

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

ALEXANDRE TEIXEIRA BORGES

**MÉTODO DA QUADRATURA DE MOMENTOS APLICADO À
SIMULAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHO DE BOLHAS EM
UM BIORREATOR PNEUMÁTICO POR CFD**

**São Carlos - SP
2023**

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

ALEXANDRE TEIXEIRA BORGES

**MÉTODO DA QUADRATURA DE MOMENTOS APLICADO À
SIMULAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHO DE BOLHAS EM
UM BIORREATOR PNEUMÁTICO POR CFD**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Béttega

**São Carlos - SP
2023**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Folha de Aprovação

Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Alexandre Teixeira Borges, realizada em 24/02/2023.

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Rodrigo Béttega (UFSCar)

Prof. Dr. Alberto Colli Badino Junior (UFSCar)

Prof. Dr. Mateus Nordi Esperança (IFSP)

O Relatório de Defesa assinado pelos membros da Comissão Julgadora encontra-se arquivado junto ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a minha família por sempre ter lutado para que eu pudesse realizar meus sonhos. Eu não teria conquistado tanto sozinho, meu muito obrigado!

Aos meus avós que já se foram viver na eternidade, agradeço por terem sido espelho para que eu pudesse me moldar como pessoa. A saudade sempre será imensa!

Aos meus amigos, em especial Alexchéviny Gimenez, Francis Freitas, Murilo Borri, Rafael Yuity e Victor Calvello, que fizeram e continuam fazendo parte essencial da minha vida. Sou extremamente grato pelos momentos que dividimos ao longo da minha caminhada!

Ao Átila Souza Oliveira, aquele que merece o mundo e um pouco mais. Seu coração transborda generosidade e empatia. Se encerro mais essa etapa acadêmica da minha vida não tenha dúvidas que todo o seu apoio e amor direcionados a mim foram primordiais para isso. Eu te amo!

Ao Prof. Dr. Rodrigo Béttega pela oportunidade de me desenvolver em uma área da Engenharia Química repleta de desafios e caminhos a serem explorados. Com certeza todo o conhecimento adquirido durante o mestrado irá estar comigo para sempre.

Ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química da UFSCar (PPGEQ-UFSCar) pela estrutura de ensino e ao centro de secagem pelos equipamentos utilizados nas simulações CFD.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes) pelo suporte financeiro para o desenvolvimento dessa pesquisa.

RESUMO

A aeração é fundamental para o funcionamento de biorreatores pneumáticos, pois a partir da injeção de gás no sistema é possível realizar a agitação do meio, bem como melhorar a transferência de massa com um menor consumo energético. A distribuição de bolhas e o regime de escoamento nesses equipamentos afetam de maneira direta o desempenho de parâmetros globais, como a retenção gasosa (ε_G) e o coeficiente volumétrico de transferência de massa (k_{La}). Dessa forma, entender o seu comportamento e seus fenômenos de interação entre as fases líquida e gasosa são importantes para avaliar a fluidodinâmica e o desempenho desses biorreatores. Neste contexto, a simulação por fluidodinâmica computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*) destaca-se por ser uma ferramenta alternativa para o estudo e avaliação desses parâmetros globais em diferentes condições de operação e geometrias, permitindo que essas avaliações não se limitem devido ao tempo e a custos de construção de protótipos necessários para avaliações experimentais. No entanto, dentre os estudos encontrados na literatura, poucos são aqueles que avaliam a influência do escoamento do gás no meio considerando a existência de uma distribuição de tamanho de bolhas em sua modelagem, a qual é observável na prática. Tal consideração é importante para que os fenômenos de coalescência e a quebra de bolhas sejam contabilizados no problema, sendo possível, a partir disso, refinar a modelagem do comportamento fluidodinâmico desses equipamentos. Assim, este trabalho tem como objetivo incorporar a distribuição de tamanho de bolhas em simulação CFD de biorreatores pneumáticos por meio de equações de balanço populacional (EBP) utilizando-se do Método de Quadratura de Momentos (QMOM), de modo a avaliar a influência dessa inclusão na resposta simulada dos principais parâmetros globais de desempenho. As simulações foram realizadas utilizando o *software Ansys Fluent*, versões 14.5 e 2022 R2, considerando o modelo Euleriano-Euleriano para a descrição do escoamento 3D multifásico ar-água para a geometria coluna de bolhas (CB) estudada por Mendes (2016). Uma rotina Python foi implementada e aplicada para auxiliar nas simulações, com objetivo de avaliar diferentes modelos de coalescência e quebra incorporados ao balanço populacional. A partir dessa rotina determinou-se as constantes utilizadas na simulação 3D para diferentes modelos de frequência de colisão. Foram realizadas simulações para vazões específicas de ar (ϕ_{ar}) de 1 a 5 vvm, tendo sido obtido contornos para o diâmetro de bolha bem como o diâmetro médio de Sauter. Os resultados demonstraram que o QMOM foi capaz de descrever a distribuição de tamanho de bolhas e sua evolução, tendo sido obtido um erro relativo máximo de 9% na estimativa do diâmetro médio de Sauter. Foi possível estimar também o valor de k_{La} , sendo que o menor erro relativo obtido foi de 12% para ϕ_{ar} igual a 1 vvm.

Palavras-chave: CFD. Equações de balanço populacional (EBP). Método de Quadratura de Momentos (QMOM). Distribuição de tamanho de bolhas. Coalescência. Quebra.

ABSTRACT

Aeration is crucial for the functioning of pneumatic bioreactors, as injecting gas into the system allows to perform agitation of the medium and as well as to improve mass transfer with lower energy consumption. Bubble distribution and flow regime in these devices directly affect the performance of global parameters, such as the gas hold-up (ε_G) and the volumetric mass transfer coefficient ($k_L a$). Thus, understanding their behavior and their interaction phenomena between the liquid and gas phases are important to evaluate the fluid dynamics and performance of these bioreactors. In this context, computational fluid dynamics (CFD) simulation stands out as an alternative tool for the study and evaluation of these global parameters under different operating conditions and geometries, allowing these evaluations to not be limited by the time and costs of building prototypes necessary for experimental evaluations. However, among the studies found in the literature, few are those that evaluate the influence of gas flow in the medium considering the existence of a bubble size distribution in its modeling, which is observable in practice. Such consideration is important so that coalescence phenomena and bubble breakage are accounted for in the problem, making it possible to refine the fluid dynamic behavior modeling of these devices. Therefore, this work aims to incorporate the bubble size distribution in CFD simulations of pneumatic bioreactors through population balance equations (PBE) using the Quadrature Method of Moments (QMOM), in order to evaluate the influence of this inclusion on the simulated response of the main performance global parameters. The simulations were performed using the Ansys Fluent software, versions 14.5 and 2022 R2, considering the Eulerian-Eulerian model for the description of the 3D air-water multiphase flow for the bubble column (CB) geometry studied by Mendes (2016). A Python routine was implemented and applied to assist in the simulations, with the goal of evaluating different coalescence and breakage models incorporated into the population balance. From this routine, the constants used in the 3D simulation for different collision frequency models were determined. Simulations were performed for specific airflow rates (ϕ_{ar}) of 1 to 5 vvm, and contours for the bubble diameter and its Sauter mean diameter value were obtained. The results showed that the QMOM were able to describe the bubble size distribution and its evolution, with a maximum relative error of 9% obtained in the estimation of the Sauter mean diameter. It was also possible to estimate the value of $k_L a$, with the lowest relative error obtained being 12% for ϕ_{ar} equal to 1 vvm.

Keywords: CFD. Population Balance Equation (PBE). Quadrature Method of Moments (QMOM). Bubble Size Distribution (BSD). Coalescence. Breakage.

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Biorreatores: (a) tipo tanque agitado e aerado (convencional) e (b) pneumático tipo coluna de bolhas (não-convencional).	3
Figura 3.2	Diferentes modelos de biorreator <i>airlift</i> : (a) tipo cilindro concêntrico (ACI), (b) tipo <i>split-cylinder</i> (ACI) e (c) tipo <i>loop</i> (ACE).	4
Figura 3.3	Principais mecanismos dos fenômenos de coalescência e quebra para bolhas.	5
Figura 4.1	Esquemática dos métodos Discreto Homogêneo (a) e Não-homogêneo (b).	16
Figura 5.1	Representação do biorreator coluna de bolhas e de suas principais dimensões.	32
Figura 5.2	Representação do aspersor tipo cruzeta com 84 orifícios.	32
Figura 5.3	Vista isométrica de parte da malha computacional gerada em torno do aspersor tipo cruzeta.	34
Figura 6.1	Fluxograma das etapas realizadas pela rotina Python.	41
Figura 6.2	Diâmetro médio de Sauter em função da velocidade superficial de ar para os modelos de frequência de colisão de Prince e Blanch (1990) e Wang <i>et al.</i> (2005).	42
Figura 6.3	Diâmetro médio de Sauter obtido para diferentes valores iniciais de diâmetro médio de bolha.	43
Figura 6.4	Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos pela simulação do conjunto A para tempo real de 1,0 segundo de escoamento para diferentes abordagens para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ϵ) e passos de tempo: (a) Caso A.1: ϵ – Buffo <i>et al.</i> (2013) e 1.10^{-3} s, (b) Caso A.2: ϵ – Buffo <i>et al.</i> (2013) e 1.10^{-4} s, (c) Caso A.3: ϵ – padrão <i>Ansys Fluent</i> e 1.10^{-3} s e (d) Caso A.4: ϵ – padrão <i>Ansys Fluent</i> e 1.10^{-4} s.	44
Figura 6.5	Contorno do diâmetro médio de Sauter obtido pela simulação do conjunto A para tempo real de 1,0 segundo de escoamento – Caso A.5.	45
Figura 6.6	Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os modelos de: (a) Prince e Blanch (1990) – Caso A.4 e (b) Wang <i>et al.</i> (2005) – Caso A.5 para tempo real de 2,0 segundos de escoamento.	46
Figura 6.7	Contornos da fração volumétrica de ar obtidos para os modelos de: (a) Prince e Blanch (1990) – Caso A.4 e (b) Wang <i>et al.</i> (2005) – Caso A.5 para tempo real de 2,0 segundos de escoamento.	47
Figura 6.8	Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) B.1, (b) B.2 e (c) B.3 para o tempo real de escoamento de 1,0 segundo para diferentes momentos iniciais no topo do biorreator.	48

Figura 6.9	Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) B.1, (b) B.2 e (c) B.3 para o tempo real de escoamento de 1,5 segundos para diferentes momentos iniciais no topo do biorreator.	48
Figura 6.10	Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) B.1, (b) B.2 e (c) B.3 para o tempo real de escoamento de 2,0 segundos para diferentes momentos iniciais no topo do biorreator.	49
Figura 6.11	Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) B.1, (b) B.2 e (c) B.3 para o tempo real de escoamento de 5,0 segundos para diferentes momentos iniciais no topo do biorreator.	49
Figura 6.12	Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) C.1 e (b) C.2 para o tempo real de escoamento de 1,0 segundo.	50
Figura 6.13	Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) C.1 e (b) C.2 para o tempo real de escoamento de 1,5 segundos.	51
Figura 6.14	Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) C.1 e (b) C.2 para o tempo real de escoamento de 2,0 segundos.	51
Figura 6.15	Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) C.1 e (b) C.2 para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.	52
Figura 6.16	Contornos da fração volumétrica de ar obtidos para os Casos: (a) C.1 e (b) C.2 para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.	53
Figura 6.17	Contornos de: (a) Fração volumétrica de ar (α_{ar}), (b) Momento de terceira ordem (m_3) e (c) Diâmetro médio de Sauter (D_b^{Sauter}) para o Caso C.2 para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.	53
Figura 6.18	Contorno de nível do diâmetro médio de Sauter para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm, (b) 2 vvm, (c) 3 vvm, (d) 4 vvm e (e) 5 vvm para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos para o caso C.2.	54
Figura 6.19	Contorno de nível do diâmetro médio de Sauter para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm, (b) 2 vvm, (c) 3 vvm, (d) 4 vvm e (e) 5 vvm para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos referente aos planos XY e ZY para o caso C.2.	55
Figura 6.20	Contorno de nível da fração volumétrica de ar para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm, (b) 2 vvm, (c) 3 vvm, (d) 4 vvm e (e) 5 vvm para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos para o caso C.2.	56
Figura 6.21	Contorno de nível da fração volumétrica de ar para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm, (b) 2 vvm, (c) 3 vvm, (d) 4 vvm e (e) 5 vvm para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos referente aos planos XY e ZY para o caso C.2.	57
Figura 6.22	Contorno de nível de $k_L a$ para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm, (b) 2 vvm, (c) 3 vvm, (d) 4 vvm e (e) 5 vvm para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos referente aos planos XY e ZY para o caso C.2.	58

Figura 6.23 Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.	59
Figura 6.24 Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar para o tempo real de escoamento de 5 segundos obtida por Rodriguez (2015) para Coluna de Bolhas com altura total de 600 mm e altura inicial de líquido antes da aeração de 450 mm.	60
Figura 6.25 Diâmetro médio de bolha de ar em função da vazão específica de ar para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.	61
Figura 6.26 Coeficiente volumétrico de transferência de massa em função da vazão específica de ar para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.	62

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1	Dimensões do biorreator coluna de bolhas estudado por Mendes (2016).	31
Tabela 5.2	Propriedades físicas dos fluidos, condições de contorno, modelos e parâmetros numéricos adotados para as simulações do biorreator coluna de bolhas.	35
Tabela 5.3	Detalhamento das condições iniciais e de contorno adotadas na simulação dos casos de estudo.	39

NOMENCLATURA

Variáveis

a	Área interfacial específica de transferência de massa
a_i	Elemento da matriz Jacobiana do algoritmo <i>Product-Difference</i>
A_{orif}	Área de um orifício do aspersor
A_{total}	Área total das partículas por unidade de volume
$A_{\vec{x}}$	Área da fronteira do espaço físico
$A_{\vec{\xi}}$	Área da fronteira do espaço de coordenada interna
b_i	Elemento da matriz Jacobiana do algoritmo <i>Product-Difference</i>
b_k	Vetor de incremento unitário no logaritmo natural do momento de ordem k
$\bar{B}_{iB,k}$	Termo de nascimento de bolhas devido ao fenômeno de quebra
$\bar{B}_{iC,k}$	Termo de nascimento de bolhas devido ao fenômeno de coalescência
C_1	Constante utilizada para modelar os fenômenos de quebra e coalescência
C_2	Constante utilizada para modelar a frequência de quebra
C_3	Constante utilizada para modelar a frequência de quebra
C_D	Coefficiente de arrasto
C_D^{elipse}	Coefficiente de arrasto para bolha com forma de elipse
C_D^{esfera}	Coefficiente de arrasto para bolha com forma de esfera
C_D^{touca}	Coefficiente de arrasto para bolha com forma de touca
C_{ϵ_1}	Constante do modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ padrão
C_{ϵ_2}	Constante do modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ padrão
c_k	Termo que minimiza o vetor diferença de terceira ordem
C_μ	Constante do modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ padrão
C_Π	Constante do modelo de Wang <i>et al.</i> (2005) para a frequência de colisão
D	Diâmetro da Coluna de Bolhas
$\bar{D}_{iB,k}$	Termo de morte de bolhas devido ao fenômeno de quebra
$\bar{D}_{iC,k}$	Termo de morte de bolhas devido ao fenômeno de coalescência
D_b^{Sauter}	Diâmetro médio de Sauter
\vec{d}_j	Vetor diferença de ordem k
$d_{i,j}$	Elemento da linha i e coluna j da tabela de diferenças
D_L	Coefficiente de difusividade do oxigênio no meio líquido
D_{max}	Diâmetro máximo das bolhas considerado para o QMOM
D_{min}	Diâmetro mínimo das bolhas considerado para o QMOM
D_{orif}	Diâmetro do orifício do aspersor
f_{bi}	Fração de massa pertencente à classe b para a fase secundária i do método Discreto
\vec{F}_i	Somatório das forças interfaciais atuantes na fase i

$\vec{F}_{L,G}^{arrasto}$	Força interfacial de arrasto atuante na fase líquida devido à presença da fase gasosa
g	Aceleração da gravidade
$g(L)$	Frequência de quebra
G_i	Termo de geração ou consumo de massa da fase i
h	Função que contabiliza o fenômeno de coalescência
h_0	Frequência de colisão
H_1	Altura do aspensor na Coluna de Bolhas
H_2	Altura inicial do líquido na Coluna de Bolhas
H_3	Altura total da Coluna de Bolhas
H_D	Altura da dispersão após a aeração da Coluna de Bolhas
h_f	Espessura do filme líquido entre duas bolhas após o tempo de drenagem
H_L	Altura do líquido antes da aeração da Coluna de Bolhas
$h_{L,k}$	Função salto descontínuo referente ao tamanho de bolha e ao k -ésimo momento
h_ξ	Função salto descontínuo
I	Integral de fechamento para o QMOM
J	Matriz Jacobiana do algoritmo <i>Product-Difference</i>
\vec{k}	Vetor que contém a ordem do momento correspondente a cada coordenada interna
k_L	Coefficiente convectivo de transferência de massa
$k_{L,a}$	Coefficiente volumétrico de transferência de massa
K_V	Fator de forma volumétrico
L	Tamanho de bolha
L_{eq}	Comprimento equivalente
L_{total}	Comprimento total das partículas por unidade de volume
\vec{M}_i	Somatório das forças externas atuantes na fase i
\dot{m}_{ik}	Taxa de transferência de massa da fase i para a fase k
m_k	Momento de ordem k para o caso monovariado da EBP
\dot{m}_{ki}	Taxa de transferência de massa da fase k para a fase i
$m_{L,k}$	Momento de ordem k de uma função densidade numérica descrita em função do tamanho de bolha L
$m_{\xi,\vec{k}}$	Momento de uma função densidade numérica
$m_{\xi,k}$	Momento de ordem k de uma função densidade numérica descrita pelo vetor coordenada ξ
N	Número de nós do polinômio ortogonal utilizado na aproximação por quadratura Gaussiana
n_L	Função densidade numérica para coordenada interna sendo o tamanho de partícula
N_{orif}	Número de orifícios do aspensor
$N(t, \vec{x})$	Número total de partícula por unidade de volume no tempo e no ponto físico
N_{total}	Número total de partículas por unidade de volume
n_ξ	Função densidade numérica da coordenada interna ξ

P	Matriz referente ao polinômio ortogonal utilizado no algoritmo <i>Product-Difference</i>
P_i	Pressão da fase i
$P_{i,j}$	Elemento da linha i e coluna j da matriz P
Re_b	Número de Reynolds da bolha
S_{12}	Área de colisão seccional de bolhas de tamanho L_1 e L_2
S_i	Fase secundária i do método Discreto
t	Tempo
t_C	Tempo de contato entre duas bolhas
t_D	Tempo de drenagem do filme líquido presente entre duas bolhas
u_{crit}	Velocidade crítica de aproximação de duas bolhas
U_i	Velocidade da bolhas pertencentes à fase secundária i do método Discreto
u_{rel}	Velocidade relativa de aproximação entre duas bolhas
Var	Variância da função densidade numérica
Var'	Variância da distribuição Log-normal
$v_{ar,entrada}$	Velocidade de entrada do ar nos orifícios do aspersor
v_G	Velocidade da fase gasosa
V_G	Volume de gás injetado na Coluna de Bolhas
v_i	Velocidade intersticial da fase i
V_i	Volume total da fase i no sistema
v_∞	Velocidade terminal da bolha
v_L	Velocidade da fase líquida
V_L	Volume de líquido na Coluna de Bolhas
V_{total}	Volume total das partículas por unidade de volume
$v_{s,G}$	Velocidade superficial da fase gasosa
v_∞	Velocidade terminal da bolha
\vec{x}	Vetor coordenada externa
w_i	Peso da aproximação quadratura Gaussiana

Símbolos Gregos

α_G	Fração volumétrica da fase gasosa
$\alpha_{G,entrada}$	Fração volumétrica da fase gasosa que entra no sistema pelo orifício do aspersor
α_i	Fração volumétrica da fase i
α_L	Fração volumétrica da fase líquida
β	Função distribuição de quebra
δ	Delta de Kronecker
$\Delta_{k,l}$	Determinante da matriz de Hankel-Hadamard
Δt	Passo de tempo da simulação
ϵ	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta

ϵ_i	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta da fase i
$\epsilon_{teórico}$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta calculada teoricamente
γ	Fator referente à redução do espaço livre para o movimento de bolhas
κ	Energia cinética turbulenta
κ_i	Energia cinética turbulenta da fase i
λ	Eficiência de coalescência
Λ	Autovalor da matriz Jacobiana
μ	Média da função densidade numérica
μ'	Média da distribuição Log-normal
$\mu_{ef,i}$	Viscosidade efetiva da fase i
μ_G	Viscosidade dinâmica da fase gasosa
μ_i	Viscosidade dinâmica da fase i
μ_L	Viscosidade dinâmica da fase líquida
$\mu_{ef,i}$	Viscosidade turbulenta da fase i
$\Omega_{\vec{\xi}}$	Espaço de coordenadas internas
$\Omega_{\vec{x}}$	Espaço físico
ϕ_{ar}	Vazão específica de alimentação de ar
π	Número Pi
Π	Termo que contabiliza os efeitos de vórtices turbulentos
ρ_G	Densidade da fase gasosa
ρ_i	Densidade da fase i
ρ_L	Densidade da fase líquida
σ	Tensão superficial
σ_ϵ	Constante do modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ padrão
σ_κ	Constante do modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ padrão
θ	Tempo de exposição ou de contato entre um elemento de volume de líquido e uma bolha de gás
\vec{v}	Autovetor da matriz Jacobiana
ε_G	Retenção gasosa
$\vec{\xi}$	Vetor coordenada interna
ξ	Nó da aproximação por quadratura Gaussiana
ζ_i	Coefficiente que relaciona a matriz P com os coeficientes da matriz Jacobiana

Abreviações

ACE	Airlift de Circulação Externa
ACI	Airlift de Circulação Interna
BSD	Bubble Size Distribution
CB	Coluna de Bolhas
CM	Class Method
CFD	Computational Fluid Dynamics
CSBS	Constant Single Bubble Size Model
DNS	Direct Numerical Simulation
DPB	Discretized Population Balance
EBP	Equação de Balanço Populacional
GPBE	Generalized Population Balance Equation
i-MUSIG	Inhomogeneous Multiple Size Group
NDF	Number Density Function
PBE	Population Balance Equation
PD	Product-Difference
PSD	Particle Size Distribution
QMOM	Quadrature Method of Moments
RMS	Root Mean Square
SMM	Standard Method of Moments
UDF	User-defined Function
VSBS	Variable Single Bubble Size Model
vvm	Volume de ar por volume de líquido por minuto

Operadores Matemáticos

∂	Operador diferencial parcial
\otimes	Produto diádico
\cdot	Produto interno
$\vec{\nabla}$	Operador diferencial nabla

Sobreescritos

T	Operação de transposição de uma matriz
-----	--

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	OBJETIVOS	2
2.1	Objetivo Geral	2
2.2	Objetivos Específicos	2
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	2
3.1	Biorreatores	2
3.2	Biorreatores Pneumáticos	3
3.3	Parâmetros de Desempenho de Biorreatores	6
3.3.1	Retenção Gasosa	7
3.3.2	Coefficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio	7
3.4	Fluidodinâmica Computacional (CFD)	8
3.4.1	Simulação por CFD de Biorreatores Coluna de Bolhas	8
4	MODELAGEM MATEMÁTICA	12
4.1	Abordagem Euler-Euler	12
4.2	Conservação de Massa	12
4.3	Conservação de Quantidade de Movimento	13
4.4	Força Interfacial	13
4.5	Modelo de Turbulência	14
4.6	Equações de Balanço Populacional (EBP)	15
4.6.1	Modelagem da Equação de Balanço Populacional (EBP)	17
4.6.2	Método de Quadratura de Momentos (QMOM)	19
4.7	Modelos de Coalescência e Quebra	27
4.7.1	Modelos de Coalescência	27
4.7.2	Modelos de Quebra	29
5	MÉTODOS	30
5.1	<i>Softwares e Hardwares</i>	30
5.2	Geometria	31
5.3	Malha Computacional	33
5.4	Procedimento de Simulação Numérica	34
5.5	Parâmetros Hidrodinâmicos e de Transferência de Massa	36
5.5.1	Retenção Gasosa	36
5.5.2	Coefficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio	36
5.6	Casos de Estudo	37
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	40

6.1	Balanço Global de Momentos	40
6.2	Simulação 3D	43
7	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	63
8	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	66

1 INTRODUÇÃO

Biorreatores são equipamentos empregados em processos com a finalidade de obter bioprodutos a partir da conversão de matéria-prima por intermédio de células ou enzimas. O funcionamento desse tipo de dispositivo está diretamente relacionado à promoção de condições ótimas para que as reações bioquímicas de interesse ocorram. Dessa forma, características estruturais e condições de operação são definidas de modo a propiciar a transferência de massa gás-líquido em bioprocessos aeróbios de maneira eficiente e, por consequência, a preservação dos seres vivos presentes no meio reacional. Neste sentido, o uso dos biorreatores pneumáticos é uma ótima alternativa, visto que os mesmos apresentam como principais vantagens altas taxas de transferência de massa e campos de velocidade uniformes.

Em biorreatores pneumáticos, a hidrodinâmica está relacionada diretamente com a aeração do sistema, a qual promove a agitação do meio ocasionando a interação entre as fases líquida e gasosa. Estas interações são responsáveis por alterar a dinâmica do escoamento no interior desses equipamentos e influenciar em parâmetros importantes utilizados na previsão do comportamento fluidodinâmico no projeto e dimensionamento dos biorreatores. Vale destaque para os fenômenos de quebra e coalescência, os quais são os responsáveis pela alteração no tamanho das bolhas dispersas na fase líquida.

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) tem sido uma aliada na compreensão de fenômenos presentes em diversos tipos de escoamentos multifásicos. O seu uso para simulações numéricas de condições e geometrias generalizadas tem mostrado um grande potencial em reduzir custos associados à pesquisa e a projetos, visto que a construção de protótipos e a realização de experimentos, por exemplo, podem ser reduzidos por meio da aplicação dessa ferramenta. Além do mais, os avanços em modelagem matemática permitiram que abordagens, como as equações de balanço populacional, fossem capazes de quantificar interações que ocorrem dinamicamente no sistema e, com isso, permitir conhecer melhor os fenômenos envolvidos no escoamento e os seus efeitos.

A pesquisa em biorreatores vem avançando tanto na parte experimental quanto na simulação por CFD, onde são comuns trabalhos que utilizam a abordagem Euleriana de dois fluidos clássica, por meio da qual não é possível modelar e prever a distribuição de tamanho de bolhas por simulação. Nesse contexto, trabalhos da literatura vêm incluindo a equação de balanço populacional à modelagem Euleriana para descrever tais efeitos. Considerando esses aspectos, nesse trabalho o Método de Quadratura de Momentos (QMOM) foi utilizado na modelagem para implementar a equação de balanço populacional e, conseqüentemente, simular a distribuição do diâmetro de bolha ao longo do domínio computacional utilizando CFD. A adoção de tal método se deu em razão do seu menor custo computacional quando comparado a outros métodos da literatura.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

A presente dissertação de mestrado tem como objetivo geral avaliar o uso de equações de balanço populacional (EBP) em simulação CFD para descrever a distribuição e os efeitos do tamanho de bolhas no escoamento gás-liquido em biorreator Coluna de Bolhas.

2.2 Objetivos Específicos

Para alcançar o objetivo geral proposto, os seguintes objetivos específicos são definidos:

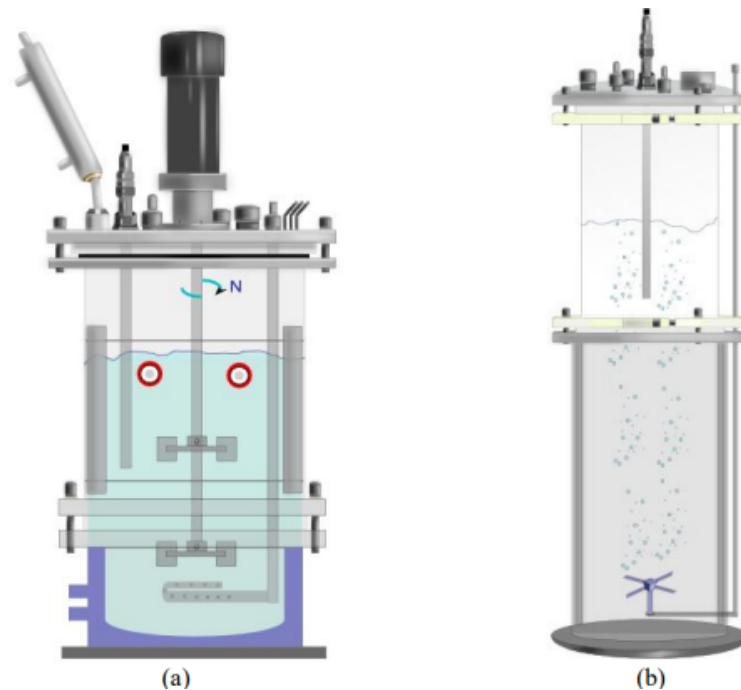
- Simular numericamente a geometria do biorreator coluna de bolhas avaliada por Mendes (2016) para diferentes vazões específicas de alimentação de ar utilizando a abordagem euleriana de dois fluidos clássica;
- Avaliar a influência da inclusão do modelo de balanço populacional na modelagem matemática e compará-los aos dados experimentais obtidos por Mendes (2016);
- Determinar o melhor conjunto de condições de contorno e de restrição para o simulador que seja capaz de descrever a distribuição do diâmetro médio de bolhas e sua evolução a partir do Método de Quadratura de Momentos (QMOM).
- Comparar a resposta hidrodinâmica e de transferência de massa para a Coluna de Bolha estudada com os resultados simulados por Rodriguez (2015), o qual utilizou a abordagem clássica de diâmetro de bolha fixo e constante.
- Comparar

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Biorreatores

É comum que os biorreatores sejam classificados quanto aos mecanismos de agitação e aeração. O biorreator tipo tanque agitado e aerado, ilustrado na Figura 3.1a, possui como característica a presença de um agitador mecânico com a função de promover a mistura do meio e de um sistema de aeração que é utilizado para a injeção de gás. Diferentemente, o biorreator pneumático, ilustrado na Figura 3.1b, é caracterizado por não apresentar uma parte móvel (agitador) em seu interior. Devido a isso, a agitação e a aeração do meio são desempenhadas pelo sistema de injeção de gás.

Figura 3.1. Biorreatores: (a) tipo tanque agitado e aerado (convencional) e (b) pneumático tipo coluna de bolhas (não-convencional).



Fonte: Mendes (2016)

Mendes (2016) relata a aplicação do biorreator pneumático como vantajosa, devido ao baixo custo energético necessário por esse equipamento, o qual se dá em razão dos mecanismos de agitação e aeração acontecerem de forma conjunta. Além disso, outra vantagem mencionada é o seu uso em cenários que envolvam microrganismos sensíveis ao estresse estrutural provocado pela agitação. A ausência de impelidores nesse tipo de dispositivo minimiza os danos morfológicos que esses seres vivos possam vir a sofrer, uma vez que os campos de cisalhamento gerados em seu interior comumente são mais uniformes do que aqueles obtidos com os biorreatores com agitação mecânica. No entanto, segundo Esperança *et al.* (2020), esses campos passam a não ser mais uniformes na região do aspersor com o aumento da vazão de alimentação de ar, visto que o alto gradiente de velocidade presente nessa região gera elevadas tensões cisalhantes, similares às encontradas em biorreator tipo tanque agitado.

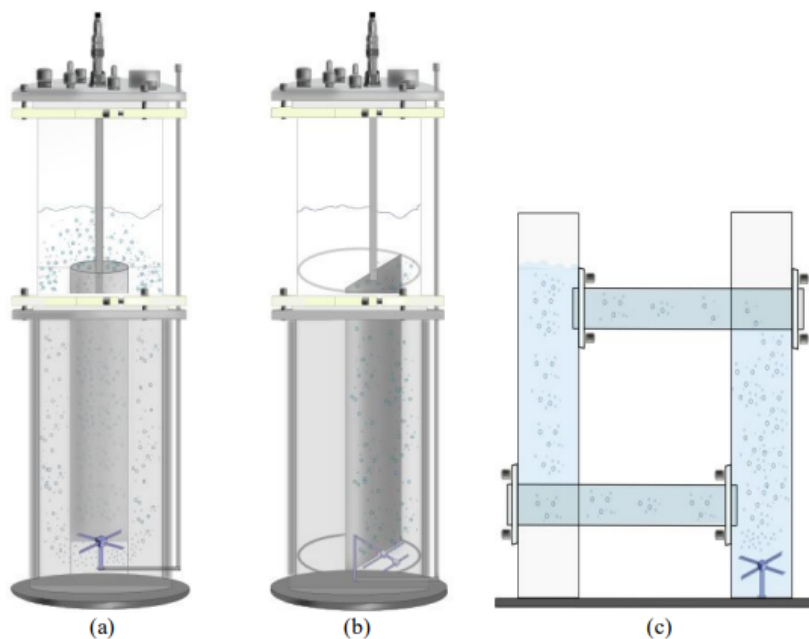
3.2 Biorreatores Pneumáticos

O funcionamento dos biorreatores pneumáticos baseia-se na diferença de densidades existente entre as regiões contidas em seu interior. O gás é injetado no sistema em forma de bolhas por meio de um aspersor localizado na base do equipamento. Por apresentar menor densidade que a fase líquida ali presente, esse gás tem como tendência de se movimentar em direção ao topo do equipamento devido ao empuxo. Esse deslocamento resulta no arrasto do líquido presente nas proximidades, fazendo com ele também se movimente para o topo.

Essa interação é a principal responsável por promover a mistura do meio. Ao encontrar a interface gás-líquido na região do topo, a mistura sofre o desprendimento de grande parte da fase gasosa, o que provoca um aumento em sua densidade e, conseqüentemente, o seu retorno em direção a base do equipamento. Nos casos em que esse escoamento é feito em um caminho fechado, esse retorno define um ciclo de circulação.

Os dois principais tipos de biorreatores pneumáticos existentes são denominados como coluna de bolhas e *airlift*, sendo que a principal diferença entre eles é dada pela existência de anteparos em seu interior. O biorreator coluna de bolhas apresenta geometria simples, sendo composto apenas por uma coluna preenchida de líquido e um aspersor em sua base, como pode ser visto na Figura 3.1b. Em razão disso, a circulação do líquido nesse dispositivo apresenta movimento desordenado quando comparado com o biorreator *airlift* que, em contrapartida, conta a presença de anteparo interno que define diferentes regiões de escoamento, delimitando os caminhos percorridos pelas fases. O mesmo pode ser classificado quanto ao tipo de circulação, sendo de circulação interna (ACI) quando as regiões de subida (*riser*) e descida (*downcomer*) se encontram em um mesmo aparato e de circulação externa (ACE) quando essas regiões se encontram em aparatos distintos. A Figura 3.2 ilustra diferentes modelos de biorreatores *airlift*.

Figura 3.2. Diferentes modelos de biorreator *airlift*: (a) tipo cilindro concêntrico (ACI), (b) tipo *split-cylinder* (ACI) e (c) tipo *loop* (ACE).



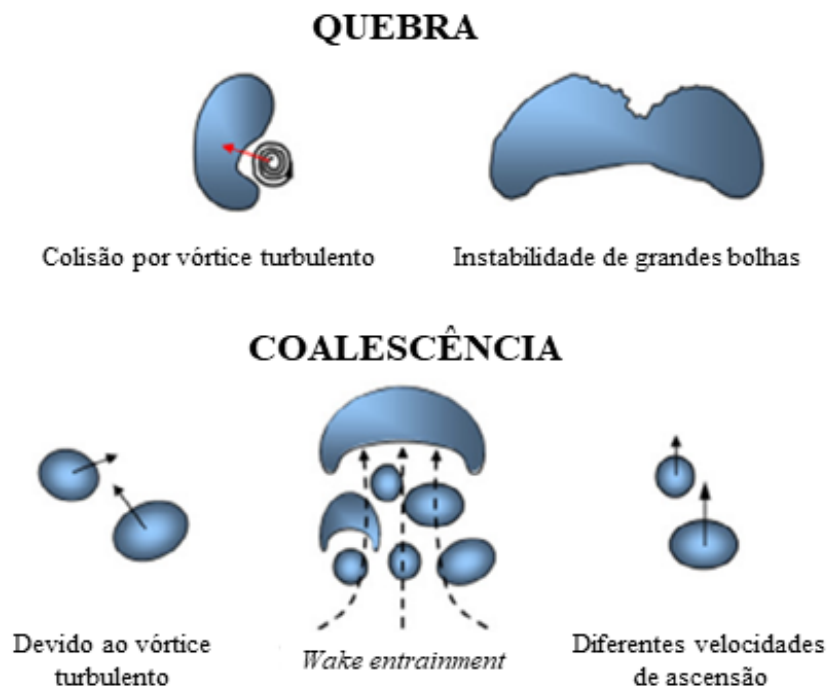
Fonte: Mendes (2016)

Diversas são as interações existentes entre as fases gasosa e líquida resultantes dos escoamentos no sistema. Ademais, existem também fenômenos que estão intimamente ligados à interação entre as bolhas de gás, promovendo a coalescência e a quebra. A presença ou não desses fenômenos está associada ao tipo de regime de escoamento encontrado nesses

biorreatores. Dependendo das condições de operação (vazão específica de alimentação de gás) e das propriedades físicas do fluido, essas interações podem se tornar significantes para o funcionamento do sistema, ao passo que negligenciá-las pode ocasionar erros na previsão do comportamento físico e na obtenção de parâmetros de desempenho.

O fenômeno de coalescência é caracterizado pelo encontro entre duas bolhas, resultando na formação de uma única bolha de tamanho maior. A quebra é o fenômeno oposto, em que o rompimento de uma bolha de maior proporção resulta na formação de outras duas bolhas de tamanhos menores. Dessa forma, pode-se inferir que a existência desses fenômenos de interação entre a própria fase gasosa define uma distribuição de tamanho de bolhas nos biorreatores pneumáticos. A Figura 3.3 esquematiza os principais mecanismos de coalescência e quebra detectados na prática.

Figura 3.3. Principais mecanismos dos fenômenos de coalescência e quebra para bolhas.



Fonte: Yang *et al.* (2018)

Segundo Liao e Lucas (2009), o fenômeno de quebra de uma bolha é determinado pelas suas próprias características e pelas condições hidrodinâmicas do líquido que encontra-se ao seu redor. Os mecanismos desse fenômeno podem ser classificados em quatro categorias, sendo elas a quebra devido à flutuação turbulenta e colisão, à tensão de cisalhamento viscosa, a processos "erosivos" e à instabilidade interfacial. Para o primeiro, a presença de flutuação turbulenta causa uma deformação na interface da bolha, o que leva a um estrangulamento dessa superfície e a uma conseqüente separação em duas ou mais bolhas menores. O mesmo ocorre quando há a colisão com vórtices turbulentos. Ademais, para essa categoria, os autores definem também a existência de casos que levam a quebra quando:

- A energia cinética turbulenta da bolha é maior que um valor crítico;
- A velocidade de flutuação ao redor da superfície da bolha é maior que um valor crítico;
- A energia cinética turbulenta da colisão com um vórtice é maior que um valor crítico;
- A força inercial da colisão com um vórtice é maior que a força interfacial da menor bolha gerada.

De acordo com Liao e Lucas (2010) as principais modelagens para o fenômeno de coalescência são o modelo de drenagem de filme, o modelo de energia e o modelo de velocidade crítica. Para o primeiro, considera-se que a coalescência ocorre quando o filme líquido entre duas bolhas que estão se colidindo é drenado até uma espessura crítica. Já para o segundo, o fenômeno ocorre durante uma colisão energética, em que a velocidade de aproximação de duas bolhas ultrapassa um valor crítico. Para o último, assume-se que a coalescência é favorecida quando se há baixas velocidades de aproximação entre duas bolhas. Em suma, a diferença de velocidades entre duas bolhas pode levar à colisão e, conseqüentemente, o contato entre elas pode acarretar em uma coalescência. Abaixo estão listados os mecanismos envolvidos nesse fenômeno:

- Movimento das bolhas devido às flutuações turbulentas presentes na fase contínua;
- Diferentes velocidades de ascensão das bolhas causadas pelos gradientes de velocidades presentes no escoamento;
- Captura por vórtices turbulentos que induzem o encontro entre as bolhas;
- Colisão entre bolhas resultante da interação com ondas (*wake-entrainment*).

3.3 Parâmetros de Desempenho de Biorreatores

Segundo Esperança (2018), o desempenho de um biorreator pode ser avaliado considerando-o no ponto de vista da Engenharia Bioquímica e no ponto de vista de uma operação unitária. Na primeira abordagem avalia-se efeitos como as condições do microrganismo, do meio de cultivo e do tipo de operação e a influência deles na obtenção de um produto de interesse. Já na segunda, o interesse está em avaliar os efeitos, por exemplo, do tipo de fluido e da geometria do biorreator nos parâmetros associados aos processos de transferência de quantidade de movimento, calor e massa. O estudo desses efeitos pode ser feito experimental e computacionalmente, sendo empregado para o último técnicas de fluidodinâmica computacional.

Em ambas as abordagens, condições operacionais, como a vazão específica de ar e agitação, são importantes para se avaliar os parâmetros de desempenho e a influência que variações nelas podem causar. Além disso, o uso dos parâmetros auxilia em etapas de projeto, operação e variação de escala de um biorreator (Mendes (2016)). Dentre esses parâmetros,

tem-se a retenção gasosa (ε_G) e o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio ($k_L a$) como os mais comumente utilizados (Mendes (2016)).

3.3.1 Retenção Gasosa

A retenção gasosa (ε_G) é utilizada para descrever a hidrodinâmica de biorreatores, visto que é de fácil determinação e está relacionada com variáveis de comum interesse, como a área interfacial específica de transferência de massa.

É definida como a razão entre o volume de gás (V_G) e o volume da dispersão gás-líquido, sendo o último dado pela somatória do volume de gás e do volume de líquido (V_L) presentes no biorreator, como mostrado na Equação 3.1.

$$\varepsilon_G = \frac{V_G}{V_G + V_L} \quad (3.1)$$

3.3.2 Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio

Esperança (2018) relata que para que um processo aeróbio tenha um bom desempenho é essencial assegurar a manutenção da atividade respiratória do conjunto de células que está sendo utilizado. Isso ocorrerá com o correto dimensionamento do sistema de transferência de oxigênio, o que implica então na necessidade de se avaliar parâmetros que influenciam diretamente nessa transferência, como o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio ($k_L a$).

O coeficiente $k_L a$ é descrito como a relação entre o coeficiente convectivo de transferência de massa (k_L) e a área interfacial específica de transferência de massa (a). O primeiro termo refere-se a película líquida presente ao redor da bolha, a qual exerce uma resistência à transferência de massa, e o segundo à área na qual ocorre o processo de transferência do gás para o líquido.

A relação descrita pela Equação 3.2 define a área interfacial como função, além da retenção gasosa, do diâmetro de bolha (D_b). Tal relação evidencia a importância de se conhecer a distribuição de tamanho de bolhas, uma vez que para diferentes valores de diâmetros são obtidos distintos valores de a , e por conseguinte de $k_L a$, o que influencia de forma direta no desempenho dos biorreatores.

$$a = \frac{6 \varepsilon_G}{D_b} \quad (3.2)$$

Vale ressaltar que essa importância se deve a presença dos fenômenos de quebra e coalescência que, segundo Mendes (2016), podem afetar os valores de $k_L a$ por meio de mecanismos que envolvem o aumento ou diminuição da área interfacial (a) em razão da formação de bolhas pequenas e grandes.

3.4 Fluidodinâmica Computacional (CFD)

Nos últimos anos, a capacidade dos computadores em processar dados e realizar cálculos numéricos tem crescido muito em razão dos avanços tecnológicos. Ao passo que a tecnologia progride, ferramentas computacionais têm sido criadas e evoluídas de modo a aproveitar o potencial que a aplicação desses novos processadores tem a oferecer. Nesse contexto, tem-se verificado o desenvolvimento e a utilização de técnicas de Fluidodinâmica Computacional para a simulação de diversas aplicações tecnológicas, dentre elas a modelagem de escoamentos multifásicos para uma série de equipamentos e processo. Em linhas gerais, CFD é utilizado para a resolução numérica de modelos e equações de conservação, como as de massa e quantidade de movimento, que representam o comportamento físico do problema que está sendo estudado. A partir dos resultados obtidos, é possível realizar estimativas de parâmetros relacionados, por exemplo, a eficiência de operações unitárias com base em informações sobre os fenômenos de transporte simulados, bem como avaliar e estudar os fenômenos presentes nesse tipo de problema. Segundo Esperança (2018), as principais vantagens da utilização de CFD são:

- Simulação desses modelos e equações para diferentes geometrias em condições generalizadas;
- Estimativa de parâmetros de interesse com um baixo custo e em curtos períodos quando comparada à abordagem experimental;
- Facilidade na investigação do efeito de parâmetros físicos no desempenho global de um processo ou no comportamento de uma variável específica;
- Aplicação em otimização de processos e melhoria e aumento de escala (*scale-up*) de equipamentos;
- Obtenção de uma grande quantidade de informação (variáveis-resposta) realizando-se um número pequeno de simulações.

Para biorreatores pneumáticos, a aplicação de técnica CFD tem se mostrado bastante útil no âmbito de prever parâmetros de desempenho relacionados à hidrodinâmica (ε_G) e à transferência de massa ($k_L a$) nesses dispositivos. Destaque pode ser dado à retenção gasosa e ao coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio, os quais comumente são utilizados nas avaliações de desempenho e na tomada de conclusões em biorreatores pneumáticos.

3.4.1 Simulação por CFD de Biorreatores Coluna de Bolhas

Neste tópico estão listados alguns estudos relacionados à simulação por CFD de biorreator coluna de bolhas que abordam a modelagem da distribuição de tamanho e os fenômenos

de coalescência e quebra de bolhas. Em especial, os últimos trabalhos citados aplicam o método de quadratura de momentos para implementação das equações de balanço populacional empregado na presente dissertação de mestrado.

Besagni *et al.* (2017) propuseram distintas abordagens para descrever a distribuição de tamanho de bolhas num biorreator de escala industrial operando em regime pseudo-homogêneo. A primeira abordagem, denominada de *fixed poly-dispersed*, considera que em regiões não próximas do aspersor os fenômenos de coalescência e quebra podem ser desprezados. Nesse caso, a modelagem das bolhas foi realizada considerando a existência de classes contendo dois ou quatro diâmetros fixos. Na segunda abordagem, denominada *poly-dispersed*, considera que esses fenômenos não podem ser negligenciados e que modelos como o *i-MUSIG* (*Inhomogeneous multiple size group*) podem ser utilizados para atribuir as diferentes classes de tamanhos de bolha em grupos com distintos campos de velocidade. Os autores concluíram que para a primeira abordagem os valores de retenção gasosa global foram superestimados e que os valores obtidos para esse parâmetro não foram sensíveis ao aumento no número de classes. Para a segunda foi possível obter valores de retenção gasosa com boa concordância em relação aos dados experimentais, tendo então permitido validar essa modelagem dos fenômenos de coalescência e quebra na simulação da distribuição de tamanho de bolhas.

Guo *et al.* (2017) conduziram simulações por CFD com a incorporação de equações de balanço populacional para avaliar a importância da escolha de um modelo de quebra para estimar valores de retenção gasosa, distribuição de tamanho de bolhas e coeficiente de transferência de massa. Os autores testaram os modelos Luo e Svendsen (1996), Lehr *et al.* (2002) e Wang *et al.* (2005) para as fases líquidas água e tolueno. A partir da comparação entre eles, foi possível constatar que os resultados mais próximos dos dados experimentais foram obtidos a partir do modelo de Wang *et al.* (2005). Os outros dois modelos subestimaram os valores de retenção gasosa global e superestimaram os valores de diâmetros de Sauter. Observou-se pelos resultados do estudo a relevância da escolha do modelo de quebra para se determinar por simulação esses parâmetros hidrodinâmicos.

Syed *et al.* (2017) realizaram uma simulação 2D axissimétrica com o objetivo de avaliar o impacto do parâmetro do modelo de coalescência de Hean (1993) e dos modelos de quebra na obtenção da retenção gasosa global e da velocidade axial do líquido. Para isso, os modelos de quebra abordados foram os Hean (1993) e de Lehr *et al.* (2002). As simulações foram realizadas a partir do acoplamento das equações de balanço populacional com esses modelos (Luo-Luo e Luo-Lehr) considerando diferentes valores para o parâmetro de coalescência (c_0). Foi observado que o decréscimo no valor desse parâmetro para o modelo Luo-Luo permitiu estimar com maior precisão os valores de retenção gasosa global. No entanto, essa redução resultou em valores de velocidade axial do líquido distantes dos dados experimentais. Além disso, pode ser notado que a variação desse parâmetro no modelo Luo-Lehr não apresentou contribuição significativa na estimativa da retenção, porém foi capaz de subestimar os valores

de velocidade axial de líquido. Os autores recomendam a utilização do modelo Luo-Lehr sem modificação no parâmetro de coalescência e sugerem avaliar a variação desse parâmetro se adotado o modelo Luo-Luo.

Sarhan *et al.* (2018)) avaliaram por simulação por CFD as influências de propriedades físico-químicas das fases líquida e gasosa em uma coluna de bolhas de seção circular. Foi considerada uma abordagem Euler-Euler considerando força de arrasto e incorporação de balanço populacional para descrever uma distribuição de tamanhos de bolhas. Esse modelo fluidodinâmico foi validado com dados experimentais de retenção gasosa global e, a partir disso, utilizado para estimar o comportamento desse parâmetro em função das propriedades do meio. Os autores concluíram que ocorre um aumento da retenção gasosa para um incremento da densidade do gás, enquanto que o mesmo ocorre para a fase líquida de menor densidade.

Huang *et al.* (2018) simularam diferentes modelos de distribuição de tamanho de bolhas em biorreatores *airlift* e coluna de bolhas em regime heterogêneo. A partir da comparação dos dados experimentais com os resultados simulados de fração volumétrica local média e velocidade de ascensão média do líquido, os autores concluíram que o modelo CSBS (*Constant single bubble size model*) foi o que apresentou melhor concordância para as diversas condições operacionais empregadas. Ademais, observaram que o modelo VSBS (*Variable single bubble size model*) resultou em estimativas similares ao CSBS, tendo sido apontado como vantajoso para a simulação de biorreatores de larga escala em que não se tem disponíveis informações sobre a distribuição de bolhas.

Yan *et al.* (2020) realizaram o estudo em coluna de bolhas dos efeitos da variação de propriedades físicas, como a viscosidade do líquido e a tensão superficial, na distribuição de tamanho de bolhas. Os autores observaram que o aumento da viscosidade resulta na formação de bolhas com tamanhos maiores devido à coalescência. O mesmo comportamento ocorreu para o aumento da tensão superficial. Dessa forma, foi verificado que variações dessas propriedades provocam alterações na hidrodinâmica do biorreator, visto que um incremento em seus valores leva a diminuição da retenção gasosa global e dificulta os mecanismos de transferência de massa.

Khalil *et al.* (2021) incorporaram equações de balanço populacional em suas simulações a fim de avaliar a influência da distribuição do tamanho de bolhas na estimativa da retenção gasosa global e do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio. Simulações considerando tamanho de bolha constante foram conduzidas e os resultados comparados. Modelos de coalescência e quebra também foram avaliados. Os autores concluíram que a inclusão da distribuição permitiu estimar corretamente os valores do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio, o que não ocorreu ao se considerar o tamanho constante. Para a retenção gasosa global, ambas abordagens de tamanho de bolha foram capazes de estimá-la com boa concordância. Quanto aos fenômenos de coalescência e quebra, observou-se que somente a escolha do modelo do primeiro possui influência nos parâmetros estimados.

Marchisio *et al.* (2003a) avaliaram a implementação das equações de balanço populacional por meio do método QMOM (*Quadrature Method of Moments*) e compararam os erros na estimativa dos fenômenos de crescimento e agregação de partículas. Foi observado que a acurácia desse método frente a outros modelos, como o DPB (*Discretized Population Balance*) e Monte Carlo, foi muito boa e evidenciou que a redução no número de equações de transporte é extremamente atrativa no que tange a diminuição do tempo computacional dispendido.

Trabalhos como Marchisio *et al.* (2003a) e Marchisio *et al.* (2003b) validaram por simulações por CFD a aplicação do método QMOM para processos que apresentam fenômenos de coalescência e quebra de bolhas. Dentre os resultados obtidos, pode-se destacar a boa relação entre acurácia e tempo computacional obtidos para um número de nós igual a 3, ou seja, quando são utilizados 6 momentos para descrever a evolução da distribuição do tamanho de partícula no processo.

Petitti *et al.* (2010) avaliaram o emprego dos modelos de balanço populacional em um reator tipo tanque agitado operando com um sistema gás-líquido. Os autores avaliaram para o método QMOM a influência da implementação de algoritmos de correção de momentos, como os de McGraw (1997) e Wright (2007), na garantia da obtenção de momentos realizáveis. Foi constatado que esses algoritmos desempenharam papel chave na obtenção de momentos válidos, contribuindo assim para a estabilidade numérica das simulações e para a consistência física dos resultados gerados.

Buffo *et al.* (2016) estudaram a utilização de uma abordagem matemática zero-dimensional para o cálculo das equações de transporte do método QMOM. O objetivo do trabalho foi avaliar em quais condições o uso de modelos 0D – balanço global de momentos, mais simples e econômicos computacionalmente, são capazes de prever respostas do sistema, como o diâmetro médio de bolha, muito próximas das obtidas por meio de uma modelagem 3D complexa. Os autores concluíram que, para escalas de tempo de mistura menores que o tempo mínimo de coalescência e quebra, modelos 0D podem ser empregados sem comprometimento dos resultados.

Gemello *et al.* (2019) implementaram as equações de balanço populacional para simular diferentes geometrias de um biorreator coluna de bolhas operando sob regime heterogêneo, no qual a presença dos fenômenos de coalescência e quebra influenciam diretamente na hidrodinâmica do sistema. Foram testados para o método QMOM diversos conjuntos de modelos de coalescência e quebra a fim de avaliar quais deles seriam capazes de prever com precisão os valores e o comportamento do diâmetro médio de bolhas nesse tipo de equipamento. Ao comparar os resultados obtidos pela simulação com dados experimentais, concluíram que o modelo de frequência de colisão de Wang *et al.* (2005), o de eficiência de coalescência de Lehr *et al.* (2002) e os modelos de quebra de Laakkonen *et al.* (2006) e Laakkonen *et al.* (2007) apresentaram maior acurácia.

Gilli (2020) empregou modelos 0D do trabalho de Buffo *et al.* (2016) em biorreatores

coluna de bolhas e tanque agitado para analisar diferentes conjuntos de modelos de coalescência e quebra, de modo a selecionar aqueles que melhor representam o comportamento do diâmetro médio de bolha do sistema estudado. Os autores utilizaram-se de uma abordagem teórica para o cálculo da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ), relacionando-a diretamente com a velocidade superficial de gás ($v_{s,G}$) nos equipamentos. Tal consideração foi feita com o objetivo de remover a dependência em relação a simulações 3D para a obtenção dos valores dessa variável. Para o biorreator coluna de bolhas foi encontrado que, juntamente com mesmos modelos de eficiência de coalescência e quebra obtidos por Gemello (2018), o modelo de frequência de colisão de Prince e Blanch (1990) foram os que melhor se ajustaram aos dados experimentais.

4 MODELAGEM MATEMÁTICA

4.1 Abordagem Euler-Euler

Neste tipo de abordagem as diferentes fases do sistema são tratadas como contínuas e interpenetrantes. As equações de conservação de massa e de quantidade de movimento são adaptadas de modo a considerar a presença do termo de fração volumétrica (α_i). Sua inclusão é realizada para quantificar o volume ocupado por uma determinada fase i no sistema e para satisfazer a consideração da abordagem de que um volume pode ser ocupado por diferentes fases.

O volume total de uma fase no sistema e a relação entre as frações volumétricas das n fases são dados pelas Equações 4.1 e 4.2, respectivamente.

$$V_i = \int_V \alpha_i dV \quad (4.1)$$

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1 \quad (4.2)$$

4.2 Conservação de Massa

A equação de conservação de massa (equação da Continuidade) adaptada com a presença do termo de fração volumétrica é dada pela Equação 4.3.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{v}_i) = \sum_{k=1}^n (\dot{m}_{ki} - \dot{m}_{ik}) + G_i \quad (4.3)$$

em que ρ_i é a densidade, \vec{v}_i o vetor velocidade intersticial e G_i o termo de geração ou consumo de massa todos referentes à fase i . Os termos \dot{m}_{ki} e \dot{m}_{ik} representam a transferência de massa existentes entre as fases k e i .

Tomando como hipóteses simplificadoras que não há geração ou consumo de massa das fases e que não há transferência de massa entre elas, mesmo que em uma operação real do biorreator ocorra a transferência de gás da bolha para o líquido, a Equação 4.3 pode ser reescrita para um sistema bifásico gás-líquido por meio das Equações 4.4 e 4.5. Os subscritos L e G representam as fases líquida e gasosa, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_L \rho_L) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_L \rho_L \vec{v}_L) = 0 \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_G \rho_G) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_G \rho_G \vec{v}_G) = 0 \quad (4.5)$$

4.3 Conservação de Quantidade de Movimento

Partindo das mesmas hipóteses adotadas para a equação da Continuidade, a equação de conservação de quantidade de movimento para uma determinada fase i é dada por Equação 4.6.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \vec{v}_i) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_i (\rho_i \vec{v}_i \otimes \vec{v}_i)) = -\alpha_i \vec{\nabla} P_i + \vec{\nabla} \cdot \left(\alpha_i \mu_{ef,i} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i \right)^T \right) \right) + \vec{F}_i + \vec{M}_i \quad (4.6)$$

em que $\vec{\nabla} P_i$ é o gradiente de pressão, $\mu_{ef,i}$ a viscosidade efetiva, \vec{F}_i e \vec{M}_i os somatórios das forças interfaciais e forças externas, respectivamente, todos referentes à fase i . O empuxo age como a principal força externa, sendo o responsável por promover a aceleração das bolhas durante o escoamento.

4.4 Força Interfacial

Dentre as forças interfaciais englobadas pelo termo \vec{F}_i da equação anterior, tais como arrasto, sustentação, massa virtual e dispersão turbulenta, tem-se verificado a predominância da primeira sobre as demais forças (Rodriguez (2015)). Para o sistema bifásico mencionado anteriormente, o arrasto é a força que atua no líquido devido ao movimento de deslocamento da fase gasosa, a qual atua como uma resistência ao escoamento. A sua forma de cálculo, por unidade de volume, está descrita na Equação 4.7.

$$\vec{F}_{L,G}^{arrasto} = \frac{3}{4} \alpha_G \rho_L \frac{C_D}{D_b} |\vec{v}_G - \vec{v}_L| (\vec{v}_G - \vec{v}_L) \quad (4.7)$$

O valor do coeficiente de arrasto (C_D) depende do escoamento que ocorre ao redor das bolhas. Existem diversas correlações para sua obtenção, sendo que a correlação proposta por Grace (1976) é uma das mais utilizadas (Rodriguez (2015); Esperança (2018); Gilli (2020)). Sua modelagem considera a existência de três diferentes formatos de bolhas (esfera, elipse e touca), em que o valor de C_D é obtido de acordo com esses formatos. As expressões para o cálculo do coeficiente de arrasto estão exibidas nas Equações 4.8 a 4.12, em que D_b , Re_b e v_∞ representam o diâmetro, o número de Reynolds e a velocidade terminal da bolha, respectivamente.

$$C_D = \max \left(C_D^{esfera}, \min \left(C_D^{elipse}, C_D^{touca} \right) \right) \quad (4.8)$$

$$C_D^{esfera} = \frac{3 D_b g (\rho_L - \rho_G)}{4 v_\infty^2 \rho_L} \quad (4.9)$$

$$C_D^{elipse} = \frac{24}{Re_b} (1 + 0.15 Re_b^{0.687}) \quad (4.10)$$

$$C_D^{touca} = \frac{8}{3} \quad (4.11)$$

$$Re_b = \frac{\rho_L |\vec{v}_G - \vec{v}_L| D_b}{\mu_L} \quad (4.12)$$

Assim como para o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio ($k_L a$), o diâmetro de bolha (D_b) exerce influência direta no coeficiente de arrasto (C_D), de modo que a consideração de uma distribuição do tamanho de bolhas permite estimar com maior precisão em relação a um diâmetro constante as diferentes magnitudes da força de arrasto no escoamento e os formatos que as bolhas assumem no sistema.

4.5 Modelo de Turbulência

O modelo $\kappa - \epsilon$ padrão é adotado em diversos problemas que envolvem a simulação de um escoamento multifásico, visto que seu uso permite a modelagem dos fenômenos de turbulência com baixo custo computacional quando comparado com a resolução das equações de conservação de forma direta (DNS - *Direct Numerical Simulation*). A partir desse modelo são obtidos os valores da energia cinética turbulenta (κ) e da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ) para a fase i por meio de equações de transporte, dadas pelas Equações

4.13 e 4.14, com σ_κ , σ_ϵ , C_{ϵ_1} e C_{ϵ_2} sendo constantes do modelo $\kappa - \epsilon$ padrão.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \kappa_i) + \vec{\nabla} \cdot \left(\alpha_i \left(\rho_i \vec{v}_i \kappa_i - \left(\mu_i + \frac{\mu_{turb,i}}{\sigma_\kappa} \right) \vec{\nabla} \kappa_i \right) \right) = \alpha_i (P_i - \rho_i \epsilon_i) \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \epsilon_i) + \vec{\nabla} \cdot \left(\alpha_i \rho_i \vec{v}_i \epsilon_i - \left(\mu_i + \frac{\mu_{turb,i}}{\sigma_\epsilon} \right) \vec{\nabla} \epsilon_i \right) = \alpha_i \frac{\epsilon_i}{\kappa_i} (C_{\epsilon_1} P_i - C_{\epsilon_2} \rho_i \epsilon_i) \quad (4.14)$$

A viscosidade turbulenta ($\mu_{turb,i}$) é obtida a partir da Equação 4.15:

$$\mu_{turb,i} = C_\mu \rho_i \frac{\kappa_i^2}{\epsilon_i} \quad (4.15)$$

4.6 Equações de Balanço Populacional (EBP)

A inclusão das equações de balanço populacional tem como objetivo representar a distribuição de tamanho de bolhas no modelo fluidodinâmico de um sistema com escoamento multifásico envolvendo a fase gasosa como dispersa. A utilização dessas equações permite caracterizar com maior precisão os diferentes diâmetros de bolhas presentes no escoamento e, com isso, descrever com maior acurácia as interações e os fenômenos ocorridos com as fases ali presentes, tais como a coalescência e quebra de bolhas.

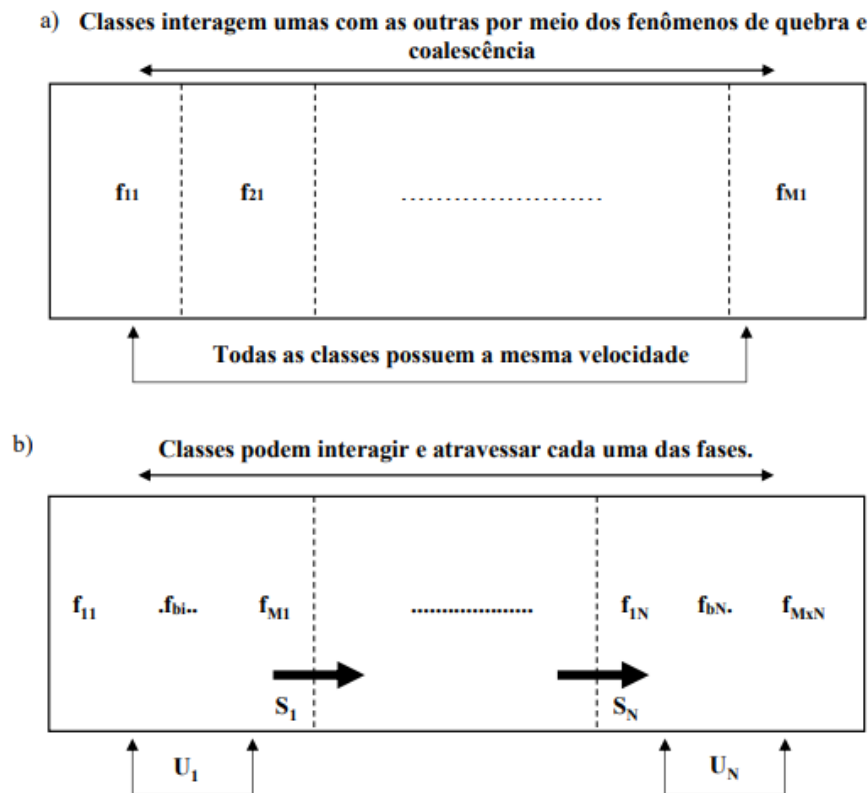
Dentre os métodos que descrevem as equações de balanço populacional tem-se os métodos Discreto e de Momentos. O primeiro, também conhecido como método de Classes (CM), foi proposto por Hounslow *et al.* (1988) e permite representar uma distribuição de tamanho de partícula (PSD - *Particle Size Distribution*) a partir da sua segmentação em um número definido de intervalos de tamanho. Essa função é aplicada diretamente na equação de conservação de quantidade de movimento, em que o valor do diâmetro médio de Sauter obtido para cada intervalo de tamanho definido é utilizado para o acoplamento.

Em suma, o método Discreto considera a existência de uma fase secundária caracterizada por bolhas que possuem a mesma velocidade. Nessa fase secundária podem existir bolhas de diferentes tamanhos, sendo elas agrupadas em finitas classes de acordo com o valor de diâmetro que possuem. Assim, em uma mesma fase secundária podem existir tanto bolhas grandes quanto microbolhas. Para que as bolhas migrem de classe é necessário que existam no escoamento interações de coalescência e quebra que promovam o aumento ou a diminuição do diâmetro. Neste caso, o fenômeno de coalescência resulta na migração de bolhas para classes de diâmetros maiores enquanto que o de quebra leva a classes de diâmetros menores.

Há duas abordagens para o método Discreto que definem a relação entre as classes das bolhas e as suas respectivas fases secundárias. A primeira é o método Discreto Homogêneo que considera a existência de somente uma fase secundária detentora de todas as classes de bolhas definidas. Por conter apenas uma fase secundária, essa abordagem considera que

todas as bolhas apresentam a mesma velocidade mesmo após os fenômenos de interação. Já a segunda é o método Discreto Não-homogêneo que considera a presença de duas ou mais fases secundárias para englobar diferentes classes de mesma velocidade. Além disso, essa abordagem permite que bolhas resultantes dos fenômenos de coalescência e quebra possuam diferentes velocidades e, com isso, possam migrar para classes e fases secundárias distintas. A Figura 4.1 apresenta uma esquematização das abordagens Homogêneo e Não-homogêneo para o método Discreto, sendo que f_{bi} é a fração de massa pertencente à classe b para a fase secundária i , S_i a fase secundária i e U_i a velocidade das bolhas pertencentes à fase secundária i . Os índices M e N representam o número de classes por fase secundária e de fases secundárias presentes no escoamento, respectivamente.

Figura 4.1. . Esquematização dos métodos Discreto Homogêneo (a) e Não-homogêneo (b).



Fonte: Rodrigues (2018)

Já o método de Momentos (SMM - *Standard Method of Moments*), proposto por Randolph e Larson (1971), descreve a distribuição de tamanho de partícula (PSD) por meio de uma distribuição de momentos e transforma as equações de balanço populacional em um conjunto de equações de transporte escritas em função desses momentos. Tem como vantagem frente ao método Discreto a redução do número de equações que modelam o problema, o que leva um custo computacional menor. Ademais, o método de Momentos é útil para situações em que uma completa distribuição de tamanho não é conhecida e pode ser bem representada por valores médios, como por uma distribuição Log-normal. No entanto, o mesmo apresenta

uma limitação de fechamento em suas equações, visto que seu uso direto está associado a problemas com coalescência constante e crescimento que independe do tamanho da partícula, assim como não é possível considerar modelagem do fenômeno de quebra. No sentido de contornar essa limitação, métodos de momentos baseado em quadratura, como o QMOM, foram desenvolvidos e têm sido aplicados nos trabalhos mais recentes que utilizam as equações de balanço populacional em sua modelagem.

Os tópicos abaixo descrevem a modelagem matemática associada às equações de balanço populacional, partindo do conceito de vetor estado da partícula (*Particle State Vector*). Tal vetor é caracterizado por um grupo de coordenadas externas ($\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$), como a posição espacial da partícula, e internas ($\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_m)$), que podem incluir m variáveis como tamanho e volume de partícula, composição e temperatura. A partir dessas coordenadas é possível descrever o número de partículas presente em todo o sistema a partir de uma função densidade numérica $n_{\vec{\xi}}(t, \vec{x}, \vec{\xi})$ (NDF - *Number Density Function*). Em seguida, o método QMOM, adotado neste trabalho, tem sua modelagem matemática exposta para evidenciar de que forma os momentos são utilizados nas equações de balanço populacional.

4.6.1 Modelagem da Equação de Balanço Populacional (EBP)

As equações utilizadas abaixo tem como fonte o trabalho desenvolvido por Marchisio e Fox (2013). Para um volume de controle finito descrito por um espaço físico $\Omega_{\vec{x}}$ de fronteira $\partial\Omega_{\vec{x}}$ e por um espaço de coordenadas internas $\Omega_{\vec{\xi}}$ de fronteira $\partial\Omega_{\vec{\xi}}$, a equação de transporte de uma função de densidade numérica (NDF) é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\Omega_{\vec{x}}} d\vec{x} \int_{\Omega_{\vec{\xi}}} d\vec{\xi} n_{\xi} \right) + \int_{\Omega_{\vec{\xi}}} d\vec{\xi} \int_{\partial\Omega_{\vec{x}}} \left(n_{\xi} \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} \right) \cdot dA_{\vec{x}} + \int_{\Omega_{\vec{x}}} d\vec{x} \int_{\partial\Omega_{\vec{\xi}}} \left(n_{\xi} \frac{\partial \vec{\xi}}{\partial t} \right) \cdot dA_{\vec{\xi}} = \int_{\Omega_{\vec{x}}} d\vec{x} \int_{\Omega_{\vec{\xi}}} d\vec{\xi} h_{\vec{\xi}} \quad (4.16)$$

em que o primeiro termo se refere ao acúmulo no tempo da NDF, o segundo é o fluxo da NDF devido à convecção no espaço físico e o terceiro o mesmo fluxo porém para o espaço da coordenada interna. As partículas se movem no espaço físico devido à velocidade $\frac{\partial \vec{x}}{\partial t}$ e na fase devido a velocidade da coordenada interna $\frac{\partial \vec{\xi}}{\partial t}$. O último termo está associado a função salto descontínua $h_{\vec{\xi}}$ que contabiliza as mudanças na NDF devido às interações entre partículas, como coalescência e quebra.

A Equação 4.16 pode ser reescrita de modo a substituir as integrais na fronteira por integrais no próprio volume de controle. Aplicando o teorema de transporte de Reynolds é obtido:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\Omega_{\vec{x}}} d\vec{x} \int_{\Omega_{\vec{\xi}}} d\vec{\xi} n_{\xi} \right) + \int_{\Omega_{\vec{\xi}}} d\vec{\xi} \int_{\Omega_{\vec{x}}} \vec{\nabla}_{\vec{x}} \cdot \left(n_{\xi} \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} \right) + \int_{\Omega_{\vec{x}}} d\vec{x} \int_{\Omega_{\vec{\xi}}} \vec{\nabla}_{\vec{\xi}} \cdot \left(n_{\xi} \frac{\partial \vec{\xi}}{\partial t} \right) = \int_{\Omega_{\vec{x}}} d\vec{x} \int_{\Omega_{\vec{\xi}}} d\vec{\xi} h_{\vec{\xi}} \quad (4.17)$$

em que $\vec{\nabla}$ é o operador gradiente, de modo que $\vec{\nabla}_{\vec{x}} = (\partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2, \partial/\partial x_3)$ e $\vec{\nabla}_{\vec{\xi}} = (\partial/\partial \xi_1, \dots, \partial/\partial \xi_m)$

Integrando a equação 4.17 para volumes de controle $\Omega_{\vec{x}}$ e $\Omega_{\vec{\xi}}$ arbitrários, a equação de transporte passa a ser descrita por:

$$\frac{\partial n_{\vec{\xi}}}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot \left(n_{\vec{\xi}} \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} \right) + \nabla_{\vec{\xi}} \cdot \left(n_{\vec{\xi}} \frac{\partial \vec{\xi}}{\partial t} \right) = h_{\vec{\xi}} \quad (4.18)$$

representando a evolução da NDF no tempo, espaço físico, espaço de coordenada interna e devido aos fenômenos de interação entre partículas.

A equação do balanço populacional é dita monovariada quando a NDF apresenta somente uma coordenada interna, como o tamanho da partícula, e multivariada para os casos em que estão presentes duas ou mais coordenadas internas, como o volume, massa, área superficial e velocidade da partícula.

Este último caso costuma ser adotado quando as partículas são caracterizadas por uma distribuição própria de velocidade e não somente por um único campo de velocidade. Sendo assim, a equação de balanço populacional (EBP ou PBE - *Population Balance Equation*) se transforma em uma equação de balanço populacional generalizada (GPBE - *Generalized Population Balance Equation*) que parte de uma função densidade numérica $n_{\vec{\xi}}(t, \vec{x}, \vec{v}, \vec{\xi})$ com \vec{v} sendo o vetor velocidade da partícula.

Nesta dissertação foi considerada a EBP monovariada, em que a coordenada interna adotada foi o tamanho da bolha ($\xi = L$). Desse modo, para uma NDF na forma $n_L(t, \vec{x}, L)$ (*Length-based NDF*), a Equação 4.18 pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial n_L}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot \left(n_L \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial L} \cdot \left(n_L \frac{\partial L}{\partial t} \right) = h_L \quad (4.19)$$

Por definição, o momento de uma NDF é dado por:

$$m_{\vec{\xi}, \vec{k}} \equiv \int_{\Omega_{\vec{\xi}}} \xi_1^{k_1} \dots \xi_m^{k_m} n_{\vec{\xi}}(\vec{\xi}) d\vec{\xi} \quad (4.20)$$

com $\vec{k} \equiv (k_1, \dots, k_m)$ sendo o vetor que contém a ordem do momento correspondente a cada componente do vetor $\vec{\xi}$.

Se a NDF for integrada para todos os valores do espaço da coordenada interna $\Omega_{\vec{\xi}}$, obtém-se o número total de partícula $N(t, \vec{x})$ por unidade de volume no tempo t e no ponto físico \vec{x} . Esse número total de partículas corresponde ao momento de ordem zero da função densidade numérica.

$$N(t, \vec{x}) \equiv m_{\vec{\xi}, 0} \equiv \int_{\Omega_{\vec{\xi}}} n_{\vec{\xi}}(\vec{\xi}) d\vec{\xi} \quad (4.21)$$

Para o caso monovariado, em que a coordenada interna é o tamanho da bolhas, o momento passa a ser definido por:

$$m_{L,k} \equiv \int_0^{\infty} L^k n_L(L) dL \quad (4.22)$$

sendo então o número total de bolhas dado por:

$$N(t, \vec{x}) \equiv m_{L,0} = \int_{\Omega_{\vec{x}}} n_L(L) dL \quad (4.23)$$

Quando se utiliza uma NDF que descreve uma população de partículas real, como a distribuição de tamanho de bolhas, os momentos de menor ordem possuem relação com propriedades físicas desse conjunto partículas. Algumas relações estão descritas abaixo:

$$\left\{ \begin{array}{l} N_{total} = m_{L,0} \\ L_{total} = m_{L,1} \\ A_{total} = K_a m_{L,2} \\ V_{total} = K_V m_{L,3} \\ D_b^{Sauter} = L_{32} = \frac{m_{L,3}}{m_{L,2}} \end{array} \right. \quad (4.24)$$

em que N_{total} representa o número, L_{total} o comprimento, A_{total} a área e V_{total} o volume total de partículas por unidade de volume e D_b^{Sauter} o diâmetro médio de Sauter.

4.6.2 Método de Quadratura de Momentos (QMOM)

O Método de Quadratura de Momentos é empregado na equações de transporte de momento para estimar os termos fontes que estão associados as interações, principalmente, entre as partículas de uma população. Tal estimativa é feita empregando uma aproximação por quadratura Gaussiana, em que se determina uma sequência de polinômios ortogonais a NDF a partir dos seus momentos.

Aplicando-se a definição de momento descrita na Equação 4.22 na equação de transporte de momento, Equação 4.19, e considerando que os fenômenos de coalescência e quebra são predominantes em relação ao crescimento das bolhas, obtém-se:

$$\frac{\partial (m_{L,k})}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot \left(m_{L,k} \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} \right) = h_{L,k} = (\bar{B}_{iB,k} - \bar{D}_{iB,k} + \bar{B}_{iC,k} - \bar{D}_{iC,k}) \quad (4.25)$$

sendo os termos fontes dados por:

$$\bar{B}_{iC,k} = \frac{L^2}{2} \int_0^L \frac{h \left((L^3 + \lambda^3)^{\frac{1}{3}}, \lambda \right)}{(L^3 - \lambda^3)^{\frac{2}{3}}} n_L \left((L^3 + \lambda^3)^{\frac{1}{3}} \right) n_L(\lambda) d\lambda \quad (4.26)$$

$$\bar{D}_{iC,k} = \int_0^\infty h(L, \lambda) n_L(L) n_L(\lambda) d\lambda \quad (4.27)$$

$$\bar{B}_{iB,k} = \int_L^\infty \beta(L|L') g(L') n_L(L') dL' \quad (4.28)$$

$$\bar{D}_{iB,k} = g(L) n_L(L) \quad (4.29)$$

em que $\bar{B}_{iC,k}$, $\bar{D}_{iC,k}$, $\bar{B}_{iB,k}$ e $\bar{D}_{iB,k}$ são os termos relacionados ao nascimento \bar{B} e morte \bar{D} de bolhas devido aos fenômenos de coalescência (C) e quebra (B). Os termos L e λ referem-se nesse equacionamento a dois tamanhos de bolha antes de coalescência e L' o tamanho da bolha antes da quebra.

Para caso monovariado, o problema de fechamento dos termos fontes para o QMOM pode ser reduzido para a seguinte integral:

$$I = \int_{\Omega_\xi} n_\xi(\xi) f(\xi) d\xi \quad (4.30)$$

onde $n_\xi(\xi)$ é a NDF não conhecida, ξ é uma coordenada interna qualquer e $f(\xi)$ é uma função que agrupa todos os demais termos do integrando que não são a NDF.

Sendo os nós da aproximação por quadratura as raízes do polinômio de ordem N ortogonal à NDF, a aproximação é dada por:

$$\int_{\Omega_\xi} n_\xi(\xi) f(\xi) d\xi \approx \sum_{i=1}^N w_i f(\xi_i) \quad (4.31)$$

em que w_i e ξ_i são os pesos e os nós, respectivamente, da aproximação por quadratura.

Aplicando-se a aproximação por quadratura Gaussiana aos momentos, obtém-se:

$$m_k = \int_{\Omega_\xi} n_\xi(\xi) \xi^k d\xi \approx \sum_{i=1}^N w_i f(\xi_i)^k \quad (4.32)$$

4.6.2.1 Algoritmo *Product-Difference* (PD)

O algoritmo *Product-Difference* é utilizado para o cálculo dos pesos (w_i) e nós (ξ_i) presentes na formulação do método QMOM. Partindo-se de um conjunto de momentos iniciais, a seguinte sequência de cálculos é realizada para construir a matriz P , em que os valores da sua primeira linha $P_{1,j}$ linha são importantes para a obtenção dos a_i e b_i da matriz Jacobiana

matrizes de Hankel-Hadamard são não negativos:

$$\Delta_{k,l} = \begin{vmatrix} m_k & m_{k+1} & \cdots & m_{k+l} \\ m_{k+1} & m_{k+2} & \cdots & m_{k+l+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{k+l} & m_{k+l+1} & \cdots & m_{k+l+l} \end{vmatrix} \geq 0 \quad \text{com } k = 0, 1 \quad \text{e } l \geq 0 \quad (4.37)$$

Isso se deve em razão dos momentos de uma NDF, como já comentado, representarem algumas características físicas importantes, de modo que os mesmos devem satisfazer as seguintes regras:

- Uma NDF positiva, como uma distribuição de tamanho de bolha, implica que o momento de ordem zero seja positivo também;
- Se a coordenada interna presente na NDF assumir somente valores positivos, como o tamanho de bolha, todos os demais momentos necessariamente devem ser positivos;
- A variância da distribuição (Var) dever ser maior ou igual a zero. Isso ocorre pois a mesma pode ser representada pela relação $Var = m_2 - m_1^2/m_0$.

Para um conjunto com 6 momentos ($N=3$), correspondente ao utilizado nesta dissertação, as maiores matrizes de Hankel-Hadamard apresentam a seguinte forma:

$$\Delta_{0,2} = \begin{vmatrix} m_0 & m_1 & m_2 \\ m_1 & m_2 & m_3 \\ m_2 & m_3 & m_4 \end{vmatrix} \quad \text{e} \quad \Delta_{1,2} = \begin{vmatrix} m_1 & m_2 & m_3 \\ m_2 & m_3 & m_4 \\ m_3 & m_4 & m_5 \end{vmatrix} \quad (4.38)$$

Uma condição necessária, mas não suficiente é a convexidade da função $\ln(m_k)$ em relação a k . Ao se construir uma tabela de diferenças a partir de momentos que descrevem uma NDF existente (realizáveis), é observável que a convexidade é garantida pela positividade dos elementos da coluna referente à diferença de segunda ordem (\vec{d}_2) e por elementos de valor muito pequeno para a diferença de terceira ordem (\vec{d}_3).

4.6.2.3 Algoritmos de Correção

O algoritmo de McGraw (1997), por exemplo, é capaz de verificar se um conjunto de momentos é realizável ou não a partir da tabela de diferença da função $\ln(m_k)$, comentada no tópico anterior, de modo que a desigualdade dada na Equação 4.39 deva ser satisfeita:

$$\frac{\ln(m_k) + \ln(m_{k-2})}{2} \geq \ln(m_{k-1}) \quad \text{para } k = 2, 3, \dots, 2N - 1 \quad (4.39)$$

A tabela diferença é construída seguindo as seguintes relações:

$$\begin{cases} d_{i,0} = \ln(m_i) & \text{para } i = 0, \dots, k \\ d_{i,j} = d_{i+1,j-1} - d_{i,j-1} & \text{para } i = 0, \dots, k-j \text{ e } j = 1, \dots, k \end{cases} \quad (4.40)$$

em que $d_{i,j}$ é a diferença de ordem j localizada na linha i da tabela de diferenças. Considera-se o conjunto de todos os valores de diferenças de uma coluna j como o vetor diferença de ordem j , representado por \vec{d}_j .

Assim, esse algoritmo tem como objetivo minimizar o vetor diferença de terceira ordem \vec{d}_3 , o qual é composto por valores muito pequenos quando os momentos são realizáveis. Para um vetor \vec{b}_k que descreve a mudança do vetor de diferença de terceira ordem para um incremento unitário no logaritmo natural do momento k , a minimização de \vec{d}_3 ocorre quando este vetor é ortogonal ao vetor \vec{b}_k .

O algoritmo corrige o momento a partir da seguinte relação:

$$(m_k)_{\text{corrigido}} = c_k(m_k)_{\text{inicial}} \implies \ln(m_k)_{\text{corrigido}} = \ln(c_k) + \ln(m_k)_{\text{inicial}} \quad (4.41)$$

em que c_k é o termo que é responsável por minimizar o vetor diferença de terceira ordem.

Assim, para \vec{d}_3 ortogonal ao vetor \vec{b}_k , tem-se que:

$$(\vec{d}_3)_{\text{corrigido}} = \ln(c_k)\vec{b}_k + (\vec{d}_3)_{\text{inicial}} \quad (4.42)$$

$$\ln c_k = -\cos\left((\vec{d}_3)_{\text{inicial}}, \vec{b}_k\right) \frac{|(\vec{d}_3)_{\text{inicial}}|}{|\vec{b}_k|} = -\frac{(\vec{d}_3)_{\text{inicial}} \cdot \vec{b}_k}{|\vec{b}_k|^2} \quad (4.43)$$

sendo $\cos\left((\vec{d}_3)_{\text{inicial}}, \vec{b}_k\right)$ o ângulo formado entre os dois vetores.

Outro algoritmo que pode ser utilizado para esse fim é o algoritmo de Wright (2007), o qual estima os novos momentos realizáveis por meio de duas distribuições Log-normal. Sua aplicação costuma ser feita quando o algoritmo de McGraw (1997) não é capaz de gerar um conjunto de momentos realizáveis. Fixados os momentos m_0 e m_3 e adotando para os momentos intermediários m_1 e m_2 para a primeira e segunda distribuição, respectivamente, os valores corrigidos da média (μ') e variância (Var') são obtidos por meio desse algoritmo de acordo com as equações abaixo:

$$\mu' = \frac{j}{ij - i^2} \ln\left(\frac{m_i}{m_0}\right) + \frac{i}{ij - j^2} \ln\left(\frac{m_j}{m_0}\right) \quad (4.44)$$

$$Var' = \frac{1}{1 - \left(\frac{i}{j}\right)} \left[\frac{2}{j^2} \ln \left(\frac{m_j}{m_0} \right) - \frac{2}{ij} \ln \left(\frac{m_i}{m_0} \right) \right] \quad (4.45)$$

A partir dessas duas distribuições Log-normal é possível corrigir os momentos intermediários m_1 e m_2 calculando a média aritmética dos valores obtidos por cada distribuição, de acordo com a Equação 4.46. Cabe ressaltar que os momentos m_0 e m_3 são os únicos que permanecem com os valores originais.

$$m_k = m_0 \exp \left(k\mu' + \frac{k^2 Var'}{2} \right) \quad (4.46)$$

O momento de terceira ordem (m_3) pode ser descrito como a razão entre a fração de gás entra no sistema ($\alpha_{G,entrada}$) e o fator de forma volumétrico (K_V):

$$m_3 = \frac{1}{K_V} \alpha_{G,entrada} = \frac{6}{\pi} \alpha_{G,entrada} \quad (4.47)$$

4.6.2.4 Momentos, Pesos e Nós para uma Distribuição Log-normal

Este tópico tem como objetivo descrever o procedimento de cálculo dos momentos, pesos e nós para uma distribuição Log-normal utilizando-se da modelagem apresentada até então para o QMOM. Partindo-se de um diâmetro de bolha médio de 0.005 m e de um desvio padrão igual a 15% desse valor, igual ao adotado para a fase gasosa ao ser injetada na Coluna de Bolhas pelo aspersor, a média (μ') e a variância (Var') da distribuição Log-normal são calculadas por:

$$\mu' = \ln \left(\frac{\mu^2}{\sqrt{\mu^2 + Var}} \right) \quad (4.48)$$

$$Var' = \ln \left(\frac{Var}{\mu^2} + 1 \right) \quad (4.49)$$

Os valores dos momentos de ordem 0 e 3 são calculados da seguinte forma:

$$\begin{cases} m_3 = \frac{6}{\pi} \\ m_0 = \frac{m_3}{\exp \left(3\mu' + \frac{9 Var'}{2} \right)} \end{cases} \quad (4.50)$$

Conhecido o valor do momento de ordem zero, o qual corresponde ao número total de bolhas (N_{total}), os demais momentos são calculados pela Equação 4.46 para um número de

nós de $N = 3$ e são iguais a:

$$\left\{ \begin{array}{l} m_0 = 14292276,7 \\ m_1 = 71461,3833 \\ m_2 = 365,346322 \\ m_3 = 1.90985932 \\ m_4 = 0,01020849 \\ m_5 = 0,00005579 \end{array} \right.$$

A partir desses valores, as matrizes de Hankel-Hadamard são obtidas pela Equação 4.37 e possuem os seguintes valores:

$$\Delta_{0,2} = \begin{vmatrix} 14292276,7 & 71461,3833 & 365,346322 \\ 71461,3833 & 365,346322 & 1.90985932 \\ 365,346322 & 1.90985932 & 0,01020849 \end{vmatrix} \quad (4.51)$$

$$\Delta_{1,2} = \begin{vmatrix} 71461,3833 & 365,346322 & 1.90985932 \\ 365,346322 & 1.90985932 & 0,01020849 \\ 1.90985932 & 0,01020849 & 0,00005579 \end{vmatrix} \quad (4.52)$$

O valor do determinante dessas matrizes são, respectivamente, 1123 e 0,00016. Dessa forma, como ambos são positivos, os momentos são realizáveis e representam uma NDF existente.

Alterando o valor do momento de ordem 2 para 370, os determinantes passam a ser, respectivamente, 63058 e -0,00931. Assim, visto que o segundo valor é negativo, tem-se que o conjunto de momentos considerando esse novo valor de m_2 não é realizável. Para torná-lo realizável é necessário utilizar um algoritmo de correção.

Dentre eles, utilizando-se do algoritmo de McGraw (1997) foi possível corrigir o conjunto de momentos para os seus valores originais.

Assim, como os momentos são realizáveis, o último passo pode ser realizado para encontrar os valores dos pesos e nós da aproximação por quadratura. Aplicando-se o algoritmo *Product-Difference* para esse conjunto de momentos, a seguinte matriz Jacobiana (J) é obtida:

$$J = \begin{bmatrix} 0,005 & -0,00075 & 0 \\ -0,00075 & 0,00534 & -0,00110 \\ 0 & -0,00110 & 0,00570 \end{bmatrix} \quad (4.53)$$

sendo os valores dos pesos de $w_1 = 4201424$, $w_2 = 8946099$ e $w_3 = 1144754$ e dos nós de

$L_1 = 0,00403$, $L_2 = 0,00523$ e $L_3 = 0,00678$.

4.6.2.5 Coalescência e Quebra em termos de Quadratura

Uma vez que os momentos foram verificados, e corrigidos caso não fossem realizáveis, os pesos w_i e nós ξ_i podem ser obtidos utilizando o algoritmo *Product-Difference* e, com isso, as equações de transporte de momentos podem ser resolvidas utilizando-se a aproximação por quadratura.

Considerando como coordenada interna o diâmetro de bolha ($\xi = L$), os termos de nascimento e morte para os fenômenos de coalescência e quebra escritos em função dos pesos e nós são calculados por:

$$\bar{B}_{iC,k} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N w_i \sum_{j=1}^N w_j (L_i^3 + L_j^3)^{\frac{k}{3}} h(L_i, L_j) \quad (4.54)$$

$$\bar{D}_{iC,k} = \sum_{i=1}^N L_i^k w_i \sum_{j=1}^N w_j h(L_i, L_j) \quad (4.55)$$

$$\bar{B}_{iB,k} = \sum_{i=1}^N w_i \int_0^{L_i} L^k g(L_i) \beta(L | L_i) dL \quad (4.56)$$

$$\bar{D}_{iB,k} = \sum_{i=1}^N w_i L_i^k g(L_i) \quad (4.57)$$

A integral presente na Equação 4.56 possui, segundo Petitti *et al.* (2010), a seguinte solução analítica:

$$\int_0^{L_i} L^k \beta(L | L_i) dL = \frac{3240 L_i^k}{(k+9)(k+12)(k+15)} \quad (4.58)$$

Por fim, o balanço global de momentos é obtido considerando somente a variação temporal do momento. Dessa forma, a equação de transporte de momento para esse caso é dada por:

$$\frac{\partial(m_{L,k})}{\partial t} = h_{L,k} \quad (4.59)$$

4.7 Modelos de Coalescência e Quebra

Os fenômenos de coalescência e quebra são intrínsecos de escoamentos multifásicos que apresentam a fase gasosa como a fase dispersa no sistema. Esses fenômenos ocorrem devido à fluidodinâmica do escoamento, com destaque para a sua natureza turbulenta.

4.7.1 Modelos de Coalescência

O fenômeno da coalescência pode ser modelado pelo produto dos termos de frequência de colisão ($h_0(L_1, L_2)$) e eficiência de coalescência ($\lambda(L_1, L_2)$), na forma que segue:

$$h(L_1, L_2) = h_0(L_1, L_2) \lambda(L_1, L_2) \quad (4.60)$$

em que L_1 e L_2 referem-se aos diâmetros das bolhas que se colidem e coalescem devido a essa interação.

Tal formulação considera que a coalescência não ocorrerá sempre que houver interação entre duas bolhas, mas somente em casos que sejam favoráveis para tal fenômeno. Em suma, a coalescência dependerá de características do meio, como a presença de filme líquido entre as bolhas e de vórtices turbulentos.

4.7.1.1 Frequência de Colisão devido à Flutuações Turbulentas

Prince e Blanch (1990) calcularam as colisões de bolhas em um escoamento turbulento por meio de uma analogia com o movimento aleatório das moléculas de gás descrito pela teoria cinética dos gases, no qual a frequência de colisão é dada pelo volume deslocado em razão do movimento das bolhas em um certo intervalo de tempo.

$$h_0(L_1, L_2) = S_{12} u_{rel} = \frac{\pi}{4} (L_1 + L_2)^2 \left(\sqrt{2\epsilon^{\frac{1}{3}}} \sqrt{L_1^{\frac{2}{3}} + L_2^{\frac{2}{3}}} \right) \quad (4.61)$$

onde S_{12} é a área de colisão seccional das bolhas e u_{rel} é a velocidade relativa de aproximação entre duas bolhas. O modelo proposto por Prince e Blanch (1990) é dado pela Equação 4.62:

$$h_0(L_1, L_2) = C_1 (L_1 + L_2)^2 \epsilon^{\frac{1}{3}} \sqrt{L_1^{\frac{2}{3}} + L_2^{\frac{2}{3}}} \quad (4.62)$$

Wang *et al.* (2005) propuseram uma correção do modelo de Prince e Blanch (1990) para considerar a razão entre os tamanhos das bolhas e dos vórtices turbulentos. Tal correção é feita para que somente a colisão de bolhas com diâmetros menores que a escala de comprimento integral de turbulência acarretem em coalescência.

$$h_0(L_1, L_2) = C_1 \gamma \Pi (L_1 + L_2)^2 \epsilon^{\frac{1}{3}} \sqrt{L_1^{\frac{2}{3}} + L_2^{\frac{2}{3}}} \quad (4.63)$$

$$\gamma = \frac{\alpha_{max}}{\alpha_{max} - \alpha_G}, \quad \alpha_{max} = 0,8 \quad (4.64)$$

$$\Pi = 1 - \exp\left(C_{\Pi} \frac{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} \alpha_G^{\frac{1}{3}}}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_G^{\frac{1}{3}}}\right), \quad C_{\Pi} = 3 \text{ (Sistema ar-água)} \quad (4.65)$$

onde γ é um fator que considera a redução do espaço livre para o movimento das bolhas devido a existência das mesmas no meio, o que provoca um aumento na frequência de colisão. Ademais, C_{Π} é uma constante que depende do sistema estudado e está relacionada com Π , sendo este último um termo que contabiliza os efeitos dos vórtices turbulentos para os casos em que o seu comprimento é próximo do tamanho das bolhas.

4.7.1.2 Eficiência de Colisão

Coulaloglou (1975) propôs quantificar a eficiência de colisão a partir do modelo de drenagem de filme, o qual considera a relação entre o tempo de drenagem (t_D) e o tempo de contato (t_C). O primeiro representa o tempo necessário para que o filme líquido entre duas bolhas seja drenado e o segundo é o tempo que as bolhas ficam em contato após a colisão.

$$\lambda(L_1, L_2) = \exp\left(-\frac{t_D}{t_C}\right) \quad (4.66)$$

Chesters (1991) propôs a partir dessa mesma abordagem, modelos que consideram a deformidade das bolhas e do comportamento móvel das suas interfaces. A Equação 4.67 é utilizada em casos de colisões inerciais com interfaces imóveis e a Equação 4.68 para colisões viscosas e interfaces móveis.

$$\lambda(L_1, L_2) = \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho_L \epsilon^{\frac{2}{3}} L^{\frac{5}{3}}}}{4\sigma}\right) \quad (4.67)$$

$$\lambda(L_1, L_2) = \exp - \left(C \frac{9\mu_L \rho_L \epsilon L_{eq}^4}{128\sigma^2 h_f^2}\right) \quad (4.68)$$

$$L_{eq} = \left(\frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2}\right)^{-1} \quad (4.69)$$

onde h_f é a espessura do filme líquido ao final do processo de drenagem e L_{eq} é o compri-

mento equivalente relacionado a interação entre bolhas de tamanho L_1 e L_2 .

O modelo experimental de Lehr *et al.* (2002) é baseado em observações que mostraram que baixas velocidades de aproximação de bolhas resultam em uma alta fração de bolhas que coalescem. Para velocidades de aproximação menores que um valor crítico (u_{crit}), as bolhas tendem a coalescer ao se colidirem. O valor de u_{crit} foi encontrado partir de ajuste com dados experimentais para um sistema de água destilada-ar, não sendo dependente do tamanho das bolhas estudadas (3-8 mm) (Gemello *et al.* (2019)).

$$\lambda(L_1, L_2) = \min \left(\frac{u_{crit}}{u_{rel}}, 1 \right), \quad u_{crit} = 0.08 \text{m/s} \quad (4.70)$$

4.7.2 Modelos de Quebra

Distintas tensões presentes no escoamento de bolhas em uma fase líquida contínua podem levá-las a sofrerem o fenômeno de quebra, originando um conjunto de bolhas necessariamente de tamanhos menores. Por meio dessas tensões é possível prever como pode ocorrer a degradação dessas bolhas em um dado sistema de interesse (Gemello (2018)). Dentre os principais mecanismos existentes, o mais importante é aquele que considera as quebras ocasionadas devido a flutuações turbulentas que acontecem na superfície das bolhas e a colisão dessas com vórtices presentes em sistemas turbulentos.

Coulaloglou e Tavlarides (1977) propuseram a modelagem da frequência de quebra para dispersões líquido-líquido considerando-a proporcional à fração de gotas que possuem a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ) maior que a tensão superficial. Essa mesma abordagem pode ser expandida para bolhas em um sistema de gás disperso em líquido.

$$g(L) = C_1 L^{-\frac{2}{3}} \epsilon^{\frac{1}{3}} \exp \left(-C_2 \frac{\sigma}{\rho_G \epsilon^{\frac{2}{3}} L^{\frac{5}{3}}} \right) \quad (4.71)$$

Prince e Blanch (1990) alteraram o modelo de Coulaloglou e Tavlarides (1977) para considerar a densidade do líquido ao invés da densidade da fase dispersa, visto que para um sistema gás-líquido a diferença de densidades entre as fases é muito maior que para um sistema de dispersão líquido-líquido .

Alopaeus *et al.* (2002) adaptaram o modelo proposto adicionando a contribuição das forças viscosas.

$$g(L) = C_1 \epsilon^{\frac{1}{3}} \text{erfc} \left(\sqrt{C_2 \frac{\sigma}{\rho_L \epsilon^{\frac{2}{3}} L^{\frac{5}{3}}} + C_3 \frac{\mu_G}{\sqrt{\rho_L \rho_G \epsilon^{\frac{2}{3}} L^{\frac{4}{3}}}}} \right) \quad (4.72)$$

Laakkonen *et al.* (2006)) modificaram o modelo de Alopaeus *et al.* (2002) substituindo a viscosidade da fase dispersa pela viscosidade da fase contínua, uma vez que consideram que a tensão viscosa que resiste a quebra depende da viscosidade do líquido que circunda a

bolha e não da viscosidade do gás.

$$g(L) = C_1 \epsilon^{\frac{1}{3}} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{C_2 \frac{\sigma}{\rho_L \epsilon^{\frac{2}{3}} L^{\frac{5}{3}}} + C_3 \frac{\mu_L}{\sqrt{\rho_L \rho_G} \epsilon^{\frac{2}{3}} L^{\frac{4}{3}}}} \right) \quad (4.73)$$

Lehr *et al.* (2002) segue o modelo proposto por Luo e Svendsen (1996), os quais se basearam na teoria da turbulência isotrópica e probabilidade. A proposição dependente de constantes experimentais, diferente dos demais modelo descritos até o momento.

$$g(L) = 0,5 \frac{L^{\frac{5}{3}} \epsilon^{\frac{19}{15}} \rho_L^{\frac{7}{5}}}{\sigma^{\frac{7}{5}}} \exp \left(-\frac{\sqrt{2} \sigma^{\frac{9}{5}}}{\rho_L^{\frac{9}{5}} \epsilon^{\frac{6}{5}} L^3} \right) \quad (4.74)$$

Laakkonen *et al.* (2007) propuseram descrever a função distribuição ($\beta(L | L_i)$) por meio da Equação 4.75, uma abordagem estatística que considera a quebra de bolhas como binária, ou seja, duas bolhas de mesmo tamanho são geradas com a quebra de uma bolha de tamanho maior. Essa função é dada por:

$$\beta(L | L_i) = 180 \left(\frac{L^2}{L_i^3} \right) \left(\frac{L^3}{L_i^3} \right)^2 \left(1 - \frac{L^3}{L_i^3} \right)^2 \quad (4.75)$$

5 MÉTODOS

5.1 Softwares e Hardwares

O *software Ansys Fluent* (versões 14.5 e 2022 R2) foi empregado para a realização das simulações fluidodinâmicas 3D que envolvem a resolução das equações de conservação de massa e de quantidade de movimento, bem como as demais equações apresentadas anteriormente. Para a criação das diferentes geometrias computacionais dos biorreatores estudados foi utilizado o *software Space Claim*, bem como o *software Meshing* para geração de malhas computacionais referentes a essas geometrias. Na etapa de pós processamento de dados foi empregado o *software CFD-Post*. As simulações foram realizadas nos computadores presentes no Laboratório de Simulação de Escoamentos Multifásicos do DEQ-UFSCar. O ambiente de desenvolvimento integrado (IDE) utilizado para desenvolver a rotina Python e simular o balanço global de momentos foi o Jupyter Notebook. As bibliotecas dessa linguagem utilizadas neste trabalho foram:

- **Numpy:** Capaz de lidar eficientemente com matrizes multidimensionais e suas operações, assim como rotinas de álgebra linear. Sua estrutura é desenvolvida em código C, o que permite explorar a velocidade nos cálculos computacionais inerente dessa linguagem.

- **Scipy:** Apresenta rotinas de interesse da engenharia, tais como integração e derivação numérica, interpolação, otimização, álgebra linear e estatística. Possui o módulo *integrate* que apresenta funções numéricas aplicadas para a resolução de problemas que envolvem integrais, como a integração de uma EDO de 1° ordem.
- **Sympy:** Biblioteca dedicada à linguagem matemática simbólica, permite realizar cálculos computacionais na forma simbólica mantendo o código escrito simples e compreensível para o usuário. Permite a construção e visualização de matrizes extensas na forma simbólica, como a matriz Jacobiana J , o que auxilia na checagem das expressões matemáticas que estão empregadas.
- **Matplotlib:** Utilizada no desenvolvimento de gráficos, em geração de imagens interativas e na exportação de dados em forma de plote. Uma vantagem é o nível de customização oferecido ao usuário, em que alterações de propriedades como fonte, estilo de linhas e formatação de eixos são permitidas.

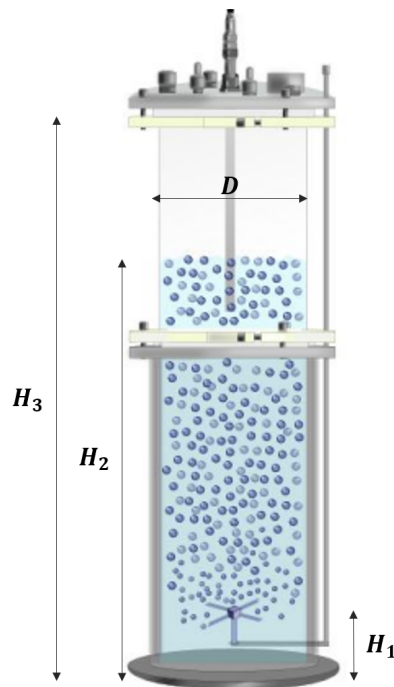
5.2 Geometria

A geometria adotada neste trabalho é baseada na configuração do biorreator coluna de bolhas utilizado no trabalho de Mendes (2016)). As dimensões do equipamento são detalhadas na Tabela 5.1 e exibidas na Figura 5.1.

Tabela 5.1. Dimensões do biorreator coluna de bolhas estudado por Mendes (2016).

Dimensões	Valor (mm)
H_1	40
H_2	405
H_3	650
D	125

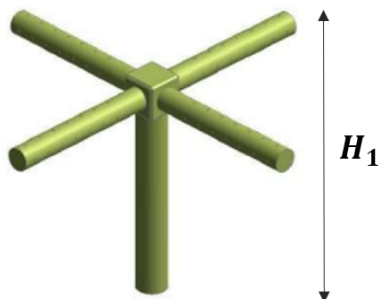
Figura 5.1. Representação do biorreator coluna de bolhas e de suas principais dimensões.



Fonte: Mendes (2016)

O biorreator exibido na Figura 5.1 possui um volume útil de 5 L preenchido com líquido e foi confeccionado em vidro borosilicato transparente, acoplado a uma base e tampa superior de aço inoxidável 316L (Mendes (2016)). O dispositivo conta com a presença de um dispersor do tipo cruzeta em sua base para injeção de gás, o qual apresenta orifícios com 0,5 mm de diâmetro (D_{orif}) espaçados entre si por 5,0 mm de distância e distribuídos ao longo das hastes do dispersor, como pode ser visto na Figura 5.2.

Figura 5.2. Representação do dispersor tipo cruzeta com 84 orifícios.



Fonte: Rodriguez (2015)

5.3 Malha Computacional

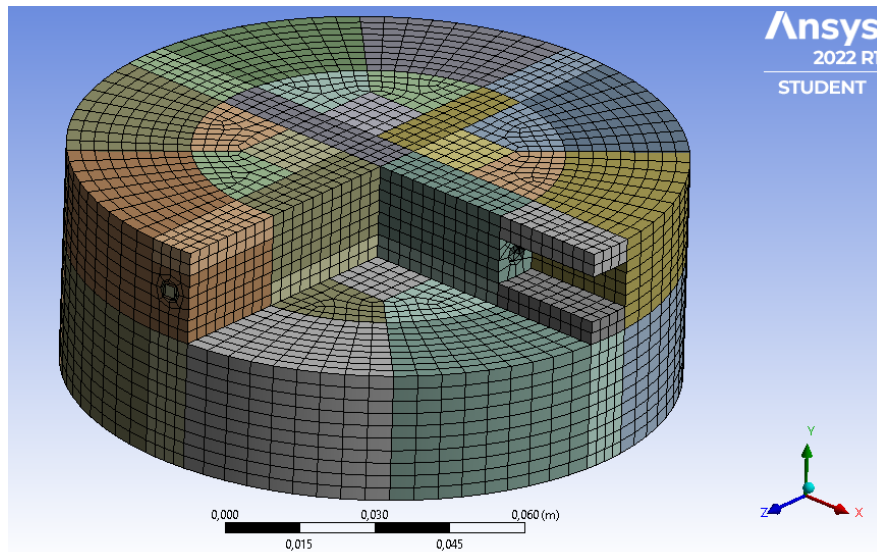
As malhas computacionais geradas seguiram a metodologia adotada por Rodriguez (2015), em que malhas tridimensionais híbridas com elementos tetraédricos e hexaédricos foram utilizados para discretizar a geometria dos três biorreatores. Ademais, em razão dos altos gradientes de velocidade e de fração volumétrica de gás, um maior refino foi dado nas regiões próximas ao aspersor, utilizando-se de elementos tetraédricos devido a sua versatilidade em se adaptar para diversas geometrias.

A malha computacional foi construída seguindo o esquema *O-grid*, em que os blocos da região mais externa radialmente formam uma configuração circular em torno dos blocos da região central. A adoção desse esquema teve como objetivo gerar os elementos computacionais na zona do aspersor com maior controle. A metodologia empregada seguiu os passos descritos abaixo:

- Gerar a malha computacional para os blocos presentes no entorno do aspersor, exceto naqueles que estão em contato com as hastes. Adicionar restrição nas arestas desses blocos tanto vertical quanto radialmente de modo a garantir a criação de elementos hexaédricos seguindo o espaçamento entre nós definido;
- Gerar a malha para os blocos faltantes que envolvem as hastes do aspersor, permitindo a existência também de elementos tetraédricos. Tal sequência propicia uma melhor adaptação entre os elementos hexaédricos gerados no passo anterior e os que serão criados nesses blocos, visto que há as hastes possuem forma cilíndrica e os orifícios forma circular;
- Gerar a malha para os blocos da região da base e do topo, os quais seguirão o padrão de elementos hexaédricos imposto aos blocos da região do aspersor (intermediária entre a base e o topo).

Para um espaçamento entre nós global de 2,5 mm, foram gerados 526.482 elementos computacionais, sendo os elementos hexaédricos majoritários. A Figura 5.3 exhibe parte da malha gerada em torno do aspersor.

Figura 5.3. Vista isométrica de parte da malha computacional gerada em torno do aspersor tipo cruzeta.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

5.4 Procedimento de Simulação Numérica

Um sistema bifásico ar-água foi simulado neste trabalho e a abordagem Euleriana-Euleriana foi utilizada para descrever a fluidodinâmica no biorreator estudado. A fase líquida foi definida como a fase contínua, enquanto que a fase gasosa foi tratada como a fase dispersa.

A Tabela 5.2 apresenta as propriedades físicas dos fluidos e as condições de contorno que foram adotados nas simulações, assim como detalha os modelos e parâmetros numéricos que foram empregados.

Tabela 5.2. Propriedades físicas dos fluidos, condições de contorno, modelos e parâmetros numéricos adotados para as simulações do biorreator coluna de bolhas.

Fluido	
Água (Fase Líquida)	$\rho_L = 995,65 \text{ kg/m}^3$, $\mu_L = 8,4 \cdot 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s}$, $\sigma = 0,0712 \text{ N/m}$
Ar (Fase Gasosa)	$\rho_G = 1,225 \text{ kg/m}^3$, $D_L = 2,84 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
Condições de Contorno	
Entrada (Orifícios do aspersor)	Velocidade normal à face do orifício Fração volumétrica de ar igual a 1 Distribuição Log-normal dos momentos
Saída	<i>Gauge Pressure</i> = 0 Pa, <i>Backflow</i> de ar = 1,0
Paredes e Anteparos Internos	<i>Stationary Wall</i> ; Não deslizamento para ambas as fases
Solver	
Parâmetros	Tipo: <i>Pressure-Based</i> Formulação da Velocidade: <i>Absolute</i> Regime: Transiente Gravidade: $g = 9,81 \text{ m/s}^2$
Modelos e Parâmetros Numéricos	
Interação entre fases	Arrasto: Grace (1976)
Turbulência	Para ambas as fases: Modelo $\kappa - \epsilon$ Padrão $C_\mu = 0,09$, $C_{\epsilon_1} = 1,44$, $C_{\epsilon_2} = 1,92$, $\sigma_\kappa = 1$, $\sigma_\epsilon = 1,3$
Fenômenos envolvidos	Frequência de Colisão: Prince e Blanch (1990)) Wang <i>et al.</i> (2005) Eficiência de Coalescência: Lehr <i>et al.</i> (2002)) Quebra: Laakkonen <i>et al.</i> (2006)) Laakkonen <i>et al.</i> (2007)
Equações de Balanço Populacional	Modelo de Quadratura de Momentos (QMOM)
Acoplamento Pressão-Velocidade	<i>Phase Coupled SIMPLE</i>
Discretização Espacial	Gradiente: <i>Least Squares Cell Based</i> Pressão: PRESTO! Momento: <i>Second Order Upwind</i> Fração Volumétrica: QUICK Energia Cinética Turbulenta: <i>First Order Upwind</i> Taxa de Dissipação Turbulenta: <i>First Order Upwind</i> Transiente: <i>First Order Upwind</i>
Critério de Convergência	$RMS = 1.10^{-4}$
Regime Transiente	25 iterações/passo no tempo Passo no tempo de 1.10^{-3} s

Fonte: Adaptado de Rodriguez (2015)

As simulações foram conduzidas para vazões específicas de alimentação de ar (ϕ_{ar}) de 1 a 5 vvm com o objetivo de avaliar a resposta fluidodinâmica do sistema devido à incorporação das equações de balanço populacional por meio do diâmetro médio de Sauter (D_{32}^{Sauter}) das bolhas. A velocidade de entrada de ar ($v_{ar,entrada}$) nos orifícios do aspersor se relaciona com a vazão específica de ar por meio da Equação 5.1.

$$v_{ar,entrada} = \frac{\phi_{ar} V_L}{N_{orif} A_{orif}} \quad (5.1)$$

em que V_L é o volume de líquido no biorreator, N_{orif} o número de orifícios presentes no aspersor e A_{orif} a área de um orifício de 0,5 mm de diâmetro correspondente a malha utilizada.

Os momentos iniciais inseridos como condição de entrada nos orifícios do aspersor foram obtidos a partir de uma distribuição Log-normal descrita pela Equação 4.46, considerando o diâmetro médio de bolha ($D_b = \mu$) igual a 5,0 mm e variância (Var) igual a 15% desse valor (Petitti *et al.* (2010)) e número de nós (N) igual a 3. Os modelos de frequência de colisão de Prince e Blanch (1990) e Wang *et al.* (2005) foram implementados por meio de funções externas ao *software*, tendo sido essas interpretadas no formato de UDF (*User-defined Function*). Tal implementação foi feita devido à ausência desses modelos na versão 14.5 do *Ansys Fluent*.

5.5 Parâmetros Hidrodinâmicos e de Transferência de Massa

5.5.1 Retenção Gasosa

Para uma Coluna de Bolhas de seção transversal constante, a Equação 3.1 pode ser rescrita em função das alturas de líquido antes da aeração (H_L) e da dispersão após a aeração (H_D) como:

$$\varepsilon_G = \frac{H_D - H_L}{H_D} \quad (5.2)$$

A determinação do valor da retenção gasosa (ε_G) pelo simulador foi feita utilizando-se das ferramentas *Iso-Surface* e *Iso-Clip*, a partir das quais foi possível estabelecer uma superfície de fração volumétrica $\alpha_G = 0,99$ e sua respectiva altura média correspondente à altura da dispersão H_D .

5.5.2 Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio

Com base na Teoria de Penetração de Higbie, descrita em Rodriguez (2015), o coeficiente convectivo de transferência de massa (k_L) pode ser calculado pela Equação 5.3:

$$k_L = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{D_L}{\theta}} \quad (5.3)$$

em que D_L é o coeficiente de difusividade mássica e θ é o tempo de exposição ou de contato entre um elemento de volume de líquido e uma bolha de gás, o qual pode ser obtido pela Equação 5.4.

$$\theta = \frac{D_b}{v_{desl}} \quad (5.4)$$

em que a velocidade de deslizamento entre a bolha e o líquido (v_{desl}) corresponde a velocidade do gás em relação ao líquido no sistema.

Uma vez que pelas equações de balanço populacional encontra-se o diâmetro de bolha de cada elemento do volume computacional e que pelas de equações de conservação se conhece a velocidade da fase gasosa, tem-se que o cálculo do k_L por meio dessa teoria pode ser realizado localmente, o que permite superar uma limitação da modelagem quanto ao efeito da presença de um enxame de bolhas.

A área interfacial específica de transferência de massa (a) foi calculada de baseando-se na Equação 3.2, a qual pode ser reescrita em termos da fração volumétrica de ar de modo que seja possível obter um valor de a para todo o volume computacional:

$$a = \frac{6 \alpha_G}{D_b} \quad (5.5)$$

As Equações de 5.3 a 5.5 foram inseridas no simulador por meio de funções customizadas, as quais buscam os valores diretamente no domínio computacional simulado.

Os valores médios dessas variáveis foi obtido criando-se um *Iso-Volume*, que contém a fase gasosa com fração volumétrica superior a 0,01 e inferior a 0,80, no qual foi possível extrair os valores das médias volumétricas. O valor de $k_L a$ foi calculado a partir do produto entre k_L e a .

5.6 Casos de Estudo

Os casos de estudo propostos neste trabalho visam compreender a influência de condições iniciais e de contorno aplicadas na simulação por CFD 3D das equações de balanço populacional pelo método QMOM. O cunho investigativo desses casos auxiliará no entendimento dessas condições, assim como permitirá escolher aquelas que melhor representam a fluidodinâmica do biorreator coluna de bolhas.

O conjunto A conta com casos cuja finalidade é avaliar a influência da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ϵ) definida na entrada dos orifícios na resposta simulada. Utilizando-se de dois passos de tempo distintos (Δt), duas abordagens para ϵ foram adotadas em que para a primeira (Casos A.1 e A.2) seguiu-se o foi proposto em Buffo *et al.* (2013) e para a segunda (Casos A.3, A.4 e A.5) manteve-se o valor padrão presente no *Ansys Fluent*. A necessidade de avaliar esse contorno se deu em razão da turbulência ser fonte causadora de instabilidades numéricas em simulações CFD quando não modelada corretamente. Assim,

utilizar uma abordagem para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta que resulte em um contorno de diâmetro similar ao real já favorece a redução dessas instabilidades.

O conjunto B teve como objetivo avaliar a resposta obtida pelo simulador para diferentes condições iniciais de momento na região de ar estagnado. Foram considerados valores de momentos que correspondem ao ar contendo bolhas de diâmetro mínimo, de 5,0 mm e de 10,0 mm (Casos B.1, B.2 e B.3, respectivamente). Essas mesmas condições foram impostas no contorno da saída, evitando que um fluxo reverso de ar ali provoque instabilidades numéricas na simulação. A escolha dessa região foi feita para analisar a sua influência no valor dos diâmetros obtidos pelo simulador após o primeiro contato da fase gasosa injetada pelo aspersor com a interface gás-líquido presente no topo do biorreator.

Por fim, o conjunto C teve como propósito avaliar a influência do momento de terceira ordem (m_3) para a região abaixo da interface gás-líquido, ou seja, para a região em que a fase líquida está localizada. Para o caso C.1 não foi considerado nenhum tipo de restrição para m_3 , enquanto que para o caso C.2 foi definido um valor de m_3 sempre nulo para regiões com fração volumétrica de ar (ϕ_{ar}) menor ou igual a 0,01. Tal restrição foi adicionada para que o simulador considerasse a existência de bolha e, conseqüentemente, de um valor de diâmetro somente para as regiões onde de fato há a presença da fase gasosa. A escolha do momento de terceira ordem foi feita em razão do mesmo ser utilizado para calcular o diâmetro de bolha (D_b^{Sauter}) e ser proporcional à fração volumétrica de ar, o que permite manipular essa variável de interesse de forma a adequá-la para representar o fenômeno físico com maior fidelidade. Além disso, foi considerado para a região acima da interface que o momento de terceira ordem possui um valor fixo e igual a $6/\pi$, proporcional à fração volumétrica de ar, como mostrado anteriormente pela Equação 4.47.

Em todos os casos foi considerado que as bolhas presentes no biorreator estão contidas em uma faixa de valor de 2,0 a 10,0 mm, a qual foi considerada também em trabalhos como de Petitti *et al.* (2010) e Buffo *et al.* (2013). A Tabela 5.3 sumariza as condições iniciais e de contorno propostas para cada caso.

Tabela 5.3. Detalhamento das condições iniciais e de contorno adotadas na simulação dos casos de estudo.

Caso	Δt (s)	Contorno para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ϵ)	Modelo de Frequência de Colisão	Momentos iniciais
A.1	1.10^{-3}	D_{orif}	Prince e Blanch (1990)	$m_3 = 6/\pi$ para $\alpha_G = 1$ $m_3 = 0$ para $\alpha_G < 1$ $m_k = 0$ para $k \neq 3$ e $\alpha_G \leq 1$
A.2	1.10^{-4}	D_{orif}	Prince e Blanch (1990)	$m_3 = 6/\pi$ para $\alpha_G = 1$ $m_3 = 0$ para $\alpha_G < 1$ $m_k = 0$ para $k \neq 3$ e $\alpha_G \leq 1$
A.3	1.10^{-3}	Intensidade Turbulenta de 5%	Prince e Blanch (1990)	$m_3 = 6/\pi$ para $\alpha_G = 1$ $m_3 = 0$ para $\alpha_G < 1$ $m_k = 0$ para $k \neq 3$ e $\alpha_G \leq 1$
A.4	1.10^{-4}	Intensidade Turbulenta de 5%	Prince e Blanch (1990)	$m_3 = 6/\pi$ para $\alpha_G = 1$ $m_3 = 0$ para $\alpha_G < 1$ $m_k = 0$ para $k \neq 3$ e $\alpha_G \leq 1$
A.5	1.10^{-4}	Intensidade Turbulenta de 5%	Wang <i>et al.</i> (2005)	$m_3 = 6/\pi$ $m_3 = 0$ para $\alpha_G < 1$ $m_k = 0$ para $k \neq 3$ e $\alpha_G \leq 1$
B.1	1.10^{-3}	Intensidade Turbulenta de 5%	Prince e Blanch (1990)	$m_k = 0$
B.2	1.10^{-3}	Intensidade Turbulenta de 5%	Prince e Blanch (1990)	$m_k = m_{k,entrada}$ para $\alpha_G = 1$ ($D_b = 5.0$ mm) $m_k = 0$ para $\alpha_G < 1$
B.3	1.10^{-3}	Intensidade Turbulenta de 5%	Prince e Blanch (1990)	$m_k = m_{k,D_{max}}$ para $\alpha_G = 1$ ($D_b = D_{max}$) $m_k = 0$ para $\alpha_G < 1$
C.1	1.10^{-3}	Intensidade Turbulenta de 5%	Prince e Blanch (1990)	$m_3 = 6/\pi$, $\alpha_G \geq 0,80$ $m_k = 0$ para $\alpha_G < 0,80$
C.2	1.10^{-3}	Intensidade Turbulenta de 5%	Prince e Blanch (1990)	$m_3 = 6/\pi$, $\alpha_G \geq 0,80$ $m_3 = 0$, $\alpha_G \leq 0,01$ $m_k = 0$ para $k \neq 3$ e $\alpha_G \leq 0,80$

Fonte: Elaborada pelo Autor

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

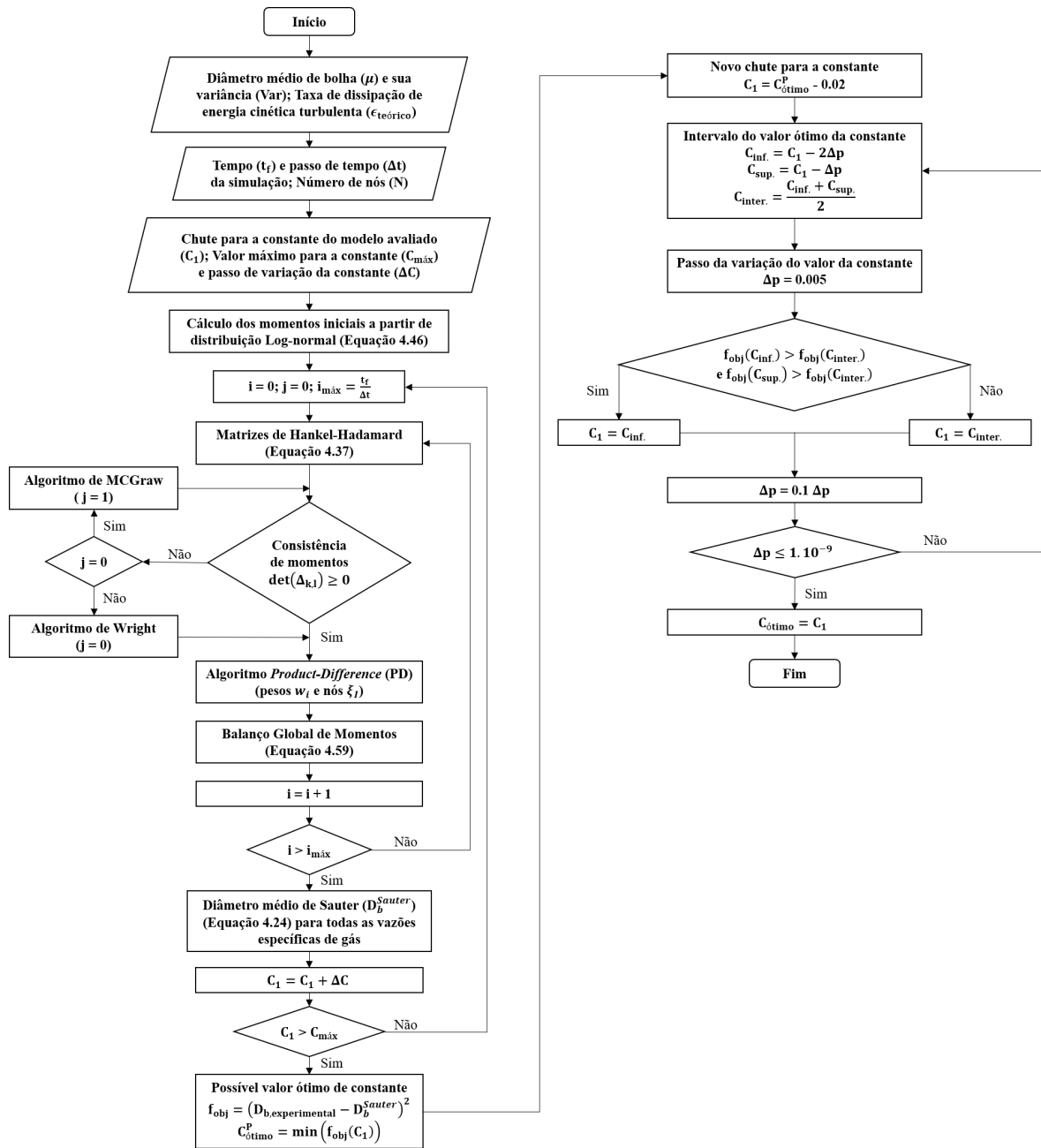
6.1 Balanço Global de Momentos

As equações de balanço populacional do Método da Quadratura de Momentos (QMOM), assim como os algoritmos de correção apresentados na seção de modelagem matemática e os modelos de coalescência e quebra, foram implementados em rotina Python.

O objetivo dessa rotina é determinar a constante C_1 dos modelos de frequência de colisão $h_0(L_i, L_j)$ para os modelos que são de interesse e serão aplicados na simulação 3D. Foi utilizado um valor teórico da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ϵ) que, segundo Gilli (2020), é obtido como sendo o produto entre a velocidade superficial de gás ($v_{s,G}$) e a aceleração da gravidade (g). Os valores ótimos dessas constantes foram encontrados a partir da minimização do erro ao quadrado entre os diâmetros médios de Sauter experimentais de Mendes (2016) e os gerados pelo método QMOM. A Figura 6.1 apresenta o fluxograma das etapas realizadas pela rotina.

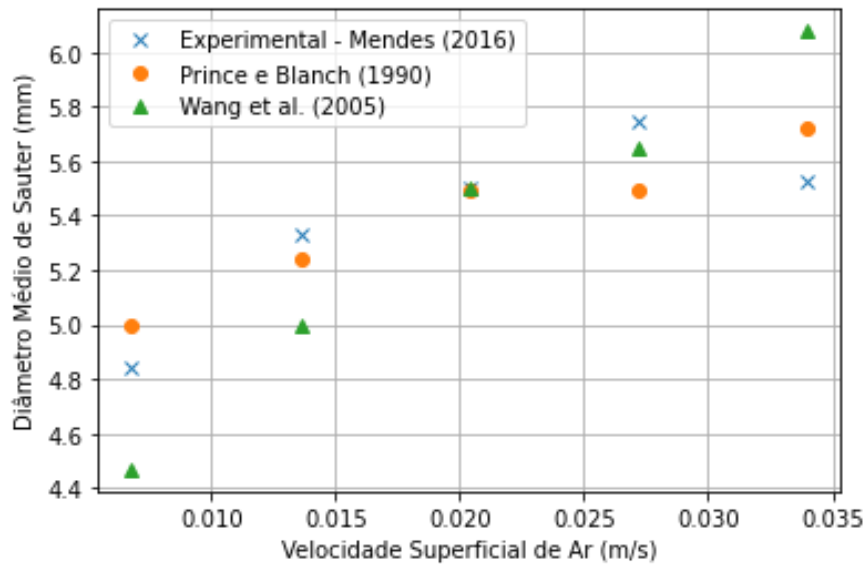
Aplicando essa rotina, os valores ótimos da constante C_1 foram encontrados para os modelos de Prince e Blanch (1990) e Wang *et al.* (2005) como sendo 0,302356 e 0,295174, respectivamente, os quais estão inseridos na faixa de valores relatados em trabalhos como o de Gemello (2018). Ambos os modelos apresentaram boa concordância em prever o aumento do diâmetro médio das bolhas com o acréscimo na vazão de específica de alimentação de ar, como pode ser visto na Figura 6.2, evidenciando que os mesmos tendem a gerar resultados similares quando aplicados em simulações tridimensionais.

Figura 6.1. Fluxograma das etapas realizadas pela rotina Python.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

Figura 6.2. Diâmetro médio de Sauter em função da velocidade superficial de ar para os modelos de frequência de colisão de Prince e Blanch (1990) e Wang *et al.* (2005).

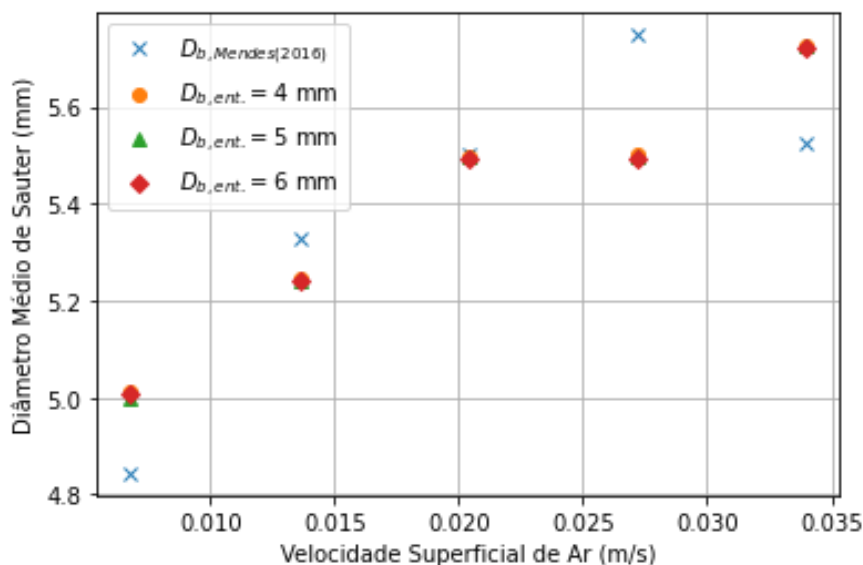


Fonte: Acervo pessoal do Autor

Vale ressaltar que tanto para a simulação do balanço global de momentos quanto para a simulação 3D, os valores utilizados para as constantes do modelo de quebra de Laakkonen *et al.* (2006) foram $C_1=4,00$, $C_2=0,04$ e $C_3=0,01$.

Ademais, foi avaliada a influência do valor de diâmetro médio adotado no cálculo dos momentos iniciais. Diâmetros de 4,0 e 6,0 mm foram simulados e os resultados de diâmetro médio de Sauter obtidos foram comparados com o resultado da simulação que utilizou o modelo de Prince e Blanch (1990). Como pode ser observado na Figura 6.3, os valores previstos a partir dos três diâmetros se sobrepuseram, o que indica que na faixa de valores testada não existe nenhuma influência desse parâmetro na resposta obtida pelo balanço global de momentos.

Figura 6.3. Diâmetro médio de Sauter obtido para diferentes valores iniciais de diâmetro médio de bolha.



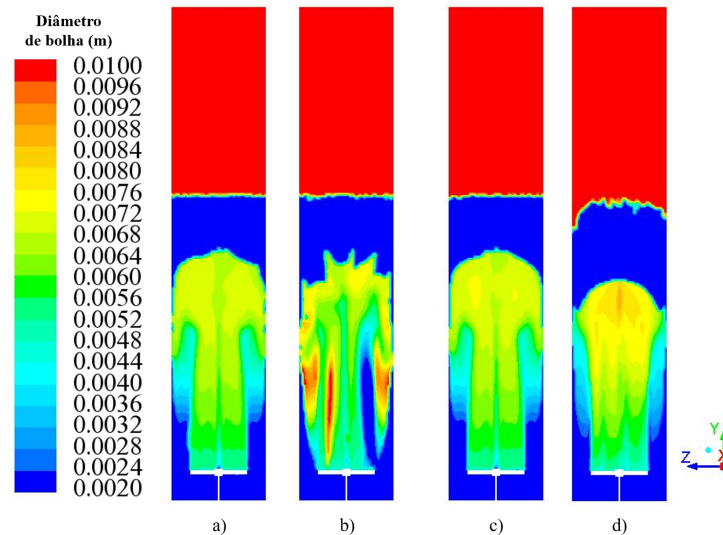
Fonte: Acervo pessoal do Autor

6.2 Simulação 3D

Partindo-se do modelo de Prince e Blanch (1990) para a frequência de colisão, avaliou-se a influência do valor da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ϵ) adotado na condição de entrada nos orifícios do aspersor (casos do conjunto A). A comparação foi realizada entre o modo padrão do *Ansys Fluent* e o valor utilizado por Buffo *et al.* (2013). Para o primeiro foram configurados os valores do modelo de turbulência com base na intensidade turbulenta e na razão de viscosidade turbulenta (5% e 10, respectivamente), enquanto que para o segundo um valor de comprimento de escala para ϵ igual ao diâmetro do orifício do aspersor (D_{orif}). O objetivo dessa comparação foi encontrar a configuração que resultasse em resíduos mais estáveis para esse parâmetro durante as simulações por CFD.

Essa avaliação foi feita considerando dois passos de tempos distintos (1.10^{-3} e 1.10^{-4} s) de modo a verificar a influência dessa condição na estabilidade numérica da simulação e no contorno dos diâmetros médios de bolhas obtidos. Pode-se verificar pelas Figuras 6.4a e 6.4c que, para um tempo real de 1,0 segundo de escoamento, os contornos obtidos utilizando o maior passo de tempo apresentaram um comportamento muito similar, com a predominância do fenômeno de quebra na região próxima ao aspersor e de coalescência na região central do biorreator. Esse comportamento era esperado visto que na zona de entrada de ar há a presença de vórtices turbulentos devido um elevado gradiente de velocidade da fase líquida, o qual também é responsável por acelerar as bolhas em direção ao topo do equipamento e favorecer a colisão entre elas.

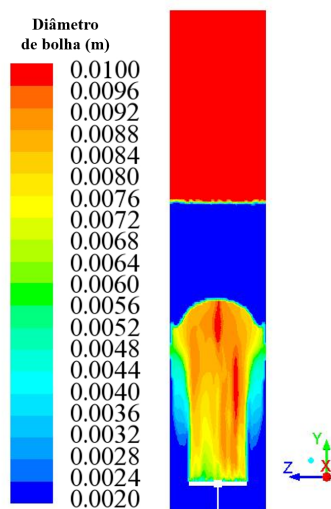
Figura 6.4. Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos pela simulação do conjunto A para tempo real de 1,0 segundo de escoamento para diferentes abordagens para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ϵ) e passos de tempo: (a) Caso A.1: ϵ – Buffo *et al.* (2013) e 1.10^{-3} s, (b) Caso A.2: ϵ – Buffo *et al.* (2013) e 1.10^{-4} s, (c) Caso A.3: ϵ – padrão *Ansys Fluent* e 1.10^{-3} s e (d) Caso A.4: ϵ – padrão *Ansys Fluent* e 1.10^{-4} s.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

No entanto, observa-se que para o passo de tempo de 1.10^{-4} s, Figuras 6.4b e 6.4d, essa similaridade já não existe. Para a simulação em que se utilizou a configuração adotada por Buffo *et al.* (2013) o contorno de diâmetro de bolha apresentou um comportamento em discordância com a física desse tipo de sistema, prevendo a ocorrência do fenômeno de coalescência, por exemplo, em regiões que na prática isso não foi experimentalmente observado (Mendes (2016); Esperança (2018)), como na parede do equipamento para a condição de vazão específica de ar de 1 vvm. Em contrapartida, na simulação com a configuração padrão do *Ansys Fluent*, pode-se visualizar que houve a formação de bolhas de diâmetros menores na região próxima a entrada dos orifícios e de diâmetros maiores na região próxima da interface gás-líquido, similar ao obtido para o passo de tempo de 1.10^{-3} s. O contorno de diâmetro médio de bolha, mostrado na Figura 6.4d, evidencia que os fenômenos de coalescência e quebra, em especial o primeiro, estão presentes ao longo de todo o biorreator, sendo esses responsáveis pela evolução da distribuição de tamanho de bolha ali presente. Com base nos resultados anteriores, utilizou-se do passo de tempo igual a 1.10^{-4} s e da configuração padrão do *Ansys Fluent* para o parâmetro ϵ para simular a frequência de colisão dada pelo modelo de Wang *et al.* (2005). O resultado de contorno de diâmetro de bolha obtido está apresentado na Figura 6.5.

Figura 6.5. Contorno do diâmetro médio de Sauter obtido pela simulação do conjunto A para tempo real de 1,0 segundo de escoamento – Caso A.5.

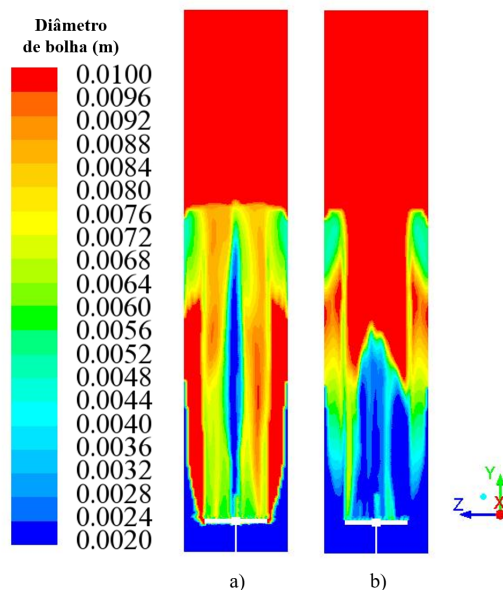


Fonte: Acervo pessoal do Autor

É possível verificar que, em relação ao modelo de Prince e Blanch (1990), o modelo de Wang *et al.* (2005) prevê uma maior intensidade de coalescência entre as bolhas, com destaque para a região central localizada acima do aspersor em que o contorno médio de bolhas apresenta maiores valores quando comparados ao modelo anterior. Essa observação é coerente com as considerações feitas pelos autores na formulação da frequência de quebra, visto que uma das correções foi feita para considerar a redução do espaço livre de movimento das bolhas devido à presença dessas no meio, a qual implica em um aumento na frequência de colisão.

Por fim, com base nas figuras apresentadas, os resultados indicaram a presença de uma instabilidade numérica na interface gás-liquido, principalmente para o caso simulado na Figura 6.4d. Tal instabilidade aparenta estar associada a definição pelo método de um diâmetro para região de ar estagnado presente no topo do biorreator, o qual é definido como o diâmetro máximo correspondente ao maior valor comumente encontrado para as bolhas nesse tipo de sistema. Pela formulação implementada, características como a baixa velocidade da fase gasosa levam a colisões muito eficientes. Dessa forma, acredita-se que a consideração de diâmetros nesse local leva à previsão de fenômenos de coalescência, o que numericamente ficou evidente que esse comportamento ocasiona instabilidade e desvio da resposta obtida em relação ao experimental, como mostrado na Figura 6.6 para um tempo real de 2,0 segundos de escoamento.

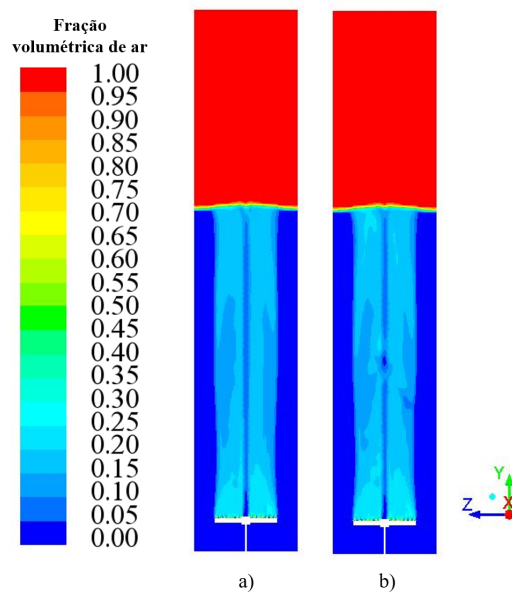
Figura 6.6. Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os modelos de: (a) Prince e Blanch (1990) – Caso A.4 e (b) Wang *et al.* (2005) – Caso A.5 para tempo real de 2,0 segundos de escoamento.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

Ainda para os casos A.4 e A.5 em um tempo real de escoamento de 2,0 segundos, é possível verificar pela Figura 6.7 que os contornos de fração volumétrica de ar são muito similares, indicando a concentração da fase gasosa na região acima do aspersor. Dado a esse comportamento, contrastante com a Figura 6.6, pode-se inferir que o desvio observado no contorno de diâmetro de bolha está associado a problemas numéricos do modelo QMOM, em que a definição dos momentos iniciais na região de ar estagnado acima da interface ar-água pode estar contribuindo para que o fenômeno de coalescência esteja sendo considerado ali e, por consequência, estar afetando as interações entre as bolhas dispersas na fase líquida, visto que a instabilidade na região abaixo da interface surge após a fase gasosa injetada no aspersor ter o primeiro contato com a interface gás-líquido.

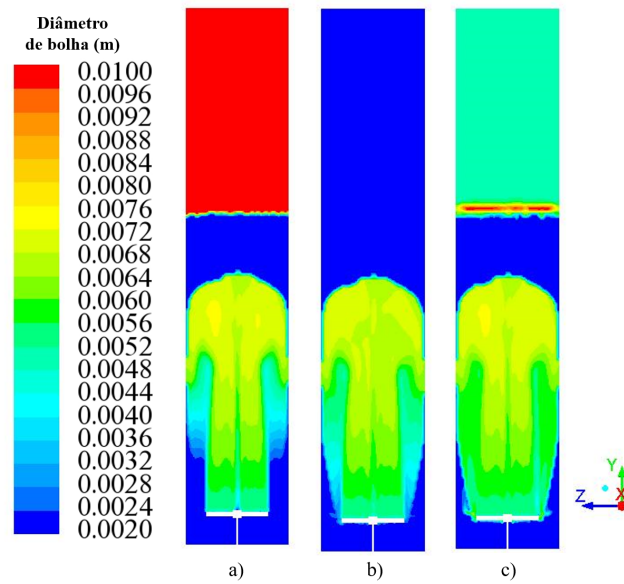
Figura 6.7. Contornos da fração volumétrica de ar obtidos para os modelos de: (a) Prince e Blanch (1990) – Caso A.4 e (b) Wang *et al.* (2005) – Caso A.5 para tempo real de 2,0 segundos de escoamento.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

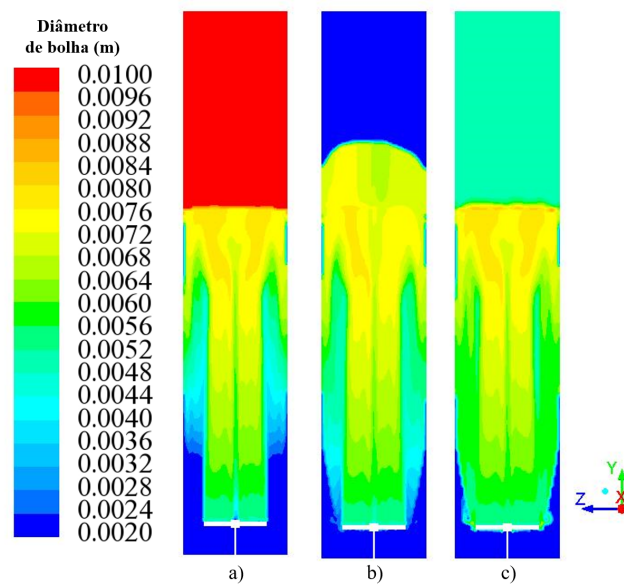
Em virtude disso, foram realizadas as simulações dos casos do conjunto B, buscando avaliar a resposta obtida pelo simulador para diferentes condições iniciais de momento na região de ar estagnado. A atenção para este conjunto esteve voltada para analisar a evolução do diâmetro de bolha presente nessa região acima da interface ar-água e, por consequência, a influência dessa evolução na fase gasosa retida na fase líquida. As Figuras de 6.8 a 6.11 apresentam os contornos de diâmetro de bolha para os casos B.1, B.2 e B.3 para os tempos reais de escoamento de 1,0 , 1,5 , 2,0 e 5,0 segundos, respectivamente.

Figura 6.8. Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) B.1, (b) B.2 e (c) B.3 para o tempo real de escoamento de 1,0 segundo para diferentes momentos iniciais no topo do biorreator.



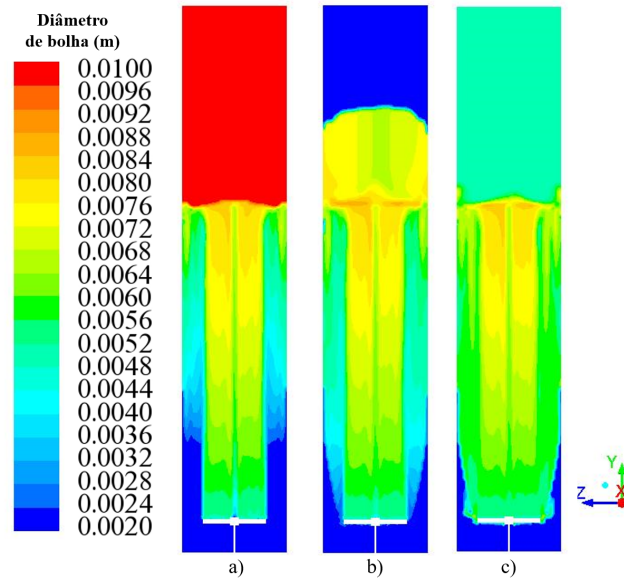
Fonte: Acervo pessoal do Autor

Figura 6.9. Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) B.1, (b) B.2 e (c) B.3 para o tempo real de escoamento de 1,5 segundos para diferentes momentos iniciais no topo do biorreator.



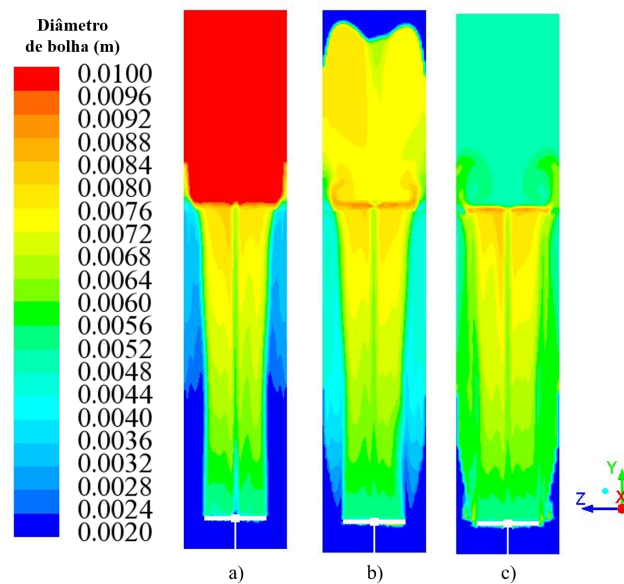
Fonte: Acervo pessoal do Autor

Figura 6.10. Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) B.1, (b) B.2 e (c) B.3 para o tempo real de escoamento de 2,0 segundos para diferentes momentos iniciais no topo do biorreator.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

Figura 6.11. Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) B.1, (b) B.2 e (c) B.3 para o tempo real de escoamento de 5,0 segundos para diferentes momentos iniciais no topo do biorreator.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

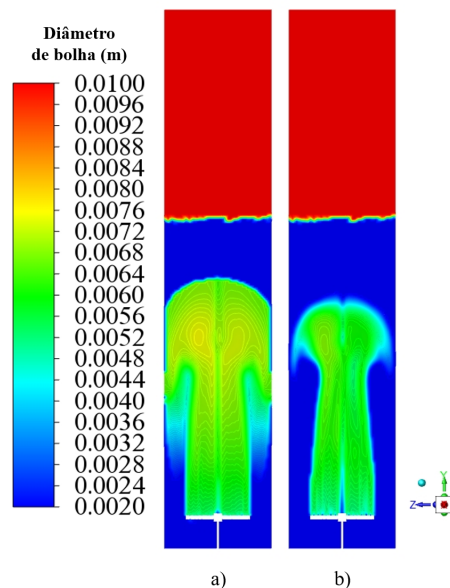
Com base nesses contornos, pode-se verificar que de fato há interação de coalescência na fase gasosa presente nessa região de topo. Como foi possível verificar, para os casos B.2 e B.3, em especial para o primeiro, ocorre uma evolução temporal do diâmetro de bolha a partir da interface, em que a região de ar estagnado começa a apresentar um contorno diferente

do imposto inicialmente. Uma possível explicação para esse comportamento coalescente é que bolhas de diâmetros maiores desprendidas da fase líquida nessa configuração estariam se colidindo com bolhas de menor diâmetro e velocidade ali presentes, ocasionando um aumento no valor do diâmetro considerado para essa região.

Para os três casos pode ser verificado que o escoamento da fase gasosa, do aspersor até o topo do biorreator, foi acompanhado da presença de bolhas próximas a parede, o que permitiu identificar uma diminuição com o tempo no diâmetro de bolha na região próxima à parede à medida que a circulação da fase líquida em direção à base se intensificava. Entretanto, essa resposta não condiz com o comportamento físico uma vez que para a condição de vazão específica utilizada (1 vvm) foi verificado experimentalmente por Mendes (2016) e Esperança (2018) que essa região não conta com a presença de ar.

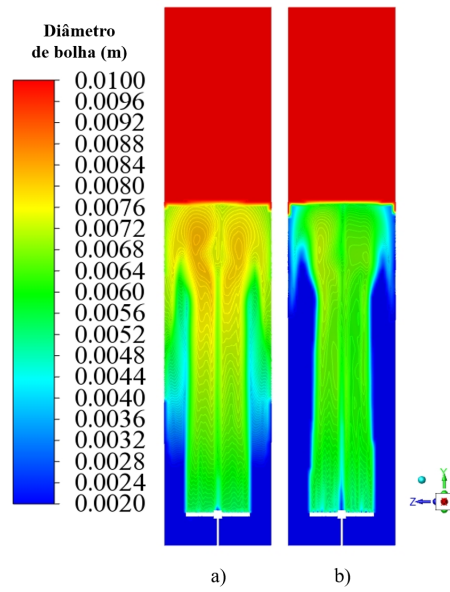
Dessa forma, para adequar a modelagem do diâmetro de bolha em relação a esse comportamento, os casos do conjunto C foram simulados de modo a avaliar a influência do uso de uma restrição para o momento de terceira ordem (m_3) nas regiões em que a fração volumétrica de ar (α_{ar}) é menor ou igual a 0,01. As Figuras de 6.12 a 6.15 apresentam os contornos de diâmetro de bolha para os casos C.1 e C.2 para os tempos reais de escoamento de 1,0 , 1,5 , 2,0 e 2,5 segundos, respectivamente.

Figura 6.12. Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) C.1 e (b) C.2 para o tempo real de escoamento de 1,0 segundo.



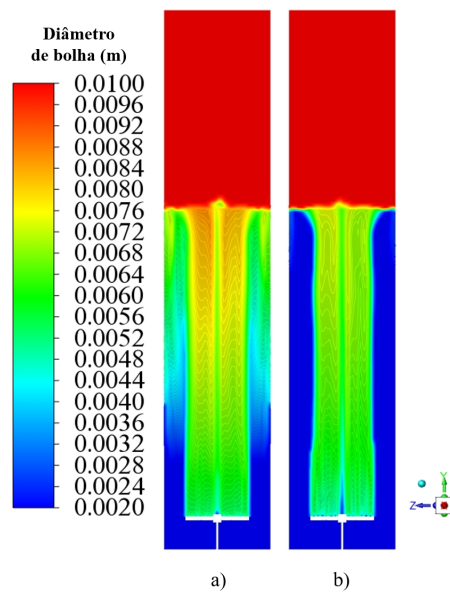
Fonte: Acervo pessoal do Autor

Figura 6.13. Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) C.1 e (b) C.2 para o tempo real de escoamento de 1,5 segundos.



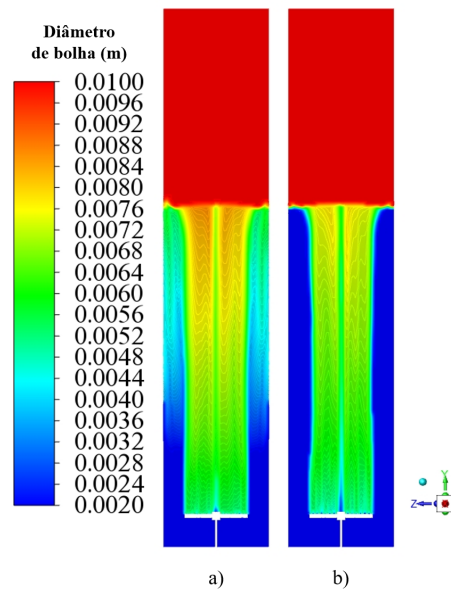
Fonte: Acervo pessoal do Autor

Figura 6.14. Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) C.1 e (b) C.2 para o tempo real de escoamento de 2,0 segundos.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

Figura 6.15. Contornos do diâmetro médio de Sauter obtidos para os Casos: (a) C.1 e (b) C.2 para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.



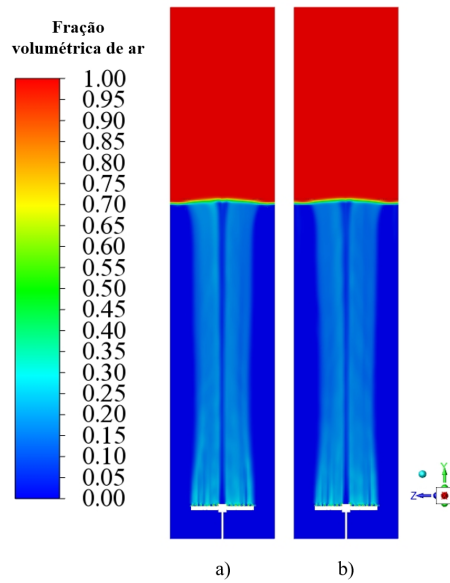
Fonte: Acervo pessoal do Autor

A partir dos contornos exibidos, tem-se que a restrição adotada para o caso C.2 foi capaz de eliminar a presença de diâmetro de bolha nas regiões próximas a parede quando a fase gasosa injetada no aspersor encontra a interface gás-líquido, dando forma a um perfil de diâmetro de bolha localizado notadamente na região acima do aspersor. Essa resposta quando comparada a obtida pelo caso C.1 ilustra que tal restrição se faz necessária para que a modelagem da distribuição de tamanho de bolha no biorreator seja considerada apenas nas regiões em que de fato há a presença da fase gasosa.

Comparando os contornos de fração volumétrica de ar, exibidos na Figura 6.16, é possível verificar para os dois casos para um tempo real de escoamento de 2,5 segundos que os valores obtidos pelo simulador são muito similares mesmo para contornos de diâmetro distintos. Isso evidencia a necessidade de se utilizar uma restrição para o valor de m_3 para que a resposta obtida esteja em concordância com o comportamento físico.

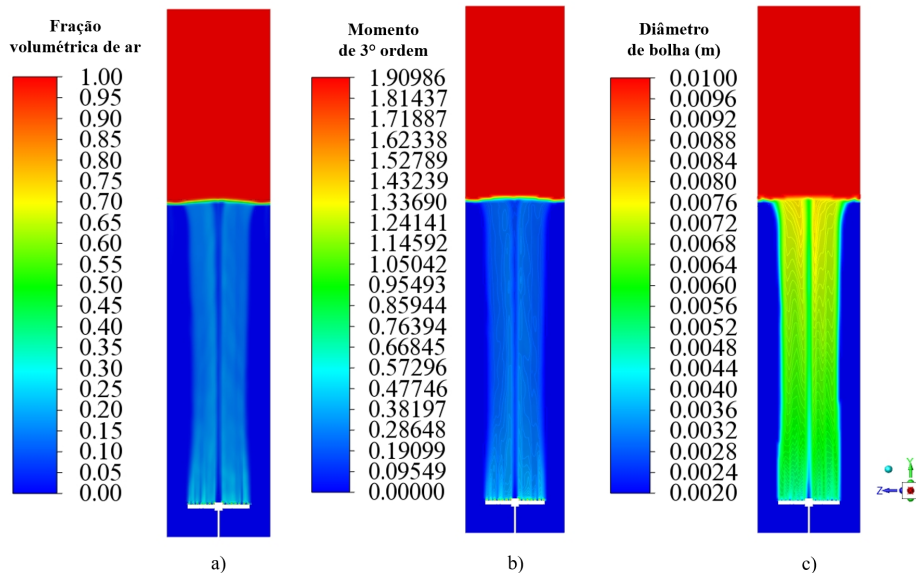
Ademais, o contorno apresentado na Figura 6.15b reflete a proporcionalidade existente do diâmetro de bolha (D_b^{Sauter}) para com o momento de terceira ordem (m_3) e, consequentemente, com a fração volumétrica de ar (α_{ar}), como mostrado na Figura 6.17.

Figura 6.16. Contornos da fração volumétrica de ar obtidos para os Casos: (a) C.1 e (b) C.2 para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

Figura 6.17. Contornos de: (a) Fração volumétrica de ar (α_{ar}), (b) Momento de terceira ordem (m_3) e (c) Diâmetro médio de Sauter (D_b^{Sauter}) para o Caso C.2 para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

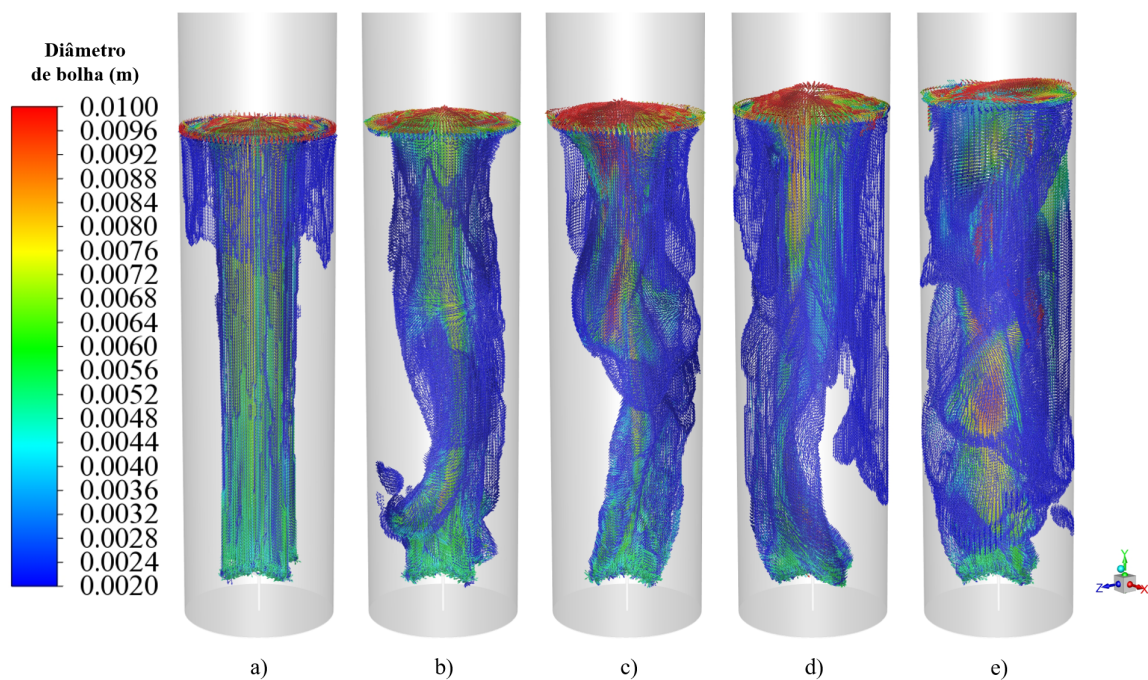
Logo, com base nos resultados obtidos e na discussão feita anteriormente, adotou-se para a simulação das demais condições de vazão específica de ar (2 a 5 vvm) as configurações do caso C.2: intensidade turbulenta de 15% para o contorno no aspersor da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta; valor do momento de terceira ordem igual a $6/\pi$ para a região acima da interface gás-líquido com fração volumétrica de ar maior ou igual a 0,80; valor do

momento de terceira ordem nulo para as regiões que possuem fração volumétrica de ar menor ou igual a 0,01.

As próximas figuras apresentam contornos de nível que foram gerados a partir do *software Fluent* utilizando-se dos vetores velocidade do líquido para indicar a direção do escoamento porém com os mesmos sendo coloridos de acordo com a variável de interesse para a análise. Ademais, os contornos exibem somente valores para as regiões em que a fração volumétrica de ar está contida entre 0,01 e 0,80, o que corresponde a região em que a fase gasosa se encontra dispersa.

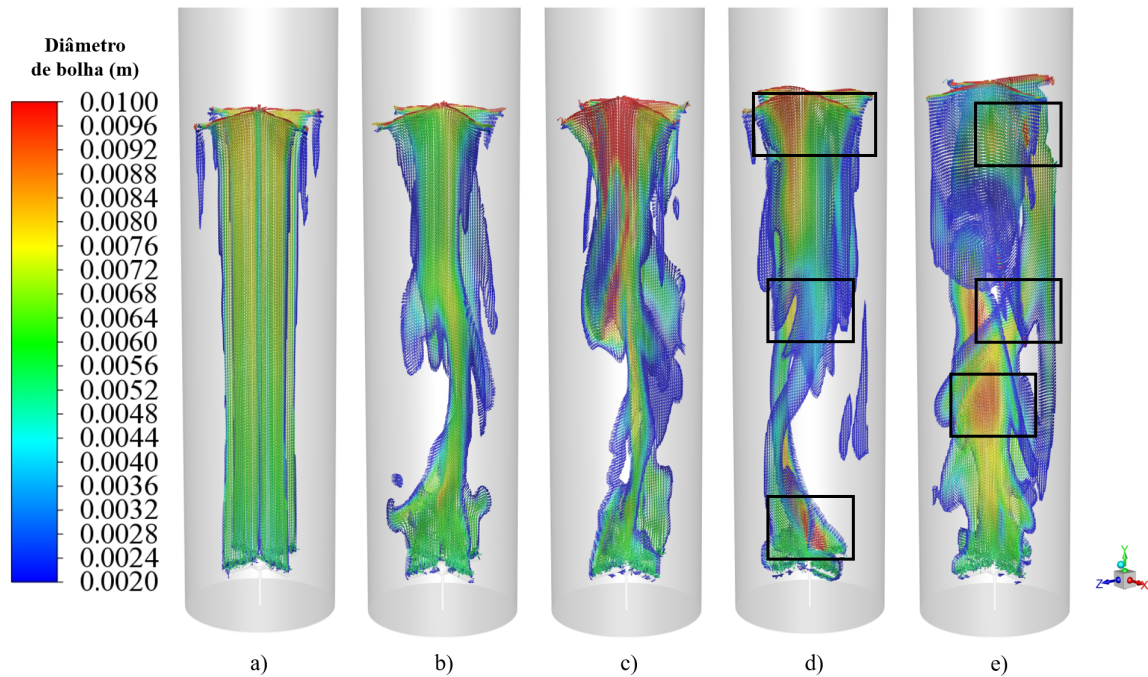
A Figura 6.18 ilustra os valores de diâmetro de bolha obtidos para cada ϕ_{ar} para um tempo real de escoamento de 2,5 segundos considerando somente as regiões em que o valor da fração volumétrica de ar está no intervalo de 0,01 a 0,80. A Figura 6.19 apresenta o mesmo contorno de nível só que para os planos XY e ZY.

Figura 6.18. Contorno de nível do diâmetro médio de Sauter para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm, (b) 2 vvm, (c) 3 vvm, (d) 4 vvm e (e) 5 vvm para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos para o caso C.2.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

Figura 6.19. Contorno de nível do diâmetro médio de Sauter para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm, (b) 2 vvm, (c) 3 vvm, (d) 4 vvm e (e) 5 vvm para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos referente aos planos XY e ZY para o caso C.2.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

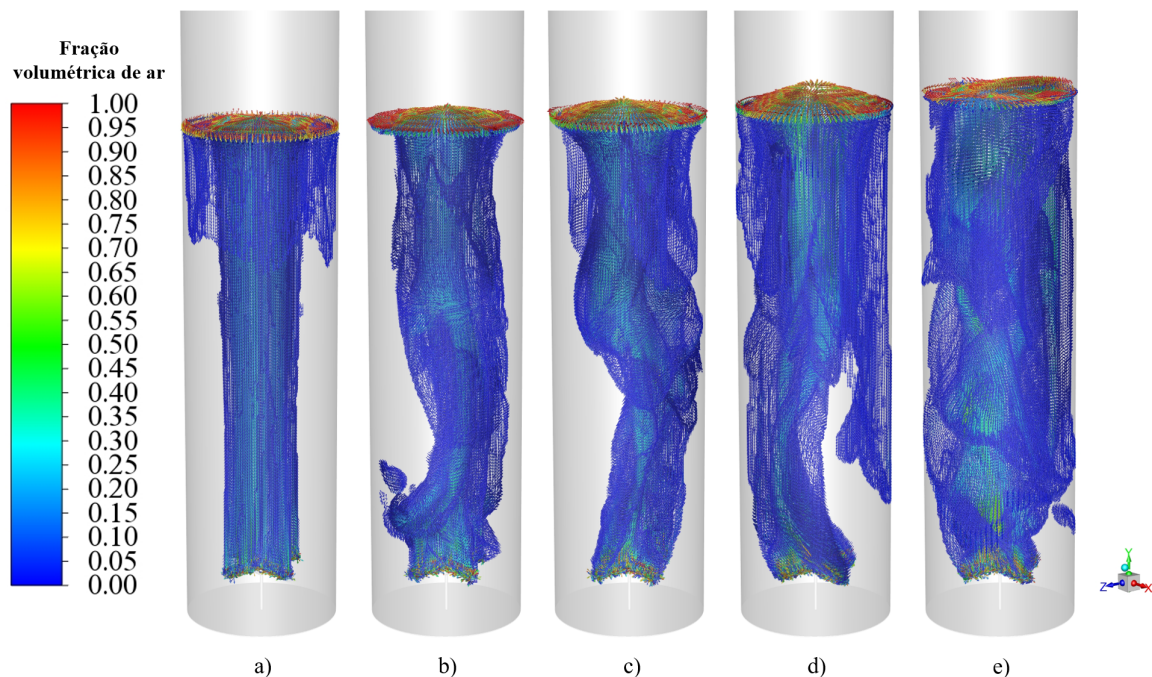
É possível observar que há um predomínio do fenômeno de coalescência ao passo que a vazão específica de ar aumenta de 1 a 3 vvm, visto que os valores de diâmetro de bolha aproximam-se do diâmetro máximo. Além disso, esse fenômeno apresentou uma tendência em ocorrer na região logo abaixo da interface gás-líquido e na região central do biorreator logo acima do aspersor. Para a primeira, devido a região ser um local onde ocorre o desprendimento do gás da fase líquida, um maior acúmulo de ar é observável e, com isso, maior é a probabilidade de se ter colisões entre as bolhas. Já para a segunda, o aumento da vazão específica de ar implica em um aumento na velocidade das bolhas, o que favorece também a colisão entre bolhas e, conseqüentemente, a coalescência delas devido as diferentes velocidades de ascensão.

Para as vazões específicas de ar de 4 e 5 vvm pode-se notar que há um aumento da contribuição do fenômeno de quebra, uma vez que na região logo abaixo da interface gás-líquido os valores de diâmetro de bolha são menores quando comparado aos obtidos pelo simulador para a ϕ_{ar} de 3 vvm. Tal diminuição era esperada pois para essas altas vazões específicas de ar a circulação ali da fase líquida em direção à base do biorreator é mais intensa que nos casos iniciais, o que provoca a instabilidade da interface das bolhas levando-as a quebra. Ademais, para a região entre a interface e o aspersor o escoamento encontra-se em regime turbulento e, em razão disso, o encontro das bolhas com a fase líquida torna-se mais intenso, acarretando no fenômeno da quebra pela colisão delas com os vórtices turbulentos ali presentes.

Ainda para essas duas vazões específicas de ar, vale ressaltar que o fenômeno da coalescência ainda está presente. As altas velocidades das bolhas de ar associadas com a circulação da fase líquida de forma turbulenta tendem a favorecer os mecanismos de colisão devido a presença de vórtice turbulento e ao *Wake entrainment* - caminho preferencial gerado pelo deslocamento de grandes bolhas que atrai bolhas menores ao redor-, resultando em valores de diâmetro de bolha próximos do diâmetro máximo em regiões afastadas da interface gás-líquido. As Figuras 6.19d e 6.19e exibem esse favorecimento, em que logo acima do aspersor há a formação de bolhas com valores de diâmetro próximos ao do máximo com posterior redução acima devido aos vórtices turbulentos e, por fim, um novo aumento em razão do escoamento do ar pela circulação do líquido.

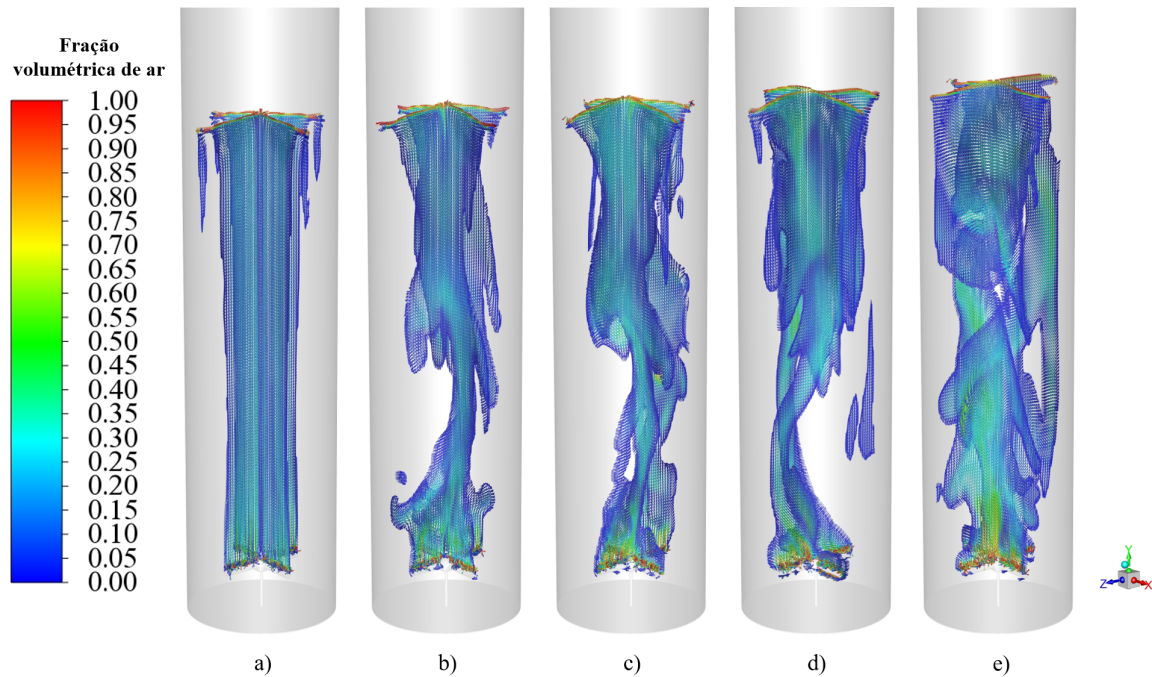
As Figuras 6.20 e 6.21 apresentam os valores de fração volumétrica de ar obtidos para cada ϕ_{ar} para um tempo real de escoamento de 2,5 segundos considerando somente as regiões em que o valor da fração volumétrica de ar está no intervalo de 0,01 a 0,80. Como já comentado, o diâmetro de bolha pelo QMOM possui uma relação de proporcionalidade com a fração volumétrica de ar. Dessa forma, os mesmos comportamentos que foram discutidos para os valores de diâmetro de bolha se estendem para essa variável.

Figura 6.20. Contorno de nível da fração volumétrica de ar para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm, (b) 2 vvm, (c) 3 vvm, (d) 4 vvm e (e) 5 vvm para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos para o caso C.2.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

Figura 6.21. Contorno de nível da fração volumétrica de ar para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm, (b) 2 vvm, (c) 3 vvm, (d) 4 vvm e (e) 5 vvm para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos referente aos planos XY e ZY para o caso C.2.

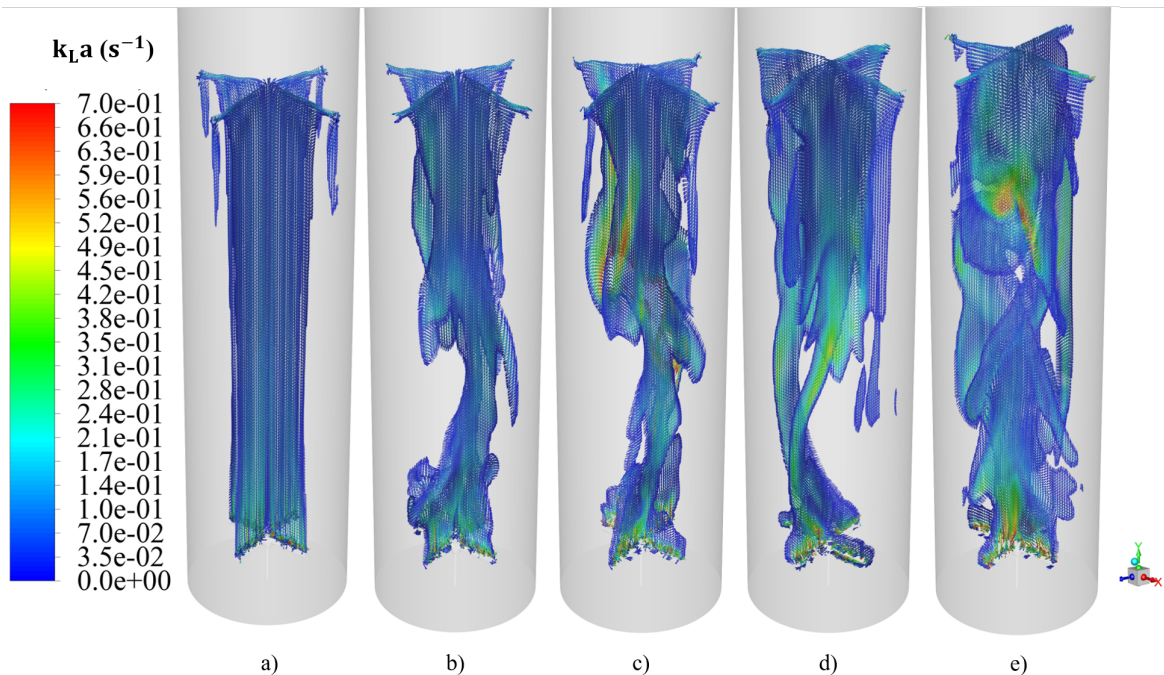


Fonte: Acervo pessoal do Autor

A partir dos contornos de nível para a fração volumétrica de ar, pode-se notar que o aumento da vazão específica de ar provoca um aumento na retenção gasosa no biorreator, o que pode ser visto pelo deslocamento da interface gás-líquido em direção ao topo. Além disso, há uma maior concentração da fase gasosa preferencialmente na região acima do aspensor, a qual deixa de ter o comportamento verticalizado para se tornar mais distribuída pelo biorreator ao passo que a vazão específica de ar aumenta. Isso se deve pelo da circulação da fase líquida e do consequente aumento da turbulência, os quais são responsáveis por arrastar as bolhas de ar para as regiões mais próximas da parede.

A Figura 6.22 exhibe o contorno de nível do coeficiente volumétrico de transferência de massa ($k_L a$). Os seus valores foram calculados localmente a partir do produto de k_L e a seguindo as equações descritas na seção 5.5.2.

Figura 6.22. Contorno de nível de $k_L a$ para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm, (b) 2 vvm, (c) 3 vvm, (d) 4 vvm e (e) 5 vvm para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos referente aos planos XY e ZY para o caso C.2.

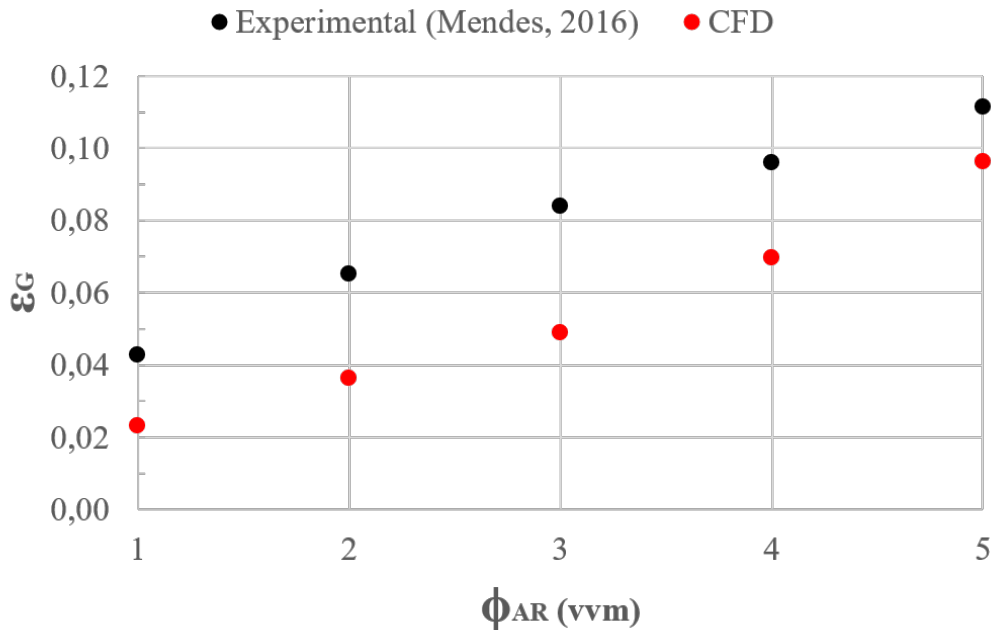


Fonte: Acervo pessoal do Autor

É possível notar pelos contornos exibidos que essas variáveis são diretamente influenciadas pelo diâmetro de bolha existente no escoamento, em que para valores pequenos de diâmetro tem-se os maiores valores de k_L , a e, conseqüentemente, $k_L a$. Sendo assim, pode-se inferir por esses contornos as regiões nas quais a transferência de massa é favorecida no biorreator e que isso ocorre para as maiores vazões específicas de ar em função da presença do fenômeno de quebra devido à turbulência acentuada da fase líquida.

A partir das respostas obtidas pela simulador para as vazões específicas de ar de 1 a 5 vvm, obteve-se os valores médios das seguintes variáveis: retenção gasosa global (ε_G); diâmetro médio de bolha (D_b^{Sauter}); e coeficiente volumétrico de transferência de massa ($k_L a$). Tais valores foram calculados afim de comparar a resposta do simulador frente aos dados experimentais presentes no trabalho de Mendes (2016). As Figura de 6.23 a 6.26 apresentam os gráficos contendo os valores obtidos.

Figura 6.23. Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.



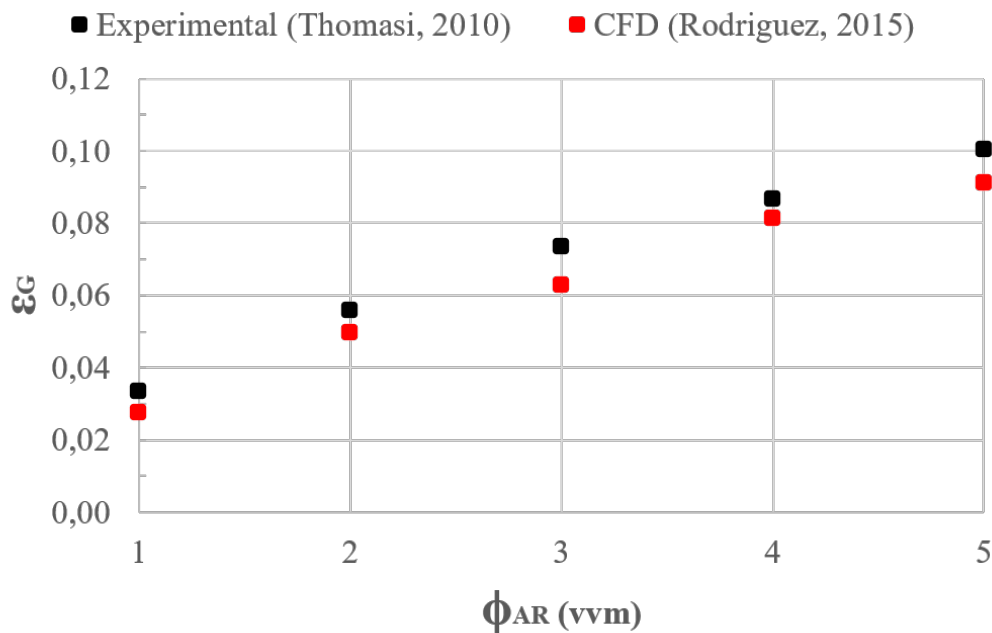
Fonte: Acervo pessoal do Autor

O simulador foi capaz de prever um comportamento para a retenção gasosa global similar ao observado experimentalmente, em que o aumento da vazão específica de ar leva a um aumento no volume de gás retido na fase líquida. O maior erro relativo foi observado para a vazão específica de alimentação de ar de 1 vvm, tendo sido de 46% em relação ao valor experimental enquanto que o menor erro foi obtido para a vazão de 5 vvm, tendo sido de 14%. Tem-se que os erros relativos reduzem ao passo que ϕ_{ar} aumenta.

Tal comportamento está associado ao tempo de escoamento, em que para altas vazões o tempo de escoamento de 2,5 segundos faz com que o sistema esteja mais próximo do regime pseudo-estacionário do que para vazões menores nessa mesma condição. Isso significa que a interface gás-líquido na região do topo do biorreator encontra-se próxima do seu valor máximo para as vazões maiores, ao passo que para as menores ela tende ainda a se desenvolver de modo a atingir seu valor máximo para um tempo de escoamento superior a 2,5 segundos.

A Figura 6.24 exibe os valores de retenção gasosa global obtidos por Rodriguez (2015) a partir de CFD e os dados experimentais de Thomasi (2010) utilizados na comparação. Rodriguez (2015) utilizou em suas simulações uma modelagem que considerou diâmetro de bolha fixo e igual a 5,0 mm e uma Coluna de Bolhas em que a sua altura e a altura inicial do líquido antes da aeração tiveram os valores iguais a 600 mm e 450 mm, respectivamente. Além do mais, as respostas foram obtidas pelo simulador para um tempo de escoamento de 5,0 segundos para todas as vazões específicas de alimentação de ar.

Figura 6.24. Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar para o tempo real de escoamento de 5 segundos obtida por Rodriguez (2015) para Coluna de Bolhas com altura total de 600 mm e altura inicial de líquido antes da aeração de 450 mm.

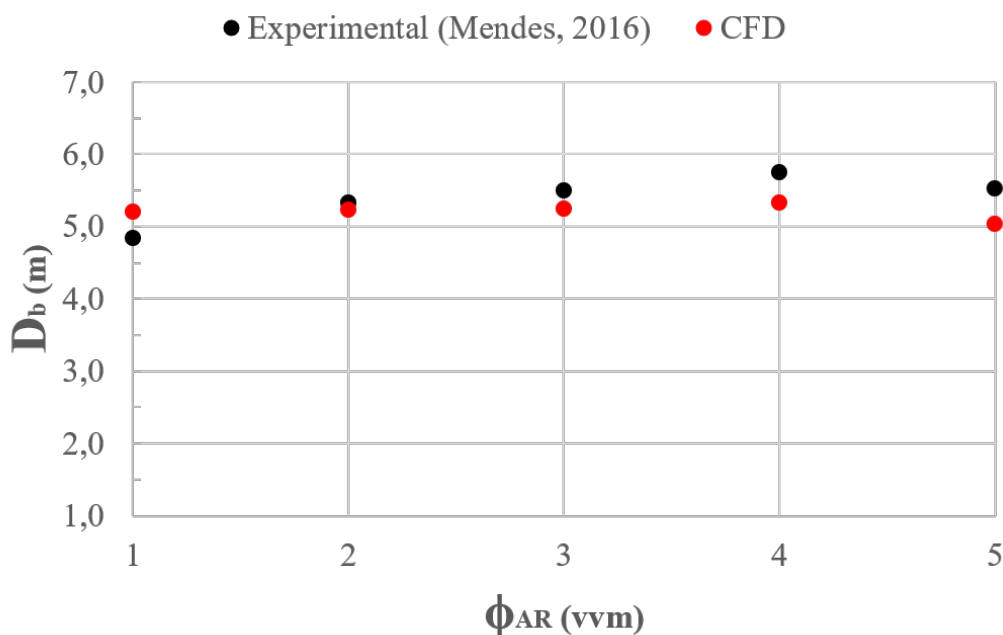


Fonte: Acervo pessoal do Autor

Assim como na Figura 6.23, a Figura 6.24 exibe um mesmo comportamento para o perfil da retenção gasosa global, em que há um aumento no seu valor, ou seja, no volume de gás retido na fase líquida com um aumento de ϕ_{ar} . O maior erro relativo obtido foi de 17% para a vazão de 1 vvm. A maior precisão do simulador utilizado por Rodriguez (2015) pode estar atrelado ao tempo de escoamento, visto que no trabalho desse autor as simulações foram conduzidas até o tempo real de 5,0 segundos, o qual seria suficiente para desenvolver a circulação do líquido e, por consequência, fazer com que a altura da interface gás-líquido atingisse seu valor máximo em estado pseudo-estacionário.

A Figura 6.25 apresenta os valores de diâmetro médio de bolha obtido pelo simulador por meio do Método de Quadratura de Momento (QMOM). Os valores de diâmetro médio de bolha obtidos pelas simulações foram muito próximos dos coletados experimentalmente. O maior erro relativo calculado foi de 9% e foi obtido para a vazão de 5 vvm, sendo que para a vazão de 2 vvm foi igual a 2%. Assim, tem-se que o simulador obteve êxito em estimar o valor de D_b^{Sauter} considerando a existência dos fenômenos de quebra e coalescência.

Figura 6.25. Diâmetro médio de bolha de ar em função da vazão específica de ar para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.

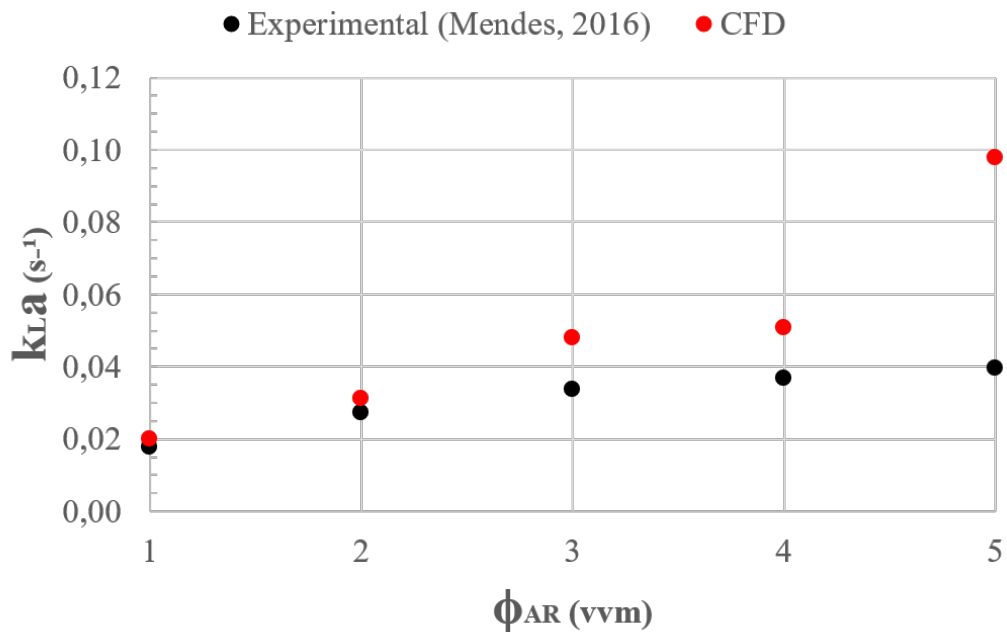


Fonte: Acervo pessoal do Autor

Tal resultado destaca a vantagem da modelagem da distribuição de tamanho de bolha a partir das EBPs, em que é possível considerar a existência de bolhas com diferentes tamanhos e de suas interações sem que os valores médios das variáveis de interesse se distanciem dos observados experimentalmente, algo que não pode ser alcançado utilizando-se um diâmetro fixo e constante. Também, tem-se que a escolha do modelo de Prince e Blanch (1990) foi adequada para representar o frequência de colisão de bolhas assim como o valor da constante C_1 obtido por meio do balanço global de momentos juntamente com o modelo de Lehr *et al.* (2002) para a eficiência de colisão e Laakkonen *et al.* (2006) e Laakkonen *et al.* (2007) para os modelos de quebra.

Os valores do coeficiente volumétrico de transferência de massa k_{La} foram obtidos por meio de média volumétrica. A Figura 6.26 apresenta esses valores médios obtidos para cada vazão específica de ar avaliada.

Figura 6.26. Coeficiente volumétrico de transferência de massa em função da vazão específica de ar para o tempo real de escoamento de 2,5 segundos.



Fonte: Acervo pessoal do Autor

O simulador foi capaz também de estimar os valores obtidos para o coeficiente volumétrico de transferência de massa (k_{La}) muito similar ao experimental para as vazões de 1 a 4 vvm, enquanto que foi subestimado para a vazão de 5 vvm. Isso pode ser consequência da modelagem de k_L , uma vez que ela considera as bolhas com o formato de esfera, o que já não pode ser garantido para altas vazões específicas de ar em que as bolhas começam a sofrer deformações em sua interface, como discutido por Rodriguez (2015). Tem-se que o menor erro relativo foi de 12% para a vazão de 1 vvm. Já o menor erro relativo para os valores obtidos por Rodriguez (2015) foi de 30%, o que indica que a utilização de equações de balanço populacional possuem uma vantagem em prever com maior precisão o valor do k_{La} . Ademais, o simulador dele subestimou os valores dessa variável, o que ocorreu devido o mesmo considerar um diâmetro fixo e, conseqüentemente, não contabilizar o fenômeno de coalescência.

7 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Conclui-se a partir dos resultados obtidos nesta dissertação de Mestrado que:

- O desenvolvimento de rotina Python mostrou-se útil para estimar as constantes dos modelos de frequência de colisão abordados por meio do balanço global de momentos, sendo seu uso vantajoso para avaliar diferentes modelagens de interesse a um custo computacional muito baixo quando comparado às simulações tridimensionais.
- As condições de contorno adotadas para o problema 3D e os momentos iniciais empregados para as equações de balanço populacional mostraram-se capazes de reproduzir o sistema ar-água do biorreator coluna de bolhas estudado. Os momentos iniciais aplicados para a região de ar acima da superfície ar-água apresentaram influência nas distribuições de tamanho de bolhas obtidas, indicando que os valores ali adotados devem ser definidos corretamente afim de evitar que instabilidades numéricas e desvios na resposta simulada ocorram.
- É necessário restringir o valor do momento de terceira ordem para a região onde a fase líquida se encontra para garantir a proporcionalidade existente entre fração volumétrica de ar, momento de terceira ordem e diâmetro de bolha.
- Com bases nos casos dos conjuntos A, B e C, foi possível concluir que a melhor configuração para simular tridimensionalmente por CFD um biorreator Coluna de Bolhas corresponde ao caso C.2: intensidade turbulenta de 15% para o contorno no aspersor da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta; valor do momento de terceira ordem igual a $6/\pi$ para a região acima da interface gás-líquido com fração volumétrica de ar maior ou igual a 0,80; valor do momento de terceira ordem nulo para a regiões que possuem fração volumétrica de ar menor ou igual a 0,01.
- As altas velocidades de ascensão das bolhas de ar intensificam a frequência de colisão entre elas, favorecendo o fenômeno de coalescência com o aumento da vazão específica de ar notadamente para as de valor de 1 a 3 vvm. Além disso, a coalescência em razão da presença de vórtices turbulentos e do carregamento da fase gasosa ao longo do biorreator devido ao escoamento é mais marcante para as vazões específicas de ar de 4 e 5 vvm.
- A presença de turbulência no escoamento para as maiores vazões específicas de ar favorece o fenômeno de quebra, de modo que o choque entre os vórtices turbulentos e as bolhas de ar provoca a redução do tamanho das mesmas. Isso pode ser observado para as regiões entre a interface gás-líquido e o aspersor, em especial para as vazões específicas de ar de 4 e 5 vvm para as quais há a presença de fenômenos de coalescência seguidos de quebra ao passo que o ar desloca em direção ao todo do biorreator.

- Para vazões específicas de ar de 1 a 3 vvm há a predominância do fenômeno de coalescência na região abaixo da interface gás-líquido. Já para as vazões específicas de 4 e 5 vvm o fenômeno de quebra torna-se pronunciado em razão da velocidade de circulação do líquido e da turbulência do sistema.
- Os resultados de Rodriguez (2015), o qual considerou diâmetro fixo, se mostraram mais precisos em estimar os valores da retenção gasosa global. No entanto, não é possível afirmar que o simulador que incorpora as equações de balanço populacional não seja capaz de gerar resultados precisos. Faz-se necessário simular os casos até o tempo de escoamento de 5,0 s para que a comparação entre os resultados possa ser feita de forma mais assertiva.
- Os contornos de diâmetro médio de Sauter obtidos reforçam as vantagens que esse tipo de abordagem CFD tem a oferecer no estudo de Coluna de Bolhas, permitindo saber localmente a distribuição de tamanho de bolhas e a sua evolução ao longo do escoamento. A busca pela obtenção de contornos coerentes fisicamente foi uma das contribuições visadas por esse trabalho.
- O mesmo ocorre para os contornos de $k_L a$, onde é possível visualizar as regiões em que a transferência de massa ocorrem com maior intensidade. Tal visualização permite compreender os fenômenos de transferência e vantajosa para ser utilizada como base para estudos de aumento de eficiência de um biorreator Coluna de Bolhas. Os menores erros relativos foram obtidos pelo simulador deste trabalho que considera os fenômenos de quebra e coalescência em sua modelagem.
- O Método da Quadratura de Momentos (QMOM) foi capaz de estimar corretamente os valores de diâmetro médio de bolha para as vazões específicas de ar estudadas, sendo então recomendado para simulações que consideram em sua modelagem uma distribuição de tamanho e sua evolução temporal em razão dos fenômenos de quebra e coalescência.
- A partir dos inúmeros esforços investidos no estudo, na coleta de informações e no desenvolvimento de ferramenta auxiliar para implementar e simular o método QMOM, conclui-se que o conhecimento apresentado aqui nesta dissertação permite representar a hidrodinâmica do sistema e a transferência de massa para simulações CFD que consideram a presença de diferentes bolhas em um biorreator Coluna de Bolhas.

Sugere-se para trabalhos futuros:

- Avaliar diferentes modelos de turbulência visto que parâmetros de turbulência, como a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ϵ), costumam apresentar instabilidades numéricas durante as simulações CFD, principalmente para aquelas que incluem a modelagem de distribuição de tamanho de bolha.

- Utilizar uma malha computacional com maior refino de modo a avaliar a sua contribuição na obtenção de respostas mais precisas para os parâmetros de desempenho.
- Adotar um passo de tempo menor que 0,001 segundos com a finalidade de comparar a resposta obtida para esse passo de tempo com a obtida nesta dissertação.
- Considerar outros modelos de coalescência, como o de Wang *et al.* (2005), na modelagem do fenômeno de coalescência para que se possa avaliar a contribuição do mesmo para obtenção de uma resposta mais precisa pelo simulador. O mesmo para os modelos de quebra.
- Avaliar outras correlações para o cálculo do $k_L a$, seja global ou localmente, de modo a potencializar a vantagem que o uso das equações de balanço populacional apresentam: uma distribuição de tamanho de bolha.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Referências

- Alopaeus, V., Koskinen, J., Keskinen, K. I. e Majander, J. (2002). Simulation of the population balances for liquid–liquid systems in a nonideal stirred tank. part 2—parameter fitting and the use of the multiblock model for dense dispersions. *Chemical Engineering Science*, **57**(10), 1815–1825.
- Besagni, G., Inzoli, F., Ziegenhein, T. e Lucas, D. (2017). Computational fluid-dynamic modeling of the pseudo-homogeneous flow regime in large-scale bubble columns. *Chemical Engineering Science*, **160**, 144–160.
- Buffo, A., Marchisio, D. L., Vanni, M. e Renze, P. (2013). Simulation of polydisperse multiphase systems using population balances and example application to bubbly flows. *Chemical engineering research and design*, **91**(10), 1859–1875.
- Buffo, A., De Bona, J., Vanni, M. e Marchisio, D. L. (2016). Simplified volume-averaged models for liquid–liquid dispersions: Correct derivation and comparison with other approaches. *Chemical Engineering Science*, **153**, 382–393.
- Chesters, A. (1991). Modelling of coalescence processes in fluid-liquid dispersions: a review of current understanding. *Chemical engineering research and design*, **69**(A4), 259–270.
- Coulaloglou, C. e Tavlarides, L. L. (1977). Description of interaction processes in agitated liquid-liquid dispersions. *Chemical Engineering Science*, **32**(11), 1289–1297.
- Coulaloglou, C. A. (1975). *Dispersed Phase Interactions in an Agitated Flow Vessel*. Illinois Institute of Technology.
- Esperança, M. N. (2018). *Contribuição ao estudo do desempenho de biorreatores airlift de circulação interna: análise das condições operacionais e da geometria do equipamento*. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Universidade Federal de São Carlos.
- Esperança, M. N., Mendes, C. E., Rodriguez, G. Y., Cerri, M. O., Bettega, R. e Badino, A. C. (2020). Sparger design as key parameter to define shear conditions in pneumatic bioreactors. *Biochemical Engineering Journal*, **157**, 107529.
- Gemello, L. (2018). *Modelling of the hydrodynamics of bubble columns using a two-fluid model coupled with a population balance approach*. Ph.D. thesis, Université de Lyon; Politecnico di Torino.

- Gemello, L., Plais, C., Augier, F. e Marchisio, D. L. (2019). Population balance modelling of bubble columns under the heterogeneous flow regime. *Chemical Engineering Journal*, **372**, 590–604.
- Gilli, E. (2020). *Population Balance Modelling of bubble sizes in gas-liquid flows with complex physical properties. application of the quadrature method of moments to stirred tanks and bubble columns*. Master's thesis, Politecnico di Torino.
- Grace, J. R. (1976). Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, **54**, 167.
- Guo, K., Wang, T., Liu, Y. e Wang, J. (2017). Cfd-pbm simulations of a bubble column with different liquid properties. *Chemical Engineering Journal*, **329**, 116–127.
- Hean, L. (1993). *Coalescence, breakup and liquid circulation in bubble column reactors*. Ph.D. thesis, Norwegian Institute of Technology.
- Hounslow, M., Ryall, R. e Marshall, V. (1988). A discretized population balance for nucleation, growth, and aggregation. *AIChE journal*, **34**(11), 1821–1832.
- Huang, Z., McClure, D. D., Barton, G. W., Fletcher, D. F. e Kavanagh, J. M. (2018). Assessment of the impact of bubble size modelling in cfd simulations of alternative bubble column configurations operating in the heterogeneous regime. *Chemical Engineering Science*, **186**, 88–101.
- Khalil, A., Rosso, D. e DeGroot, C. T. (2021). Effects of flow velocity and bubble size distribution on oxygen mass transfer in bubble column reactors—a critical evaluation of the computational fluid dynamics-population balance model. *Water Environment Research*, **93**(10), 2274–2297.
- Laakkonen, M., Alopaeus, V. e Aittamaa, J. (2006). Validation of bubble breakage, coalescence and mass transfer models for gas-liquid dispersion in agitated vessel. *Chemical engineering science*, **61**(1), 218–228.
- Laakkonen, M., Moilanen, P., Alopaeus, V. e Aittamaa, J. (2007). Modelling local bubble size distributions in agitated vessels. *Chemical Engineering Science*, **62**(3), 721–740.
- Lehr, F., Millies, M. e Mewes, D. (2002). Bubble-size distributions and flow fields in bubble columns. *AIChE Journal*, **48**(11), 2426–2443.
- Liao, Y. e Lucas, D. (2009). A literature review of theoretical models for drop and bubble breakup in turbulent dispersions. *Chemical Engineering Science*, **64**(15), 3389–3406.
- Liao, Y. e Lucas, D. (2010). A literature review on mechanisms and models for the coalescence process of fluid particles. *Chemical Engineering Science*, **65**(10), 2851–2864.

- Luo, H. e Svendsen, H. F. (1996). Theoretical model for drop and bubble breakup in turbulent dispersions. *AIChE journal*, **42**(5), 1225–1233.
- Marchisio, D. L. e Fox, R. O. (2013). *Computational models for polydisperse particulate and multiphase systems*. Cambridge University Press.
- Marchisio, D. L., Vigil, R. D. e Fox, R. O. (2003a). Implementation of the quadrature method of moments in cfd codes for aggregation–breakage problems. *Chemical Engineering Science*, **58**(15), 3337–3351.
- Marchisio, D. L., Vigil, R. D. e Fox, R. O. (2003b). Quadrature method of moments for aggregation–breakage processes. *Journal of colloid and interface science*, **258**(2), 322–334.
- McGraw, R. (1997). Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments. *Aerosol science and Technology*, **27**(2), 255–265.
- Mendes, C. E. (2016). *Avaliação das condições hidrodinâmicas, de transferência de oxigênio e de cisalhamento em diferentes modelos e escalas de reatores pneumáticos*. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Universidade Federal de São Carlos.
- Petitti, M., Nasuti, A., Marchisio, D. L., Vanni, M., Baldi, G., Mancini, N. e Podenzani, F. (2010). Bubble size distribution modeling in stirred gas–liquid reactors with qmom augmented by a new correction algorithm. *AIChE Journal*, **56**(1), 36–53.
- Prince, M. J. e Blanch, H. W. (1990). Bubble coalescence and break-up in air-sparged bubble columns. *AIChE journal*, **36**(10), 1485–1499.
- Randolph, A. e Larson, L. (1971). Theory of particulate processes: Analysis and techniques of continuous crystallization.
- Rodrigues, J. P. (2018). *Avaliação de modelos matemáticos para a simulação do escoamento água–ar na flotação por ar dissolvido utilizando fluidodinâmica computacional*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Universidade Federal de São Carlos.
- Rodriguez, G. Y. (2015). *Avaliação de parâmetros globais de desempenho de biorreatores pneumáticos através de fluidodinâmica computacional*. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Universidade Federal de São Carlos.
- Sarhan, A., Naser, J. e Brooks, G. (2018). Cfd modeling of bubble column: Influence of physico-chemical properties of the gas/liquid phases properties on bubble formation. *Separation and Purification Technology*, **201**, 130–138.

- Syed, A. H., Boulet, M., Melchiori, T. e Lavoie, J.-M. (2017). Cfd simulations of an air-water bubble column: Effect of luo coalescence parameter and breakup kernels. *Frontiers in Chemistry*, **5**, 68.
- Thomasi, S. S. (2010). *Avaliação de parâmetros de desempenho de três modelos de biorreatores pneumáticos de bancada*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química. Universidade Federal de São Carlos.
- Wang, T., Wang, J. e Jin, Y. (2005). Population balance model for gas- liquid flows: Influence of bubble coalescence and breakup models. *Industrial & engineering chemistry research*, **44**(19), 7540–7549.
- Wright, D. L. (2007). Numerical advection of moments of the particle size distribution in eulerian models. *Journal of Aerosol Science*, **38**(3), 352–369.
- Yan, P., Jin, H., He, G., Guo, X., Ma, L., Yang, S. e Zhang, R. (2020). Numerical simulation of bubble characteristics in bubble columns with different liquid viscosities and surface tensions using a cfd-pbm coupled model. *Chemical Engineering Research and Design*, **154**, 47–59.
- Yang, G., Zhang, H., Luo, J. e Wang, T. (2018). Drag force of bubble swarms and numerical simulations of a bubble column with a cfd-pbm coupled model. *Chemical Engineering Science*, **192**, 714–724.