistema de aeração, que é utilizada não somente para fornecer oxigênio aos microrganismos, mas também para realizar a limpeza da superfície das membranas, auxiliando na mitigação do *fouling* e aumentando o grau de mistura do sistema através da turbulência gerada pelas bolhas de ar (JUDD; JUDD, 2011). Essa é a configuração utilizada neste trabalho e, a partir da próxima seção, o termo BRM se referenciará exclusivamente a sistema de biorreatores com membranas submersas.

Mais recentemente, um terceiro tipo de configuração tem ganhado espaço, a configuração submersa-externa. No sistema submerso-externo, existem dois tanques, no primeiro ocorre o processo biológico e no segundo, onde se localiza o módulo de membranas, a filtração. Essa terceira configuração mescla as características das duas configurações descritas anteriormente (externa e submersa) (JUDD; JUDD, 2011).

2.1.2 Aeração em biorreatores com membranas

A aeração é essencial em biorreatores com membranas e sua função não é unicamente a de fornecer oxigênio aos microrganismos responsáveis pela digestão da carga orgânica, como ocorre em outros tipos de biorreatores. De fato, Judd; Judd (2011) comentam que a respiração biológica pode consumir apenas 10% do oxigênio fornecido em BRMs. A introdução de bolhas de ar no sistema ajuda a garantir agitação, altas taxas de transferência de massa e, conseqüentemente, mistura do fluido no biorreator com membranas. Além disso, as bolhas de ar transferem energia em forma de quantidade de movimento para o líquido e para as superfícies das membranas, aumentando o cisalhamento nessas superfícies. Dessa forma, a aeração se torna um mecanismo fundamental para mitigar a formação de *fouling* (JUDD; JUDD, 2011).

Existem três características principais num sistema com aeração: tamanho das bolhas, taxa de entrada de ar e área do aerador (JUDD; JUDD, 2011). A taxa de entrada de ar e a área

do aerador são os responsáveis pela intensidade da aeração e, juntamente com o tamanho das bolhas, influenciam diretamente na transferência de oxigênio para os microrganismos e na permeabilidade das membranas (através da mitigação do *fouling*).

Além disso, a intensidade da aeração tem relação com a viscosidade do fluido. A viscosidade e a aeração se relacionam através dos gradientes de velocidade causados pelo movimento das bolhas. Esses gradientes alteram diretamente a viscosidade do lodo ativado, um fluido pseudoplástico, e o cisalhamento gerado também pode resultar na quebra de flocos do material sólido do lodo, o que, por sua vez, também altera a sua viscosidade.

Um quarto parâmetro da aeração, a homogeneidade na distribuição das bolhas na região onde se encontram os módulos de membrana, também exerce grande influência sobre o desempenho de BRMs. A homogeneidade nessa distribuição de bolhas de ar está relacionada com a homogeneidade do *fouling* sobre a superfície das membranas. Esse parâmetro já foi citado em alguns artigos, como Liu *et al.* (2015), e depende, basicamente, da intensidade da aeração, geometria e localização do aerador em relação às membranas.

Por fim, cabe salientar que a aeração nesses sistemas normalmente é responsável pela criação de turbulência no escoamento. A turbulência é necessária para que haja altos níveis de transferência de massa, agitação e cisalhamento sobre as membranas. Esse tópico será abordado mais detalhadamente na próxima seção.

2.2 Turbulência

2.2.1 Conceitos básicos de turbulência

Turbulência é um fenômeno caracterizado pelo movimento irregular e randômico de um fluido quando as forças inerciais têm papel muito mais importante do que as forças viscosas presentes no escoamento. As instabilidades e distúrbios típicos da turbulência dão origem a movimentos secundários aleatórios que se ampliam e se propagam tridimensionalmente. Estes fenômenos podem ser estudados por meio da solução direta das equações de Navier-Stokes, pela técnica DNS (*Direct Numerical Simulation*). No entanto, o uso desta técnica é muitas vezes impossibilitada pelo seu elevado custo computacional. Alternativamente, o problema pode ser tratado pelo uso de modelos de turbulência, sendo que, neste caso, apesar da grande

quantidade de estudos focada no desenvolvimento da modelagem da turbulência ao longo dos anos, ainda não existe uma teoria de aplicação geral para esse fenômeno.

As principais características de escoamentos turbulentos incluem: presença de flutuações aparentemente aleatórias de quantidades físicas como pressão e velocidade; caráter tridimensional e transiente da turbulência; imprevisibilidade de trajetórias (perda de memória das condições iniciais); escoamento altamente rotacional, caracterizando a não-linearidade do escoamento, com *eddies* (redemoinhos) de diferentes escalas; alta dissipação de energia; e alta difusividade (TENNEKES; LUMLEY, 1972).

Um aspecto importante no estudo da turbulência está relacionado com o fluxo de energia. A turbulência não pode se manter sem obter energia do ambiente. A fonte mais comum de energia para a turbulência é o cisalhamento do escoamento principal. Dessa forma as flutuações de velocidade são mantidas e dão origem à energia cinética turbulenta, essa energia segue sendo transferida dos maiores para os menores *eddies* até sua dissipação viscosa na parede. Como a dinâmica da turbulência é rápida, devido às altas velocidades, a turbulência está em equilíbrio dinâmico com o escoamento principal e, dessa forma, a transferência de energia ocorre rapidamente e a taxa de dissipação na parede pode ser considerada igual à taxa de transferência de energia.

2.2.2 Fundamentos da modelagem da turbulência

Devido às flutuações aleatórias características da turbulência não existe solução analítica para as equações de Navier-Stokes (NS) para esses escoamentos. Como alternativa, soluções podem ser obtidas através de métodos numéricos. A simulação numérica direta (DNS, *Direct Numerical Simulation*) resolve numericamente as equações de NS para escoamentos turbulentos, mas possui custo computacional elevadíssimo e é utilizada atualmente apenas para geometrias e escoamentos simples (JOSHI *et al.*, 2017).

A simulação dos grandes *eddies* (LES, *Large Eddies Simulation*) resolve apenas as maiores escalas da turbulência de forma similar à DNS e utiliza modelos adicionais para as menores escalas visto que essas apresentam comportamento mais isotrópico. Isso é realizado através do uso de um filtro (cujo efeito é similar à realização de médias espaciais e temporais sobre as variáveis) para distinguir as menores das maiores escalas da turbulência. A aplicação desse filtro às equações de NS resulta em equações com variáveis equivalentes às das equações

de NS, escritas agora apenas para as maiores escalas, e com um tensor adicional que representa as tensões das menores escalas. Diversos modelos têm sido desenvolvidos com o objetivo de relacionar esse tensor com parâmetros do escoamento e de representar o comportamento físico da turbulência de forma adequada nessas pequenas escalas. Ainda que essa estratégia de modelagem possa consumir apenas de 5 a 10% do tempo de simulação requerido para a DNS, continua sendo considerada extremamente demorada e inviável de ser utilizada em diversos casos (WILCOX, 2006).

Outras estratégias para se resolver escoamentos turbulentos consistem no uso de métodos estatísticos: métodos espectrais, funções de densidade de probabilidades, transformada de Fourier, e a decomposição de Reynolds. Além disso, resoluções baseadas na teoria matemática do caos têm sido estudadas (WILCOX, 2006).

A decomposição de Reynolds é o método mais empregado para a resolução de escoamentos turbulentos. As variáveis são decompostas em uma soma com dois termos: uma média temporal, realizada sobre um período muito maior que o período das flutuações, e as flutuações tempo-dependentes (Figura 2.2) (SCHIESTEL, 2006; WILCOX, 2006; WHITE, 2009).

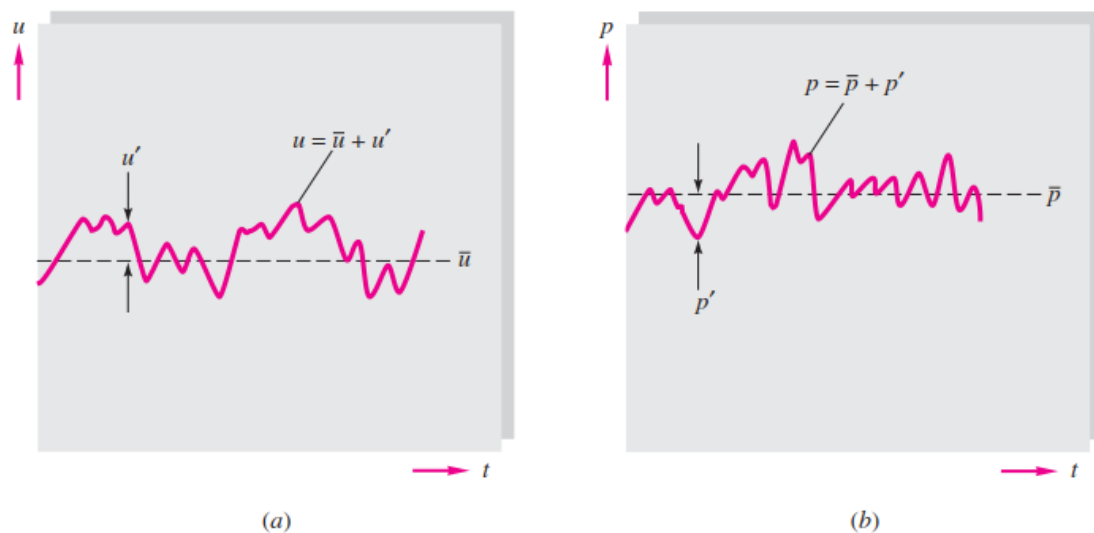


Figura 2.2: Definição da média e da flutuação turbulenta das variáveis: (a) velocidade e (b) pressão.

Fonte: White, 2009.

Através da substituição desses dois termos no lugar das variáveis correspondentes nas equações de Navier-Stokes, surgem os termos denominados de médias de Reynolds das equações de Navier-Stokes, ou Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS). O termo de

flutuações médio ao longo do tempo é nulo, i.e., as flutuações têm uma variação total nula em relação ao valor médio da variável em análise para longos períodos. Contudo, os termos quadráticos dessas flutuações não desaparecem, resultando em termos de aceleração convectiva que possuem as mesmas dimensões da tensão de cisalhamento; são tensões aparentes que foram denominadas de tensões turbulentas, também conhecidas como tensões de Reynolds (WHITE, 2009). As equações RANS, para fluidos incompressíveis em coordenadas cartesianas, escritas com a notação de Einstein, são:

$$\rho \left[\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_j \bar{u}_i)}{\partial x_j} - g_i \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) - \rho \overline{u'_j u'_i} \right] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (2.1)$$

onde x_i ($i = 1..3$), x_j ($j = 1..3$) e x_k ($k = 1..3$) referem-se às coordenadas de um ponto (x , y e z , respectivamente); u_i ($i = 1..3$), u_j ($j = 1..3$) e u_k ($k = 1..3$) referem-se às componentes do vetor velocidade (u_x , u_y e u_z , respectivamente); ρ é a massa específica do fluido; \bar{u}_i , \bar{u}_j são as médias temporais dos componentes do vetor velocidade; g_i é o componente i do vetor gravidade; μ é a viscosidade dinâmica do fluido e \bar{p} é a média temporal da pressão. É importante ainda mencionar que na notação utilizada na Equação (2.1), um subíndice (i , j ou k) que aparece apenas uma vez por termo indica uma direção específica da equação vetorial, enquanto um subíndice que aparece repetido em um determinado termo indica um somatório de todos os termos associados. Para simplificar a notação, \bar{u}_i , \bar{u}_j serão representados por U_i , U_j a partir desse ponto.

O surgimento das tensões turbulentas resulta em um maior número de variáveis do que de equações, o que nesse caso é chamado de *the closure problem of turbulence*. Para resolver o sistema de equações, as tensões turbulentas (ou de Reynolds) devem ser relacionadas com parâmetros do escoamento, o que deu início ao desenvolvimento dos modelos de turbulência RANS (SCHIESTEL, 2006; WILCOX, 2006).

Os modelos de turbulência RANS surgiram com a aproximação de Boussinesq, na qual foi deduzida a tensão exercida a nível molecular (Equação 2.2) a partir da teoria dos gases para um gás ideal (WILCOX, 2006). Embora as escalas molecular e turbulenta sejam diferentes, essa foi a base para o desenvolvimento de teorias e modelos posteriores. Para maior clareza, algumas das equações seguintes serão exibidas apenas para uma direção de escoamento, começando pela tensão exercida a nível molecular, que é dada por:

$$\tau_{xy} = \mu \frac{dU_x}{dy} \quad (2.2)$$

onde τ_{xy} é o componente xy da tensão; μ é a viscosidade molecular, definida como $\frac{1}{2}\rho v_t l_{plm}$; v_t é a velocidade térmica (velocidade molecular); l_{plm} é o percurso livre médio; U_x é a velocidade média na direção x . Em 1925, Prandtl postulou a hipótese do comprimento de mistura, na qual a mesma dedução para a tensão molecular foi aplicada para a tensão turbulenta (WILCOX, 2006):

$$-\overline{\rho u'_x u'_y} = \tau_{xy} = \mu_t \frac{dU_x}{dy} \quad (2.3)$$

onde a viscosidade turbulenta, conhecida como *eddy viscosity*, é definida em analogia com a viscosidade laminar

$$\mu_t = \frac{1}{2}\rho v_m l_m \quad (2.4)$$

onde l_m é a escala de comprimento da dispersão, chamada de comprimento de mistura e v_m é a velocidade de mistura. Prandtl definiu a velocidade de mistura como $v_m = \text{constante } l_m \left| \frac{dU_x}{dy} \right|$ e, como l_m não é uma propriedade física do fluido, pode absorver a constante e o $\frac{1}{2}$ da equação anterior. Dessa forma, a Equação 2.4 se torna

$$\mu_t = \rho l_m^2 \left| \frac{dU_x}{dy} \right| \quad (2.5)$$

Apesar da hipótese do comprimento de mistura ter fornecido um fechamento para as equações de Reynolds, ela é válida apenas para muito poucas situações onde pode-se considerar apenas um comprimento característico no escoamento turbulento e que o mesmo possa ser conhecido previamente (TENNEKES; LUMLEY, 1972; WILCOX, 2006). As equações puramente algébricas para o fechamento das equações RANS são chamadas de modelos de turbulência *zero-equation*, por não fazerem uso de equações diferenciais.

Os modelos *one-equation* e *two-equation* se baseiam na energia cinética turbulenta. A energia turbulenta é dada por $k = \frac{1}{2}\overline{u'_i u'_i}$ e se relaciona com os tensores de Reynolds por

$\tau_{ii} = -2\rho k$. A partir das equações RANS, o momento para k ($\overline{u'_i u'_i}$) pode ser calculado, fornecendo uma equação diferencial para o cálculo da energia turbulenta. Os modelos de turbulência mais utilizados são do tipo *two-equation*, mais especificamente os modelos k - ϵ e k - ω . Os modelos *two-equation*, diferentemente dos *one-equation*, não fornecem apenas uma maneira de calcular k , mas também as escalas de comprimento característico da turbulência ou seus equivalentes, exibidos nas relações dimensionais de Kolmogorov (WILCOX, 2006):

$$\mu_t \sim \rho k / \omega, \quad l \sim k^{1/2} / \omega, \quad \epsilon \sim \omega k \quad (2.6)$$

onde ω é a taxa de dissipação específica, l representa os comprimentos característicos da turbulência e ϵ é a taxa de dissipação de energia.

Dessa forma, diz-se que esses modelos são “completos”, pois fornecem o cálculo da turbulência sem necessitar o conhecimento prévio de sua estrutura. Contudo, o cálculo das escalas de comprimento da turbulência ou suas variáveis equivalentes necessita de uma segunda equação de transporte.

O modelo k - ω foi o primeiro do tipo *two-equation*. Foi proposto por Kolmogorov, em 1942, quando postulou a equação diferencial para o cálculo de ω através de raciocínio físico e análise dimensional. Contudo, houve pouco desenvolvimento formal fornecido por Kolmogorov quanto ao seu modelo (WILCOX, 2006). Para exemplificar os modelos *two-equation*, apenas o modelo de turbulência k - ϵ será descrito nessa revisão, devido a maiores informações disponíveis relativas a seu desenvolvimento. A equação diferencial para a energia turbulenta, escrita para o modelo de turbulência k - ϵ é dada por (LAUNDER; SPALDING, 1974):

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_k} \right] + \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_k} - \epsilon \quad (2.7)$$

onde σ_k é uma constante empírica e ϵ é definido por:

$$\epsilon = \nu \frac{\overline{\partial u'_i}}{\partial x_k} \frac{\overline{\partial u'_i}}{\partial x_k} \quad (2.8)$$

onde ν é a viscosidade cinemática do fluido. Através da definição da taxa de dissipação de energia turbulenta, pode-se calcular seu momento correspondente a partir das equações RANS

e se obter a segunda equação de transporte para o fechamento da turbulência, uma equação diferencial para ϵ . Conforme Launder & Spalding (1974), essa equação é dada por:

$$\frac{D\epsilon}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_k} \right] + \frac{C_1 \mu_t \epsilon}{\rho k} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_k} - C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.9)$$

onde σ_ϵ , C_1 e C_2 são constantes. A viscosidade turbulenta continua sendo calculada pela aproximação de Boussinesq para modelos do tipo *one-equation* e *two-equation*; reescrita em termos de energia turbulenta para o modelo k - ϵ , obtém-se

$$\mu_t = C_\mu \rho k^{1/2} l \quad (2.10)$$

onde C_μ é uma constante. Ou em termos de ϵ , no lugar de l ,

$$\mu_t = C_\mu \rho k^2 / \epsilon \quad (2.11)$$

É importante repetir que apesar de todo o desenvolvimento e estudos relativos a modelos de turbulência, os mais utilizados, inclusive em aplicações práticas de engenharia, continuam sendo os do tipo *two-equation*. Um dos maiores argumentos relativos à falta de sustentação física desses modelos é a utilização da aproximação rudimentar de Boussinesq, cuja viscosidade turbulenta deriva da analogia com a viscosidade molecular. A viscosidade molecular depende apenas do fluido, enquanto que a viscosidade turbulenta é afetada por diversos parâmetros do escoamento, como os chamados efeitos “históricos” ou de memória do escoamento, fronteiras sólidas, intensidade da turbulência, etc. Dentre os escoamentos para os quais esse tipo de modelagem resulta em baixa acurácia, destacam-se os que possuem as seguintes características: mudanças repentinas na taxa de deformação, superfícies curvas, dutos com movimentos secundários, com separação da camada limite, dentre outros (WILCOX, 2006).

Além dos modelos mencionados, existem pelo menos dezenas de outros propostos ao longo dos anos. Adicionalmente, os tipos de modelos tratados aqui (*zero*, *one* e *two-equation*) fazem parte da classe de modelos de turbulência de primeira ordem, que se utilizam da analogia com o escoamento laminar para calcular a turbulência (através da aproximação de Boussinesq). Existe uma segunda classe de modelos de turbulência RANS, os modelos de segunda ordem. Esses modelos utilizam as equações RANS para calcular um momento de segunda ordem no lugar da aproximação de Boussinesq. Contudo, são modelos mais complexos e com maior custo

computacional, devido ao surgimento de um grande número de equações diferenciais. Além disso, para diversos casos, os modelos de segunda ordem não têm produzido resultados de maior qualidade comparado aos de primeira ordem (MENTER; ESCH, 2001).

2.2.3 Tratamento da turbulência em regiões de parede

Neste trabalho, um tópico da modelagem de turbulência merece atenção especial. A estratégia de modelagem da turbulência em zonas próximas a paredes é importante para o cálculo da tensão cisalhante nessa região. Na Figura 2.3, os perfis típicos de tensão e velocidade para essa região são exibidos. Existe uma divisão entre as regiões onde a tensão laminar e a tensão turbulenta dominam, chamadas de camada viscosa ou camada de parede e camada externa, respectivamente. Há também uma região onde ambas tensões são relevantes, chamada de camada intermediária.

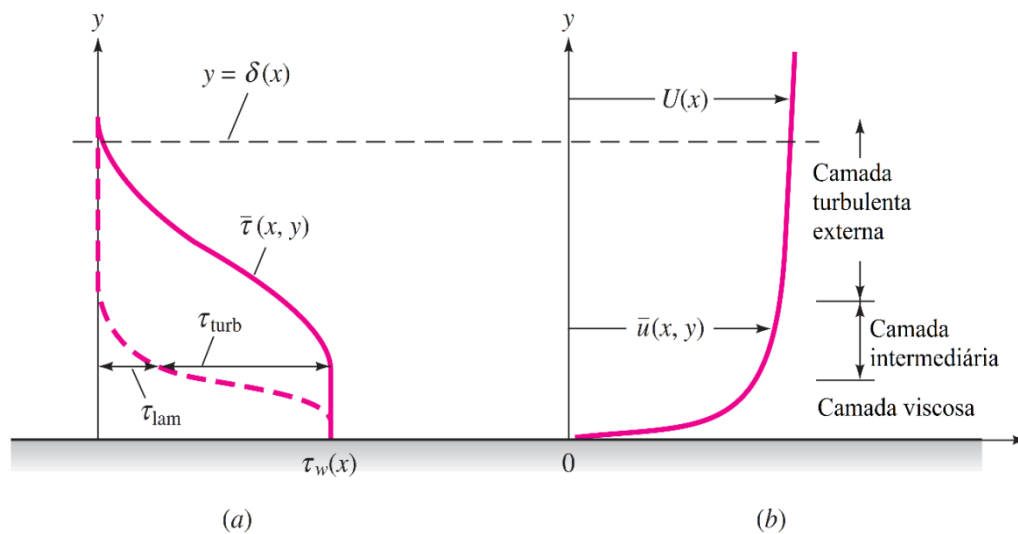


Figura 2.3: Distribuições típicas de (a) tensão e (b) velocidade em escoamentos turbulentos próximo a uma parede (τ_w é a tensão na parede e δ é a espessura da camada limite). Fonte: adaptado de White, 2009.

Infelizmente, no geral, os modelos de turbulência de primeira ordem falham em prever com acurácia a região viscosa mais próxima da parede (WILCOX, 2006). Isso se deve à presença de uma parede no escoamento, essa fronteira adiciona uma escala de comprimento importante ao escoamento turbulento onde os efeitos viscosos prevalecem. Contudo, em diversos casos, a tensão total pode ser considerada constante através da camada de parede, como

é exibido na Figura 2.3(a), e, dessa forma, uma estratégia de resolução, chamada de lei universal de parede para escoamentos turbulentos pode ser utilizada nessa região.

Em 1930, Prandtl deduziu que a velocidade na região viscosa seria independente da espessura da camada limite, ou seja, $U = f(\mu, \tau_w, \rho, y)$ (WHITE, 2009). Por análise dimensional, chega-se à lei da parede

$$U^+ = U/U^* = F(yU^*/\nu) \quad (2.12)$$

onde U^* é chamada de velocidade de fricção e é definida por

$$U^* = (\tau_w/\rho)^{1/2} \quad (2.13)$$

Em 1933, Kármán deduziu que a velocidade na camada externa é independente da viscosidade molecular, mas que a diferença entre essa velocidade e a velocidade na corrente principal do escoamento deve ser dependente da espessura da camada limite, $U_{cp} - U = g(\delta, \tau_w, \rho, y)$ (WHITE, 2009). Por análise dimensional, tem-se a lei de velocidade para a camada externa

$$(U_{cp} - U)/U^* = G(y/\delta) \quad (2.14)$$

A camada intermediária deve fornecer uma transição suave entre as outras duas. Em 1937, C. B. Millikan mostrou que isso só é verdade para a transição de velocidade governada por

$$U/U^* = 1/\kappa \ln(yU^*/\nu) + B \quad (2.15)$$

onde κ e B são constantes empíricas (WHITE, 2009).

Dessa forma, um perfil de velocidade para a camada limite pode ser traçado, como na Figura 2.4, onde o eixo x está em escala logarítmica e $y^+ = yU^*/\nu$. A região viscosa e a região intermediária também são chamadas de região linear e região logarítmica, respectivamente.

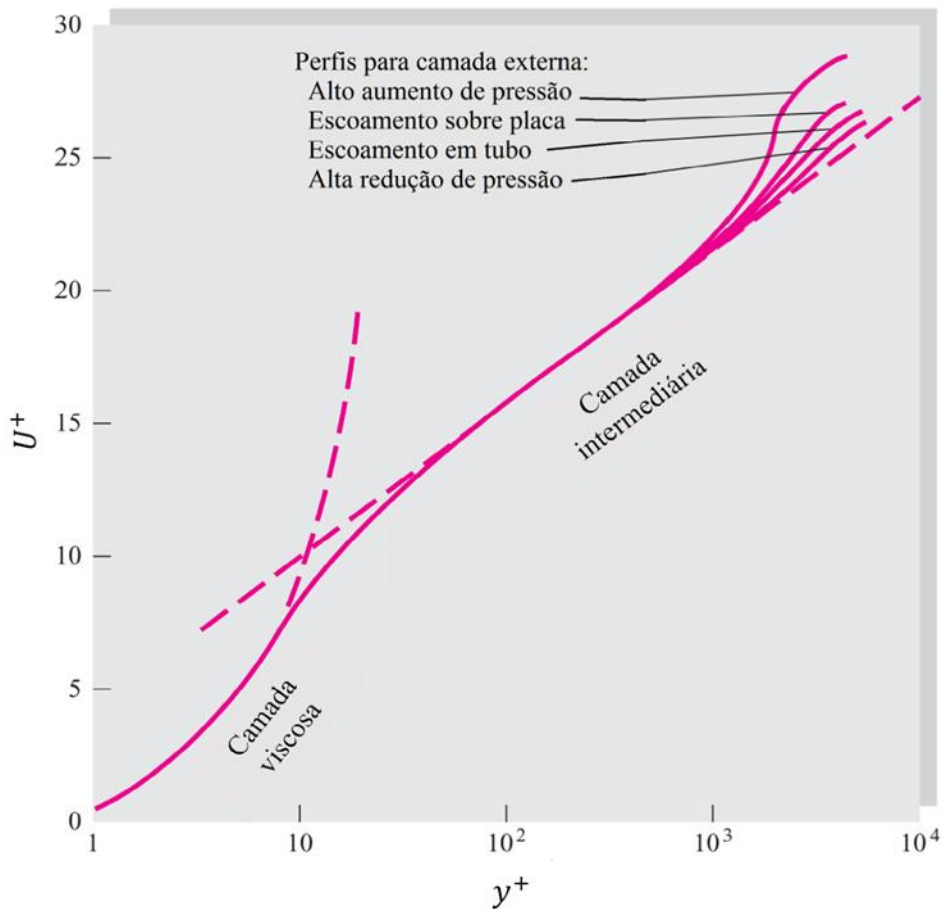


Figura 2.4: Verificação experimental da lei da parede para o perfil de velocidade adimensional em escoamentos turbulentos próximo à parede. Linhas tracejadas são derivadas das equações das leis da camada limite e linha contínua se refere aos dados experimentais. Fonte: adaptado de White, 2009.

Em diversos casos, devido à pequena espessura da camada viscosa, a camada limite é aproximada por completo pela equação da região logarítmica (WHITE, 2009). Todavia, salienta-se que para alguns casos mais complexos, como escoamentos com zonas de recirculação, não existe mais uma lei universal e essa estratégia se torna insatisfatória (SCHIESTEL, 2006).

Conforme Schiestel (2006), existem três estratégias para a resolução da região de parede: uso de funções de parede, modelos de turbulência multi-zonais e modelos de turbulência para baixo número de Reynolds. Devido aos elevados gradientes nessa região, a utilização de funções de parede é frequente para geometrias maiores e/ou mais complexas, já que um grande número de nós na malha computacional seria necessário para resolver essa região.

Dentre as funções de parede mais comuns, se destacam as que são conhecidas como funções de parede para alto número de Reynolds (alto-Re) e funções de parede para baixo número de Reynolds (baixo-Re). As funções de parede para alto-Re normalmente integram a região viscosa e intermediária utilizando a equação logarítmica e requerem que o primeiro nó da malha esteja localizado na região logarítmica; enquanto que, as para baixo-Re utilizam a equação linear para a região viscosa e a equação logarítmica para a região intermediária e a resolução da camada limite alterna o uso de cada equação baseado em valores de y^+ ou suas variações.

Outras alternativas para a resolução da região de parede em escoamentos turbulentos é o uso de modelos de turbulência para baixo número de Reynolds ou modelos multi-zonais. Os modelos de turbulência para baixo Reynolds resolvem o escoamento por completo utilizando a mesma estratégia e, por isso, acabam tendo menor acurácia em regiões do escoamento mais turbulentas. Já, os modelos multi-zonais resolvem a região viscosa com um modelo adequado para baixo Reynolds e o restante com um modelo para alto Reynolds. Para exemplificar os modelos de turbulência multi-zonais, o modelo $k-\omega$ SST será brevemente descrito.

O modelo $k-\omega$ SST utiliza o modelo $k-\omega$ para as regiões próximas a paredes e o modelo $k-\epsilon$ para o restante do escoamento, empregando uma função, F_1 , para o acoplamento entre esses dois modelos. O modelo é descrito pelas Equações 2.16-2.18:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j k}{\partial x_j} = \tilde{P}_k - \beta^* \rho \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial \rho \omega}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j \omega}{\partial x_j} = \frac{\gamma P_k}{\nu_t} - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F_1) \rho \frac{\sigma_{\omega 2}}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (2.17)$$

$$\mu_t = \rho \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega; S \cdot F_2)} \quad (2.18)$$

onde

$$P_k = \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}; \quad \tilde{P}_k = \min(P_k; c_1 \epsilon) \quad (2.19)$$

$$\tau_{ij} = \mu_t \left(2S_{ij} - \frac{2}{3} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}; \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.20)$$

e β^* , β , γ , σ_k , σ_ω , $\sigma_{\omega 2}$, a_1 e c_1 são constantes φ do modelo, com $\varphi = F_1\varphi_1 + (1 - F_1)\varphi_2$, onde φ_1 e φ_2 são os coeficientes dos modelos k - ω e k - ϵ , respectivamente, e

$$F_1 = \tanh(\text{arg}_1^4); \text{arg}_1 = \min\left(\max\left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^*\omega y}; \frac{500\nu}{y^2\omega}\right); \frac{4\rho\sigma_{\omega 2}k}{CD_{k\omega}y^2}\right) \quad (2.21)$$

$$CD_{k\omega} = \max\left(2\rho\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}; 1,0e^{-10}\right) \quad (2.22)$$

$$F_2 = \tanh(\text{arg}_2^2); \text{arg}_2 = \max\left(2 \frac{\sqrt{k}}{\beta^*\omega y}; \frac{500\nu}{y^2\omega}\right) \quad (2.23)$$

Além disso, modelos baseados em ω podem utilizar um tratamento especial próximo à região de parede, devido à solução analítica existente para ω para as regiões viscosa e intermediária, evitando o alto custo computacional de se resolver essa região. Esse tratamento especial é chamado de tratamento automático de parede e realiza a transição suave entre as regiões mencionadas (MENTER; KUNTZ; LANGTRY, 2003), sendo dado por:

$$\omega_1(y^+) = \left(\omega_{vis}^2(y^+) + \omega_{log}^2(y^+)\right)^{0,5} \quad (2.24)$$

onde ω_{vis} , ω_{log} se referem às soluções analíticas de ω para as regiões viscosa e logarítmica, respectivamente, com $\omega_{vis} = \frac{6\nu}{0,075y^2}$; $\omega_{log} = \frac{U^*}{0,3\kappa y}$.

2.3 CFD aplicado a biorreatores com membranas

Conforme mencionado no Capítulo 1, para se obter informações da hidrodinâmica de BRMs através de CFD, diversos fenômenos devem ser modelados. Além disso, a escolha da estratégia de modelagem para as equações governantes é crucial, já que vai determinar o tipo de escoamento multifásico a ser resolvido. A estratégia Euler-Lagrange (EL) trata o fluido como uma fase contínua e resolve o percurso de cada partícula ou bolha. Contudo, atualmente EL é apenas aplicada para baixas frações de partículas, devido ao seu alto custo computacional. A estratégia Euler-Euler (EE) trata todas as fases como contínuas e inter-penetrantes e pode ser subdividida em: modelo Euleriano, modelo de mistura e método do volume de fluido (VOF, *volume of fluid*). O VOF é aplicado para escoamentos com partículas maiores que o tamanho

de um volume da malha; é um modelo que resolve a interface entre fases e apenas um conjunto de equações governantes é resolvido (somente para a fase líquida); a solução para a fase dispersa é obtida através da relação de fração volumétrica. Além disso, a interpenetração entre fases é restrita à região próxima à interface. O modelo Euleriano resolve um conjunto de equações governantes para cada fase e é aplicável para partículas com tamanho menor que a dimensão de um volume da malha, definindo previamente o tamanho das partículas. O modelo de mistura é uma simplificação do Euleriano, no qual apenas equações governantes da mistura são resolvidas, no lugar de equações para cada fase (NAESSENS *et al.*, 2012).

A modelagem VOF é normalmente empregada para bolhas de grande diâmetro e fluxo pistonado, útil ao se analisar os efeitos cisalhantes de uma ou duas grandes bolhas na superfície da membrana. Contudo, o escoamento de gás em BRMs é normalmente disperso e, devido ao maior detalhamento fornecido, a estratégia Euleriana é mais adequada para representar o sistema como um todo e é amplamente empregada (AMINI *et al.*, 2015; BRANNOCK; WANG; LESLIE, 2010; KANG *et al.*, 2008; LIU *et al.*, 2015, 2016; WANG *et al.*, 2010; YAN *et al.*, 2015, 2016).

Outros aspectos relevantes na modelagem de BRMs incluem: efeitos do tipo de módulo de membrana (fibra-oca ou placa-e-quadro); inclusão ou não do movimento das fibras; a estratégia utilizada para modelar o escoamento do lodo; e o efeito da geometria dos aeradores. Estes aspectos são discutidos nos parágrafos seguintes.

Biorreatores com membrana operando com módulos de membranas do tipo fibra-oca têm representado um desafio particular para simulações CFD, já que necessitariam de uma enorme capacidade computacional para resolver o sistema de equações para cada fibra individualmente. Como alternativa, é comum modelar o feixe, ou conjunto, de fibras como um meio poroso. Correlações empíricas para a queda de pressão ou calibração experimental para se obter parâmetros de resistência ao fluxo têm sido bastante utilizados (BUETEHORN *et al.*, 2011; KANG *et al.*, 2008; LIU *et al.*, 2015; WANG *et al.*, 2010). Os dados obtidos por Wang *et al.* (2010) foram mais exatos quando o modelo de meio poroso foi utilizado, comparado com os resultados das simulações sem a sua utilização; além disso, o uso de calibrações experimentais resultou em melhor predição do que usando correlações empíricas existentes. Buetehorn *et al.* (2011) estudou o impacto do arranjo irregular das fibras no escoamento de um BRM; eles utilizaram tomografia computadorizada para escanear um módulo de fibras-ocas e

gerar fatores de fricção espacialmente distribuídos para a calibração do seu modelo e verificaram haver alta dependência da velocidade transversal e da viscosidade turbulenta em relação ao arranjo local das fibras.

Levar em consideração os efeitos do movimento das fibras de membrana é recomendado para melhorar a exatidão da solução (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012). Zamani *et al.* (2013) modelaram a superfície das fibras de membrana como paredes com vibração longitudinal e consideraram o escoamento laminar. Os autores verificaram que a taxa cisalhante nas superfícies das membranas aumentou aproximadamente 67% quando a distância entre as fibras mudou de 0,1 para 1 mm. Por esse motivo, eles recomendaram a utilização de feixes de fibras com densidade de empacotamento não muito elevada para se obter filtrações com alto cisalhamento nas membranas. Por outro lado, para escoamento turbulento, Liu *et al.* (2016) descobriram que a redução da separação entre as fibras de 1 para 0,2 mm aumentou o cisalhamento nas superfícies em 360% para o seu sistema. Eles modelaram o movimento lateral de uma membrana do tipo fibra-oca e mostraram que o perfil de tensão cisalhante é dinâmico e variável espacialmente. Além disso, aumentar a flexibilidade das fibras (reduzindo o módulo de Young de 76 para 20 MPa), diminuir a fixação nas extremidades das fibras (com um aumento da soltura de 0,5 para 1%) e aumentar o diâmetro das fibras (de 1 para 1,3 mm) resultou em tensões cisalhantes 9,7; 50,4; e 67% maiores na superfície das membranas, respectivamente.

Outra característica importante presente em sistemas BRM é o escoamento do lodo. O lodo ativado tem duas fases, é composto por partículas sólidas e por uma solução líquida; contudo, pode ser modelado como uma fase contínua já que os efeitos da aeração superam o efeito do assentamento das partículas (Brannock; Wang; Leslie, 2010; Liu *et al.*, 2015). Adicionalmente, a literatura tem resultados contraditórios sobre qual modelo reológico deve ser usado para representar o comportamento não-newtoniano do lodo (Naessens *et al.*, 2012). Brannock; Wang; Leslie (2010) empregaram o modelo Herschel–Buckley com a adaptação de Papanastasiou e descobriram que a reologia do lodo tinha um efeito mínimo na hidrodinâmica do BRM; eles atribuíram isso à alta razão de viscosidade turbulenta presente no sistema. Liu *et al.* (2015) mostrou que a concentração de sólidos suspensos (C_{ss}) teve um grande impacto na reologia do lodo e na hidrodinâmica do BRM e que o modelo Ostwald de Waele fornecia melhor concordância com os dados reológicos do lodo. Seus resultados mostraram um C_{ss} ótimo para um máximo de tensão cisalhante na superfície das membranas causado por aumento na viscosidade; acima dessa concentração máxima, contudo, o efeito da viscosidade na diminuição

da velocidade do líquido foi maior, o que resultou numa diminuição da tensão cisalhante. A adição de coagulantes também teve um efeito positivo na reologia do lodo e subsequente impacto na hidrodinâmica do BRM e no cisalhamento na membrana. Todavia, o *fouling* exibiu uma distribuição heterogênea sobre a superfície das membranas em todos os cenários simulados.

Devido à importância da hidrodinâmica em sistemas BRM, os efeitos das características geométricas também precisam ser estudados adequadamente. Recentemente, alguns pesquisadores têm utilizado CFD para obter dados úteis para analisar esses efeitos. Em um sistema com membrana do tipo placa-e-quadro, Wei *et al.* (2013) conseguiram otimizar o espaçamento entre as placas de membrana em relação ao cisalhamento nas mesmas, enquanto que Yan *et al.* (2015) encontraram o melhor tamanho e localização para defletores em relação ao cisalhamento. Além disso, comparado com a configuração sem defletores, o sistema apresentou um aumento de 10-30% na tensão cisalhante com o uso dos mesmos. Em um BRM de escala industrial, Amini *et al.* (2015) estudaram a configuração e a localização dos aeradores e concluíram que a localização dos aeradores no fundo do BRM fornecia maior velocidade de circulação, retenção de ar e tensão cisalhante, comparado com a localização dos aeradores na entrada do módulo de membranas. Comparando sistemas com e sem defletores, Yan *et al.* (2016) obtiveram valores de cisalhamento nas membranas 74% maiores com o uso de defletor, resultante da distribuição de bolhas mais homogênea.

Para facilitar a comparação entre as estratégias de modelagem usadas nos trabalhos citados nos parágrafos anteriores, a Tabela 2.1 foi elaborada. A Tabela 2.1 apresenta os trabalhos da literatura em ordem cronológica e, devido ao grande número de características importantes à modelagem de BRM, foi dividida em duas partes (Parte I e Parte II).

Tabela 2.1: Aspectos da modelagem e características dos sistemas utilizados na literatura sobre simulações fluidodinâmicas de sistemas BRM em ordem cronológica - Parte I.

	Tipo de módulo de membrana	Altura do sistema (m)	Padrão de escoamento do gás	Fases	Geometria da entrada de ar simulada	Estratégia de modelagem multifásica	Transferência de momento entre fases (apenas para Eu)
(KANG <i>et al.</i> , 2008)	Fibra-oca	NI	Disperso	3	NI	Eu	NI
(WANG <i>et al.</i> , 2010)	Fibra-oca	0,2	Disperso	2 (gás-líquido)	NI	Eu	NI
(BRANNOCK; WANG; LESLIE, 2010)	Fibra-oca	0,2	Disperso	2 (gás-líquido)	NI	Eu	Coefficiente de arrasto de Morsi–Alexander
(BUETEHORN <i>et al.</i> , 2011)	Fibra-oca	0,75	Pistonado (única bolha)	2 (gás-líquido)	Orifício na base do sistema	VOF	NA
(RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012)	Fibra-oca	2,19	Disperso	2 (gás-líquido)	Metade superior da superfície de cilindros	Mistura	NA
(WEI <i>et al.</i> , 2013)	Placa-e-quadro	0,6	Pistonado (única bolha)	2 (gás-líquido)	Superfície da base do sistema	VOF	NA
(ZAMANI; LAW; FANE, 2013)	Fibra-oca	0,4	NI	NI	NI	NI	NI
(AMINI <i>et al.</i> , 2015)	Placa-e-quadro	1,65	Disperso	3	Superfície de cilindros	Eu	NI
(LIU <i>et al.</i> , 2015)	Fibra-oca	1	Disperso	2 (gás-líquido)	Superfície de cilindros	Eu	NI
(YAN <i>et al.</i> , 2015)	Placa-e-quadro	0,45	Disperso	2 (gás-líquido)	Orifícios de um tubo	Eu	NI
(LIU <i>et al.</i> , 2016)	Fibra-oca	0,4	Disperso	2 (gás-líquido)	Superfície da base do sistema	Eu	NI
(YAN <i>et al.</i> , 2016)	Placa-e-quadro	0,45	Disperso	2 (gás-líquido)	Superfície retangular	Eu	NI

NI: não informado; NA: não aplicável; RNG: *Re-Normalization Group*; Eu: Euleriano; VOF: volume of fluid (volume de fluido); PBE: population balance equation (equação de balanço populacional); C_{ss}: concentração de sólidos suspensos.

Tabela 2.1: Aspectos da modelagem e características dos sistemas utilizados na literatura sobre simulações fluidodinâmicas de sistemas BRM em ordem cronológica – Parte II.

	Modelos de turbulência	Bolhas	Filtração	Membranas	Viscosidade do líquido	Movimento das fibras
(KANG <i>et al.</i> , 2008)	<i>Realizable k-ϵ mixture</i>	Uniformes, esféricas e de tamanho constante	Sumidouro com fluxo variável com altura	Módulo modelado como meio poroso	Newtoniano com viscosidade dependente da C_{ss}	-
(WANG <i>et al.</i> , 2010)	<i>Standard k-ϵ</i>	Uniformes, esféricas e de tamanho constante	NI	Módulo modelado como meio poroso com resistência ao fluxo dependente da C_{ss}	Newtoniano	-
(BRANNOCK; WANG; LESLIE, 2010)	<i>Standard k-ϵ</i>	Uniformes, esféricas e de tamanho constante	Sumidouro	NI	Relação de Herschel–Buckley com adaptação de Papanastasiou	-
(BUETEHORN <i>et al.</i> , 2011)	RNG <i>k-ϵ</i>	Bolha de Taylor – com coalescência e quebra	NI	Módulo modelado como meio poroso heterogêneo	Newtoniano com viscosidade dependente da C_{ss}	-
(RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012)	RNG <i>k-ϵ</i>	Uniformes, esféricas e de tamanho constante	Sem filtração	Módulo modelado como bloco sólido	Newtoniano	-
(WEI <i>et al.</i> , 2013)	<i>Realizable k-ϵ</i>	Resolvidas – inicializadas como cilindros	NI	Placas sólidas	NI	NA
(ZAMANI; LAW; FANE, 2013)	Laminar	NI	NI	Fibras sólidas	NI	Velocidade longitudinal periódica (vibração)
(AMINI <i>et al.</i> , 2015)	<i>Standard k-ϵ</i>	Modeladas com PBE	NI	Placas sólidas	Newtoniano com viscosidade dependente da C_{ss}	NA
(LIU <i>et al.</i> , 2015)	RNG <i>k-ϵ</i> (líquido), <i>Zero equation</i> (gás)	Uniformes, esféricas e de tamanho constante	NI	Módulo modelado como meio poroso com resistência ao fluxo dependente da viscosidade	Ostwald-de Waele	-
(YAN <i>et al.</i> , 2015)	<i>Standard k-ϵ</i>	Uniformes, esféricas e de tamanho constante	Sem filtração	Placas sólidas	Newtoniano	NA
(LIU <i>et al.</i> , 2016)	RNG <i>k-ϵ</i>	Uniformes, esféricas e de tamanho constante	Resolvida	Paredes das fibras modeladas como meio poroso	Newtoniano	Deslocamento sinusoidal
(YAN <i>et al.</i> , 2016)	<i>Standard k-ϵ</i> (líquido), <i>Zero equation</i> (gás)	Uniformes, esféricas e de tamanho constante	Sem filtração	Placas sólidas	Newtoniano	NA

NI: não informado; NA: não aplicável; RNG: *Re-Normalization Group*; Eu: Euleriano; VOF: volume of fluid (volume de fluido); PBE: population balance equation (equação de balanço populacional); C_{ss} : concentração de sólidos suspensos.

A partir dos dados apresentados na Tabela 2.1, é importante observar que simplificações frequentemente precisam estar presentes em outros pontos, quando fenômenos mais complexos são modelados, para que se obtenha um esforço computacional razoável. Por exemplo, modelos para o movimento de fibras foram apenas empregados para escoamento laminar (ZAMANI *et al.*, 2013), sistemas de menores escalas (ZAMANI *et al.*, 2013; LIU *et al.*, 2016), geometrias simplificadas para simular a entrada de ar, modelagem simplificada para o comportamento das bolhas e escoamento newtoniano (LIU *et al.*, 2016).

Apesar de existirem algumas tentativas em modelar a reologia do lodo, na maioria dos problemas o lodo ainda é modelado como um fluido newtoniano e a filtração através das membranas é normalmente desconsiderada devido ao baixo fluxo permeado, quando esse é comparado com os fluxos verticais no sistema, decorrentes da aeração. Além disso, nos artigos mencionados, o escoamento disperso de bolhas foi considerado com distribuição uniforme e tamanho e formato constantes das bolhas, exceto no trabalho desenvolvido por Amini *et al.* (2015), que empregaram equação de balanço populacional (PBE) para descrever estatisticamente os fenômenos de coalescência e de divisão durante as colisões das bolhas.

Capítulo 3

Metodologia

Neste capítulo será detalhado o sistema de biorreator com membranas estudado, juntamente com as medições experimentais utilizadas para validação das simulações, as condições de operação e a geração de malha computacional. Os modelos e as condições de contorno utilizadas serão descritos, assim como as simplificações realizadas. Os parâmetros de simulação, assim como os esquemas numéricos, serão exibidos. Além disso, será comentado como foi realizado o tratamento dos dados após as simulações.

3.1 Sistema experimental e geração de malha

A validação experimental é um dos pontos mais importantes de uma simulação. Devido à dificuldade em coletar dados experimentais, mencionada anteriormente (Seção 1.1), um sistema de BRM apresentado na literatura foi escolhido como base de estudo. Esse sistema foi descrito e estudado experimentalmente por Fulton *et al.* (2011) e posteriormente foi simulado e teve suas medições experimentais rerepresentadas ou refeitas por Ratkovich; Hunze; Nopens (2012). A escolha desse BRM se baseou em alguns fatores, tais como: a escala do sistema, sendo mais representativo para aplicações industriais de engenharia; a disponibilidade de detalhes da geometria e de dados experimentais; a coleta de dados, que foi realizada durante

operação simplificada do BRM, o que auxilia na redução de esforço computacional necessário para as simulações.

As medições experimentais no BRM utilizado (FULTON *et al.*, 2011 e RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012) foram realizadas com uso de água no lugar de lodo ativado e na ausência de filtração. O sistema foi estudado nesse trabalho para duas vazões de aeração, 5 e 15 m³/h, mencionadas no restante do texto como vazões baixa e alta, respectivamente.

O BRM é composto por um tanque retangular, conforme esquema da Figura 3.1. Em seu interior estão localizados três módulos de membrana do tipo fibra-oca dispostos como “cortinas” (são placas planas compostas por um feixe plano de fibras-ocas dispostas lado a lado). Esses módulos possuem dois suportes cada, posicionados em suas partes superior e inferior. Diretamente abaixo do primeiro e do último módulo, e próximo à base do BRM, se encontram dois cilindros responsáveis pela aeração. Na Figura 3.2, encontram-se as vistas frontal, lateral e superior do esquema exibido na Figura 3.1.

Devido à simetria (linhas pontilhadas indicadas na Figura 3.2), os autores analisaram apenas um quarto do BRM. Eles mediram a tensão cisalhante sobre os módulos de membrana e a velocidade do gás em regiões próximas aos módulos, nos pontos indicados nas Figura 3.3 e Figura 3.4, respectivamente.

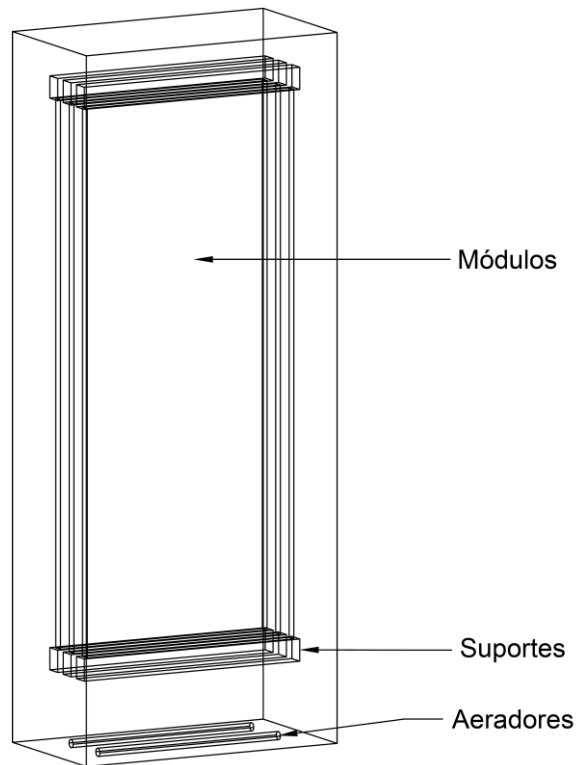


Figura 3.1: Esquema do BRM estudado por Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012).

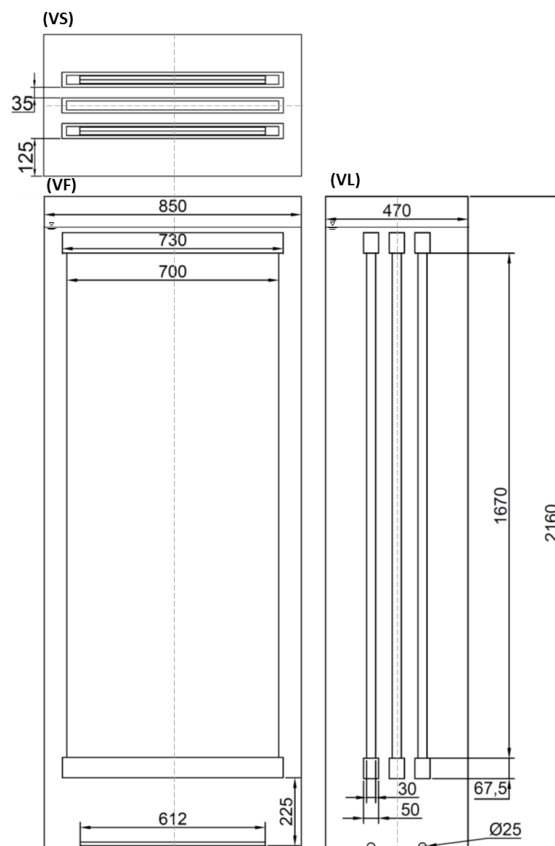


Figura 3.2: Vistas frontal (VF), lateral (VL) e superior (VS) do BRM estudado por Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012). Cotas em milímetros. Linhas pontilhadas indicam os planos de simetria.

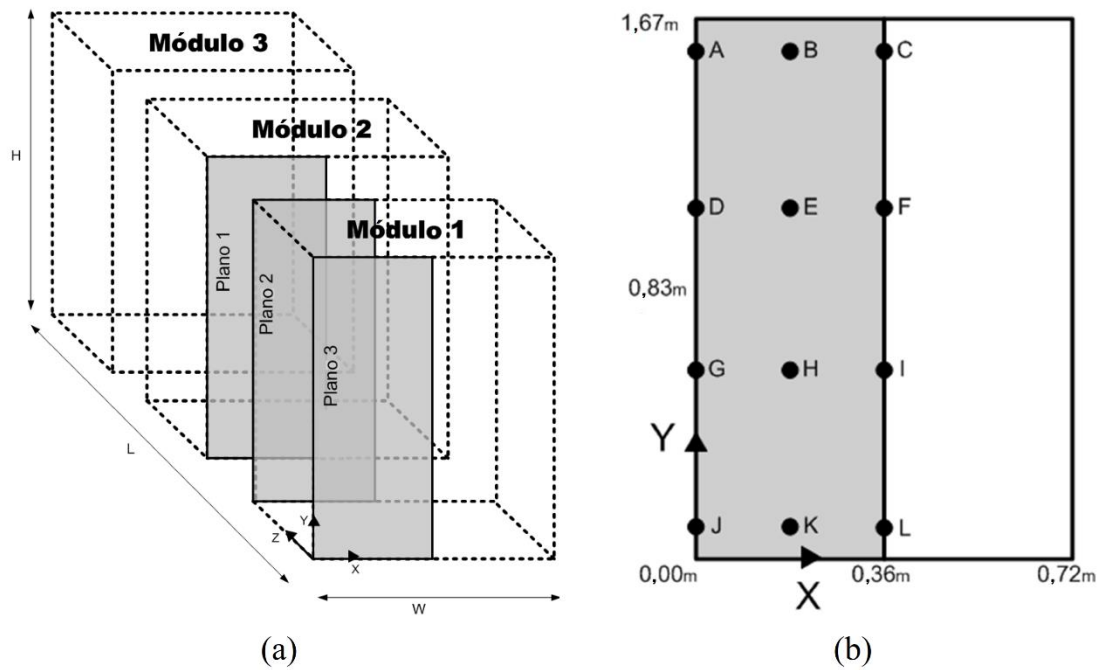


Figura 3.3: Localização das medições de tensão cisalhante nos módulos de membrana. (a) vista perspectiva dos planos de medição, (b) vista frontal dos locais de medição de tensão em cada plano (linhas ABC, DEF, GHI, e JKL em 'y' 1,57, 1,08, 0,59, e 0,10 m, respectivamente, e colunas ADGJ, BEHK e CFIL em 'x' 0, 0,18 e 0,36 m, respectivamente). Obs.: esquema fora de escala. Fonte: adaptado de Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012).

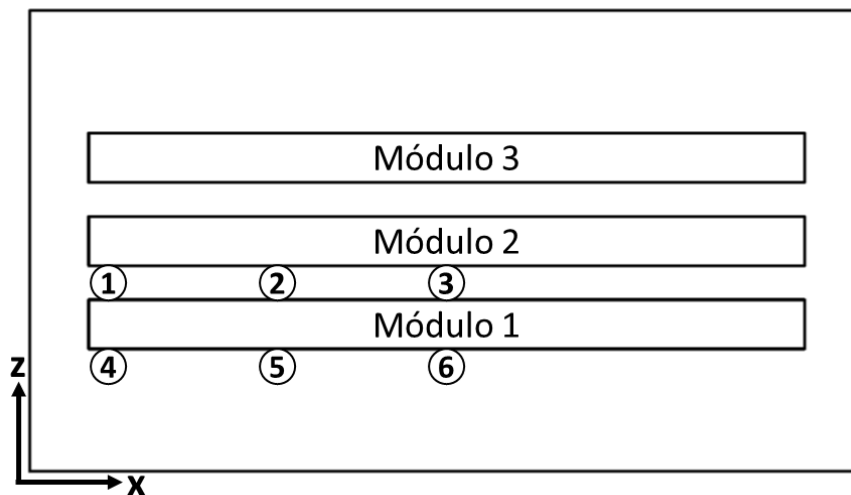


Figura 3.4: Vista superior do BRM estudado por Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012) com a localização das medições de velocidade das bolhas em 'y' 1,82 m (pontos 1, 2, 3, e 4, 5, 6 em 'x' 0, 0,18 e 0,36 m, respectivamente).

Nos estudos realizados por Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012), as medições experimentais foram feitas através do método eletroquímico. Os valores de tensão foram estimados através dos valores medidos de corrente em cada ponto de medição. Os eletrodos utilizados foram envoltos em fibras de Teflon (Figura 3.5 (a) e (b)) e posicionados nos módulos de membrana. A velocidade do gás em cada ponto de medição foi quantificada através de dois cátodos alinhados verticalmente (Figura 3.5 (c)). No momento em que uma bolha entra em contato com um cátodo, a corrente elétrica é interrompida. A velocidade de cada bolha investigada foi calculada através do tempo necessário para a bolha percorrer a distância entre cátodos.

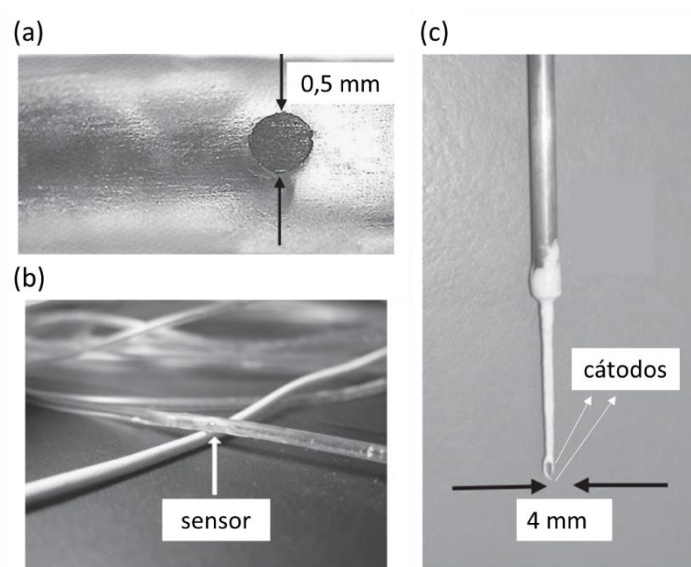


Figura 3.5: Sensores utilizados nas medições experimentais. (a) Sensor para medição de tensão e (b) fibra na qual se encontra recoberto. (c) Sensor para medição de velocidade. Fonte: adaptado de Fulton *et al.* (2011).

Para o estudo de independência de malha, a discretização do domínio (ICEM, Ansys) gerou malhas com três refinamentos distintos na região do primeiro nó, próximo à superfície das membranas. Na Tabela 3.1 são exibidos, para cada malha, a posição do primeiro nó, em relação à superfície do módulo de membranas mais próximo, e o intervalo de valores de y^+ obtidos neste ponto, o número total de volumes da malha e a razão de aspecto máxima atingida. Os volumes gerados são em sua maioria hexaédricos.

Tabela 3.1: Características das malhas utilizadas para o estudo de independência de malha.

<i>Malha</i>	<i>Primeiro nó (mm)</i>	y^+ (<i>1º nó</i>)	<i>Nº de volumes</i>	<i>Razão de Aspecto máx.</i>
M1	2,500	30~57	126503	17,132
M2	0,770	10~18	218141	17,132
M3	0,385	4~8	612509	17,136

3.2 Modelos

Na modelagem do sistema, as equações de conservação de energia foram desconsideradas. Assim, as equações governantes utilizadas foram as de conservação de massa e de quantidade de movimento (Equação 3.1 e Equação 3.2, respectivamente), escritas em termos da descrição Euleriana para representar o escoamento do sistema gás-líquido:

$$\frac{\partial \alpha_\varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (U_\varphi \alpha_\varphi) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \alpha_\varphi U_\varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_\varphi U_\varphi U_\varphi) + \nabla \cdot (\alpha_\varphi \bar{R}_\varphi^{ef}) = -\frac{\alpha_\varphi}{\rho_\varphi} \nabla \bar{p} + \alpha_\varphi g + \frac{\bar{M}_\varphi}{\rho_\varphi} \quad (3.2)$$

onde o subscrito φ denota a fase, α é a fração volumétrica, \bar{R}_φ^{ef} são os tensores viscosos e turbulentos combinados e \bar{M}_φ é o termo de transferência de momento médio entre fases, requerido na formulação Euleriana. Essa transferência de momento consiste basicamente de forças relacionadas ao arrasto, à sustentação (ou *lift*), à massa virtual (força adicional devido ao fato de que as bolhas em aceleração necessitam deslocar líquido) e à dispersão turbulenta. Para a determinação das forças de arrasto foi empregado o modelo de Schiller-Naumann (TABIB; ROY; JOSHI, 2008), enquanto para as forças de massa virtual utilizou-se um coeficiente constante de 0,5.

Para o fechamento do sistema de equações RANS é necessária a escolha do modelo de turbulência a ser utilizado. Neste estudo será feita a comparação entre os modelos de turbulência $k-\epsilon$ e $k-\omega$ SST, cujas equações são apresentadas a seguir para escoamento incompressível de uma única fase, somente para facilitar a leitura.

- Modelo k - ϵ :

$$\frac{D\epsilon}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_k} \right] + \frac{C_1 \mu_t \epsilon}{\rho k} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_k} - C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \quad (3.3)$$

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_k} \right] + \frac{\mu_t \epsilon}{\rho k} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_k} - \epsilon \quad (3.4)$$

$$\mu_t = C_\mu \rho k^{1/2} l \quad (3.5)$$

- Modelo k - ω SST

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{\tilde{P}_k}{\rho} - \beta^* \omega k + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (3.6)$$

$$\frac{D\omega}{Dt} = \frac{\gamma P_k}{\mu_t} - \beta \omega^2 + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F_1) \frac{\sigma_{\omega 2}}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (3.7)$$

$$\mu_t = \rho \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega; S \cdot F_2)} \quad (3.8)$$

As funções correspondentes às variáveis adicionais que aparecem ($\tilde{P}_k, P_k, F_1, F_2, S$) nas Equações 3.6-3.8 foram descritas na Seção 2.2.2. As constantes dos modelos de turbulência utilizadas foram as estabelecidas como padrões no OpenFOAM (Tabela 3.2).

Tabela 3.2: Constantes dos modelos de turbulência

Constante	Valor	Constante	Valor
σ_ϵ	1,3	γ_1	5/9
σ_k	1,0	γ_2	0,44
C_1	1,44	σ_{k1}	0,85
C_2	1,92	σ_{k2}	1,0
C_μ	0,09	σ_ω	0,5
β^*	0,09	$\sigma_{\omega 2}$	0,856
β_1	0,075	a_1	0,31
β_2	0,0828	c_1	10,0

A resolução da turbulência próxima às paredes empregou funções de parede para reduzir o custo computacional. As simulações com o modelo $k-\epsilon$ foram estudadas para duas funções de parede, alto-Re (aR) e baixo-Re (bR). Para as simulações com $k-\omega$ SST, a função de parede automática foi utilizada. Essas funções foram descritas e discutidas na Seção 2.2.3.

Em BRMs, módulos de membrana do tipo fibra-oca são normalmente modelados como meios porosos (Seção 2.2.4). Contudo, modelos de meio poroso não estão implementados no OpenFOAM, pacote de CFD utilizado para a implementação do modelo, para a estratégia de modelagem Euleriana. Por esse motivo, e devido ao custo computacional, os módulos de membrana foram modelados como blocos sólidos, similar à modelagem de membranas planas, estratégia também empregada por Ratkovich; Hunze; Nopens (2012) que simularam o mesmo sistema. Outras simplificações realizadas são referentes aos orifícios dos aeradores e ao comportamento e tamanho das bolhas. No lugar de modelar cada orifício, considerou-se geração homogênea de gás em cada volume da malha dentro dos aeradores. As bolhas foram consideradas esféricas com diâmetro constante e igual ao tamanho médio de bolha de 3 mm, medido por Fulton *et al.* (2011). Colisões, divisões e coalescência de bolhas foram desconsideradas. Adicionalmente, a água foi modelada como um fluido Newtoniano incompressível e o ar como um gás ideal.

As condições de contorno relevantes estão sumarizadas na Tabela 3.3. Uma condição de contorno para remoção do gás foi estabelecida no topo do BRM e a condição de não-deslizamento foi aplicada para as velocidades de cada fase nas paredes e nas superfícies das membranas. Os valores de pressão nas paredes e nas superfícies das membranas foram estabelecidos como dependentes do fluxo (baseado no acoplamento velocidade-pressão) e foram calculados através da pressão hidrostática no restante do domínio. Para a taxa de aeração, uma fonte de geração de massa foi adicionada nos volumes dos aeradores.

Tabela 3.3: Condições de contorno para a fração volumétrica da fase gás (α_{gas}) e para as velocidades das fases (\underline{u}_φ).

Fronteira	α_{gas}	$\underline{u}_{gas}, \underline{u}_{liq}$
Atmosfera	$\underline{n} \cdot \nabla \alpha_{gas} = 0$	$\underline{n} \cdot \nabla (\underline{u}_\varphi) = \underline{0}$
Paredes e Membranas	$\underline{n} \cdot \nabla \alpha_{gas} = 0$	$\underline{u}_\varphi = \underline{0}$

\underline{n} é o vetor normal.

3.3 Simulações

As simulações numéricas foram realizadas através de um pacote de CFD de código aberto escrito em C++, o OpenFOAM (v. 3.0.x). A discretização temporal foi realizada pelo método de Euler e os demais termos (gradientes, divergentes e laplacianos) foram discretizados com o emprego do teorema de Gauss, transformando as integrais de volume em integrais de superfície, que foram subsequentemente aproximadas por somatórios sobre as faces das células. O *solver* multi-grid algébrico-geométrico (GAMG, *geometric algebraic multi-grid*), com o *smoother* Gauss-Seidel, foi usado para resolver o sistema de equações em termos da pressão. A tolerância das variáveis foi estabelecida em 10^{-5} e o algoritmo PIMPLE foi usado para resolver o acoplamento pressão-velocidade. O PIMPLE é uma combinação dos algoritmos PISO e SIMPLE (*pressure-implicit split-operator* e *semi-implicit method for pressure-linked equations*, respectivamente). O passo de tempo inicial foi de 0,00005 s e foi automaticamente ajustado durante as simulações de modo a maximizar seu valor sem ultrapassar um número de Courant máximo estabelecido em 1,0. As simulações foram executadas sobre 24 núcleos de processamento em paralelo através da decomposição do domínio (malha computacional).

3.4 Tratamento dos dados

Os testes estatísticos para comparação de médias utilizaram a distribuição *t* de *student* e o teste de Tukey (no caso de um grande número de pares de médias a serem comparados simultaneamente). As médias de cada variável e a diferença relativa entre médias de variáveis de um mesmo tipo foram calculadas de acordo com as Equações 3.9-3.11.

$$\bar{f} = \frac{\sum_i f_i}{t_f - t_0} \quad (3.9)$$

$$\bar{f}_{t_\infty} = \frac{\sum_j f_j}{t_\infty - t_0} \quad (3.10)$$

$$dif. rel. = \frac{|\bar{f}_1 - \bar{f}_2|}{\bar{f}_1} \times 100\% \quad (3.11)$$

onde $i = t_0, t_1 \dots t_f$, $j = t_0, t_1 \dots t_\infty$, t_0 e t_f são os tempos inicial e final, respectivamente, do período sobre o qual as médias são calculadas e t_∞ é o tempo final simulado do processo. De modo a estabelecer um período de tempo estatisticamente representativo sobre o qual as médias são calculadas, foi realizado a comparação estatística de médias \bar{f} (alterando t_0 e t_f) em relação à média \bar{f}_{t_∞} . Dessa forma, a média de cada conjunto de dados foi realizada sobre um período de, pelo menos, 180 s, contados após os primeiros 40 s (que incluem um período transiente inicial de aproximadamente 10 s).

Os desvios padrões foram calculados para quantificar as oscilações e são referentes à média temporal. A tensão cisalhante média global (ou total) foi calculada pela média da tensão cisalhante em todos os tempos (do período mencionado anteriormente) e em todos os pontos da superfície das membranas.

Capítulo 4

Resultados

O cisalhamento promovido pelas bolhas de ar na superfície das membranas auxilia na redução do fouling. Será mostrado que para prever essa tensão com acurácia, deve-se garantir que a turbulência seja modelada adequadamente e que o modelo seja escolhido corretamente. Primeiramente será comentado sobre a dinâmica do escoamento e as dificuldades geradas pela mesma e serão exibidos os testes de convergência de malha. Em seguida, será realizada a comparação das previsões obtidas nas simulações deste trabalho com valores medidos experimentalmente e preditos por simulações na literatura. Serão comparados os valores de velocidade do gás e tensão cisalhante em pontos específicos e também valores médios globais de tensão cisalhante, representativos da intensidade total da tensão exercida pela aeração sobre as membranas. Além disso, os dados preditos por cada modelo serão comparados entre si.

4.1 Dinâmica do escoamento e convergência das simulações

Altas flutuações nos valores locais de velocidade (e tensão cisalhante) ao longo do tempo estão comumente presentes em escoamentos com bolhas e são geradas pela dinâmica da fase dispersa (VAN DER LAN, 1985). Essas flutuações de grande amplitude tem frequência baixa quando comparadas com a frequência das flutuações da turbulência (BECKER; DE BIE;

SWEENEY, 1999). Na Figura 4.1, é exibido um exemplo de perfil da evolução temporal da velocidade do gás predita pelas simulações; os demais perfis de velocidade e os de tensão cisalhante possuem uma dinâmica semelhante. É possível verificar o período e a amplitude da dinâmica das bolhas, que são variáveis, estando qualitativamente de acordo com a literatura (VAN DER LAN, 1985).

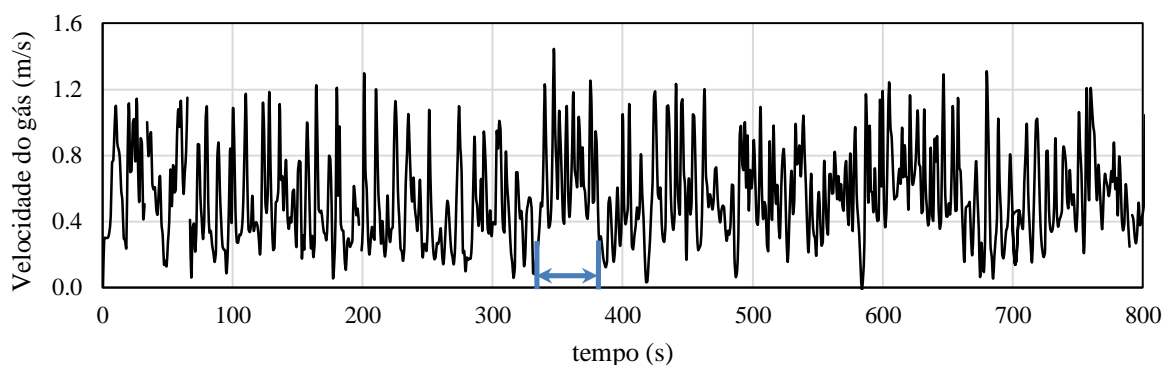


Figura 4.1: Evolução temporal da velocidade da fase gás predita pelo modelo $k-\omega$ SST com a malha M2 para baixa vazão de aeração no ponto 3 com um período relativo à dinâmica das bolhas indicado na figura.

Devido à alta variabilidade das oscilações presentes em escoamentos multifásicos, deve-se atentar para a escolha de um tempo suficientemente longo sobre o qual as médias das variáveis são calculadas (MCCLURE *et al.*, 2014). Outro aspecto importante é relativo a geometrias complexas e/ou de grandes dimensões, onde a dinâmica local do escoamento pode ser extremamente lenta em alguns pontos (contendo oscilações com períodos mais longos). Esses fatores levaram à utilização de 24 processadores em paralelo para as simulações e, ainda assim, o tempo de simulação necessário para convergência foi consideravelmente longo, sendo que a relação entre horas de simulação para cada segundo de escoamento variou de, aproximadamente, 0,5 a 2,5.

Na Figura 4.2, seis perfis preditos por simulações para a evolução temporal da velocidade do gás são exibidos, dos Pontos 1 ao 6 (descritos na Figura 3.4). Percebe-se mais claramente a estabilização da dinâmica oscilatória das bolhas a partir de 400 s para a maioria dos pontos. Os Pontos 3, 5 e 6; contudo, apresentam padrões de oscilações aproximadamente constantes do início ao fim do período exibido. Destes, apenas os Pontos 3 e 6 exibem médias iguais (com 95% de confiança), contadas a partir de 40 s para períodos de aproximadamente 180 s, quando comparadas com a média calculada entre 40 s e o tempo final. Portanto, devido ao alto custo computacional (não foi possível rodar todas as simulações durante mais de 400 s),

apenas os pontos (dentre os detalhados nas Figura 3.3 e Figura 3.4) que foram considerados convergidos até 220 s foram subsequentemente analisados.

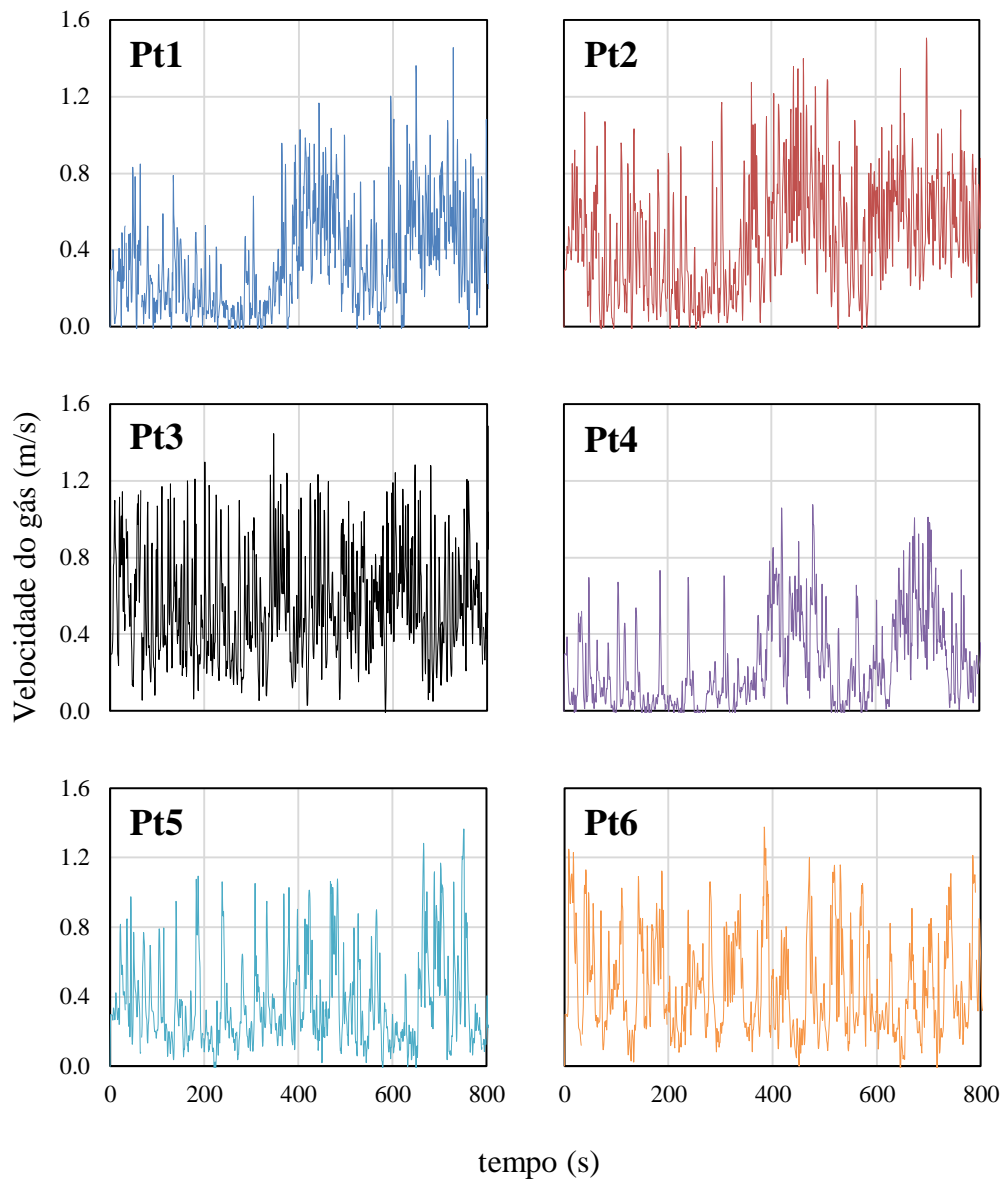


Figura 4.2: Evolução temporal da velocidade da fase gás predita pelo modelo $k-\omega$ SST com a malha M2 para baixa vazão de aeração nos Pontos (Pt) 1 a 6, representados na Figura 3.4.

Os resultados apresentados na Figura 4.2 indicam que uma comparação mais definitiva das predições obtidas requereria a coleta experimental de dados também durante o período transiente desse sistema. Contudo, Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012), assim como todos os outros artigos encontrados na literatura (como AMINI *et al.*, 2015; BRANNOCK; WANG; LESLIE, 2010; KANG *et al.*, 2008; LIU *et al.*, 2015; WANG *et al.*, 2010; YAN *et al.*, 2015, 2016), não detalharam suficientemente a dinâmica do sistema. Raramente são mencionadas características das oscilações presentes no sistema ou testes

estatísticos para verificação da convergência das variáveis das medições experimentais e das predições das simulações. Dessa forma, não foi possível realizar uma comparação destes perfis temporais.

Outro aspecto a se destacar é a acurácia dos valores médios reportados nos trabalhos da literatura. Por exemplo, Fulton *et al.* (2011) e Ratkovich; Hunze; Nopens (2012) mencionaram a coleta de dados experimentais durante 45 s para cada ponto e um tempo ainda menor para a coleta de dados das simulações. No entanto, como observado na Figura 4.2, apesar dos valores das variáveis de interesse iniciarem um estado pseudo-estacionário rapidamente, a dinâmica das oscilações presentes no escoamento com bolhas é muito variável, e tempos mais longos do que os usados na literatura foram requeridos aqui para cálculo de médias estatisticamente representativas, conforme comentado anteriormente.

4.2 Convergência de malha

Devido às altas flutuações exibidas pelos valores pontuais das variáveis e ao esforço computacional requerido para que convirjam, esses valores não foram utilizados como critério de parada principal para o refinamento de malha. O critério de parada estabelecido para o refinamento de malha foi a não ocorrência de variação estatisticamente significativa na tensão cisalhante média global com posterior refinamento. A Figura 4.3 exemplifica como evolui no tempo a tensão cisalhante global nas simulações deste trabalho. Percebe-se mais claramente a convergência dessa variável, quando comparada com as variáveis locais (como os exemplos exibidos da velocidade do gás), devido aos menores desvios em relação ao valor médio. Na Figura 4.3(b), observa-se que a tensão assume um estado pseudo-estacionário a partir de 10 s, aproximadamente.

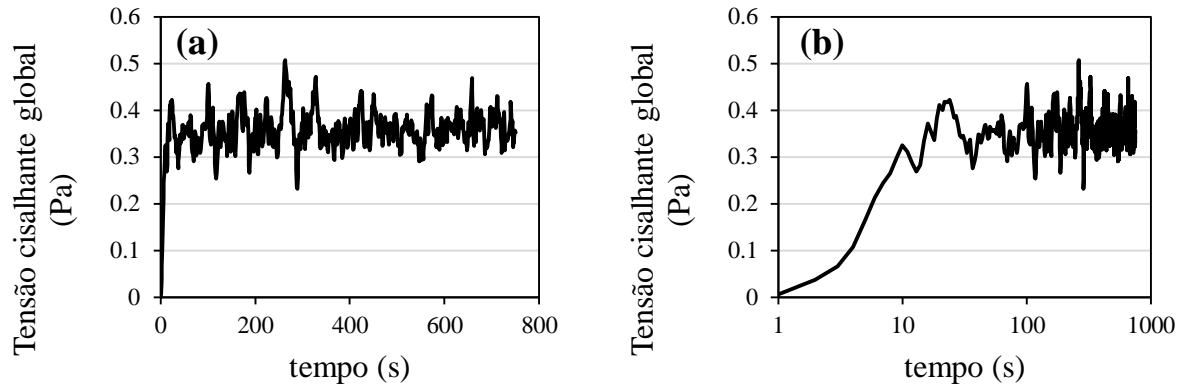


Figura 4.3: Evolução temporal da tensão cisalhante global sobre as membranas predita pelo modelo $k-\omega$ SST com a malha M2 para baixa vazão de aerção em (a) escala normal e (b) em escala logarítmica para o eixo x.

A convergência de malha pode ser verificada na Figura 4.4 pela tensão cisalhante global ao longo do tempo para malhas de diferentes refinamentos M1, M2 e M3 (Tabela 4.1). Percebe-se que foi atingida independência de malha para essa variável, com uma diferença de 0,47% (estatisticamente insignificante, com 95% de confiança), em relação às médias temporais, conforme a Tabela 4.1. Dessa forma, a malha M2 foi utilizada em todas as simulações posteriores deste trabalho.

Contudo, deve-se ressaltar que, ao se comparar valores pontuais das variáveis, como tensão ou velocidade, para diferentes refinamentos de malha, uma diferença de até 31% foi encontrada. Assim, os resultados das simulações podem apresentar um erro adicional referente a sua distribuição espacial. Esse erro foi levado em conta ao se comparar as predições das diferentes estratégias de modelagem da turbulência.

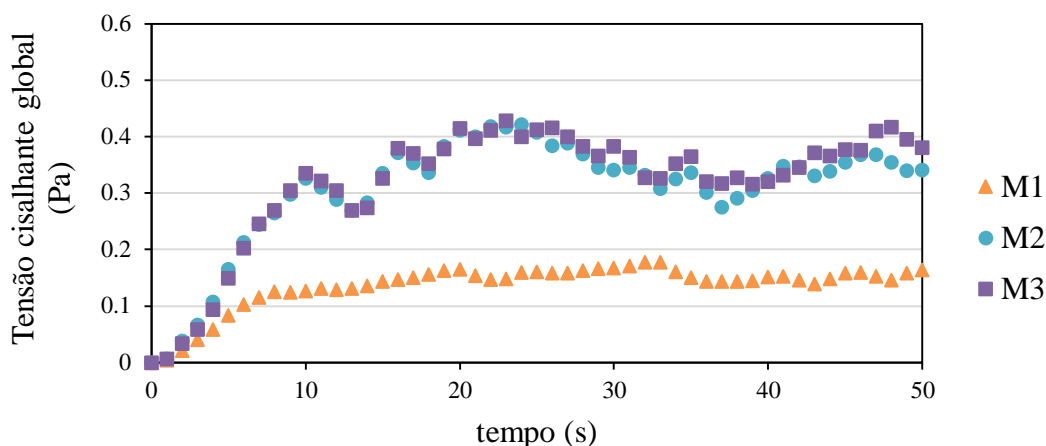


Figura 4.4: Evolução temporal da tensão cisalhante global sobre as membranas predita pelo modelo $k-\omega$ SST para baixa vazão de aeração para três refinamentos de malha.

Tabela 4.1: Testes de convergência (independência) da malha. Comparação da tensão cisalhante média global sobre as membranas para três malhas com refinamentos distintos.

<i>Malha</i>	τ (Pa)	<i>Diferença de τ entre malhas (%)</i>
M1	0,151	
M2	0,360	58,09 (entre M2-M1)
M3	0,362	0,47 (entre M3-M2)

4.3 Comparação de predições e medições experimentais

Nesta seção será apresentada a comparação dos valores das variáveis de interesse (velocidade do gás e tensão cisalhante), que foram obtidos através de diferentes estratégias de modelagem, entre si e entre valores deste trabalho e valores simulados e experimentais correspondentes da literatura. Devido à natureza oscilatória da resposta temporal, tanto numérica quanto experimental, tais comparações devem ser feitas em termos estatísticos, por meio do cálculo de valores médios e do uso de testes estatísticos específicos para a comparação destes valores médios. Neste sentido, é importante mencionar que a grande maioria dos trabalhos da literatura não leva este fato em consideração, fazendo simplesmente as comparações de valores em termos de diferenças relativas, sem utilizar testes de comparação de média.

4.3.1 Velocidade do gás

A Tabela 4.2 exibe os valores de velocidade do gás para dois pontos no BRM, Ponto 3 e Ponto 6. Os resultados das simulações com diferentes estratégias de modelagem da turbulência deste trabalho e os resultados experimentais foram comparados. Verifica-se que, tanto na baixa quanto na alta vazão de aeração, ocorrem casos onde há diferença significativa entre as predições dos diferentes modelos, indicando a importância de um estudo mais detalhado sobre a adequação dos diferentes modelos e/ou critérios de escolha.

Tabela 4.2: Valores de velocidade local do gás para taxas de aeração baixa e alta e pontos de medição 3 e 6 para as três estratégias de modelagem de turbulência e dados experimentais.

Taxa de aeração	Estratégia de modelagem e origem dos dados experimentais	Velocidade do gás (m/s)	
		Ponto 3	Ponto 6
Baixa	$k-\epsilon$ aR	$0,551 \pm 0,022^{ab}$	$0,621 \pm 0,026^a$
	$k-\epsilon$ bR	$0,599 \pm 0,022^a$	$0,428 \pm 0,021^b$
	$k-\omega$ SST	$0,546 \pm 0,009^b$	$0,474 \pm 0,009^c$
	(FULTON <i>et al.</i> , 2011)	$0,206 \pm 0,016^c$	$0,462 \pm 0,003^{bc}$
Alta	$k-\epsilon$ aR	$0,658 \pm 0,029^a$	$0,576 \pm 0,033^a$
	$k-\epsilon$ bR	$0,652 \pm 0,025^a$	$0,476 \pm 0,027^b$
	$k-\omega$ SST	$0,705 \pm 0,013^a$	$0,454 \pm 0,013^b$
	(FULTON <i>et al.</i> , 2011)	$0,273 \pm 0,021^b$	$0,658 \pm 0,015^c$

Médias seguidas de pelo menos uma letra diferente nos sobrescritos em cada Ponto são significativamente diferentes (com 95% de confiança pelo teste de Tukey) e possuem valor de diferença entre si maior do que o valor da diferença obtido entre M2-M3. Pontos para os quais não foi verificada convergência durante as simulações não são mostrados.

Adicionalmente, observa-se na Tabela 4.2 que não há uma correlação entre os resultados preditos pelos modelos e as medidas experimentais de velocidade reportadas por Fulton *et al.* (2011) nos pontos considerados. Observa-se inclusive uma inversão da tendência verificada nos dados experimentais, nos quais tem-se valores de velocidade mais baixos para o Ponto 3, quando comparado com o Ponto 6.

Com relação a este resultado, é necessário considerar que existem alguns aspectos da modelagem que devem ser avaliados na tentativa de explicar estas discrepâncias. Primeiramente, enquanto que as medições experimentais de velocidade do gás foram realizadas bolha a bolha; para as simulações, a estratégia Euleriana adotada considera cada fase como um contínuo interpenetrante, não leva em consideração cada bolha como uma partícula. Ademais, para as simulações, os módulos de membrana foram representados como blocos sólidos; portanto, a ausência da modelagem do movimento das fibras poderia ter tido uma influência

maior nos valores preditos do Ponto 3, que se localiza entre dois módulos, do que nos valores do Ponto 6, que apresentou baixas diferenças relativas em relação às medidas experimentais. Da mesma forma, o Ponto 3 sofre maior efeito da modelagem do escoamento na região de parede, que foi simplificada através do emprego das funções de parede.

No entanto, existem também aspectos com relação à natureza, precisão e acurácia dos dados experimentais de velocidade apresentados por Fulton *et al.* (2011) que devem ser considerados. Apesar de os autores afirmarem que as menores velocidades das bolhas no Ponto 3 provavelmente se devem à maior resistência imposta pela geometria entre os módulos de membrana (ainda que o espaçamento mínimo entre módulos seja mais de 4 vezes o diâmetro das bolhas de gás), eles ressaltam que esse resultado não é consistente com o encontrado por Nguyen Cong Duc *et al.* (2008), que obtiveram velocidades maiores na região entre módulos para um sistema semelhante. Adicionalmente, cabe mencionar que os dados de velocidade e diâmetro calculados pela metodologia de Chaumat *et al.* (2007), usada por Fulton *et al.* (2011) para o cálculo das características das bolhas através dos sinais obtidos pelos sensores, são confiáveis apenas em termos de ordem de magnitude, mas apresentam baixa precisão (CHAUMAT *et al.*, 2007). Finalmente, deve-se ressaltar que estão presentes incertezas em relação às dimensões/cotas obtidas dos artigos de referência, já que parte das medidas tiveram que ser estimadas. Por exemplo, a localização dos sensores de medição de velocidade do gás em relação à coordenada “z” não foi fornecida pelos autores.

Dos diferentes aspectos discutidos nos parágrafos anteriores, conclui-se que os dados de velocidade de gás disponíveis na literatura não constituem ainda uma referência confiável. Por esse motivo, esta variável não aparece ainda como um parâmetro adequado para comparação. Somente a obtenção de dados experimentais mais confiáveis pode alterar esta situação.

4.3.2 Tensão cisalhante

A tensão cisalhante sobre pontos da superfície das membranas, predita pelas simulações deste trabalho para baixa (Tabela 4.3) e alta (Tabela 4.4) vazões de aeração, foram comparadas com dados experimentais e resultados de simulações fornecidos por Ratkovich; Hunze; Nopens (2012) que empregaram a estratégia de mistura para a modelagem das equações governantes do sistema multifásico e o modelo de turbulência RNG $k-\epsilon$. Neste trabalho, os modelos de

turbulência puderam ser melhor distinguidos, em relação a seus resultados de tensão local, para baixa vazão de aeração e no Plano 3. No geral, o modelo $k-\omega$ SST exibiu menores diferenças em relação aos dados experimentais do que o modelo $k-\epsilon$ avaliado neste trabalho.

Tabela 4.3: Comparação da tensão cisalhante (Pa) sobre a superfície das membranas para três estratégias de modelagem de turbulência, dados simulados da literatura e dados experimentais (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012) para baixa vazão de aeração.

		Plano 3		Plano 2			Plano 1		
		x ₁	x ₃	x ₁	x ₂	x ₃	x ₁	x ₂	x ₃
y ₁	k-ε aR	-	0,681 ±0,028 ^a	-	-	0,538 ±0,024 ^a	-	-	0,547 ±0,023 ^a
	k-ε bR	-	0,500 ±0,031 ^b	-	-	0,658 ±0,028 ^a	-	-	0,657 ±0,028 ^a
	k-ω SST	-	0,366 ±0,010 ^c	-	-	0,518 ±0,010 ^a	-	-	0,521 ±0,010 ^a
	SIM	-	0,143 ±0,072 ^d	-	-	0,214 ±0,197 ^b	-	-	0,179 ±0,142 ^b
	EXP	-	0,294 ±0,247 ^c	-	-	0,259 ±0,165 ^c	-	-	0,133 ±0,125 ^c
y ₂	k-ε aR	0,375 ±0,014 ^a	0,744 ±0,030 ^a	0,350 ±0,013 ^a	-	-	0,362 ±0,014 ^a	-	-
	k-ε bR	0,292 ±0,014 ^a	0,602 ±0,030 ^a	0,408 ±0,022 ^a	-	-	0,431 ±0,020 ^a	-	-
	k-ω SST	0,379 ±0,007 ^a	0,429 ±0,011 ^b	0,392 ±0,009 ^a	-	-	0,438 ±0,009 ^a	-	-
	SIM	0,158 ±0,105 ^b	0,339 ±0,179 ^c	0,193 ±0,088 ^b	-	-	0,123 ±0,088 ^b	-	-
	EXP	0,163 ±0,104 ^b	0,256 ±0,221 ^d	0,209 ±0,117 ^c	-	-	0,138 ±0,076 ^c	-	-
y ₃	k-ε aR	-	0,377 ±0,010 ^a	-	0,200 ±0,007 ^a bc	0,255 ±0,007 ^{ab}	-	0,199 ±0,007 ^{ab}	0,256 ±0,007 ^a
	k-ε bR	-	0,300 ±0,011 ^a	-	0,245 ±0,008 ^{ac}	0,254 ±0,009 ^{ab}	-	0,247 ±0,008 ^c	0,254 ±0,009 ^a
	k-ω SST	-	0,226 ±0,004 ^b	-	0,152 ±0,003 ^b	0,184 ±0,003 ^{cd}	-	0,156 ±0,003 ^a	0,185 ±0,003 ^b
	SIM	-	0,509 ±0,158 ^c	-	0,214 ±0,125 ^a	0,175 ±0,071 ^{ac}	-	0,232 ±0,161 ^{bc}	0,526 ±0,176 ^c
	EXP	-	0,744 ±0,593 ^d	-	0,287 ±0,357 ^c	0,126 ±0,069 ^{bd}	-	0,398 ±0,500 ^d	0,000 ±0,062 ^d

y₁, y₂, y₃ correspondem às linhas ABC, DEF e JKL (conforme Figura 3.33), respectivamente, onde a primeira letra corresponde a x₁, a segunda a x₂ e a terceira a x₃; e x₁, x₂ e x₃ correspondem às distâncias em X de 0, 0,18 e 0,36 m, respectivamente. Médias seguidas de pelo menos uma letra diferente nos sobrescritos em cada ponto (x,y) são significativamente diferentes com 95% de confiança pelo teste de Tukey e possuem diferença maior que a diferença obtida no refinamento de malha. Pontos para os quais não foi verificada convergência durante as simulações não são mostrados. Resultados experimentais (EXP) e da simulação (SIM) de Ratkovich; Hunze; Nopens (2012).

Tabela 4.4: Comparação da tensão cisalhante (Pa) sobre a superfície das membranas para três estratégias de modelagem de turbulência, dados simulados da literatura e dados experimentais (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012) para alta vazão de aeração.

		Plano 3		Plano 2			Plano 1		
		x ₁	x ₃	x ₁	x ₂	x ₃	x ₁	x ₂	x ₃
y ₁	k-ε aR	-	0,853 ±0,043 ^a	-	-	0,810 ±0,034 ^a	-	-	0,796 ±0,033 ^a
	k-ε bR	-	0,859 ±0,043 ^a	-	-	0,957 ±0,032 ^a	-	-	0,937 ±0,030 ^a
	k-ω SST	-	0,509 ±0,018 ^b	-	-	0,830 ±0,021 ^a	-	-	0,810 ±0,021 ^a
	SIM	-	0,805 ±0,610 ^a	-	-	0,707 ±0,439 ^b	-	-	0,293 ±0,171 ^b
	EXP	-	0,353 ±0,435 ^c	-	-	0,894 ±0,412 ^c	-	-	0,360 ±0,419 ^c
y ₂	k-ε aR	0,419 ±0,018 ^{ab}	0,945 ±0,039 ^a	0,484 ±0,022 ^a	-	-	0,516 ±0,024 ^{ab}	-	-
	k-ε bR	0,423 ±0,014 ^{ab}	1,123 ±0,041 ^a	0,526 ±0,021 ^{ab}	-	-	0,572 ±0,022 ^a	-	-
	k-ω SST	0,561 ±0,016 ^c	0,655 ±0,020 ^b	0,603 ±0,020 ^a	-	-	0,610 ±0,017 ^a	-	-
	SIM	0,395 ±0,279 ^a	0,837 ±0,535 ^c	0,535 ±0,116 ^b	-	-	0,279 ±0,139 ^c	-	-
	EXP	0,459 ±0,282 ^b	0,612 ±0,588 ^b	0,333 ±0,238 ^c	-	-	0,471 ±0,282 ^b	-	-
y ₃	k-ε aR	-	0,539 ±0,019 ^{ab}	-	0,342 ±0,013 ^a	0,436 ±0,014 ^{ab}	-	0,336 ±0,013 ^{ab}	0,435 ±0,014 ^a
	k-ε bR	-	0,538 ±0,015 ^{ab}	-	0,374 ±0,010 ^a	0,441 ±0,012 ^{ab}	-	0,371 ±0,010 ^a	0,438 ±0,012 ^a
	k-ω SST	-	0,424 ±0,010 ^a	-	0,287 ±0,008 ^a	0,363 ±0,009 ^b	-	0,286 ±0,008 ^{ab}	0,359 ±0,009 ^a
	SIM	-	0,488 ±1,047 ^a	-	1,233 ±0,931 ^b	0,535 ±2,139 ^a	-	0,279 ±0,209 ^b	0,628 ±0,628 ^b
	EXP	-	0,523 ±0,221 ^b	-	0,628 ±0,291 ^c	0,546 ±0,291 ^a	-	0,612 ±0,259 ^c	0,518 ±0,247 ^c

y₁, y₂, y₃ correspondem às linhas ABC, DEF e JKL (conforme Figura 3.33), respectivamente, onde a primeira letra corresponde a x₁, a segunda a x₂ e a terceira a x₃; e x₁, x₂ e x₃ correspondem às distâncias em X de 0, 0,18 e 0,36 m, respectivamente. Médias seguidas de pelo menos uma letra diferente nos sobrescritos em cada ponto (x,y) são significativamente diferentes com 95% de confiança pelo teste de Tukey e possuem diferença maior que a diferença obtida no refinamento de malha. Pontos para os quais não foi verificada convergência durante as simulações não são mostrados. Resultados experimentais (EXP) e da simulação (SIM) de Ratkovich; Hunze; Nopens (2012).

Comparando com as previsões de Ratkovich; Hunze; Nopens (2012), obteve-se neste trabalho previsões para tensão local mais próximas do resultado experimental apenas para alta vazão de aeração. Para baixa vazão de aeração, as maiores diferenças entre as previsões deste trabalho e valores experimentais ocorreram no Plano 1, nos Pontos C e D, que estão localizados próximos das arestas dos módulos e da superfície do líquido, onde a intensidade da turbulência tende a ser maior (LIU *et al.*, 2010). Esses locais podem, portanto, sofrer maior influência de fenômenos complexos (como movimento das fibras, inversão de fluxo, separação da camada limite, coalescência e divisão das bolhas, etc.) que não estão sendo levados em consideração na modelagem, causando previsões menos acuradas. Para alta vazão de aeração, a mesma explicação pode ser válida, já que as maiores diferenças entre valores preditos aqui e valores das medições experimentais estão nos Pontos C do Plano 1 (para todos os modelos) e do Plano 3 (apenas para modelo $k-\epsilon$).

Para baixa vazão de aeração, as menores diferenças entre os valores experimentais e as previsões deste trabalho, para todos os modelos, estão localizados nos Pontos L no Plano 3 e nos Pontos K de todos os planos; para $k-\omega$ SST, as menores diferenças também incluem os Pontos L no Plano 2 e C no Plano 3. Para alta vazão de aeração, previsões com os modelos $k-\epsilon$ foram estatisticamente iguais aos valores experimentais para os Pontos D e L no Plano 3 e Ponto C no Plano 2; além disso, o uso do modelo $k-\epsilon$ aR resultou em tensão estatisticamente igual ao valor experimental no Ponto D no Plano 1 e o modelo $k-\omega$ SST no Ponto F no Plano 3. As menores diferenças entre os valores experimentais e as previsões deste trabalho para essa vazão de aeração e para todos os modelos estão localizadas nos Pontos L, para todos os planos; D, no Plano 1 e Plano 3; e C, no Plano 2. Os valores das diferenças entre valores preditos neste trabalho e valores experimentais encontrados no Ponto C no Plano 2 foram menores que os encontrados no mesmo Ponto nos Planos 1 ou 3. Essa diferença entre os Planos 2 e 1 pode ser devido à influência da maior proximidade do aerador em relação ao Plano 2, que está logo abaixo do módulo de membranas correspondente a esse Plano. Além disso, a menor resistência imposta pela geometria ao escoamento próximo do Plano 3 pode ter causado diferenças na acurácia das previsões entre Plano 2 e Plano 3.

Ao se comparar as previsões entre as diferentes estratégias de modelagem adotadas, algumas observações podem ser feitas. Para baixa vazão de aeração, dentre os modelos avaliados, o modelo $k-\omega$ SST resultou em menores diferenças entre suas previsões e os valores experimentais nos Pontos L do Plano 2, e C e F do Plano 3; mas obteve maiores diferenças,

entre previsões e valores medidos, nos Pontos D do Plano 1 e do Plano 3, onde $k-\epsilon$ aR e $k-\epsilon$ bR tiveram as menores diferenças, respectivamente. Para alta vazão de aeração, previsões com o modelo $k-\omega$ SST teve menores diferenças, em relação aos valores experimentais, nos Pontos C e F do Plano 3 e, estatisticamente, só foi possível verificar uma maior diferença dentre seus resultados em relação aos medidos experimentalmente no Ponto D do Plano 3, onde ambas estratégias com o modelo $k-\epsilon$ (aR e bR) obtiveram previsões com menores diferenças e estatisticamente iguais entre si. Apesar do modelo $k-\omega$ SST ter exibido, no geral e dentre os pontos analisados, as menores diferenças em relação aos dados coletados experimentalmente, e ser evidente que a escolha do modelo de turbulência resultou em previsões significativamente diferentes em diversos pontos, dados mais confiáveis, especialmente em termos de convergência temporal das variáveis, são necessários para caracterizar apropriadamente a acurácia desses modelos sobre as previsões de tensão cisalhante nas membranas.

De modo a permitir melhor visualização, foram gerados perfis com os valores de intensidade de tensão cisalhante sobre as membranas para baixa (Figura 4.5) e alta (Figura 4.6) vazões de aeração. Esses perfis são úteis para comparações qualitativas, uma vez que os valores preditos de tensão nesse trabalho não convergiram completamente em todos os pontos.

O primeiro aspecto a ressaltar pela análise dos resultados apresentados na Figura 4.5 e na Figura 4.6 é o fato de que os Planos 1 e 2 apresentam perfis similares para os resultados deste trabalho, o que a princípio está de acordo com a equivalência geométrica das suas localizações (Figura 3.3). Todavia, ao se comparar com os dados de Ratkovich; Hunze; Nopens (2012), mais notavelmente para baixa vazão de aeração e para as medições experimentais, os valores de intensidade de tensão foram muito diferentes entre o Plano 1 e o Plano 2; os autores não apresentaram justificativas para as diferenças encontradas entre os dois planos citados.

Nas Figuras 4.5-4.6, observa-se, ainda, que os resultados de tensão deste trabalho, comparando-se os três planos entre si, são mais similares (apesar de significativamente diferentes) que as observadas nos resultados experimentais de Ratkovich; Hunze; Nopens (2012). Como maiores velocidades e quantidade de bolhas usualmente ocasionariam maior intensidade de turbulência e, conseqüentemente, maiores valores de tensão cisalhante, os resultados simulados no presente trabalho parecem mais corretos do ponto de vista qualitativo. Esta afirmação se baseia no fato de que, nos resultados de Fulton *et al.* (2011), os valores de velocidade da fase gás (Tabela 4.2) e de quantidade de bolhas foram mais altos para pontos

localizados próximos ao Plano 3 (0,46 e 0,66 m/s para baixa e alta vazão de aeração, respectivamente), enquanto os valores mais elevados de tensão (Figuras 4.5-4.6) foram observados no Plano 2, onde as velocidades foram mais baixas (0,21 e 0,27 m/s, para baixa e alta vazão de aeração, respectivamente).

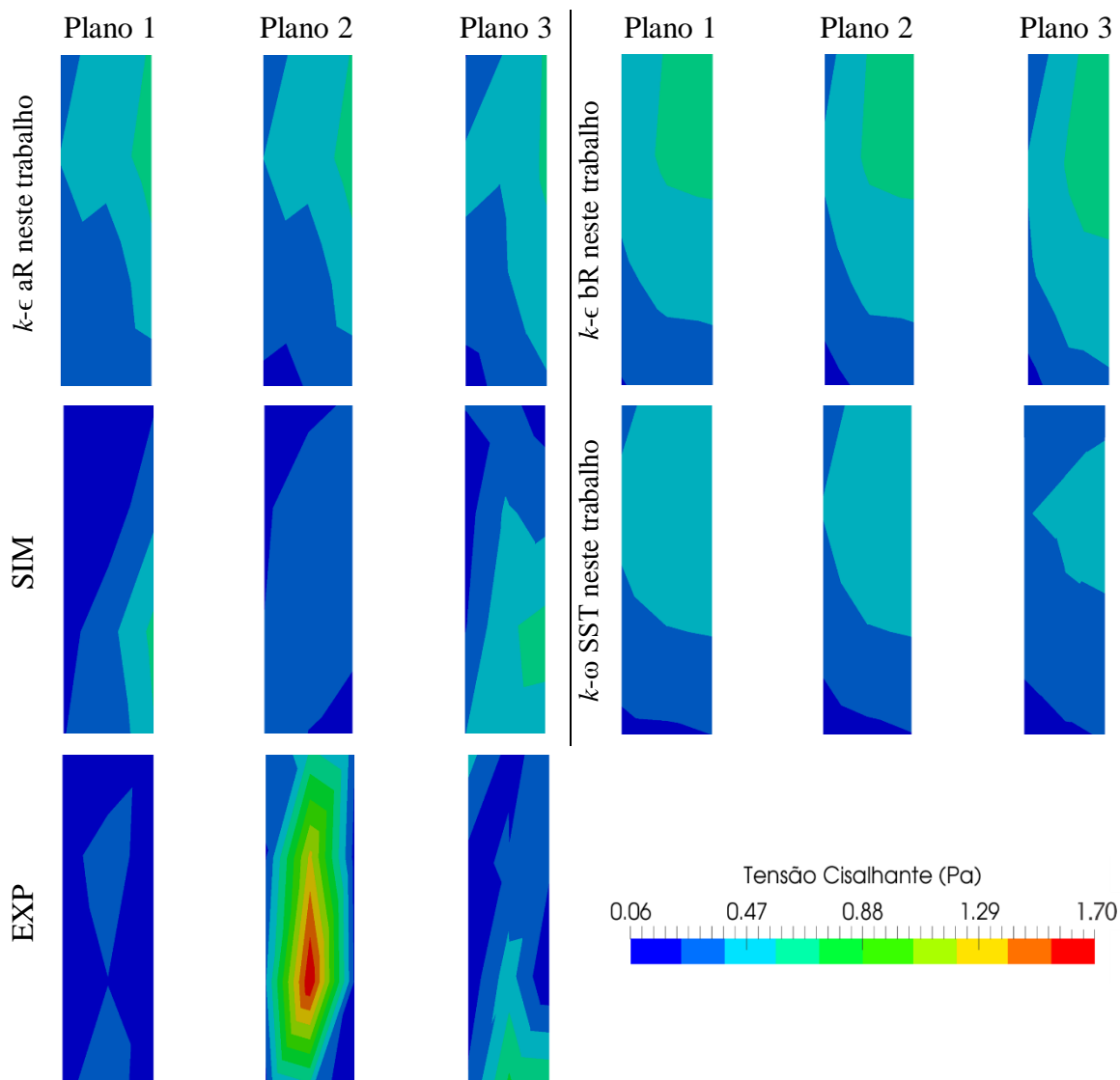


Figura 4.5: Comparação dos perfis de tensão cisalhante (Pa) sobre a superfície das membranas para três estratégias de modelagem de turbulência, dados experimentais (EXP) e simulados na literatura (SIM) (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012) para baixa vazão de aeração nos três planos de medição. Valores de tensão nas regiões entre os pontos de medição foram obtidos por interpolação linear.

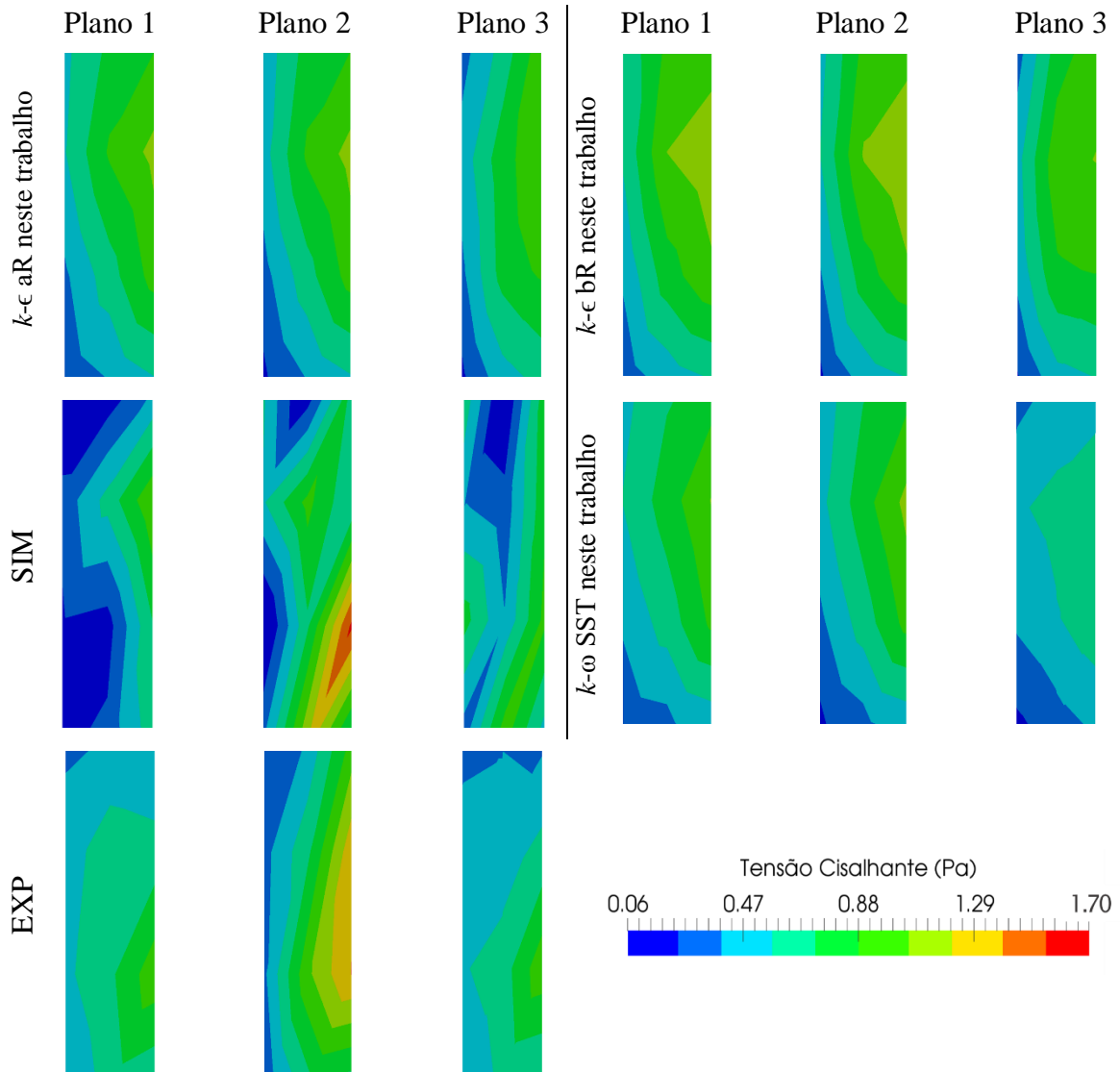


Figura 4.6: Comparação dos perfis de tensão cisalhante (Pa) sobre a superfície das membranas para três estratégias de modelagem de turbulência, dados experimentais (EXP) e simulados na literatura (SIM) (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012) para alta vazão de aeração nos três planos de medição. Valores de tensão nas regiões entre os pontos de medição foram obtidos por interpolação linear.

Adicionalmente, nota-se deslocamento dos máximos de tensão obtidos nesse trabalho em relação aos resultados experimentais (EXP) e simulados (SIM) de Ratkovich; Hunze; Nopens (2012), tal deslocamento é mais acentuado entre os resultados deste trabalho com os experimentais (EXP). Nos resultados experimentais, os máximos de tensão se localizam em uma altura inferior (para ambas vazões de aeração) e mais à esquerda (apenas para baixa vazão de aeração), quando comparados com os resultados das simulações deste trabalho.

Nota-se que as diferenças entre SIM-EXP no Plano 2 para baixa vazão de aeração e nos Planos 1 e 3 para alta vazão de aeração, por exemplo, foram qualitativamente maiores que entre

as predições obtidas nesse trabalho e as medições experimentais. Além disso, exceto pelo deslocamento dos máximos de tensão, as predições deste trabalho nos Planos 1 e 3 para alta vazão de aeração são qualitativamente similares às medições experimentais.

É importante verificar também que, dentre esses perfis de tensão, existem diferenças nas predições dependendo da estratégia de modelagem de turbulência empregada. Isso é mais notável para o Plano 3, exceto entre $k-\epsilon$ aR e $k-\epsilon$ bR para alta vazão de aeração.

Para analisar a intensidade total do cisalhamento sobre as membranas, calculou-se a tensão cisalhante média global e seu desvio padrão para as diferentes estratégias de modelagem utilizadas. Esses dados são exibidos na Tabela 4.5, junto com os valores simulados e experimentais apresentados na literatura. O teste estatístico de diferença de médias indicou que nenhum desses valores preditos de tensão pode ser considerado estatisticamente igual aos experimentais, com 95% de confiança. Consequentemente, as diferenças dos valores preditos em relação aos valores experimentais foram calculadas e também são exibidas.

Tabela 4.5: Comparação da tensão cisalhante média global (Pa) na superfície das membranas para as três estratégias de modelagem da turbulência, dados simulados da literatura e dados experimentais (RATKOVICH; HUNZE; NOPENS, 2012), para duas taxas de aeração.

Vazão de aeração		$k-\epsilon$ aR	$k-\epsilon$ bR	$k-\omega$ SST	SIM	EXP
Baixa	Tensão	0,424 $\pm 0,002$	0,437 $\pm 0,003$	0,360 $\pm 0,001$	0,295 $\pm 0,070$	0,385 $\pm 0,070$
	Diferença* (%)	10,2	13,5	6,6	23,4	
Alta	Tensão	0,661 $\pm 0,003$	0,716 $\pm 0,003$	0,589 $\pm 0,002$	0,601 $\pm 0,080$	0,687 $\pm 0,120$
	Diferença* (%)	3,7	4,2	14,2	12,5	

Resultados experimentais (EXP) e da simulação (SIM) de Ratkovich; Hunze; Nopens (2012). *Diferença é relativo aos valores experimentais.

Nota-se, no geral, boa concordância entre os valores experimentais e preditos pelas simulações. As predições obtidas nesse trabalho obtiveram melhor concordância do que as predições da literatura, exceto com $k-\omega$ SST para alta vazão de aeração. O uso de diferentes funções de parede, bR ou aR, para o modelo $k-\epsilon$ resultou em diferenças significativas nas predições, porém estas diferenças foram menores que as encontradas quando foram comparados diferentes modelos. Na comparação de predições entre modelos, obteve-se, neste trabalho, uma diferença de até 21,6%, dependendo do modelo de turbulência utilizado.

Capítulo 5

Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

5.1 Conclusões

A partir dos resultados obtidos nesse trabalho foi possível demonstrar que a predição de tensão cisalhante no sistema BRM analisado é altamente sensível à escolha da estratégia de modelagem da turbulência. As predições foram mais sensíveis quanto ao modelo de turbulência do que em relação às funções de parede testadas. Com as especificações geométricas de um BRM reportado na literatura, uma malha computacional de tamanho razoável foi construída e, através da estratégia de modelagem multifásica Euleriana, disponível no software de código aberto OpenFOAM, a convergência da simulação e do refinamento de malha foram verificadas.

Observou-se a complexidade da dinâmica gerada pela fase dispersa, o que exigiu tempo elevado para se atingir convergência adequada das variáveis locais. Identificou-se também a necessidade de se coletar dados da evolução temporal das variáveis avaliadas. Os resultados das simulações foram comparados com valores simulados e experimentais disponíveis na literatura para velocidade das bolhas e tensão de cisalhamento nas membranas. Apesar das diferenças encontradas entre predições e medições experimentais para as variáveis locais em certos pontos, essas diferenças não foram superiores, no geral, às encontradas pelas predições da literatura. As predições para tensão cisalhante global apresentaram baixas diferenças em relação aos dados experimentais, apresentando maior concordância, no geral, do que resultados

simulados da literatura. O papel da escolha da estratégia de modelagem de turbulência em sistemas BRM foi avaliado comparando-se os resultados gerados ao se empregar os modelos $k-\epsilon$ com funções de parede para baixo e para alto Reynolds e o modelo $k-\omega$ SST. As previsões para tensão cisalhante global resultaram em diferenças de até 21,6% entre modelos.

Em suma, a partir dos resultados desse trabalho, infere-se que se deve dar maior importância ao intervalo de tempo de coleta de dados, de modo a adquirir médias representativas do perfil dinâmico das variáveis e que comparações mais definitivas entre resultados de simulações e medições experimentais devem incluir a análise da evolução temporal das variáveis em análise. Além disso, atenção maior deve ser dada à escolha da estratégia de modelagem de turbulência, visto que, no caso estudado aqui, houve alta sensibilidade das previsões dependendo dessa escolha.

5.2 Sugestões para trabalhos futuros

A sequência desse trabalho envolve, primeiramente, o desenvolvimento de uma metodologia para obtenção de dados experimentais que possibilitaria uma menor dependência de dados da literatura para validação das simulações. De posse dessa metodologia, seriam projetados BRMs de pequena escala com diferentes geometrias que possibilitem a geração de menores malhas computacionais, minimizando o problema do custo computacional encontrado nesse trabalho.

Os dados experimentais coletados permitiriam análises mais profundas em termos de validação e verificação da relevância da modelagem de outros fenômenos, compreensão da dinâmica do sistema, verificação das opções de modelos mais adequadas e posterior análise de sensibilidade. Por fim, almeja-se estudar o escalonamento desses sistemas, de modo a se obter informações úteis a nível industrial.

Referências Bibliográficas

AMINI, E. et al. Investigating the effect of sparger configuration on the hydrodynamics of a full-scale membrane bioreactor using computational fluid dynamics. **RSC Adv.**, v. 5, n. 127, p. 105218–105226, 2015.

BECKER, S.; DE BIE, H.; SWEENEY, J. Dynamic flow behaviour in bubble columns. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 4929–4935, 1999.

BÖHM, L. et al. The importance of fluid dynamics for MBR fouling mitigation. **Bioresource Technology**, v. 122, p. 50–61, 2012.

BRANNOCK, M. et al. Optimising mixing and nutrient removal in membrane bioreactors: CFD modelling and experimental validation. **Desalination**, v. 250, n. 2, p. 815–818, 2010.

BRANNOCK, M. W. D. et al. Computational fluid dynamics simulations of MBRs: Inside submerged versus outside submerged membranes. **Desalination**, v. 236, n. 1–3, p. 244–251, 2009.

BRANNOCK, M.; WANG, Y.; LESLIE, G. Mixing characterisation of full-scale membrane bioreactors: CFD modelling with experimental validation. **Water Research**, v. 44, n. 10, p. 3181–3191, 2010.

BUETEHORN, S. et al. CFD simulation of single- and multi-phase flows through submerged membrane units with irregular fiber arrangement. **Journal of Membrane Science**, v. 384, n. 1–2, p. 184–197, 2011.

CHAUMAT, H. et al. On the reliability of an optical fibre probe in bubble column under industrial relevant operating conditions. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 31, n. 6, p. 495–504, 2007.

CHERNYSHEV, A. S.; SCHMIDT, A. A. Using the Euler – Euler Approach for Mathematical Modeling of Turbulent Flows in Bubbly Media. v. 39, n. 6, p. 548–551, 2013.

FULTON, B. G. et al. Distribution of surface shear forces and bubble characteristics in full-scale gas sparged submerged hollow fiber membrane modules. **Desalination**, v. 281, n. 1, p. 128–141, 2011.

JOSHI, J. B. et al. Bubble generated turbulence and direct numerical simulations. **Chemical Engineering Science**, v. 157, p. 26–75, 2017.

JUDD, S.; JUDD, C. **The MBR Book**. [s.l: s.n.]. v. 1

KANG, C. W. et al. Bridging the gap between membrane bio-reactor (MBR) pilot and plant studies. **Journal of Membrane Science**, v. 325, n. 2, p. 861–871, 2008.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, n. 2, p. 269–289, 1974.

LIU, N. et al. Experimental investigation of hydrodynamic behavior in a real membrane bio-reactor unit. **Journal of Membrane Science**, v. 353, n. 1–2, p. 122–134, 2010.

LIU, X. et al. Numerical simulation of bubble induced shear in membrane bioreactors: Effects of mixed liquor rheology and membrane configuration. **Water Research**, v. 75, p. 131–145, 2015.

LIU, X. et al. Fluid Structure Interaction analysis of lateral fibre movement in submerged membrane reactors. **Journal of Membrane Science**, v. 504, p. 240–250, 2016.

MCCLURE, D. D. et al. Development of a CFD model of bubble column bioreactors: Part two - comparison of experimental data and CFD predictions. **Chemical Engineering and Technology**, v. 37, n. 1, p. 131–140, 2014.

MENTER, F.; ESCH, T. Elements of Industrial Heat Transfer Prediction. **16th Brazilian Congress of Mechanical Engineering (COBEM)**, 2001.

MENTER, F. R.; KUNTZ, M.; LANGTRY, R. Ten Years of Industrial Experience with the SST Turbulence Model. **Turbulence Heat and Mass Transfer 4**, v. 4, p. 625–632, 2003.

NAESSENS, W. et al. Critical review of membrane bioreactor models - Part 2: Hydrodynamic and integrated models. **Bioresource Technology**, v. 122, p. 107–118, 2012.

NGUYEN CONG DUC, E. et al. Local hydrodynamic investigation of the aeration in a submerged hollow fibre membranes cassette. **Journal of Membrane Science**, v. 321, n. 2, p. 264–271, 2008.

PRIESKE, H.; DREWS, A.; KRAUME, M. Prediction of the circulation velocity in a membrane bioreactor. **Desalination**, v. 231, n. 1–3, p. 219–226, 2008.

RATKOVICH, N. et al. Experimental study and CFD modelling of a two-phase slug flow for an airlift tubular membrane. **Chemical Engineering Science**, v. 64, n. 16, p. 3576–3584, 2009.

RATKOVICH, N.; HUNZE, M.; NOPENS, I. Hydrodynamic Study of a Hollow Fiber Membrane System Using Experimentally and Numerically Derived Surface Shear Stresses. **Multiphase Science and Technology**, v. 24, n. 1, p. 47–66, 2012.

RIERA, J.; ZEPPIERI, S.; DERJANI-BAYEH, S. Hydrodynamic study of a multiphase spouted column. **Fuel**, v. 138, p. 183–192, 2014.

SCHIESTEL, R. **Modeling and Simulation of Turbulent Flows**. [s.l: s.n.].

SCOPUS. **Scopus**. Disponível em: <scopus.com>. Acesso em: 10 out. 2016.

TABIB, M. V.; ROY, S. A.; JOSHI, J. B. CFD simulation of bubble column — An analysis of interphase forces and turbulence models. **Chemical Engineering Journal**, v. 139, p. 589–614, 2008.

TENNEKES, H.; LUMLEY, J. L. **Spectral Dynamics** First course in turbulence, 1972.

VAN DER LAN, R. G. J. M. **Hydrodynamics of a Bubble Column Loop Reactor**. [s.l.] Delft University of Technology, 1985.

WANG, Y. et al. CFD simulations of membrane filtration zone in a submerged hollow fibre membrane bioreactor using a porous media approach. **Journal of Membrane Science**, v. 363, n. 1–2, p. 57–66, 2010.

WEI, P. et al. CFD modeling of hydrodynamic characteristics of slug bubble flow in a flat sheet membrane bioreactor. **Journal of Membrane Science**, v. 445, p. 15–24, 2013.

WHITE, F. Fluid Mechanics. p. 887, 2009.

WILCOX, D. C. **Turbulence Modeling for CFD**. [s.l: s.n.].

YAN, X. et al. Hydraulic optimization of membrane bioreactor via baffle modification using computational fluid dynamics. **Bioresource Technology**, v. 175, p. 633–637, 2015.

YAN, X. et al. Hydrodynamic optimization of membrane bioreactor by horizontal geometry modification using computational fluid dynamics. **Bioresource Technology**, v. 200, p. 328–334, 2016.

ZAMANI, F.; LAW, A. W. K.; FANE, A. G. Hydrodynamic analysis of vibrating hollow fibre membranes. **Journal of Membrane Science**, v. 429, p. 304–312, 2013.