

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

DIEGO RODRIGUES PESSOA

SIMULAÇÃO DA DINÂMICA DO BIORREATOR DE FERMENTAÇÃO EM ESTADO
SÓLIDO EM CFD

CURITIBA

2016

DIEGO RODRIGUES PESSOA

SIMULAÇÃO DA DINÂMICA DO BIORREATOR DE FERMENTAÇÃO EM ESTADO
SÓLIDO EM CFD

Dissertação apresentada ao programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Área de concentração de Desenvolvimento de Processos Químicos, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial das exigências para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Fernando de Lima Luz Junior

Coorientador: Prof. Dr. David Alexander Mitchell

CURITIBA

2016

Pessoa, Diego Rodrigues

Simulação da dinâmica do biorreator de fermentação em estado sólido em CFD / Diego Rodrigues Pessoa. – Curitiba, 2016.

115 f. : il., tabs.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Orientador: Luiz Fernando de Lima Luz Junior

Coorientador: David Alexander Mitchell

Bibliografia: p. 101-108

1. Fermentação. 2. Calor – Transmissão. 3. Modelos Matemáticos. I. Luz Junior, Luiz Fernando de Lima. II. Mitchell, David Alexander. III. Título.

CDD 621.4021



ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO

Aos trinta dias do mês de março de 2016, no Auditório Inferior do Prédio da Engenharia Química no Centro Politécnico – UFPR foi instalada pelo Dr. Luiz Fernando de Lima Luz Júnior, professor do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, a Banca Examinadora para a **nonagésima primeira** defesa de dissertação de mestrado na área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos. Estiveram presentes no ato, professores, alunos e visitantes. A Banca Examinadora, atendendo à determinação do colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, foi constituída professores doutores: Luiz Fernando de Lima Luz Júnior (PPGEQ/UFPR), David Alexander Mitchell (PPGEQ/UFPR), Carlos Itsuo Yamamoto (PPGEQ/UFPR) e Michele Rigon Spier (PPGEAL/UFPR). Às 14h00min, a banca iniciou os trabalhos, convidando o candidato **Diego Rodrigues Pessoa** a fazer a apresentação da dissertação de mestrado intitulada “*Simulação da dinâmica do biorreator de fermentação em estado sólido em CFD*”. Encerrada a apresentação, iniciou-se a fase de arguição pelos membros participantes. Tendo em vista a dissertação e a arguição, a banca decidiu pela APROVAÇÃO do candidato, (de acordo com a determinação dos artigos 68º e 69º da Resolução 65/09 – CEPE/UFPR de 30.10.2009).

Curitiba, 30 de março de 2016.

Prof. Dr. Luiz Fernando de Lima Luz Júnior
(PPGEQ/UFPR) – Orientador

Prof. Dr. David Alexander Mitchell
(PPGEQ/UFPR) – Coorientador

Prof. Dr. Carlos Itsuo Yamamoto
(PPGEQ/UFPR) – Membro Interno

Prof. Dra. Michele Rigon Spier
(PPGEAL/UFPR) – Membro Externo

AGRADECIMENTOS

Aos meus queridos pais, Christovam e Seres, que nunca deixaram de me acompanhar e me apoiar em todas minhas decisões e etapas da minha vida.

Ao professor Luiz Fernando, pela excelente orientação de meu trabalho, sempre me acompanhando de perto e se mostrando disposto a dedicar uma parte de seu tempo a mim. Agradeço também pela sua simpatia e amizade.

Ao professor David, pelas horas de orientação e discussões em torno do tema, além da disposição em ler meus trabalhos cuidadosamente.

Ao professor Carlos Yamamoto e à Elisa, pela disposição de seus tempos para me auxiliar na compreensão dos códigos para simulação.

À minha namorada Laila, pela paciência, compreensão e apoio em todos os momentos deste período de dedicação ao mestrado.

À minha colega Anelize, pela amizade, paciência e disponibilidade em me ensinar a metodologia laboratorial envolvida no preparo dos fungos, por disponibilizar seus dados de cultivo no biorreator piloto e por me ceder a oportunidade de coleta de informações a partir de seus experimentos.

À Luana, Alessandra e Maura, pela paciência e por me auxiliarem sempre que precisei delas.

A todo grupo de pesquisa de Bioquímica, liderado pelo professor David e pela professora Nádia, que me acolheram e permitiram que eu aumentasse meus conhecimentos e aperfeiçoasse minha capacidade de apresentação.

Ao Alex, pela amizade, por toda paciência e dedicação, pois este teve um papel essencial me orientando com os códigos e com o *software*, permitindo uma evolução muito mais rápida e eficiente de toda a pesquisa.

Aos colegas de pós-graduação, Gustavo, Paulo, Luana, Ana, João, Mariana, Priscila Higuti e Priscila Zorzenão, pelos momentos de estudo e de descontração.

À Capes e ao CNPq, pelo apoio financeiro.

RESUMO

A fermentação em estado sólido (FES) demonstra grande potencial por apresentar grande produtividade volumétrica e baixos custos de operação. Porém existem grandes desafios para que esta rota de produção seja aplicada em grandes escalas. Corridas de fermentação e testes para a larga escala são demasiadamente caras e demoradas e, devido a isto, os modelos matemáticos e as simulações computacionais tornam-se ainda mais importantes para a superação destes desafios. As técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) estão cada vez mais acessíveis, contudo não se encontra na literatura nenhuma aplicação do CFD em sistemas de FES. No trabalho atual, utilizou-se o *software* comercial de fluidodinâmica computacional ANSYS Fluent® 16.0 para desenvolver um modelo matemático para a transferência de calor e massa, juntamente ao crescimento microbiano em um biorreator em escala piloto de leito fixo. As simulações levam em consideração a dinâmica do fluxo em meios porosos, o não equilíbrio térmico e de concentrações de água entre as fases sólida e gasosa, o crescimento da biomassa (microrganismo), a geração de calor e água metabólicos, e a variação da permeabilidade do leito ao longo do tempo. Este modelo foi manualmente incluído no *software* por meio de UDFs (*User Defined Functions*). O uso do CFD apresenta a vantagem de prever possíveis gradientes de temperatura e de transferência de massa radiais gerados pela geometria complexa do sistema. A geometria foi baseada no biorreator piloto localizado nas instalações da Universidade Federal do Paraná. Ela foi desenhada em 3D no *software* ANSYS ICEM CFD® 16.0 e transportada para o Fluent para configurar todas as condições de operação. Baseou-se as simulações em dois experimentos de condições distintas, visando representá-los e compará-los aos resultados obtidos por CFD. Um experimento de FES foi promovido através do cultivo do fungo *Aspergillus niger* no biorreator piloto, cujas condições iniciais foram aplicadas para a simulação final do cultivo. Para a obtenção de parâmetros de permeabilidade, foram feitas medições de perda de carga em corridas de fermentação no biorreator piloto. O valor da perda de carga predita é similar à medida no experimentalmente. O mesmo modelo matemático foi capaz de descrever coerentemente as dinâmicas de transferência de calor e massa de ambos os experimentos. A predição do crescimento biológico ao longo do cultivo também produziu perfis de concentração de biomassa e de temperatura do leito concordantes com observações experimentais. Desta forma, se desenvolveu um meio robusto e confiável de testar condições de operação para produções de larga escala em biorreatores de fermentação em estado sólido.

Palavras-Chave: Fermentação em Estado Sólido, FES, Fluidodinâmica Computacional, CFD, ANSYS Fluent.

ABSTRACT

Solid-state fermentation (SSF) has potential advantages for the production of certain biotechnological products, due to its large volumetric productivity and low operating costs. However, there are major challenges in obtaining adequate heat and mass transfer when this fermentation method is used at large scales. Mathematical models and computer simulations are useful tools for designing strategies to overcome these challenges, given the cost of large-scale fermentation experiments. It is therefore surprising that, to date, there are few examples of the application of computational fluid dynamics (CFD) to SSF bioreactors. In the current work, we used the commercial CFD software ANSYS FLUENT® 16.0 to develop a mathematical model for heat and mass transfer along the microbial growth in a pilot-scale packed-bed bioreactor. On the simulation were taken into account: the dynamics of airflow in the porous substrate bed; the lack of thermal and moisture equilibrium between the solid and gas phases; and the influence of the biological growth on the solid consumption, bed porosity and permeability and on the balances due the metabolic heat and water productions. The model was inserted into the commercial CFD software ANSYS Fluent® 16.0 through UDF's (user defined functions). CFD models can predict radial temperature and mass transfer gradients in complex geometries of flow. The mesh and geometry were based on the pilot-scale bioreactor, located at the Federal University of Paraná facilities. The 3D geometry was drawn using ANSYS ICEM CFD® 16.0 and exported to Fluent in order to set all the operational conditions. The simulation conditions were based on two different experiments, aiming to represent them and compare them to the obtained CFD results. A SSF experiment was performed by growing the fungus *Aspergillus niger* on the pilot-scale bioreactor, which initial conditions were applied on the final cultivation simulation. The permeability parameters were estimated by the pressure drop data taken from the SSF run. The predicted pressure drop values were similar to the experimental readings. The same mathematical model was capable of describe coherently the dynamics of mass and heat transfer of both experiments. The biological growth prediction over the cultivation also produced biomass concentration and temperature profiles showed to be accordant to the experimental observations. Thus, the work intends to provide the basis for the development of a robust and reliable model for testing operating conditions and control strategies for large-scale cultivation in SSF bioreactors.

Keywords: Solid State Fermentation, SSF, Computational Fluid Dynamics, CFD, ANSYS Fluent.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 – FATORES QUE DEFINEM OS SISTEMAS DE FERMENTAÇÃO EM ESTADO-SÓLIDO (FES). O arranjo das partículas sólidas úmidas e a fase gasosa contínua envolvendo um fungo filamentoso (lado esquerdo) e um organismo unicelular (lado direito).....	19
FIGURA 2 – DIAGRAMA GENERALIZADO DE UM BIORREATOR DE FES.....	23
FIGURA 3 – ILUSTRAÇÃO DOS QUATRO PRINCIPAIS TIPOS DE REATORES CLASSIFICADOS DE ACORDO COM AS FORMAS DE AGITAÇÃO E AERAÇÃO. 24	24
FIGURA 4 – MALHA ESTRUTURADA PARA SIMULAÇÃO DO FLUXO DE AR SOBRE UM AEROFÓLIO.....	26
FIGURA 5 – CÉLULA RETANGULAR QUE DEFINE UM VOLUME DE CONTROLE.....	27
FIGURA 6 – EXEMPLOS DE MALHA ESTRUTURADA (A) E NÃO ESTRUTURADA (B).	28
FIGURA 7 – (A) REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO MODELO. (B) POSSÍVEL REPRESENTAÇÃO FÍSICA DOS FLUXOS INTERNOS AO BIORREATOR.	36
FIGURA 8 – COMPARAÇÃO DOS DADOS EXPERIMENTAIS DE TEMPO DE RESIDÊNCIA MÉDIO (5,4 rpm, preenchimento de 30 %, sem levantadores, vazão de 150 l/min) com os melhores ajustes dos modelos de fluxo “bem misturado” (linha tracejada) e fluxo pistonado com dispersão axial (linha traço-ponto-ponto).	37
FIGURA 9 – VISUALIZAÇÃO DA PREDIÇÃO DA QUEBRA DE AGREGADOS DURANTE O PERÍODO DE AGITAÇÃO PARA AS TRÊS DIFERENTES FORÇAS DE TENSÃO DE LIGAÇÃO ENTRE HIFAS.....	38
FIGURA 10 – FLUXOGRAMA DE ETAPAS DA PESQUISA.....	40
FIGURA 11 – BIORREATOR PILOTO ABERTO	52
FIGURA 12 – MEDIDAS DO BIORREATOR PILOTO	53
FIGURA 13 – (A) MALHA DO BIORREATOR, (B) FOTO COMPARATIVA COM BIORREATOR REAL E (C) POSIÇÃO DOS TERMOPARES DESTACADA: cor azul para altura de 5 cm. Rosa para 18 cm e vermelho para 33 cm.....	54
FIGURA 13 – DISPOSIÇÃO DOS TERMOPARES NO INTERIOR DO BIORREATOR: (a) disposição dos termopares ao longo do eixo horizontal; (b) disposição dos termopares ao longo do eixo vertical.	55
FIGURA 16 – COMPARAÇÃO ENTRE REFINAMENTOS (BAIXO, MÉDIO E ALTO) PARA O PASSO DE TEMPO ESCOLHIDO DE 0,01 s. A altura dos termopares correspondentes a cada curva está indicada.....	62

FIGURA 17 – PADRÕES DE DISTRIBUIÇÃO DE FLUXO ATRAVÉS DA <i>POROUS-JUMP</i> OBTIDOS EM DIFERENTES REFINAMENTOS: A – BAIXO; B – MÉDIO; C – ALTO. O ponto de entrada do gás, abaixo da superfície, está indicado em cada um dos casos assim como a localização da parede oposta à entrada do fluxo. No canto direito da figura há a orientação dos eixos de acordo com o ponto de vista utilizado.....	63
FIGURA 18 – COMPARAÇÃO ENTRE A ATIVIDADE DE AGUA NA FASE GÁS MÉDIA, PARA O VOLUME DO LEITO, GERADA PELA EQUAÇÃO DA ISOTERMA ORIGINAL E MODIFICADA.	65
FIGURA 19 – LINHAS DE FLUXO DE (A) TEMPERATURA, (B) VELOCIDADE E (C) PRESSÃO AO LONGO DO BIORREATOR.....	66
FIGURA 20 – PERFIS SIMULADOS DE TEMPERATURA E ANÁLISE PARAMÉTRICA.....	68
FIGURA 21 – PLANOS XY DISTRIBUIDOS NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm DO LEITO.	69
FIGURA 22 – PERFIS SIMULADOS DE UMIDADE DO AR E DO SUBSTRATO MÉDIOS PARA OS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm.	70
FIGURA 23 – PLANOS DE CORTE DO LEITO UTILIZADOS PARA A GERAÇÃO DOS CONTORNOS DE VARIÁVEIS. Planos xy nas posições de z (altura) de 1, 25 e 40 cm, planos xz nas posições de y de 10, 30 e 50 cm e planos yz nas posições de x de 10, 35 e 60 cm.....	71
FIGURA 24 – CONTORNOS DE POROSIDADE DO SUBSTRATO HETEROGÊNEO DE FT/BC 9:1 NOS PLANOS XZ E YZ.....	71
FIGURA 25 – CONTORNO DE UMIDADE DO SUBSTRATO HETEROGÊNEO FT/BC 9:1 NO TEMPO DE 400 S NOS PLANOS XZ E YZ.....	72
FIGURA 26 – CONTORNO DE UMIDADE DO SUBSTRATO HETEROGÊNEO FT/BC 9:1 NO TEMPO DE 800 s NOS PLANOS XZ E YZ.....	73
FIGURA 27 – CONTORNO DE TEMPERATURA DO SUBSTRATO HETEROGÊNEO FT/BC 9:1 NOS TEMPOS DE 400 s NOS PLANOS XZ E XY.	74
FIGURA 28 – CONTORNO DE TEMPERATURA DO SUBSTRATO HETEROGÊNEO FT/BC 9:1 NOS TEMPOS DE 400 s NOS PLANOS XZ E XY.	74
FIGURA 29 – CONTORNO DE UMIDADE DO AR NO LEITO HETEROGÊNEO FT/BC 9:1 NO TEMPO DE 400 s NOS PLANOS XZ E YZ.....	75
FIGURA 30 – CONTORNO DE UMIDADE DO AR NO LEITO HETEROGÊNEO FT/BC 9:1 NO TEMPO DE 800 s NOS PLANOS XZ E YZ.....	75
FIGURA 30 – COMPARAÇÃO ENTRE AS LEITURAS INDIVIDUAIS DOS TERMOPARES E ENTRE AS MÉDIAS DAS LEITURAS DOS TERMOPARES DAS	

ALTURAS DE 5, 18 E 33 cm, PARA AS SIMULAÇÕES COM LEITO HOMOGÊNEO E HETEROGÊNEO.....	76
FIGURA 31 – COMPARAÇÃO ENTRE AS PREDIÇÕES DE TERMOPARES DE LEITOS HETEROGÊNEOS DE DISTRIBUIÇÃO DE POROSIDADES DISTINTAS E AS LEITURAS INDIVIDUAIS EXPERIMENTAIS (temperatura no eixo y)	77
FIGURA 32 – COMPARAÇÃO ENTRE UMIDADE DO AR MÉDIA PARA OS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm, PREDITA EM LEITO HETEROGÊNEO E HOMOGÊNEO DE FT/BC 9:1.	78
FIGURA 33 – COMPARAÇÃO ENTRE UMIDADE DO LEITO MÉDIA PARA OS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6 E 40 cm, PREDITA EM LEITO HETEROGÊNEO E HOMOGÊNEO DE FT/BC 9:1.....	79
FIGURA 34 – COMPARAÇÃO ENTRE O CALORES MÉDIOS LIBERADOS POR CONDENSAÇÃO PARA OS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm, PREDITOS EM LEITO HETEROGÊNEO E HOMOGÊNEO DE FT/BC 9:1.....	79
FIGURA 35 – COMPARAÇÃO ENTRE TEMPERATURAS PREDITAS E LEITURAS EXPERIMENTAIS MÉDIAS PARA CADA ALTURA, PARA O LEITO DE SOJA. Simulação com velocidade de entrada do ar de 10,8 (—) e 6,4 m/s (---) e dados experimentais na altura de 5 (■), 18 (●) e 33 cm (▲).	81
FIGURA 36 – COMPARAÇÃO ENTRE TEMPERATURAS PREDITAS PARA OS TERMOPARES INDIVIDUAIS, PARA VELOCIDADES DE FLUXO DE 10,8 E 6,4 m/s, E AS LEITURAS EXPERIMENTAIS, PARA O LEITO DE SOJA.....	82
FIGURA 37 – PREDIÇÃO DA UMIDADE DO AR MÉDIA EM PLANOS XY DE DIFERENTES ALTURAS DO LEITO DE SOJA, PARA VELOCIDADES DE FLUXO DE 10,8 E 6,4 m/s.	84
FIGURA 38 – UMIDADE MÉDIA EM PLANOS XY DO LEITO DE SOJA PREDITA DE DIVERSAS ALTURAS, PARA VELOCIDADES DE FLUXO DE 10,8 E 6,4 m/s. ..	85
FIGURA 40 – CONTORNOS DA POROSIDADE INICIAL NO LEITO HETEROGÊNEO DE FT/BC 9:1, NA SIMULAÇÃO DO CULTIVO.	89
FIGURA 41 – CONTORNOS DA POROSIDADE EM 8,5 HORAS DE FLUXO NO LEITO HETEROGÊNEO DE FT/BC 9:1, NA SIMULAÇÃO DO CULTIVO.....	90
FIGURA 42 – CONTORNOS DE CONCENTRAÇÃO DE BIOMASSA INICIAL E NO TEMPO DE FLUXO DE 8,5 h, NA SIMULAÇÃO DO CULTIVO.....	90
FIGURA 43 – CONTORNOS DE TEMPERATURA NO TEMPO DE FLUXO DE 8,5 h, NA SIMULAÇÃO DO CULTIVO.	92
FIGURA 44 – MÉDIAS DOS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm PARA O CRESCIMENTO DA CONCENTRAÇÃO DA BIOMASSA, CALOR METABÓLICO E POROSIDADE	93

FIGURA 45 – MÉDIAS DOS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm PARA O CALOR DE EVAPORAÇÃO E PARA A UMIDADE DO AR E DO SUBSTRATO, NA SIMULAÇÃO DO CULTIVO.	95
FIGURA 46 – TEMPERATURA DOS TERMOPARES INDIVIDUAIS PARA A SIMULAÇÃO DO CULTIVO.	96

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – PARÂMETROS DE AJUSTE DAS EQUAÇÕES DAS ISOTÉRMAS PARA FT, BC E SOJA.....	46
TABELA 2 – PARÂMETROS DAS PARTÍCULAS E DO LEITO FT/BC 9:1 EM FUNÇÃO DO TEOR DE UMIDADE EM BASE ÚMIDA (MC).....	51
TABELA 3 – PARÂMETROS PARA O LEITO POROSO E PARA O GRÃO DE SOJA EM FUNÇÃO DO TEOR DE UMIDADE EM BASE ÚMIDA (MC).....	51
TABELA 4 – POSIÇÃO DOS TERMOPARES: AS POSIÇÕES EM Y ESTÃO NA MESMA ORDEM QUE OS NOMES DOS TERMOPARES NO CABEÇALHO.....	54
TABELA 5 – CONDIÇÕES INICIAIS DOS EXPERIMENTOS MODELO EM FES. ...	57
TABELA 6 – CONDIÇÕES PARA O CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE RESISTÊNCIA VISCOSA (1/K) DOS EXPERIMENTOS COM SUBSTRATO DE FT/BC 9:1 E DE GRÃOS DE SOJA.	59
TABELA 7 – DESCRIÇÃO DAS CONFIGURAÇÕES DE SIMULAÇÃO.	64
TABELA 8 – CONDIÇÕES INICIAIS E PARÂMETROS PARA A SIMULAÇÃO DO CULTIVO DE FES COM CRESCIMENTO DE BIOMASSA	86

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	18
2.1	FERMENTAÇÃO EM ESTADO-SÓLIDO	18
2.1.1	Desafios para o aumento de escala de produção na fermentação em estado sólido	20
2.1.2	Biorreatores de Fermentação em Estado Sólido	23
2.2	FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.....	25
2.2.1	Discretização utilizando o método de volumes finitos.....	27
2.2.2	Geração de malhas.....	28
3	REVISÃO DA LITERATURA.....	29
3.1	MODELOS PREDITIVOS PARA FES	29
3.2	APLICAÇÕES RELACIONADAS E O POTENCIAL DO CFD PERANTE A FES	30
3.2.1	Aplicações relacionadas existentes do CFD na FES.....	31
3.2.2	Potenciais aplicações do CFD na FES	33
3.2.2.1	Na escala microscópica.....	33
3.2.2.2	Na escala mesoscópica.....	33
3.2.2.3	Na escala macroscópica	35
4	MATERIAIS E MÉTODOS	39
4.1	ETAPAS DA PESQUISA	39
4.2	EQUACIONAMENTO	41
4.2.1	Balanço de massa para a água na fase gasosa	41
4.2.2	Balanço de energia da fase gasosa.....	42
4.2.3	Balanço de massa para a água na fase sólida	42
4.2.4	Balanço de energia da fase sólida	43
4.2.5	Produção de Biomassa	44
4.2.6	Balanço de sólidos secos	45
4.2.7	Isotermas e umidade relativa da fase sólida.....	45
4.2.8	Atividade da água na fase gasosa.....	47
4.2.9	Coeficiente de Transferência de massa.....	48

4.2.10	Coeficiente de Transferência de calor	48
4.3	OBTENÇÃO DE PARÂMETROS	48
4.3.1	Coeficientes de resistência de escoamento.....	49
4.4	DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES DOS LEITOS POROSOS	49
4.5	SIMULAÇÕES	51
4.5.1	Geometria do biorreator	52
4.5.2	Testes de malha	56
4.5.3	Configurações de simulação.....	56
5	ANÁLISE DE RESULTADOS E APLICAÇÃO DO MODELO PREDITIVO	58
5.1	MANIPULAÇÃO DO MODELO PREDITIVO	58
5.2	PERDA DE CARGA E COEFICIENTES DE RESISTÊNCIA DO LEITO ..	59
5.3	TESTES DE MALHA	60
5.4	SIMULAÇÕES	63
5.4.1	Configurações de simulação.....	63
5.4.2	Simulação das fases iniciais do experimento com FT/BC 9:1 e leite homogêneo	64
5.4.3	Simulação das fases iniciais do experimento com FT/BC 9:1 e leite heterogêneo.....	70
5.4.4	Simulação das fases iniciais do experimento com grãos de soja e leite homogêneo	80
5.4.5	Simulação da dinâmica de crescimento fúngico no experimento com FT/BC 9:1 com distribuição de esporos e porosidade de leite heterogêneos	86
6	CONCLUSÕES.....	98
	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	100
	REFERÊNCIAS.....	101
	ANEXO.....	109

LISTA DE ABREVIATURAS

BC – Bagaço de cana

CFD – Fluidodinâmica Computacional

DDF – Discretização por diferenças finitas

DEF – Discretização por elementos finitos

DVF – Discretização por volumes finitos

FES – Fermentação em estado sólido

FT – Farelo de trigo

FT/BC 9:1 – Farelo de trigo e bagaço de cana na proporção 9:1 (m/m)

MC – Teor de umidade (base úmida)

ProBio – Laboratório de Desenvolvimento e Otimização de Processos Bioquímicos

TC – Transferência de calor

TM – Transferência de massa

TS – Passo de tempo

UDF – *User defined function*

UFPR – Universidade Federal do Paraná

1 INTRODUÇÃO

A fermentação em escala industrial desempenha um papel bastante importante nas indústrias químicas, alimentícias, farmacêuticas e alcooleiras. Quase na sua totalidade os processos são baseados na fermentação submersa, que já foi muito estudada e tem-se um razoável domínio técnico que envolve o conhecimento de parâmetros, modelagens e estratégica de controle bem desenvolvidas. Neste contexto, a fermentação em estado sólido (FES) se apresenta como alternativa e demonstra grande potencial devido a uma maior produtividade volumétrica e menores custos de operação.

Apesar do crescente interesse acerca da FES, existem grandes desafios para que esta rota de produção seja aplicada em grandes escalas. Em comparação à fermentação submersa, a FES apresenta baixas condutividades térmicas e baixos teores de água livre no substrato sólido e, como consequência, grandes dificuldades na dissipação do calor metabólico do fungo e na manutenção dos níveis ideais de umidade no leito. Ao mesmo tempo, a homogeneização do substrato muitas vezes é um desafio devido à alta sensibilidade dos fungos filamentosos aos estresses gerados pela agitação mecânica do leito.

Com tamanhas e variadas dificuldades, apela-se ao máximo a buscar as melhores condições de operação e estratégias de controle para viabilizar a aplicação da FES a grandes produções. No entanto, corridas de fermentação para obtenção de parâmetros e testes de diversas condições e estratégias de operação para a larga escala são demasiadamente caras e demoradas. Além disso, as fermentações em colunas de escala laboratorial não reproduzem as condições de operação dos grandes biorreatores. Devido a isto, os modelos matemáticos e as simulações computacionais tornam-se ainda mais importantes nesta busca.

Alguns autores (CALÇADA, 1998; von MEIEN e MITCHELL, 2002) desenvolveram modelos matemáticos preditivos para a FES e de crescimento de fungos no substrato. Estes modelos preditivos consistem de sistemas de equações diferenciais que representam os balanços mássicos da água e energéticos para as fases gasosa e sólida do leito. Já os modelos de crescimento fúngico consistem de

equações da cinética da geração de biomassa, em função da atividade de água e da temperatura no sólido e no gás.

O modelo de von Meien e Mitchell (2002) já foi aplicado e forneceu boa representatividade dos fenômenos reais (MARQUES, 2005; de LIMA, 2009), apesar de algumas inadequações presentes. Por exemplo, os parâmetros da equação de cinética de crescimento específica em função da atividade de água (μ_w) foram obtidos para o fungo *Aspergillus niger* e *Rhizopus oligosporus*, espécies diferentes da utilizada nos experimentos de Lima (2009) e Marques (2005). Além disto, o modelo original se baseia na isoterma de dessorção dos grãos de milho, diferentemente do substrato utilizado por Lima (2009), que foi uma mistura de farelo de trigo e soja. Devido à escassez de parâmetros relacionados à FES na literatura, as pesquisas desta área devem se valer dos poucos dados existentes ou dispender esforços para os próprios levantamentos experimentais.

As técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) estão cada vez mais acessíveis devido à alta capacidade de processamento dos computadores pessoais, e sua aplicabilidade é extremamente ampla. Contudo, não se encontra na literatura nenhuma aplicação do CFD em sistemas de fermentação em estado sólido. Como diferencial em relação à aplicação isolada dos modelos matemáticos existentes, o uso do CFD apresenta a vantagem de prever possíveis gradientes de temperatura e de transferência de massa radiais gerados pela geometria complexa do sistema. Ou seja, além dos gradientes axiais usualmente previstos pelos modelos, gradientes radiais podem existir dependendo da distribuição da vazão da fase gasosa, que pode variar em relação à geometria do biorreator, o que pode tornar o leito bastante não homogêneo com relação à temperatura e à umidade. Por isso o CFD permite o estudo de diferentes geometrias do biorreator e sua influência no desempenho da operação e cultivo. Além disso o *software* permite a visualização e análises dos gradientes e fluxos em 3D de forma muito facilitada, permitindo análises mais avançadas assim como apresentações diferenciadas dos resultados.

Portanto, no presente trabalho, ver-se-á a primeira aplicação do potencial de simulação de fluidodinâmica dos *softwares* de CFD em um leito poroso de FES, a ser relatado na literatura. Além disto, levar-se-á em consideração, não só a dinâmica do fluxo em meios porosos, mas também o “não equilíbrio” térmico e de concentrações de água entre as fases sólida e gasosa, a geração de calor e água metabólicos, o

crescimento da biomassa e a variação da permeabilidade do leito ao longo do tempo. Tais considerações são regidas pelos modelos matemáticos existentes, já mencionados, e são manualmente incluídas no *software* comercial de fluidodinâmica computacional ANSYS Fluent® 16.0, por meio de UDF's (*User Defined Functions*). As UDF's são funções definidas por usuário que consistem de códigos de programação em linguagem C++ e permitem a adição de equacionamentos e relações lógicas para simular novos fenômenos.

Desta forma, pretende-se desenvolver um meio robusto e confiável de testar condições de operação e estratégias de controle para produções de larga escala em biorreatores de fermentação em estado sólido, baseado na ferramenta de CFD, enfim, contribuindo para a viabilidade desta nova rota de produção, cujos potenciais já foram constatados.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo aborda a teoria necessária para a compreensão da pesquisa e seus resultados apresentados nas seções seguintes. Na seção 2.1 encontram-se conceitos básicos sobre a fermentação em estado sólido (FES), desafios para o aumento de escala para processos de FES e de diferentes configurações de biorreatores de operação de larga escala. Já na seção 2.2, aborda-se a teoria básica da fluidodinâmica computacional (CFD) e do método de discretização de equações diferenciais por volumes finitos.

2.1 FERMENTAÇÃO EM ESTADO-SÓLIDO

Em um conceito bioquímico, a fermentação é um processo biológico anaeróbio de obtenção de energia na forma de ATP, utilizado por muitas espécies de fungos e bactérias (LOPES, 2006). Porém o termo “fermentação” tem uma diferente definição na literatura de estudo da produção de químicos como sendo “um cultivo controlado de organismos”, independente da presença do oxigênio (MITCHELL *et al.*, 2006).

Na fermentação submersa, os microrganismos são cultivados em uma fase líquida contínua e são utilizados os nutrientes necessários para sua multiplicação (de LIMA, 2009). Atualmente, ela é amplamente utilizada como método de processamento biológico para a produção de muitas biomoléculas, ingredientes alimentícios, materiais e fármacos. Por outro lado, ainda são poucas as aplicações industriais para a fermentação no estado sólido, apesar de estudos demonstrarem que, em determinados casos, ela pode ser igualmente ou mais útil e eficiente (OOSTRA *et al.*, 2001).

Houve um significativo aumento do interesse na tecnologia da fermentação em estado sólido (FES) voltado para a produção de enzimas, pigmentos, aromatizantes, etanol, ácidos orgânicos, resíduos enriquecidos para ração animal, antibióticos, entre outros. Frequentemente, os processos de FES envolvem o uso de subprodutos da agricultura e da indústria alimentícia que incluem: farelo de trigo, farelo de arroz, bagaço de maçã, bagaço de uva, bagaço de laranja, bagaço da cana de açúcar, casca

de banana, casca de frutas cítricas, palha de trigo, palha de arroz, polpas cítricas e outros. Também podem ser utilizados suportes inertes impregnados de soluções nutritivas, podendo os suportes serem naturais (ex.: bagaço de cana de açúcar) ou artificiais (ex.: espumas de poliuretano) (MITCHELL *et al.*, 2006).

Segundo Mitchell *et al.* (2006), a fermentação em estado-sólido envolve o crescimento de microrganismos, fungos filamentosos em sua maioria, em partículas sólidas úmidas, em situações em que os espaços entre as partículas contêm uma fase gás contínua e um mínimo de água visível como pode ser visualizado no esquema da FIGURA 1.

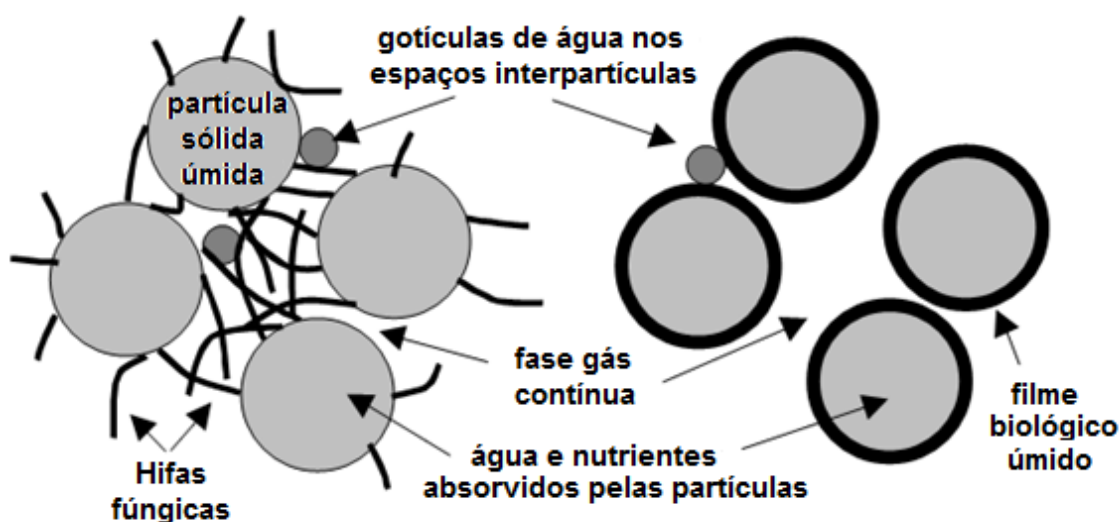


FIGURA 1 – FATORES QUE DEFINEM OS SISTEMAS DE FERMENTAÇÃO EM ESTADO-SÓLIDO (FES). O arranjo das partículas sólidas úmidas e a fase gasosa contínua envolvendo um fungo filamentososo (lado esquerdo) e um organismo unicelular (lado direito).

FONTE: ADAPTADO DE MITCHELL *et al.* (2006)

Segundo Viniegra-González (1997), a FES apresenta importantes aspectos devido a algumas características físico-químicas do processo, como baixa atividade da água e gradientes de temperatura, nutrientes e produtos bastante significantes no meio. Nos processos de fermentação submersa a biomassa fica completamente mergulhada no meio líquido do cultivo, por esta razão este método permite que haja taxas de mistura e de condução de calor muito maiores que nos processos de FES. No entanto, para a FES a solubilidade e a difusão de oxigênio são superiores e a quantidade de água no meio é muito menor. Além disto, a FES possui outras vantagens se comparadas à fermentação submersa: os biorreatores geralmente

operam sem agitação contínua, reduzindo significativamente o custo energético do processo; a alta produtividade por unidade de volume; e, finalmente, a geração reduzida de resíduos que resulta menores custos de tratamento e impactos ambientais. (PÉREZ-CORREA; AGOSIN, 1999).

2.1.1 Desafios para o aumento de escala de produção na fermentação em estado sólido

Fungos filamentosos são obrigatoriamente aeróbios e necessitam de suprimento de oxigênio para crescerem. A oxidação do substrato pelo fungo produz calor que deve ser removido para evitar a elevação da temperatura a níveis que podem levar à morte do microrganismo. Potencialmente, leitos de substratos sólidos podem ser aerados e resfriados com o uso do fluxo forçado de ar úmido (MITCHELL *et al.*, 2000b; NAGEL *et al.*, 2001; von MEIEN *et al.*, 2004). Segundo von Meien *et al.* (2004), a dificuldade da remoção do calor gerado pelas atividades biológicas tem sido o fator limitante na operação de fermentações no estado sólido com grandes leitos porosos e até este problema ser superado, a FES se limitará a pequenas escalas. O resfriamento dos biorreatores de FES pode ser promovido pela agitação do leito, porém a maioria dos processos de FES envolve fungos filamentosos que são sensíveis às tensões de cisalhamento geradas pela agitação contínua (MITCHELL *et al.* 2000a).

Mitchell e von Meien (2000c) afirmam que biorreatores de agitação intermitente se mostram como uma solução promissora. A agitação intermitente, com longos intervalos entre eventos de agitação, resultará no rompimento das hifas que se estendem entre as partículas durante os períodos estáticos (MITCHELL *et al.*, 2000c). No entanto, mesmo optando por esta alternativa, a manutenção da temperatura e da umidade no leito sólido e das concentrações de oxigênio nos valores ideais para uma atividade metabólica ótima não é uma tarefa simples (MITCHELL e von MEIEN, 2000c). Isto devido à formação de gradientes axiais e radiais no leito nos períodos de operação estática. Este é um problema para as grandes escalas, porém para escalas de laboratório os leitos são finos o suficiente para que camisas de resfriamento ou banhos os resfriem. Já, o uso de camisas de resfriamento em biorreatores de leito fixo

industriais não é uma estratégia vantajosa, uma vez que a remoção de calor será eficiente somente nos 10 a 20 cm de leito mais próximos da parede do biorreator (MITCHELL *et al.*, 2000a).

A aeração forçada tem a função de fornecer oxigênio e remover o dióxido de carbono e o calor gerados no processo (SHOJAOSADATI; BABAEIPOUR, 2002). Além disso, as únicas maneiras eficientes de remoção do calor é a convecção e a evaporação para a corrente de ar. Entretanto, a vazão do ar deve ser controlada, pois, se for baixa, gradientes significativos de temperatura axial podem ser formados, elevando a temperatura de saída para valores que são deletérios para o microrganismo (GHILDYAL *et al.*, 1994; ASHLEY *et al.*, 1999).

Os gradientes de temperatura permitem que haja evaporação da umidade no leito mesmo com o uso do ar saturado inicialmente (MITCHELL *et al.* 2000b). O transporte de água, o suprimento de ar e a remoção de calor estão correlacionados: as taxas de aeração são geralmente determinadas pela necessidade de remoção de calor e não pela do suprimento de oxigênio, e a evaporação da água do leito para a fase gasosa pode secar o substrato se não houver reidratação durante a fermentação (MITCHELL *et al.*, 2000a). Mitchell *et al.* (2000a) também lembram que, se há a necessidade de adicionar água ao leito durante a fermentação, o substrato deve ser hidratado de forma uniforme, e a homogeneidade só pode ser alcançada por meio de agitação contínua ou intermitente. Porém, se o microrganismo não tolerar agitação, essa homogeneidade é impossível de ser alcançada. Ashley *et al.* (1999) reforçam que, apesar dos leitos móveis oferecerem maior homogeneidade térmica ao sistema, não são recomendados quando os agentes fermentadores são fungos filamentosos, pois podem ocasionar o rompimento do micélio, prejudicando a atividade microbiana e comprometendo a produtividade do processo.

Segundo Mitchell *et al.* (2000a), os gradientes térmicos ao longo do biorreator são mais importantes que os gradientes de concentração de gases. O crescimento e a formação do produto são sensíveis a desvios da temperatura ótima, enquanto grandes variações nos níveis de oxigênio e de dióxido de carbono ocorrem frequentemente sem grandes efeitos no desempenho do processo. Porém, a dificuldade no controle da temperatura do leito é um dos maiores problemas enfrentados em escala industrial, podendo ocorrer superaquecimento do meio,

afetando as cinéticas de crescimento e de morte dos microrganismos (MITCHELL *et al.*, 2000b).

O objetivo de um sistema de controle de um biorreator de FES é tipicamente manter a temperatura do leito e o teor de água em valores que proporcionem o crescimento e a formação de produtos em níveis ótimos (FERNANDEZ *et al.* 1996). As variáveis de operação que podem ser manipuladas para a obtenção destes níveis ideais são, dependendo do projeto do biorreator, a temperatura, vazão do gás e umidade do ar de entrada, e variáveis associadas com a agitação, como a frequência e intensidade da mesma. Também é possível manipular a temperatura e a vazão do fluido de arrefecimento de camisas ou placas de resfriamento, caso façam parte do biorreator. Além disto, as variáveis de estado do leito que podem ser medidas *on-line* e podem ser prontamente utilizadas são temperaturas e concentrações de oxigênio e dióxido de carbono nos gases de saída (MITCHELL *et al.*, 2000a). Porém, o grau de controle que se pode obter com os sistemas de controle mencionados é limitado devido à complexidade dos fenômenos que ocorrem em biorreatores de FES: a vazão de ar e as umidades podem ser controladas para influenciar a temperatura do leito, mas isto também afeta o teor de água no substrato (MITCHELL *et al.*, 2000a).

Não é possível definir *a priori* uma boa estratégia de controle para biorreatores de FES intermitentemente agitados. Ademais, qualquer que seja a estratégia proposta, é preciso que se customize o algoritmo de controle, estabeleça um critério “gatilho” para os eventos de mistura e calcule quanta água deve ser reabastecida ao leito. Estes parâmetros podem ser obtidos experimentalmente, porém para biorreatores de larga escala, isto consome muito tempo e recursos financeiros, o que impede o teste de muitas estratégias. Além disso, como boas estratégias de controle ainda não foram desenvolvidas, é muito difícil que se obtenha corridas de fermentação que possam ser reproduzidas. Como uma alternativa, muitas estratégias de controle podem ser testadas e boas estimativas dos parâmetros podem ser obtidas por simulações computacionais. Estas simulações requerem modelos matemáticos confiáveis que descrevam as mudanças de temperatura e no teor de água nas fases gasosa e sólida. O modelo também deve descrever a influência da temperatura, umidade e agitação na cinética de crescimento, e deve considerar a heterogeneidade do leito, para reproduzir os gradientes térmicos e de umidade observados (von MEIEN *et al.*, 2004).

2.1.2 Biorreatores de Fermentação em Estado Sólido

Os biorreatores podem apresentar alguns dos recursos – que visam a manutenção da temperatura e umidade ideias do leito de substrato – descritos anteriormente, como: aeração forçada, pás ou lâminas para agitação do leito, camisa de resfriamento e sistema de monitoramento. Tais recursos estão esquematizados na FIGURA 2, instalados em um biorreator de larga escala, de leito fixo suportado por uma placa perfurada. A ilustração (FIGURA 2) apresenta um desenho esquemático, pois, não necessariamente, todos biorreatores apresentarão todos os tais recursos. O biorreator representado, conta com um sistema de agitação que gira em dois eixos distintos, que visa homogeneizar o substrato com relação à temperatura e umidade. Também está ilustrado o sistema de monitoramento que pode representar termopares internos ao leito poroso, que geram perfis de temperatura ao longo da altura, ou podem monitorar as concentrações de oxigênio e/ou dióxido de carbono da fase gasosa.

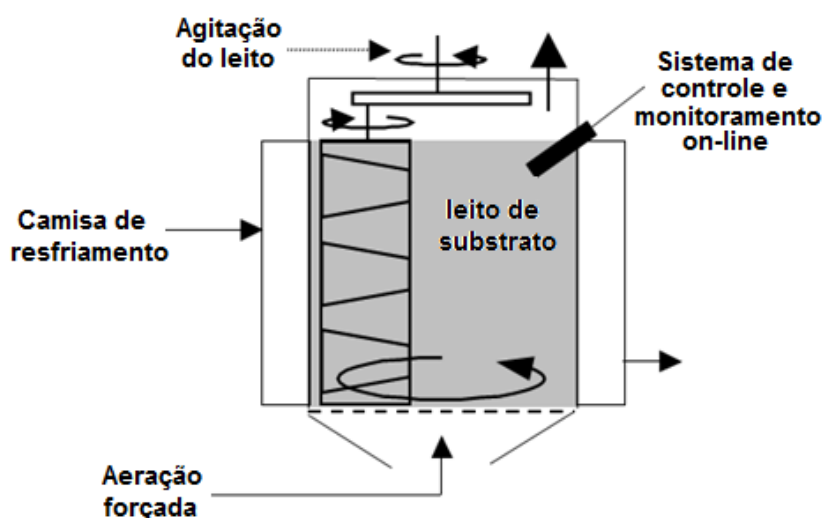


FIGURA 2 – DIAGRAMA GENERALIZADO DE UM BIORREATOR DE FES.

FONTE: ADAPTADO DE MITCHELL *et al.* (2006)

Os autores Mitchell *et al.* (2006) descrevem as duas principais funções de um biorreator de FES, como:

- Suportar o leito de substrato e prover uma barreira contra a perda do microrganismo para o exterior e a contaminação deste por fontes externas;

- Prover e controlar da melhor forma possível as condições ideais do substrato, como a temperatura e a atividade de água, nos valores ótimos para o crescimento do fungo e formação do produto.

Os biorreatores de fermentação no estado sólido podem ser classificados de acordo com os regimes de agitação e aeração (MITCHELL *et al.*, 2000a). Um quadro que exemplifica os quatro principais tipos baseados nas características de agitação e aeração pode ser observado na FIGURA 3.

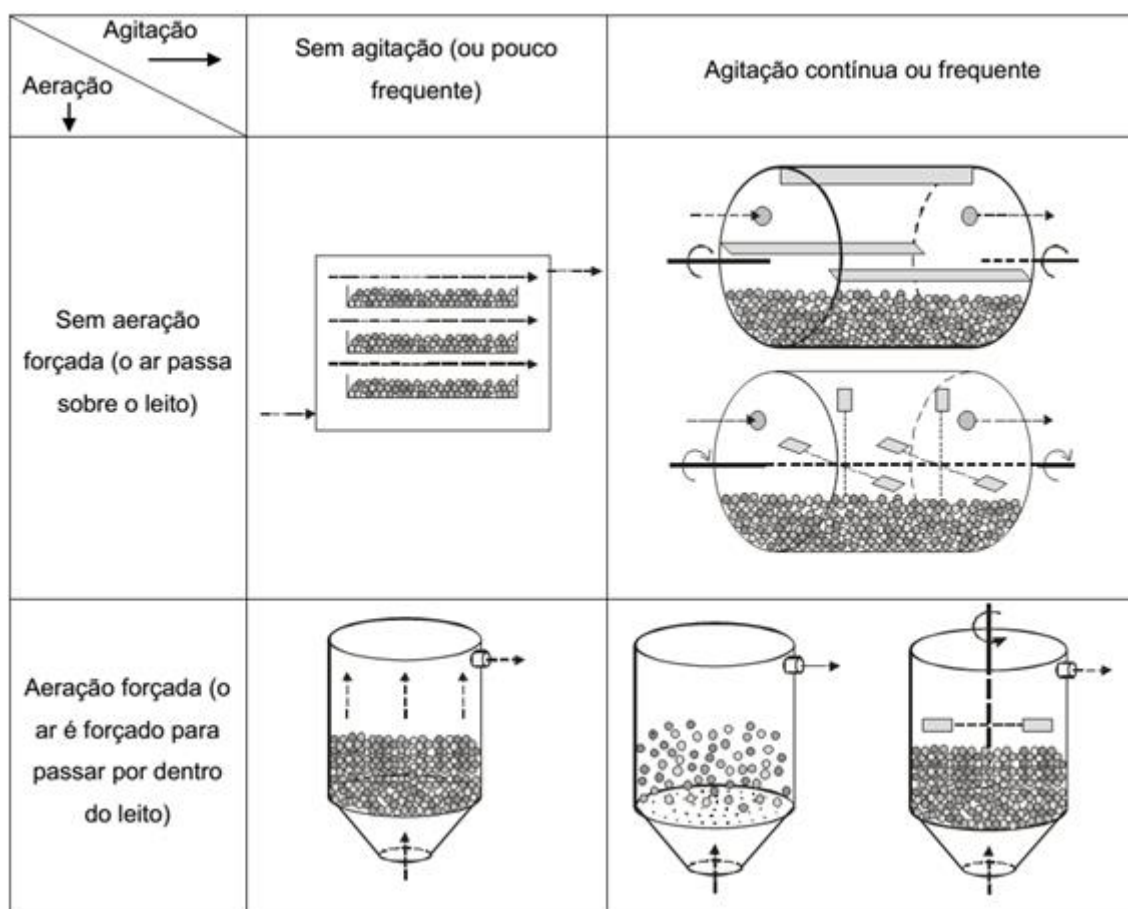


FIGURA 3 – ILUSTRAÇÃO DOS QUATRO PRINCIPAIS TIPOS DE REATORES CLASSIFICADOS DE ACORDO COM AS FORMAS DE AGITAÇÃO E AERAÇÃO.

FONTE: ADAPTADO DE MITCHELL *et al.* (2000a) *apud* de LIMA (2009)

2.2 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

A fluidodinâmica computacional (CFD) é o ramo da fluidodinâmica que permite simular fluxos reais através de soluções numéricas das equações que regem o fenômeno. Apesar das equações da fluidodinâmica de Navier-Stokes serem conhecidas a mais de 150 anos, o desenvolvimento de formas reduzidas dessas equações ainda é uma área de pesquisa a ser explorada (SAYMA, 2009).

Aplicando as leis fundamentais da mecânica para os fluídos obtêm-se as equações da conservação de massa, de momento que juntamente às equações de conservação de energia formam um sistema de equações diferenciais parciais acopladas e não lineares. Não é possível resolver estas equações analiticamente, para a maioria dos problemas de engenharia. No entanto, é possível obter soluções computacionais aproximadas para uma grande variedade destes problemas com a ajuda do CFD (RAY, BHASKARAN e COLLINS, 2012).

Para Sayma (2009), o propósito de uma simulação é descobrir como o fluxo se comporta em um dado sistema para um conjunto de condições de entrada e saída, no caso, as condições de contorno. De acordo com Ray *et al.* (2012) a estratégia do CFD é, basicamente, substituir o domínio contínuo de um problema por um domínio discreto, montando uma malha. Enquanto no domínio contínuo, cada variável de fluxo está definida em todo ponto do domínio, no discreto as variáveis se encontram apenas nos pontos nodais da malha. Os valores das variáveis nos outros locais são determinados por interpolações dos valores dos nós próximos. Desta forma, também pode-se aproximar as variáveis comuns do domínio contínuo a variáveis discretas. O sistema discreto é um grande conjunto de equações algébricas acopladas nas variáveis discretas. Então, a montagem e resolução de um sistema discreto gera um problema de inversão de matrizes solucionado por um grande número de cálculos. A FIGURA 4 ilustra o exemplo de uma malha para a resolução do fluxo de ar em um aerofólio.

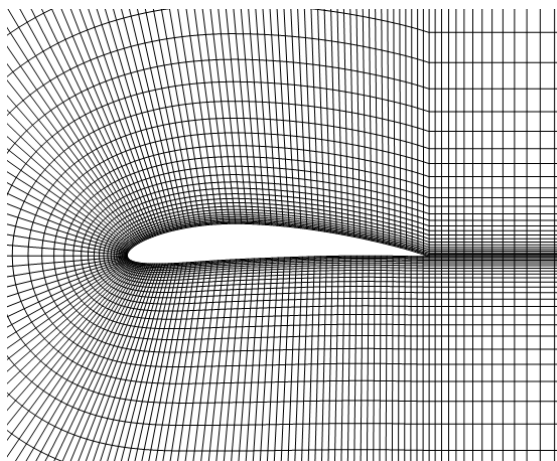


FIGURA 4 – MALHA ESTRUTURADA PARA SIMULAÇÃO DO FLUXO DE AR SOBRE UM AEROFÓLIO.

FONTE: RAY, BHASKARAN e COLLINS (2012)

Em essência, obtêm-se um sistema onde as incógnitas são todos os nós da malha. Se o fluxo for transiente, seja pelas condições de contorno variantes, ou por ser inerentemente transiente, o procedimento de cálculo é repetido em intervalos de tempo discretos para prever a evolução das variáveis de fluxo nos pontos nodais com o tempo (SAYMA, 2009). Como não existem métodos que resolvam as equações diferenciais envolvidas, de forma direta, uma alternativa seria transformá-las para formas menos complexas. Isso pode ser obtido com o uso das técnicas de discretização: diferenças finitas (DDF), volumes finitos (DVF) e elementos finitos (DEF) (JAMALEDDINE e RAY, 2010).

De forma geral, a vantagem básica da DVF sobre a DDF é a habilidade de cálculo sem a necessidade de uma malha estruturada (células hexagonais). Tanto a DVF quanto a DDF fornecem soluções discretas, enquanto a DEF fornece, até um ponto, soluções contínuas. Porém para DDF, as variáveis são alocadas nos centros de células ao invés dos pontos nodais. Além disso, tanto a DVF quanto a DDF são consideradas mais fáceis de se programar se comparadas à DEF (JAMALEDDINE e RAY, 2010).

A maioria com *softwares* comerciais de CFD utilizam os métodos de volumes finitos ou de elementos finitos que servem melhor para a modelagem de geometrias complexas. Por exemplo, o software ANSYS Fluent® se utiliza do método de volumes finitos, enquanto o ANSYS CFX® usa o método de elementos finitos (RAY, BHASKARAN e COLLINS, 2012).

2.2.1 Discretização utilizando o método de volumes finitos

Através da FIGURA 4 que ilustra o aerofólio, podem-se observar quadriláteros, que no método de volumes finitos, são denominados de “células”. Na abordagem dos volumes finitos, a forma integral das equações de conservação é aplicada ao volume de controle definido pela célula, para se chegar às equações discretas correspondentes. Por exemplo, a forma integral da equação da continuidade, para um fluxo estacionário e incompressível, é

$$\int_S \vec{V} \cdot \hat{n} \cdot dS = 0 \quad (1)$$

A integração é sobre a superfície S do volume de controle, \vec{V} é o vetor velocidade incidente sobre a superfície e \hat{n} é a normal externa à superfície. Fisicamente, a equação denota que o “saldo” do fluxo dentro do volume de controle é igual a zero (RAY, BHASKARAN e COLLINS, 2012). Sabendo que a velocidade na face i é tida como $\vec{V}_i = u_i \hat{i} + v_i \hat{j}$. Aplicando a equação (1) de conservação de massa para o volume de controle definido pela célula na FIGURA 5, tem-se que

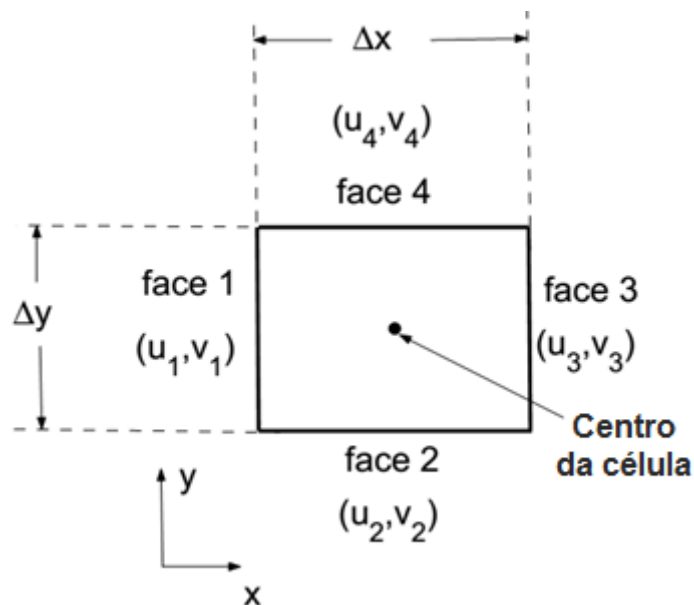


FIGURA 5 – CÉLULA RETANGULAR QUE DEFINE UM VOLUME DE CONTROLE.

FONTE: RAY, BHASKARAN e COLLINS, 2012.

Os pares de valores de velocidade e de vetores unitários (u_1 e \hat{i}) e (v_2 e \hat{j}) são referentes aos eixos x e y, respectivamente. A equação (2) é a forma discreta da equação da continuidade para a célula e é equivalente ao somatório do fluxo que atravessa o volume de controle igualado a zero, o que garante a conservação da massa na célula. Geralmente, os valores no centro da célula são determinados diretamente invertendo o sistema discreto. Os valores na face u_1 , v_2 , etc. são combinados pela interpolação dos centros de células nas células adjacentes. Enfim, similarmente se obtêm as equações discretas para a conservação de momento e energia para a célula (RAY, BHASKARAN e COLLINS, 2012). Em suma, o fato de que, a variação de qualquer quantidade dentro de um volume de controle depende somente dos valores dos fluxos nas suas superfícies, é a base da teoria de volumes finitos (SAYMA, 2009).

$$-u_1\Delta y - v_2\Delta x + u_3\Delta y + v_4\Delta x = 0 \quad (2)$$

2.2.2 Geração de malhas

O processo de discretização converte um sistema contínuo em um discreto, onde a malha necessita ser construída para que a solução aproximada se combine com os pontos nodais. De forma geral, existem dois tipos de malhas, caracterizadas pela conectividade entre seus pontos. Malhas estruturadas têm conectividades regulares, ou seja, cada ponto tem o mesmo número de vizinhos. Já nas malhas não estruturadas os pontos podem ter diferentes números de vizinhos entre si (SAYMA, 2009). Pode-se ver a diferença através da FIGURA 6.

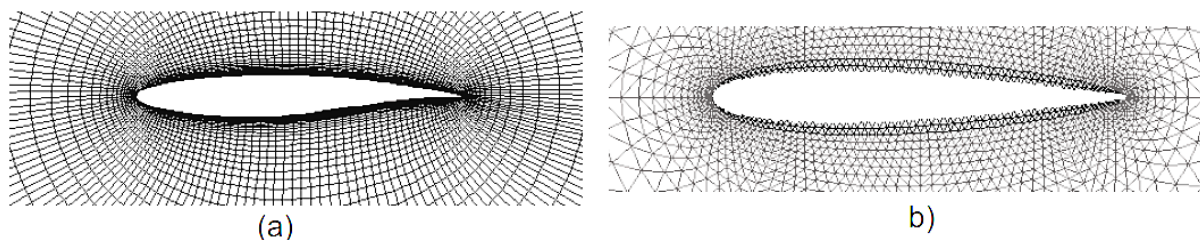


FIGURA 6 – EXEMPLOS DE MALHA ESTRUTURADA (A) E NÃO ESTRUTURADA (B).

FONTE: ADAPTADO DE SAYMA (2009).

3 REVISÃO DA LITERATURA

Neste capítulo apresenta-se uma revisão das pesquisas publicadas mais relevantes para o presente trabalho. Primeiramente a seção 3.1, relata alguns dos principais modelos matemáticos utilizados para descrever o processo de fermentação em estado sólido, com aeração forçada e leitos não agitados. A seção seguinte (3.2), detalha o equacionamento e valores base para a determinação das propriedades do leito poroso de FT/BC 9:1 e de grãos de soja. Finalmente, na seção 3.3, aborda-se trabalhos que envolvem a simulação por CFD de processos correlacionados com a FES.

3.1 MODELOS PREDITIVOS PARA FES

Primeiramente Calçada (1998) apresenta um modelo preditivo de secagem de leitos porosos. O modelo consiste de um sistema de equações diferenciais parciais dos balanços mássicos de água e de energia, tanto para a fase gasosa quanto para a sólida do leito. O sistema foi discretizado parcialmente pelo método das linhas, e se apresenta da seguinte forma:

$$G \cdot \frac{\partial \varphi_g}{\partial z} = K_s a (\varphi_s - \varphi_s^*) \quad (3)$$

$$G(C_{p_{ar}} + \varphi_g \cdot C_{p_v}) \frac{\partial T_g}{\partial z} = -ha(T_g - T_s) \quad (4)$$

$$(1 - \varepsilon)\rho_s \frac{\partial \varphi_s}{\partial t} = -K_s a \cdot (\varphi_s - \varphi_s^*) \quad (5)$$

$$(1 - \varepsilon)\rho_s(C_{p_s} + C_{p_1} \cdot \varphi_s) \frac{\partial T_s}{\partial t} = ha(T_g - T_s) - K_s a \cdot (\varphi_s - \varphi_s^*) \quad (6)$$

As equações de número 3 até 6 representam, respectivamente, o balanço de massa e de energia para a fase gasosa e o balanço de massa e energia para fase sólida. Vale esclarecer que a equação 4 é uma simplificação baseada em estudos preliminares que demonstram que a energia sensível cedida pelo gás para aquecer o

vapor liberado pelo leite é muito inferior ao calor consumido para o aquecimento dos sólidos. A equação original era da forma da equação (7):

$$G(C_{p_{ar}} + \varphi_g \cdot C_{p_v}) \frac{\partial T_g}{\partial z} = -ha(T_g - T_s) - \frac{C_{p_v}}{2} K_s a (\varphi_s - \varphi_s^*) (T_g - T_s) \quad (7)$$

Algum tempo depois von Meien e Mitchell (2002) propuseram um modelo preditivo específico para fermentação no estado-sólido. O estudo foi feito sobre o cultivo de *Aspergillus niger* sobre milho em um biorreator de leito fixo, com aeração forçada e agitação intermitente. Até o momento da publicação de von Meien e Mitchell (2002), nenhum estudo havia levado em consideração o não equilíbrio entre as duas fases (sólida e gasosa) no leito sólido, inclusive, em sua maioria os trabalhos não consideravam o balanço de água ou o faziam de forma muito simplificada (von MEIEN e MITCHELL, 2002).

Neste novo modelo foram adicionadas equações para o consumo de substrato, para a produção de biomassa e velocidades específicas de crescimento, e as equações de balanço foram adaptadas para descrever melhor a dinâmica da FES.

3.2 APLICAÇÕES RELACIONADAS E O POTENCIAL DO CFD PERANTE A FES

Até o ano de 2015, não se encontra nenhuma publicação na literatura disponível que relacione a fluidodinâmica computacional com a fermentação no estado sólido, áreas de pesquisa nas quais o presente trabalho está envolvido. No entanto, pode-se encontrar muitos trabalhos que se utilizam do CFD para a simulação e compreensão de sistemas de secagem, muitos deles com o uso de leitos fluidizados (RANJBARAN e ZARE, 2012; JANG e ARASTOPOUR, 2013). Há um, contudo, que estuda a secagem de um leito fixo poroso (PRUKWARUN *et al.*, 2013). Estes casos de processos de secagem têm em comum com o presente trabalho, o fenômeno da transferência de massa da água, presente nas partículas sólidas, para a fase gasosa através da evaporação.

Além disto, esta interdisciplinaridade é inédita na literatura e, por isto, ainda não há uma análise do potencial oferecido pelo CFD quando aplicado aos fenômenos da FES e às suas operações de cultivo. Nesta revisão de literatura, buscaram-se

exemplos de trabalhos voltados à FES que poderiam se aproveitar da capacidade da fluidodinâmica computacional para obter melhores resultados e conclusões. O CFD poderia ser utilizado para a modelagem da FES em todas as suas escalas: na microscópica, que concerne aos fenômenos intracelulares em regiões determinadas da hifa (GORIELY e TABOR, 2008), onde os transportes citoplasmáticos de massa e convectivos governam e explicam o desenvolvimento do fungo; na mesoscópica, que analisa um micélio inteiro e até interações entre micélios diferentes (BOSWELL e DAVIDSON, 2012), onde se poderia observar a influência de cada estrutura do fungo no fluxo gasoso e nos fenômenos de transporte do meio; e, por final, na macroscópica que permite a determinação de parâmetros e comportamentos de forma global, assim como verificar as heterogeneidades e gradientes gerados em toda a extensão do leito de cultivo.

3.2.1 Aplicações relacionadas existentes do CFD na FES

Segundo Jamaledine e Ray (2010), o CFD se mostrou como uma eficiente ferramenta computacional para a predição de comportamentos de fluxos e de fenômenos de transferência de massa ocorrendo em sistemas multicomponentes com uma ou mais fases. Nos últimos anos o CFD tem sido usado cada vez mais frequentemente para melhorar projetos e aumentos de escala dos processos de secagem. O uso do CFD na obtenção de informações para o projeto de reatores, aumentos de escala e otimização tem atraído uma atenção considerável (DEYPERE *et al.*, 2004; LI *et al.*, 2010 *apud* JANG e ARASTOPOUR, 2014). No entanto, de acordo com Ranjbaran e Zare (2012) pacotes comerciais de CFD têm algumas desvantagens em simulações de secagens de materiais granulares. Poucas correlações são fornecidas nestes pacotes, e a representação das transferências de massa para a umidade acaba requerendo UDFs (funções definidas pelo usuário), que tornam os processos de codificação e compilação demorados.

O trabalho de Prukwarun *et al.* (2013) utilizou o *software* ANSYS Fluent® 14.0, e relata algumas das estratégias utilizadas para a simulação da secagem de um leito fixo poroso composto de longan (fruta típica da Ásia oriental). Primeiramente, o autor considerou o leito de partículas como um volume poroso uniforme em que as

propriedades físicas do leito (porosidade e coeficientes de resistência ao fluxo) são iguais para qualquer ponto interno ao leito. Esta consideração teve o objetivo de reduzir o número de cálculos e o tempo de convergência, já que, simular o fluido através de um leito fixo com a geometria detalhada de empacotamento, exigiria uma grande capacidade computacional para reduzir o longo tempo de processamento. Além disto, a placa perfurada, abaixo do leito, foi considerada como uma parede porosa (*porous jump*) em que sua resistência ao fluxo era idêntica em qualquer região da placa. Os coeficientes viscosos do leito foram estimados, pela equação de Ergun (Equação 8) e Forchheimer (Equação 9), através dos dados experimentais de perda de carga e de velocidade do ar, previamente obtidos.

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{\mu(1 - \varepsilon^2)}{d_p^2 \varepsilon^3} v_s + 1,75 \frac{\mu(1 - \varepsilon)}{d_p \varepsilon^3} v_s^2 \quad (8)$$

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{\mu}{K} v_s + \rho C_2 v_s^2 \quad (9)$$

Na equação de Ergun, $\Delta P/L$ é a perda de carga por altura de leito, μ a viscosidade do ar, ε é a porosidade do leito, d_p é o diâmetro de partícula, v_s é a velocidade superficial do fluxo gasoso. Na equação de Forchheimer, $1/K$ é o coeficiente de resistência viscosa, C_2 o de resistência inercial, e ρ é a densidade do fluido.

Prukwarun *et al.* (2013) declararam que não houve diferenças entre a perda de carga determinada pelas simulações e a calculada através da equação de Ergun. Também constataram, através das simulações, que a placa perfurada não foi eficiente na distribuição do fluxo de ar quente, e que o próprio leito poroso desempenhou melhor este papel. O *software* de CFD permitiu que realizassem análises de eficiência térmica e de linhas de velocidade de fluxo para diferentes configurações do equipamento. Além disso, admitem que a evaporação da água interna aos frutos é importante para a distribuição da temperatura e da umidade no leito, porém requer a inclusão do modelo matemático do fenômeno através de UDFs. Contrariando o fato do trabalho ser voltado à secagem, Prukwarun *et al.* (2013) não apresentam quaisquer modelos ou parâmetros utilizados para a simulação da evaporação da água.

3.2.2 Potenciais aplicações do CFD na FES

Esta seção pretende explicar e dar exemplos de possíveis aplicações da fluidodinâmica computacional na fermentação em estado sólido. O raciocínio é organizado com base nas três diferentes escalas de tamanho exploradas para a compreensão dos fenômenos envolvidos na FES: microscópica, mesoscópica e macroscópica.

3.2.2.1 Na escala microscópica

Dentro do ramo biológico há trabalhos na literatura voltados à compreensão dos fenômenos intracelulares das hifas fúngicas, principalmente no que concerne à morfologia das suas extremidades (BALMANT, 2013; RIQUELME *et al.*, 2007). O melhor entendimento da dinâmica citoplasmática e metabólica do fungo possibilita uma descrição mais precisa do sistema de fermentação em estado sólido. Sabendo que os fluxos convectivos do citoplasma são o fenômeno de transporte de maior peso no meio intracelular pode-se imaginar possíveis aplicações do CFD para a representação destas condições de fluxo microscópico.

3.2.2.2 Na escala mesoscópica

Ainda pouco se compreende das influências do crescimento de fungos filamentosos sobre a morfologia do leito. Há poucos trabalhos na literatura voltados à investigação das variações de porosidade, permeabilidade e perda de carga do leito, geradas pela presença das hifas na superfície das partículas. E mesmo os poucos dados existentes acerca do assunto, quando comparados, tornam-se bastante inconclusivos.

Por exemplo, os artigos de Casciotori *et al.* (2014), e Karimi *et al.* (2014) obtêm dados de porosidade ao longo do crescimento de fungos filamentosos (*Myceliophthora*

thermophila I-1D3b e *Aspergillus niger* PTCC 5010, respectivamente). Quando há o crescimento de um fungo em um substrato, os espaços vazios entre as partículas são ocupados pelos micélios e hifas, fazendo com que a redução da porosidade do meio seja a conclusão mais direta sobre o resultado deste processo. Entretanto, Casciatori *et al.* (2014) relatam uma manutenção da porosidade ao longo dos seis dias de cultivo, contrariando as primeiras expectativas. Além disto, Karimi *et al.* (2014) verificam uma variação da propriedade (de 51 a 76 %) ao longo do crescimento do fungo, porém a classificam como desprezível perante a variação provocada pela umidade. Deve-se levar em consideração o fato de se tratarem de espécies diferentes, de qualquer forma, a manutenção da porosidade ou seu aumento, como consequência do aumento de biomassa no sistema, são comportamentos inesperados e ainda incompreendidos, principalmente quando o crescimento do fungo está associado à elevação da perda de carga do leito.

Os dados de perda de carga existentes na literatura são mais abundantes, no entanto há muita variabilidade entre as condições experimentais e a comparação entre os trabalhos existentes (CASCIA TORI *et al.*, 2014; KARIMI *et al.*, 2014; AURIA *et al.*, 1995; PIEDRAHÍTA-AGUIRRE *et al.*, 2014) também é pouco conclusivo. As condições do cultivo como, composição, compactação e umidade do substrato, espécie do micro-organismo e seu estágio de desenvolvimento, relação entre a largura do leito e o diâmetro de partícula e velocidade do gás utilizada na aeração forçada podem gerar valores de perda de carga por unidade de comprimento de leito com diferenças de até três ordens de grandeza.

Por exemplo, Piedrahíta-Aguirre *et al.* (2014) encontram valores de perda de carga para um leito de soja na faixa de 250 até 550 Pa/m para uma velocidade superficial de 6,8 mm/s, sem a presença de micro-organismos. Já, Karimi *et al.* (2014) determinam valores que variam entre 27.000 e 41.000 Pa/m para a velocidade de 4,2 mm/s em um leito de farelo de trigo, que representam a menor e a maior perda de carga no cultivo de *A. niger*. Casciatori *et al.* (2014) também estimam valores de 68 a 117 Pa/m para um leito de farelo de trigo sem a presença de fungo, com valores de velocidade entre 1,4 e 2,0 mm/s (ZANELATO *et al.*, 2012). Observa-se que o maior valor obtido por Casciatori *et al.* (2014) e o menor obtido por Karimi *et al.* (2014), aparentemente, foram medidas em condições muito próximas e, mesmo assim, diferenciam-se por duas ordens de grandeza.

Uma possível forma de melhor compreender quais são os efeitos da presença dos fungos filamentosos no leito de FES, seria reproduzir tais condições físicas com o uso do CFD. Construindo uma geometria de representação de poucas partículas e poucos micélios e impondo um fluxo gasoso através destes obstáculos, pode-se estimar qual a resistência ao fluxo gerada pelo meio. É possível, inclusive, simular os diversos níveis de desenvolvimento do fungo, variando a quantidade de hifas preenchendo o espaço vazio entre as partículas. Então o efeito de resistência à passagem do fluxo gasoso poderia ser extrapolado para todo volume do leito e comparado com dados experimentais.

3.2.2.3 Na escala macroscópica

Provavelmente o maior potencial de aplicação do CFD reside na simulação dos mais diversos tipos de biorreatores já propostos. Os softwares de CFD são capazes de representar os fenômenos de transporte em geometrias complexas e inúmeras condições de operações distintas, se o sistema for bem modelado. Sabendo disso, a representação das condições de operação dos diversos biorreatores e a fácil visualização dos comportamentos resultantes poderia acelerar consideravelmente o processo de consolidação da FES na escala industrial. E isto pode ocorrer através do aumento da velocidade nas pesquisas na área, assim como da melhor apresentação de seus resultados gerados pelo advento do CFD como uma poderosa ferramenta de pesquisa.

Um exemplo da aplicabilidade do CFD em biorreatores de FES poderia ocorrer em trabalhos como o de Hardin *et al.* (2001) onde os autores modelam matematicamente o fluxo interno de gases e a troca de calor em um biorreator de tambor rotativo. Hardin *et al.* sugerem que o espaço vazio acima do leito, dentro do tambor, possuiria basicamente duas regiões de fluxo diferenciado. Uma delas consistiria em uma região cilíndrica que atravessaria o tambor no sentido axial, indo da entrada de gases até a saída. Esta região teria o comportamento de um fluxo pistonado, ou seja, que é perfeitamente homogêneo radialmente, mas não axialmente. Já as outras regiões no entorno do fluxo pistonado, inclusive a fase gasosa que permeia o leito, seriam “zonas mortas” de fluxo. Considerou-se que haveria trocas

térmicas e de massa entre ambas as regiões, limitadas à área de contato entre elas. Uma representação do modelo e das considerações físicas internas ao biorreator pode ser observada na FIGURA 7.

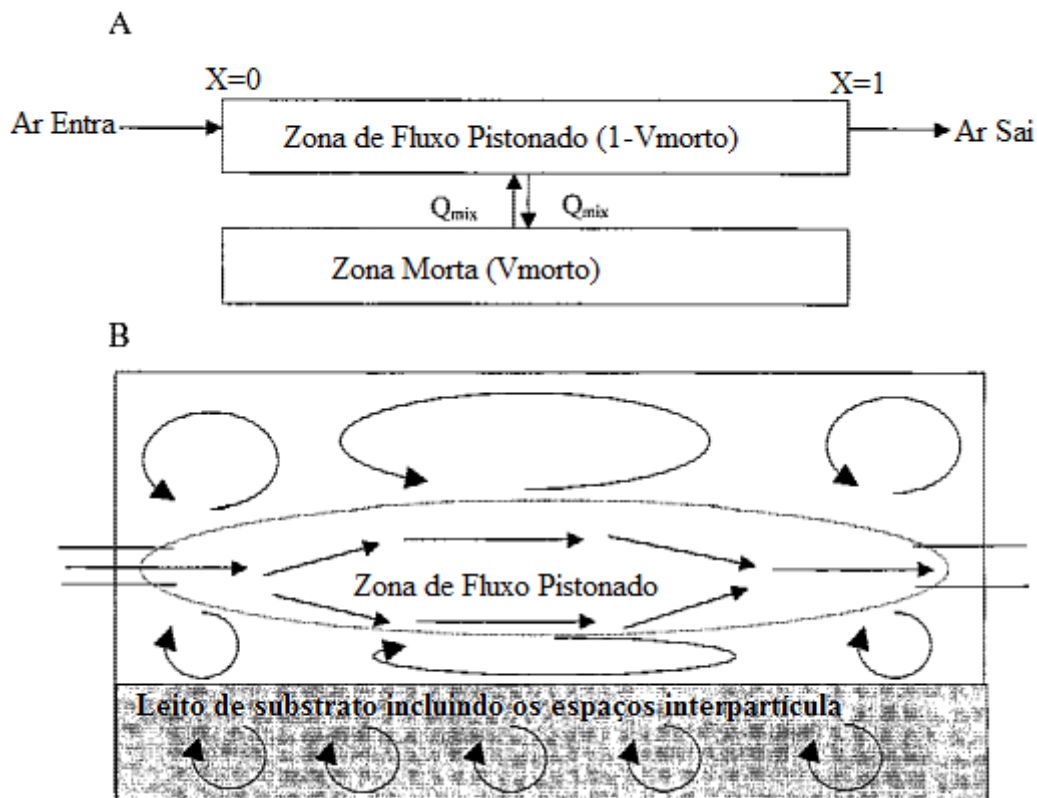


FIGURA 7 – (A) REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO MODELO. (B) POSSÍVEL REPRESENTAÇÃO FÍSICA DOS FLUXOS INTERNOS AO BIORREATOR.

FONTE: ADAPTADO DE HARDIN *et al.* (2001)

Apesar de tais considerações serem bastante razoáveis, os autores não verificaram uma boa concordância entre a curva obtida pelo modelo matemático e os dados experimentais de tempo médio de residência interno ao tambor. O gráfico com esta comparação pode ser visto na FIGURA 8.

O objetivo geral do trabalho de Hardin *et al.*, (2001) consistia na formulação de um modelo para a predição do tempo de residência interno no biorreator de tambor rotativo, como uma contribuição para a caracterização da transferência de massa de água, do leito para a fase gasosa. Neste caso, os *softwares* de CFD seriam uma importante ferramenta para uma predição mais precisa dos fluxos internos ao equipamento e das taxas de transferência de massa. E poderiam inclusive dar suporte aos modelos matemáticos e considerações físicas propostos.

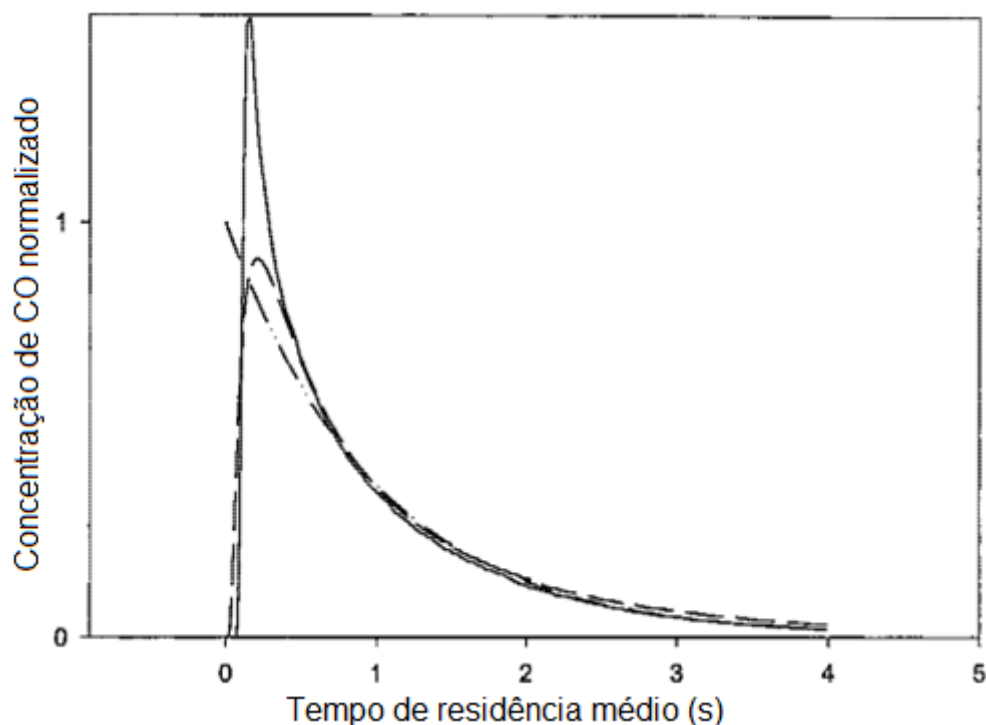


FIGURA 8 – COMPARAÇÃO DOS DADOS EXPERIMENTAIS DE TEMPO DE RESIDÊNCIA MÉDIO (5,4 rpm, preenchimento de 30 %, sem levantadores, vazão de 150 L/min) com os melhores ajustes dos modelos de fluxo “bem misturado” (linha tracejada) e fluxo pistonado com dispersão axial (linha traço-ponto-ponto).

FONTE: ADAPTADO DE HARDIN *et al.* (2001)

Um outro exemplo de aplicação do CFD na fermentação em estado sólido pode ser exemplificado pelo trabalho de Shutyser (2003), que foca no estudo da agitação e mistura do leito de substrato. O autor simula o efeito da rotação do tambor de um biorreator sobre um número alto, porém finito, de partículas discretas que representam o leito de substrato interno. São relevados, inclusive, as forças interpartículas, geradas pela formação da malha de hifas fungicas em seus diversos estágios de desenvolvimento, e sua influência na compactação do leito.

A FIGURA 9 ilustra um dos seus resultados. Para cada ligação, cinco imagens são mostradas, após 0, 1, 2, 3, 4 e 5 rotações. Grandes agregados tem a cor vermelha e partículas individuais tem a cor azul. As forças de ligação para cada caso são: (A) 9,4 mN, (B) 18,9 mN e (C) 37,8 mN.

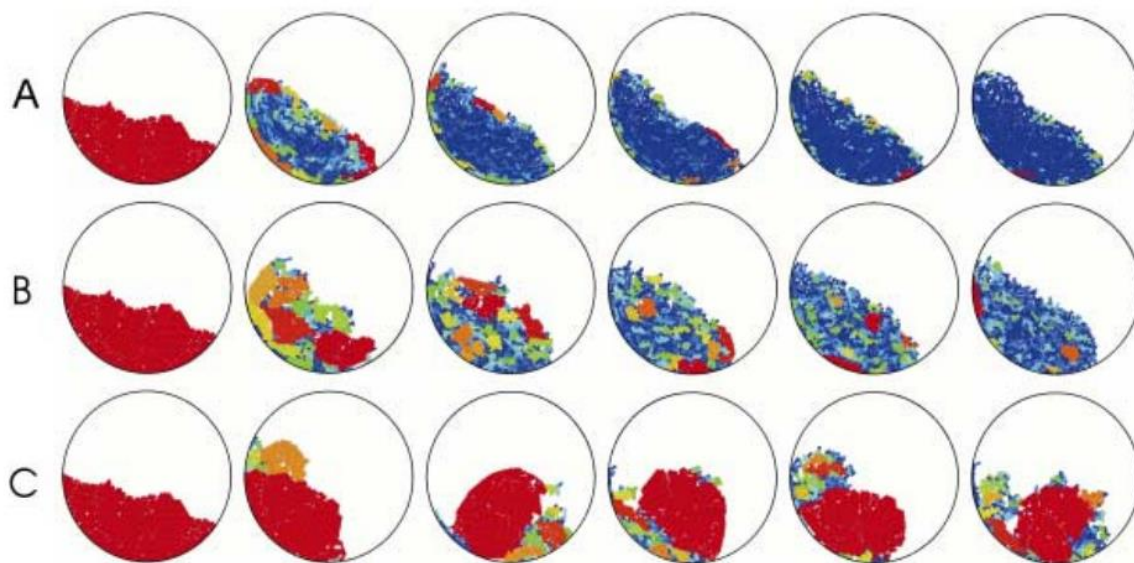


FIGURA 9 – VISUALIZAÇÃO DA PREDIÇÃO DA QUEBRA DE AGREGADOS DURANTE O PERÍODO DE AGITAÇÃO PARA AS TRÊS DIFERENTES FORÇAS DE TENSÃO DE LIGAÇÃO ENTRE HIFAS.

FONTE: SHUTYSER (2003)

Além disto, o uso deste recurso voltado para o planejamento experimental pode tornar todo este processo menos dispendioso. Pode-se observar este tipo de aplicação do CFD no artigo de Ziegenbalg *et al.* (2012) em que, para reduzir custos e esforços experimentais, apelou-se a métodos numéricos para elaborar o planejamento experimental. No citado caso, o CFD foi utilizado para determinar quais os agitadores mais adequados dentre uma coleção de diversos aparelhos. Em investigações experimentais as previsões calculadas pelo *software*, acerca das características destes equipamentos, foram confirmadas. A temática do trabalho de Ziegenbalg *et al.* (2012) não se relaciona à FES, no entanto a ideia de aplicabilidade do CFD é universal.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

Este capítulo, inicialmente fornece um panorama das etapas envolvidas no trabalho (FIGURA 10). Posteriormente, são explicitados mais detalhadamente o equacionamento baseado no modelo de von Meien e Mitchell (2002) e para a determinação das propriedades do leito de substrato. Também é relatado como foi realizada a simulação e a obtenção de parâmetros importantes para complementar o modelo utilizado.

4.1 ETAPAS DA PESQUISA

A execução do projeto pesquisa iniciou-se pela criação da geometria virtual do biorreator e das malhas, paralelos à promoção do cultivo em biorreator piloto para a coleta de dados experimentais e à busca por parâmetros e correlações para estimar as propriedades físicas dos leitos de substrato. Estes quesitos permitiram a montagem do caso de simulação no *software* ANSYS Fluent®. Gerou-se variações de refinamento na malha, para os futuros testes de precisão das malhas.

No entanto, ainda havia a necessidade da inclusão do equacionamento para os cálculos das transferências de calor (TC) e massa (TM) no interior do meio poroso do leito. Então escreveu-se o código, no formato de uma UDF (*user defined function*), adicionou-se a lógica, o equacionamento e compilou-se a UDF dentro do *software* de CFD, tornando o caso de simulação pronto para o início dos cálculos iterativos.

Executaram-se os testes de malha, com refinamentos, passos de tempo e modelos de turbulência distintos e, através dos resultados obtidos, definiu-se quais as condições ideais de simulação. Para essa decisão, levou-se em consideração a qualidade dos resultados e o tempo de simulação, que tornaria viável a geração de grande quantidade de resultados com precisão aceitável, com os recursos materiais, técnicos e de tempo disponíveis.

Portanto, primeiramente simulou-se os momentos iniciais (aproximadamente 20 minutos) do experimento promovido por Finkler (2016), em um leito homogêneo.

Tais momentos marcam o período de estabilização térmica e de umidade do leito, ou seja, a aproximação das temperaturas e o equilíbrio de umidades entre a fase sólida e gasosa. Também, este período inicial caracteriza a não germinação dos esporos fúngicos presentes (fase lag), definindo uma influência não significativa nas propriedades do leito. O leito homogêneo foi definido como aquele que apresenta valores de porosidade e de permeabilidade idênticos em qualquer ponto. Paralelamente, simulou-se os momentos iniciais do experimento em um leito de soja, cujas condições iniciais, indicadas por Marques (2005), são bastante diferentes do experimento com a mistura FT/BC 9:1, porém ainda contando com um leito homogêneo.

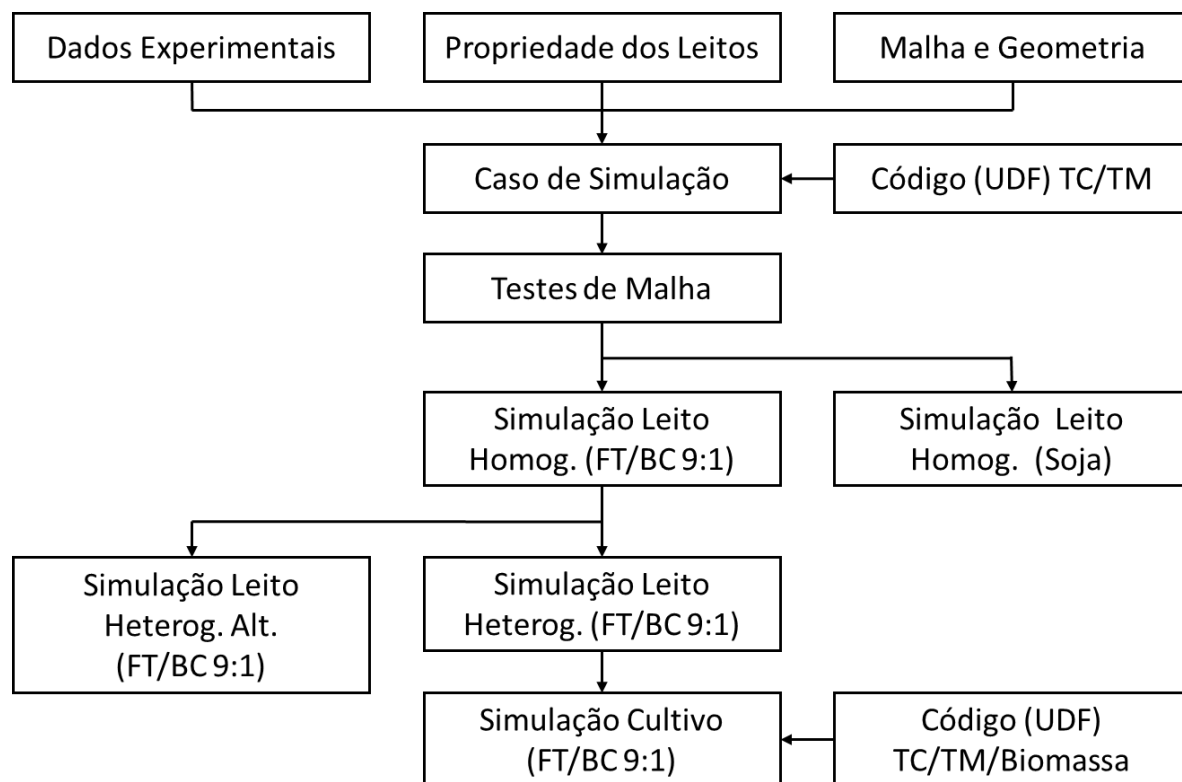


FIGURA 10 – FLUXOGRAMA DE ETAPAS DA PESQUISA

O aumento gradual de complexidade e realismo das simulações se deu com a geração de um leito de FT/BC 9:1 heterogêneo. Define-se o leito heterogêneo como tendo porosidades e permeabilidades distintas para pontos distintos no seu interior. Assumiu-se estas condições para a simulação dos momentos iniciais do cultivo, novamente, para que se pudesse comparar com os resultados obtidos para o leito homogêneo. Para efeito de comparação, também, executou-se uma segunda

simulação em leito heterogêneo, com distribuição de porosidade e permeabilidade distintas à primeira, designando como “leito heterogêneo alternativo”.

Finalmente, a simulação das fases avançadas do cultivo integrou o código (UDF) ao código do modelo de crescimento do microrganismo, como função da umidade e temperatura locais, e tem como ponto de partida o estado de equilíbrio atingido pela simulação das condições iniciais do cultivo. A simulação do cultivo de *A. niger* em FT/BC 9:1 também levou em consideração a distribuição heterogênea de porosidade, permeabilidade e, inclusive, de concentração de biomassa.

4.2 EQUACIONAMENTO

Nesta seção é exposto o modelo matemático detalhado baseado no trabalho de von Meien e Mitchell (2002), que consiste nos balanços de massa e energia, equações para cálculo dos coeficientes de transferência de massa e calor, isoterma do substrato e equação cinética para o crescimento do microrganismo. Posteriormente, apresenta-se o equacionamento para a estimação das propriedades físicas dos leitos de farelo de trigo e bagaço de cana e de grãos de soja.

4.2.1 Balanço de massa para a água na fase gasosa

A equação do balanço de massa para a fase gasosa é dada pela equação 10.

$$\varepsilon \cdot \rho_g \frac{\partial \varphi_g}{\partial t} + G \cdot \frac{\partial \varphi_g}{\partial z} = K_s a (\varphi_s - \varphi_s^*) \quad (10)$$

O primeiro termo do lado esquerdo representa a variação do teor de água na fase gás (φ_g) ao longo do tempo t (s), onde ρ_g é densidade do gás e ε é a porosidade do leito de substrato. O segundo termo representa o fluxo convectivo de água na corrente de ar no sentido da altura do leito (z), em que G é a vazão mássica de ar. O termo do lado direito representa a transferência de massa de água entre as fases gasosa e sólida por meio de evaporação ou condensação, sendo que $K_s a$ é o coeficiente de transferência de água entre as fases. A transferência de massa ocorre

proporcionalmente a diferença entre a umidade real da fase sólida (φ_s) e a umidade que ela teria se estivesse em equilíbrio térmico e de umidade com a fase gasosa (φ_s^*).

4.2.2 Balanço de energia da fase gasosa

O balanço de energia da fase gasosa é calculado pela equação 11.

$$\varepsilon \cdot \rho_g (C_{p_{ar}} + \varphi_g C_{p_v}) \frac{\partial T_g}{\partial t} + G (C_{p_{ar}} + \varphi_g \cdot C_{p_v}) \frac{\partial T_g}{\partial z} = -ha(T_g - T_s) \quad (11)$$

O primeiro termo do lado esquerdo representa a variação da quantidade de energia da fase gasosa ao longo do tempo, enquanto que o segundo termo representa o fluxo de energia devido à convecção do ar seco mais do vapor da água. Tanto a variação de energia temporal quanto a espacial são função da temperatura da fase gás T_g . A capacidade calorífica da fase gasosa úmida é composta pelas capacidades caloríficas do gás seco ($C_{p_{ar}}$) e do vapor da água (C_{p_v}), além da umidade da fase gasosa (φ_g). O termo do lado direito é a transferência de energia por convecção entre a fase gasosa e a fase sólida, onde ha é o coeficiente de troca de calor convectivo e T_s é a temperatura da fase sólida.

4.2.3 Balanço de massa para a água na fase sólida

A variação do teor de água na fase sólida é uma função da transferência de massa entre os sólidos e a fase gasosa e, também, da geração de água devido ao metabolismo da biomassa presente (Equação 12).

$$\frac{\partial(S \cdot \varphi_s)}{\partial t} = -K_s a \cdot (\varphi_s - \varphi_s^*) + Y_{W/B} \frac{\partial(b \cdot S)}{\partial t} \quad (12)$$

O lado esquerdo da equação representa a variação do teor de água na fase sólida ao longo do tempo. A produção de água pelo microrganismo é determinada pelo coeficiente de rendimento de produção de água metabólica em função do crescimento do microrganismo ($Y_{W/B}$) e pela variação da concentração volumétrica de

biomassa com o tempo. A concentração volumétrica de biomassa é calculada pela multiplicação entre a concentração de biomassa (b) e a concentração volumétrica de sólidos secos (S).

Os sólidos secos são considerados como as massas de biomassa e de substrato secos. Como existe produção de biomassa e consumo de substrato, este termo não permanece constante, diferentemente do que ocorria com o modelo de secagem. Pela mesma razão, a concentração volumétrica de biomassa também varia e necessita ser considerada em função do tempo. A concentração de sólidos secos se correlaciona com a porosidade em sua própria definição (Equação 13)

$$S = C_s \cdot (1 - \varepsilon) \quad (13)$$

$$C_s = \rho_s \cdot \frac{1}{1 + \varphi_s} \quad (14)$$

Sendo que ρ_s é a densidade de partícula do sólido, que multiplicado pela fração de massa seca no substrato úmido gera uma concentração de sólidos secos por unidade de volume de sólidos úmidos (C_s), visível na equação 14.

4.2.4 Balanço de energia da fase sólida

O crescimento do microrganismo gera calor metabólico, que acaba aquecendo o substrato. O substrato aquecido transfere energia para a fase gasosa por contato e convecção e para a umidade, que evapora (Equação 15).

$$S(C_{p_s} + C_{p_l} \cdot \varphi_s) \frac{\partial T_s}{\partial t} = ha(T_g - T_s) - \lambda \cdot K_s a \cdot (\varphi_s - \varphi_s^*) + Y_{Q/B} \left(S \frac{\partial b}{\partial t} + b \frac{\partial S}{\partial t} \right) \quad (15)$$

A convecção para a fase gasosa, a evaporação/condensação da água e a produção de calor metabólico, respectivamente são representados pelos termos do lado direito da equação, em que λ é o valor da entalpia de evaporação da água. Já, do lado esquerdo está representada a variação de energia na fase sólida – sendo que C_{p_l} é o calor específico da água líquida – considerando que a capacidade calorífica do leito permanece constante ao longo da fermentação, apesar do aumento de biomassa e do consumo das partículas. A produção de calor pelo microrganismo

depende do coeficiente de rendimento de produção de calor metabólico em função do crescimento do microrganismo ($Y_{Q/B}$) e pela variação das concentrações da biomassa e de sólidos secos com o tempo.

4.2.5 Produção de Biomassa

O crescimento da biomassa ocorre de acordo com a equação logística (Eq. 16).

$$\frac{\partial b}{\partial t} = \mu \cdot b \left(1 - \frac{1}{b_m} \right) \quad (16)$$

A equação logística foi escolhida por von Meien e Mitchell (2002) para descrever o crescimento do *Aspergillus niger* e é comumente utilizada na literatura para prever a dinâmica de crescimento de microrganismos (GHOSH RAY E GHANGREKAR, 2016; ASHA-AUGUSTINE *et al.*, 2015; MURALIDHARAN E RADHA, 2015). A velocidade de produção de biomassa é maior quanto menor for a razão entre a concentração de biomassa (b) e a concentração máxima de biomassa (b_m). A velocidade específica de crescimento em um determinado instante é calculada por (SARGANTANIS *et al.*, 1993).

$$\mu = \mu_{opt} \sqrt{\mu_W \cdot \mu_T} \quad (17)$$

Na equação 17, para o cálculo da velocidade específica de crescimento (μ) assume-se que é afetada tanto pela temperatura quanto a atividade de água do sólido. As taxas de crescimento específicas μ_T e μ_W são definidas como frações da máxima taxa de crescimento (μ_{opt}), que ocorreria se todas as condições de cultivo fossem ótimas. Desta forma, a fração da velocidade específica de crescimento em função da atividade da água para a fase sólida (a_{ws}) é dada pela equação 18.

$$\mu_W = \exp(D_1 \cdot a_{ws}^3 + D_2 \cdot a_{ws}^2 + D_3 \cdot a_{ws} + D_4) \quad (18)$$

sendo que D_1 , D_2 , D_3 , D_4 são constantes do ajuste aos dados experimentais do crescimento de *Aspergillus niger* (GLENN E ROGERS, 1988). A fração da velocidade específica de crescimento em função da temperatura da fase sólida é calculada pela equação 19.

$$\mu_T = \frac{1}{\mu_{opt}} \cdot \frac{A \cdot \exp\left[\frac{-E_{A1}}{R \cdot (T_s + 273)}\right]}{1 + B \cdot \exp\left[\frac{-E_{A2}}{R \cdot (T_s + 273)}\right]} \quad (19)$$

Onde, A é o fator de frequência do numerador, B é a constante de ajuste do denominador, R é a constante universal dos gases ideais e E_{A1} e E_{A2} as energias de ativação (SAUCEDO-CASTANEDA *et al.*, 1990).

4.2.6 Balanço de sólidos secos

No cálculo dos sólidos secos estão inclusos a biomassa e o substrato seco conforme a equação 20.

$$\frac{\partial S}{\partial t} = Y_{S/B} \frac{\partial (bS)}{\partial t} \quad (20)$$

O coeficiente de rendimento dos sólidos secos em função da biomassa ($Y_{S/B}$), que representa a variação de substrato seco mais biomassa seca por quilograma de biomassa produzida, é um número negativo. Isto se deve ao fato de que o microrganismo consome o substrato, reduzindo a massa seca total, que acaba se transformando em biomassa e dióxido de carbono.

4.2.7 Isotermas e umidade relativa da fase sólida

As equações de isotermas são utilizadas para calcular o teor de água presente na fase sólida caso esta estivesse em equilíbrio térmico e de umidade com a fase gasosa. O modelo original utilizou a equação empírica da isoterma (Eq. 21) de dessorção do grão milho (CALÇADA, 1998), onde os termos C_1 , C_2 , C_3 , C_4 e C_5 são constantes de ajuste da equação e a_{wg} é a atividade de água na fase gás. O modelo de von Meien e Mitchell (2002) considera que, apesar do crescimento de biomassa, a isoterma permanece idêntica à dos grãos de milho no decorrer do tempo.

$$\varphi_s^* = \left[\frac{\ln(1 - a_{wg}^{C_5})}{-\exp(C_1 + C_2 \cdot T_g)} \right]^{\frac{1}{(C_3 + C_4 \cdot T_g)}} \quad (21)$$

Quando a equação foi rearranjada para deixar explícito o termo da umidade relativa, foi calculado o valor da atividade da água na fase sólida (Equação 22).

$$a_{ws} = \left\{ 1 - \exp \left[-\varphi_s^{(C_3 + C_4 \cdot T_s)} \cdot \exp(C_1 + C_2 \cdot T_s) \right] \right\}^{\frac{1}{C_5}} \quad (22)$$

No entanto, existem equações e parâmetros de ajuste mais adequados ao farelo de trigo, bagaço de cana e aos grãos de soja. A equação de Peleg (1993), ajusta a isoterma do farelo de trigo e do bagaço de cana obtida por Casciadori *et al.* (2015), com os parâmetros determinados pelos mesmos autores na faixa entre 30 e 60 °C, demonstrando uma independência da temperatura para ambos os materiais; e a equação GAB (Lewicki, 1998) ajusta a isoterma da soja obtida por Marques *et al.* (2006). As equações fornecem bons ajustes para as novas isotermas e permitem uma melhor representação do equilíbrio dinâmico existente entre as concentrações de água nas fases sólida e gasosa. As equações para FT/BC 9:1 e grãos de soja podem ser vistas, respectivamente, nas Eq. (24) e (25), onde os parâmetros P_1 , P_2 , P_3 e P_4 são os parâmetros de ajuste para ambos os substratos, cujos valores podem ser vistos na TABELA 1. Para um melhor ajuste do comportamento da isoterma adicionou-se um fator de correção (F_{corr}) igual a 1,13197 à equação original de Peleg (1993) (Equação 23).

$$\varphi_s^* = P_1 \cdot a_{wg}^{P_2} + P_3 \cdot a_{wg}^{P_4} \quad (23)$$

$$\varphi_s^* = P_1 \cdot (a_{wg} \cdot F_{corr})^{P_2} + P_3 \cdot (a_{wg} \cdot F_{corr})^{P_4} \quad (24)$$

$$\varphi_s^* = \frac{P_1 P_2 P_3 a_{wg}}{(1 - P_2 a_{wg}) \cdot [1 + (P_3 - 1) P_2 a_{wg}]} \quad (25)$$

TABELA 1 – PARÂMETROS DE AJUSTE DAS EQUAÇÕES DAS ISOTÉRMAS PARA FT, BC E SOJA.

Material	P_1	P_2	P_3	P_4	Fonte
FT	0,117	0,364	0,522	8,342	CASCIATORI <i>et al.</i> (2015)
BC	0,145	10,98	0,107	1,058	CASCIATORI <i>et al.</i> (2015)
Soja	0,4945	0,9528	1.249	-	O Autor

Outra adequação necessária foi a alteração da correlação de cálculo do a_{ws} , baseada na isoterma de dessorção dos grãos de milho por outra baseada na equação de ajuste da isoterma da mistura FT/BC 9:1. Como a equação de a_{ws} original foi obtida isolando o termo da atividade de água da equação da isoterma, uma equação equivalente não pôde ser obtida baseando-se na correlação de Peleg (1993) (Equação 23) por uma impossibilidade matemática. Portanto propôs-se um algoritmo de cálculo do valor de a_{ws} baseado no valor atual da umidade do sólido, que pode ser visto na Equações 26, 27 e 28.

$$\varphi_s^M = P_1 \cdot (a_{ws}^n \cdot F_{corr})^{P_2} + P_3 \cdot (a_{ws}^n \cdot F_{corr})^{P_4} \quad (26)$$

$$ERRO = 0,9 \cdot \varphi_s^{FT} + 0,1 \cdot \varphi_s^{BC} - \varphi_s \quad (27)$$

$$a_{ws}^{n+1} = a_{ws}^n \cdot (1 - 0,11 \cdot ERRO) \quad (28)$$

Neste algoritmo, onde n é o número da iteração, estima-se um valor inicial para a atividade de água no sólido (a_{ws}^0), calcula-se a umidade do material M (φ_s^M) correspondente a esta condição; determina-se o erro entre o valor calculado da umidade da mistura sólida ($0,9 \cdot \varphi_s^{FT} + 0,1 \cdot \varphi_s^{BC}$) e o valor real momentâneo (φ_s); corrige-se o valor da atividade de água, obtendo-se um novo valor (a_{ws}^1); e finalmente, repete-se o processo até que $ERRO < 10^{-5}$ kg/kg.

4.2.8 Atividade da água na fase gasosa

A atividade da água para a fase gasosa é calculada pela pressão atual de vapor da água dividida pela pressão de vapor da saturação a uma determinada temperatura

$$a_{wg} = \frac{\varphi_g P}{P_w^{sat}(\varphi_g + 0,62413)} \quad (29)$$

A pressão parcial de saturação P_w^{sat} é estimada pela equação de Antoine (REID *et al.* 1977):

$$P_w^{\text{sat}} = 133,322 \cdot e^{\left(18,3036 - \frac{3816,44}{T_g + 273,15 - 46,13}\right)} \quad (30)$$

4.2.9 Coeficiente de Transferência de massa

O coeficiente para a transferência de massa de água entre as fases sólida e gasosa é uma função da temperatura do gás e da quantidade de água na fase sólida, através da equação empírica desenvolvida para a secagem do milho (MANCINI, 1996)

$$K_s a = [a_1 + a_2 \cdot (T_g + 273)] \cdot \varphi_s - [a_3 + a_4 (T_g + 273)] \quad (31)$$

onde os termos a_1 , a_2 , a_3 e a_4 são constantes de ajuste da equação.

4.2.10 Coeficiente de Transferência de calor

O coeficiente para a transferência de calor convectivo entre a fase sólida e gasosa é uma função da temperatura da fase gasosa e da vazão mássica de gás, utilizando a equação empírica desenvolvida para a secagem do milho (BOYCE, 1965 e CALADO, 1993).

$$h_a = 44209,85 \cdot \left[\frac{G(T_g + 273)}{0,0075 \cdot P} \right]^{0,6011} \quad (32)$$

4.3 OBTENÇÃO DE PARÂMETROS

A obtenção de parâmetros se utilizou de corrida de FES no biorreator piloto e tem grande importância na melhoria dos modelos matemáticos de representação da FES.

4.3.1 Coeficientes de resistência de escoamento

Os dados para determinação dos coeficientes de resistência foram obtidos através da medição da perda de carga em corrida de fermentação no biorreator piloto promovida por Finkler (2016). A fermentação foi conduzida através do cultivo do fungo *Aspergillus niger* no substrato de farelo de trigo com bagaço de cana na proporção de 9:1 (massa). A corrida de fermentação em estado sólido foi preparada e operada de acordo com a metodologia de Pitol *et al.* (2016) que consiste nas melhores condições encontradas para o crescimento do fungo e produtividade de pectinases. A perda de carga foi medida através de um manômetro de mercúrio, cujas extremidades estavam conectadas à entrada e saída de ar do biorreator. Os dados de perda de carga foram obtidos para cinco diferentes vazões de ar entre 170,7 e 252,5 m³/h durante na fase lag do cultivo – período inicial do cultivo em que ainda não houve crescimento dos micélios fúngicos nos espaços interpartículas. Também foram obtidos valores de diferença de pressão ao longo da fase lag em uma vazão constante de 240 m³/h, padrão do experimento.

4.4 DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES DOS LEITOS POROSOS

O comportamento do fluido no meio poroso pode ser descrito pelo número de Reynolds de acordo com a Equação (33) (AHN *et al.*, 2008).

$$Re_K = \frac{\rho v K^{0.5}}{\mu} \quad (33)$$

Se $Re_K < 1$ o fluxo é laminar e as forças viscosas representam o principal efeito sobre a perda de carga descrito pela equação de Darcy (AURIA *et al.*, 1993). Através da correlação (Equação 34) fornecida pela ANSYS para a perda de carga é possível ajustar os dados experimentais para se estimar os coeficientes de resistência viscosa ($1/K$) e inercial (C_2) para uma membrana (*porous-jump*) ou um meio poroso (ANSYS, 2013). A *porous-jump* é um artifício utilizado pela ANSYS para representar uma superfície permeável com espessura e resistências ao fluxo conhecidas.

$$\left(\frac{\Delta P}{L}\right) = \frac{\mu}{K}v + \frac{\rho C_2}{2}v^2 \quad (34)$$

Em fluxos laminares, o termo inercial da equação (34) tende a zero resultando na equação clássica de Darcy, na qual a permeabilidade pode ser facilmente calculada. Também é possível estimar a permeabilidade através da correlação de Kozeny-Carman (Equação 35) (Coulson e Richardson, 2002).

$$K = \frac{\varepsilon^3 d_p^2}{(1 - \varepsilon)^2 36\beta} \quad (35)$$

Onde $\beta = 4$ para partículas esféricas e $d_p = 5,4 \cdot 10^{-3}$ m para os grãos de soja (Ranjbaran e Zare, 2012). A resistência viscosa pode ser calculada simplesmente invertendo o valor da permeabilidade. As demais propriedades do substrato em função do teor de umidade (MC) podem ser calculadas de acordo com a TABELA 2 e 3.

Uma correlação empírica entre a permeabilidade e a concentração de biomassa foi obtida por Auria *et al.* (1993), através de experimentos de cultivo de *A. niger* em Amberlite IRA-900. Para viscosidade e densidade constante do fluido tem-se a Equação (36), onde K^0 é a permeabilidade inicial (sem a presença do fungo).

$$K = K^0 \cdot (0,976 - 44 \cdot b) \quad (36)$$

A equação original simula a correção da permeabilidade partindo de 97,6 % do seu valor inicial ($K^0 \cdot 0,976$), quando o ideal é que se baseasse no seu valor integral. É provável que esta pequena diferença em relação ao valor unitário na equação empírica, se deva a imprecisões da medição experimental. Por isso, reajustou-se os dados experimentais de Auria *et al.* (1993), fixando o coeficiente linear no valor unitário e obteve-se uma equação semelhante (37)

$$K = K^0 \cdot (1 - 45,5 \cdot b) \quad (37)$$

TABELA 2 – PARÂMETROS DAS PARTÍCULAS E DO LEITO FT/BC 9:1 EM FUNÇÃO DO TEOR DE UMIDADE EM BASE ÚMIDA (MC).

Parâmetro	Material	Equação/Valor	Fonte
Densidade de partícula (kg/m ³)	FT	$0,974 + 0,226MC$	Eq(38) CASCIATORI <i>et al.</i> (2014)
	BC	$0,578 + 0,00365\exp\left(\frac{MC}{0,149}\right)$	Eq(39) CASCIATORI <i>et al.</i> (2014)
Calor específico (J/(kg.°C))*	FT	1590,0	SWEAT (1986)
Condutividade térmica (W/(m.°C))	FT	$0,213 + 0,264MC$	Eq(40) CASCIATORI <i>et al.</i> (2013)
	BC	$16,8 - 35,7 \cdot 0,51\frac{1}{MC}$	Eq(41) CASCIATORI <i>et al.</i> (2013)
Porosidade do leito em baixa compactação	BC	$0,91 - 0,016\exp\left(\frac{MC}{0,30}\right)$	Eq(42) CASCIATORI <i>et al.</i> (2014)
	FT	$0,62 - 0,136MC$	Eq(43) CASCIATORI <i>et al.</i> (2014)

Nota: *estimado por média ponderada com o teor de umidade.

TABELA 3 – PARÂMETROS PARA O LEITO POROSO E PARA O GRÃO DE SOJA EM FUNÇÃO DO TEOR DE UMIDADE EM BASE ÚMIDA (MC).

Parâmetro	Equação/Valor	Fonte
Densidade de partícula (kg/m ³)*	641,9	SHIRKOLE <i>et al.</i> (2011)
Calor específico (J/(kg.°C))*	1990,0	SHIRKOLE <i>et al.</i> (2011)
Condutividade térmica (W/(m.°C))	$0,3544MC + 0,86799$	Eq(44) DESHPANDE <i>et al.</i> (1996)
Porosidade do leito	0,40	MARQUES (2005)

Nota: *estimado por média ponderada com o teor de umidade.

As TABELAS 2 e 3 se referem ao teor de umidade em base úmida e os valores se referem à propriedade do sólido seco. O calor específico do FT/BC 9:1 foi aproximado para a propriedade do farelo de trigo puro.

4.5 SIMULAÇÕES

O trabalho de elaboração de um modelo virtual para simulação computadorizada consistiu de algumas etapas. Nesta seção, detalha-se o desenvolvimento da malha do biorreator, da placa perfurada, da obtenção dos parâmetros de resistência ao fluxo, dos testes de malha, das configurações de

simulação da dinâmica inicial dos experimentos de FES com FT/BC 9:1 e com os grãos de soja e da análise paramétrica.

4.5.1 Geometria do biorreator

Retirou-se as medidas do biorreator piloto instalado no Laboratório de Desenvolvimento e Otimização de Processos Bioquímicos (ProBio), localizado no prédio da Usina Piloto A do campus Politécnico da Universidade Federal do Paraná. O biorreator piloto pode ser visto na FIGURA 11.



FIGURA 11 – BIORREATOR PILOTO ABERTO

A geometria utilizada considera apenas a câmara interna que retém os sólidos, limitada na base por uma placa perfurada. Esta câmara possui as medidas de 70 cm de largura, por 60 cm de profundidade, por 50 cm de altura a partir da placa perfurada. As dimensões do biorreator piloto estão esquematizadas na FIGURA 12.

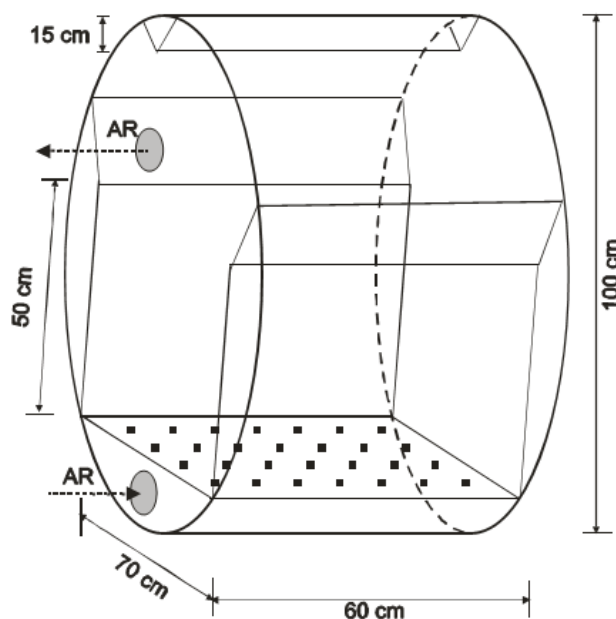


FIGURA 12 – MEDIDAS DO BIORREATOR PILOTO

FONTE: de LIMA (2009)

A geometria foi desenhada em 3D no *software* ANSYS ICEM CFD® 16.0 e exportada para o ANSYS Fluent® 16.0 para configurar todas as condições de operação. Uma malha hexaédrica, com o critério de qualidade de determinante $2 \times 2 \times 2$ mínimo 0,325 e 66.495 nós, foi gerada e pode ser vista na FIGURA 14A (a câmara está sendo representada vazia na ilustração). Ainda na FIGURA 14A, o volume cilíndrico (roxo), interno à câmara do substrato (verde), delimita o eixo de rotação do biorreator. A escolha pela malha hexaédrica em detrimento da tetraédrica, se deve ao fato de a geometria não ser tão complexa a ponto de exigir uma malha não estruturada, mais flexível. Afinal, a vantagem da flexibilidade das malhas não estruturadas vem acompanhada da desvantagem da irregularidade da estrutura, causando um aumento de complexidade na formulação e solução do problema.

As leituras experimentais de temperatura foram obtidas através dos termopares instalados no interior da câmara do substrato em quatro alturas (z) diferentes (TABELA 4), no entanto como o leito ficou abaixo do termopar mais alto, ele não foi considerado nas medições. As posições dos termopares estão designadas em relação ao ponto de origem apontado no canto inferior da câmara (indicado como "0" na FIGURA 13A) e a entrada e saída de ar do biorreator também estão indicados na FIGURA 13B. Uma ilustração do posicionamento espacial dos

doze termopares se apresenta na FIGURA 13C, juntamente à indicação das suas medidas de altura no eixo Z. A localização real dos termopares foi reproduzida no simulador. Portanto, as temperaturas previstas são baseadas nos pontos de medição reais, para efeito de comparação.

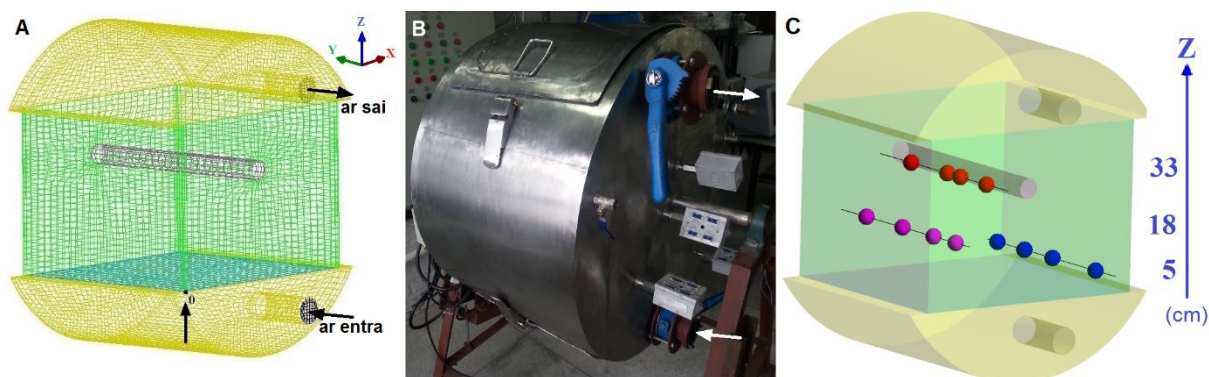


FIGURA 13 – (A) MALHA DO BIORREATOR, (B) FOTO COMPARATIVA COM BIORREATOR REAL E (C) POSIÇÃO DOS TERMOPARES DESTACADA: cor azul para altura de 5 cm. rosa para 18 cm e vermelho para 33 cm.

TABELA 4 – POSIÇÃO DOS TERMOPARES: as posições em y estão na mesma ordem que os nomes dos termopares no cabeçalho.

	T1; T2; T0; T3	T4; T7; T5; T6	T11; T10; T9; T8
x (cm)	65	14	27
y (cm)	9,0; 29,5; 42,5; 55,0	6,0; 16,0; 30,5; 47,5	10,0; 22,0; 27,5; 44,5
z (cm)	5	18	33

O poço dos termopares não é preenchido por óleo, o que poderia dissipar o calor ao longo de toda uma haste, tornando as leituras individuais dos quatro termopares de cada altura mais próximas e irreais. Portanto, sabendo que os termopares estão separados e isolados entre si, pode-se assumir que as suas leituras correspondem à temperatura da região mais próxima. Além disto, a precisão dos termopares é de 0,5 °C para mais ou para menos.

A FIGURA 14 apresenta a posição dos termopares esquematizados.

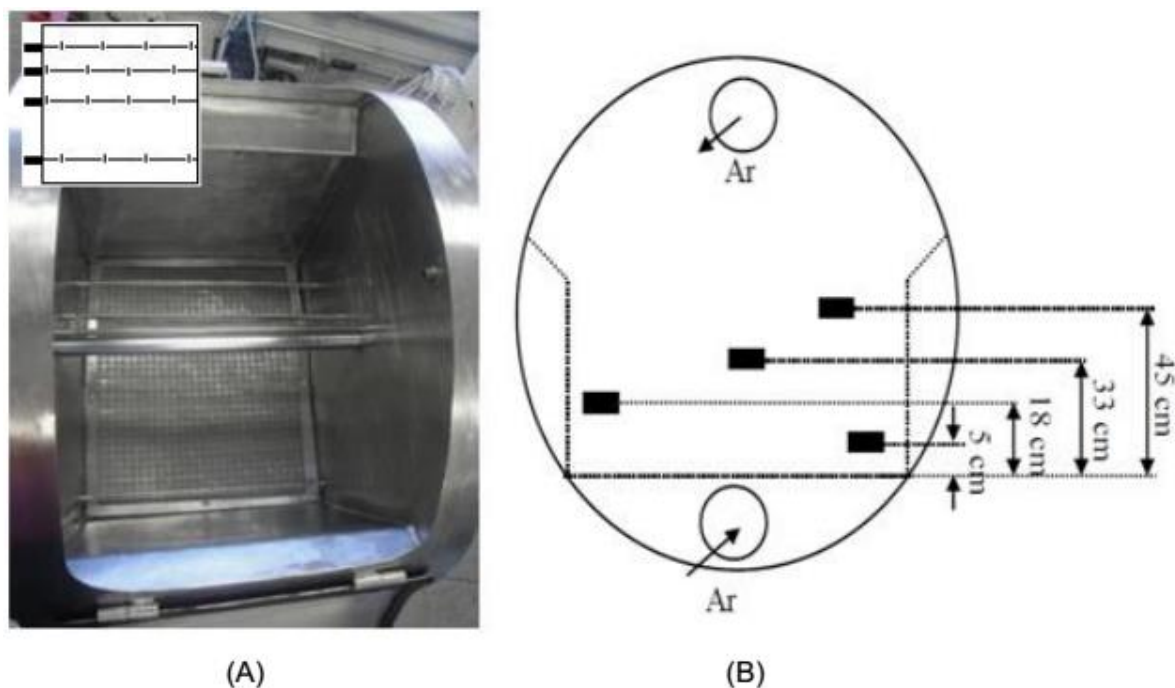


FIGURA 13 – DISPOSIÇÃO DOS TERMOPARES NO INTERIOR DO BIORREATOR: (A) Disposição dos termopares ao longo do eixo horizontal; (B) disposição dos termopares ao longo do eixo vertical.

FONTE: BARGA (2007)

Também, uma malha tetraédrica altamente refinada e sob a aplicação de “inflação” (*inflation*) foi desenvolvida para a placa perfurada para a determinação dos seus coeficientes de resistência ao fluxo. O recurso de *inflation* disponível no *software* ICEM CFD® permite gerar uma malha híbrida com camadas de elementos hexaédricos e prismas adjacentes às superfícies e elementos tetraédricos preenchendo o restante do volume do sistema. Esta configuração híbrida permite uma melhor qualidade de refinamento próximo às superfícies, que são uma região crítica na definição do fluxo enquanto, nas regiões de fluxo mais uniforme, tem-se elementos maiores que não sobrecarregam a malha e que mantêm a qualidade aceitável de refinamento.

Nesta malha para a placa perfurada, simulou-se o fluxo de diferentes velocidades superficiais e obteve-se os respectivos valores de perda de carga. Ajustou-se uma curva a estes dados permitindo-se a determinação dos coeficientes inercial e viscoso da Equação 34. Estes coeficientes foram utilizados para determinar as propriedades de resistência ao fluxo da *porous-jump* (TABELA 5).

4.5.2 Testes de malha

No primeiro teste de malha, a geometria do leito poroso foi isolada para verificar o efeito de três refinamentos e passos de tempo distintos na qualidade dos resultados na simulação do modelo. O volume do leito poroso é de cerca de $0,177 \text{ m}^3$ e os refinamentos baixo, médio e alto resultaram em um volume médio de elementos de 7,29, 3,40 e $1,27 \text{ cm}^3$, respectivamente. Os passos de tempo testados foram 0,1, 0,01 e 0,001 s. Na segunda análise, foi testada a influência dos três refinamentos e quatro modelos de turbulência distintos (laminar, k-epsilon, k-omega e transition k-kl-omega) na distribuição do fluxo de ar através da *porous-jump*. O volume do biorreator é de cerca de $0,395 \text{ m}^3$ e os refinamentos baixo, médio e alto resultaram em um volume médio de elementos de 6,46, 2,58 e $1,15 \text{ cm}^3$, respectivamente. Os modelos de turbulência foram testados no estado estacionário e as simulações cessaram no critério de convergência padrão ou quando alcançavam 1.200 iterações. As malhas com refinamentos mais esparsos não foram incluídas, pois geravam geometrias não realistas do biorreator e elementos de baixa qualidade. Também foi realizado o teste de três diferentes passos de tempo (0,1, 0,05 e 0,02 s) para as condições de simulação do cultivo, simulando-se um curto período de tempo para a comparação entre os resultados.

4.5.3 Configurações de simulação

As condições iniciais para os experimentos em FES promovidos no biorreator piloto podem ser vistas na TABELA 5. As condições iniciais para o cultivo de FES e do experimento com a soja foram extraídas de Finkler (2016) e Marques (2005), respectivamente. Tais parâmetros foram utilizados nas simulações dos períodos iniciais do cultivo, quando ocorre o estabelecimento do equilíbrio térmico e de umidade entre as fases sólida e gasosa. Para a simulação do experimento de Marques (2005), também testou-se um fluxo de ar menor ($0,036 \text{ kg/s}$) para verificar a concordância com os dados experimentais.

TABELA 5 – CONDIÇÕES INICIAIS DOS EXPERIMENTOS MODELO EM FES.

Variáveis	Valor	
	FT/BC 9:1	Soja
Temperatura do ar de entrada (°C)	32,0	26,6
Temperatura inicial do sólido (°C)	25,6	59,4
Atividade de água do ar de entrada	0,99	0,99
Umidade inicial do sólido (kg/kg base seca)	1,50	1,03
Vazão de ar (kg/s)	0,077	0,060
Porosidade do leito	0,564*	0,400
Altura do leito (m)	0,40	0,35

Nota: *Calculado pelas equações (42) e (43)

Para as simulações do leito heterogêneo e com crescimento de biomassa gerou-se uma distribuição normal da porosidade, em torno do valor calculado através das Equações 42 e 43, e da concentração de biomassa em torno do valor inicial de biomassa estipulado (0,002 kg/kg) (SAUCEDO-CASTANEDA *et al.*, 1990) Este valor visa representar a massa inicial de microrganismos relativo à massa de sólidos secos, ao fim da fase lag, ou seja, no início do período de desenvolvimento do fungo que segue a germinação dos esporos. Gerou-se, com o uso do *software* Microsoft Office Excel® 2013, 27 mil valores aleatórios de porosidade e concentração de biomassa, respeitando uma distribuição normal, para associação de um valor distinto a cada um dos elementos da malha que representa o leito de substratos. Para a porosidade, considerou-se que uma faixa de três desvios padrões (abrangendo 99,73 % dos dados) correspondem a uma variação de 20 % em torno do valor central. Para a biomassa, os três desvios padrões correspondem a uma variação de 10 %. Também, para efeito de comparação, gerou-se um segundo leito heterogêneo de distribuição normal aleatória de porosidade nas mesmas condições em que a primeira foi gerada, porém distinta desta. Chamou-se este segundo leito heterogêneo de “alternativo”.

5 ANÁLISE DE RESULTADOS E APLICAÇÃO DO MODELO PREDITIVO

Neste capítulo serão analisados os resultados da obtenção de parâmetros dos leitões de substratos, dos testes de malhas e das simulações das fases iniciais do cultivo em FES (experimento com soja e com mistura FT/BC 9:1) e das fases onde ocorrem atividade biológica.

5.1 MANIPULAÇÃO DO MODELO PREDITIVO

As equações do modelo foram manipuladas visando a simplificação do sistema, tornando algumas equações diferenciais em algébricas. Sabendo-se que a equação temporal da concentração de sólidos secos (Equação 20) depende da variação da concentração de biomassa transiente (Equação 16) então:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{Y_{S/B} \cdot S}{(1 - Y_{S/B} \cdot b)} \cdot \mu \cdot b \left(1 - \frac{b}{b_m}\right) \quad (45)$$

E que o balanço de água na fase sólida (Equação 12) depende da Equação 45, tem-se que:

$$\frac{\partial(S \cdot \varphi_s)}{\partial t} = -K_s a \cdot (\varphi_s - \varphi_s^*) + \left[\frac{b \cdot Y_{S/B}}{(1 - Y_{S/B} \cdot b)} + 1 \right] \cdot S \cdot Y_{W/B} \cdot \mu \cdot b \left(1 - \frac{1}{b_m}\right) \quad (46)$$

Simplificando, o balanço de água na fase sólida – com os termos fontes de água na forma algébrica – obtém-se a seguinte forma:

$$\frac{\partial(S \cdot \varphi_s)}{\partial t} = -K_s a \cdot (\varphi_s - \varphi_s^*) + \frac{S \cdot Y_{W/B}}{1 - Y_{S/B} \cdot b} \cdot \mu \cdot b \left(1 - \frac{1}{b_m}\right) \quad (47)$$

Para que os valores de concentração de biomassa e de concentração de sólidos secos sejam atualizados discretamente com o tempo de fluxo, integrou-se definidamente as Equações 18 e 22, do tempo atual até o tempo somado do passo de tempo (Δt) utilizado no cálculo. A integração da taxa de crescimento da biomassa e da taxa de consumo do sólido resultou nas Equações 48 e 49, respectivamente.

$$b^1 = \frac{e^{\mu\Delta t} \cdot b^0 \cdot b_m}{b_m - b^0 \cdot (1 - e^{\mu\Delta t})} \quad (48)$$

$$S^1 = S^0 \exp \left[\Delta t \cdot \frac{Y_{S/B}}{1 - Y_{S/B} \cdot b} \cdot \mu \cdot b \left(1 - \frac{b}{b_m} \right) \right] \quad (49)$$

Onde b^0 e b^1 são a concentração de biomassa antiga e nova e S^0 e S^1 são a concentração de sólidos secos antiga e nova, respectivamente.

5.2 PERDA DE CARGA E COEFICIENTES DE RESISTÊNCIA DO LEITO

Para as cinco diferentes vazões de ar testadas na fase lag, a perda de carga do leito de FT/BC 9:1 variou entre 1.831,6 e 2.830,7 Pa/m. O ajuste da curva pela Equação 34 proveu o valor do coeficiente de resistência viscosa ($1/K$) de $5,34 \times 10^8 \text{ m}^{-2}$ e de resistência inercial (C_2) de 19.340 m^{-1} . No entanto, verifica-se, pela equação 33, que $Re_K < 1$ (TABELA 6), apesar da existência do coeficiente de resistência inercial. Além deste fato, não se pode garantir que a existência de C_2 não se deva apenas aos erros aleatórios de medição e ao baixo número de dados coletados. Portanto, é mais sensata a consideração do fluxo interno ao leito como “laminar”, através de um ajuste linear (Darcy) dos dados de perda de carga. Os parâmetros nos quais os cálculos dos coeficientes de resistência ao fluxo foram estimados, para o experimento com FT/BC 9:1 e com os grãos de soja, se encontram na TABELA 6.

TABELA 6 – CONDIÇÕES PARA O CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE RESISTÊNCIA VISCOSA ($1/K$) DOS EXPERIMENTOS COM SUBSTRATO DE FT/BC 9:1 E DE GRÃOS DE SOJA.

Substrato do experimento	Temperatura média (°C)	Densidade do ar* (kg/m ³)	Viscosidade do ar* (Pa.s)	Vazão (kg/s)	$1/K$ (m ⁻²)	Re_K
FT/BC 9:1	29,3	1,16	$2,81 \times 10^{-5}$	0,077	$5,90 \times 10^8$	0,56
Grãos de soja	42,5	1,10	$2,93 \times 10^{-5}$	0,060	$2,78 \times 10^7$	0,87

Nota: *Dado interpolado de Perry e Green (1999).

Também, foram coletadas 8 medidas de perda de carga ao longo das primeiras 10 h de fermentação (fase lag) a uma vazão de ar constante igual a $240 \text{ m}^3/\text{h}$

(0,077 kg/s). A perda de carga oscilou entre 761,2 e 1712,7 Pa/m, com um valor médio de 1.308,3 Pa/m. É possível que a oscilação se deva a flutuações nas condições ambientais de pressão e temperatura que podem ter levado a variações de vazão de ar.

5.3 TESTES DE MALHA

Sabendo-se que os perfis de temperatura durante o aquecimento do leito foram medidos para três alturas diferentes (valores de z), a leitura dos perfis de temperatura dá-se da seguinte maneira: cada curva representa a média entre os valores registrados pelos quatro termopares naquela altura (TABELA 4). Os termopares em alturas menores aqueciam antes devido à proximidade à entrada do fluxo de ar, de forma que as curvas no gráfico começam a elevar-se na seguinte ordem: primeiramente $z=5$ cm, então $z=18$ cm e, finalmente, $z=33$ cm.

Os tamanhos de passo de tempo afetaram significativamente os resultados. Os passos de tempo de 0,01 e 0,001 s forneceram perfis de umidade e temperatura bastante similares enquanto, para 0,1 s, se obteve resultados diferentes dos demais, como pode ser observado na FIGURA 15. Sabendo-se que maiores passos de tempo teoricamente fornecem os resultados menos precisos, pode-se seguramente afirmar que o passo de tempo de 0,1 s forneceu as previsões de pior qualidade. Portanto, dentre os passos de tempo de forneceram bons resultados, escolheu-se o de 0,01 s por não haver diferenças significativas entre os resultados dos dois menores passos de tempo testados. Os distintos refinamentos (baixo, médio e alto nas FIGURAS 15A, 15B e 15C, respectivamente) da malha do substrato demonstraram pouca influência na qualidade dos resultados das simulações, como também pode ser observado através da comparação direta entre os refinamentos para o passo de tempo escolhido de 0,01 s (FIGURA 16). Vale enfatizar que um maior refinamento de malha resulta em uma malha com maior densidade de elementos, com maior detalhamento e precisão, também exigindo maior esforço computacional para a simulação. A mínima qualidade de refinamento na qual se baseou foi a do critério de determinante $2 \times 2 \times 2$ superior a 0,3 requerido pelo simulador Fluent®.

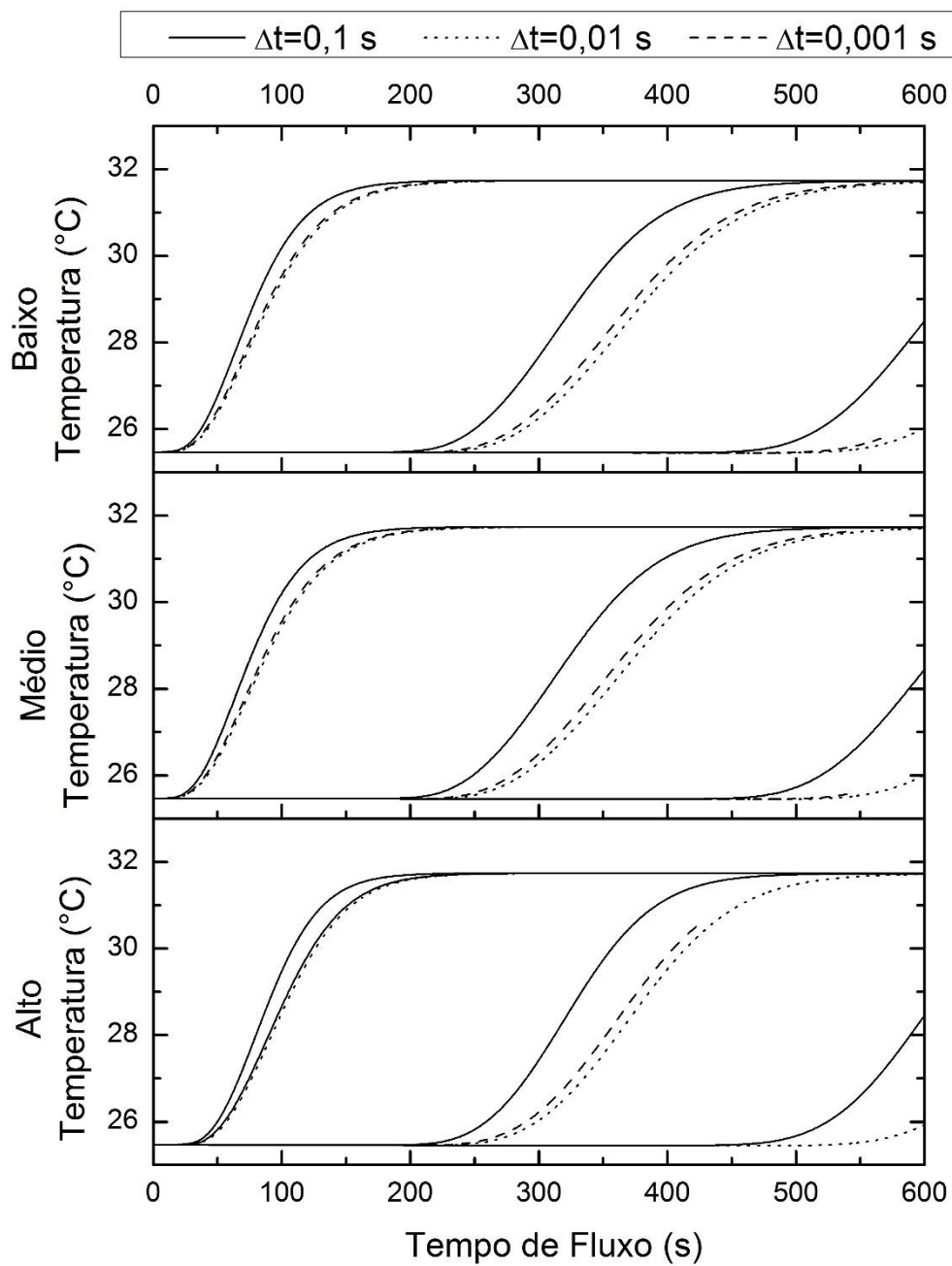


FIGURA 15 – COMPARAÇÃO ENTRE DIFERENTES PASSOS DE TEMPO (0,1, 0,01 E 0,001 S) E REFINAMENTOS DE MALHA (A) BAIXO, (B) MÉDIO E (C) ALTO. O refinamento “alto” refere-se à malha de maior detalhamento e o “baixo”, à de menor.

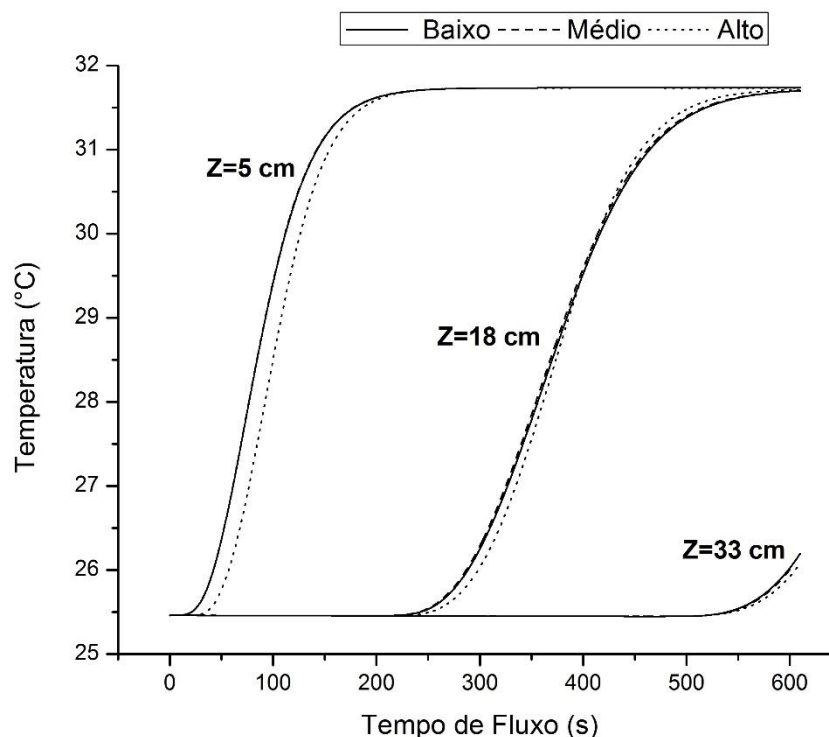


FIGURA 16 – COMPARAÇÃO ENTRE REFINAMENTOS (BAIXO, MÉDIO E ALTO) PARA O PASSO DE TEMPO ESCOLHIDO DE 0,01 s. A altura dos termopares correspondentes a cada curva está indicada.

Com relação aos modelos de turbulência, ambos os modelos de 2 equações (k-epsilon e k-omega) exigiram baixo esforço computacional e forneceram distribuições de vazão de ar semelhantes às do modelo de transição de 3-equações. Então o modelo k-epsilon foi escolhido, pois demonstrou comportamentos mais suaves para os perfis de evaporação enquanto o modelo k-omega forneceu comportamentos oscilatórios. Isso se deve ao fato de k-epsilon ser mais adequado para descrever fluxos turbulentos distantes de paredes (predominante no sistema em questão), enquanto o modelo k-omega é mais preciso para a situação oposta.

Também foi investigado o efeito do refinamento, nas câmaras inferiores e superiores do equipamento, quanto aos padrões de distribuição do fluxo de ar através da *porous-jump*. Orientando-se por uma vista superior da *porous-jump* (FIGURA 17), o gás entra na câmara inferior do biorreator na direção e sentido de aumento de Y, por baixo da superfície, e atravessa a placa perfurada (*porous-jump*) com a direção de Z. A FIGURA 17 ilustra com cores a velocidade em Z do fluxo de ar ao atravessar a superfície que representa a placa perfurada. Ao entrar, fluxo atinge a parede oposta e a turbulência resultante ajuda na distribuição do fluxo no interior da câmara inferior.

Percebe-se que a região próxima de onde a parede oposta é atingida se destaca pelas maiores velocidades em Z. Os refinamentos baixo e médio produziram padrões similarmente assimétricos e somente o maior refinamento (alto) produziu um padrão simétrico de distribuição de fluxo (FIGURA 17c). Apesar disto, escolheu-se o refinamento baixo que apresentou uma qualidade de distribuição bastante próxima ao médio, assumindo-se uma menor precisão nos resultados simulados em decorrência da menor qualidade da malha.

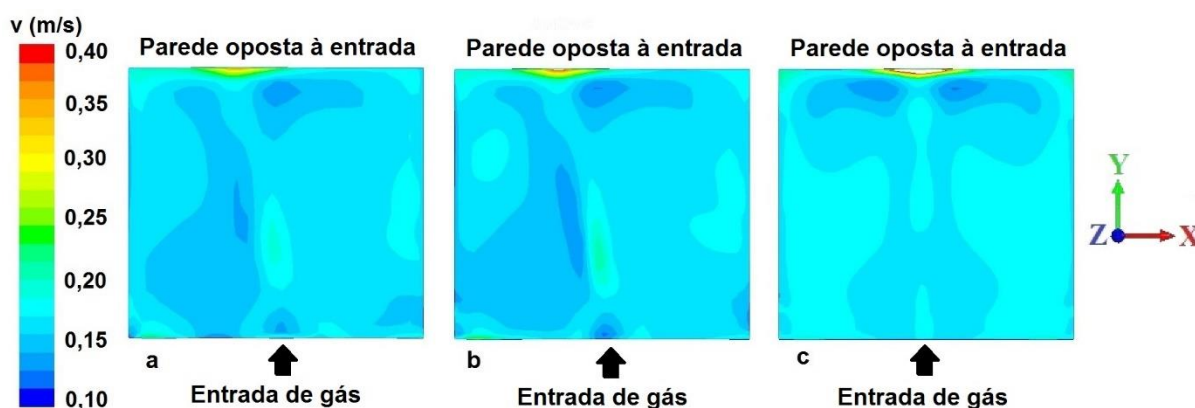


FIGURA 17 – PADRÕES DE DISTRIBUIÇÃO DE FLUXO ATRAVÉS DA *POROUS-JUMP* OBTIDOS EM DIFERENTES REFINAMENTOS: a – baixo; b – médio; c – alto. O ponto de entrada do gás, abaixo da superfície, está indicado em cada um dos casos assim como a localização da parede oposta à entrada do fluxo. No canto direito da figura há a orientação dos eixos de acordo com o ponto de vista utilizado.

5.4 SIMULAÇÕES

Esta seção integra a apresentação das configurações de simulação, das simulações das fases iniciais dos experimentos de cultivo com a mistura FT/BC 9:1 (FINKLER, 2016) e com grãos de soja (MARQUES, 2016) e da análise paramétrica. Posteriormente apresenta-se os resultados de simulação das fases de cultivo com atividade biológica.

5.4.1 Configurações de simulação

O leito de substrato foi representado como uma zona de volume poroso, já que o detalhamento geométrico das partículas individuais ou dos poros exigiria um esforço

computacional excessivo. Da mesma forma, a placa perfurada foi considerada como uma parede porosa (*porous-jump*) com o objetivo de reduzir o esforço computacional, ainda assim preservando a qualidade dos resultados (PRUKWARUN *et al.*, 2013). O valor da perda de carga através do leito poroso de 1.175,5 Pa/m foi estimado por simulação, o qual é próximo do valor médio obtido nas primeiras 10 h do experimento de cultivo. A TABELA 7 mostra os principais parâmetros e configurações da simulação.

TABELA 7 – DESCRIÇÃO DAS CONFIGURAÇÕES DE SIMULAÇÃO.

Descrição	Método/Valor	
Composição do leito	FT/BC 9:1	Grãos de soja
Densidade de partícula úmida (kg/m ³)	1.077	823,6
Calor específico do sólido úmido (J/(kg.°C))	3.146,4	3.103,2
Condutividade térmica do sólido úmido (W/(m.°C))	0,3536	1,0478
Modelo viscoso do meio poroso	Laminar	Laminar
Modo térmico do meio poroso	Non-equilibrium	Non-equilibrium
Coeficiente de transferência de calor do leito (W/(m ³ .°C))	58.376,7*	3.189,7
Pressão de operação (Pa)	101.325	101.325
Parâmetros do <i>porous-jump</i>	1/K= 2,88 x 10 ⁶ m ⁻² ; L= 0,002 m; C ₂ = 15.578,7 m ⁻¹	
Passo de tempo (s)	0,01	0,01

*Valores interpolados de Lima (2009) para a temperatura da fase gás igual a 305 K.

5.4.2 Simulação das fases iniciais do experimento com FT/BC 9:1 e leito homogêneo

A FIGURA 18 compara o comportamento da atividade de água média na fase gasosa quando a isoterma de Peleg (1993) é utilizada nas formas original e corrigida, apresentadas nas equações 21 e 22, respectivamente. Verifica-se que, enquanto a forma corrigida mantém o valor inicial da atividade de água (0,99) próximo do valor unitário (saturação), a forma original admite valores acima de 1. Sabe-se que valores de umidade acima da saturação são uma impossibilidade física e por isso inadmissíveis na construção do modelo.

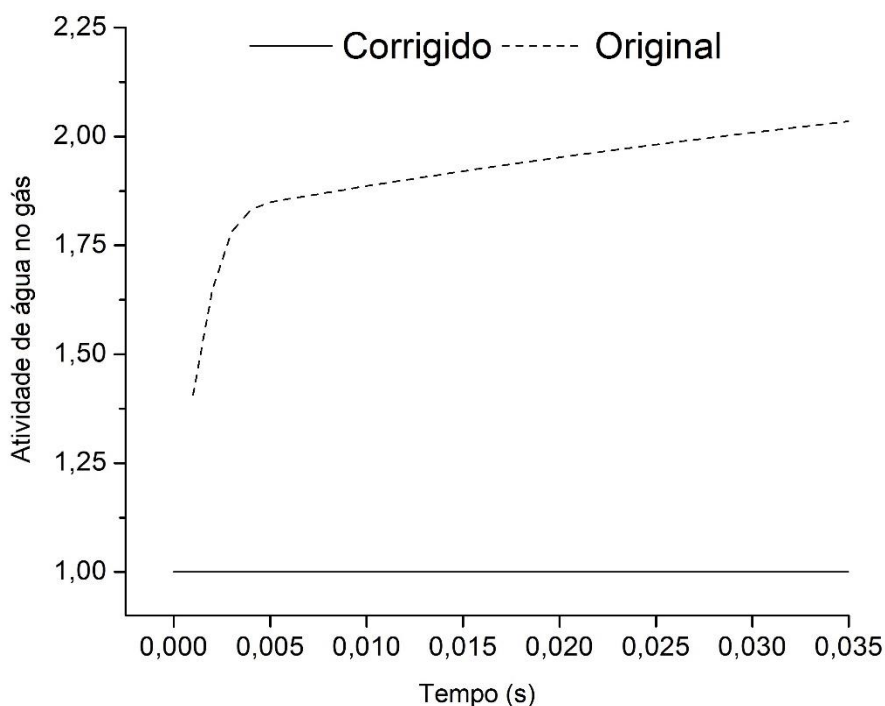


FIGURA 18 – COMPARAÇÃO ENTRE A ATIVIDADE DE AGUA NA FASE GÁS MÉDIA, PARA O VOLUME DO LEITO, GERADA PELA EQUAÇÃO DA ISOTERMA ORIGINAL E MODIFICADA.

As linhas de fluxo têm como origem diferentes pontos na secção do duto de entrada de ar e terminam no duto de saída do biorreator. Cada linha de fluxo traça o caminho de uma partícula originária de um dos pontos do duto de entrada, dentro do biorreator. A FIGURA 19a mostra as linhas de fluxo coloridas de acordo com o diagrama de temperatura do ar, para o momento dos 600 s de fluxo. Pode-se observar que há uma breve região de transição de temperatura (onde as linhas mudam da cor vermelha para azul) no interior do leito de substrato. Ademais, a altura, no interior do leito, na qual ocorre esta transição gradualmente aumenta com o tempo. A FIGURA 19b ilustra as linhas de fluxo coloridas de acordo com a velocidade. Nota-se as maiores velocidades nos dutos de entrada e saída do biorreator, e as menores velocidades no interior do leito de substrato. Além disto, é notável a turbulência gerada na câmara inferior (abaixo da placa perfurada) em contraste com o fluxo laminar no restante do trajeto. A FIGURA 19c apresenta linhas de fluxo coloridas conforme a pressão manométrica local. É possível notar que a região de maior pressão se encontra na câmara inferior do biorreator, com valores aproximados à perda de carga oferecida pelo leito de substrato. A pressão reduz-se gradualmente com a altura do leito e, na saída do equipamento, se iguala a zero. Há também uma pequena região

de pressão manométrica negativa próxima à saída de ar, devido à convergência do fluxo de ar para o duto de saída.

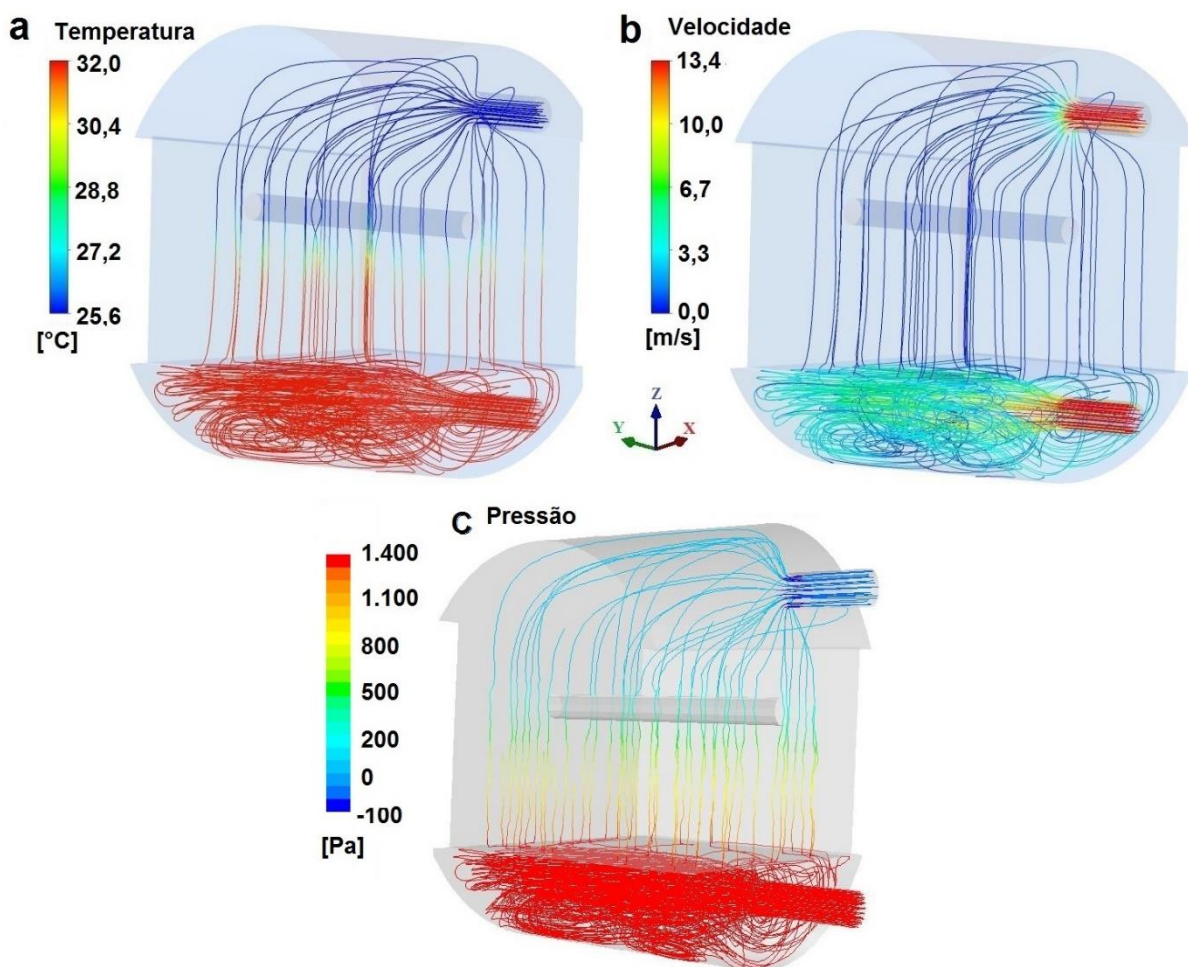


FIGURA 19 – LINHAS DE FLUXO DE (A) TEMPERATURA, (B) VELOCIDADE E (C) PRESSÃO AO LONGO DO BIORREATOR.

Nota-se que os perfis de temperatura simulados não concordam perfeitamente com os experimentais (FIGURA 20a), onde a maior diferença a ser observada encontra-se no fato de a segunda curva experimental ($z=18$ cm) iniciar sua subida precocemente. Isto indicaria um aquecimento, desta altura, muito anterior ao previsto, o que poderia ser explicado por diferenças entre as propriedades físicas reais do leito de substrato e as estimadas. Portanto, para que o leito real tenha mostrado tal comportamento, é provável que as suas propriedades físicas forneçam uma menor inércia térmica ou uma maior taxa de fornecimento de calor, que o previsto. Define-se por inércia térmica a facilidade com que um sistema pode ter sua temperatura alterada através do fornecimento ou retirada de calor. Por exemplo, um sistema de grande

massa tende a ter uma grande inércia térmica, assim como um sistema com alto valor de calor específico.

A análise paramétrica foi planejada assumindo variações de propriedades físicas e condições de operação que pudessem influenciar os perfis de temperatura no sentido de aquecer o substrato com maior rapidez. Na FIGURA 20b observa-se que uma redução do calor específico do leito permitiu que as curvas se elevassem mais cedo, assim como uma redução na densidade de partícula torna mais fácil o aquecimento do sistema. Um aumento na porosidade do leito desloca as curvas para a esquerda (FIGURA 20c) e isto é esperado, pois maiores frações de vazios implicam em uma densidade aparente do leito reduzida e conseqüentemente uma menor inércia térmica do sistema. Uma maior vazão de ar desloca as curvas significativamente para a esquerda, por aumentar a taxa de aquecimento, enquanto uma redução no coeficiente de transferência de calor surte um pequeno efeito no perfil (FIGURA 20d).

O teste paramétrico exemplifica várias possibilidades de variação nas propriedades do leito que poderiam traduzir-se nas diferenças verificadas entre a simulação do caso central e os dados experimentais. No entanto, nenhuma das variações testadas foi capaz de reproduzir a proximidade temporal entre o aquecimento das duas primeiras alturas. Tal fenômeno também poderia estar relacionado a variações na vazão de ar geradas por oscilações de pressão e/ou temperatura ambiente. Com vazões maiores, temporariamente, seria possível gerar um aquecimento mais acelerado das duas primeiras alturas e, com a redução posterior da vazão, mais atrasado para a terceira altura.

Analisando o período necessário para que as três alturas alcancem o equilíbrio térmico (32 °C), é possível afirmar que tanto a simulação quanto as leituras experimentais se assemelham quanto a este quesito. Isto reforça a proximidade da relação entre a taxa de fornecimento de calor, através da aeração, e a capacidade térmica do leito de substrato para ambos os casos. O que pode indicar um bom nível de precisão do modelo matemático e das propriedades físicas estimadas.

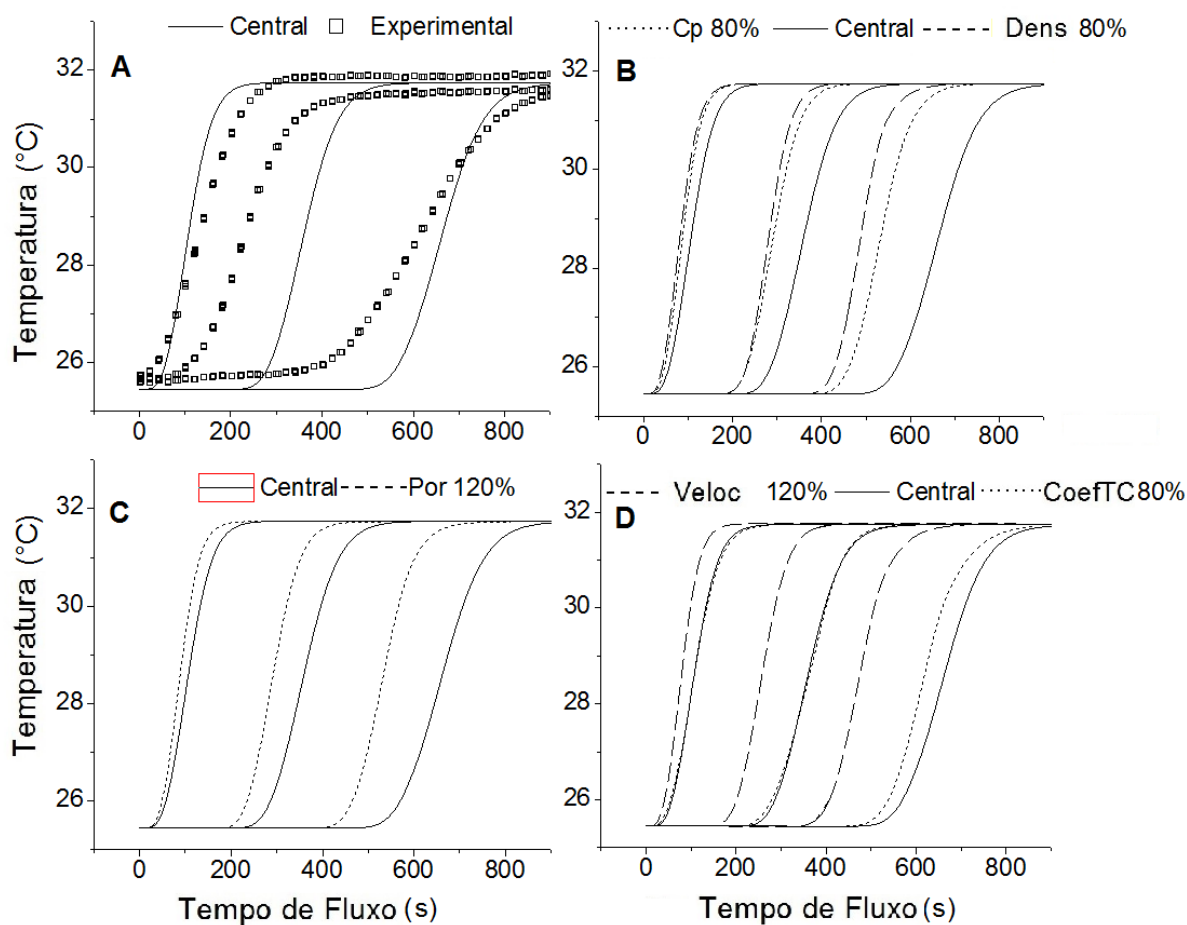


FIGURA 20 – PERFIS SIMULADOS DE TEMPERATURA E ANÁLISE PARAMÉTRICA. Comparação: a – dados experimentais e simulação do caso central; b – caso central e casos com calor específico do substrato (cp) 20 % menor e com densidade de partícula (dens) 20 % menor; c – caso central e caso com porosidade do leito de substrato (por) 20 % maior; d – caso central e casos com vazão de ar (veloc) 20 % maior e com coeficiente de transferência de calor do substrato (coeftc) 20 % menor.

Enquanto os perfis de temperatura apresentavam curvas que, individualmente, representavam a média das leituras dos quatro termopares de uma mesma altura, as predições de umidade do ar e do substrato representam valores médios de planos XY (FIGURA 21) perpendiculares à direção do fluxo gasoso (z). Da mesma forma, os planos situados nas menores alturas sofrem primeiro as perturbações geradas pela passagem do ar quente e úmido. A FIGURA 22 mostra os perfis de umidade do ar média preditos para cada um dos cinco planos XY em diferentes alturas, incluindo a da superfície do substrato ($z=40$ cm). A umidade do ar parte de 0,0205 kg/kg (condição de equilíbrio com o substrato na temperatura inicial de 25,6 °C), aumentando até 0,0300 kg/kg (umidade de saturação do ar de entrada, a 32,0 °C). Isso ocorre, pois, o

ar mais quente e úmido invade os poros do leito aquecendo o substrato e substituindo o ar mais frio e seco, inicialmente estagnado. E isto ocorre inicialmente nas regiões mais baixas do leito, aquecendo e umedecendo o ar nas porções mais altas gradualmente.

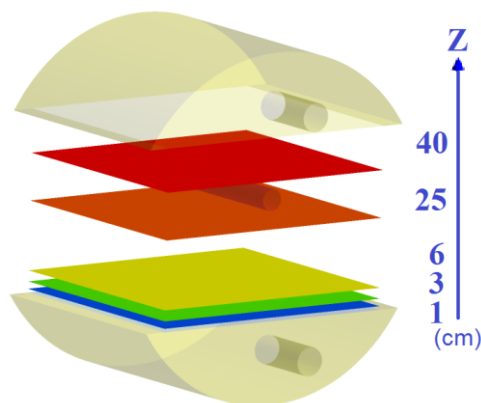


FIGURA 21 – PLANOS XY DISTRIBUIDOS NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm DO LEITO.

A umidade do substrato gerou um perfil similar à umidade do ar, porém variando dentro de uma estreita faixa (FIGURA 22). Como o substrato está mais frio que o fluxo de ar saturado de entrada, ocorre o resfriamento da fase gás ao entrar em contato com os sólidos do leito. Sendo que o ar resfriado tem menor capacidade de reter umidade, ocorre inevitavelmente a condensação da água em excesso na fase gás, elevando ligeiramente o teor de umidade do substrato próximo. Esta condensação acelera o aquecimento do substrato, já que se trata de um processo exotérmico. Como esperado, em ambos os perfis as menores alturas sofrem as variações mais cedo.

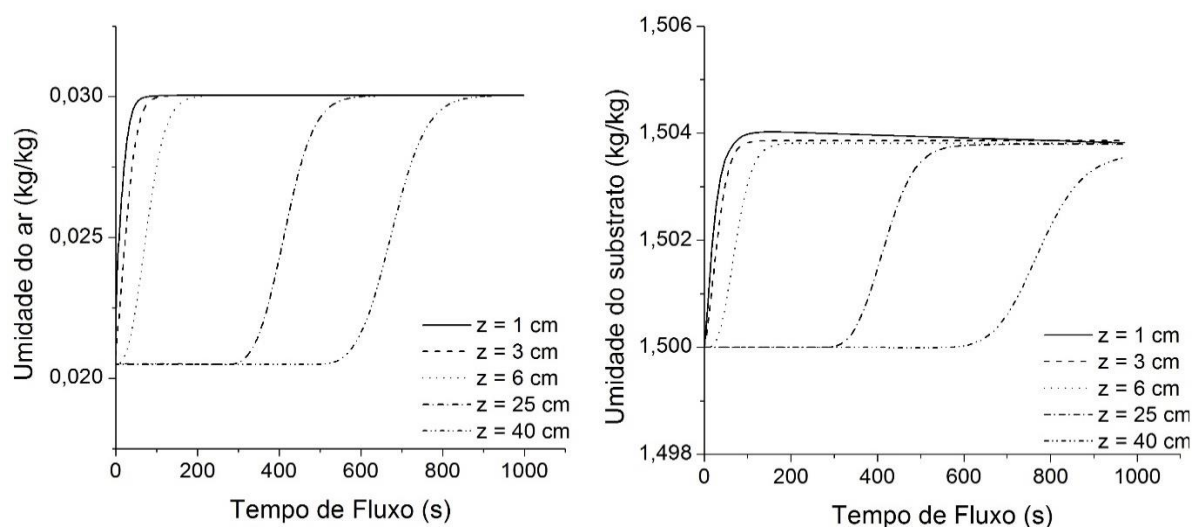


FIGURA 22 – PERFIS SIMULADOS DE UMIDADE DO AR E DO SUBSTRATO MÉDIOS PARA OS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm.

A perda de carga existe no sistema, e mesmo a maior amplitude de variação de pressão (cerca de 0,014 atm) não gera oscilações significativas no equilíbrio de umidade do ar.

5.4.3 Simulação das fases iniciais do experimento com FT/BC 9:1 e leito heterogêneo

Aplicou-se uma porosidade randômica aos elementos do leito, no caso do experimento com FT/BC 9:1, para se verificar a influência nos perfis de temperatura e umidade do ar e do substrato. Os valores aleatórios de porosidade se distribuíram de forma normal dentro de uma faixa de desvio de cerca de 20% em torno do valor central (igual a 0,564, calculado pelas equações 42 e 43). Em consequência da variação da porosidade, a permeabilidade também foi recalculada para cada elemento com o uso da Equação 35, definindo-se a permeabilidade de $K = 1,95 \times 10^{-9} \text{ m}^2$ para a porosidade central e estimando d_p^2/β como uma constante igual a $7,44 \times 10^{-8} \text{ m}^2$.

Através de cortes planos do volume do leito de substrato é possível observar mapas de contornos de variáveis relacionados ao substrato. A posição dos cortes paralelos aos planos XY, XZ e YZ podem ser observados através da FIGURA 23. Com

base nestes planos são demonstrados a distribuição e os efeitos da porosidade heterogênea (FIGURA 24) e dos primeiros momentos de fluxo de ar. Nas imagens de contornos coloridos, as faixas brancas horizontais nos planos YZ ($X = 35$ cm) e os círculos brancos nos planos XZ são os contornos do eixo de rotação do biorreator piloto.

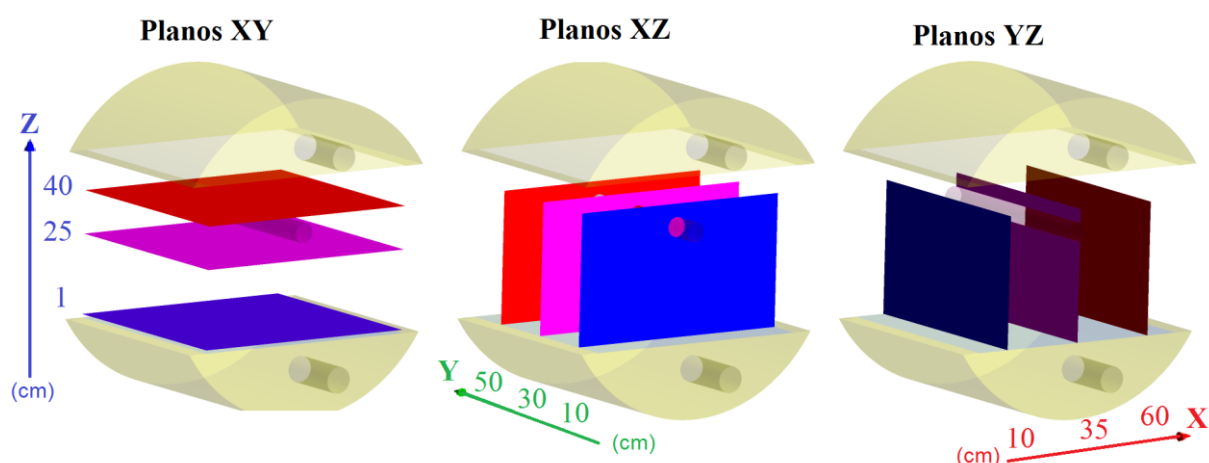


FIGURA 23 – PLANOS DE CORTE DO LEITO UTILIZADOS PARA A GERAÇÃO DOS CONTORNOS DE VARIÁVEIS. Planos XY nas posições de Z (altura) de 1, 25 e 40 cm, planos XZ nas posições de Y de 10, 30 e 50 cm e planos YZ nas posições de X de 10, 35 e 60 cm.

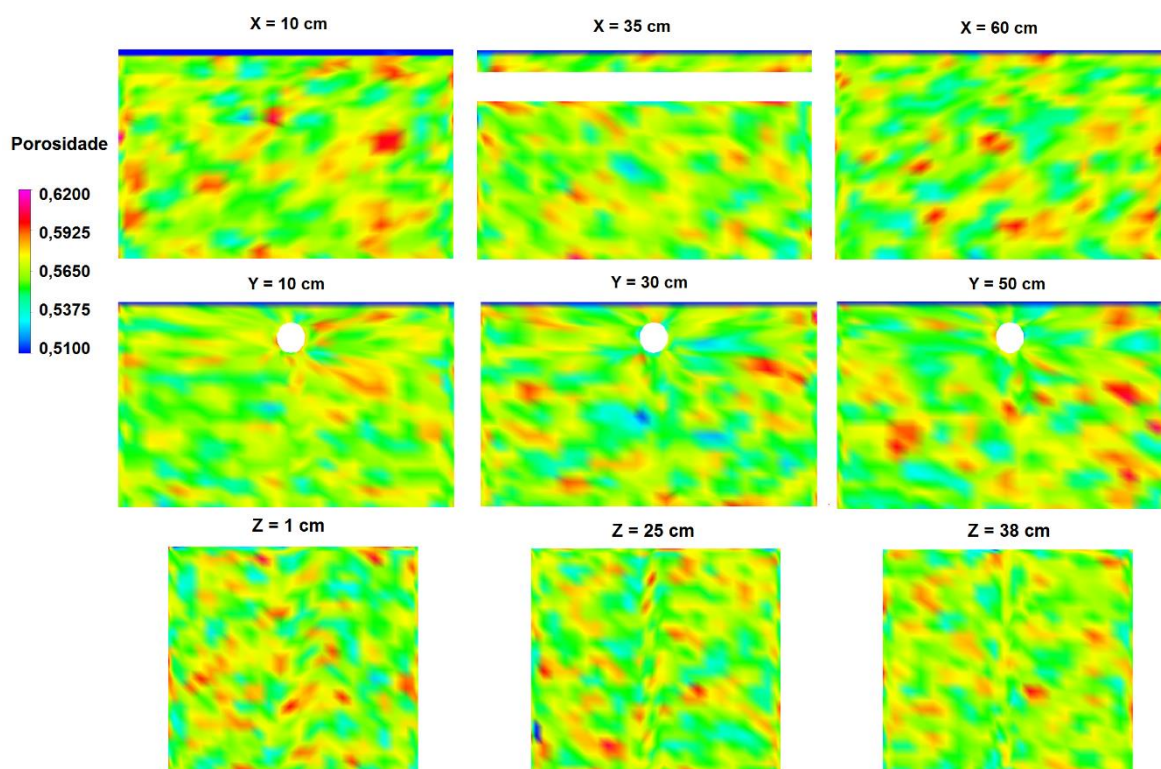


FIGURA 24 – CONTORNOS DE POROSIDADE DO SUBSTRATO HETEROGÊNICO DE FT/BC 9:1 NOS PLANOS XZ E YZ.

É possível observar, nas FIGURAS 25 e 26, a existência de duas regiões, uma delas mais alta, de cor azul escura, e outra de cores variando do azul claro até púrpura. A região azul escura representa uma porção de umidade inicial do substrato, onde o processo de condensação de umidade ainda não iniciou, pois, toda umidade em excesso na fase gás se condensou na faixa de transição com a região mais baixa, representadas por diversas cores. Ao atravessar a placa perfurada, a fase gás sobe pelo leito e, enquanto está em contato com a região colorida, não há transferência de calor ou de água significativa, afinal esta região sólida mais baixa já entrou em equilíbrio com a fase gás quente e úmida. No entanto, ao atravessar a faixa de transição com a região azul escura, o gás gradualmente se resfria e gera condensação, até o momento em que o ar mais frio e seco entra em equilíbrio com a região sólida fria e seca (azul escura). Com o tempo, a faixa de transição entre as duas regiões distintas do leito se eleva e a região azul escura se reduz gradualmente, como pode ser observado entre as FIGURAS 25 e 26, devido aos diferentes tempos de fluxo de 400 e 800 s.

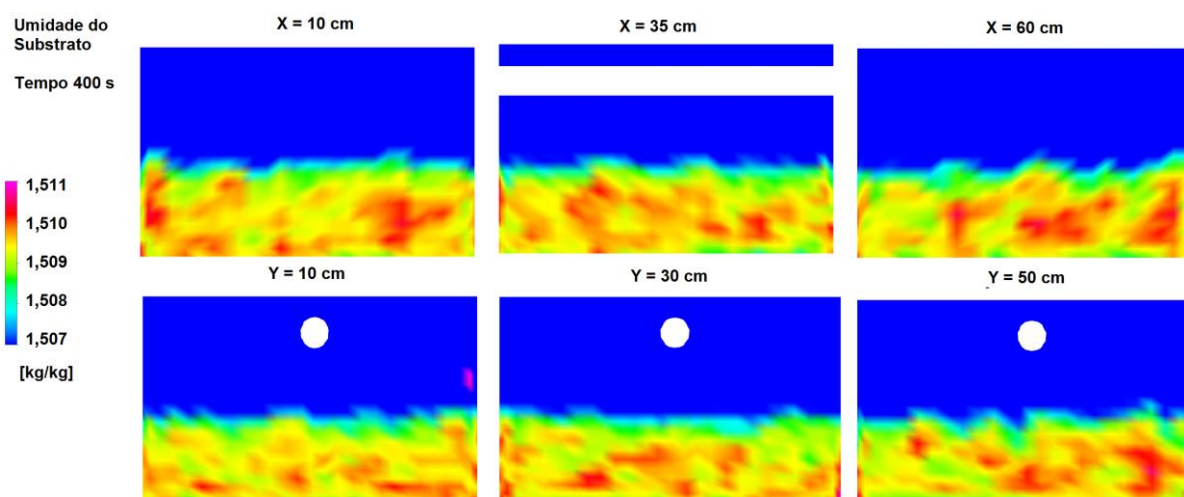


FIGURA 25 – CONTOURO DE UMIDADE DO SUBSTRATO HETEROGÊNEO FT/BC 9:1 NO TEMPO DE 400 s NOS PLANOS XZ E YZ.

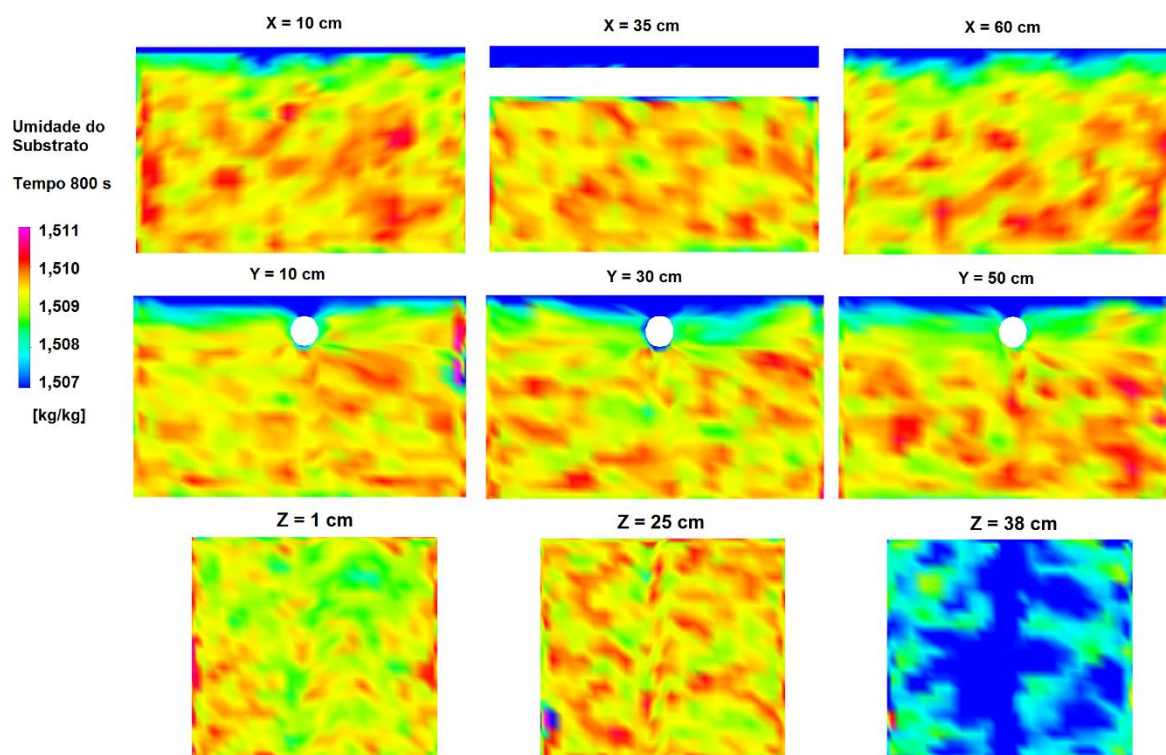


FIGURA 26 – CONTOURO DE UMIDADE DO SUBSTRATO HETEROGÊNIO FT/BC 9:1 NO TEMPO DE 800 s NOS PLANOS XZ E YZ.

Também é notável como as diferentes condições de porosidade podem levar a uma distribuição diferenciada da umidade do substrato, representada pelas diversas cores, apesar desta amplitude de variação ser bastante estreita. Regiões de menor porosidade apresentam maior massa de sólidos e, portanto, maior inércia térmica, implicando uma menor velocidade de aquecimento e de secagem do substrato, conseqüentemente. Além disto, regiões de menores porosidades apresentam maiores resistências ao fluxo e, por isso, estão expostos à menores fluxos de ar, tornando as trocas de calor e massa mais lentas. Assim sendo, as regiões de cores avermelhadas nas FIGURAS 25 e 26 são mais úmidas e apresentam maiores porosidades do que as regiões de cores mais frias.

Apesar das diferentes condições dentro do substrato, não são facilmente observáveis gradientes radiais de temperatura nem de umidade do ar, como pode ser confirmado pelas FIGURAS 27, 28 e 29, 30.

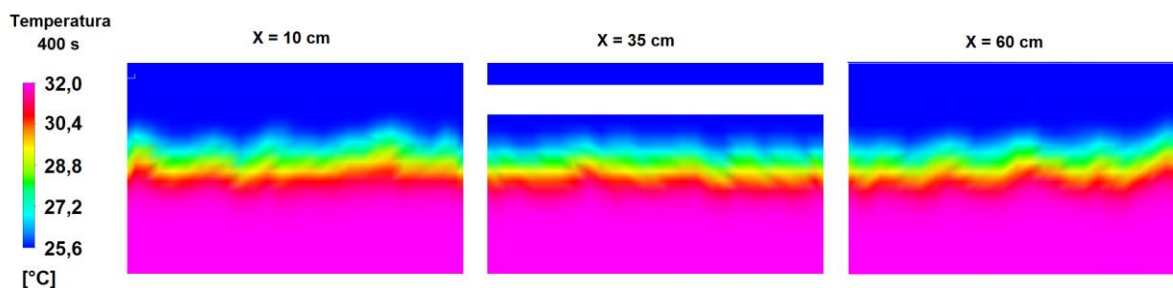


FIGURA 27 – CONTORNO DE TEMPERATURA DO SUBSTRATO HETEROGÊNIO FT/BC 9:1 NOS TEMPOS DE 400 s NOS PLANOS XZ E XY.

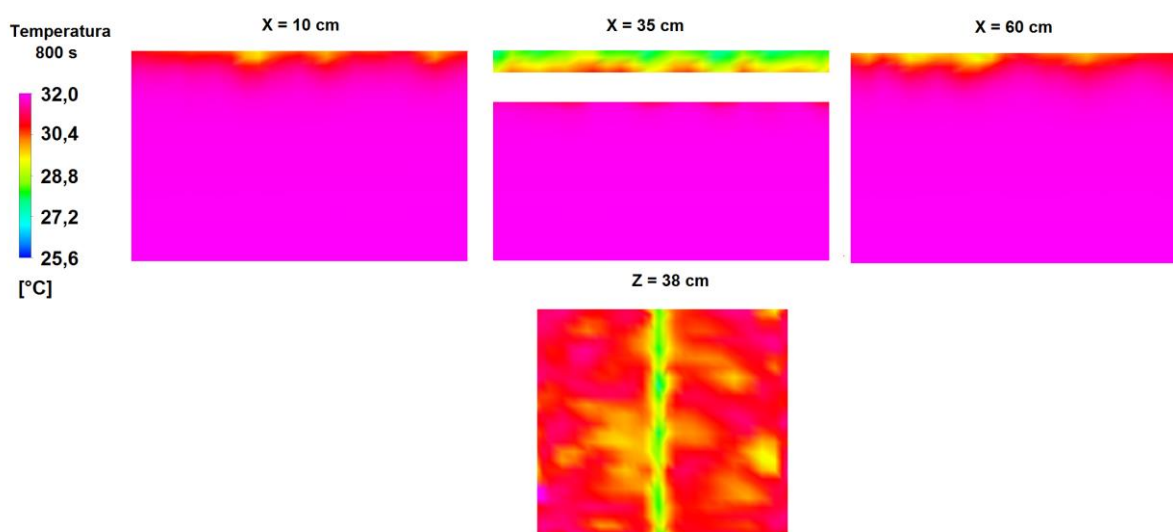


FIGURA 28 – CONTORNO DE TEMPERATURA DO SUBSTRATO HETEROGÊNIO FT/BC 9:1 NOS TEMPOS DE 800 s NOS PLANOS XZ E XY.

É perceptível como o modelo de fluidodinâmica foi capaz de prever as influências diretas e indiretas do eixo de rotação do biorreator no fluxo de ar através do leito (FIGURAS 26, 28 e 30). Devido às menores velocidades no entorno da superfície estática do eixo, principalmente na porção imediatamente superior, menores taxas de troca de calor e de massa incidiram sobre a região. Desta forma, a região superior ao eixo tem um substrato mais seco e mais frio que o seu entorno. É importante realçar que tal detalhamento dos resultados não poderia ser atingido com o uso de modelos de predição axial da dinâmica física da fermentação em estado sólido.

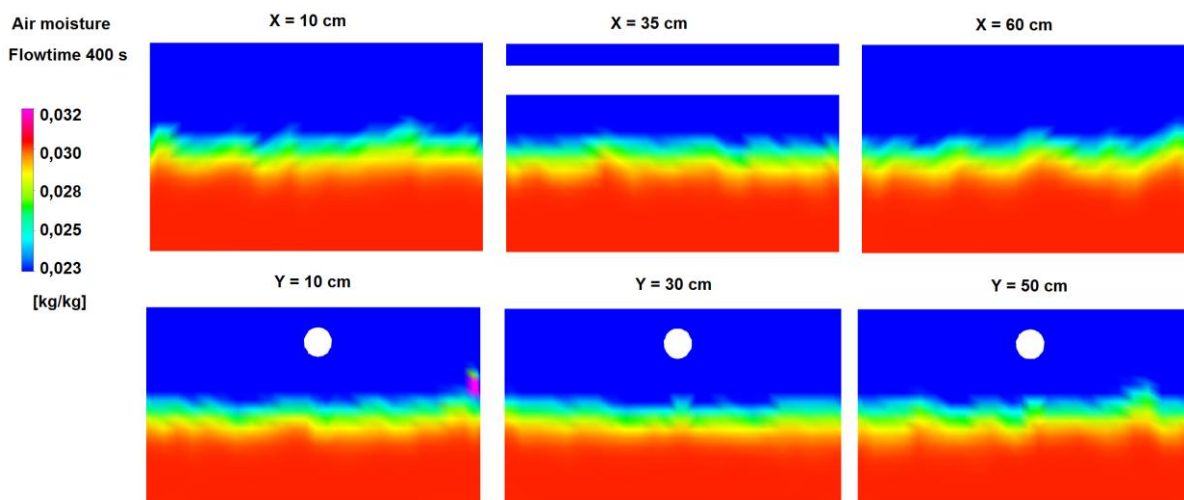


FIGURA 29 – CONTOURO DE UMIDADE DO AR NO LEITO HETEROGÊNIO FT/BC 9:1 NO TEMPO DE 400 s NOS PLANOS XZ E YZ.

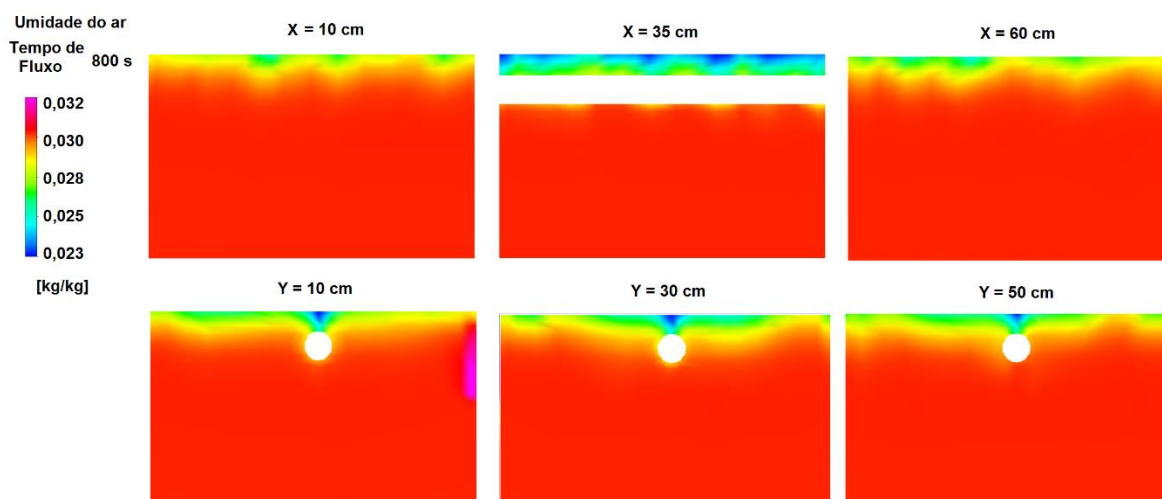


FIGURA 30 – CONTOURO DE UMIDADE DO AR NO LEITO HETEROGÊNIO FT/BC 9:1 NO TEMPO DE 800 s NOS PLANOS XZ E YZ.

Através da FIGURA 31 pode-se comparar os perfis individuais de cada termopar para os casos homogêneo e heterogêneo, e entre as médias de temperatura para cada altura em cada caso. Percebe-se que os desvios nas temperaturas registradas entre os termopares de uma mesma altura são maiores para o leito heterogêneo. Apesar disto, não há uma indicação clara de que isto se deva à uma distribuição diferenciada do fluxo de ar devido à geometria complexa do biorreator. Nota-se, também, que apesar das diferenças nas predições entre cada termopar individual, as médias de temperatura para cada altura são bastante próximas.

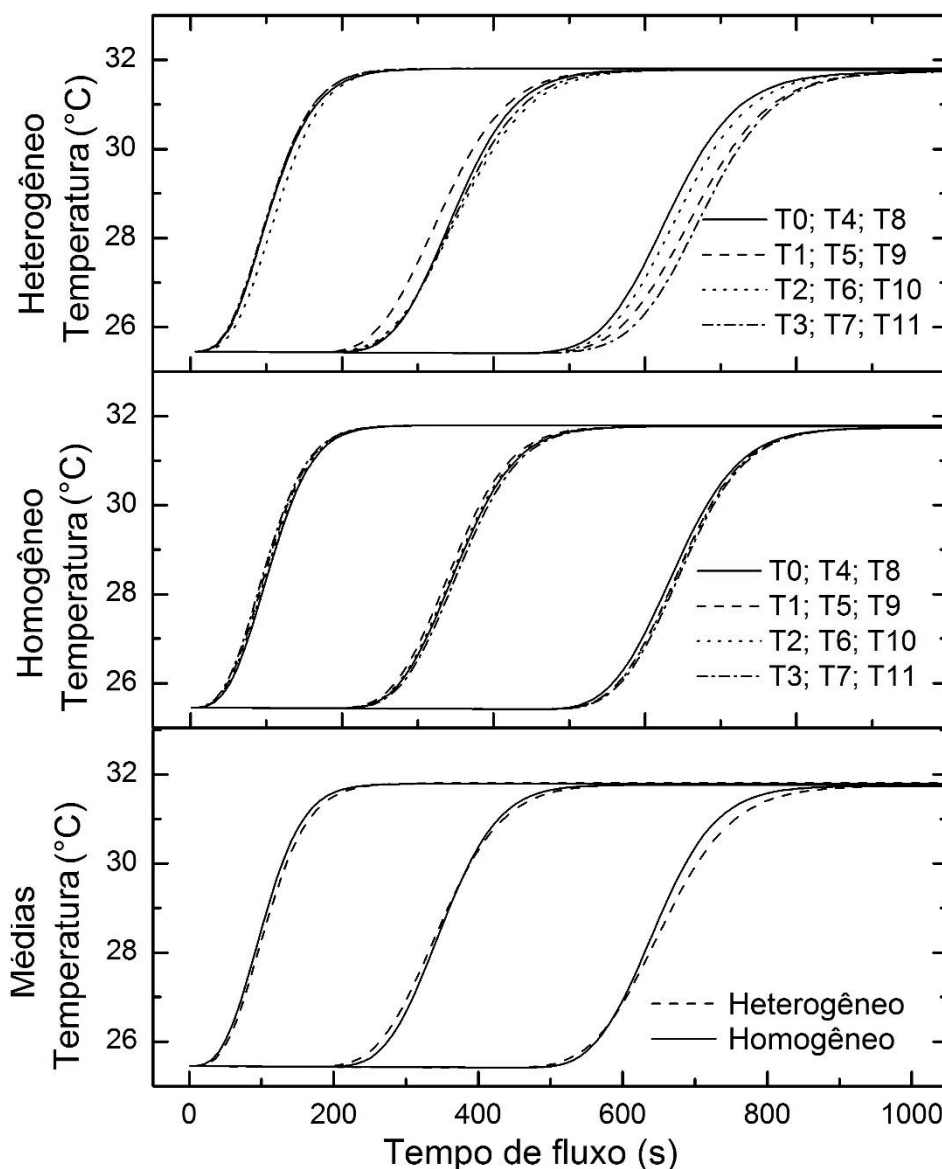


FIGURA 30 – COMPARAÇÃO ENTRE AS LEITURAS INDIVIDUAIS DOS TERMOPARES E ENTRE AS MÉDIAS DAS LEITURAS DOS TERMOPARES DAS ALTURAS DE 5, 18 E 33 cm, PARA AS SIMULAÇÕES COM LEITO HOMOGÊNIO E HETEROGÊNIO.

Pode-se observar que devido à distribuição irregular dos desvios de porosidade e permeabilidade, alguns termopares coincidentemente situaram-se em pontos com condições de fluxo bastante distintos. Maiores porosidades geram maiores permeabilidades e maiores velocidades de fluxo, implicando em taxas de aquecimento e condensação mais elevadas, além de uma menor inércia térmica da região. Esse fenômeno previsto por simulação pode ser um problema real nas leituras experimentais de temperatura, e pode gerar interpretações errôneas da temperatura média do substrato em cultivos reais.

Já a FIGURA 31 compara as predições individuais dos termopares do mesmo caso heterogêneo com um leito heterogêneo alternativo e, também, com as leituras experimentais. O leito alternativo possui uma distribuição de porosidade distinta, porém que foi gerada nas mesmas condições que a primeira. A leitura do gráfico experimental (FIGURA 31a) se dá da mesma forma que os gráficos de temperatura preditivos: as primeiras quatro curvas a se elevarem se referem aos primeiros quatro termopares (T0, T1, T2 e T3, não necessariamente nesta ordem), assim como as próximas quatro curvas se referem aos próximos quatro termopares (T4, T5, T6 e T7, não necessariamente nesta ordem), assim por diante. A simbologia de cada termopar está indicada na legenda da figura. Comparando-se as predições para o leito heterogêneo convencional com as leituras experimentais (FIGURAS 31b e 31c) verifica-se que várias curvas se encontram nas mesmas ordens de posição. No entanto, comparando-se os dados experimentais com as predições do leito alternativo, não se verifica esta mesma ocorrência. O leito alternativo confirma que a constatação sobre a ordem das curvas se deveu a uma coincidência, pois, caso não fosse, poderia ser afirmado que a geometria do biorreator piloto estaria influenciando a distribuição do fluxo de ar neste sentido. Apesar das diferenças de predição entre os dois leitos heterogêneos, as médias entre os termopares de cada altura, para ambos os casos, são muito próximas (FIGURA 31d).

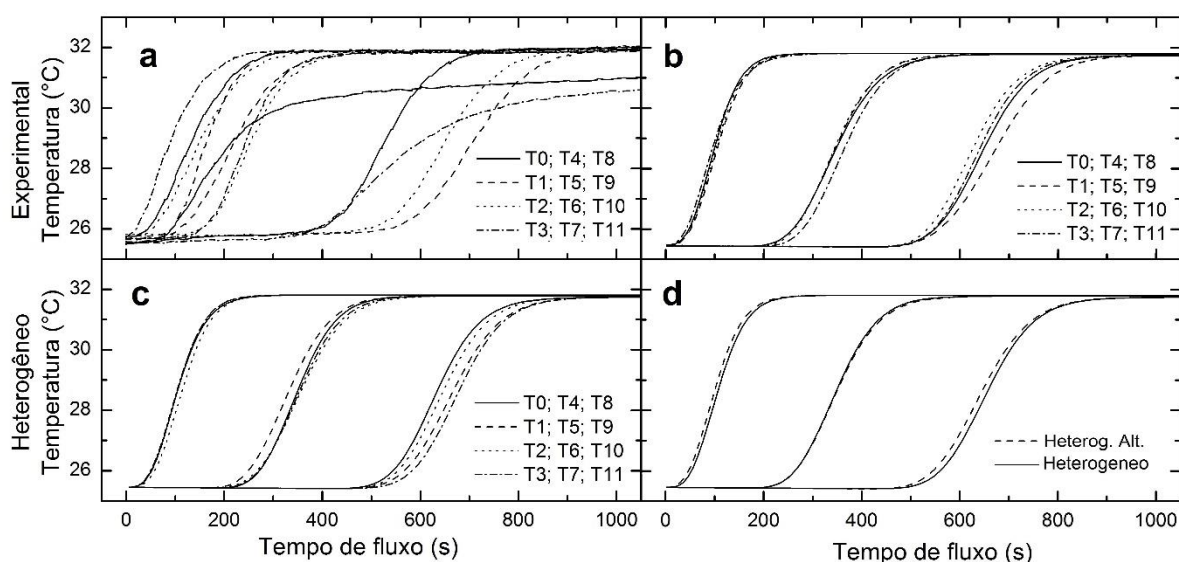


FIGURA 31 – COMPARAÇÃO ENTRE AS PREDIÇÕES DE TERMOPARES DE LEITOS HETEROGÊNEOS DE DISTRIBUIÇÃO DE POROSIDADES DISTINTAS E AS LEITURAS INDIVIDUAIS EXPERIMENTAIS (TEMPERATURA NO EIXO Y). (A) leituras experimentais, (b) predição para leito heterogêneo convencional, (c) predição para leito heterogêneo alternativo, (d) comparação entre as médias preditas de cada altura para os dois leitos heterogêneos distintos.

Os perfis de umidade do ar e do substrato para o leito heterogêneo convencional, comparados com o leito homogêneo, podem ser observados pelas FIGURAS 32 e 33, respectivamente. Os gráficos não diferenciam simbolicamente as curvas e suas correspondentes alturas no leito de substrato. No entanto, basta repetir o mesmo raciocínio utilizado para a leitura dos perfis de temperatura: o plano XY situado na primeira altura (1 cm) é o primeiro a sofrer a perturbação gerada pela aeração, correspondendo à primeira curva a se manifestar na linha do tempo; portanto, o segundo plano XY (3 cm) corresponde à segunda curva a se manifestar no gráfico, e assim por diante. Nota-se que a variação da umidade do ar para ambos os leitos é a mesma, apenas um pouco atrasada no caso do substrato heterogêneo, provavelmente devido à distribuição não uniforme do calor pelo volume do leito. Já o perfil de umidade do sólido apresenta uma maior amplitude de variação para o leito heterogêneo, fenômeno que, de alguma forma, está relacionado à irregularidade na distribuição de sólidos no leito. Além disso, para ambos os casos, as menores alturas foram mais influenciadas pela condensação de água, o que é esperado, pois a condensação ocorre mais intensamente nas regiões de maior diferença de temperatura entre as fases sólida e gasosa.

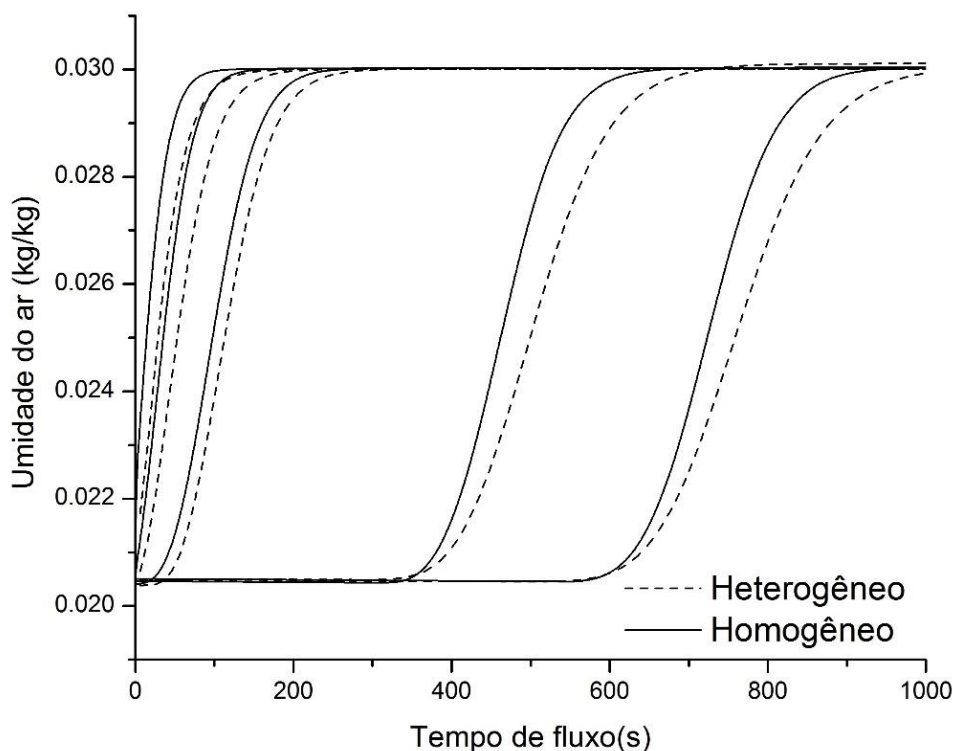


FIGURA 32 – COMPARAÇÃO ENTRE UMIDADE DO AR MÉDIA PARA OS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm, PREDITA EM LEITO HETEROGÊNIO E HOMOGÊNIO DE FT/BC 9:1.

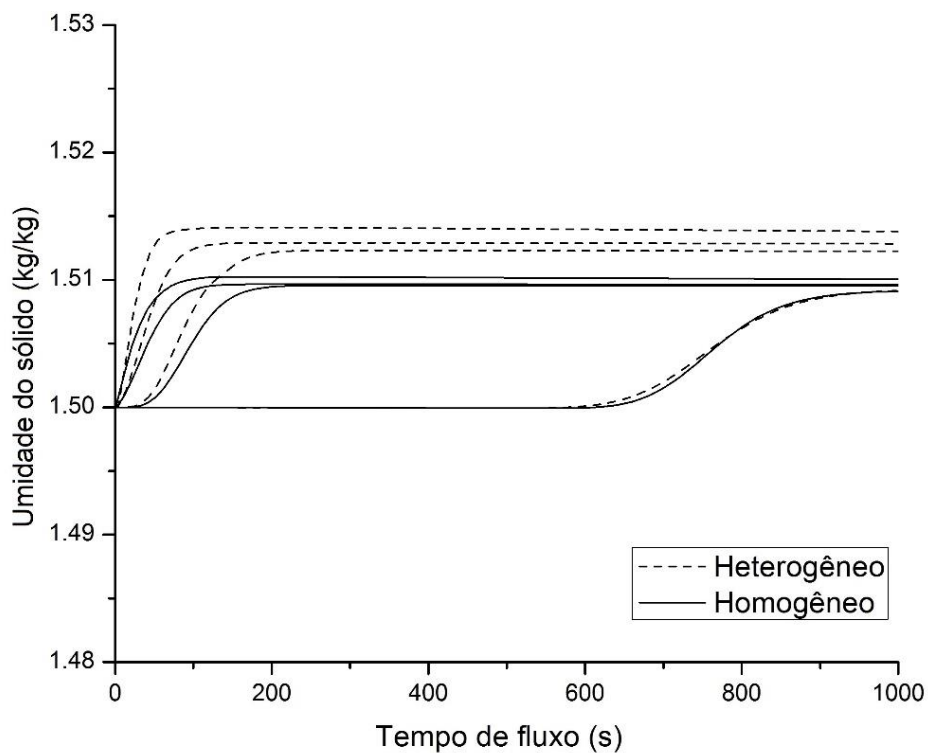


FIGURA 33 – COMPARAÇÃO ENTRE UMIDADE DO LEITO MÉDIA PARA OS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6 E 40 cm, PREDITA EM LEITO HETEROGÊNEO E HOMOGÊNEO DE FT/BC 9:1.

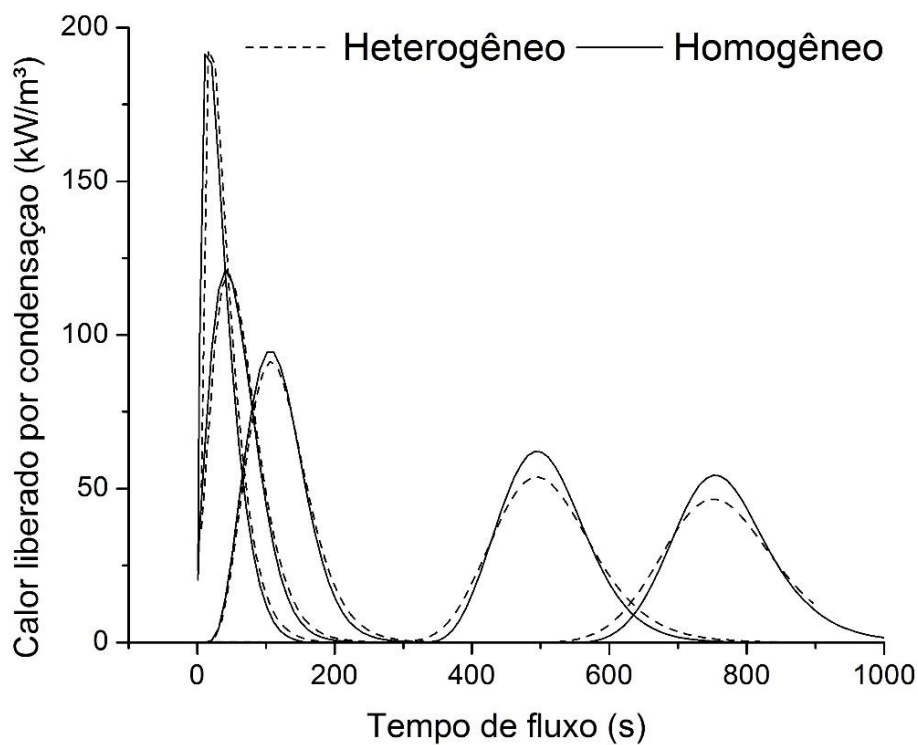


FIGURA 34 – COMPARAÇÃO ENTRE OS CALORES MÉDIOS LIBERADOS POR CONDENSAÇÃO PARA OS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm, PREDITOS EM LEITO HETEROGÊNEO E HOMOGÊNEO DE FT/BC 9:1.

A FIGURA 34 apresenta o perfil de calor liberado por condensação nas diferentes alturas, sendo que cada pico corresponde à média do plano XY de uma altura. Nota-se que as primeiras alturas apresentam picos de condensação maiores, porém mais breves, enquanto as últimas alturas demonstram picos mais baixos, porém mais duradouros. Isto ocorre pelo fato de a diferença de temperatura entre ambas as fases ser mais acentuada em pontos mais próximos à entrada do gás. A medida que o gás atravessa o leito, sua temperatura fica gradualmente mais próxima à da fase sólida, reduzindo as taxas de condensação e de transferência de calor com a altura. O aumento seguido de uma queda do calor liberado por condensação, descreve a aproximação e afastamento, respectivamente, da faixa de transição (zona de condensação) em relação a um plano XY determinado. Esta zona de condensação separa a região sólida inferior que está em equilíbrio com a fase gás quente e úmida, proveniente da entrada, da região sólida superior que está em equilíbrio com o ar que se tornou frio e seco.

Observa-se também que, apesar da semelhança, os picos de calor associados ao leito homogêneo são levemente mais altos e os associados ao leito heterogêneo são levemente mais largos na região da base. Ou seja, a heterogeneidade do leito permitiu uma melhor dissipação do calor pelo volume de substrato poroso. Verifica-se a conservação da energia entre os dois casos confirmando que as áreas destacadas no topo e nas bases de cada pico são iguais.

5.4.4 Simulação das fases iniciais do experimento com grãos de soja e leito homogêneo

O experimento com grãos de soja teve suas condições iniciais descritas por Marques (2005) e se encontram nas TABELAS 6 e 8. O experimento constitui no resfriamento de um leito poroso e úmido de grãos de soja conduzido no biorreator piloto. Assim como no experimento com a mistura FT/BC 9:1 cada linha de temperatura representa a média entre quatro termopares dispostos em uma mesma altura do leito. E da mesma forma, os termopares dispostos nas menores alturas são os primeiros a manifestarem um comportamento em função do resfriamento pelo fluxo gasoso. Em razão da grande diferença entre a temperatura inicial do substrato e do

ar de entrada, mesmo nas maiores alturas, a fase gás ainda não havia atingido o equilíbrio térmico e, portanto, as porções mais altas de substrato sofreram o efeito de resfriamento ainda nos primeiros momentos (FIGURA 35).

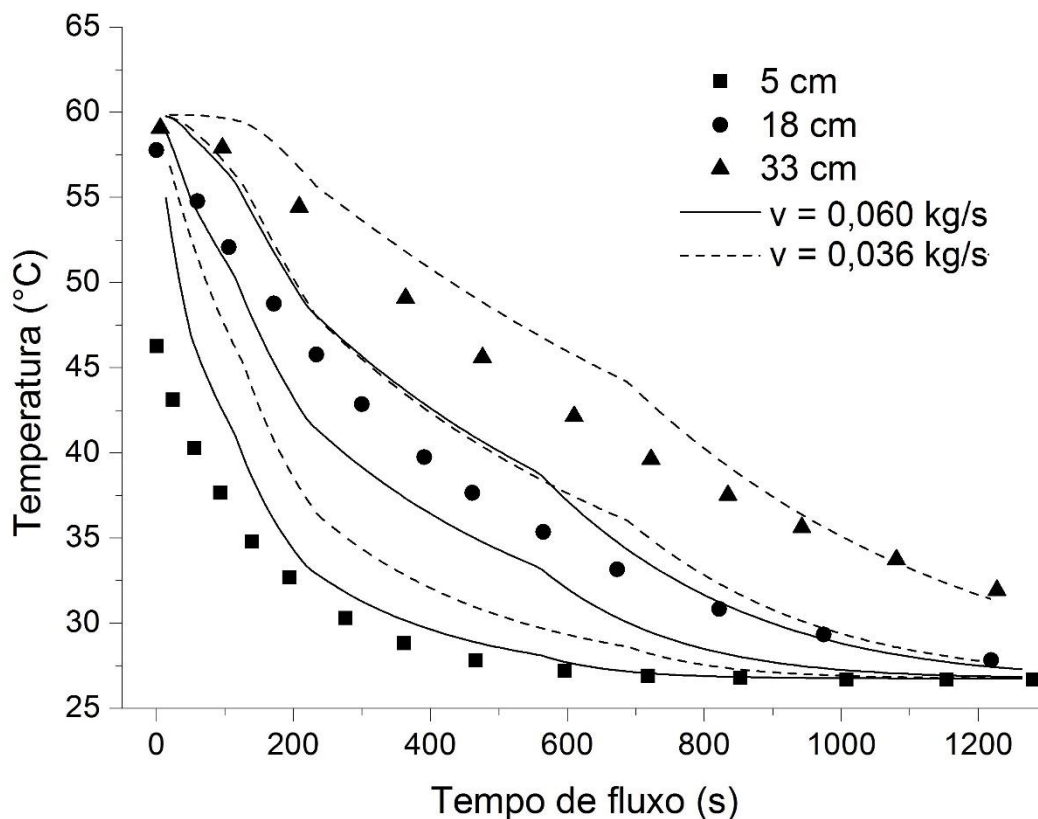


FIGURA 35 – COMPARAÇÃO ENTRE TEMPERATURAS PREDITAS E LEITURAS EXPERIMENTAIS MÉDIAS PARA CADA ALTURA, PARA O LEITO DE SOJA. Simulação com velocidade de entrada do ar de 10,8 (—) e 6,4 m/s (- - -) e dados experimentais na altura de 5 (■), 18 (●) e 33 cm (▲).

Mesmo que o a vazão experimental, de 0,060 kg/s, tenha sido simulada, foi testado um valor de vazão menor (0,036 kg/s), para verificar qual dos casos concordaria melhor com os resultados experimentais. Pode-se observar na FIGURA 35 que a vazão reduzida induziu a uma menor velocidade de resfriamento do sistema. No entanto, é provável que imprecisões em outros parâmetros do leito podem estar influenciando os resultados, como verificado na análise paramétrica: porosidade, calor específico e densidade do substrato. É perceptível que nenhuma das velocidades gerou um perfil de médias de temperatura que descrevesse fielmente os dados experimentais. Verifica-se que, mesmo que a maior velocidade de fluxo descreva melhor a curva para a menor altura no leito (5 cm), a menor velocidade descreve melhor o perfil de temperatura para a maior altura (33 cm).

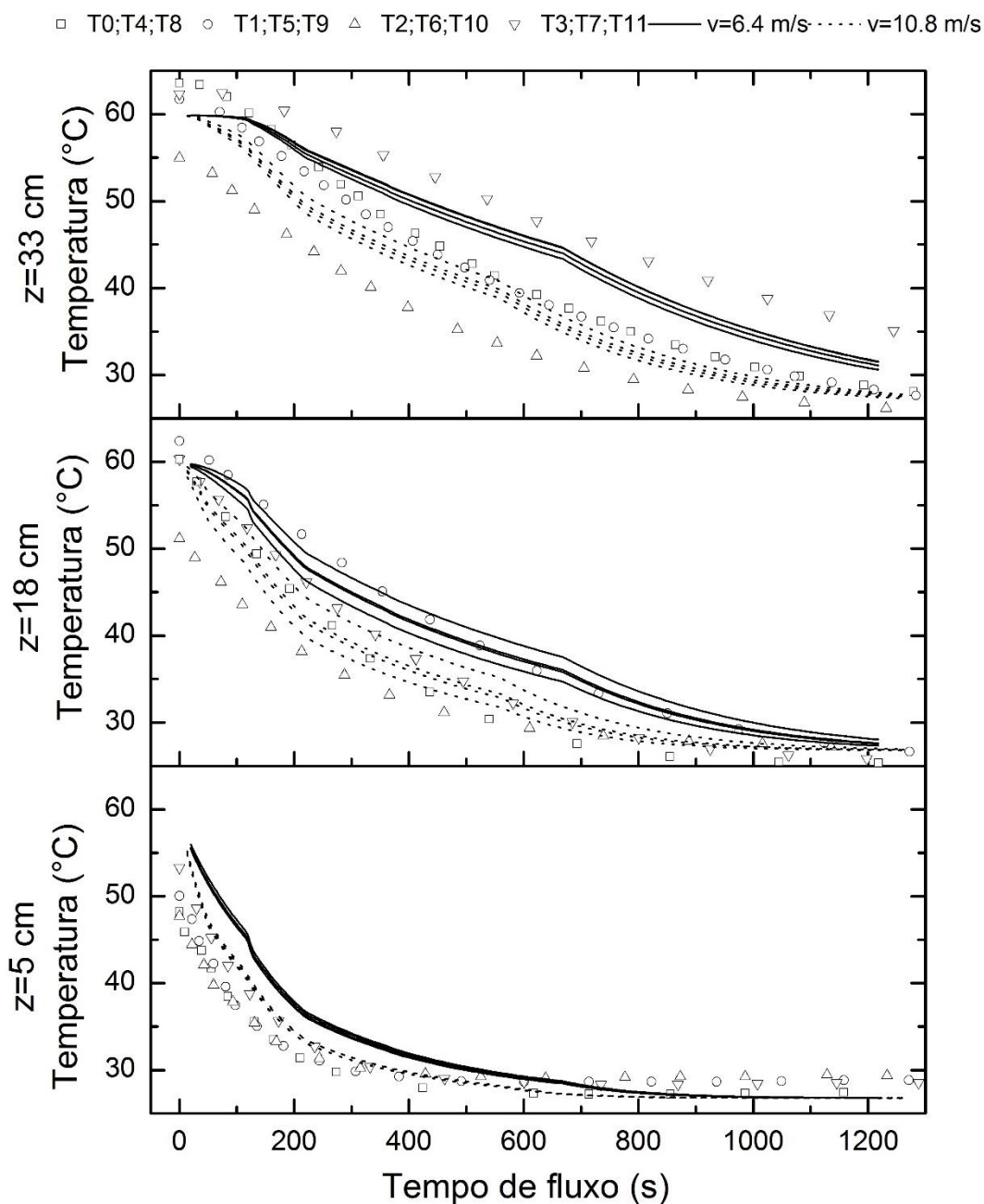


FIGURA 36 – COMPARAÇÃO ENTRE TEMPERATURAS PREDITAS PARA OS TERMOPARES INDIVIDUAIS, PARA VELOCIDADES DE FLUXO DE 10,8 E 6,4 m/s, E AS LEITURAS EXPERIMENTAIS, PARA O LEITO DE SOJA.

Na FIGURA 36, os termopares individuais de cada simulação não foram diferenciados para cada altura devido à proximidade entre suas leituras não trazer esta necessidade. A FIGURA 36 comprova que ambas simulações geraram resultados dentro ou próximos da faixa de variação das temperaturas registradas experimentalmente para uma mesma altura. A faixa de variação das temperaturas experimentais para uma mesma altura se mostrou muito maior que as previstas,

principalmente nas maiores alturas. A análise das distribuições das temperaturas experimentais com relação eixo Y (profundidade do biorreator), leva a conclusão sobre a inexistência de padrões de aquecimento. Ou seja, não há aquecimento preferencial no sentido da profundidade do leito de sólidos. Esta conclusão pode ser obtida baseando-se no posicionamento de cada termopar (TABELA 4). Tamanhas variações de temperatura – por exemplo, uma diferença de até 20 °C, aproximadamente, entre os termopares T10 e T11, a 33 cm de altura e 400 s tempo de fluxo – poderiam ser atribuídas a oscilações locais de porosidade, onde maiores frações de vazios tornam o aquecimento da região facilitada. No entanto, os grãos de soja são aproximadamente esféricos e as poucas configurações de empacotamento disponíveis não dão margem a grandes variações de porosidade. Uma última hipótese estaria relacionada à qualidade e precisão de medição de alguns termopares, que poderia levar a desvios irreais dos valores verdadeiros de temperatura.

Baseado nos perfis de temperatura preditos para os leitos de FT/BC 9:1 e de grãos de soja, pode-se afirmar que o modelo matemático apresenta uma capacidade de predição dos fenômenos de troca de calor e de massa satisfatória. Os experimentos consistem de processos bastante distintos: as propriedades físicas dos leitos diferem significativamente; um dos experimentos constitui um aquecimento e, o outro, um resfriamento do leito; as amplitudes térmicas presentes são muito discrepantes – cerca de cinco vezes maior no experimento de Marques (2005) em relação ao cultivo. Tais diferenças resultaram em dinâmicas térmicas experimentais, também, bastantes distintas e, ainda assim, as duas versões de um mesmo modelo matemático (somente distinguindo-se pela equação de ajuste das isotermas) foram capazes de prever perfis razoavelmente precisos para ambos os casos.

Se todo o volume do leito sofre resfriamento simultâneo, todas as variáveis relacionadas a este processo se manifestam, como consequência, em todo substrato. Isso pode ser confirmado através das FIGURAS 37, 38 e 39, onde as variáveis manifestam um comportamento simultâneo em todas as alturas verificadas. Observa-se, na FIGURA 37, que a umidade do ar parte do seu valor de equilíbrio com o substrato úmido (cerca de 0,15 kg/kg), na temperatura inicial, e varia em direção ao valor de umidade do ar saturado e frio de entrada (cerca de 0,02 kg/kg).

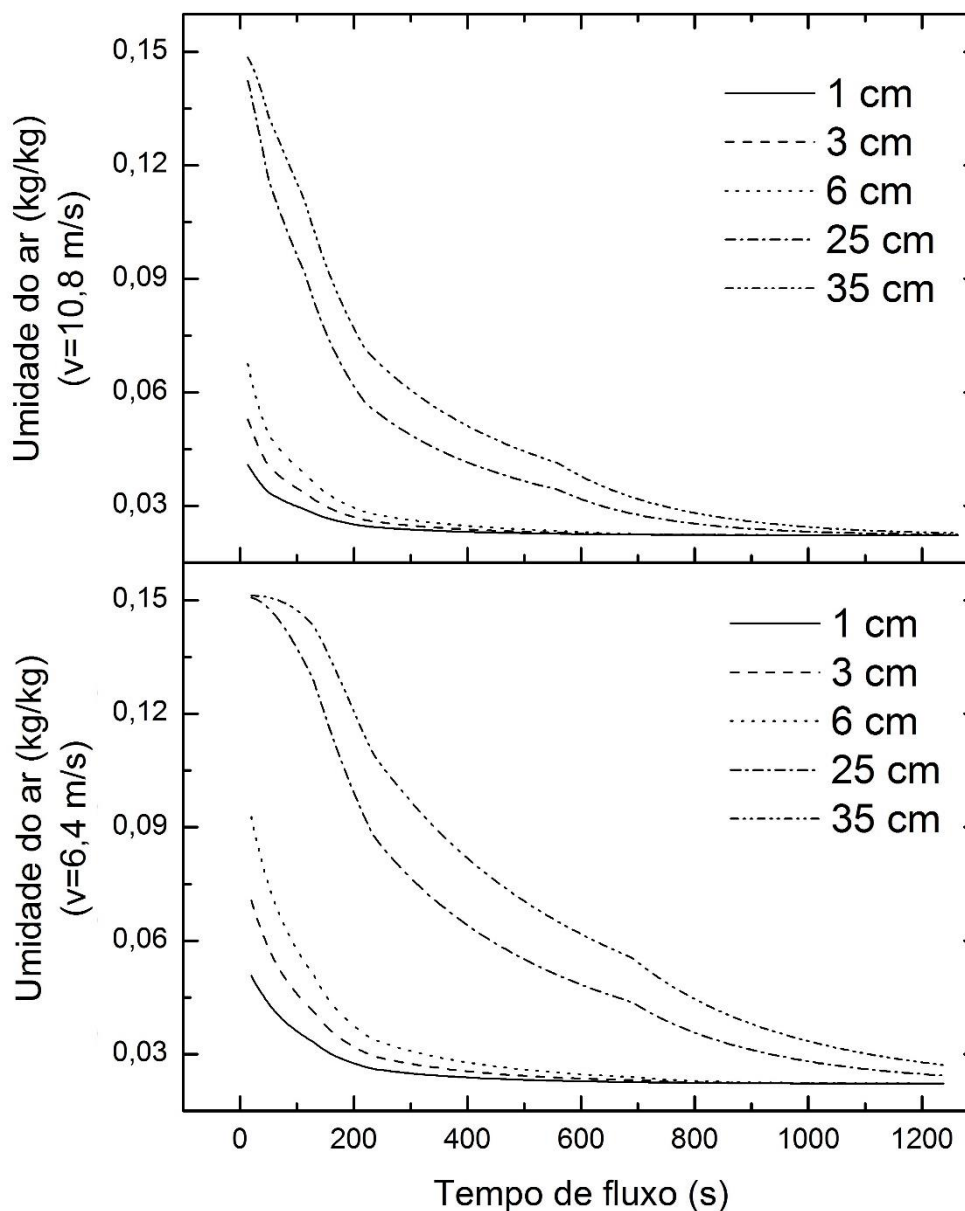


FIGURA 37 – PREDIÇÃO DA UMIDADE DO AR MÉDIA EM PLANOS XY DE DIFERENTES ALTURAS DO LEITO DE SOJA, PARA VELOCIDADES DE FLUXO DE 10,8 E 6,4 m/s.

No experimento, o leito de substrato está a uma temperatura maior que a fase gasosa úmida que o atravessa. Assim que as duas fases trocam calor, o ar se aquece e sua umidade relativa cai, tornando-o capaz de carregar mais vapor e secar o leito com maior rapidez através da evaporação. A evaporação aumenta a taxa de resfriamento do leito consideravelmente por consistir de um fenômeno endotérmico. Apesar da evaporação, a fase gás torna-se menos úmida com o tempo pois o vapor liberado é constantemente retirado do sistema, ao mesmo tempo que o ar frio (menos úmido) e introduzido no interior do leito pela aeração forçada.

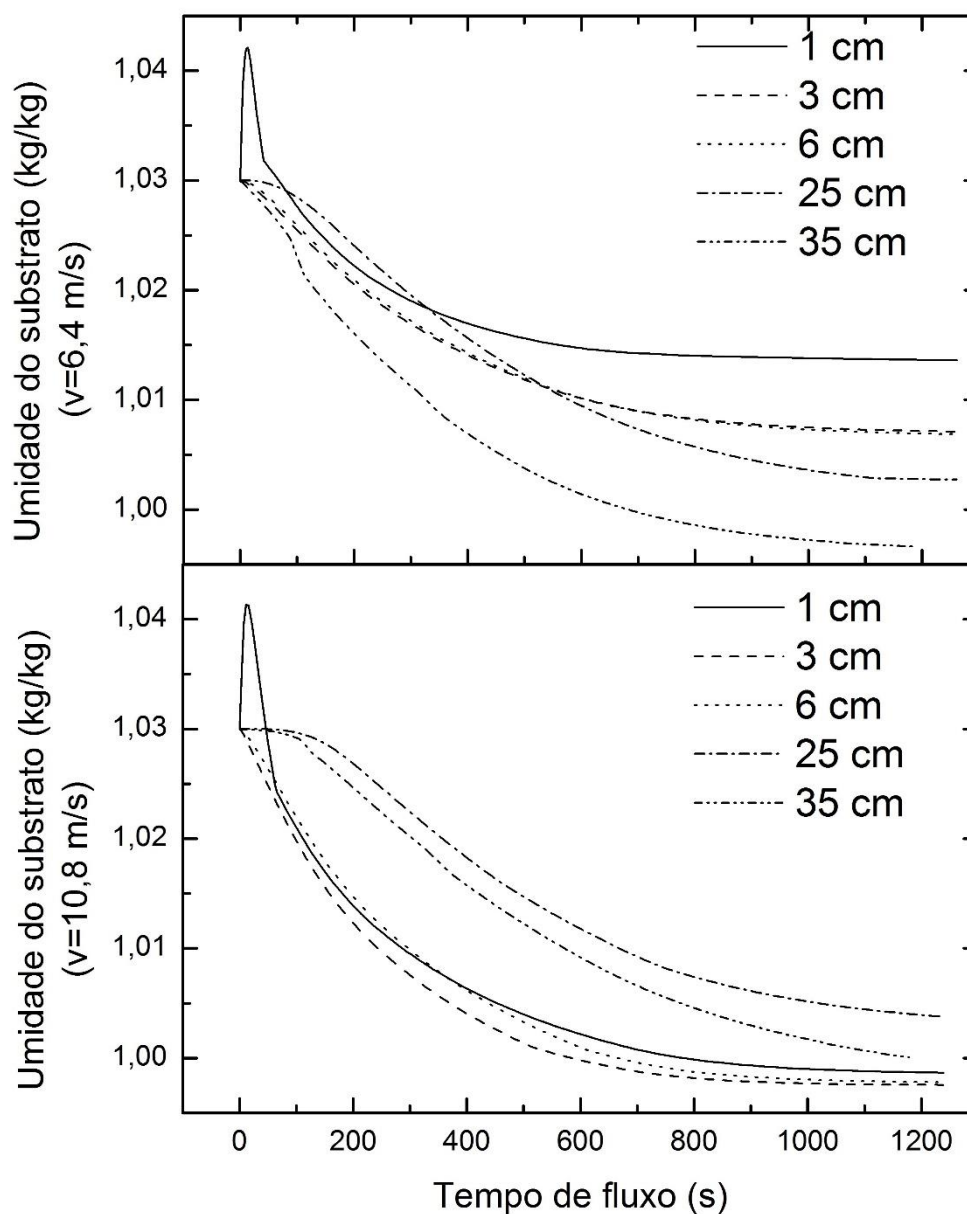


FIGURA 38 – UMIDADE MÉDIA EM PLANOS XY DO LEITO DE SOJA PREDITA DE DIVERSAS ALTURAS, PARA VELOCIDADES DE FLUXO DE 10,8 E 6,4 m/s.

Pode se observar o processo de secagem do leito através do perfil de umidade do leito na FIGURA 38. Mesmo notando, na figura, que os dois diferentes fluxos de ar as leituras foram muito diferentes, a redução da umidade do leito foi um fator comum. Para o maior fluxo, a secagem foi mais intensa, principalmente para as menores alturas.

5.4.5 Simulação da dinâmica de crescimento fúngico no experimento com FT/BC 9:1 com distribuição de esporos e porosidade de leito heterogêneos

A simulação partiu das condições de equilíbrio obtidas após um longo tempo de fluxo na simulação da fase inicial de cultivo. As condições de equilíbrio térmico e de umidade e da concentração de biomassa no sistema podem ser vistas na TABELA 8.

TABELA 8 – CONDIÇÕES INICIAIS E PARÂMETROS PARA A SIMULAÇÃO DO CULTIVO DE FES COM CRESCIMENTO DE BIOMASSA

Símbolo	Parâmetro/Variável	Valor	Fonte
t	Tempo de fermentação	8,5 h	Escolhido
H	Altura do leito	40 cm	Condição do experimento
T _{g0}	Temperatura inicial da fase gasosa	305 K	Condição do experimento
T _{s0}	Temperatura inicial da fase sólida	305 K	Escolhido
φ _{g0}	Umidade inicial da fase gasosa	0,03 kg-água.kg-ar-seco ⁻¹	Equação 29
φ _{s0}	Umidade inicial da fase sólida	1,5035 kg-água.kg-sólido-seco ⁻¹	Condição do experimento
a _{wg0}	Atividade inicial da fase gasosa	0,9900	Condição do experimento
a _{ws0}	Atividade inicial da fase sólida	0,9924	Equações 26, 27 e 28
M	Vazão mássica do ar	0,077 kg-ar-seco.s ⁻¹	Condição do experimento
C _{pg}	Capacidade calorífica do gás seco	1005 J.kg-ar-seco ⁻¹ .K ⁻¹	HIMMELBLAU (1996)
C _{pv}	Capacidade calorífica do vapor da água	1791 J.kg-vapor-água ⁻¹ .K ⁻¹	HIMMELBLAU (1996)
P	Pressão atmosférica	101325 Pa	HIMMELBLAU (1996)
ρ _g	Densidade do ar seco	1,16 kg-ar-seco.m ⁻³	PERRY E GREEN (1999)
ρ _s	Densidade do sólido seco	934,8 kg-sólido-seco.m ⁻³	Equações 38 e 39
C _{ps}	Capacidade calorífica do sólido seco	1590 J.kg-sólido-seco ⁻¹ .°C ⁻¹	SWEAT (1986)
C _{pw}	Capacidade calorífica da água líquida	4184 J.kg-água ⁻¹ .°C ⁻¹	HIMMELBLAU (1996)
ε ₀	Porosidade inicial	0,564	Equações 42 e 43
b _m	Concentração máxima de biomassa	0,25 kg-biomassa.kg-sólidos-secos ⁻¹	GUMBIRA-SA'ID <i>et al.</i> (1993)

TABELA 8 - CONTINUAÇÃO

Símbolo	Parâmetro/Variável	Valor	Fonte
$Y_{S/B}$	Coeficiente de rendimento dos sólidos secos em função da biomassa	-2 kg.sólidos-secos.kg-biomassa ⁻¹	Escolhido com base no coeficiente de rendimento de 0,33 kg-biomassa.kg-substrato-seco ⁻¹
$Y_{Q/B}$	Coeficiente de rendimento do calor metabólico em função da biomassa	8,366 x 10 ⁶ J.kg-biomassa ⁻¹	SAUCEDO-CASTANEDA <i>et al.</i> (1990)
$Y_{W/B}$	Coeficiente de rendimento da água metabólica em função da biomassa	0,3 kg-água.kg biomassa ⁻¹	SARGANTIS <i>et al.</i> (1990)
μ_{opt}	Velocidade de crescimento específica ótima	9,00535 x 10 ⁻⁵ s ⁻¹	SAUCEDO-CASTANEDA <i>et al.</i> (1990)
D_1, D_2, D_3 e D_4	Constantes da Equação 18	$D_1=618,9218$; $D_2=-1863,527$; $D_3=1865,097$; $D_4=-620,6684$	Ajuste empírico aos dados de Glenn e Rogers (1988) para <i>Aspergillus niger</i>
A	Fator de frequência para o numerador da Equação 19	7,483 x 10 ⁷ s ⁻¹	SAUCEDO-CASTANEDA <i>et al.</i> (1990)
B	Constante de ajuste para Equação 19	1,300 x 10 ⁴⁷	SAUCEDO-CASTANEDA <i>et al.</i> (1990)
E_{A1} e E_{A2}	Energias de ativação para a Equação 19	$E_{A1}=70.225$ J.mol ⁻¹ e $E_{A2}=283.356$ J.mol ⁻¹	HIMMELBLAU (1996)
R	Constante universal dos gases	8,314 J.mol ⁻¹ .°C ⁻¹	HIMMELBLAU (1996)
a_1, a_2, a_3 e a_4	Constantes de ajuste da Equação 31	$a_1=7,304$; $a_2=-1,77$ x 10 ⁻² ; $a_3=2,202$; $a_4=-6,18$ x 10 ⁻³	MANCINI (1996)
λ	Entalpia de evaporação da água	2.414.300 J.kg-água ⁻¹	HIMMELBLAU (1996)

FONTE: ADAPTADO DE VON MEIEN E MITCHELL (2002)

Em relação às simulações realizadas no trabalho de von Meien e Mitchell (2002) o tempo de fluxo predito foi muito mais curto. Enquanto o artigo simulou até 60 horas de fluxo o trabalho atual se limitou a 8,5 horas. Por motivos ainda indeterminados – possivelmente relacionados ao acúmulo de erro numérico devido ao baixo refinamento da malha ou à imprecisões do modelo – divergências ocorriam neste estágio da simulação impedindo a continuidade dos cálculos. Outro fator agravante para a reprodução de um maior número de resultados, para a simulação do cultivo, consiste na complexidade da simulação proposta pelo atual trabalho. Enquanto von Meien e Mitchell (2002) focaram no estudo do modelo sobre a dinâmica axial no biorreator, o trabalho atual também leva em conta fenômenos radiais de transferência de água e calor e resolve as equações da mecânica de fluídos para a fase gasosa, considerando as turbulências externas ao leito, usando o método de

volumes finitos. O sistema de equações a serem resolvidas simultaneamente nas simulações de CFD é bastante grande e complexo, o que o torna muito mais instável e exigente computacionalmente. Por estes motivos, o passo de tempo utilizado deve ser consideravelmente menor e seu cálculo se torna significativamente mais lento. Como exemplo, o trabalho de Lima (2009) que simulou o mesmo modelo matemático, limitado ao sentido axial do leito, utilizava passos de tempo 1,8 s e chegou a tempos de fluxo de 60 h. Enquanto isso, a simulação de 8,5 h de fluxo exigiu cerca de 350 horas, ou 15 dias, a um passo de tempo de 0.1 s.

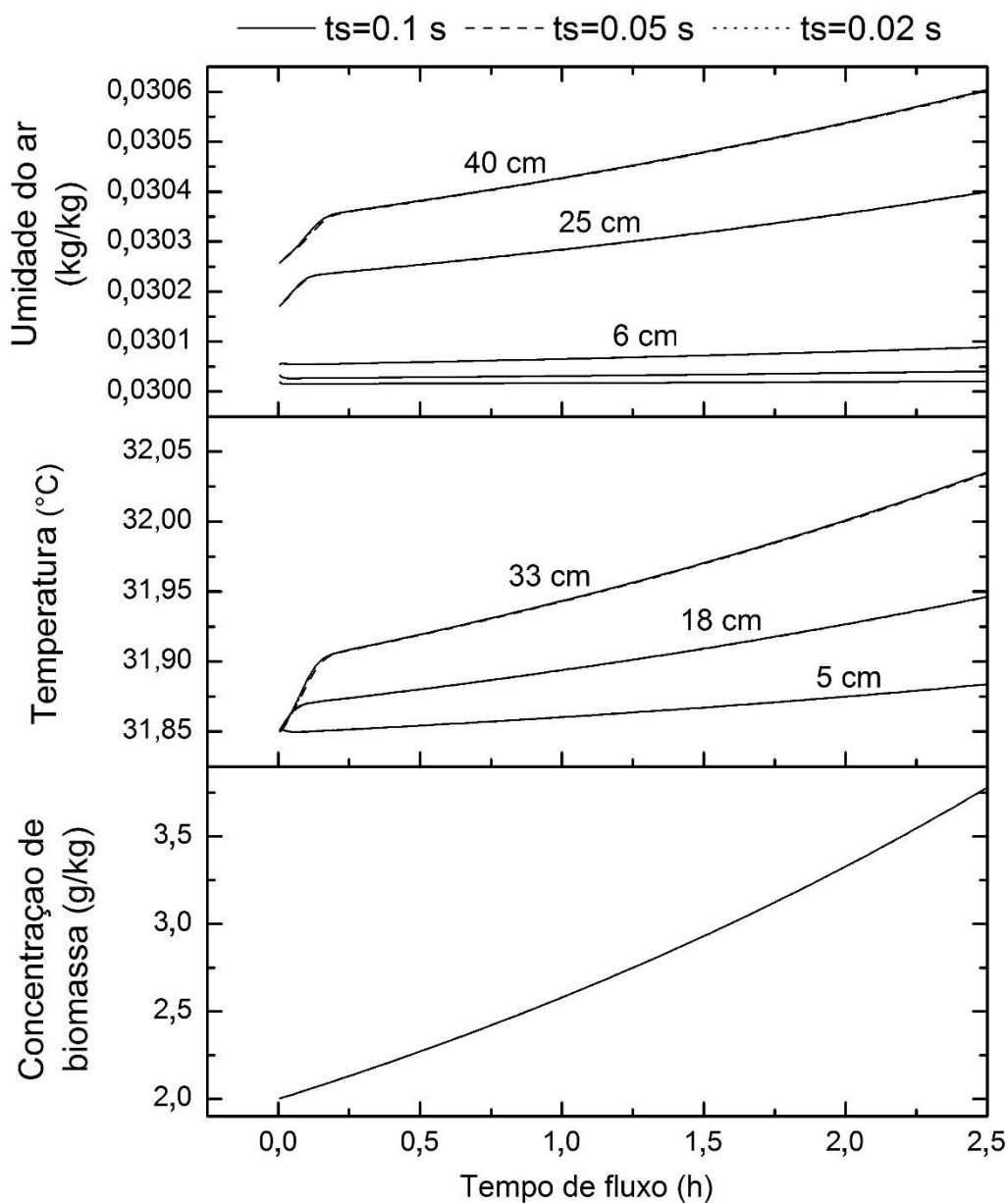


FIGURA 39 – COMPARAÇÃO ENTRE AS SIMULAÇÕES DO CULTIVO COM PASSO DE TEMPO (TS) DE 0,1, 0,05 E 0,02 s. As predições de umidade do ar e de concentrações de biomassa basearam-se nas médias de planos XY nas alturas de 1, 3, 6, 25 e 40 cm. As predições de temperatura basearam-se nas médias dos quatro termopares de cada altura (5, 18 e 33 cm).

A simulação do cultivo considera o início do desenvolvimento do fungo, logo após a fase lag, onde o crescimento e a influência da biomassa se torna perceptível. Foram realizadas simulações em três passos de tempo distintos: 0,1, 0,05 e 0,02 s. Na FIGURA 39, o gráfico de umidade do ar e de crescimento da biomassa foram gerados com base na média dos planos XY em cinco diferentes alturas (1, 3, 6, 25 e 40 cm), enquanto o gráfico de temperaturas baseou-se na média dos quatro termopares de cada altura (5, 18 e 33 cm). Devido ao crescimento da biomassa e à geração de calor metabólico, as maiores temperaturas se concentraram nas maiores alturas, assim como as maiores umidades na fase gás. Tal fenômeno será melhor abordado posteriormente. Nota-se que, os resultados dos três diferentes passos de tempo se sobrepõe tornando inviável diferenciar as curvas de 0,05 e 0,02 s. Portanto, pode-se afirmar que o passo de tempo de 0,1 s torna a simulação tão precisa quanto um passo de tempo cinco vezes menor. Também devido às pequenas diferenças geradas entre as alturas, é possível observar que os valores de concentração de biomassa se resumem a uma única curva.

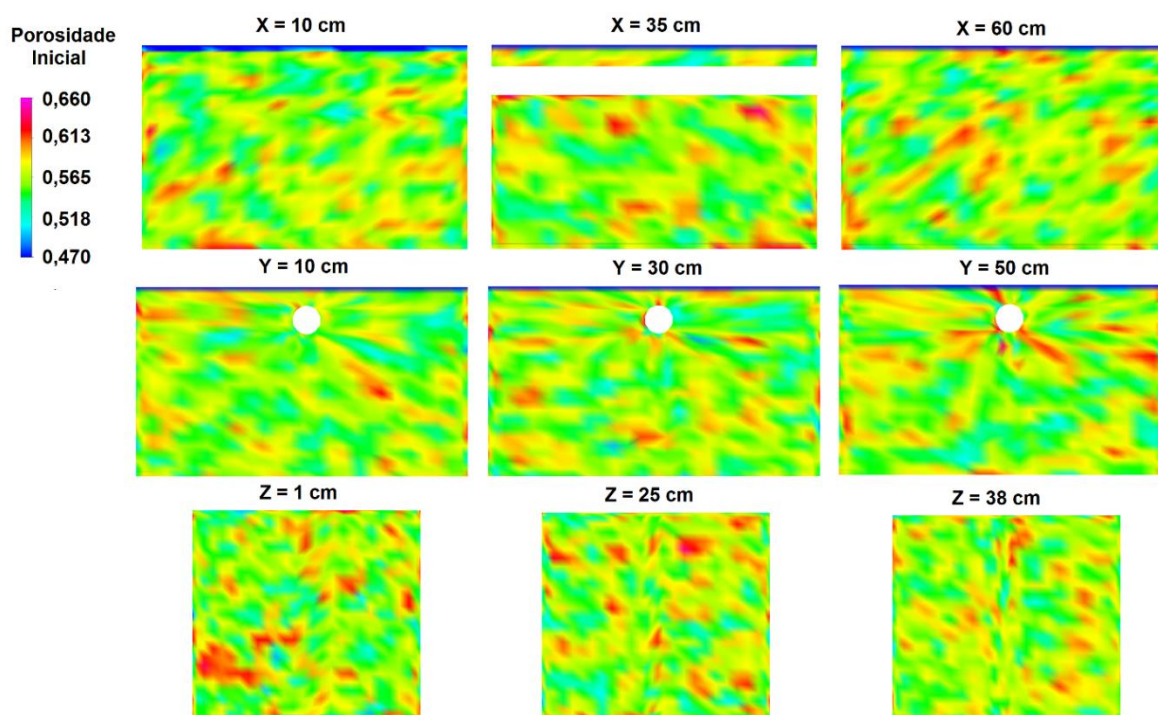


FIGURA 40 – CONTORNOS DA POROSIDADE INICIAL NO LEITO HETEROGÊNIO DE FT/BC 9:1, NA SIMULAÇÃO DO CULTIVO.

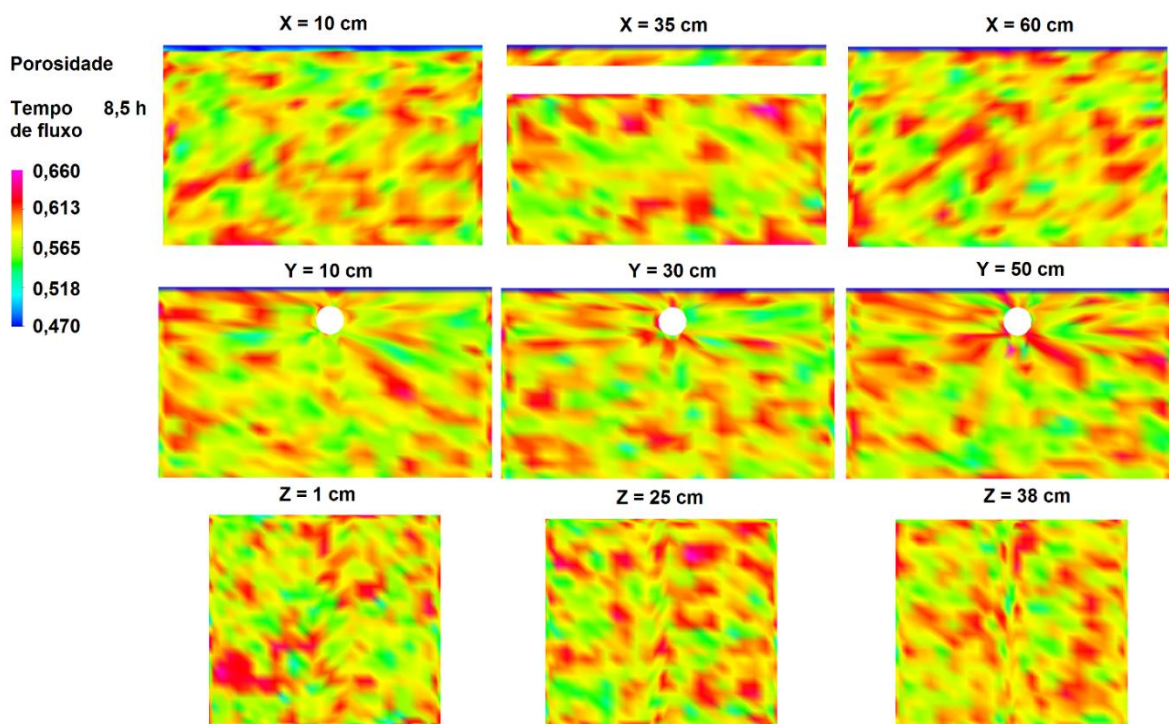


FIGURA 41 – CONTORNOS DA POROSIDADE EM 8,5 HORAS DE FLUXO NO LEITO HETEROGÊNEO DE FT/BC 9:1, NA SIMULAÇÃO DO CULTIVO.

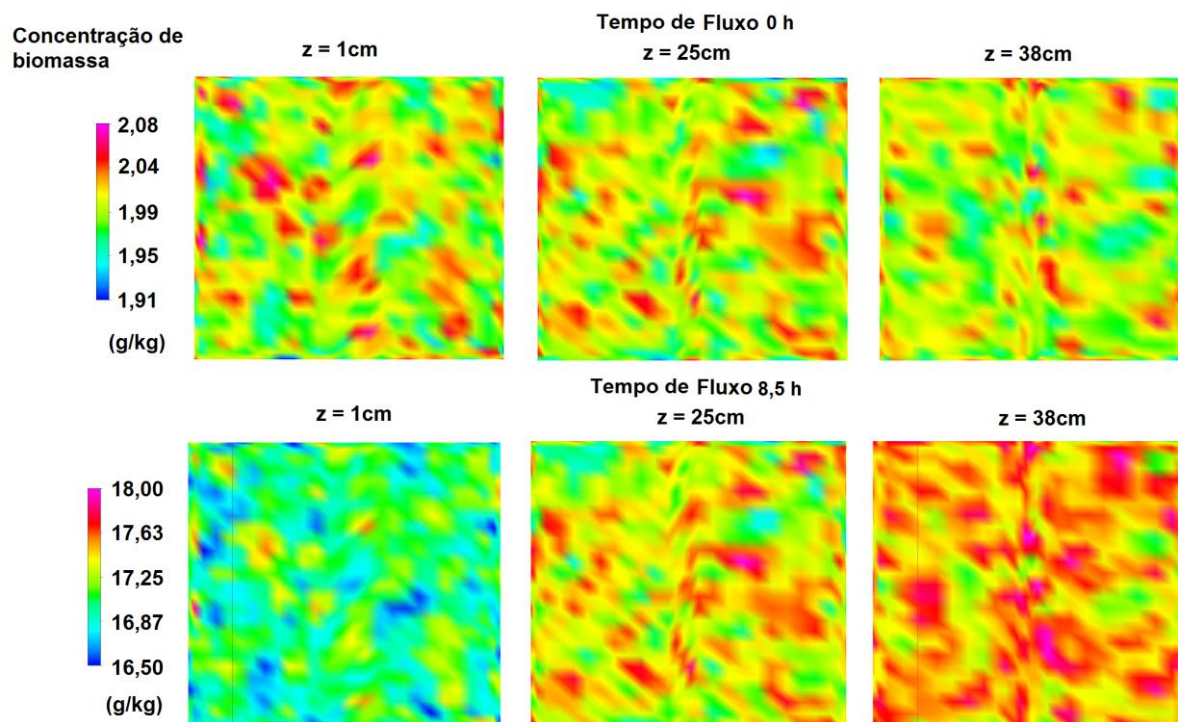


FIGURA 42 – CONTORNOS DE CONCENTRAÇÃO DE BIOMASSA INICIAL E NO TEMPO DE FLUXO DE 8,5 HORAS, NA SIMULAÇÃO DO CULTIVO.

Pode-se comparar as condições iniciais de concentração de biomassa (FIGURA 42) e de porosidade no leito de substrato (FIGURAS 40 e 41), com o seu estado final, em 8,5 horas de fluxo. Observa-se claramente a heterogeneidade gerada estrategicamente em ambas as variáveis, que inicialmente se distribuem similarmente em todo leito. Nas 8,5 horas de fluxo, tanto as concentrações de biomassa quanto a porosidade se diferenciam, produzindo valores mais altos. Apesar de a concentração de biomassa variar em uma estreita faixa, é perceptível que as maiores alturas do leito produziram maiores concentrações do fungo, devido às temperaturas mais altas destas regiões, consequência da própria geração de calor metabólico. E, por um efeito cumulativo, as discrepâncias das concentrações entre as alturas podem se acentuar ao longo do cultivo, devido às taxas interdependentes, de produção de calor metabólico e de crescimento, superiores nas maiores alturas. As diferentes ordens de grandeza dos valores de concentração de biomassa, entre os dois tempos comparados, inviabilizam o uso de uma mesma escala para ambos que permita visualizar as heterogeneidades e discrepâncias entre as alturas.

Já, para a representação dos contornos de porosidade, a mesma escala foi aplicada permitindo a nítida percepção de aumento da porosidade. As maiores porosidades do substrato também estão relacionadas à maior atividade do fungo, afinal a degradação do substrato orgânico faz parte da sua cadeia metabólica. Vale lembrar que a temperatura é favorável à atividade biológica até um ponto, a partir do qual ela começa a se tornar deletéria ao microrganismo. No entanto, a simulação alcançou apenas os momentos iniciais (8,5 h) de desenvolvimento do fungo e a temperatura ainda não havia alcançado o seu valor ótimo.

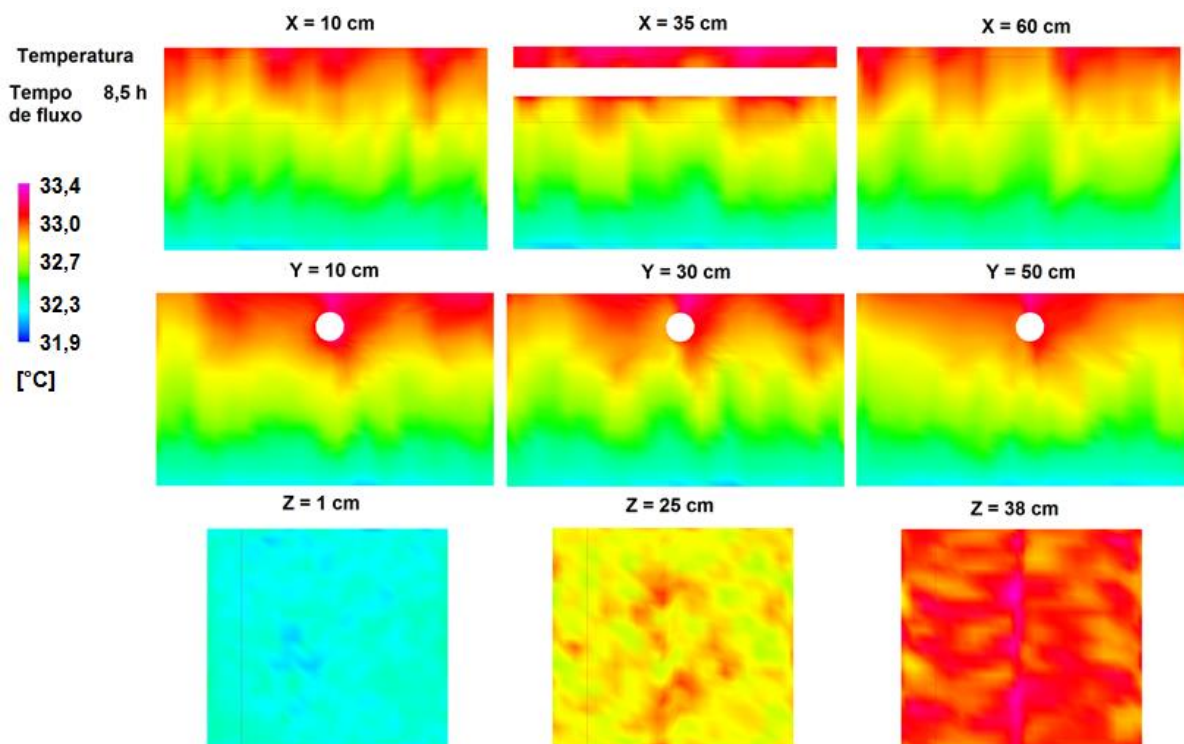


FIGURA 43 – CONTORNOS DE TEMPERATURA NO TEMPO DE FLUXO DE 8,5 h, NA SIMULAÇÃO DO CULTIVO.

A FIGURA 43 confirma que as maiores temperaturas estão nas maiores alturas do leito. Sabendo-se que, nestas condições de cultivo, não há a possibilidade de alguma região do leito estar em temperaturas menores que a fase gasosa em contato, deduz-se que a condensação de água se torna impossível e que, portanto, o aquecimento do substrato não depende deste fenômeno exotérmico. Desta forma, conclui-se que o aquecimento se deve à geração de calor metabólico. Portanto, com um maior tempo de simulação, é provável que o crescimento acelerado do fungo, nas porções superiores do leito, cause uma produção acentuada de calor metabólico e, uma incapacidade do resfriamento pelo fluxo gasoso, levando a condições inadequadas de temperatura para o cultivo.

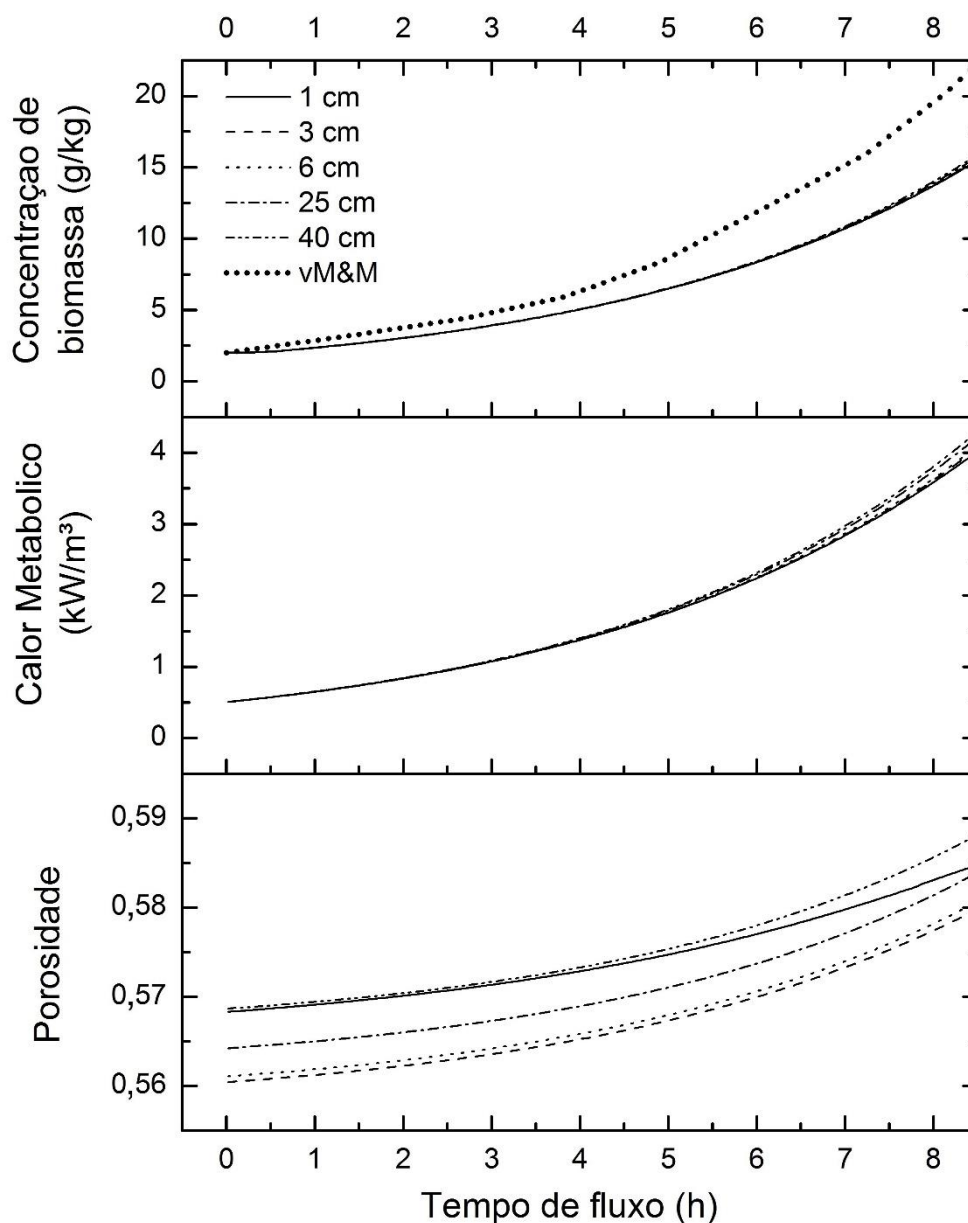


FIGURA 44 – MÉDIAS DOS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm PARA O CRESCIMENTO DA CONCENTRAÇÃO DA BIOMASSA, CALOR METABÓLICO E POROSIDADE PARA A SIMULAÇÃO DO CULTIVO. “vM&M” designa a concentração de biomassa média no volume de leito predita pela simulação de von Meien e Mitchell (2002), sem o uso do esquema de controle.

A biomassa apresentou um crescimento acelerado, no período simulado, com um comportamento próximo a da concentração média do leito predita por von Meien e Mitchell (2002) (FIGURA 44). A pequena defasagem entre as duas previsões certamente se deve às diferenças nas condições do experimento simulado. O trabalho de 2002 também se baseia em um leito de atividade de água próxima à unidade, no entanto, a temperatura inicial do substrato e do ar de entrada é de 35 °C, 3 °C acima da aplicada na atual simulação, o que pode acelerar substancialmente o crescimento

do fungo, de acordo com a equação logística (Eq. 16). Apesar da distribuição inicialmente heterogênea das concentrações de biomassa, as médias de concentração, entre cada plano XY de diferente altura, se mostrou quase idêntica. Apenas, a partir de 7 horas de fluxo é possível identificar uma diferenciação das concentrações de biomassa onde, nas maiores alturas, os valores são levemente maiores.

As curvas de crescimento do calor metabólico e da porosidade acompanham o crescimento microbiano. O calor metabólico mostrou uma pequena diferenciação preferencial nas maiores alturas, identificável já a partir das 5 horas de fluxo. A distribuição de porosidade demonstrou uma maior variação entre as médias de planos XY em diferentes alturas (cerca de 1 %, entre a maior e a menor média), com um ordenamento aleatório de valor entre as alturas. O aumento da porosidade de cada altura acompanhou coerentemente o aumento do crescimento biológico. A altura de 1 cm apresentou uma velocidade de aumento diferenciada, menor que a das demais alturas, que pode estar relacionado aos erros propagados devido à qualidade da malha.

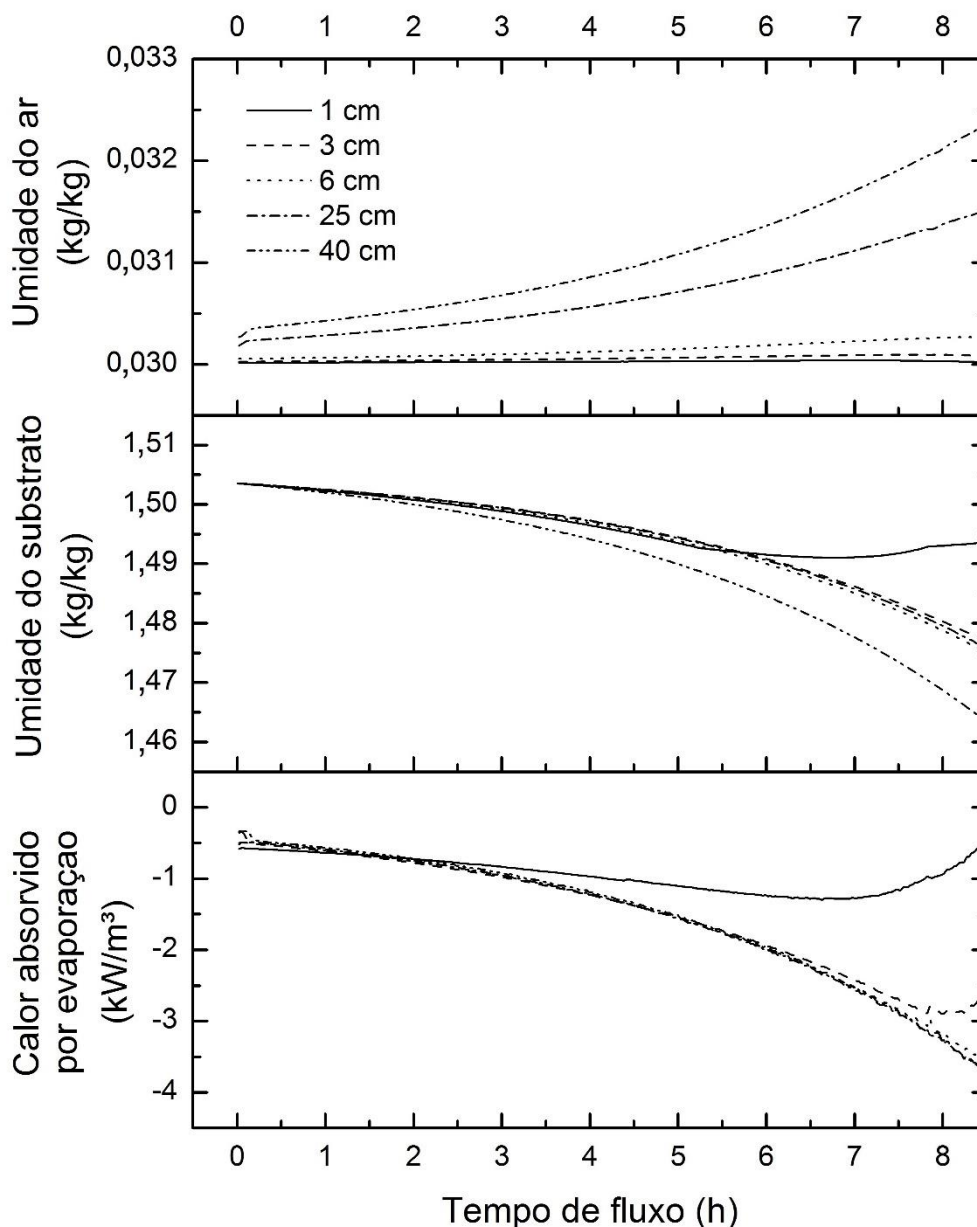


FIGURA 45 – MÉDIAS DOS PLANOS XY NAS ALTURAS DE 1, 3, 6, 25 E 40 cm PARA O CALOR DE EVAPORAÇÃO E PARA A UMIDADE DO AR E DO SUBSTRATO, NA SIMULAÇÃO DO CULTIVO.

A umidade do ar aumentou com o tempo de fluxo, tendo uma taxa de aumento mais expressivo para as maiores alturas (FIGURA 45). À medida que o gás ascendia, o mesmo se aquecia, em contato com porções mais quentes do substrato, e absorvia maior umidade provinda da evaporação. Portanto, de forma geral o leito sofreu uma leve secagem ao longo do cultivo, afinal a umidade evaporada deixa o leito pela saída de ar do biorreator, tornando o sistema continuamente mais seco. A média de umidade do substrato na altura de 40 cm, apresentou uma secagem mais acentuada provavelmente por consistir do topo do leito, que está em contato com a fase gasosa

mais aquecida e em maior área de contato. Já a altura de 1 cm, apresenta um comportamento coerente até cerca de 5 horas de fluxo quando, então, acusa uma manutenção e posterior aumento da umidade (a partir de 7 horas), devido ao fenômeno de condensação. Sabendo que não havia as condições necessárias para que houvesse a condensação, conclui-se que a predição para a primeira altura é inconsistente. O perfil do calor de evaporação confirma uma redução rápida na média da taxa de evaporação para as duas primeiras alturas. O calor de evaporação foi definido como negativo, pois implica uma perda de calor do substrato para a vaporização da água líquida. Portanto, indicando processos de condensação localizados e ainda assim inesperados e não coerentes nas alturas de 1 e 3 cm. Tais comportamentos inconsistentes identificados podem ser frutos de propagação de erros do modelo matemático – por imprecisões no equilíbrio de umidade – ou por elementos de baixa qualidade da malha, que ainda serão investigados em trabalhos futuros.

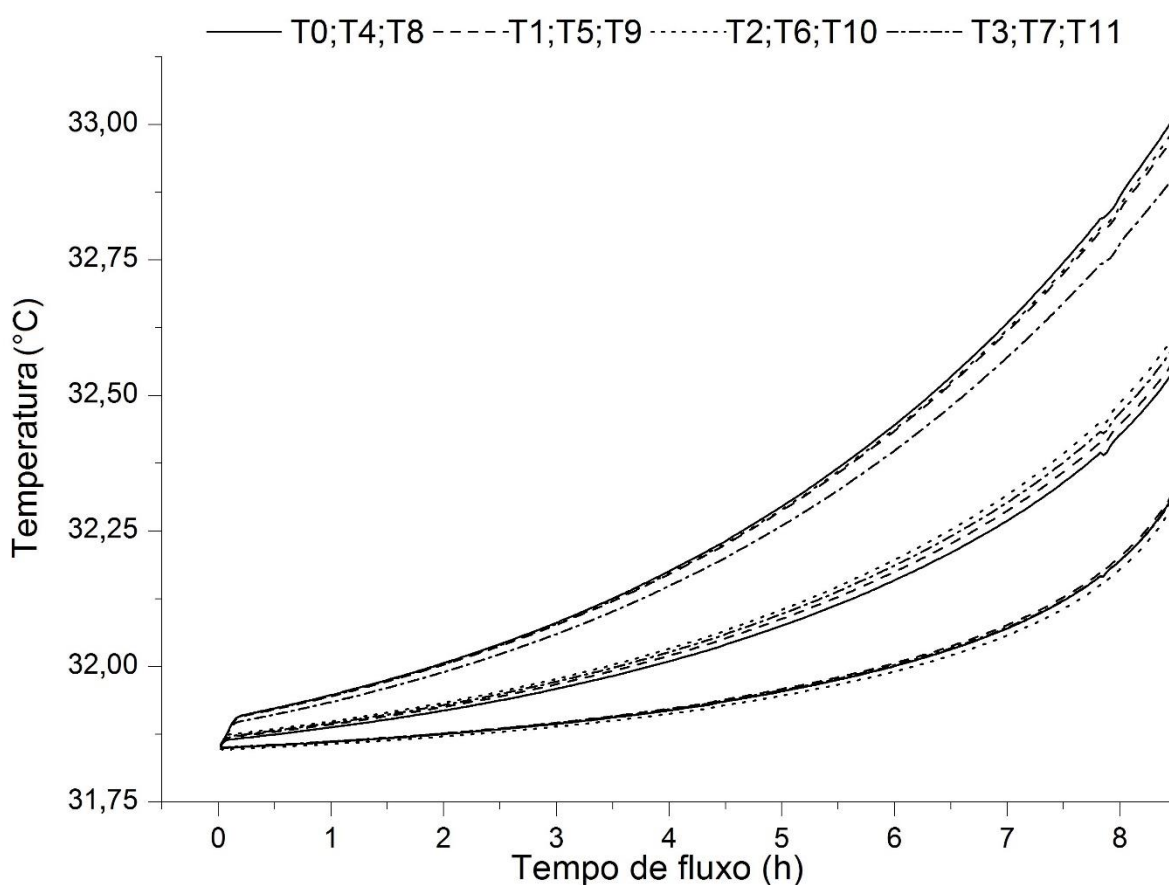


FIGURA 46 – TEMPERATURA DOS TERMOPARES INDIVIDUAIS PARA A SIMULAÇÃO DO CULTIVO.

O perfil de temperaturas (FIGURA 46) para os termopares individuais confirma que as maiores alturas sofrem um aquecimento mais acentuado, afinal as regiões mais baixas estão mais próximas da entrada do fluxo gasoso, sendo melhores resfriadas, e, desta forma, o calor metabólico acaba se acumulando nas regiões mais altas. No tempo de fluxo predito, não houve uma diferenciação significativa entre os termopares de uma mesma altura, comprovando um aquecimento aproximadamente homogêneo do leite, apesar da distribuição heterogênea de porosidade e de concentração da biomassa. Apesar da pequena amplitude de variação de temperatura entre as diferentes alturas (cerca de 0,5 °C de variação máxima observada) o aquecimento do leite estava em aceleração. Portanto, é esperado que as temperaturas preditas estejam muito abaixo do que os microrganismos seriam capazes de gerar dentro do leite. Também pode-se observar uma maior velocidade de aumento da temperatura, nos últimos 30 minutos simulados, para os termopares mais baixos, provavelmente relacionado à condensação anormal de água.

6 CONCLUSÕES

Apesar de algumas imprecisões e do curto período de simulação do cultivo, as simulações em CFD forneceram descrições razoáveis das dinâmicas de transferência de calor e massa (água) no interior dos leitos de farelo de trigo e bagaço de cana e de grãos de soja. De forma geral, os comportamentos previstos foram coerentes com os verificados experimentalmente. As duas versões dos modelos matemáticos utilizados para descrever a FES (diferindo apenas na equação de ajuste da isoterma), em conjunto ao pacote de equações do *software* de CFD, foram capazes de representar dois experimentos muito distintos. As equações escolhidas para os ajustes das isotermas predisseram aceitavelmente as condições necessárias para ocorrência de evaporação e condensação.

O uso do *software* comercial Fluent®, da empresa americana ANSYS, traz desafios adicionais à sua aplicação na simulação da fermentação em estado sólido. Apesar de o *software* oferecer mecanismos prontos e robustos de simulação da mecânica de fluidos e transferência de calor, o mesmo não ocorre para a transferência de massa principalmente, envolvendo meios porosos. Portanto, o uso de UDF's (*user defined functions*) se faz essencial para a customização do *software* através da adição de todo o equacionamento, manualmente. Por isso, o uso e o domínio da ferramenta de CFD não é uma tarefa trivial.

Provavelmente, as imprecisões observadas nas previsões dos primeiros momentos de fluxo são devidas à dependência de parâmetros mais féis às propriedades reais do leito e às condições de operação. Pode-se dizer que o fator mais crítico para a tradução do comportamento dinâmico do leito de substrato é a isoterma e a sua equação de ajuste escolhida. A divergência acusada na simulação final do cultivo foi um exemplo de erro que necessita de uma investigação mais profunda para o aperfeiçoamento do código e do modelo matemático. A qualidade do código e do caso de simulação são altamente dependentes do tempo investido no projeto, já que possíveis erros e incoerências, na maioria das vezes, apenas são percebidos durante as simulações.

Apesar disto, o potencial do CFD é inegável e a qualidade da apresentação dos seus resultados reforça este fato. As formas oferecidas para a visualização de

resultados são inúmeras e provavelmente jamais poderão ser comparadas às apresentações de resultados experimentais. Graças a essa capacidade, verificou-se uma distribuição uniforme do fluxo de ar pelo leito e nenhuma evidencia de geração de fluxos preferenciais ou zonas de estagnação, devido à geometria do biorreator piloto. A maior não uniformidade detectada foi gerada pelo eixo de rotação, que produziu uma zona de baixa pressão e baixo fluxo, na sua porção superior, com uma implicação visível nas imagens de contornos.

O trabalho atual consiste no primeiro estudo envolvendo fermentação em estado sólido e fluidodinâmica computacional na literatura. Sendo assim, a presente pesquisa inaugura uma nova área interdisciplinar de conhecimento, com o significado de um importante passo para o estabelecimento da FES em escala industrial. Afinal, elaborou-se um primeiro modelo capaz de auxiliar no planejamento de testes experimentais e de projetos de biorreator de larga escala. Desta forma, dando início ao estudo do biorreator piloto e oportunizando o aperfeiçoamento dos códigos e a validação com dados experimentais de cultivos em trabalhos futuros. Assim, construindo uma ferramenta robusta e confiável para o teste de diferentes condições e estratégias de controle para cultivos em larga-escala em biorreatores de fermentação em estado sólido.

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- A fim de dar continuidade direta ao presente trabalho, a investigação das discrepâncias relatadas e do comportamento anômalo explicitado no final da simulação do cultivo seriam passos essenciais para o aprimoramento do código (UDF) e dos casos de simulação;
 - O aumento da complexidade da geometria e da malha, levando em consideração um maior número de detalhes do biorreator;
 - O aumento de complexidade do equacionamento, ao levar em conta o fenômeno do encolhimento do leito devido ao desenvolvimento da rede hifas e da secagem do mesmo;
 - A correção de possíveis problemas de código que possam levar à erros de simulação.
- A investigação ou geração de dados de isotermas e de equações de ajuste para maiores precisões e melhores desempenhos de simulação;
- A validação de um maior número de dados experimentais, testando condições diferenciadas de temperaturas, substratos, microrganismos e cinéticas de crescimento
- A aplicação do CFD na FES com diferentes abordagens:
 - A aplicação na microescala voltada ao melhor entendimento das dinâmicas intracelulares das hifas fúngicas;
 - A aplicação na escala mesoscópica, para a compreensão da relação entre o crescimento da biomassa, a porosidade e a permeabilidade do leito de substrato;
 - A simulação de diferentes geometrias e escalas de biorreatores, incluindo escalas industriais de produção.

REFERÊNCIAS

AHN, H.K.; RICHARD, T.L.; GLANVILLE, T.D. Laboratory determination of compost physical parameters for modelling of airflow characteristics. **Waste Manag.** v.28 p.660-670, 2008

ANSYS. **ANSYS FLUENT 15.0 user's guide.** Canonsburg, PA: ANSYS, Inc., 2013

ASHA-AUGUSTINE; IMELDA-JOSEPH; RAJ, R.P.; DAVID, N.S. Growth kinetic profiles of *Aspergillus niger* S(1)4 a mangrove isolate and *Aspergillus oryzae* NCIM 1212 in solid-state fermentation. **Indian J Fish.** v.62 p.100-106, 2015

ASHLEY, V.M.; MITCHELL, D.A.; HOWES, T. Evaluating strategies for overcoming overheating problems during solid state fermentation in packed bed bioreactors. **Biochem Eng. J.** v.3 p.141–50, 1999

AURIA, R.; MORALES, M.; VILLEGAS, E.; REVAH, S., Influence of mold growth on the pressure drop in aerated solid state fermentors. **Biotechnol & Bioeng.** v.41 p.1007-13, 1993

AURIA, R.; ORTIZ, I.; VILLEGAS, E.; REVAH, S. Influence of Growth and High Mould Concentration on the Pressure Drop in Solid State Fermentations. **Process Biochem.** v.30 n.8 p.751-756, 1995

BALMANT, W. **Modelagem matemática do crescimento microscópico de fungos filamentosos em superfícies sólidas.** Tese de Doutorado, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2013.

BANDELIER, S.; RENAUD, R.; DURAND, A. Production of gibberellic acid by fed-batch solid state fermentation in an aseptic pilot-scale reactor. **Process Biochem.** v.32 p.141–5, 1997

BARGA, M. C. **Modelo de inferência para a determinação da umidade do leito de um biorreator piloto de fermentação no estado sólido.** Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2007

BOSWELL, G. P.; DAVIDSON, F. A. **Modelling hyphal networks.** Fungal Biology Reviews, v.26 p.30-38, 2012

BOYCE, D.S. Grain moisture and temperature changes with position and time during through drying. **J Agric Res.** v.10 p.333-341, 1965

CALADO V.M.A. **Secagem de cereais em leito fixo de fluxos cruzados.** Tese de Doutorado UFRJ, 1993

CALÇADA, L.A. **Secagem de materiais granulares porosos.** Tese de Doutorado – UFRJ, 1998

CASCIATORI, F.P.; LAURENTINO C.L.; LOPES, K.C.M.; DE SOUZA, A.G.; THOMÉO, J.C. Stagnant effective thermal conductivity of agro-industrial for solid-state fermentation. **Int J of Food Prop.** v.16 p.1578-1593, 2013

CASCIATORI, F. P.; LAURENTINO, C. M.; TABOGA, S. R.; CASCIATORI, P. A.; THOMÉO, J. C. Structural properties of beds packed with agro-industrial solid by-products applicable for solid-state fermentation: Experimental data and effects on process performance. **Chem Eng J.** v.255 p.214-224, 2014

CASCIATORI, F.P.; LAURENTINO, C.L.; ZANELATO, A.I.; THOMÉO, J.C.; Hygroscopic properties of solid agro-industrial by-products used in solid-state fermentation. **Ind Crop Prod.** v.64 p.114-123, 2015

CHAMIELEC, Y.; RENAUD, R.; MARATRAY, J.; ALMANZA, S.; DIEZ, M.; DURAND, A. Pilot-scale reactor for aseptic solid-state cultivation. **Biotech Techniques.** v.8 p.245–8, 1994

CORADIN, J. H.; BRAUN, A.; VICCINI, G.; LUZ JR., L.F.L.; KRIEGER, N.; MITCHELL, D. A. A three-dimensional discrete lattice-based system for modeling the growth of aerial hyphae of filamentous fungi on solid surfaces: A tool for investigating micro-scale phenomena in solid-state fermentation. **Biochem Eng J.** v.54 p.164–171, 2011

COULSON, J. M.; RICHARDSON, J. F. **Coulson and Richardson's Chemical Engineering – Particle Technology and Separation Processes:** Volume 2, 5ª edição, Butterworth-Heinemann, Reino Unido, 2002

de LIMA, T. **Modelo de inferência para a estimação da umidade do leito de um biorreator de fermentação no estado sólido.** Dissertação de Mestrado – UFPR, 2009

DEPYPERE, F.; PIETERS, J.G.; DEWETTINCK, K. CFD analysis of air distribution in fluidised bed equipment, **Powder Technol.** v.145 p.176-189, 2004

DESHPANDE, S.D.; BAL, S.; OJHA, T.P. Bulk thermal conductivity and diffusivity of soybean. **Int J Food Process Pres.** v.20 n.3 p.177–18, 1996

DURAND, A.; CHEREAU, D. A new pilot reactor for solid-state fermentation: Application to the protein enrichment of sugar beet pulp. **Biotech Bioeng.** v.31 p.476–86, 1988

FERNANDEZ, M.; PEREZ-CORREA, J.R.; SOLAR, I.; AGOSIN, E. Automation of a solid substrate cultivation pilot reactor. **Bioprocess Eng.** v.16 p.1–4, 1996

FINKLER, A.T.J. **Estudo da agitação intermitente na produção de pectinases por fermentação em estado sólido em escala piloto.** Dissertação de Mestrado – UFPR, 2016.

FUNG, C.J.; MITCHELL, D.A. Baffles increase performance of solid-state fermentation in rotating drums. **Biotechnol Tech.** v.9 p.295-298, 1995

GHILDYAL, N.P.; GOWTHAMAN, M.K.; RAGHAVA RAO, K.S.M.S.; KARANTH, N.G. Interaction between transport resistances with biochemical reaction in packed-bed solid-state fermentors: Effect of temperature gradients. **Enzyme Microb Technol.** v.16 p.253–7, 1994

GHOSH RAY, S.; GHANGREKAR, M.M. Biodegradation kinetics of thin-stillage treatment by *Aspergillus awamori* and characterization of recovered chitosan. **Appl Microbiol Biotechnol.** v.100 p.1955–1965, 2016

GLENN, D.R.; ROGERS, P.L.; A solid substrate fermentation process for an animal feed product: Studies on fungal strain improvement. **Aus J Biotechnol.** v.2 p.50-57, 1988

GORIELY, A.; TABOR, M. Mathematical modeling of hyphal tip growth. **Br Mycol Soc.** v.22 p.77-83, 2008

GUMBIRA-SA'ID, E; GREENFIELD, P. F.; MITCHELL, D. A.; DOELLE, H. W. Operational parameters for packed beds in solid-state cultivation. **Biotech Adv.** v.11 p.599-610, 1993

HARDIN, M. T.; HOWES, T.; MITCHELL, D. A. Residence time distributions of gas flowing through rotating drum bioreactors. **Biotechnol & Bioeng.** v.74 p.145-153, 2001

HIMMELBLAU, D.M. **Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering**, 6.ed. Prentice Hall, Upper Saddle River, 1996

JAMALEDDINE, T. J.; RAY, M. B. Application of Computational Fluid Dynamics for Simulation of Drying Processes: A Review. **Dry Technol.** v.28 n.2 p.120-154, 2010

JANG, J.; ARASTOOPOUR, H. CFD simulation of a pharmaceutical bubbling bed drying process at three different scales. **Powder Technol.** v.263 p.14-25, 2014

KARIMI, A.; SHOJAOSADATI, S. A.; HEJAZI, P; VASHEGANI-FARAHANI, E.; HASHEMI, M. Porosity changes during packed bed solid-state fermentation. **J Ind Eng Chem.** v.20 p.4022–4027, 2014

LEWICKI, P.P. A three-parameter equation for food moisture sorption isotherms. **J Food Process Eng.** v.21 p.127–144, 1998

LI, T.W.; ZHANG, Y.M.; GRACE, J.R.; BI, X.T. Numerical investigation of gas mix in gas-solid fluidized beds, **AIChE J.** v.56 p.2280–2296, 2010

LIMA, T. **Modelo de inferência para a estimação da umidade do leito de um biorreator de fermentação no estado sólido.** Dissertação (Mestrado em Engenharia), Universidade Federal do Paraná. 2009

LOPES, S. **Bio:** volume 1, 1. Ed.; São Paulo: Saraiva, 2006

MANCINI, M.C. **Transferência de massa em secadores de grãos.** Tese de Doutorado - UFRJ, 1996

MARQUES, B. C. **Estudo de sistemas de fermentação em estado sólido em escala piloto.** Dissertação (Mestrado em Engenharia), Universidade Federal do Paraná, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, 2005

MARQUES, B.C.; BARGA, M.C.; BALMANT, W.; LUZ JR, L.F.L.; KRIEGER, N.; MITCHELL, D.A. A model of the effect of the microbial biomass on the isotherm of the fermenting solids in solid-state fermentation. **Food Technol Biotechnol**. v.44 p.457-463, 2006

MITCHELL, D. A.; KRIEGER, N.; BEROVIC, M., **Solid State Fermentation Bioreactors**: Fundamental of Design and operation. 1. ed. Verlag Berlin Heidelberg: Springer, 2006

MITCHELL, D.A.; BEROVIC, M.; KRIEGER, N. Biochemical engineering aspects of solid state bioprocessing. **Adv Biochem Eng/Biotechnol**. v.68, p.61-138, 2000a

MITCHELL, D. A.; KRIEGER, N.; STUART, D. M.; PANDEY, A. New developments in solid-state fermentation. II. Rational approaches to the design, operation and scale up of bioreactors. **Process Biochem**. v.35, p.1211-1225, 2000b

MITCHELL, D.A.; von MEIEN, O.F. Mathematical modeling as a tool to investigate the design and operation of the Zymotis packed-bed bioreactor for solid-state fermentation. **Biotechnol & Bioeng**. v.68 p.127–135, 2000c

MURALIDHARAN, R.; RADHA, K.V. A kinetic study of polyhydroxybutyrate production on nitrogen limited medium using *Bacillus subtilis* MTCC 9763 through a two stage cultivation strategy. **J Environ Bio**. v.36 p.537-542, 2015

NAGEL, F. J. J. I.; TRAMPER, J.; BAKKER, M. S. N.; RINZEMA, A. Model for on-line moisture-content control during solid-state fermentation. **Biotechnol & Bioeng**. v.72 n.2 p.231-243, 2001

OOSTRA, J.; LE COMTE, E. P.; VAN DEN HEUDEL, J. C.; TRAMPER, J.; RINZEMA, A. Intra-particle oxygen diffusion limitation in solid-state fermentation. **Enzyme Microb Technol**,v.27 p.652-3, 2001

PANDEY, A.; SOCCOL, C.R.; RODRIGUEZ-LEON, J.; NIGAM, P. **Solid-State Fermentation in Biotechnology**. New Delhi: Asiatech Publishers Inc., 2001

PELEG, M. Assessment of a semi-empirical four parameter general model for sigmoid moisture sorption isotherms. **J. Food Process Eng**. v.16 p.21-37, 1993

PERRY, R.H.; GREEN, D.W. **Perry's chemical engineering handbook**, USA, McGraw-Hill, p.2-208, 1999

PÉREZ-CORREA, J.R.; AGOSIN, E. Automation on solid-substrate fermentation processes. In: FLICKINGER, M.C.; DREW, S.W. (Eds) **The encyclopedia of bioprocess technology: fermentation, biocatalysis and bioseparation**. John Wiley, New York, v.5 p.2429-2446, 1999

PIEDRAHÍTA-AGUIRRE, C. A.; BASTOS, R. G.; CARVALHO, A. L.; MONTE ALEGRE, R. The influence of process parameters in production of lipopeptide iturin A using aerated packed bed bioreactors in solid-state fermentation. **Bioprocess Biosyst Eng**. v.37 p.1569-1576, 2014

PITOL, L. O. **Ampliação de escala da produção de pectinases em fermentação no estado sólido**. Dissertação de Mestrado – UFPR, 2014

PITOL, L.O.; BIZ, A.; MALLMANN, E.; KRIEGER, N.; MITCHELL, D. A. Production of pectinases by solid-state fermentation in a pilot-scale packed-bed bioreactor. **Chem Eng J**. v.283 p.1009-1018, 2016

PRUKWARUN, W.; KHUMCHOO, W.; SEANCOTR, W. CFD simulation of fixed bed dryer by using porous media concepts: Unpeeled longan case. **Int J Agric & Biol Eng**. v.6 n.1 p.100-110, 2013

RANJBARAN, M.; ZARE, D. CFD modeling of microwave-assisted fluidized bed drying of moist particles using two-fluid model, **Drying Tech**. v.30 p.362-376, 2012

RAY, B.; BHASKARAN, R.; COLLINS, L. R. **Introduction to CFD basics**. Site da Cornell University, 2012. e-book. Disponível em: <https://confluence.cornell.edu/display/SIMULATION/FLUENT+-+Introduction+to+CFD+Basics> Acesso em: 27/04/2015

REID, R.C.; PRAUSNITZ, J.M.; SHERWOOD, T.K. **The Properties of Gases and Liquids**, 3. ed., New York: McGraw-Hill, 1977

RIQUELME, M.; BARTNICKI-GARCÍA, S.; GONZÁLEZ-PRIETO, J.M.; SÁNCHEZ-LEÓN, E.; VERDÍN-RAMOS, J.A.; BELTRÁN-AGUILAR, A.; FREITAG M. *Spitzenkörper* localization and intracellular traffic of green fluorescent protein-labeled CHS-3 and CHS-6 chitin synthases in living hyphae of *Neurospora crassa*. **Eukaryot Cell**, v.6 p.1853-1864, 2007

SARGANTANIS, J.; KARIM, M.N.; MURPHY, V.G.; RYOO, D. TENGEDY, R.P. Effect of operating conditions on solid substrate fermentation. **Biotechnol & Bioeng.** v.42 p.149-158, 1993

SAUCEDO-CASTANEDA, G.; GUTIERREZ-ROJAS, M.; BACQUET, G.; RAIMBAULT, M.; VINIEGRAGONZALEZ, G. Heat transfer simulation in solid substrate fermentation. **Biotechnol & Bioeng.** v.35 p.802-808, 1990

SAYMA, A. **Computational Fluid Dynamics.** Abdalnaser Sayma & Ventus Publishing ApS, 2009. e-book. Disponivel em: <http://www.leka.lt/sites/default/files/dokumentai/computational-fluid-dynamics.pdf>
Acesso em: 27/04/2015

SHIRKOLE, S. S.; KENGHE, R. N.; NIMKAR, P. M. Moisture dependent physical properties of soybean. **Int J Eng Sci & Technol.** v.3 n.5 p.3807–3815, 2011

SHOJAOSADATI, S. A.; BABAEIPOUR, V. Citric acid production from apple pomace in multi-layer packed-bed solid-state bioreactor. **Process Biochem.** v.37 p.909-914, 2002

SHUTYSER, M. A. I. **Mixed solid-state fermentation: numerical modeling and experimental validation.** Tese de Ph.D. Wageningen University, Holanda. 2003

VINIEGRA-GONZÁLEZ, G., Solid-state fermentation: definition, characteristics, limitations and monitoring. In: ROUSSOS, S.; LONSANE, B.K.; RAIMBAULT, M.; VINIEGRA-GONZÁLEZ, G.; **Advances in solid-state fermentation.** Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, p.5-23, 1997

von MEIEN, O. F.; MITCHELL, D. A. A two-phase model for water and heat transfer within an intermittently-mixed solid-state fermentation bioreactor with forced aeration. **Biotechnol & Bioeng.** v.79 p.416-28, 2002

von MEIEN, O. F.; LUZ, L. F. L.; MITCHELL, D. A.; PEREZ-CORREA, J. R.; AGOSIN, E.; FERNANDEZ-FERNANDEZ, M. and ARCAS, J. A.. Control strategies for intermittently mixed, forcefully aerated solid-state fermentation bioreactors based on the analysis of a distributed parameter model. **Chem Eng Sci.** v.59 n.21 p.4493-4504, 2004

ZANELATO, A. I.; SHIOTA, V. M.; GOMES, E.; da SILVA, R.; THOMÉO, J. C. Endoglucanase production with the newly isolated *Myceliophthora* sp. I-1D3b in a packed bed solid-state fermentator. **Braz J Microbiol.** p.1536-1544, 2012

ZIEGENBALG, D.; KOMPTER, C.; SCHÖNFELD, F.; KRALISCH, D. Evaluation of different micromixers by CFD simulations for the anionic polymerisation of styrene. **Green Process Synth**, v.1 p.211-224, 2012

ANEXO

ARTIGO PUBLICADO EM CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS
(CET) VOL. 49, 49-54, 2016.

Fluid Dynamics Simulation of a Pilot-Scale Solid-State Fermentation Bioreactor

Diego R. Pessoa^a, Anelize T. J. Finkler^a, Alex V. L. Machado^a, Luiz Fernando L. Luz Jr.^a, David A. Mitchell^b

^aUniversidade Federal do Paraná, Departamento de Engenharia Química, Caixa Postal 19011 – Centro Politécnico – CEP 81531-980 – Curitiba – Paraná – Brasil

^bUniversidade Federal do Paraná, Departamento de Bioquímica e Biologia Celular, Caixa Postal 19046 – Centro Politécnico – CEP 81531-980 – Curitiba – Paraná – Brasil
diego.pes@hotmail.com

Solid-state fermentation (SSF) has potential advantages for the production of certain biotechnological products, due to its large volumetric productivity and low operating costs. However, there are major challenges in obtaining adequate heat and mass transfer when this fermentation method is used at large scales. Mathematical models and computer simulations are useful tools for designing strategies to overcome these challenges, given the cost of large-scale fermentation experiments. In the current work, we used the commercial CFD software ANSYS FLUENT® 16.0 to develop a mathematical model for heat and mass transfer in a pilot-scale packed-bed bioreactor. The model takes into account the dynamics of airflow in the porous substrate bed and the lack of thermal and moisture equilibrium between the solid and gas phases. The permeability parameters were obtained from pressure drop measurements made in the pilot-scale bioreactor during a fermentation in which *Aspergillus niger* was grown on a mixture of wheat bran and sugar cane bagasse. The CFD simulations were able to represent the temperature and moisture profiles observed experimentally during the initial heating of the substrate bed by the process air. A parametric analysis was also performed, in order to understand better the physical dynamics of the system. Our work provides the basis for the development of a robust and reliable model for testing operating conditions and control strategies for large-scale cultivation in SSF bioreactors.

Keywords: solid-state fermentation, SSF, computational fluid dynamics, CFD, ANSYS Fluent.

1. Introduction

Despite the growing interest in producing microbial products by solid-state fermentation (SSF), there are major challenges to face when using this cultivation method at large-scale, due to the relatively poor heat and mass transfer within the bed of solid particles. Mathematical models and computational simulations are useful tools for developing operating and control strategies to overcome these challenges. It is therefore surprising that, to date, there are few examples of the application of computational fluid dynamics (CFD) to SSF bioreactors. CFD models can predict radial temperature and mass transfer gradients in complex geometries of flow. Additionally, current commercial CFD packages allow easy visualization and analysis of the results in 3D.

Recently, we studied the production of pectinases by *Aspergillus niger* in a pilot-scale packed-bed bioreactor, using a porous substrate bed consisting of wheat bran (WB) and sugarcane bagasse (SCB), in a 90:10 mass ratio (Pitol et al., 2016). The aim of the current work was to develop a CFD simulation of heat and mass transfer in this bed, thereby providing the basis for the development of a model that can, in the future, be used as a tool for identifying appropriate operating strategies for optimizing the performance of cultivations undertaken in this bioreactor. Experimental pressure drop data were collected in the pilot-scale bioreactor, in order to obtain the permeability coefficients characterizing the resistance of the porous substrate bed. The simulations were validated with experimental data for bed temperature and moisture content obtained during the initial heating of the bed by the process air.

2. Model development and materials and methods

2.1 Model of heat and mass transfer in the bed of solid particles

We used the model for heat and water transfer in porous SSF beds proposed by von Meien and Mitchell (2002). This model considers the solid and gas phases separately, with differential equations being used to describe the balances on water and energy in these phases. This model has provided good descriptions for heat and water transfer in the pilot-scale bioreactor used by Pitol et al. (2016), as shown by experiments undertaken in the absence of microbial growth by Marques *et al.* (2006), although this investigation did not recognize the heterogeneity of the porous medium, nor the presence of radial profiles. The equations were inserted into the commercial CFD software ANSYS Fluent® 16.0 through UDF's (user defined functions).

The model of von Meien and Mitchell (2002) was developed for the growth of *A. niger* on corn. We replaced the equation for the isotherm of corn used by von Meien and Mitchell (2002) with the equation of Peleg (1993), proposed by Casciadori *et al.* (2015) to fit to the isotherm of wheat bran and sugar cane bagasse:

$$\varphi_s^* = P_1 a_{wg}^{P_2} + P_3 a_{wg}^{P_4} \quad (1)$$

In this equation, the fitting constants P1, P2, P3 and P4 were 0.117, 0.364, 0.522 and 8.342, respectively, for wheat bran and 0.145, 10.98, 0.107 and 1.058, respectively, for sugarcane bagasse (Casciadori *et al.*, 2015).

2.2 Solid-state fermentation experiments

The bed of solids was 0.4 m high and had a porosity of 0.564 (calculated using Eq(7) and Eq(8) in Table 1). It had an initial temperature of 25.6°C and an initial moisture content of 1.50 kg/kg (dry basis). The inlet air had a temperature of 32.0°C and a water activity of 0.99 and was supplied at a flow rate of 0.077 kg/s.

2.3 Calculation of parameters

Through the pressure drop correlation from ANSYS, it is possible to fit experimental data in order to obtain the viscous (1/K) and inertial resistance (C2) coefficients for a porous medium or a membrane (porous-jump):

$$\left(\frac{\Delta P}{L}\right) = \frac{\mu}{K} v + \frac{\rho C_2}{2} v^2 \quad (2)$$

The remaining properties of the substrate solids as functions of moisture content (MC) are estimated as shown in Table 1. Note that MC refers to the moisture content on a wet basis and the specific heat capacity of the 9:1 mixture of wheat bran and sugarcane bagasse was taken as that of 100 % wheat bran.

Table 1: WB and SCB moist particle and porous bed parameters as a function of moisture content (MC).

Parameter	Material	Equation/Value		Source
Solid particle density (kg/m ³)	WB	0.974 + 0.226MC	Eq(3)	Casciadori <i>et al.</i> (2014)
	SCB	0.578 + 0.00365exp $\left(\frac{MC}{0.149}\right)$	Eq(4)	Casciadori <i>et al.</i> (2014)
Solid specific heat capacity (J/(kg.°C))*	WB	1590.0		Sweat (1986)
Solid thermal conductivity (W/(m.°C))	WB	0.213 + 0.264MC	Eq(5)	Casciadori <i>et al.</i> (2013)
	SCB	16.8 – 35.7 · 0.51 $\frac{1}{MC}$	Eq(6)	Casciadori <i>et al.</i> (2013)
Solid bulk porosity on Loose Packing	WB	0.91 – 0.016exp $\left(\frac{MC}{0.30}\right)$	Eq(7)	Casciadori <i>et al.</i> (2014)
	SCB	0.62 – 0.136MC	Eq(8)	Casciadori <i>et al.</i> (2014)

Note: *estimated by weighted average with the actual moisture content.

2.4 Pressure drop data

The pressure drop data used for calculation of the permeability coefficients were obtained from experiments in the pilot-scale packed bed-bioreactor, undertaken as described by Pitol *et al.* (2016). Wheat bran and sugarcane bagasse were used (on a dry mass basis, 27 kg and 3 kg, respectively). The pressure drop was measured with a mercury manometer connected to the bioreactor air inlet and outlet. Pressure drop data was obtained for five different airflow rates between 170.7 and 252.5 m³/h.

2.5 Bioreactor geometry

The bioreactor, located at the Federal University of Paraná, is as described by Pitol *et al.* (2016). The dimensions were measured and the 3D geometry was drawn using ANSYS ICEM CFD® 16.0 and exported to ANSYS Fluent® 16.0. A hexahedral mesh with minimum determinant 2x2x2 quality of 0.325 and 66,495 nodes was generated (Figure 1a). The experimental temperature measurements were provided by thermocouples installed inside the substrate chamber at three different heights (z) (Table 2). The thermocouple locations are related to the origin point at the inferior corner of the empty substrate chamber (indicated by "0" in Figure 1a) and the bioreactor air inlet and outlet are also indicated in Figure 1a.

A highly refined, inflated tetrahedral mesh was developed for the perforated plate in order to estimate its flow resistance coefficients. The flow of air at different superficial velocities was simulated, providing estimates of pressure drop across the plate. A curve was fitted to this data, enabling estimation of the inertial and viscous coefficients of Eq(2). These coefficients were used in the porous-jump (Table 3).

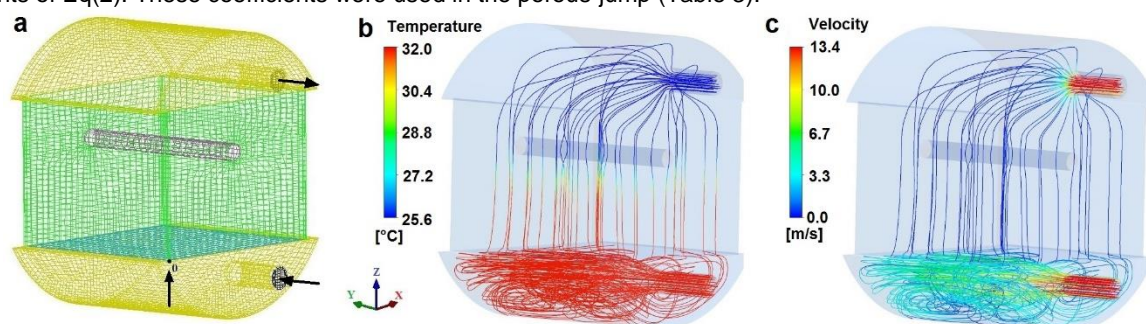


Figure 1: Bioreactor geometry: a – Mesh; b – Temperature streamlines; c – Velocity streamlines.

Table 2: Thermocouple positions: the y positions are given in the same order as the thermocouple labels in the column headings.

	T1; T2; T0; T3	T4; T7; T5; T6	T11; T10; T9; T8
x (cm)	65	14	27
y (cm)	9.0; 29.5; 42.5; 55.0	6.0; 16.0; 30.5; 47.5	10.0; 22.0; 27.5; 44.5
z (cm)	5	18	33

2.6 Mesh analysis

In the first mesh analysis, we isolated the porous bed geometry to see the effect of three different mesh refinements and time step values on the quality of the results of the model simulation. The porous bed volume was about 0.177 m³ and the low, medium and high refinements resulted in average element volumes of 7.29, 3.40 and 1.27 cm³, respectively. The time steps tested were 0.1, 0.01 and 0.001 s. In the second analysis, we tested the influence of the three refinements and four different turbulence models (laminar, k-epsilon, k-omega and transition k-kl-omega) on the airflow distribution through the porous-jump. The bioreactor volume was about 0.395 m³ and the low, medium and high refinements resulted in average element volumes of 6.46, 2.58 and 1.15 cm³, respectively. The turbulence models were tested at steady state and simulations stopped at default convergence criteria or when they reached 1,200 iterations. Meshes with even lower refinements were not an option because they led to non-realistic bioreactor geometry with poor quality elements.

2.7 Parametric analysis

The parameters presented in Sections 2.1 and 2.2 and Table 3 represent the central case simulation. Parameters were varied relative to this central case: airflow 20 % higher, solid specific heat 20% lower, particle density 20 % lower, porous medium heat transfer coefficient 20 % lower and bed porosity 20 % higher.

3. Results

3.1 Pressure drop and permeability

For five different airflow rates, the pressure drop varied between 1,831.6 and 2,830.7 Pa/m. Curve fitting gave a viscous coefficient (1/K) of 5.12 x 10⁸ m⁻² and an inertial resistance coefficient (C₂) of 19,340 m⁻¹. Pressure drop data (8 points) were also collected during the first 10 h of the fermentation at a constant air flow rate of 240 m³/h (0.077 kg/s). The pressure drop oscillated between 761.2 and 1712.7 Pa/m, with an average value of 1,308.3 Pa/m. The values of air density (1.16 kg/m³) and viscosity (2.81 x 10⁻⁵ Pa.s) used to calculate the resistance coefficients were for the average operating temperature of 29.3 °C (Perry and Green, 1999).

3.2 Mesh Analysis

The refinement of the substrate mesh had little influence on the quality of the simulation results. The minimum refinement quality set was based on the 2x2x2 determinant quality criterion equal to 0.3, the minimum value required by the Fluent® simulator. However, the size of the time step affected the results. Time steps of 0.01 and 0.001 s gave quite similar temperatures and air and substrate moisture profiles, with poor quality results being obtained with a time step size of 0.1 s. Therefore a 0.01 s time step was chosen for the simulations.

With respect to turbulence model, both 2-equation models (k-epsilon and k-omega) had low computational cost requirements and gave airflow distribution results similar to those obtained with the transition 3-equation model. The k-epsilon model was chosen because it gave a smooth behavior for the evaporation rate profile whereas both the k-omega model and the transition model gave oscillatory behavior.

The effect of the chamber mesh refinement on the symmetry of the flow distribution pattern through the porous-jump was investigated. The gas enters below the porous-jump in the Y direction. The flow hits the opposite wall and the turbulence generated helps to distribute the flow throughout the inferior chamber. Figure 2 shows the resulting z velocity flow through the porous-jump surface. The low and medium refinements produced similarly asymmetric patterns; only the most refined mesh produced a symmetric flow pattern (Figure 2). However, the highly refined mesh is overly time consuming. Since the mesh refinement had relatively little influence on the simulation results, the low refinement was chosen for the simulations, as it allowed for faster simulations. Figure 1c shows the resulting simulated air flow through the bioreactor.

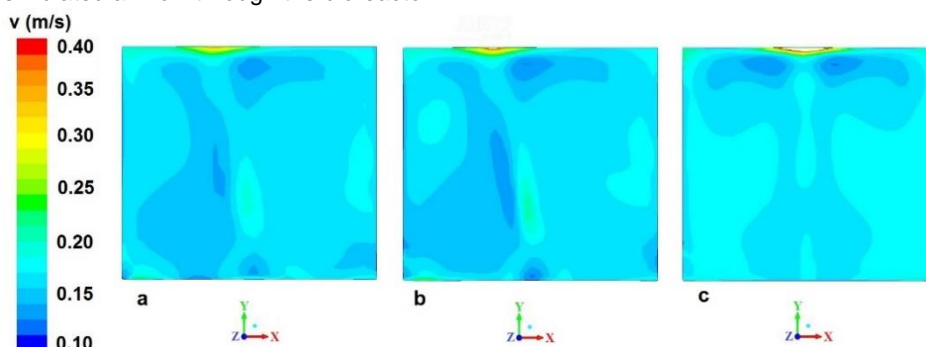


Figure 2: Flow distribution pattern through porous-jump obtained with different refinements: a – low; b – medium; c – high.

3.3 Simulation settings, simulations and parametric analysis

The substrate bed was represented as a homogenous porous medium and the perforated base plate was treated as a porous wall (porous-jump) in order to reduce the computational cost, while maintaining the quality of the results (Prukwarun et al., 2013). A pressure drop across the porous bed of 1,175.5 Pa/m was estimated through the simulation, which is close to the average value obtained experimentally in the first 10 h (i.e. before growth of the fungal mycelium into the inter-particle spaces). Table 3 gives the main parameters and simulation settings.

Table 3: Description of simulation settings.

Description	Method/Value
Moist solids particle density (kg/m ³)	1,077
Moist solids specific heat capacity (J/(kg.°C))	3,146.4
Moist solids thermal conductivity (W/(m.°C))	0.3536
Porous medium thermal mode	Non-equilibrium
Heat transfer coefficient (W/(m ² .°C))	58,376.7*
Operating pressure (Pa)	101,325
Porous jump parameters	1/K= 2.88 x 10 ⁶ m ² ; L = 0.002 m; C ₂ = 15,578.7 1/m
Time step (s)	0.01

*Interpolated values from Lima (2009) for gas temperature of 305 K.

Temperature profiles during bed heating were measured for three bed heights (z values) (symbols in Figure 3). Each curve represents the average of the values recorded by the thermocouples at that height. Lower heights are heated first, such that the curves begin to rise in the order z=5 cm, then z=18 cm and, finally, z=33 cm. Figure 1b shows the temperature streamlines of the air for the flowtime of 600 s: there is a short region of temperature transition (where the streamline changes from red to blue) inside the substrate bed. The height within the bed at which this transition occurs gradually increases over time. The simulated temperature profiles do not agree perfectly with the experimental ones (Figure 3a), with the greatest difference being that, experimentally, the profile for z=18 cm begins to rise much earlier than predicted.

The parametric analysis shows that, with exception of the heat transfer coefficient, all of the parameters affected the predicted heating curves noticeably. The reduction of the bed specific heat allowed the curves to rise earlier, as the reduction in particle density made it easier to heat the system (Figure 3b). With increased bed porosity, the heating curves were dislocated to the left (Figure 3c); this is expected, since higher void fractions should imply reduced bulk density and thus reduced thermal inertia. A higher air flow rate dislocated the curves significantly to the left, while a reduced heat transfer coefficient had little effect (Figure 3d).

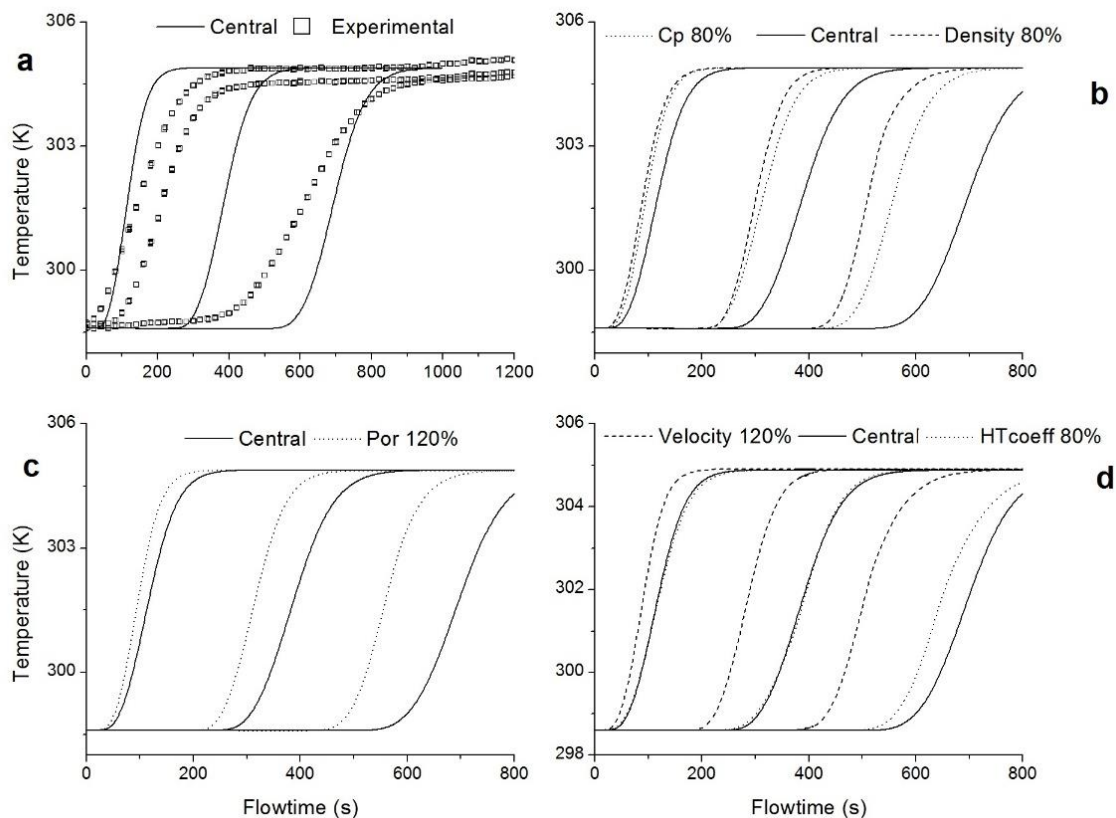


Figure 3: Simulated temperature profiles and parametric analysis. Comparison: a - experimental data and central simulation; b - central, substrate specific heat (C_p) 20 % lower and particle density 20 % lower; c - central and substrate porosity (Por) 20 % higher; d - central, airflow 20 % higher and substrate heat transfer coefficient ($HTcoeff$) 20 % lower.

The predicted moisture contents of the air and substrate are average values for XY planes perpendicular to the air flow direction. Figure 4 shows predictions for five different bed heights, including at the substrate surface ($z=40$ cm). The moisture content of the air increases from 0.0205 kg/kg, corresponding to the initial condition of moisture equilibrium at 25.6 °C, to 0.0300 kg/kg, corresponding to a water activity of 0.99 at 32 °C. The substrate moisture content shows a similar behavior, but varies over a very narrow range (Figure 4). As the substrate is colder than the air and the gas phase is almost saturated, condensation of water occurs, increasing the moisture content of the substrate slightly (Figure 4). This condensation accelerates the substrate heating process since it is an exothermal phenomenon. As expected, in both profiles the lower heights suffer the variation earlier.

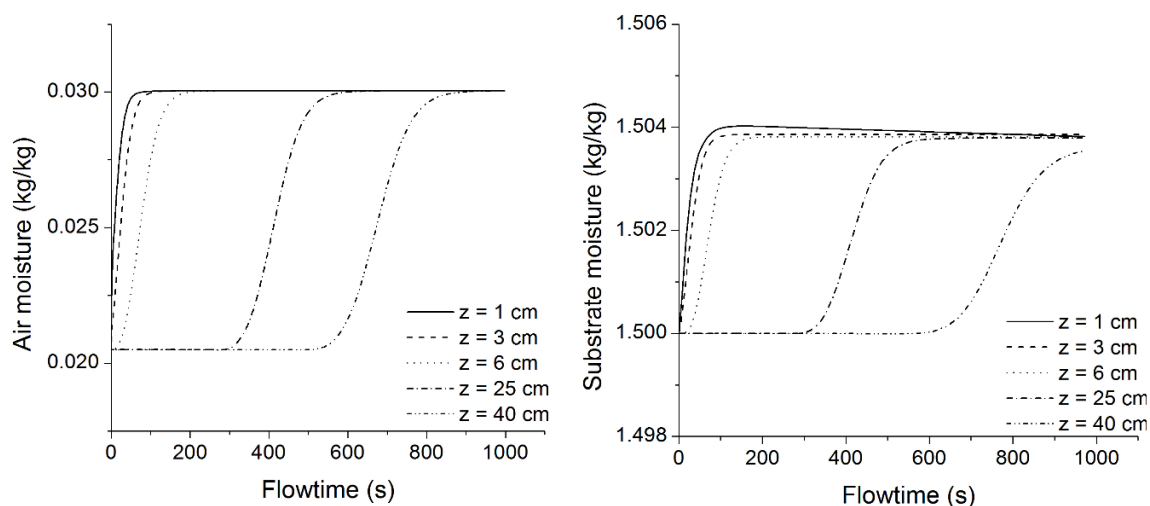


Figure 4: Predicted air and substrate moisture profiles.

4. Conclusion

Despite some discrepancies, the CFD simulations gave reasonable descriptions of the dynamics of heat and water transfer within the porous bed composed of wheat bran and sugarcane bagasse. With the incorporation of a model for microbial growth, this CFD model could be extended to provide a robust and reliable tool for testing operating conditions and control strategies for large-scale cultivations in SSF bioreactors.

Nomenclature

φ_s^*	Solid moisture at equilibrium (kg/kg)	ΔP	Pressure drop (Pa)
a_{wg}	Water activity of the gas phase	L	Porous medium thickness (m)
μ	Fluid viscosity (Pa.s)	K	Permeability (m ²)
ρ	Fluid density (kg/m ³)	C_2	Inertial resistance coefficient (1/m)
v	Fluid superficial velocity (m/s)		

5. References

- Casciotori F.P., Laurentino C.L., Lopes K.C.M., de Souza A.G., Thoméo J.C., 2013, Stagnant effective thermal conductivity of agro-industrial for solid-state fermentation. *Int. J. of Food Prop.* 16, 1578-1593.
- Casciotori F.P., Laurentino C.M., Taboga S.R., Casciotori P.A., Thoméo, J.C., 2014, Structural properties of beds packed with agro-industrial solid by-products applicable for solid-state fermentation: Experimental data and effects on process performance. *Chem. Eng. J.* 255, 214-224.
- Casciotori F.P., Laurentino C.L., Zanelato A.I., Thoméo J.C., 2015, Hygroscopic properties of solid agro-industrial by-products used in solid-state fermentation. *Ind. Crop. Prod.* 64, 114-123
- Lima T., 2009, Modelo de inferência para a estimação da umidade do leito de um biorreator de fermentação no estado sólido. Master's Thesis – UFPR, Curitiba-PR, Brazil.
- Marques B.C., Barga M.C., Balmant W., Luz Jr L.F.L., Krieger N., Mitchell D.A., 2006, A model of the effect of the microbial biomass on the isotherm of the fermenting solids in solid-state fermentation. *Food Technol. Biotechnol.* 44, 457-463.
- Peleg M., 1993. Assessment of a semi-empirical four parameter general model for sigmoid moisture sorption isotherms. *J. Food Process Eng.* 16, 21-37.
- Perry R.H. and Green D.W., 1999, Perry's chemical engineering handbook, USA, McGraw-Hill, p.2-208.
- Pitol L.O., Biz A., Mallmann E., Krieger N., Mitchell D.A., 2016, Production of pectinases by solid-state fermentation in a pilot-scale packed-bed bioreactor. *Chem. Eng. J.* 283, 1009-1018.
- Prukwarun W., Khumchoo W., Seancoth W., 2013, CFD simulation of fixed bed dryer by using porous media concepts: Unpeeled longan case. *Int. J. Agric. & Biol. Eng.* 6, 100-110.
- Sweat V.E. Thermal properties of foods. *Engineering properties of foods.* New York: Marcel Dekker, 1986.
- von Meien O.F. and Mitchell D.A., 2002, A two-phase model for water and heat transfer within an intermittently-mixed solid-state fermentation bioreactor with forced aeration. *Biotechnol. Bioeng.* 79, 416-28.