



Universidade Federal de São Carlos
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química



Ana Carolina Borges Silva

**AVALIAÇÃO NUMÉRICO-
EXPERIMENTAL DA HIDRODINÂMICA
E DA TRANSFERÊNCIA DE OXIGÊNIO
EM BIORREATOR COLUNA DE
BOLHAS UTILIZANDO
FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

São Carlos – SP
28 de abril de 2023



Universidade Federal de São Carlos
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química



Ana Carolina Borges Silva

Avaliação Numérico-Experimental da Hidrodinâmica e da Transferência de Oxigênio em Biorreator Coluna De Bolhas utilizando Fluidodinâmica Computacional

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como requisito para a obtenção do Título de Doutor em Engenharia Química na área de concentração de Pesquisa e Desenvolvimento de Processos Químicos.

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Béttega

Coorientador: Prof. Dr. Alberto Colli Badino Junior

São Carlos – SP

28 de abril de 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 Tese de Doutorado da candidata Ana Carolina Borges Silva, realizada em 28/04/2023

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. RODRIGO BÉTTEGA (UFSCar)

Prof. Dr. ALBERTO COLLI BADINO (UFSCar)

Dr. MATEUS NORDI ESPERANÇA (IFSP – Campus Capivari)

Prof. Dr. GABRIEL HENRIQUE JUSTI (UNIPAMPA)

Prof. Dr. MARCEL OTÁVIO CERRI (UNESP)

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

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço a Deus pelo dom da vida, pela proteção e por ter me permitido conquistar mais um sonho.

Aos meus pais por todo o incentivo, perseverança e lutas para que eu pudesse vivenciar mais essa etapa, e experienciar tantos momentos importantes. À minha irmã, Ana Paula Silva Capuci, por me entender, me aconselhar e ser minha melhor amiga durante toda essa jornada. Ao meu namorado, Gustavo Batista, por ser o melhor companheiro nas horas mais difíceis e pelas incontáveis horas de alegrias. Ao meu cunhado, Marcos Capuci, pela amizade, companheirismo e apoio.

Aos meus melhores companheiros Theo, Tuniquinha, Dio, Jujuba, Ozzy, Thor, Joe e Sabrininha, que me propiciaram infinitos momentos de felicidade e permaneceram comigo em todos os momentos dessa jornada.

Agradeço, especialmente, ao meu orientador, Prof. Dr. Rodrigo Béttega, pela confiança em meu trabalho, compreensão, atenção e cortesia sempre presentes, sendo exemplo de pesquisador por excelência a seus orientados. Agradecimento especial também ao coorientador deste trabalho, Prof. Dr. Alberto Colli Badino, por todas as importantes contribuições e pelo constante incentivo à minha pesquisa.

A todos os colegas dos laboratórios LabSem e de Bioquímica pelo apoio e pelos ensinamentos, além de tantos momentos de alegria vivenciados juntos.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo financiamento através da bolsa de pesquisa nº 141149/2020-5.

Aos professores e funcionários do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da UFSCar pelos ensinamentos e assistência durante todo o período. E a todos que, mesmo aqui não citados, contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho.

*“Mas é preciso ter manha, é preciso ter graça
É preciso ter sonho sempre
Quem traz na pele essa marca
Possui a estranha mania de ter fé na vida”*

Milton Nascimento

Este trabalho é dedicado aos meus pais, Ronas e Aparecida.

RESUMO

Biorreatores pneumáticos fazem parte de uma classe de reatores cada vez mais utilizada em bioprocessos, pois proporcionam transferências de calor e massa adequadas, rápida mistura e boa suspensão de sólidos. No estudo dos fenômenos de transferência em equipamentos de engenharia, a fluidodinâmica computacional (CFD- Computational Fluid Dynamic) vem se destacando, sendo resolvidas as equações de conservação de quantidade de movimento, energia e massa para descrever a fluidodinâmica do processo. Neste trabalho, a hidrodinâmica de um biorreator coluna de bolhas de seção quadrada foi avaliada experimentalmente e numericamente por meio de simulações CFD, sendo analisadas a retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$), o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{LA}) e as taxas de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) e máxima ($\dot{\gamma}_{max}$). A resposta simulada foi comparada para diferentes diâmetros de bolhas de 4,5 e 6 mm considerando a abordagem Euler – Euler, e se utilizando nas simulações numéricas diferentes vazões específicas de alimentação de ar (1,0; 3,0 e 5,0 vvm) e as forças interfaciais de arrasto e sustentação. Após a definição do melhor modelo matemático, foram inseridas no modelo fluidodinâmico as equações de balanço populacional (EBP) para a distribuição de tamanhos de bolha e avaliação da influência de modelos que descrevem os fenômenos de quebra (modelo de Luo) e coalescência (modelo turbulento) na estrutura da distribuição de ar e nos parâmetros hidrodinâmicos. Estes últimos foram comparados aos resultados da melhor configuração encontrada nas primeiras simulações. Valores simulados de retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$), coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{LA}), taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) e máxima ($\dot{\gamma}_{max}$), obtidos nas primeiras simulações, foram comparados com valores experimentais e da literatura com o intuito de definir o melhor modelo matemático e o procedimento numérico adequado. As simulações do modelo considerando a força de sustentação exibiram resultados mais próximos aos experimentais, sendo os maiores valores dos parâmetros analisados encontrados para o menor diâmetro de bolha (4 mm) empregado neste trabalho. Com relação à taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$), houve maior concordância entre os valores obtidos por CFD e estimados pela equação de proporcionalidade para as simulações que consideraram a força de sustentação. Após o ajuste do modelo fluidodinâmico, inseriram-se as equações de balanço populacional, sendo comparadas as interações de quebra e coalescência. A distribuição de tamanho de bolha demonstrou apresentar resultados dentro das faixas delimitadas para cada fase dispersa de ar, verificando-se o bom funcionamento do modelo, com diâmetros médios de Sauter dentro da faixa avaliada experimentalmente. O modelo acoplado CFD-PBM considerando os efeitos de quebra e coalescência apresentou a melhor previsão de resultados para a retenção gasosa e o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio, em relação aos valores experimentais. Para a taxa de cisalhamento média, este modelo demonstrou o melhor ajuste aos dados previstos por correlação semiempírica. Quanto à taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$), houve maior concordância entre os valores obtidos por CFD e estimados pela equação de proporcionalidade para as simulações em que as interações de quebra e coalescência foram consideradas, demonstrando a mesma ordem de grandeza.

Palavras-chave: biorreator coluna de bolhas, modelo de balanço populacional, hidrodinâmica, transferência de oxigênio, taxa de cisalhamento, fluidodinâmica computacional, força de sustentação, modelos de quebra e coalescência.

ABSTRACT

Pneumatic bioreactors are increasingly employed in bioprocesses due to their effective heat and mass transfer, rapid mixing, and efficient suspension of solids. Computational Fluid Dynamics (CFD) has emerged as a key tool for studying transport phenomena in engineering equipment, utilizing conservation equations for momentum, energy, and mass to describe fluid dynamics. This study evaluates the hydrodynamics of a square-section bubble column bioreactor both experimentally and numerically through CFD simulations. Key parameters such as global gas holdup ($\bar{\alpha}_G$), volumetric oxygen transfer coefficient (k_{La}), and mean ($\dot{\gamma}_{AV}$) and maximum ($\dot{\gamma}_{max}$) shear rates are analyzed. Numerical simulations employ the Euler-Euler approach and vary bubble diameters (4, 5, and 6 mm) alongside specific air feed rates (1.0, 3.0, and 5.0 vvm), incorporating drag and lift interfacial forces. Following the selection of the optimal mathematical model, population balance equations (PBE) are integrated into the fluid dynamic model to predict bubble size distribution and assess the impact of breakage (Luo model) and coalescence (turbulent model) phenomena on air distribution and hydrodynamic parameters. These are compared with initial simulation results to refine the model. Simulated values of $\bar{\alpha}_G$, k_{La} , $\dot{\gamma}_{AV}$, and $\dot{\gamma}_{max}$ is compared with experimental and literature data to validate the mathematical model and numerical approach. Results indicate that simulations incorporating lift forces closely match experimental outcomes, with the smallest bubble diameter (4 mm) yielding the highest parameter values. Notably, maximum shear rate ($\dot{\gamma}_{max}$) predictions show good agreement with semi-empirical correlations when considering interactions of breakage and coalescence. Adjusting the fluid dynamic model with PBE confirms accurate prediction of bubble size distribution and Sauter mean diameters within experimental ranges. The coupled CFD-PBM model, considering breakage and coalescence effects, provides superior predictions for gas retention and volumetric oxygen transfer coefficient compared to experimental values. For mean shear rate, the model aligns well with semi-empirical correlations, while maximum shear rate predictions maintain consistent order of magnitude when considering interaction effects.

Keywords: bubble column bioreactor, population balance model, hydrodynamics, oxygen transfer, shear rate, computational fluid dynamic, lift force, coalescence and breakage models.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Biorreatores Pneumáticos: (a) Coluna de Bolhas, (b) Airlift de Cilindros Concêntricos	25
Figura 2 - Reator Convencional tipo Tanque Agitado e Aerado.....	26
Figura 3 - Regimes de escoamento observados em reatores pneumáticos. a) Regime homogêneo; b) Regime heterogêneo (churn-turbulent); c) Regime heterogêneo (slug flow).	29
Figura 4 - Regimes de escoamento observados em reatores coluna de bolhas em função da velocidade superficial de gás e diâmetro do reator, para água e soluções diluídas. D_c se refere ao diâmetro da coluna e U_G se refere à velocidade do gás.....	30
Figura 5 - Principais relações entre os parâmetros de desempenhos utilizados na análise de biorreatores.....	31
Figura 6 - Resistências à transferência de oxigênio encontradas desde a bolha de ar/oxigênio até o interior da célula em um dado bioprocessos.	32
Figura 7 - Relação entre parâmetros hidrodinâmicos e de transferência de oxigênio em biorreatores em diversos níveis.	34
Figura 8 - Formatos de bolhas e gotas em movimento gravitacional sem obstáculos através de líquidos.....	36
Figura 9 - Escoamento de um líquido no interior de um tubo: (a) formação do perfil de velocidades; (b) ação do gradiente de velocidades sobre um microrganismo.....	39
Figura 10 - Ilustração exemplificando como gradientes de velocidade podem fragmentar microrganismos filamentosos.....	39
Figura 11 - Etapas envolvidas na aplicação da Fluidodinâmica Computacional.	43
Figura 12 - Domínio computacional de três biorreatores pneumáticos: a) coluna de bolhas; b) airlift de dutos concêntricos; c) airlift split.	45
Figura 13 - Malhas estruturada e não-estruturada em um biorreator coluna de bolhas.	46
Figura 14 - Coeficiente de arrasto para esferas rígidas em função do número de Reynolds.	57
Figura 15 - Coeficiente de sustentação para uma esfera rígida e lisa em função do número de Reynolds. Linha sólida: solução analítica para escoamento invíscido; linhas pontilhadas: ajuste da curva para os resultados numéricos com $Sr = 0,02$ (●) e $Sr = 0,2$ (▲); linhas tracejadas: solução analítica para creeping flow com $Sr = 0,02$ e $Sr = 0,2$	60
Figura 16 - Ilustração das forças interfaciais modeladas neste trabalho: (a) Arrasto (b) Sustentação.....	61
Figura 17 - Representação do processo de agregação iniciado pela drenagem do filme fluido que separa as partículas, podendo resultar (a) na agregação das partículas ou (b) na separação destas.	72
Figura 18 - Mecanismos de coalescência e quebra de partículas.	76
Figura 19 - Representação de como a técnica do pivô fixo lida com a formação de novas partículas que não coincidem com um pivô existente; • limites das classes, pivô (ξ_i), Δ nova partícula formada por agregação ou quebra.	80

Figura 20 - Distribuição de Tamanho de Partícula representada pelo Método Discreto.....	83
Figura 21 - Representação dos modelos Discretos. a) Princípio do modelo Discreto Homogêneo. b) Princípio do modelo Discreto Não –Homogêneo.	87
Figura 22 - Geometria do biorreator pneumático coluna de bolhas estudado e condições de contorno aplicadas: (a) coluna (b) aspensor tipo cruzeta de 180 orifícios	101
Figura 23 - Fluxograma representativo das etapas de simulações realizadas.	107
Figura 24 - Detalhes da malha computacional para a base do biorreator e do aspensor.....	108
Figura 25 - Ilustração do aparato experimental para medição da concentração de oxigênio dissolvido em função do tempo.....	111
Figura 26 – Análise da Taxa de Cisalhamento Máxima por meio da ferramenta CFD-Post ...	115
Figura 27 - Retenção gasosa global (α_G) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas com e sem a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-5).	118
Figura 28 - Diferenças Relativas para Retenção gasosa global (α_G) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para os modelos com e sem força de sustentação. (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm	120
Figura 29 – Desvio Médio relativo da retenção gasosa global (α_G) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) para as simulações com e sem a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-5). (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm	121
Figura 30 - Distribuições espaciais da fração volumétrica no biorreator coluna de bolhas sem força de sustentação operados com vazões de alimentação de ar (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm	122
Figura 31 - Distribuições espaciais da fração volumétrica no biorreator coluna de bolhas com força de sustentação operado com vazões de alimentação de ar de (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm	123
Figura 32 - Perfis de oxigênio para diferentes vazões de ar específicas em um biorreator de coluna de bolhas de ar-água.....	124
Figura 33 - Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas com e sem a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-5).	125
Figura 34 – Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas com e sem a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-5) para o modelo de Ndiaye et al. (2018).....	126
Figura 35 - Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas com e sem a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-5) para o modelo de Danckwerts (1951).....	126
Figura 36 - Diferenças Relativas para Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para os modelos com e sem força de sustentação. (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm	128
Figura 37 - Distribuição espacial de k_{La} para o biorreator coluna de bolhas operando nas vazões de (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm sem a força de sustentação.	129
Figura 38 - Distribuição espacial de k_{La} para o biorreator coluna de bolhas operando nas vazões de (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm com a força de sustentação.....	129

Figura 39 - Taxa de cisalhamento média (γm) em função da vazão específica de ar com e sem o modelo de força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-1).	131
Figura 40 - Distribuição espacial da velocidade do líquido para o biorreator coluna de bolhas operando nas vazões de (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm sem a força de sustentação.	132
Figura 41 – Distribuição espacial da velocidade do líquido para o biorreator coluna de bolhas operando nas vazões de (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm com a força de sustentação.	132
Figura 42 - Ajuste entre a taxa de cisalhamento máxima obtida por CFD e estimada pela Equação proposta por Esperança et al. (2020) no biorreator coluna de bolhas para o modelo sem a força de sustentação (NLF4-1 a NLF6-5). (a) $d_B=4$ mm (●), (b) $d_B=5$ mm (■) e (c) $d_B=6$ mm (◆).....	134
Figura 43 - Ajuste entre a taxa de cisalhamento máxima obtida por CFD e estimada pela Equação proposta por Esperança et al. (2020) no biorreator coluna de bolhas para o modelo com a força de sustentação (NLF4-1 a NLF6-5). (a) $d_B=4$ mm (●), (b) $d_B=5$ mm (■) e (c) $d_B=6$ mm (◆).....	134
Figura 44 – Comparação entre as taxas de cisalhamento média e máxima em biorreator coluna de bolhas, com e sem a força de sustentação para os diâmetros de (a) $d_B=4$ mm, (b) $d_B=5$ mm e (c) $d_B=6$ mm.....	136
Figura 45 - Aparato Experimental utilizado para a verificação da Distribuição de Tamanho de Bolhas.....	143
Figura 46 - Imagens das bolhas obtidas para as vazões operadas em uma das faces do biorreator coluna de bolhas: (a) 1 vvm; (b) 3 vvm; (c) 5 vvm.....	144
Figura 47 - Representação das fases e classes utilizadas nas simulações com EBP's.	147
Figura 48 - Distribuição de Tamanho de Bolhas para as vazões de (a) $\phi_{ar}= 1$ vvm, (b) $\phi_{ar}= 1$ vvm e (c) $\phi_{ar}= 5$ vvm.	151
Figura 49 - Ajuste da distribuição de bolhas experimental pelo Modelo RRB para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm; (b) 3 vvm e (c) 5 vvm.....	152
Figura 50 – Diâmetro de bolhas (d_B) em função posição (mm) no biorreator coluna de bolhas operando na vazão de alimentação de ar $\phi_{ar} = 1, 3$ e 5 vvm para: (a) fase ar_1 e (b) fase ar_2 dos casos estudados.	155
Figura 51 – Distribuição espacial dos diâmetros de bolhas no biorreator coluna de bolhas operando na vazão de $\phi_{ar} = 1, 3$ e 5 vvm para (a) Fase ar_1 (b) Fase ar_2	158
Figura 52 – Retenção gasosa total (α) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para os modelos de balanço populacional.	160
Figura 53 - Retenção gasosa (α) para o biorreator coluna de bolhas em função da velocidade de injeção de ar.	161
Figura 54 - Retenção gasosa (α) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para as fases ar_1 e ar_2 dos modelos de balanço populacional.	162
Figura 55 - Retenção gasosa (α) em função posição (mm) no biorreator coluna de bolhas operando com vazão de alimentação de ar $\phi_{ar} = 1, 3$ e 5 vvm para (a) Fase ar_1 , (b) Fase ar_2 para os casos (●) EBP, (◆) EBP-B, (▲) EBP-C e (●) EBP-BC	163
Figura 56 - Distribuições espaciais da fração volumétrica no biorreator coluna de bolhas operando com vazão de alimentação de ar $\phi_{ar} = 1, 3$ e 5 vvm para: (a) Fase ar_1 (b) Fase ar_2 . ..	164

Figura 57 - Diferenças Relativas para Retenção gasosa (α) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para os modelos de balanço populacional. (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (●) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm.....	165
Figura 58 – Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas.....	166
Figura 59 - Diferenças Relativas para Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para os modelos de balanço populacional. (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (●) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm	167
Figura 60 - Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para as fases ar_1 e ar_2 dos modelos de balanço populacional.	168
Figura 61 - Distribuição espacial da velocidade do líquido para o biorreator coluna de bolhas operando na vazão de $\phi_{ar} = 1, 3$ e 5 vvm.....	169
Figura 62 – Velocidade do líquido em função posição (mm) no biorreator coluna de bolhas operando com vazão de alimentação de ar de (a) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (b) $\phi_{ar} = 3$ vvm e (c) $\phi_{ar} = 5$ vvm.....	170
Figura 63 – Taxa de cisalhamento média (γ_m) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas.	172
Figura 64 - Taxa de cisalhamento máxima (γ_{max}) em função da velocidade de injeção de gás (U_G) no biorreator coluna de bolhas.....	173
Figura 65 - Ajuste entre a taxa de cisalhamento máxima obtida por CFD e estimada pela Equação proposta por Esperança et al. (2020) no biorreator coluna de bolhas para os modelos de balanço populacional: EBP (●), EBP-B (◆), EBP-C (▲) e EBP-BC (●).....	175

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Parâmetros do modelo Luo e Lehr	92
Tabela 2 - Informações construtivas do biorreator coluna de bolhas.	101
Tabela 3 - Modelos e parâmetros numéricos das simulações realizadas.	109
Tabela 4 - Dados operacionais e condições de contorno.	110
Tabela 5 - Casos simulados utilizando a fluidodinâmica computacional.	110
Tabela 6 - Constantes de atraso para as vazões de 1, 3 e 5 vvm.	112
Tabela 7 - Total de elementos e tamanho característico das malhas utilizadas no GCI.	116
Tabela 8 - Resultados das simulações do teste de malha.	116
Tabela 9 - Diferenças entre os resultados das simulações do teste de malha em termos percentuais.	116
Tabela 10 - Valores calculados de GCI.	117
Tabela 11 – Valores da função gama (Γx) para x variando de 1,31 a 1,73, com incremento de 0,01	146
Tabela 12 - Modelos e parâmetros numéricos das simulações EBP realizadas.	148
Tabela 13 - Códigos e características das simulações realizadas com EBP (Equações de Balanço Populacional).	148
Tabela 14 - Dados operacionais e condições de contorno para as simulações EBP.	149
Tabela 15 - Distribuição de tamanho de bolhas no biorreator coluna de bolhas	150
Tabela 16 - Frações de ar adotadas nas simulações com Equações de Balanço Populacional.	150
Tabela 17 – Diâmetros médios de Sauter para as simulações utilizando o modelo acoplado CFD-PBM após um tempo de real de simulação de 5 s.	153
Tabela 18 - Diâmetros de Sauter encontrados para as vazões de 1, 3 e 5 vvm.	154
Tabela 19 – Constantes de Proporcionalidade (k), com seus respectivos desvios padrões, para os modelos simulados após um tempo de real de simulação de 5 s.	175

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Definição	Unidade
a	Área interfacial específica de transferência de massa	m ⁻¹
a,b,c,d,e,f	Constantes da função polinomial	-
C	Concentração real de oxigênio na fase líquida	kg.m ⁻³
C _S	Concentração de saturação (ou solubilidade) de oxigênio na fase líquida	kg.m ⁻³
C _D	Coefficiente de arrasto	-
C _D ^{elip}	Coefficiente de arrasto para bolhas em formato de elipse	-
C _D ^{esf}	Coefficiente de arrasto para bolhas em formato de esfera	-
C _D ^{touca}	Coefficiente de arrasto para bolhas em formato de touca	-
C _{ε1}	Constante do modelo de turbulência κ - ε	-
C _{ε2}	Constante do modelo de turbulência κ - ε	-
C _μ	Constante do modelo de turbulência κ - ε	-
C _{μp}	Constante do modelo de turbulência κ - ε	-
d _B	Diâmetro das bolhas de ar	mm
d _{orif}	Diâmetro dos orifícios presentes no aspersor	mm
d _{32i}	Diâmetro médio de Sauter para fase i	m
D	Diâmetro de partícula	m
D'	Parâmetro do modelo RRB	m
D ₅₀	Diâmetro médio geométrico	m
EBP	Equações de Balanço Populacional	-
e _a ²¹	Erro relativo aproximado entre as malhas intermediária e refinada	-
e _a ³²	Erro relativo aproximado entre as malhas grosseira e intermediária	-
f _{bi}	Fração de massa pertencente ao intervalo b na fase i secundária	%
f _i	Resposta da malha i	kg
f _{ext} ^{ji}	Resposta extrapolada em relação às malhas i e j	kg
F _{vm,q}	Força de massa virtual da fase q	kg.m/s ²
F _{lift,q}	Força de sustentação da fase q	kg.m/s ²
F _q	Força de campo na fase q	kg.m/s ²
F _S	Fator de segurança do método GCI	-

g	Aceleração da gravidade	$m.s^{-2}$
G_b	Termo de geração de energia cinética turbulenta devido ao empuxo	J/s
GCI	<i>Grid Convergence Index</i>	-
GCI ₁₂	Incerteza numérica entre as malhas refinada e intermediária	-
GCI ₂₃	Incerteza numérica entre as malhas intermediária e grosseira	-
G_k	Termo de geração de energia cinética turbulenta devido ao gradiente de velocidades médias	J/s
h	Tamanho característico da malha computacional	m
h_D	Altura da dispersão gás-líquido	m
h_L	Altura do líquido	m
K	Parâmetro do modelo GGS	m
κ	Energia cinética turbulenta	J/kg
k_L	Coefficiente convectivo de transferência de massa da película líquida em torno da bolha	$m.s^{-1}$
k_{La}	Coefficiente volumétrico de transferência de oxigênio	s^{-1}
m	Parâmetro do modelo GGS	-
M_i	Transferência de quantidade de movimento (por unidade de volume) devido às forças interfaciais atuantes na fase “i”	$kg.m^{-2}.s^{-2}$
M_{ij}^D	Força de arrasto (por unidade de volume) atuando na fase “i” devido à presença da fase “j”	$kg.m^{-2}.s^{-2}$
M_{LG}^D	Força de arrasto (por unidade de volume) atuando na fase líquida devido à presença da fase gasosa	$kg.m^{-2}.s^{-2}$
M_{ij}^L	Força de sustentação (por unidade de volume) atuando na fase “i” devido à presença da fase “j”	$kg.m^{-2}.s^{-2}$
M_{ij}^{TD}	Força de dispersão turbulenta (por unidade de volume) atuando na fase “i” devido à presença da fase “j”	$kg.m^{-2}.s^{-2}$
M_{ij}^{VM}	Força de massa virtual (por unidade de volume) atuando na fase “i” devido à presença da fase “j”	$kg.m^{-2}.s^{-2}$
n	Parâmetro do modelo RRB	-
N	Número total de elementos computacionais presentes na malha	-
N_{O_2}	Velocidade de transferência de oxigênio	$kg.m^{-3}.s^{-1}$

N_{orif}	Número de orifícios presentes no aspersor	-
P_{atm}	Pressão atmosférica	Pa
R^2	Coefficiente de determinação do modelo	
r_{ij}	Razão de refinamento entre duas malhas computacionais	
S_i	Transferência de quantidade de movimento (por unidade de volume) devido às forças externas atuantes na fase “i”	$kg.m^{-2}.s^{-2}$
t	Função de transformação logarítmica	-
U_G	Velocidade superficial de gás	$m.s^{-1}$
V_{∞}	Velocidade terminal da bolha	$m.s^{-1}$
Z	Função polinomial aproximada à função inversa de probabilidade integral	-

Letras gregas

Símbolo	Definição	Unidade
α	Parâmetro para resposta assintótica	%
α_q	Fração volumétrica da fase q	%
$\bar{\alpha}_G$	Retenção gasosa global	-
$\bar{\alpha}$	Retenção gasosa	-
ε	Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta	J/kg
$\varepsilon_{(i+1,i)}$	Diferença das respostas simuladas malha i+1 e i	kg
$\dot{\gamma}$	Taxa de cisalhamento	s^{-1}
$\dot{\gamma}_m$	Taxa de cisalhamento média	s^{-1}
$\dot{\gamma}_{max}$	Taxa de cisalhamento máxima	s^{-1}
k	Energia cinética turbulenta	$m^2.s^{-2}$
$\mu_{ef,i}$	Viscosidade efetiva da fase “i”	Pa.s
μ_i	Viscosidade dinâmica da fase “i”	Pa.s
μ_L	Viscosidade turbulenta da fase “i”	Pa.s
$\mu_{turb,i}$	Viscosidade induzida pela fase	Pa.s
$\mu_{turb,diss}$	Viscosidade cinemática do fluido	$m^2.s^{-1}$
ν	Densidade da fase continua	$kg.m^{-3}$
ρ_{disp}	Densidade da dispersão gás-líquido	$kg.m^{-3}$
ρ_g	Densidade da fase gasosa	$kg.m^{-3}$
ρ_L	Densidade da fase líquida	$kg.m^{-3}$
ρ_q	Massa específica da fase q	kg/m^3

$\hat{\rho}q$	Massa específica da mistura	kg/m ³
τ	Tensão de cisalhamento	Pa
σ	Tensão superficial	kg.s ⁻²
σ_k	Constante do modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$	-
σ_ϵ	Constante do modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$	-
Φ_{ar}	Vazão específica de ar	vvm
α_c	Coefficiente angular	-
β	Coefficiente linear	-

Operadores matemáticos

Símbolo	Definição
∂	Operador diferencial del
∇	Operador diferencial nabla
\times	Notação de produto vetorial
\otimes	Notação de produto diádico

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO	20
CAPÍTULO 2 – OBJETIVOS	24
CAPÍTULO 3 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA GERAL	25
3.1 Biorreatores Pneumáticos	25
3.1.1 Biorreatores Coluna de Bolhas	27
3.2 Regimes de Escoamento	28
3.3 Parâmetros para Análise de Desempenho	30
3.3.1 Parâmetros de Desempenho	31
3.3.1.1 Retenção Gasosa (α_G)	31
3.3.2 Parâmetros de Transferência de Massa	32
3.3.2.1 Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_{LA})	33
3.3.2.2 Diâmetro de Bolhas (d_B)	35
3.3.3 Parâmetros Hidrodinâmicos	37
3.3.3.1 Taxa de Cisalhamento (γ)	38
3.4 Fluidodinâmica Computacional	42
3.4.1 Aspectos Gerais	42
3.4.2 Definição da geometria (volume de controle)	44
3.4.3 Geração da malha computacional	45
3.4.4 Pré-processamento	46
3.4.5 Processamento	47
3.4.6 Pós-processamento	47
3.5 Tipos de Abordagens Matemáticas	48
3.5.1 Abordagem Lagrangeana	48
3.5.1.1 Modelagem Euler - Lagrange	48
3.5.1.2 Simulação Numérica Direta (DNS - Direct Numerical Simulation)	49
3.5.2 Volume de Fluido (VOF - Volume-of-Fluid)	49
3.5.3 Modelagem Euler - Euler	50
3.5.3.1 Modelo Multifluido	50
3.6 Equacionamento para o Escoamento Bifásico Água – Ar	52
3.6.1. Conservação da Massa – Equação da Continuidade	53
3.7 Fechamento das Forças de Interação	55
3.7.1 Modelagem da Força de Arrasto	56
3.7.2 Modelagem da Força de Sustentação	59
3.8 Modelos de Turbulência	61

3.9 Balanço Populacional	69
3.9.1 Equações de Balanço Populacional	70
3.9.1.1 <i>Processos de Agregação</i>	71
3.9.1.2 <i>Processos de Quebra</i>	74
3.9.1.3 <i>Simplificações e Hipóteses Adotadas</i>	75
3.9.2 Métodos de Solução da Equação de Balanço Populacional	77
3.9.2.1 <i>Método das Classes (Modelo Discreto)</i>	78
3.9.2.1.1 <i>Modelo Discreto Não Homogêneo</i>	85
3.10 Modelos de Coalescência e Quebra utilizados	89
3.10.1 <i>Modelo Turbulento de Coalescência</i>	89
3.10.2 <i>Modelo de Luo para Quebra</i>	91
3.10.3 <i>Modelo de Laakkonen para Quebra</i>	92
CAPÍTULO 4 – AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DO DIÂMETRO DA BOLHA E DA FORÇA DE SUSTENTAÇÃO POR FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL	95
4.1 Introdução	95
4.2 Estado da arte	95
4.3 Materiais e Métodos	99
4.3.1 Software Ansys Fluent ® 14.5	99
4.3.2 Hardware	100
4.3.3 Geometria do Biorreator	100
4.3.4 Teste GCI (Grid Convergence Index) – Independência De Malha	101
4.3.4.1. <i>Determinação do tamanho representativo da malha (h)</i>	103
4.3.4.2. <i>Escolha de três configurações de malha e obtenção da resposta simulada</i>	103
4.3.4.3. <i>Cálculo da ordem aparente (p) do método</i>	104
4.3.4.4. <i>Cálculo da resposta extrapolada (f_{ext})</i>	104
4.3.4.5. <i>Cálculo dos erros relativos e erros relativos extrapolados</i>	104
4.3.4.6. <i>Cálculo do GCI21, GCI32 e GCI3</i>	105
4.3.4.7. <i>Intervalo de resposta assintótica</i>	106
4.3.5 Simulações Numéricas	106
4.3.5.1 <i>Malha numérica</i>	107
4.3.5.1 <i>Determinação do Modelo Matemático</i>	108
4.3.6 Determinação experimental e estimativa de parâmetros de desempenho	110
4.3.6.1 <i>Retenção Gasosa Global (α_G)</i>	110
4.3.6.2 <i>Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_{LA})</i>	111
4.3.6.3 <i>Taxas de Cisalhamento Média (γ_m) e Máxima (γ_{max})</i>	114
4.4 Resultados e Discussão	115
4.4.1 Teste de Independência de Malhas	115

4.4.2 Retenção Gasosa Global (α_G).....	117
4.4.3 Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio.....	124
4.4.4 Taxa de cisalhamento média (γ_m).....	130
4.4.5 Taxa de cisalhamento máxima (γ_{max})	133
4.5 Considerações Finais.....	137
<i>CAPÍTULO 5 – AVALIAÇÃO DO MODELO ACOPLADO CFD-PBM NA ANÁLISE DE PARÂMETROS DE DESEMPENHO POR FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL</i> 139
5.1 Introdução.....	139
5.2 Estado da Arte.....	139
5.3 Materiais e Métodos.....	142
5.3.1 Distribuição de Tamanhos de Bolhas	142
5.3.2 Simulações Numéricas com aplicação das Equações de Balanço Populacional (EBP).....	147
5.4 Resultados e Discussão.....	149
5.4.1 Distribuição de Tamanho de Bolhas.....	149
5.4.2 Retenção Gasosa (α)	159
5.4.3 Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio ($k_{L,a}$).....	166
5.4.4 Taxa de Cisalhamento Média (γ_m).....	169
5.4.5 Taxa de Cisalhamento Máxima (γ_{max})	173
5.5 Considerações Finais.....	176
<i>CAPÍTULO 6 – CONCLUSÕES GERAIS</i> 177
<i>CAPÍTULO 7 – LISTA DE PUBLICAÇÕES</i> 179
<i>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</i>	180

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

Denominam-se escoamentos multifásicos dispersos, escoamentos que consistem de, pelo menos, duas fases, como gotas em um gás ou bolhas em um líquido, sendo que esses elementos discretos não estão conectados entre si, devido a existência de uma fase contínua que os separa (CROWE *et al.*, 1998). Um sistema polidisperso refere-se à uma população de partículas sólidas, bolhas ou gotas, que são caracterizadas por uma ou mais propriedades organizadas num intervalo definido, enquanto em um sistema monodisperso, todas as partículas são idênticas (RIGOPOULOS, 2010).

Diversas tecnologias são baseadas nas propriedades de uma polidispersão, impulsionando o desenvolvimento de técnicas numéricas capazes de prever o comportamento dinâmico da população de partículas, desejando-se que tais técnicas possam auxiliar na previsão e controle da influência das partículas sobre um dado sistema (SILVA, 2008).

Os fenômenos associados aos processos de engenharia química, em sua maioria, estão intrinsecamente ligados às propriedades das partículas de um sistema polidisperso, tendo como um excelente exemplo de equipamento a coluna de bolhas, na qual é possível observar um escoamento gás-líquido em que a fase dispersa é formada por bolhas que definem a eficiência desse equipamento. Nestes equipamentos, a distribuição de tamanho de partícula controla os fenômenos de transferência de massa, energia e também de quantidade de movimento, os quais afetam a temperatura e a concentração dos componentes transferidos para as bolhas (SANTOS, 2010).

Reatores coluna de bolhas são amplamente empregados em processos industriais por promoverem eficientemente o contato gás-líquido, sendo atrativos para aplicações de engenharia química por características como a adequada transferência de oxigênio e baixo consumo de energia, devido principalmente às simplicidades geométrica e operacional (WANG *et al.*, 2007; ANASTASIOU *et al.*, 2013). Apesar da aparente simplicidade mecânica, o projeto desses equipamentos requer o entendimento dos fenômenos de transporte de massa e da hidrodinâmica interna, principalmente no regime de escoamento turbulento, pois estes dependem das condições de operação, das propriedades físicas do gás e do líquido, da configuração do aspersor e do tamanho do reator (ROLLBUSCH *et al.*, 2015; AL-NASERI *et al.*, 2019; BESAGNI *et al.*, 2018; LEONARD *et al.*, 2019; MOLLER *et al.*, 2019; RAIMUNDO *et al.*, 2019; ZHANG *et al.*, 2020; LI *et al.*, 2021).

No entanto, ainda não se tem total entendimento da fluidodinâmica tanto da fase dispersa quanto da fase contínua (SILVA, 2008).

Fatores como a turbulência, fluxos locais, retenção gasosa e tamanho de bolha estão associados de forma complexa às condições de operação e às variáveis de projeto (GEMELLO *et al.*, 2019). Um importante parâmetro que deve ser avaliado é a taxa de cisalhamento, devido ao seu impacto na morfologia do microrganismo e na viabilidade, e, portanto, na formação de bioprodutos (ESPERANÇA *et al.*, 2019). Nos processos bioquímicos existe uma alta dependência da intensidade de cisalhamento quando células frágeis, como células animais, vegetais e microrganismos filamentosos são utilizados, ao contrário dos processos químicos, nos quais a força de cisalhamento, na maioria das vezes, afeta apenas a transferência de calor e massa (CONTRERAS, 1999). A morfologia das células é afetada por um ambiente de cisalhamento excessivamente alto, o que leva a danos que acarretam na perda de viabilidade e na ruptura ou desintegração celular (ROSA *et al.*, 2005). Desta forma, a biossíntese do produto microbiano é afetada e, portanto, um biorreator deve fornecer ambientes com moderado ou baixo cisalhamento, com intuito de evitar danos às células sensíveis ao cisalhamento, enquanto ainda fornece transferências de calor e massa adequadas (CONTRERAS, 1999; ROSA *et al.*, 2005).

A taxa de cisalhamento ($\dot{\gamma}$) é um parâmetro que depende do perfil local de velocidade do fluido e de suas propriedades reológicas. Visando vencer toda a complexidade envolvida em sua mensuração, diversos esforços têm sido feitos para desenvolver e aprimorar metodologias e correlações que avaliem a taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) como um parâmetro de comparação do desempenho de biorreatores (SHI *et al.*, 1990).

Assim, compreender e modelar o comportamento interno dos biorreatores coluna de bolhas, considerando seus parâmetros de desempenho, é fundamental para projetar, operar e otimizar uma ampla gama de processos industriais, e por esta razão a Fluidodinâmica Computacional (CFD) tem sido amplamente utilizada (RZEHAK *et al.*, 2017; ZIEGENHEIN *et al.*, 2017; HUANG *et al.*, 2018; ZHANG *et al.*, 2020; LI *et al.*, 2021).

O comportamento hidrodinâmico dos biorreatores coluna de bolhas pode ser determinado em uma ampla gama de condições de operação. As interações existentes entre a fase gasosa dispersa (que é formada por bolhas que interagem devido ao seu

movimento caótico sob o regime heterogêneo) e a fase líquida contínua é que controlam os sistemas gás-líquido. O modelo Euleriano clássico, de dois fluidos, é bastante utilizado para simular escoamentos heterogêneos com baixo custo computacional, porém com algumas limitações, como a suposição de diâmetro constante para a fase gasosa dispersa, ou seja, não utilizando uma distribuição de tamanho de bolhas. No entanto, a estimativa do tamanho das bolhas costuma ser uma tarefa difícil, pois depende do sistema estudado, das condições de operação, da hidrodinâmica global e da turbulência. Para tanto, existem muitas correlações disponíveis na literatura, todavia, geralmente resultando em respostas diferentes (MARCHISIO & FOX, 2013; GEMELLO *et al.*, 2019).

Visando descrever o comportamento de uma distribuição de partículas, nasce a teoria de balanço populacional (BP) como ferramenta essencial, sendo importante ressaltar que, em muitos casos, o tratamento da equação de balanço populacional está conectado com a solução do escoamento do sistema multifásico (RAMKRISHNA, 2000).

Deste modo, o acoplamento entre PBM e CFD é considerado essencial para os problemas reais de engenharia, visto que, além do desafio de desenvolver a teoria do balanço populacional, e aperfeiçoar os métodos de solução, existe também a meta de acoplar as equações fluidodinâmicas das fases com a equação de balanço populacional (SILVA, 2008). As partículas distribuídas no domínio não têm comportamento homogêneo, na grande maioria dos casos, implicando que o campo de velocidade dessas partículas, assim como os termos fonte (relacionados aos fenômenos de quebra e coalescência), dependem da fluidodinâmica da fase contínua, da mesma maneira que a velocidade da fase contínua depende da fase dispersa (SANTOS, 2010). Combinando a abordagem multifásica Euleriana/Euleriana com a equação de balanço populacional (CFD-PBM), esse efeito de duas vias pode ser mensurado, simulando uma coluna de bolhas de forma mais eficiente, visto que o uso de equações de balanço populacional incorporadas ao CFD aumenta a capacidade preditiva do modelo na obtenção de campos de fluxos e retenção gasosa. Neste sentido, a utilização de equações de balanço populacional serve para fornecer a distribuição local do tamanho da bolha (YANG & XIAO, 2017; YANG *et al.*, 2018; SHI *et al.*, 2019; GEMELLO *et al.*, 2019). Assim, para desenvolver um modelo de processo significativo é necessária uma descrição precisa de todas as principais interações, como transferência de momento na interface gás-líquido e fontes de turbulência (HUANG *et al.*, 2018).

Embora o uso das equações de balanço populacional para a análise hidrodinâmica de biorreatores por simulações CFD seja crescente, sua aplicação na estimativa da taxa de cisalhamento em biorreatores de coluna de bolhas permanece escassa. Os estudos relatados na literatura geralmente têm aplicado a abordagem clássica de Euler-Euler e a hipótese de tamanho de bolha médio e constante. Neste sentido, este trabalho visa contemplar esta lacuna da literatura, empregando a técnica de CFD-PBM para o estudo hidrodinâmico de reatores colunas de bolhas.

CAPÍTULO 2 – OBJETIVOS

O objetivo geral deste trabalho foi avaliar a influência das equações de balanço populacional na hidrodinâmica e no cisalhamento de um biorreator coluna de bolhas de seção quadrada, utilizando o modelo acoplado CFD-PBM. De modo a alcançar o objetivo proposto, cumpriram-se os seguintes objetivos específicos:

- Construção da malha computacional com aplicação do método *Grid Convergence Index* (GCI) para estimativa do erro de discretização de malha e seleção da mesma;
- Análise da influência da força interfacial de sustentação e do diâmetro de bolhas na hidrodinâmica e cisalhamento de biorreatores coluna de bolhas simulados com modelo Euler-Euler clássico;
- Incorporação do balanço populacional para representar a distribuição de tamanho de bolhas no modelo matemático simulado por CFD;
- Análise da influência dos modelos de quebra e coalescência de bolhas;
- Comparação entre os resultados obtidos para um tamanho médio constante de bolha e os resultados obtidos com a inclusão das equações de balanço populacional, possibilitando a análise dos efeitos das diferentes abordagens de modelagem na distribuição da taxa de cisalhamento no reator de coluna de bolhas.

3.1 Biorreatores Pneumáticos

Biorreatores pneumáticos correspondem a uma classe conhecida como biorreatores não-convencionais, sendo utilizados em bioprocessos para transferência gás-líquido, nos quais o ar (ou oxigênio puro) é injetado na base do reator promovendo a gaseificação e agitação do meio líquido. São exemplos destes equipamentos os biorreatores de coluna de bolhas (Figura 1a) e reator *airlift* (Figura 1b) (MENDES, 2016).

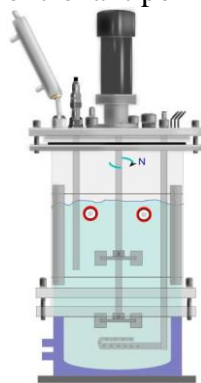
Figura 1 - Biorreatores Pneumáticos: (a) Coluna de Bolhas, (b) Airlift de Cilindros Concêntricos



Fonte: Mendes, 2016

Quando comparados aos reatores convencionais do tipo tanque agitado e aerado (Figura 2), que empregam recursos independentes para promover a agitação e a aeração do sistema, os reatores pneumáticos possuem a vantagem de usar um único recurso para executar ambas as tarefas, o que reduz os gastos energéticos. Além disso, por não possuírem peças móveis no interior do reator (ao contrário dos reatores convencionais, que possuem eixo com impelidores), a limpeza e esterilização dos reatores pneumáticos é realizada de forma mais simples (SIEGEL *et al.*,1992; SNAPE *et al.*,1995; ABDULMOHSIN *et al.*,2011)

Figura 2 - Reator Convencional tipo Tanque Agitado e Aerado



Fonte: Mendes, 2016

Dentre outras vantagens dos biorreatores pneumáticos em relação ao tipo tanque agitado e aerado, destacam-se a simplicidade e o baixo custo de construção e operação, a ausência de selo mecânico (minimizando contaminações), a elevada capacidade de suspensão e mistura de sólidos, e as altas velocidades de transferência de calor e massa associadas a um baixo consumo energético (LUO E AL-DAHMAN, 2010; CERRI *et al.*, 2009; ZHANG *et al.*, 2014).

A principal finalidade da aeração do sistema, em bioprocessos aeróbios, é promover altas taxas de transferência de oxigênio. Este é um nutriente essencial para a sobrevivência e manutenção das células, que possui baixa solubilidade em água. Neste cenário, os reatores pneumáticos são conhecidos por proporcionar alta transferência de massa e calor, aliadas a boa suspensão de sólidos e rápida mistura (JULIÁ *et al.*, 2007; LUO & AL-DAHMAN, 2010).

O cisalhamento imposto às células pelo sistema é outro ponto capaz de comprometer a eficiência do bioprocessamento, pois diferentemente de processos químicos, nos quais os componentes são inanimados, os bioprocessos utilizam organismos vivos e, assim, fatores como pressão, pH, temperatura, falta ou excesso de nutrientes e, até mesmo, agitação do meio, podem levar ao estresse das células. Nos casos onde organismos maiores como fungos e bactérias filamentosas são utilizadas, diferentes gradientes de velocidade ou campos de cisalhamento causados pela agitação do meio líquido podem levar à fragmentação do organismo, podendo ocasionar fatores como a produção de compostos indesejáveis, a redução da produção do biocomposto de interesse ou, ainda, a morte do organismo (WECKER *et al.*, 1991; MANOLOV, 1992; MAKAGIANSAR *et al.*, 1993; AMANULLAH, 1999; WONGWICHARN *et al.*, 1999; LI *et al.*, 2002; HEYDARIAN, *et al.*, 2009; LI *et al.*, 2010; BRAGA, 2015).

Todavia, como qualquer outro equipamento, os reatores pneumáticos possuem alguns pontos que devem ser considerados antes de sua utilização. Em alguns modelos, tais como os reatores tipo *airlift*, é necessário que um volume mínimo de líquido seja utilizado, permitindo a conexão entre as diferentes seções do reator (regiões de subida e descida). Como a agitação do meio é realizada unicamente através da injeção de gás, a vazão de gás deve ser suficiente para promover a homogeneidade (MENDES, 2016).

Devido às inúmeras vantagens apresentadas pelos reatores pneumáticos, sua aplicabilidade têm sido avaliada em diferentes vertentes, tais como a produção de antibióticos (KAHAR *et al.*, 2002; OHTA *et al.*, 1995; ADINARAYANA *et al.*, 2004), crescimento de algas (JONES & HARRISON, 2014; LENNARTSSON *et al.*, 2011), produção de enzimas (KIM *et al.*, 1997; YUGUO *et al.*, 2000; FONTANA *et al.*, 2009; AHAMED & VERMETTE, 2010), biopolímeros (TAVARES *et al.*, 2004; ÖZCAN *et al.*, 2014; ROUKAS & MANTZOURIDOU, 2001), compostos aromáticos (BRAGA *et al.*, 2015), alcaloides (YUN *et al.*, 2007), ácido málico (KAWAGOE *et al.*, 1997) e glucônico (TRAGER, 1989; KLEIN *et al.*, 2002), remoção de tintas (BEHIN, 2012), descoloração de efluentes por ozonização (BEHIN *et al.*, 2015; TURHAN & TURGUT, 2009), remoção de chumbo (SAHU *et al.*, 2009) e nitrogênio (CHAI *et al.*, 2015) de efluentes industriais, recuperação de cobre (BEHRAD *et al.*, 2012), bio-oxidação de ferro (KAKSONEN *et al.*, 2014), biodegradação de compostos tóxicos como quinolina (YONGMING *et al.*, 2002), p-nitrofenol (SALEHI *et al.*, 2011) e 4-clorofenol (GALÍNDEZ-MAYER *et al.*, 2008), tratamento de resíduos da indústria de vinho (LUCAS *et al.*, 2009) e de azeite de oliva (CERRONE *et al.*, 2011), produção de biocombustíveis a partir de algas como etanol (Lennartsson *et al.*, 2011), biodiesel (NAJAFABADY *et al.*, 2010) e hidrogênio (NAYAK & ROY, 2013) e o aumento da eficiência do processo convencional de produção de etanol através da remoção de etanol por injeção de gases durante a fermentação (stripping) (SONEGO *et al.*, 2014; SILVA *et al.*, 2015).

3.1.1 Biorreatores Coluna de Bolhas

O reator tipo coluna de bolhas (CB) é composto por uma coluna onde um dado gás ou mistura de gases são injetados por meio de um aspersor localizado na base do reator, apresentando assim, uma configuração bastante simples. Desta maneira, a aeração e a homogeneização do meio reacional são obtidas através do borbulhamento do gás

injetado, conforme pode ser visualizado na Figura 1(a). O gás, sob a forma de bolhas, sobe devido à sua baixa densidade arrastando consigo o líquido, gerando um movimento aleatório no meio reacional que promove a mistura gás-líquido (BASHEER & SUBRAMANIAM, 2012).

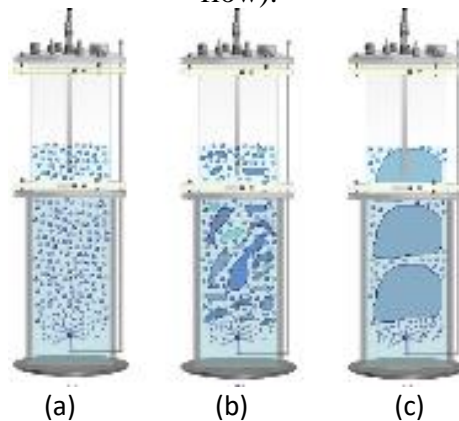
Baseando-se em evidências experimentais, observa-se a existência de um padrão de circulação de líquido global na coluna, apresentando escoamento ascendente na região central e descendente em locais próximos à parede (VISWANATHAN & RAO, 1983; BURNS & RICE, 1997; VIAL *et al.*, 2001). Embora exista certo grau de dificuldade em mensurar esta circulação, descrições teóricas da estrutura de escoamento têm sido propostas, o que permite a realização do cálculo do tempo médio de circulação do líquido, sendo necessário o cálculo de perfis radiais de retenção gasosa (VIAL *et al.*, 2001).

3.2 Regimes de Escoamento

Em função da vazão específica de ar utilizada nos reatores pneumáticos, sua hidrodinâmica é caracterizada por diferentes padrões de escoamento. Na maior parte dos casos, dois regimes de escoamento são observados nestes equipamentos, além de um regime de transição: um regime homogêneo (*bubbly flow*) e regimes heterogêneos do tipo turbulento-agitante (*churn-turbulent flow*) ou do tipo pistonado (*slug flow*), conforme ilustrado na Figura 3.

Diferentes autores relataram a presença de um regime homogêneo quando são utilizadas baixas velocidades de gás na alimentação. Este regime é descrito por uma baixa circulação de líquido, estreita distribuição de tamanho de bolhas, tempo de residência das bolhas praticamente constante e retenção gasosa radialmente uniforme. Além disso, os fenômenos de quebra e coalescência de bolhas podem ser ignorados, em virtude da pouca interação entre as bolhas (SHAMLOU *et al.*, 1994; MOUSTIRI *et al.*, 2001; VIAL *et al.*, 2001; LEMOINE *et al.*, 2008).

Figura 3 - Regimes de escoamento observados em reatores pneumáticos. a) Regime homogêneo; b) Regime heterogêneo (churn-turbulent); c) Regime heterogêneo (slug flow).



Fonte: Mendes (2016)

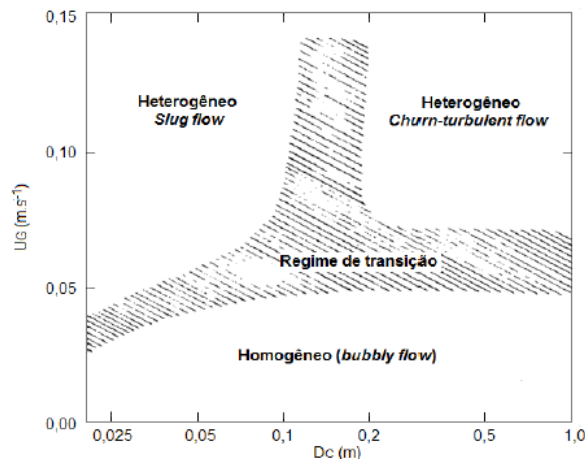
Com o aumento da velocidade superficial do gás, a instabilidade do escoamento aumenta e, desta forma, o regime homogêneo não se mantém. Devido ao fenômeno de coalescência, são formadas bolhas maiores com alta velocidade de subida, o que leva a uma intensa circulação de líquido, além de criar zonas de recirculação no reator, para onde bolhas pequenas são arrastadas. O padrão de escoamento formado neste caso está relacionado a um regime heterogêneo do tipo *churn-turbulent*, caracterizado por uma ampla distribuição de tamanho de bolhas e um perfil radial parabólico de retenção gasosa (SHAMLOU *et al.*, 1994; MOUSTIRI *et al.*, 2001; VIAL *et al.*, 2001; LEMOINE *et al.*, 2008).

Um regime heterogêneo do tipo *slug flow* é observado somente em reatores de escala laboratorial com pequeno diâmetro de coluna, em geral menores de 0,15 m (LEMOINE *et al.*, 2008). Nestes reatores, a interferência da parede sobre o escoamento é bastante expressiva, gerando bolhas grandes com formato parabólico, conhecidas como bolhas de Taylor (Figura 3(c)) (Vial *et al.*, 2001). Neste tipo de escoamento, o diâmetro da coluna possui um forte impacto sobre a mistura e transferência de massa (LEMOINE *et al.*, 2008).

Em biorreatores coluna de bolhas, observa-se que regime homogêneo ocorre em velocidades superficiais de gás inferiores a $0,05 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ (MOUSTIRI *et al.*, 2001; LEMOINE *et al.*, 2008). Todavia, Vial *et al.* (2001) trouxeram em sua pesquisa que, quando são utilizados separadores gás-líquido eficientes nestes reatores, este regime é demonstrado somente para velocidades de gás inferiores a $0,03 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ em sistemas água-ar. Corroborando com estas observações, o gráfico exposto na Figura 4 pode ser utilizado

para se obter maiores informações em relação à velocidade superficial de gás e ao diâmetro do reator em que cada um dos três regimes é obtido. Cabe ressaltar que este gráfico somente é válido para reatores coluna de bolhas operados com água ou soluções diluídas na fase líquida (SHAH *et al.*, 1982; MERCHUK & GLUZ, 2002).

Figura 4 - Regimes de escoamento observados em reatores coluna de bolhas em função da velocidade superficial de gás e diâmetro do reator, para água e soluções diluídas. D_c se refere ao diâmetro da coluna e U_G se refere à velocidade do gás.

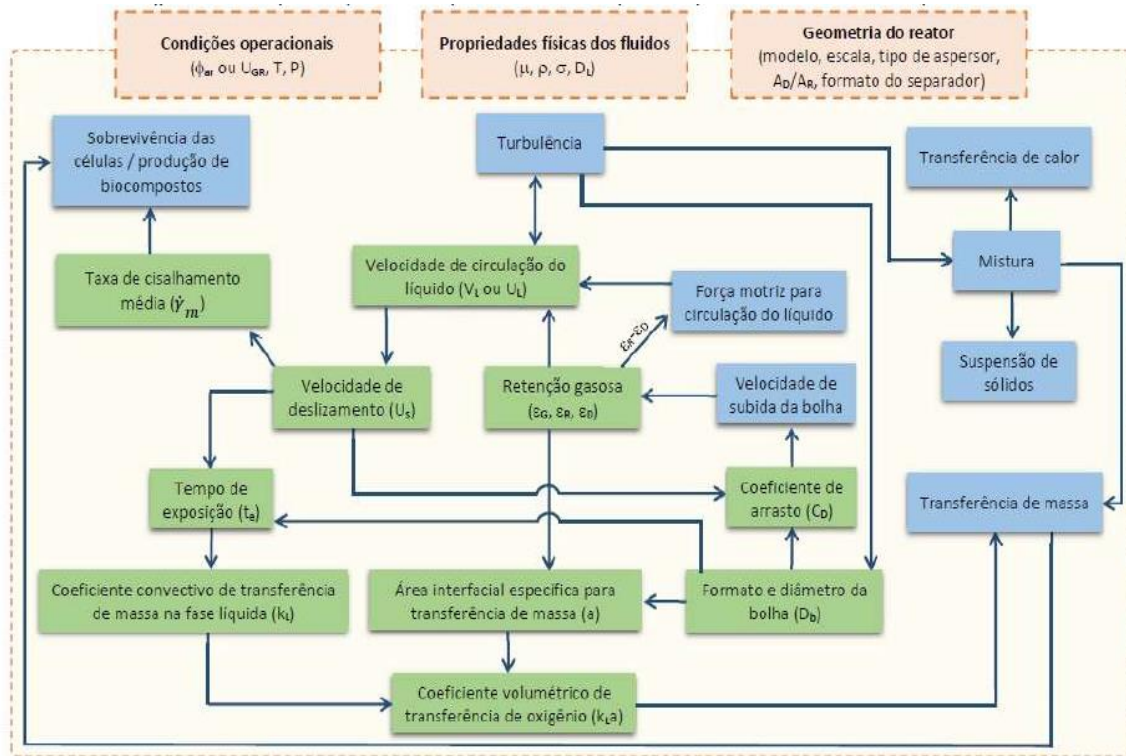


Fonte: Adaptado de Shah *et al.* (1982) e Merchuk e Gluz (2002).

3.3 Parâmetros para Análise de Desempenho

A análise de biorreatores pneumáticos envolve a utilização de parâmetros hidrodinâmicos e de transferência de massa, como a retenção gasosa, o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio ($k_L a$) e a taxa de cisalhamento média, os quais auxiliam tanto no projeto e operação destes equipamentos, quanto na variação de escala. Com o objetivo de descobrir a dinâmica dos fenômenos relacionados a estes parâmetros, muitas investigações vêm sendo realizadas, uma vez que a relação entre eles é extremamente complexa, sendo sensíveis à velocidade superficial do gás, às propriedades físicas dos fluidos de trabalho e à geometria do reator, conforme ilustrado pela Figura 5 (AL-MASRY 1999c; WEI *et al.*, 2000; JIN *et al.*, 2006)

Figura 5 - Principais relações entre os parâmetros de desempenhos utilizados na análise de biorreatores.



Fonte: Mendes, 2016.

3.3.1 Parâmetros de Desempenho

3.3.1.1 Retenção Gasosa ($\bar{\alpha}_G$)

Por ser facilmente mensurável, a retenção gasosa ($\bar{\alpha}_G$) é amplamente utilizada para caracterizar a hidrodinâmica de reatores pneumáticos. Este parâmetro está relacionado a variáveis importantes para a compreensão da dinâmica de biorreatores pneumáticos, tais como a velocidade de circulação do líquido, a área interfacial para transferência de massa e, conseqüentemente, o coeficiente volumétrico de transferência de massa (k_{La}) (RODRIGUEZ, 2015).

A retenção gasosa é definida como a fração ou o percentual de volume de gás presente numa mistura gás-líquido ou gás-líquido-sólido. Em sistemas bifásicos, é descrita matematicamente como mostrado pela Equação 1 (MEHRNIA *et al.*, 2005):

$$\alpha_G = \frac{V_G}{V_G + V_L} \quad (1)$$

na qual V_G é o volume de gás presente na dispersão gás-líquido e V_L é o volume de líquido na dispersão.

Em reatores que possuem área de seção transversal constante, a Equação 1 pode ser simplificada e reescrita segundo a Equação 2 (CHISTI, 1989), em que H_D é a altura da dispersão gás-líquido e H_L é a altura de líquido antes da aeração.

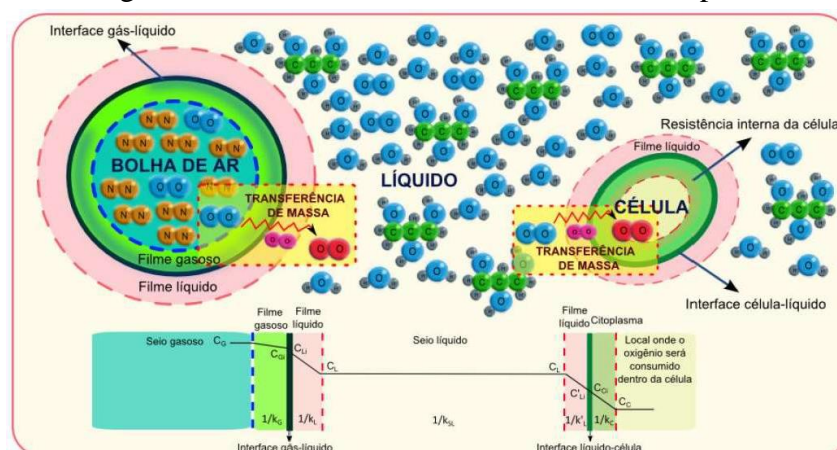
$$\alpha_G = \frac{H_D - H_L}{H_D} \quad (2)$$

3.3.2 Parâmetros de Transferência de Massa

A principal função de um biorreator é fornecer oxigênio, em bioprocessos aeróbios, suficiente para que o microrganismo possa desempenhar o seu papel de multiplicar as células e produzir os metabólitos de interesse (MENDES, 2016). Todavia, apesar de crucial, a baixa solubilidade do oxigênio em água (8,10 mg/L a 25°C e 6,99 mg/L a 35°C em equilíbrio com o oxigênio do ar a 1 atm), comparada à de outros nutrientes (como fontes de carbono, nitrogênio e fósforo), representa ainda uma das dificuldades em suprir a necessidade de aeração em cultivos submersos (SCHMIDELL, 2001). Deste modo, dimensionar corretamente o sistema de transferência de oxigênio é decisivo para garantir a manutenção da atividade respiratória das células, permitindo o bom desempenho de bioprocessos aeróbios (ESPERANÇA, 2018).

Diversas resistências à transferência de oxigênio são encontradas em um bioprocessos aeróbio, desde o seio gasoso até o interior da célula, conforme ilustrado na Figura 6. Todavia, existe a possibilidade de se modificar somente as resistências ligadas ao transporte do oxigênio do gás para o líquido, através de alterações nas condições do processo e na geometria do biorreator, permitindo que cada organismo possa se desenvolver dentro de suas próprias limitações (MENDES, 2016).

Figura 6 - Resistências à transferência de oxigênio encontradas desde a bolha de ar/oxigênio até o interior da célula em um dado bioprocessos.



Fonte: Mendes, 2016.

Assim, com o intuito de disponibilizar no meio líquido uma quantidade suficiente de oxigênio para a célula, as resistências à difusão do oxigênio e seu transporte, até atingir o seio do líquido, devem ser avaliadas (MENDES, 2016).

3.3.2.1 Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_La)

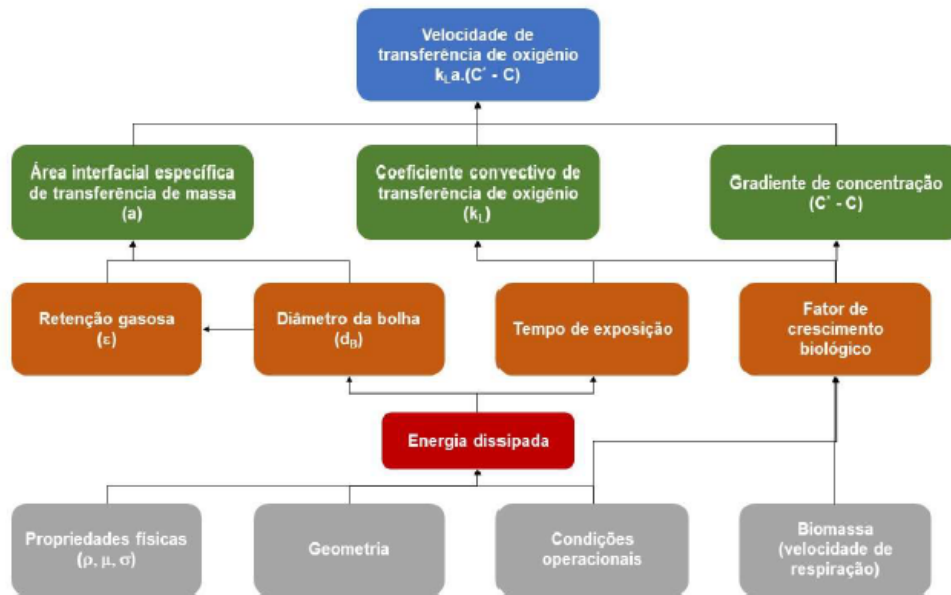
Na transferência de oxigênio da fase gasosa para a fase líquida são observadas etapas de transferência entre as fases, difusão pelo líquido até a célula e também consumo de oxigênio no interior da célula, sendo que uma resistência ao transporte de massa está associada a cada etapa (SCHMIDELL, 2001) (Figura 6). Em virtude de fatores como a alta movimentação das moléculas de oxigênio no interior da bolha, a baixa solubilidade do oxigênio e a alta agitação do meio líquido durante o processo, podem ser desprezadas as resistências relacionadas à difusão do oxigênio no seio e no filme gasoso e ao transporte do oxigênio no seio do líquido (SCHMIDELL, 2001; NAJAFPOUR, 2015). A resistência que limita o transporte do oxigênio do seio do gás até o seio do líquido é definida como a resistência relacionada ao transporte do oxigênio através do filme de líquido adjacente à interface gás-líquido, descrita como o inverso do coeficiente convectivo de transferência de massa da película líquida em torno da bolha (k_L^{-1}) (MENDES, 2016). Além disso, as resistências associadas ao transporte de oxigênio do gás para o líquido podem ser modificadas, ainda que exista um elevado número de resistências impostas à transferência de oxigênio da fase gasosa até o interior da célula. Tais modificações podem ocorrer por meio de alterações nas condições operacionais ou modificações na geometria do biorreator (MENDES, 2016).

Desta forma, a velocidade de transferência de oxigênio é descrita em termos do k_La , o qual é composto pelo coeficiente convectivo de transferência de massa (k_L) e pela área interfacial específica disponível para transferência de massa (a) e da força motriz para a transferência de oxigênio, conforme a Equação (3):

$$n_{O_2}a = k_La(C_S - C) \quad (3)$$

na qual k_La é o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (s^{-1}); C_S é a concentração de saturação (ou solubilidade) de oxigênio no líquido ($kg.m^{-3}$) e C é concentração de oxigênio no seio do líquido ($kg.m^{-3}$). Os principais fatores que afetam $n_{O_2}a$ são apresentados na Figura 7.

Figura 7 - Relação entre parâmetros hidrodinâmicos e de transferência de oxigênio em biorreatores em diversos níveis.



Fonte: adaptado de Garcia-Ochoa e Gomez (2009).

Assim, de acordo com os conceitos acima apresentados, existem duas formas de melhorar a taxa de transferência de oxigênio ($n_{O_2} \cdot a$). A primeira delas seria aumentando a força motriz para a transferência de oxigênio, enriquecendo o ar com O_2 ou a pressão na cabeça do biorreator (*head space*), o que levaria a um aumento no valor de C_s . Uma segunda opção seria aumentar o $k_L a$, visto que este é o produto entre duas variáveis ($k_L \cdot a$), sendo que, devido à sua importância em relação aos mecanismos de transferência de massa, este parâmetro tornou-se chave na avaliação da eficiência de um dado sistema aeróbio (ESPERANÇA, 2018).

O fator k_L é inversamente proporcional à espessura da película de líquido estagnado ao redor da bolha, sendo dependente das condições operacionais do equipamento (LEWIS & WHITMAN, 1924). Desta forma, ao aumentarmos a vazão de ar ou as condições de agitação, maior será a velocidade do líquido no biorreator e menor a espessura desta película, o que acarreta em um maior valor de k_L (ESPERANÇA, 2018). Já a área interfacial é definida por meio da retenção gasosa global (α_G) e do diâmetro das bolhas de ar (d_B), conforme Equação (4):

$$a = \frac{6\alpha_G}{d_B(1-\alpha_G)} \quad (4)$$

em que a é a área superficial específica ou área interfacial (m^{-1}). Portanto, aumentar a retenção gasosa ou diminuir o diâmetro das bolhas pode levar a um aumento do valor da

área interfacial específica e, conseqüentemente, do $k_{L,a}$. Todavia, aumentar a retenção gasosa com bolhas grandes pode ter um efeito contrário.

3.3.2.2 Diâmetro de Bolhas (d_B)

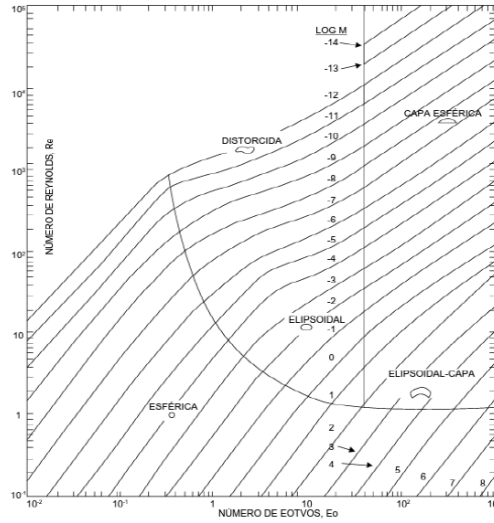
O diâmetro de bolha (d_B) é um parâmetro de extrema importância para a compreensão tanto dos fenômenos de transferência de massa quanto de movimento, ainda que não seja um parâmetro hidrodinâmico propriamente dito.

A formação de bolhas em sistemas gás-líquido sofre a influência das condições operacionais (vazão de gás, temperatura e pressão), geometria do equipamento (geometria do aspersor e diâmetro do orifício), além das propriedades físicas dos fluidos (densidade, viscosidade, propriedades reológicas, tensão superficial e polaridade); logo, a quebra e/ou coalescência de bolhas (que refletem diretamente no tamanho da bolha) são fenômenos que possuem uma alta sensibilidade a quaisquer alterações no processo (KULKARNI & JOSHI, 2005). A influência de algumas variáveis sobre o diâmetro da bolha foi correlacionada conforme a Equação 5 (JAMIALAHMADI & MULLER-STEINHAGEN, 1989). Nesta equação, o diâmetro da bolha é correlacionado ao diâmetro do orifício do aspersor, a tensão superficial do líquido, além das densidades das fases líquida e gasosa.

$$d_B \propto \frac{6 \cdot D_O \cdot \sigma_L^{1/3}}{\rho_L \cdot \rho_G} \quad (5)$$

A determinação dos formatos das bolhas sofre influência, além dos fenômenos de quebra e coalescência, das propriedades físicas dos fluidos e da turbulência do meio. De maneira geral, as bolhas podem apresentar uma superfície rígida, no qual o diâmetro da bolha é inferior a 2mm, móvel (fluida) com formato esférico, elipsoidal e distorcido etc. (HEIJNEN & VAN'T RIET, 1984; SARDEING *et al.*, 20016), conforme demonstrado na Figura 8.

Figura 8 - Formatos de bolhas e gotas em movimento gravitacional sem obstáculos através de líquidos



Fonte: Rosa (2012)

O comportamento de bolhas em líquidos foi investigado no estudo de Clift, Grace e Weber, de 1978, por meio de correlações utilizando-se números adimensionais como o de Reynolds (Equação 6) e Eötvös e Morton (ROSA, 2012) (Equação 7). Na Equação 7, V_r corresponde a velocidade relativa gás-líquido (diferença entre as velocidades do gás e do líquido). Tais adimensionais são maneiras distintas de se relacionar as forças de tensão superficial, viscosidade, inércia e empuxo e, assim, expressam a importância das propriedades físicas do líquido, vazão do gás e ação da gravidade tanto sobre o formato quanto sobre o escoamento de bolhas (MENDES, 2016).

$$Re_b = \frac{\rho_L V_r d_B}{\mu_L} = \frac{\text{inércia}}{\text{viscosidade}} \quad (6)$$

$$Eo_b = \frac{(\rho_L - \rho_G) g d_B^2}{\sigma_L} = \frac{\text{empuxo}}{\text{tensão superficial}} \quad (7)$$

A velocidade relativa (V_r) na Equação 6 pode ser determinada através do coeficiente de arrasto (C_D) conforme Equação 8, descrita com base em Ishii e Zuber (1979), Karamanev (1994) e Simonnet *et al.* (2007). Esta equação permite o cálculo de C_D para bolhas de formato não-esférico escoando em um líquido, seja ele newtoniano ou não-newtoniano, e considera a interferência de outras bolhas dispersas no líquido por meio do termo $(1 - \alpha_G)$. A velocidade relativa também pode ser calculada conforme Equação 9 (ROSA, 2012), a partir da velocidade de deslizamento.

$$C_D = \frac{4 g (\rho_L - \rho_G) D_b^3 (1 - \alpha_G)}{3 \rho_L D_H^2 V_r^2} \quad (8)$$

$$U_S = (1 - \alpha_G)V_r \quad (9)$$

A injeção de gás é responsável pela movimentação do meio reacional em biorreatores pneumáticos, promovendo a homogeneização do sistema e, portanto, facilitando os processos de transferência de quantidade de movimento, calor e massa. Logo, a forma como acontece a aspensão de um gás, irá influenciar significativamente o desempenho global do processo, ou seja, o formato do aspensor pode alterar a hidrodinâmica de um biorreator pneumático.

3.3.3 Parâmetros Hidrodinâmicos

No início de um determinado bioprocessamento geralmente há o movimento do líquido no interior do reator, marcado por uma dada velocidade de circulação deste líquido, a qual, conseqüentemente, gera a turbulência do meio. Logo em seguida, uma redução do tempo necessário para a mistura dos compostos inseridos no reator (nutrientes, como O₂, soluções para controle de pH) irá acontecer, assim como o aumento do transporte convectivo de calor e de massa (MENDES, 2016). O movimento do líquido e a mistura ajudam na suspensão de sólidos, que podem ser desde a própria biomassa (microorganismos em suspensão) até nutrientes sólidos como bagaço de cana-de-açúcar (CUNHA *et al.*, 2012; ESPERANÇA *et al.*, 2014).

A adição de componentes à água (assim como a própria turbulência) afeta os fenômenos de quebra e coalescência, levando a modificações tanto no formato quanto no tamanho das bolhas de gás (d_B) (FREITAS & TEIXEIRA, 2001; DENG *et al.*, 2001; PAINMANAKUL *et al.*, 2005). O tamanho da bolha influencia na transferência de massa e nos parâmetros hidrodinâmicos, como a retenção gasosa e a velocidade de circulação do líquido, seja ela superficial ou intersticial (U_L e V_L, respectivamente). Este último parâmetro é influenciado indiretamente pelo efeito de d_B, pois a retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$) o afeta diretamente. Em reatores pneumáticos a velocidade do líquido está relacionada à área de seção transversal dos canais formados pelas bolhas por onde o líquido deverá escoar, a qual é função de $\bar{\alpha}_G$ (MENDES, 2016).

Além disso, como a velocidade de deslizamento está relacionada a uma velocidade relativa entre o gás e o líquido, a velocidade do líquido (em regime de turbulência) irá afetar esta variável, que está relacionada a taxa de cisalhamento imposta pelo fluido. A taxa de cisalhamento é um parâmetro decisivo para a eficiência do bioprocessamento em questão, uma vez que campos de velocidade/cisalhamento ao longo do equipamento

podem afetar de maneira adversa o microrganismo, levando ao surgimento de processos bioquímicos no interior da célula, os quais podem ou não produzir os biocompostos de interesse, cabendo ressaltar a possibilidade de ocorrer a lise celular (MENDES, 2016).

Segundo Esperança (2018), o desempenho de um biorreator pode ser avaliado por meio de uma abordagem que trata o “reator microbiológico como uma operação unitária”, avaliando quais os efeitos dos tipo de fluido e de biorreator (e sua geometria) e condições operacionais em parâmetros de desempenho relacionados à transferência de quantidade de movimento (hidrodinâmica), calor e massa, empregando-se para isso as simulações em fluidodinâmica computacional (CFD) como uma ferramenta para obtenção de resultados.

A análise do comportamento hidrodinâmico de um processo pode ser considerada como a base para compreender o sistema em sua totalidade, uma vez que os fenômenos envolvidos na transferência de movimento influenciarão de maneira direta as transferências de calor e de massa, além do cisalhamento imposto pelo sistema. Assim sendo, as teorias que descrevem tais parâmetros serão apresentadas nas subseções que se seguem.

3.3.1 Taxa de Cisalhamento ($\dot{\gamma}$)

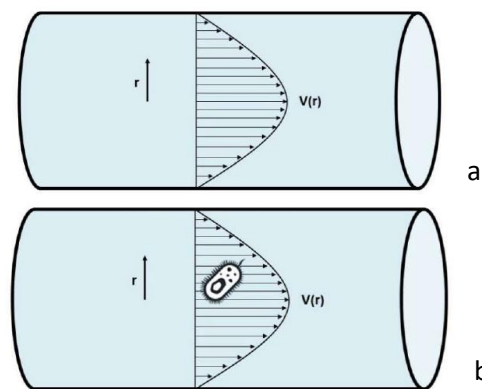
A taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) é um parâmetro indispensável para concepção de biorreatores, visto que sua determinação possibilita estimar a magnitude dos danos celulares em biosistemas sensíveis ao cisalhamento e também correlacionar os parâmetros de transferência de massa e hidrodinâmicos (MENDES, 2016). Em biorreatores, a taxa de cisalhamento é função da posição. Porém, devido à complexidade em se determinar a taxa de cisalhamento local, considera-se a existência de uma taxa de cisalhamento média, a qual é proporcional à velocidade superficial do gás (AL-MASRY & CHETTY, 2006).

A tensão de cisalhamento ocorre devido à exposição das células a um gradiente de velocidade do fluido no qual está inserida. Por exemplo, ao considerar um escoamento plenamente desenvolvido no interior de um tubo em regime laminar, é possível observar o surgimento de um perfil de velocidade (Figura 9a), o que faz com que qualquer célula que esteja sendo “carregada” pelo fluido sofra os efeitos deste gradiente de velocidade, visto que cada porção de fluido irá se deslocar com uma velocidade local diferente. Isto

ocasiona velocidades relativas ao longo do comprimento celular (Figura 9b), levando a uma fragmentação da estrutura morfológica (Figura 10) (ESPERANÇA, 2018).

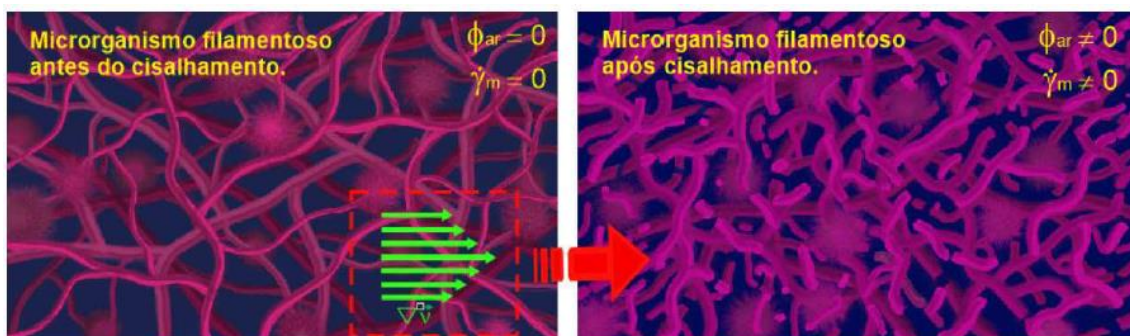
As células cultivadas em biorreatores estão expostas ao ambiente hidrodinâmico do equipamento, incluindo as tensões cisalhantes, que podem levar a danos morfológicos e fisiológicos irreparáveis às células, dependendo da magnitude destas forças, acarretando tanto na perda de viabilidade quanto na ruptura e morte celular. Com isso, a produção do composto de interesse poderia ser comprometida, o que inviabilizaria o bioprocessamento em questão (MENDES, 2016).

Figura 9 - escoamento de um líquido no interior de um tubo: (a) formação do perfil de velocidades; (b) ação do gradiente de velocidades sobre um microrganismo.



Fonte: Esperança, 2018.

Figura 10 - Ilustração exemplificando como gradientes de velocidade podem fragmentar microrganismos filamentosos.



Fonte: Mendes, 2016.

De acordo com o exemplo acima, a taxa de cisalhamento ($\dot{\gamma}$) definida pela Equação 10 corresponde à variação da velocidade axial (escoamento unidirecional) em relação ao raio do tubo (r).

$$\dot{\gamma} = \left| \frac{dv}{dr} \right| \quad (10)$$

Todavia, em escoamentos mais complexos, tais como os observados em biorreatores, tal definição não é simples. É necessário, nestes casos, considerar os três componentes do vetor velocidade de líquido e as três coordenadas espaciais existentes no sistema cartesiano, além das interações gás-líquido-paredes do biorreator (ESPERANÇA, 2018).

A estimativa deste parâmetro em biorreatores pneumáticos tem sido realizada através de análise teórica (PEREZ *et al.*, 2006), intuitiva (MERCHUK & BENZVI, 1992; MERCHUK & BERZIN, 1995; GRIMA *et al.*, 1997), analógica (NISHIKAWA *et al.*, 1977; SHI *et al.*, 1990; AL-MASRY & CHETTY, 1996; CERRI *et al.*, 2009; THOMASI *et al.*, 2010) e correlativa (SCHUMPE & DECKWER, 1987) e, mais recentemente, aplicando a fluidodinâmica computacional (ANASTASIOU *et al.*, 2013; MAVADDAT *et al.*, 2014; PAWAR, 2017; PAWAR, 2018, ESPERANÇA *et al.*, 2019 e ESPERANÇA *et al.*, 2020).

As pesquisas voltadas para a estimativa da taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) vêm permitindo a comparação de diferentes modelos de biorreatores, sendo que o estudo da taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$), nas regiões próximas ao aspersor, tem permitido uma maior compreensão dos efeitos do cisalhamento em bioprocessos (THOMASI *et al.*, 2010; CERRI & BADINO, 2012, ESPERANÇA *et al.*, 2019).

Merchuk *et al.* (1998) verificaram a influência do tipo de aspersor no processo de mistura em um biorreator de circulação interna, do tipo *airlift* de cilindros concêntricos, sendo considerado como fluido a água do mar. Os resultados apontaram que a geometria e o tamanho do poro são fatores consideráveis em sistemas cujos fluidos não favorecem a coalescência, sendo o aspersor capaz de modificar o regime de escoamento (uniforme, transiente e heterogêneo). Além disso, foi observado que o tempo de mistura sofreu mais influência em baixas velocidades gasosas.

Badino *et al.* (2006, 2007) patentearam (agência financiadora: FAI-UFSCar) um aspersor tipo “cruzeta” instalado em biorreator *airlift* de cilindros concêntricos, o qual foi capaz de promover boa transferência de oxigênio, com menor consumo de energia, quando comparado ao biorreator convencional tipo tanque agitado e aerado.

Os trabalhos desenvolvidos na simulação da hidrodinâmica de biorreatores pneumáticos, utilizando a técnica CFD, propõem, em sua maioria, modelos matemáticos baseados em modelos já existentes nos pacotes computacionais disponíveis, tais como

FLUENT[®], *CFX*[®] e *OPENFOAM*[®]. Tais modelos, provenientes das equações de conservação de quantidade de movimento, energia e massa, possuem como objetivo descrever o comportamento hidrodinâmico do sistema, a fim de prever parâmetros de processo indispensáveis na análise de desempenho de biorreatores.

Cockx *et al.* (1997) propuseram um modelo hidrodinâmico para reatores de circulação interna de geometria retangular. A formulação do modelo foi fundamentada em duas fases (líquido-gás), adotando-se os modelos de caixa preta (1D) e fluidodinâmico (3D). As equações de balanço foram resolvidas no *software ASTRID CFD*[®], sendo os resultados obtidos por este modelo coerentes com os ensaios experimentais. Todavia, os resultados são restritos à geometria adotada nesta pesquisa.

Mudde e Van Den Akker (2001) obtiveram resultados de simulação bidimensional (2D) e tridimensional (3D) de um reator *airlift* retangular de circulação interna, o qual operava em estado estacionário à baixas vazões de alimentação de ar. Os parâmetros velocidade de líquido e fração de gás foram calculados através do *software FLUENT*[®] v. 4.5, considerando o modelo k- ϵ de turbulência. As respostas simuladas, principalmente referentes a região de separação, demonstraram sensibilidade à geometria do aspensor e ao fato deste estar, ou não, tocado à parede interna.

Van Baten *et al.* (2003) estudaram a hidrodinâmica de biorreatores *airlift* de circulação interna, com a proposição e validação de modelos matemáticos baseados na turbulência em fase líquida (k- ϵ), por meio do *software* comercial *CFX*[®] versões 4.2 e 4.4. A fração volumétrica de gás e as velocidades de líquido nas regiões de subida e descida demonstraram boa concordância, sendo utilizada a hipótese de simetria axial.

Santos (2005) analisou a influência da fase contínua, velocidade de entrada do gás, tamanho das bolhas e de três correlações para força interfacial de arraste em um biorreator coluna de bolhas, utilizando o modelo Euleriano. Perante os resultados, o autor concluiu que, para altas velocidades superficiais do gás, deve-se considerar os fenômenos de coalescência e quebra das bolhas.

Li *et al.* (2009) investigaram o efeito da configuração do aspensor em um reator coluna de bolhas cilíndrico, utilizando para isso a técnica de CFD aliada à modelos de coalescência, utilizando o modelo MUSIG (*Multiple-Size-Group*). Como resultado, os autores verificaram uma grande influência na retenção gasosa global, tempo de mistura, turbulência e tamanho das bolhas, sendo que ao aumentar o número de orifícios do

aspensor, houve um aumento na retenção gasosa global e uma diminuição do tamanho das bolhas.

3.4 Fluidodinâmica Computacional

3.4.1 Aspectos Gerais

A Fluidodinâmica Computacional (CFD, do inglês Computational Fluid Dynamics) pode ser definida como uma ferramenta de análise de problemas que envolvem o escoamento de fluidos e os fenômenos de troca de calor e massa, além de reações químicas, turbulência, etc., através da simulação computacional. Consiste no emprego de técnicas numéricas avançadas para a resolução de equações diferenciais parciais que descrevem as transferências de quantidade de movimento, calor e massa, possibilitando a previsão quantitativa de escoamentos de fluidos, assim como dos fenômenos relacionados aos mesmos, respeitando o princípio de conservação de tais grandezas (RODRIGUEZ, 2015; RODRIGUES, 2018).

Para a resolução numérica das equações é necessário implementar métodos numéricos discretos, tal como o método dos volumes finitos, utilizado pela maioria dos *softwares* de CFD. Desta forma, as equações diferenciais parciais são discretizadas e, então aplicadas para qualquer elemento do volume de controle finito que esteja no interior do domínio, ou seja, na região onde ocorre o escoamento e outros fenômenos de transferência. Para tanto, faz-se necessário que a geometria desse domínio seja particionada em um elevado número de células com volumes de controle finitos. Após a definição das condições iniciais, de contorno e das condições físicas, as equações de balanço discretizadas são resolvidas em cada célula, de maneira iterativa, sendo que a solução (perfis de velocidade, pressão, concentração, etc.) é melhorada a cada passo (RODRIGUEZ, 2015).

A utilização desta técnica permite a obtenção de perfis espaciais e temporais de variáveis como velocidade, fração volumétrica de gás, pressão e temperatura, além do cálculo de valores globais ou locais de parâmetros de desempenho, obtenção de mapas de contorno e visualização campos vetoriais. Dentre as vantagens de utilização desta ferramenta, pode-se destacar (ESPERANÇA, 2018; RODRIGUES, 2018):

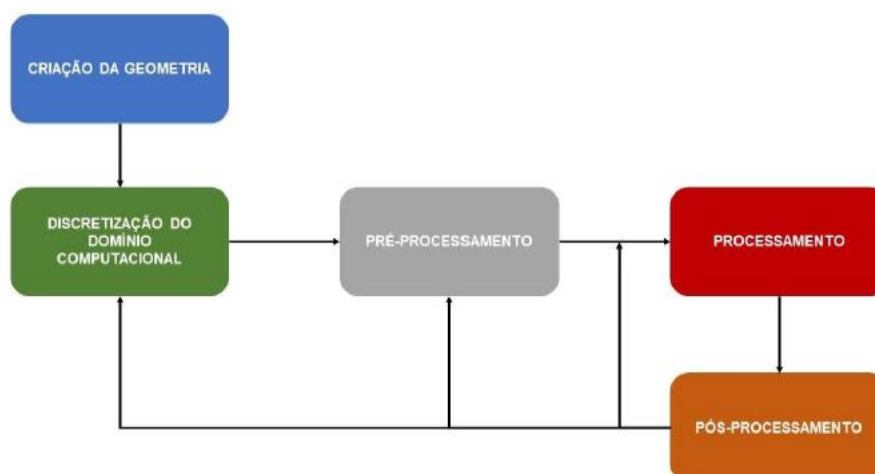
- Simulação de fenômenos de transporte em geometrias irregulares e complexas para condições generalizadas;

- Obtenção de respostas de maneira barata e em períodos relativamente rápidos, quando comparada à abordagem experimental, visto que, uma vez verificado o modelo adotado na simulação, não há necessidade de alta gama de experimentos;
- Facilidade na investigação do efeito de parâmetros físicos no desempenho global de um processo ou no comportamento de uma variável específica;
- Aplicação em otimização e aumento de escala (*scale-up*);
- Obtenção de uma grande quantidade de informação (variáveis resposta) realizando-se um número pequeno de simulações.
- Utilização em etapas de otimização de equipamentos e processos.

Embora a aplicação da técnica apresente muitas vantagens, é necessário ressaltar que sua prática engloba a obtenção de soluções aproximadas do problema real, visto que muitos fenômenos que ocorrem na prática não estão perfeitamente modelados matematicamente pelas teorias científicas atuais, sendo os modelos matemáticos elaborados por meio de hipóteses e considerações; a necessidade de simplificação da modelagem, com o intuito de reduzir o esforço computacional; e erros ocasionados pela limitação dos próprios métodos numéricos aplicados na resolução das equações diferenciais parciais, inerentes a todos os métodos numéricos e computacionais, e também a precisão da máquina (ESPERANÇA, 2018; RODRIGUES, 2018).

As simulações de escoamentos por meio da Fluidodinâmica Computacional envolvem cinco etapas (Figura 11), sendo elas a criação da geometria do domínio computacional, discretização do domínio computacional (geração da malha computacional); pré-processamento; processamento e pós-processamento.

Figura 11 - Etapas envolvidas na aplicação da Fluidodinâmica Computacional.



Fonte: Esperança, 2018.

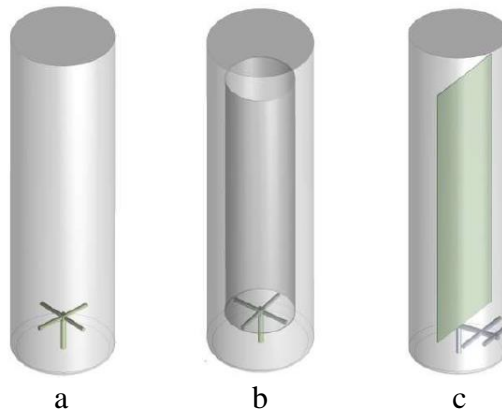
A aplicação de CFD consiste, primeiramente, em criar a geometria do sistema analisado, ou seja, o domínio computacional, o qual deve ser subdividido em pequenos elementos nos quais as equações de conservação serão resolvidas, constituindo assim a malha computacional. Feito isso, as simulações computacionais são realizadas através da implementação dos modelos matemáticos que descrevem o sistema avaliado de maneira mais assertiva, assim como os métodos numéricos de resolução mais adequados (pré-processamento). Em seguida, a solução numérica do sistema de equações diferenciais parciais é iniciada, até que seja alcançado um critério de parada determinado previamente (processamento). Por fim, após a obtenção de uma solução que atenda aos requisitos pré-estabelecidos, é feita a análise dos resultados (pós-processamento) (RODRIGUEZ, 2015; ESPERANÇA, 2018).

3.4.2 Definição da geometria (volume de controle)

Esta é a primeira etapa para o uso da ferramenta CFD. Nela, é realizada, através de ferramentas de desenho computacionais oferecidas por pacotes gráficos, a representação virtual do domínio real objeto de estudo. Deve-se salientar que o nível de detalhamento e complexidade do desenho, ou seja, formatos que não apresentam um padrão geométrico definido (triângulos, quadriláteros, círculos e polígonos regulares), irão implicar em esforços computacionais maiores, ou seja, maior necessidade de recursos de *hardware e software* e, conseqüentemente, um maior tempo de processamento para obtenção da solução do sistema (RODRIGUEZ, 2015).

Além disso, durante a criação do domínio computacional, as superfícies que irão servir de condições de contorno para a resolução do problema serão empregadas, ou seja, nesta etapa serão criados planos com entrada/saída de um fluido, prescrição de pressão, paredes, dentre outros, conforme Figura 12 (ESPERANÇA, 2018).

Figura 12 - Domínio computacional de três biorreatores pneumáticos: a) coluna de bolhas; b) airlift de dutos concêntricos; c) airlift split.



Fonte: Rodriguez, 2015.

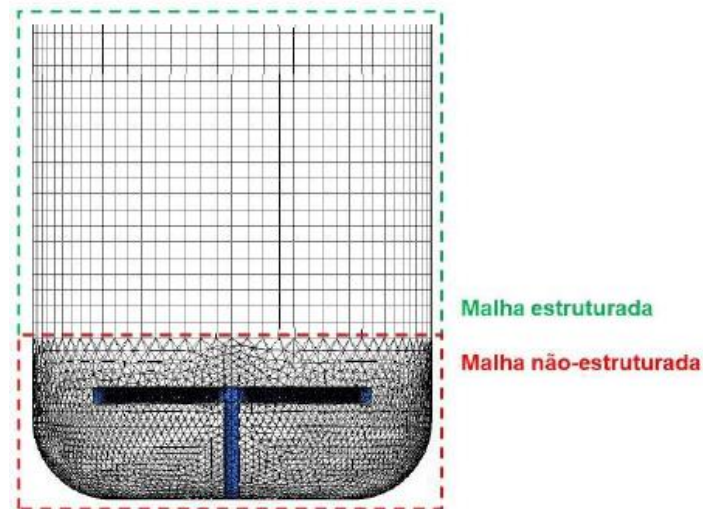
3.4.3 Geração da malha computacional

Após a criação do domínio computacional, é necessário subdividi-lo em elementos (2D ou 3D) pequenos e finitos, denominados células computacionais, que são os pequenos elementos de volume formados entre os nós da malha, permitindo que a resolução numérica das equações diferenciais parciais seja feita de forma discreta para cada célula computacional. O nó de uma malha é caracterizado pela intersecção entre as linhas de subdivisão da mesma (ESPERANÇA, 2018; RODRIGUES, 2018).

O resultado da simulação irá fornecer perfis espaciais para as grandezas avaliadas, tais como velocidade e concentração. Todavia, esta etapa exige certo cuidado, pois, aumentar a quantidade de elementos de forma indiscriminada levará um esforço computacional cada vez maior e, possivelmente a erros na simulação.

A malha computacional pode ser classificada em estruturada ou não-estruturada (Figura 13). A primeira classificação diz respeito às malhas que apresentam padrão definido de construção, facilitando os cálculos e otimizando a solução, pois os nós são facilmente endereçados. No entanto, sua aplicação é restrita a geometrias simples ou a regiões particulares de domínios complexos. Quanto as malhas não estruturadas, estas não possuem padrão regular, requisitando um maior esforço computacional. Todavia, sua utilização é mais ampla, podendo ser aplicada a geometrias complexas ou situações em que as dimensões do domínio variam consideravelmente (ESPERANÇA, 2018; RODRIGUES, 2018).

Figura 13 - Malhas estruturada e não-estruturada em um biorreator coluna de bolhas.



Fonte: Esperança, 2018.

Com intuito de se evitar divergências numéricas, é necessário que a malha seja avaliada antes de ser empregada na etapa de processamento. Dentre os parâmetros de qualidade da malha, destacam -se o *equisize skew*, *equiangle skew* e o *aspect ratio*. O primeiro descreve a distorção do elemento computacional por meio da avaliação da sua área (células 2D) ou do seu volume (3D) em relação aos valores de uma célula de referência. Bons elementos computacionais apresentam valores deste parâmetro inferiores a 0,50, e malhas computacionais de elevada qualidade possuem valores médios de *equisize skew* que variam entre 0,10 e 0,40 (ANSYS Inc. 2.4 GAMBIT, User's Guide).

O parâmetro *equiangle skew* diz respeito a distorção do elemento computacional através da avaliação dos ângulos observados entre as arestas que compõem a célula, sendo estes valores comparados àqueles verificados em uma célula referência. São considerados bons elementos computacionais aqueles com valores inferiores a 0,50, sendo que valores de *equiangle skew* entre 0,10 e 0,40 caracterizam malhas computacionais de elevada qualidade. Por fim, o *aspect ratio* descreve o quão regular um elemento computacional é, sendo que quanto mais próximo do valor unitário, mais regular (equilátero) será o elemento (ANSYS Inc. 2.4 GAMBIT, User's Guide).

3.4.4 Pré-processamento

Após finalizar a malha e comprovar sua qualidade por meio da análise dos parâmetros *equisize skew*, *equiangle skew* e o *aspect ratio*, têm-se início a etapa de pré-processamento. Nesta etapa, são definidos a abordagem fenomenológica, os modelos físicos de turbulência, forças interfaciais, dentre outros, além das propriedades físicas dos

fluidos, condições iniciais (para problemas em regime transiente) e de contorno e, por fim, os métodos numéricos que serão utilizados na resolução das equações de conservação. Um arquivo de dados, denominado de caso, é gerado ao final desta etapa, contendo todas as informações do problema (RODRIGUEZ, 2015).

É essencial que as condições de contorno sejam definidas, a fim de que os resultados das simulações correspondam ao observado fisicamente, visto que tais resultados irão fornecer informações como valores de velocidade de fluidos entrando/saindo do domínio, condições de pressão prescrita, entre outras. Em biorreatores, as principais condições de contorno empregadas na simulação hidrodinâmica são a velocidade prescrita no contorno de entrada, a qual informa tanto o valor quanto a direção de entrada de um fluido em uma determinada face (área), sendo aplicada para indicar a velocidade de injeção de ar através dos furos do aspersor em biorreatores pneumáticos; a condição de não deslizamento na parede, que indica a relação entre as velocidades do fluido e de uma parede sólida, sendo utilizada, na maioria dos casos, a condição de não-deslizamento para ambas as fases; e a pressão prescrita no contorno de saída, informando a relação entre a pressão no interior e no exterior do domínio computacional, sendo esta condição aplicada no topo de biorreatores pneumáticos para informar que este está sujeito à pressão atmosférica (ESPERANÇA, 2018).

3.4.5 Processamento

Nesta etapa, as informações definidas no pré-processamento são lidas e, então inicia-se a resolução das equações envolvidas no processo. Esta resolução é realizada de forma iterativa e está sujeita à complexidade do problema e ao nível dos recursos computacionais disponibilizados, podendo demorar minutos ou meses para atingir a solução que satisfaça as condições apresentadas e o critério de parada desejado (RODRIGUEZ, 2015).

3.4.6 Pós-processamento

Por fim, quando a solução do problema é atingida, a etapa de pós-processamento é iniciada. Esta etapa é caracterizada pela interpretação da resposta, podendo os resultados serem disponibilizados graficamente ou em mapas de contorno, campos vetoriais, animações representando avanço com o tempo, entre outras formas que o *software* disponibiliza (RODRIGUEZ, 2015).

3.5 Tipos de Abordagens Matemáticas

Conforme mencionado anteriormente, a ferramenta CFD - Computational Fluid Dynamics - é fundamentada na resolução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, fazendo uso de um conjunto de técnicas numéricas e cálculos computacionais para alcançar a resposta desejada. Para se obter a resposta fluidodinâmica, duas abordagens principais podem ser utilizadas na modelagem do problema: a Euler-Lagrange e a Euler-Euler, sendo que em escoamentos bifásicos, tais como os escoamentos gás-líquido observados em biorreatores pneumáticos, ambas podem ser utilizadas.

3.5.1 Abordagem Lagrangeana

A abordagem Euler-Lagrange, também chamada de abordagem Lagrangeana, pode ser dividida de acordo com o tratamento dado a fase dispersa:

3.5.1.1 Modelagem Euler - Lagrange

Neste modelo, a fase fluida é tratada como contínua (ou seja, como fase Euleriana), através da resolução das equações de Navier-Stokes. Já a fase dispersa é tratada como discreta, descrevendo-se todas as características referentes ao escoamento de cada partícula e considerando-se que cada uma delas é capaz de trocar quantidade de movimento (momento), energia e massa com a fase fluida, sendo que as diferentes fases podem interagir entre si. Deste modo, aplica-se um balanço de forças individual para as partículas que compõem a fase dispersa, obtendo-se a trajetória individual de cada partícula (ANSYS, 2013a).

O algoritmo de solução é iniciado por meio do cálculo das equações da fase contínua (Euleriana) e, em seguida, as velocidades e posições das partículas para o próximo passo de tempo são obtidas utilizando a segunda Lei de Newton para modelar cada partícula (KUMAR & RAMKRISHNA, 1996b; LAGE, 2002). Os modelos, tanto para o movimento quanto para a posição de cada partícula estão descritos nas Equações 11 e 12, nas quais m_i e u_i representam a massa (m_i constante) e a velocidade da partícula i , respectivamente, e ΣF_i é a soma das forças atuantes na partícula i .

$$m_i \frac{du_i}{dt} = \Sigma F_i \quad (11)$$

$$\frac{dx_i}{dt} = u_i \quad (12)$$

Em uma terceira etapa, os efeitos das partículas sobre o campo de escoamento da fase contínua são computados em um procedimento iterativo, sendo que as interações partícula-partícula ou partícula-parede também podem ser incorporadas ao modelo (SANTOS, 2010).

A limitação desta abordagem está no fato de que há um maior esforço computacional na obtenção das soluções, visto que este cresce de maneira drástica com o aumento do número de partículas simuladas. Devido a isto, é recomendada para escoamentos em que a fase dispersa seja encontrada em baixas concentrações, ou que apresente diferentes propriedades como tamanho, composição química, entre outros. Deste modo, a abordagem Euler-Lagrange se faz adequada quando a fase particulada é considerada diluída, em casos de escoamento de partículas isoladas ou ainda para o cálculo da distribuição do tempo de residência (SILVA, 2011).

3.5.1.2 Simulação Numérica Direta (DNS - Direct Numerical Simulation)

Neste modelo é considerado que a partícula ocupa apenas uma célula da malha em dado instante de tempo fornecendo somente uma velocidade relevante atuando na célula, sendo então a turbulência resolvida diretamente sem a necessidade de adotar nenhum modelo adicional. Tal consideração leva a uma modelagem muito mais complexa para a locomoção das partículas, o que gera a necessidade de malhas muito mais refinadas e passos de tempo muito pequenos, logo o esforço computacional requerido é bastante alto (LAGE, 1992). Devido à precisão dos resultados obtidos, as simulações DNS vêm sendo utilizadas para verificar e validar outras formas de modelagem quando a realização de experimentos é impossível (SILVA, 2008).

Os modelos acima descritos permitem o entendimento de que as abordagens Lagrangeanas necessitam de um alto poder de computação, o que as tornam menos utilizadas para o cálculo de escoamentos multifásicos complexos e também para aplicações em processos reais, nos quais a fração volumétrica da fase dispersa é usualmente alta (SILVA, 2008).

3.5.2 Volume de Fluido (VOF - Volume-of-Fluid)

É uma abordagem na qual as partículas fluidas (bolhas ou gotas) são consideradas deformáveis, e o acompanhamento das superfícies pode ser modelado, tornando-a uma abordagem mais refinada que as anteriores. Neste modelo, um único campo de

escoamento é considerado e a fase dispersa se distingue da contínua pela variação das propriedades do fluido através da interface, porém esta técnica é ainda pouco utilizada para a simulação de reatores reais devido ao imenso custo computacional (DELNOIJ *et al.*, 1997).

Em virtude da sua generalidade, este trabalho trata o modelo Euleriano-Euleriano com maior enfoque, sendo os detalhes sobre sua modelagem descritos nas próximas seções.

3.5.3 Modelagem Euler - Euler

As equações de conservação de massa e momento médias são utilizadas para descrever os perfis dinâmicos de ambas as fases em uma escala de tamanho superior à molecular, sendo fundamentada na promediação das equações de conservação usando médias volumétricas temporal ou amostral (ISHII, 1975; ENWALD *et al.*, 1996; DREW & PASSMAN, 1999).

Nesta abordagem, as diferentes fases do sistema são tratadas matematicamente como contínuas, interpenetrantes e interagem entre si, por meio de forças interfaciais. Isso implica que cada fase do sistema é descrita por seu próprio campo de soluções, seja como campo de velocidade ou de fração volumétrica, e que o campo de fração volumétrica da fase gasosa resultante da simulação é uma função contínua do espaço e no tempo, assumindo-se que a somatória das frações seja igual a um, não sendo possível detectar visualmente a forma e a precisa localização das bolhas (RODRIGUEZ, 2015). As variáveis, escalares ou vetoriais, são transportadas através dos elementos computacionais utilizando um sistema de coordenadas fixo, no qual as equações locais instantâneas são submetidas a um processo de cálculo de valores médios adequado. Em aplicações industriais é comum que as fases se encontrem bem misturadas e o número de partículas ou bolhas seja muito grande e, deste modo, o processo de média se torna necessário para caracterizar a mistura (SILVA, 2011).

3.5.3.1 Modelo Multifluido

Derivado do processo de promediação das equações de conservação locais de cada fase, o qual considera os meios interpenetrantes, este modelo é a formulação Euleriana mais geral, ou seja, as diferentes fases podem possuir a mesma posição no espaço. Na abordagem multifluido, o processo de média introduz a fração volumétrica, r , no conjunto

de variáveis, sendo esta definida como a probabilidade de dada fase estar presente em certo instante de tempo e ponto no espaço (média amostral). Em virtude da perda de informação no processo de média, alguns termos adicionais precisam ser modelados e aparecem nas equações de conservação de cada fase, com o intuito de modelar os fenômenos que ocorrem em escalas menores que a escala da média (ISHII, 1975; ISHII & HIBIKI, 2006). Tais termos devem considerar a estrutura do campo de escoamento, além das propriedades físicas dos materiais em sua modelagem, podendo ser derivados empiricamente, analiticamente ou numericamente (SILVA, 2008).

Na formulação do modelo multifluido são consideradas $n + 1$ fases, nas quais existem apenas uma fase contínua, representada pelo subscrito $\alpha=0$, e n fases dispersas, descritas com o subscrito $\alpha=1, \dots, n$. Para sistemas multifásicos isotérmicos, as Equações 13 e 14 representam as equações de conservação médias

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla(r_\alpha \rho_\alpha u_\alpha) = R_\alpha \quad (13)$$

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla(r_\alpha \rho_\alpha u_\alpha) = \nabla(r_\alpha T_\alpha^{eff}) + \widehat{M}_{l,\alpha} + R_\alpha u_{\alpha,l} + S_\alpha + r_\alpha \rho_\alpha g \quad (14)$$

em que ρ_α , u_α , r_α e T_α^{eff} representam, respectivamente, a massa específica média, a velocidade média, a fração da fase e o tensor formado pela combinação das tensões médias viscosa e turbulenta da fase α ($T_\alpha^{eff} = T_\alpha^{lam} + T_\alpha^{turb}$). Já R_α é o termo fonte referente à massa trocada entre a fase α e as outras fases, S_α é o termo fonte de quantidade de momento na fase α devido a forças externas, além da gravidade, e $\widehat{M}_{l,\alpha}$ é o termo de troca de momento pela interface da fase α .

Os principais componentes de $\widehat{M}_{l,\alpha}$, frequentemente, se devem às forças de arrasto, sustentação e massa virtual atuando na interface das fases. A formulação do termo referente à taxa de troca de massa entre fases, R_α , depende do processo considerado na simulação (evaporação, solidificação, condensação, etc.), onde $u_{\alpha,l}$ é a velocidade com a qual a massa é transferida através da interface entre as fases (ISHII & HIBIKI, 2006).

A tensão viscosa (ou tensão média da fase) usualmente é modelada pela relação para fluidos Newtonianos (BIRD *et al.*, 1960). A Equação 15 mostra o modelo de tensão viscosa adaptado para a abordagem multifluido (SILVA, 2008), ressaltando que, quando se considera apenas o escoamento laminar, o termo de tensão de Reynolds devido à turbulência é considerado nulo.

$$\begin{aligned}
T_{\alpha}^{lam} &= -\rho_{\alpha} \mathbf{I} + \tau_{\alpha}^{lam} \\
\tau_{\alpha}^{lam} &= 2\mu_{\alpha} D_{\alpha} + \left(k_{\alpha} - \frac{2}{3}\mu_{\alpha}\right) (\nabla u_{\alpha}) \mathbf{I} \\
D_{\alpha} &= \frac{1}{2} [\nabla u_{\alpha} + (\nabla u_{\alpha})^T]
\end{aligned} \tag{15}$$

Na modelagem de escoamentos multifásicos, um dos pontos-chave é a utilização correta dos termos de troca de momento $\widehat{M}_{I,\alpha}$ pela interface da fase α , pois a formulação desta expressão exerce uma grande influência no cálculo da distribuição da fase dispersa e também do campo de velocidades no escoamento. A lei de conservação de quantidade de movimento mostra que a quantidade total de momento transferida entre as fases é nula, ou seja, $\sum_{\alpha=0}^n \widehat{M}_{I,\alpha} = 0$, e, desta forma, é possível fechar o sistema de equações ao definir a modelagem de apenas n fases (SILVA, 2008). Diversos trabalhos na literatura retratam mais detalhadamente a teoria de formulação e a modelagem multifluido (ISHII, 1975; DREW & PASSMAN, 1999; MICHELLE, 2002; BRENNEN, 2005; BOVE, 2005; ISHII & HIBIKI, 2006).

3.6 Equacionamento para o Escoamento Bifásico Água – Ar

O escoamento de fluidos é modelado matematicamente de acordo com os princípios de conservação de quantidade de movimento, massa e energia, os quais resultam em equações diferenciais parciais, sendo que a resolução dessas equações fornece perfis espaciais e transientes de grandezas como concentração, temperatura e velocidade, assim como de grandezas que dependem delas.

A abordagem Euler-Euler pode ser aplicada a todos os regimes de escoamento, visto que não é necessário prescrever sua topologia. Todavia, a formulação dos termos de troca de momento entre as fases de tensão turbulenta depende do regime de escoamento. Diante disso, a capacidade preditiva do modelo multifásico depende muito da modelagem destes termos, chamadas leis de fechamento. As leis de fechamento devem sempre se guiar pelos princípios de equipresença, solução bem-posta, indiferença ao referencial, determinismo e pela Segunda Lei da Termodinâmica (SILVA, 2008).

A equipresença significa que qualquer variável descrita por uma lei de fechamento deve ser função de todas as outras variáveis utilizadas. O princípio de solução bem-posta estabelece que a solução das equações do modelo existe, é única e varia continuamente com as condições de contorno impostas. A indiferença ao referencial sugere que as

expressões tensoriais das leis de fechamento não dependem do referencial do observador. Por fim, o determinismo confirma a predibilidade do presente a partir de dados passados, porém o que garante que a solução tenha um significado físico é satisfazer a Segunda Lei da Termodinâmica (SILVA, 2008).

Na resolução das equações para o escoamento multifásico, necessita-se também das condições iniciais, as quais especificam seu estado inicial, enquanto as condições de contorno são utilizadas para especificar como o escoamento interage com a sua vizinhança. Conhecendo as leis de fechamento, as condições iniciais e condições de contorno, o sistema de equações do modelo multifásico está fechado e pode ser resolvido (SANTOS, 2010).

Nos tópicos seguintes, serão apresentados maiores detalhes sobre o fechamento da modelagem multifluido para os termos de troca de momento entre fases e também sobre a modelagem da turbulência em escoamentos multifásicos.

3.6.1. Conservação da Massa – Equação da Continuidade

A Equação da Continuidade de cada uma das fases é modificada e faz-se uso da definição de α_q apresentada anteriormente. Neste tópico será apresentada sua forma geral (Equação 16) e as duas equações simplificadas para as duas fases de interesse (Equações 17 e 18).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \bar{v}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_q \quad (16)$$

Considerando $q =$ fase líquida (l) ou fase gasosa (g), tem-se:

\bar{v}_q – velocidade da fase q

\dot{m}_{pq} – transferência de massa da fase p para a fase q

\dot{m}_{qp} – transferência de massa da fase q para a fase p

S_q – termo de geração de massa para a fase q

N – número de fases presente no escoamento

Para a modelagem do sistema binário ar – água, foi definido que o subscrito g se refere à fase gasosa (ar) e l à fase líquida (água). No modelo utilizado, foi desprezada a transferência de massa entre as fases gasosa e líquida, além de não ser considerada

nenhuma geração ou consumo de massa no interior do equipamento. Assim, as equações da continuidade para cada uma das fases são dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \cdot \rho_l) + (\alpha_l \cdot \rho_l \cdot v_l) = 0 \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \cdot \rho_g) + (\alpha_g \cdot \rho_g \cdot v_g) = 0 \quad (18)$$

3.6.2. Conservação da Quantidade de Movimento

As equações de conservação de quantidade de movimento utilizando o conceito de α_q são demonstradas abaixo, tanto para a fase água (Equação 19) quanto para a fase ar (Equação 20), sendo que não foi considerada a transferência de massa entre as fases (CHEN *et al.*, 2016):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \cdot \rho_l \cdot v_l) + \nabla \cdot (\alpha_l(\rho_l \cdot v_l \otimes v_l)) = -\alpha_l \cdot \nabla P_l + \nabla \cdot (\alpha_l \cdot \mu_{\text{eff},l}(\nabla v_l + (\nabla v_l)^T)) + \alpha_l \cdot \rho_l \cdot g + M_l \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \cdot \rho_g \cdot v_g) + \nabla \cdot (\alpha_g(\rho_g \cdot v_g \otimes v_g)) = -\alpha_g \cdot \nabla P_g + \nabla \cdot (\alpha_g \cdot \mu_{\text{eff},g}(\nabla v_g + (\nabla v_g)^T)) + \alpha_g \cdot \rho_g \cdot g + M_g \quad (20)$$

Nas equações acima v_i , α_i , ρ_i , P_i e $\mu_{\text{ef},i}$, representam, respectivamente, as seguintes grandezas locais referentes às fases líquida e gasosa: vetor velocidade intersticial, fração volumétrica, densidade, pressão e viscosidade efetiva, esta última vinculada à turbulência. Os termos M_l e M_g dizem respeito à transferência de quantidade de movimento devido às forças interfaciais, e possuem grandeza de força por unidade de volume. Nas equações acima descritas, o operador \otimes indica o produto vetorial entre 2 vetores.

Nas equações 19 e 20, os dois termos do lado esquerdo denotam, respectivamente, a taxa global de acúmulo de quantidade de movimento e a transferência de momento por convecção em cada fase. Dentre os termos dispostos no lado direito da equação, é importantes destacar que a força resultante que atua em cada uma das fases é dividida, de acordo com sua característica, em quatro componentes principais, a saber: força de campo, de ascensão, de massa virtual (sendo estas forças dependentes do meio em que a fase q está inserida), e força de interação entre as fases.

O empuxo é a principal força externa que atua como fonte de transferência de quantidade de movimento, sendo sua ação um efeito da diferença de densidade entre as

fases líquida e gasosa (Equação 21). Em escoamentos gás-líquido em biorreatores pneumáticos (colunas de bolhas e *airlift*), o empuxo é responsável pela grande aceleração que as bolhas sofrem (SILVA, 2011).

$$S_i = (\rho_i - \rho_{ref})g \quad (21)$$

em que S_i corresponde ao vetor força de empuxo (por unidade de volume), ρ_{ref} é a densidade de referência (densidade da fase contínua) e g é o vetor aceleração da gravidade. O termo M_i corresponde às forças interfaciais existentes no sistema, sendo seu calculo feito por meio do somatório vetorial das diversas forças interfaciais existentes em sistemas gás-líquido tais como as forças de arrasto, sustentação, massa virtual, dispersão turbulenta, dentre outras.

3.7 Fechamento das Forças de Interação

No modelo Euleriano, a abordagem de fechamento tem foco nos fenômenos que acontecem na interface entre as fases. A força interfacial de uma fase α normalmente é decomposta em termos da força de interação entre fases e da pressão e tensão de cisalhamento interfaciais médias, conforme Equação 22 (SILVA, 2008):

$$\widehat{M}_{I,\alpha} = M_{I,\alpha} + \rho_{I,\alpha} \nabla r_\alpha - \tau_{I,\alpha} \cdot \nabla r_\alpha \quad (22)$$

Através da decomposição demonstrada na Equação 22 combinada à Equação 15, pode-se reescrever o lado direito da Equação 14, como colocado na Equação 23, sem considerar os efeitos de turbulência.

$$\nabla \cdot (r_\alpha T_\alpha^{lam}) + \widehat{M}_{I,\alpha} + R_\alpha u_\alpha + S_\alpha + r_\alpha \rho_\alpha g = -r_\alpha \nabla \rho_\alpha + \nabla \cdot (r_\alpha \tau_\alpha^{lam}) + (\rho_{I,\alpha} - \rho_\alpha) \nabla r_\alpha - \tau_{I,\alpha} \cdot \nabla r_\alpha + M_{I,\alpha} + R_\alpha u_{\alpha,l} + S_\alpha + r_\alpha \rho_\alpha g \quad (23)$$

Quando se admite que os efeitos de tensão interfacial não são importantes ($\tau_{I,\alpha} = 0$), pode-se considerar que a pressão possui localmente o mesmo valor para todas as fases, ou seja, $\rho_\alpha = \rho_{I,\alpha} = \rho$. O termo de interação entre as fases pode considerar inúmeros tipos de forças interfaciais, porém, usualmente, as principais forças são devido ao arrasto, sustentação e massa virtual (FORD, 1998).

A modelagem do sistema multifásico pode ser realizada a partir de uma fase primária ($\alpha = 0$), equivalendo à fase contínua, e n fases secundárias, onde cada uma delas representa uma classe de partícula com volume compreendido em um intervalo especificado (SILVA, 2008). A Equação 24 apresenta a formulação do termo de interação

entre fases para a fase primária, na qual M^a , M^s e M^{mv} consistem, respectivamente, nas forças devido ao arrasto, sustentação e à massa virtual.

$$M_{I,0} = \sum_{\alpha=1}^n [M_{I,0\alpha}^a + M_{I,0\alpha}^s + M_{I,0\alpha}^{mv}] \quad (24)$$

Ao considerar que não há interação entre as fases secundárias, uma hipótese razoável para sistemas diluídos ($r_0 \rightarrow 1$), a formulação do termo de interação entre fases pode ser reescrita como demonstrado na Equação 25.

$$M_{I,\alpha} = M_{I,\alpha 0}^a + M_{I,\alpha 0}^s + M_{I,\alpha 0}^{mv}; \alpha = 1, \dots, n \quad (25)$$

Neste caso, é necessário observar que a troca de quantidade de movimento entre as fases dispersa e contínua se inter-relaciona de forma oposta. Por exemplo, para a força de arrasto esta relação seria $M_{I,\alpha 0}^a = -M_{I,0\alpha}^a$, sendo esta mesma relação válida para as outras forças (SILVA, 2008). Uma breve discussão sobre essas forças está colocada na sequência.

As forças interfaciais exercem um papel fundamental no comportamento hidrodinâmico de escoamentos multifásicos, surgindo devido à transferência de quantidade de movimento entre as fases através da interface que as separam. As forças interfaciais mais relevantes no escoamento gás-líquido de biorreatores são as forças de arrasto, sustentação, massa virtual e dispersão turbulenta (SILVA, 2011; RODRIGUEZ, 2015).

As diferentes forças interfaciais são modeladas matematicamente com base em correlações que descrevem os coeficientes para cada tipo de interação. Para cada força encontram-se disponíveis diversas correlações com diferentes hipóteses, como por exemplo, corpos rígidos ou deformáveis, além de faixas de aplicabilidade. Contudo, ainda que exista uma grande diversidade de força interfaciais, em biorreatores pneumáticos tem-se verificado a predominância do arrasto e da sustentação sobre as demais forças (RODRIGUEZ, 2015), sendo uma prática comum a realização de simulações considerando apenas estas duas forças (WANG *et al.*, 2005; DHOTRE *et al.*, 2008; SILVA *et al.*, 2012; GUPTA & ROY, 2013; HAN *et al.*, 2017; ZHANG *et al.*, 2018; ALAM *et al.*, 2020; LI *et al.*, 2021).

3.7.1 Modelagem da Força de Arrasto

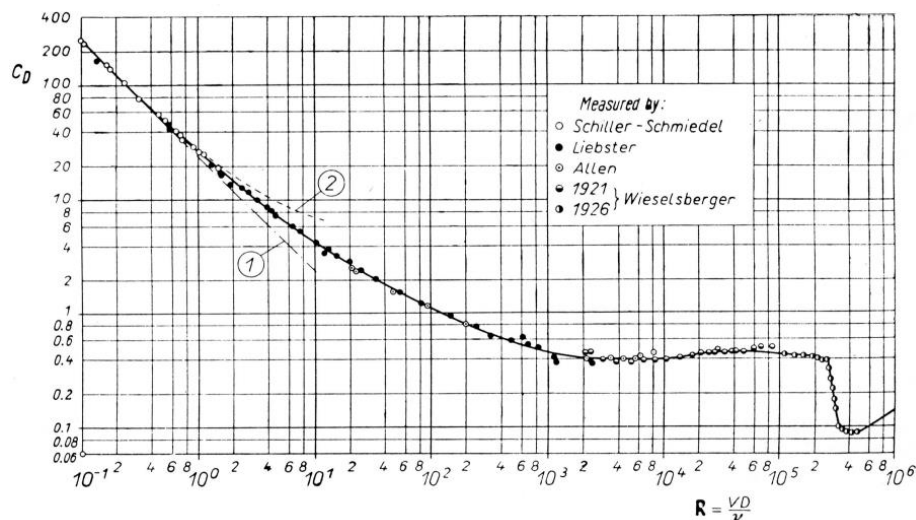
A força de arrasto atua paralelamente à direção do escoamento principal, mas em sentido oposto, e age como uma força de resistência, a qual é originada por dois fatores

principais: o atrito entre a partícula e fluido, devido a velocidade relativa entre as fases, e a distribuição de pressão na superfície do corpo, agindo na fase líquida como consequência do movimento da fase gasosa ($M_{g,l}^D$). Esta força aparece sempre que existe um movimento relativo entre a partícula e o fluido e pode ser definida como a força exercida pela fase contínua sobre a partícula na direção do escoamento (RODRIGUEZ, 2015).

A teoria em que a força de arrasto é baseada teve início com os estudos de Newton (1686) sobre a queda livre no ar de esferas com diferentes tamanhos, no qual se mediu a velocidade terminal das partículas ao soltá-las do alto da catedral de St. Patrick em Londres. Com os dados obtidos, Newton relacionou o arrasto da partícula como função do diâmetro e da velocidade terminal e, assim, concluiu experimentalmente que a força de arrasto sobre a partícula é proporcional ao quadrado da velocidade terminal. Posteriormente, essa relação foi estendida por Allen (1900) abrangendo os efeitos da massa específica das partículas e do fluido na força de arrasto. Stokes (1851) atingiu o mesmo resultado de forma analítica ao negligenciar a convecção na equação de Navier-Stokes, corroborando os resultados obtidos por Newton (SILVA, 2008).

Os resultados de estudos referentes à força de arrasto são apresentados, em sua grande maioria, na forma adimensional, por meio do coeficiente de arrasto, C_D , que é função do número de Reynolds, Re , conforme apresentado na Figura 14 (SCHLICHTING, 1979).

Figura 14 - Coeficiente de arrasto para esferas rígidas em função do número de Reynolds.



Fonte: Schlichting (1979).

A Equação 26 apresenta a definição do número de Reynolds, na qual ρ_0 e μ_0 são a massa específica e viscosidade da fase contínua, respectivamente, $u_r = u_0 - u_p$ é a velocidade relativa, e d_α é o diâmetro equivalente da partícula, ou seja, o diâmetro da esfera com o mesmo volume da partícula.

$$Re = \frac{\rho_0 |u_r| d_\alpha}{\mu_0} \quad (26)$$

A maioria dos escoamentos multifásicos utiliza a formulação colocada na Equação 27, em que $C_{D,\alpha}$ é o coeficiente de arrasto para a fase α , $u_{r,\alpha} = u_0 - u_\alpha$ é a velocidade relativa e A_α é a área projetada normal à velocidade relativa da partícula pertencente à fase α dividida pelo volume da mesma (BOVE, 2005).

$$M_{I,\alpha}^a = \frac{1}{2} \rho_0 r_\alpha A_\alpha C_{D,\alpha} |u_{r,\alpha}| u_{r,\alpha} \quad (27)$$

$$\text{Sendo esferas: } A_\alpha = \frac{\pi d_\alpha^2 / 4}{\pi d_\alpha^3 / 6} = \frac{3}{2 d_\alpha}$$

Todavia, a física do escoamento ao redor das partículas fluidas se difere de duas maneiras quanto ao escoamento em torno das partículas rígidas. Devido ao fato de que a forma da partícula não é fixa, efeitos desse tipo devem ser considerados ao calcular o coeficiente de arrasto para bolhas e gotas (CLIFT *et al.*, 1978; LOTH, 2000; SIMONNET *et al.*, 2007).

A força de arrasto é representada por unidade de volume e pode ser calculada conforme a Equação 28.

$$M_{g,l}^D = \frac{3}{4} \alpha_G \rho_g \frac{C_D}{d_B} |v_g - v_l| (v_g - v_l) \quad (28)$$

Na literatura encontram-se disponíveis diversas correlações para o cálculo do coeficiente de arrasto (C_D), sendo uma das mais utilizadas a equação proposta por Grace *et al.* (1976), que considera diferentes formatos para as bolhas de acordo com o regime de escoamento, tais como esfera, elipse e touca (ESPERANÇA, 2018). A correlação de Grace *et al.* (1976) calcula o valor do coeficiente de arrasto por meio do critério estabelecido pela Equação 29.

$$C_D = \max(C_D^{esf}, \min(C_D^{elip}, C_D^{touca})) \quad (29)$$

na qual C_D^{esf} , C_D^{elip} e C_D^{touca} correspondem aos coeficientes de arrasto para bolhas no formato de esfera, elipse e touca, respectivamente, e assumem valores de acordo com as Equações 30 a 32.

$$C_D^{esf} = \frac{24}{Re_b} (1 + 0.15 Re_b^{0.687}) \quad (30)$$

$$C_D^{elip} = \frac{4 g d_B (\rho_L - \rho_G)}{3 v_\infty^2 \rho_L} \quad (31)$$

$$C_D^{touca} = \frac{8}{3} \quad (32)$$

em que v_∞ e Re_B referem-se à velocidade terminal da bolha e ao número de Reynolds da bolha, respectivamente.

3.7.2 Modelagem da Força de Sustentação

A força de sustentação, em um escoamento com campo uniforme e estacionário, refere-se à força normal à velocidade relativa do fluido, ou seja, age perpendicularmente à direção do escoamento e promove o deslocamento lateral das bolhas. Esta força, $M_{I,\alpha}^s$, foi realatada pela primeira vez atuando sobre uma partícula, conforme registrado por Poiseuille (1841), ao constatar que as células do sangue permaneciam afastadas das paredes dos capilares. Contudo, as causas deste fenômeno só foram esclarecidas com o trabalho de Segré e Silberberg (1962), mais de um século depois, quando os dois pesquisadores estudaram o leve deslocamento radial de esferas flutuantes, com diferentes tamanhos, suspensas em um tubo, sob as condições de escoamento de Poiseuille, devido à atuação desta força lateral sobre as partículas. A partir daí, vários trabalhos sobre a força de sustentação foram realizados, em grande parte para escoamento em tubos e canais (COX & MASON, 1971; TSUJI *et al.*, 1984).

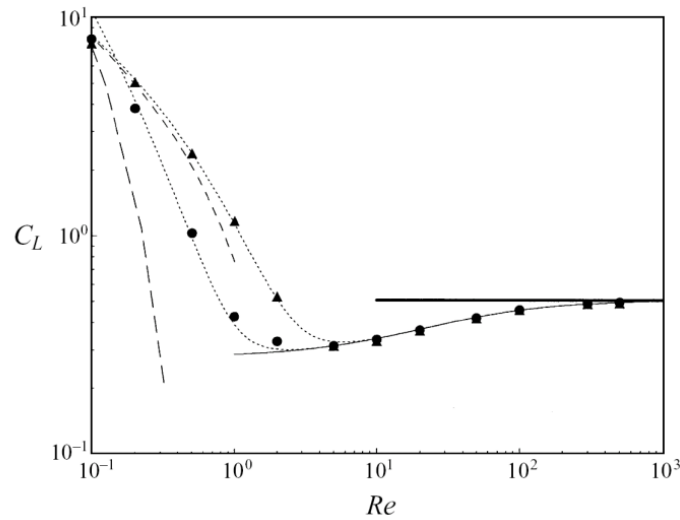
A força de sustentação pode surgir de diversas maneiras, tais como a presença de um gradiente de velocidade na fase contínua, a deformação e rotação da partícula (chamado de efeito Magnus) e também pelo efeito de surfactantes presentes no meio contínuo (SILVA, 2008). Quanto às aplicações com partículas fluidas, Auton (1987) demonstrou que a força de sustentação aplicada a uma bolha esférica isolada em um escoamento estacionário invíscido é proporcional ao produto vetorial da vorticidade da fase contínua ($\nabla \times u_0$) e a velocidade relativa $u_{r,\alpha}$ entre as fases, chegando à expressão

colocada na Equação 33 para representar a força de sustentação, onde $C_{L,\alpha}$ é o coeficiente de sustentação da fase α .

$$M_{l,\alpha}^s = -C_{L,\alpha} \rho_0 r_\alpha u_{r,\alpha} \times (\nabla \times u_0) \quad (33)$$

A Figura 15 mostra a variação do coeficiente de sustentação sobre uma esfera lisa e esférica em função do número de Reynolds (LEGENDRE & MAGNAUDET, 1998).

Figura 15 - Coeficiente de sustentação para uma esfera rígida e lisa em função do número de Reynolds. Linha sólida: solução analítica para escoamento invíscido; linhas pontilhadas: ajuste da curva para os resultados numéricos com $Sr = 0,02$ (●) e $Sr = 0,2$ (▲); linhas tracejadas: solução analítica para *creeping flow* com $Sr = 0,02$ e $Sr = 0,2$.



Fonte: Legendre e Magnaudet (1998).

Legendre e Magnaudet (1998) demonstraram em seus experimentos que o coeficiente de sustentação se torna constante ($C_{L,\alpha} = 0,5$) para o caso de uma bolha esférica em um escoamento invíscido ($Re > 102$). Porém, quando o número de Reynolds é inferior a 102, o coeficiente de sustentação passa a ter uma forte dependência com as características do escoamento ao redor da partícula (MCLAUGHLIN, 1991; LEGENDRE & MAGNAUDE, 1997), sendo função do número de Reynolds e da taxa adimensional de cisalhamento na fase α , $S_{r,\alpha}$, definida por:

$$S_{r,\alpha} = \frac{|\nabla u_0| d_\alpha}{|u_{r,\alpha}|} \quad (34)$$

Dado o grande número de fatores que influenciam a força de sustentação, geralmente, os limites apresentados na Figura 12 são extrapolados e admite-se que o coeficiente de sustentação é constante e igual a 0,5 (SILVA, 2008).

A força de sustentação pode ser correlacionada com a velocidade relativa e a velocidade da fase líquida, sendo expressa conforme a Equação 35. Esta força age lateralmente ao escoamento em objetos assimétricos, sendo que, no caso das bolhas presentes em um biorreator pneumático, a força de sustentação é uma das responsáveis por "puxar" ou "empurrar" as bolhas na direção radial (RODRIGUEZ, 2015).

$$F_L = C_L \alpha_l \rho_g (\vec{v}_l - \vec{v}_g) \cdot \nabla \cdot \vec{v}_g \quad (35)$$

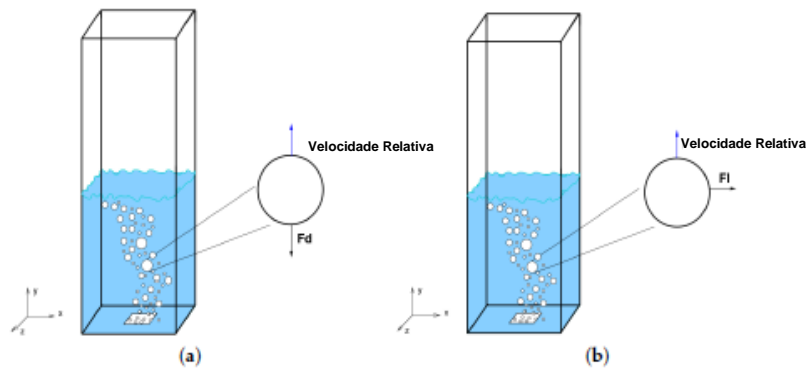
Assim como no arraste, o coeficiente de sustentação é estimado por meio de correlações propostas na literatura. Neste estudo, o modelo proposto por Tomiyama (2004), descrito pela Equação 36, foi utilizado, pois refere-se a sistemas ar-água, sendo aplicável à bolhas deformáveis e dependente do número de Eötvos (Equação 37).

$$C_L = \begin{cases} \min[0.288 \tanh(0.121 \text{Re}_b; f(E_{od}))] & E_{od} < 4 \\ f(E_{od}) = 0.00105 E_o^3 - 0.0159 E_{od}^2 - 0.0204 E_{od} + 0.474 & 4 \leq E_{od} \leq 10 \\ -0,29 & E_{od} > 10 \end{cases} \quad (36)$$

$$E_{od} = E_o (1 + 0.163 E_o^{0.757})^{2/3} \quad (37)$$

O mecanismo de atuação das forças de arrasto e sustentação em um biorreator coluna de bolhas, pode ser visualizado na ilustração demonstrada pela Figura 16.

Figura 16- Ilustração das forças interfaciais modeladas neste trabalho: (a) Arrasto (b) Sustentação.



Fonte: Adaptado de Vieira *et al.* (2018).

3.8 Modelos de Turbulência

A turbulência pode ser determinada como a flutuação aleatória temporal e espacial de grandezas relacionadas ao escoamento de fluidos. Do ponto de vista físico, a turbulência consiste no fenômeno em que as forças inerciais se sobrepõem às forças viscosas, sendo descrita por elevados valores de números de Reynolds (RODRIGUEZ,2015).

As principais características deste tipo de escoamento são: a aleatoriedade, ou seja, movimento irregular e caótico; tridimensionalidade, acarretando em elevado nível de flutuação e vorticidade (velocidade de circulação do fluido por unidade de área); várias escalas estruturais, levando à formação de estruturas em diversas escalas devido à ocorrência de fenômenos como movimentos rotatórios, coalescência, divisão e alongamento dos vórtices; não-linearidade, o que causa o aparecimento de fenômenos como a coalescência e o alongamento dos turbilhões; dissipação, representada pela ocorrência de transferência de energia por meio de um processo chamado cascata de energia, no qual vórtices maiores (com maior energia) transferem energia através de interações não-lineares aos vórtices menores, que são dissipados por forças viscosas; e difusividade, ou seja, elevada taxa de difusão de calor e quantidade de movimento devido à mistura dos elementos de fluido à nível macroscópico (ESPERANÇA, 2018).

Em simulações CFD, a modelagem da turbulência é de grande importância na descrição correta de escoamentos multifásicos. Após vários trabalhos comparando simulações laminares e turbulentas para o escoamento gás-líquido, foi possível concluir que o modelo laminar não é apropriado para representar o perfil de escoamento, mesmo para baixos valores de velocidade e retenção gasosa (PFLEGER *et al.*, 1999; SOKOLICHIN & EIGENBERGER, 1999; SUNDARESAN, 2000; DEEN *et al.*, 2001). Após a análise destes trabalhos, foi possível concluir que as simulações que utilizam os modelos laminares não são capazes de representar o fenômeno físico, visto que os resultados não convergem em malha, enquanto que os modelos de turbulência consideram os fenômenos de dissipação de energia que ocorrem na subescala da malha e, assim, representam os fenômenos que afetam o escoamento (SANTOS, 2010).

A modelagem da turbulência tem início com a decomposição de Reynolds na qual a velocidade instantânea é dividida na soma de uma velocidade média u e uma velocidade flutuante u_0 . As equações da continuidade e de balanço de momento são escritas em função da velocidade instantânea, e devido a isso, podem ser reescritas aplicando-se a média de Reynolds para uma escala de tempo Δt , a qual deve ser maior que a escala de tempo das flutuações de velocidade e menor que a escala de tempo do processo transiente a ser modelado. Com isso, o termo de tensão de Reynolds ($T_\alpha^{turb} = -\rho_\alpha \overline{u'_\alpha u'_\alpha}$) surge na equação de momento por meio do processo de média, considerando os efeitos de turbulência (SILVA, 2008). Cabe ressaltar que, como a modelagem da turbulência possui

enfoque em determinados efeitos, as equações de seus modelos podem variar significativamente dependendo das hipóteses assumidas em sua formulação.

A tensão de Reynolds pode ser modelada utilizando a abordagem baseada na teoria de viscosidade de Boussinesq (1877), a qual considera que, assim como as tensões viscosas em um escoamento laminar, as tensões turbulentas são proporcionais ao gradiente da velocidade média do escoamento. Por meio dos fundamentos da viscosidade laminar, o autor introduziu o conceito de viscosidade turbulenta como uma propriedade que depende da turbulência local, porém, são necessários modelos que possam calculá-la. A Equação 38 apresenta a formulação do tensor tensão turbulento, sendo k a energia cinética turbulenta e τ_α^{turb} o tensor tensão residual de turbulência.

$$T_\alpha^{turb} = -\frac{2}{3}\rho_\alpha k \mathbf{I} + \tau_\alpha^{turb}$$

$$\tau_\alpha^{turb} = 2\mu_\alpha^{turb} D_\alpha \quad (38)$$

O trabalho de Michele (2002) *apud* Brauer (1979) foi um dos primeiros trabalhos a demonstrar a modelagem da turbulência, ao identificar diferentes fontes de turbulência e propor suas formulações. A seguir estão listadas as principais causas de geração de turbulência em escoamentos multifásicos.

A turbulência de Reynolds, definida pelas flutuações de velocidade, como no caso monofásico, também é válida para escoamentos multifásicos, contudo outros efeitos, tais como a flutuação de fase, devem ser avaliados. A turbulência de Interface ocorre devido à diferença de tensão superficial na interface quando existe transferência de massa na última. A turbulência por Deformação é induzida por meio do movimento da superfície das bolhas. Por fim, a turbulência por Interação de População ocorre devido às interações entre partículas ou bolhas em movimento (TSUCHIYA *et al.*, 1996).

O modelo $k - \varepsilon$ é a abordagem mais utilizada no tratamento de escoamentos turbulentos multifásicos, embora só trate da turbulência isotrópica, introduzindo duas equações de transporte adicionais no cálculo, usadas para calcular a energia cinética turbulenta, k , e a taxa de dissipação de energia, ε (PFLEGER *et al.*, 1999; SOKOLICHIN & EIGENBERGER, 1999). A energia cinética afeta diretamente as diferentes escalas da estrutura de turbilhões presentes no escoamento, sendo que as maiores estruturas são portadoras de maior quantidade de energia, enquanto as menores estruturas de turbilhões carregam menor quantidade de energia. Com isso, a taxa de dissipação de energia ε deve ser resolvida de forma acoplada à energia cinética k , com intuito de representar a variação

do tamanho das estruturas dos turbilhões, sendo que a partir de k e ε é possível calcular a viscosidade turbulenta local, usada nas equações de transporte de momento (SILVA, 2008).

A equação de conservação para a energia cinética turbulenta na fase contínua, k_0 , pode ser descrita conforme a Equação 39, na qual Ψ_α é o termo de produção de energia turbulenta e $S_{0,k}$ é um termo fonte que pode ser usado para implementar efeitos de turbulência ocasionados por outras fontes como, por exemplo, a interação entre bolhas.

$$\frac{\partial(r_0\rho_0k_0)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_0\rho_0u_0k_0) - \nabla \cdot \left[r_0 \left(\mu_0^{lam} + \frac{\mu_0^{turb}}{\sigma_\alpha} \right) \nabla k_0 \right] = r_0(\psi_\alpha - \rho_0\varepsilon_0) + S_{0,k} \quad (39)$$

A equação de conservação da dissipação de energia turbulenta ε_0 na fase contínua é mostrada na Equação 40, e o termo fonte $S_{0,k}$ também pode ser usado para modelar outros efeitos de turbulência.

$$\frac{\partial(r_0\rho_0\varepsilon_0)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_0\rho_0u_0\varepsilon_0) - \nabla \cdot \left[r_0 \left(\mu_0^{lam} + \frac{\mu_0^{turb}}{\sigma_\alpha} \right) \nabla \varepsilon_0 \right] = r_0 \frac{\varepsilon_0}{k_0} (C_{\varepsilon 1} \psi_\alpha - C_{\varepsilon 2} \rho_0 \varepsilon_0) + S_{0,\varepsilon} \quad (40)$$

A viscosidade turbulenta μ_0^{turb} pode ser calculada como colocado abaixo.

$$\mu_0^{turb} = C_\mu \rho_0 \frac{k_0^2}{\varepsilon_0} \quad (41)$$

Desta forma, três incógnitas (k_0 , ε_0 e μ_0^{turb}) e três equações (Equações 39, 40 e 41) são adicionadas ao usar o modelo $k-\varepsilon$ a fim de considerar os efeitos de turbulência nas simulações, o que acaba elevando o custo computacional, porém em um nível aceitável (SILVA, 2008; SANTOS, 2010).

É possível ainda incluir os efeitos de turbulência causados por outras fontes, como a turbulência induzida pelas interações entre as partículas fluidas, sendo que estes efeitos podem ser incluídos através da definição de uma velocidade flutuante devido à presença de bolhas, ou introduzindo termos fontes adicionais na equação. Neste intuito, o modelo descrito por Sato para turbulência induzida por bolhas assume que, em escoamentos gás-líquido, a velocidade do líquido pode ser decomposta em uma velocidade média (\bar{u}), uma velocidade flutuante devido à turbulência inerente ao líquido, e independente do movimento relativo entre as bolhas e o líquido, (u'), e uma velocidade flutuante adicional devido à presença de bolhas no escoamento (\tilde{u}) (SATO & SEKOGUCHI, 1975; SATO *et al.*, 1981).

$$u = \bar{u} + u' + \check{u} \quad (42)$$

Assim, a formulação de média de Reynolds para as equações de balanço inclui ainda novos termos devido aos efeitos de interação entre as bolhas, os quais devem ser modelados de forma apropriada, fornecendo um componente adicional à expressão de viscosidade turbulenta. O modelo de tensão residual turbulenta induzida por bolhas $\tau_{\alpha,b}^{turb}$ está colocado na Equação 43 (SATO *et al.*, 1981).

$$\tau_{\alpha,b}^{turb} = 2\mu_{\alpha,b}^{turb} D_{\alpha} ; \mu_{\alpha,b}^{turb} = \Omega_b r_{\alpha} \rho_0 d_{\alpha} |u_{r,\alpha}| \quad (43)$$

em que Ω_b é uma constante empírica, que frequentemente possui valor de 1,2. O modelo de tensão residual turbulenta induzida por bolhas consiste de uma correção da turbulência pela viscosidade e é fundamentado no conceito de comprimento de mistura de Prandtl, no qual o raio da bolha é usado como o tamanho de escala da turbulência induzida pelas bolhas (SILVA, 2008).

Em sistemas de Engenharia, os escoamentos turbulentos são de grande importância, visto que na prática correspondem à maior parte dos escoamentos observados. Na teoria, todavia, é possível fazer a previsão de escoamentos tanto laminares quanto turbulentos aplicando-se as Equações da Continuidade (Equações 17 e 18) e de Conservação de Quantidade de Movimento (Equações 19 e 20). Contudo, em escoamentos turbulentos, utilizar estas equações de forma direta exigiria células computacionais com escalas de comprimento muito pequenas, para que os vórtices turbulentos fossem descritos, resultando em um elevado tempo de simulação e esforço computacional (RODRIGUEZ, 2015). O processo de resolução numérica no qual se consideram as Equações da Continuidade e do Movimento com o intuito de se resolverem os vórtices turbulentos é denominado Direct Numerical Simulation (DNS).

Uma forma de vencer tal limitação é a aplicação da abordagem RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*), que modifica as equações da Continuidade e de Conservação de Quantidade de Movimento através da introdução de quantidades médias e flutuações de propriedades nas equações instantâneas (SILVA, 2011). Nesta abordagem, a velocidade instantânea da fase i é decomposta em duas componentes de velocidade: velocidade média (\bar{v}) e um valor de flutuação (v'_i), conforme apresentado na Equação 44 (LOPES, 2012).

$$v_i = \bar{v} + v'_i \quad (44)$$

A modelagem dos efeitos da turbulência, sem a necessidade da resolução dos vórtices turbulentos, torna-se possível. Todavia, este procedimento de aproximação introduz termos desconhecidos nas equações, fazendo com que equações adicionais para sua modelagem sejam necessárias, sendo definidas de acordo com o modelo de turbulência utilizado (ESPERANÇA, 2018).

Em virtude da complexidade apresentada por escoamentos turbulentos, um elevado esforço tem sido realizado para o desenvolvimento ou otimização de modelos de turbulência. Embora exista uma grande disponibilidade de modelos de turbulência, tais como κ - ε , κ - ω , Reynolds Stress Model (RSM), dentre outros, o modelo κ - ε é o mais recomendado em aplicações de Engenharia, pois apresenta resultados suficientemente precisos para um esforço computacional moderado (RODRIGUEZ, 2015). Este modelo, assim como suas variações, tem sido amplamente utilizado na simulação do escoamento gás-líquido em biorreatores pneumáticos (BANNARI *et al.*, 2011; ZHANG *et al.*, 2012; MORADI *et al.*, 2013; GARCIA *et al.*, 2014; MAVADDAT *et al.*, 2014; MOSTOUFI *et al.*, 2014; RODRIGUEZ *et al.*, 2015; XU *et al.*, 2015) e a sua aplicação introduz duas novas variáveis à modelagem, ou seja, duas novas equações de transporte a serem resolvidas: a energia cinética turbulenta (κ) e taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε), que descrevem as escalas de velocidade turbulenta e de comprimento turbulento (ESPERANÇA, 2018).

No modelo κ - ε , tem-se como hipótese que a turbulência é definida por uma viscosidade efetiva ($\mu_{\text{ef},i}$), cujo valor é uma função tanto do fluido quanto do escoamento. Desta forma, a viscosidade efetiva corresponde à soma de três viscosidades (Equação 45):

$$\mu_{\text{eff},i} = \mu_i + \mu_{\text{turb},i} + \mu_{\text{turb},\text{disp}} \quad (45)$$

em que μ_i representa a viscosidade dinâmica, que é característica do próprio fluido e definida pela Lei de Newton para escoamentos laminares; $\mu_{\text{turb},i}$ representa a viscosidade turbulenta, que está associada à energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação (Equação 46); e por fim, $\mu_{\text{turb},\text{disp}}$ representa a viscosidade induzida pela fase dispersa, a qual considera a turbulência provida pela fase dispersa (Equação 47):

$$\mu_{\text{turb},i} = C_\mu \rho_i \left(\frac{\kappa_i^2}{\varepsilon_i} \right) \quad (46)$$

$$\mu_{\text{turb},\text{disp}} = C_{\mu p} \rho_c \varepsilon_d d_B |v_d - v_c| \quad (47)$$

sendo ρ_c , ε_d , v_d e v_c os termos correspondentes à densidade da fase contínua, fração volumétrica da fase dispersa e velocidades das fases dispersa e contínua, respectivamente.

Baseando-se nesta hipótese, duas novas equações de transporte para se determinar o termo da energia cinética turbulenta (κ) e o da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε) necessitam ser resolvidas para o modelo κ - ε *realizable*. Este modelo de turbulência foi criado com o intuito de aprimorar a performance do modelo κ - ε *standard*, o qual faz considerações bem definidas quanto ao regime de escoamento válido na modelagem. Há dois pontos importantes de diferenças entre os modelos: o primeiro é a diferença na formulação da viscosidade turbulenta, e o segundo, a modificação na equação da taxa de dissipação (ε), que é derivada de uma equação exata para o transporte das flutuações médias quadráticas de vorticidade (RODRIGUES, 2018).

O equacionamento do modelo de turbulência κ - ε *realizable* é descrito nas Equações 48 a 61 (ANSYS, 2013a).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i k) + \frac{\partial(\rho_i k \bar{v}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k + G_b - \rho_i \varepsilon - |Y_M| + S_k \quad (48)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \varepsilon) + \frac{\partial(\rho_i \varepsilon \bar{v}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \rho_i C_1 S_\varepsilon - \rho_i C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{v \cdot \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b + S_\varepsilon \quad (49)$$

$$C_1 = \max \left[0,43; \frac{\eta}{\eta+5} \right], \eta = S \frac{k}{\varepsilon} \quad (50)$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (51)$$

$$\mu_t = \rho_i C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (52)$$

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_S \frac{kU^*}{\varepsilon}} \quad (53)$$

$$U^* = \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij}\tilde{\Omega}_{ij}} \quad (54)$$

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \Omega_{ij} - 2\varepsilon_{ij}\omega_k \quad (55)$$

Por padrão do software *Ansys* o termo $-2\varepsilon_{ij}\omega_k$ é nulo, pois representa um termo de rotação extra que não é compatível com casos que envolvem malha deslizante ou múltiplas armações de referência e, portanto, neste trabalho, adotou-se este padrão.

$$\Omega_{ij} = \tilde{\Omega}_{ij} - \varepsilon_{ij}\omega_k \quad (56)$$

$$A_S = \sqrt{6}c \cos \theta \quad (57)$$

$$\theta = \frac{1}{3} \cos^{-1}(\sqrt{6}W) \quad (58)$$

$$W = \frac{S_{ij}S_{ik}S_{ki}}{\tilde{s}^3} \quad (59)$$

$$\tilde{S} = \sqrt{S_{ij}S_{ij}} \quad (60)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \quad (61)$$

Tendo os seguintes termos:

G_κ – termo de geração de energia cinética turbulenta devido ao gradiente de velocidades médias, o qual está descrito na Equação 62;

G_b – termo de geração de energia cinética turbulenta devido ao empuxo. Este termo está presente quando há campo gravitacional diferente de zero e gradiente de temperatura. Neste estudo, foi considerado um sistema isotérmico, e, em virtude disto, este termo foi desprezado.

Y_M – representa a contribuição da flutuação da dilatação em situações de escoamentos turbulentos compressíveis na taxa total de dissipação de energia. Este termo não foi considerado neste trabalho, pois o escoamento de água estudado possui baixa concentração de ar, assumindo-se, portanto, a hipótese de fluido incompressível.

S_κ e S_ε – Termos fontes definidos no *software*, sendo que, neste trabalho, foram adotados como nulos.

$\bar{\Omega}_{ij}$ – média do tensor de taxa de rotação em um movimento em relação a uma posição de referência com velocidade angular, $\omega\kappa$.

$\omega\kappa$ – velocidade angular;

Os termos $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, C_μ e A_0 são constantes, e σ_κ e σ_ε representam os números de Prandtl turbulento para κ e ε , respectivamente. Estes termos utilizam o default do *software Ansys Fluent*, tendo os seguintes valores:

$$C_{1\varepsilon} = 1,44; C_2 = 1,9; A_0 = 4,04; \sigma_\kappa = 1,0 \text{ e } \sigma_\varepsilon = 1,2.$$

A Equação 51 representa o termo de geração de energia cinética turbulenta devido ao gradiente de velocidades médias (G_k). Cabe ressaltar que este termo é idêntico para os modelos de turbulência κ - ε *standard* e κ - ε *realizable*.

$$G_k = \mu_t S^2 \quad (62)$$

3.9 Balanço Populacional

Considera-se que o desenvolvimento dessa teoria teve início no final do século XVIII, com a equação de Boltzmann dando origem à primeira aparição da EBP (YEOH E TU, 2010), ainda que tenha sido expressa em termos de uma distribuição de moléculas, sendo sua formulação geral desenvolvida somente em meados do século XIX. A partir desta definição, Hulburtz e Katz (1964) e Valentas e Amundson (1966) foram os pioneiros na introdução da equação de balanço populacional para a modelagem de processos em engenharia química envolvendo operações com fases dispersas (SILVA, 2008).

Em diversos processos nas indústrias químicas, a distribuição de tamanho de partículas (DTP) é um fator crucial, sobre a performance do equipamento e a qualidade do produto final. Para sistemas onde houver pós, bolhas, gotas, lamas ou sprays, a população de partículas ao final do processo normalmente é diferente da população inicial, o que torna necessário realizar cada vez mais estudos sobre a evolução da DTP e seus efeitos sobre o comportamento do sistema (SILVA, 2008; SANTOS, 2010).

Uma população de partículas em um sistema fechado pode sofrer com os efeitos de nucleação, agregação, quebra e crescimento. Tais fenômenos estão associados à maneira como as partículas interagem entre si e com a fase contínua, estando incluso o efeito do campo de escoamento sobre as propriedades das partículas, os quais levam a heterogeneidades espaciais. Com isso, a modelagem destes processos é um fator importante para projetos de engenharia confiáveis (SILVA, 2008; SANTOS, 2010).

O primeiro trabalho que utilizou o balanço populacional deduziu o modelo para agregação pura e aplicou-o a um sistema biológico (HULBURTZ & KATZ, 1964; VALENTAS & AMUNDSON, 1966), sendo que a popularidade do balanço populacional cresceu devido ao livro de Randolph e Larsen (1988). Ainda que este trabalho esteja voltado basicamente para cristalização, ele expôs uma abordagem geral, a qual pode ser aplicada em diversos casos, inclusive para processos de pulverização, coagulação de aerossóis e granulação (SILVA, 2008). Ramkrishna (2000) incluiu os processos de crescimento de células, estabelecendo a modelagem de balanço populacional como uma ferramenta básica para ser aplicada a todos os processos que envolvem interação entre partículas.

As áreas de aplicação para balanço populacional são de fato diversas e amplas, como por exemplo, os sistemas biológicos e ambientais (MANTZARIS, 2005), as nanopartículas (SCHWARZERA, 2006), os processos de polimerização (SMAGALAA & MCCOY, 2006) e, por fim, as aplicações à fluidodinâmica de processos polidispersos (NERE & RAMKRISHNA, 2006), a qual é foco deste trabalho.

A seguir, são apresentados a teoria do balanço populacional e os fundamentos da equação de balanço populacional (EBP), demonstrando sua formulação completa, incluindo os termos de agregação e quebra de partículas. Em virtude da complexidade da modelagem destas equações (EBP), são apresentadas algumas hipóteses simplificadoras de modo a aplicar esta técnica a casos práticos.

3.9.1 Equações de Balanço Populacional

O tamanho de bolhas da fase gasosa pode ser incorporado ao modelo fluidodinâmico por meio das equações de balanço populacional, tornando possível a avaliação da influência dessa distribuição no comportamento fluidodinâmico, além dos demais fenômenos de transferência de energia e massa para o sistema multifásico (RODRIGUES, 2018).

Para utilizar as equações de balanço populacional é necessário incorporar uma nova variável, $f(x, v, t)$, conhecida como função de densidade numérica da partícula (FDN), a qual quantifica o número médio de partículas no tempo t por unidade de volume no espaço de estado. Por meio desta função, as variáveis importantes para sistemas polidispersos podem ser calculadas, como por exemplo, o número total de partículas, N_T , no domínio $\Omega_x \times \Omega_v$ do espaço de estado de partículas (x, v) , representado pela Equação 63 (SILVA, 2008).

$$N_T(t) \doteq \int_{\Omega_x} \int_{\Omega_v} f(x, v, t) dV_v dV_x \quad (63)$$

Cabe ressaltar que outras densidades numéricas podem ser calculadas para a população em estudo. Ao considerar $v(v)$ como o volume da partícula no espaço de estado interno v , a densidade de volume pode ser então definida como o produto $v(v).f(x, v, t)$ e, desta forma, a fração volumétrica da fase dispersa, incluindo todas as partículas, r , pode ser encontrada por meio da Equação 64.

$$r(x, t) \doteq \int_{\Omega_v} v(v) f(x, v, t) dV_v \quad (64)$$

As densidades de massa e volume, ao contrário da densidade numérica, dizem respeito à quantidade de material disperso e, portanto, são variáveis mais relevantes em aplicações práticas (SANTOS, 2010). A Equação 54 representa a equação de balanço populacional, na qual \dot{X} é a taxa de variação da variável externa, D_x é o coeficiente de difusão anisotrópico, e $H(x, v, t)$ é o termo fonte da equação de balanço populacional, que inclui os efeitos de nucleação, crescimento, agregação e quebra (RAMKRISHNA, 2000). O segundo e terceiro termo da Equação 65 equivalem ao transporte convectivo e dispersivo de partículas no espaço físico, respectivamente.

$$\frac{\partial f(x,v,t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot [\dot{X}f(x, v, t)] + \nabla_x \cdot [D_x \cdot (\nabla_x \cdot D_x^T f(x, v, t))] + H(x, v, t) \quad (65)$$

O termo fonte, $H(x,v,t)$, da equação de balanço populacional (EBP) pode ser dividido nos termos: taxa de nucleação $J(x, v, t)$, taxa de variação das propriedades da partícula $G(x, v, t)$ e taxas de nascimento e morte, $B(x,v,t)$ e $D(x,v,t)$, respectivamente, as quais podem ocorrer por processos de agregação e quebra, definidos pelos subscritos a e b , respectivamente.

$$H(x, v, t) = B_a(x, v, t) - D_a(x, v, t) + B_b(x, v, t) - D_b(x, v, t) + J(x, v, t) + G(x, v, t) \quad (66)$$

Na Equação 66, o termo $G(x,v,t)$ é referente às mudanças no estado das variáveis internas, podendo ser interpretado como o divergente do fluxo destas variáveis em seu respectivo estado, sendo sua equação geral expressa pela Equação 67, onde \dot{V} representa a taxa de determinação das alterações da variável interna. O segundo termo da equação equivale à contribuição estocástica da variação (SILVA, 2008; SANTOS, 2010).

$$G(x, v, t) = -\nabla_v \cdot [\dot{V}f(x, v, t)] + \nabla_v \cdot [D_v \cdot (\nabla_v \cdot D_v^T f(x, v, t))] \quad (67)$$

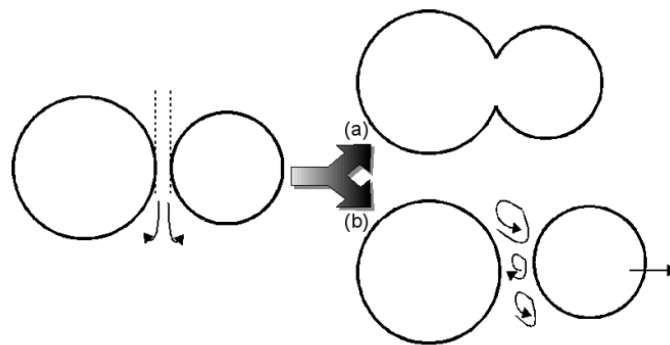
A notação utilizada nas equações acima permite quantificar os processos de maneira separada e modelá-los de forma mais fácil e eficiente, sendo que para um equacionamento mais completo da EBP, é necessário o conhecimento destes processos e da sua modelagem (SANTOS, 2010). Assim, nas próximas seções serão demonstrados aspectos tanto da física quanto da modelagem dos fenômenos de agregação e quebra.

3.9.1.1 Processos de Agregação

Em escoamentos turbulentos, durante uma dispersão, as partículas movem-se de forma aleatória e colidem continuamente umas com as outras. Assim, para que ocorra a

coalescência, o fluido que está entre as partículas em colisão deve ser drenado até a espessura de ruptura deste filme fluido (SANTOS, 2010). Durante esta drenagem, pode ocorrer uma flutuação turbulenta na fase contínua tão intensa que as partículas se separem por completo, e com isso, nem toda colisão entre partículas necessariamente resultaria em agregação. Frente ao exposto, a eficiência da agregação deve ser anexada ao processo físico de colisão entre as partículas. A Figura 17 apresenta um diagrama simplificado do processo de agregação.

Figura 17- Representação do processo de agregação iniciado pela drenagem do filme fluido que separa as partículas, podendo resultar (a) na agregação das partículas ou (b) na separação destas.



Fonte: Silva (2008).

A frequência de agregação a , descrita abaixo, pode ser definida como a probabilidade de duas partículas no estado (\tilde{x}, \tilde{v}) e (x', v') no instante t com as propriedades da fase contínua, y , se agregarem em um período de tempo de t a $t + dt$. Assim, tem-se a expressão frequência de agregação = frequência de colisão \times eficiência de agregação ou conforme descrito pela Equação 68.

$$a(\tilde{x}, \tilde{v}, x', v'; y, t) = \varpi(\tilde{x}, \tilde{v}, x', v'; y, t)\lambda(\tilde{x}, \tilde{v}, x', v'; y, t) \quad (68)$$

Na literatura, existem diversas abordagens propostas para modelar a frequência de agregação em diferentes sistemas polidispersos, tais como Harper (1936), Howarth (1964), Coualoglou e Tavlarides (1977) e Parichay *et al.* (1987), os quais propuseram diferentes hipóteses e teorias para basear seus modelos e, ainda assim, houve um consenso entre todos sobre os fenômenos físicos que afetam a agregação.

Dois fatores principais afetam a frequência de agregação, sendo eles a frequência de colisão de um par específico de partículas e a probabilidade de a agregação ocorrer após a colisão (SANTOS, 2010). A frequência de colisão de um par específico de partículas depende, em especial, da distribuição de tamanho da partícula e do padrão de

escoamento, enquanto a probabilidade de agregação ocorrer após a colisão depende dos aspectos que afetam o sucesso da agregação, tais como a camada limite viscosa (ou a drenagem do filme do fluido), a deformação das partículas e o balanço de energia (LIU *et al.*, 2000).

Desta forma, as taxas de nascimento e morte por agregação, que fazem parte do termo fonte da equação de balanço populacional, conforme mostrado na Equação 66, são dadas por Ramkrishna (2000) conforme Equação 69 e 70:

$$B_a(x, v, y, t) = \frac{1}{\delta} \int_{\Omega_{x'}} \int_{\Omega_{v'}} a(\tilde{x}, \tilde{v}, x', v'; y, t) f(\tilde{x}, \tilde{v}, t) f(x', v', t) \frac{\partial(\tilde{x}, \tilde{v})}{\partial(x, v)} dV_{v'} dV_{x'} \quad (69)$$

$$D_a(x, v, y, t) = \int_{\Omega_{x'}} \int_{\Omega_{v'}} a(x, v, x', v'; y, t) f_2(\tilde{x}, \tilde{v}, x', v', t) dV_{v'} dV_{x'} \quad (70)$$

onde δ representa o número de vezes que pares idênticos foram considerados no intervalo de integração, sendo $1/\delta$ o termo que corrige a redundância. O termo $\partial(\tilde{x}, \tilde{v})/\partial(x, v)$ corresponde ao jacobiano da transformação de coordenadas de modo que o par de partículas que colide com as coordenadas $[\tilde{x}, \tilde{v}]$ e $[x', v']$ gerem partículas no estado $[x, v]$, sendo dado por:

$$\frac{\partial(\tilde{x}, \tilde{v})}{\partial(x, v)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \tilde{x}_1}{\partial x_1} & \frac{\partial \tilde{x}_1}{\partial x_2} & \frac{\partial \tilde{x}_1}{\partial x_3} & \frac{\partial \tilde{x}_1}{\partial v_1} & \dots & \frac{\partial \tilde{x}_1}{\partial v_n} \\ \frac{\partial \tilde{x}_2}{\partial x_1} & \frac{\partial \tilde{x}_2}{\partial x_2} & \frac{\partial \tilde{x}_2}{\partial x_3} & \frac{\partial \tilde{x}_2}{\partial v_1} & \dots & \frac{\partial \tilde{x}_2}{\partial v_n} \\ \frac{\partial \tilde{x}_3}{\partial x_1} & \frac{\partial \tilde{x}_3}{\partial x_2} & \frac{\partial \tilde{x}_3}{\partial x_3} & \frac{\partial \tilde{x}_3}{\partial v_1} & \dots & \frac{\partial \tilde{x}_3}{\partial v_n} \\ \frac{\partial \tilde{v}_1}{\partial x_1} & \frac{\partial \tilde{v}_1}{\partial x_2} & \frac{\partial \tilde{v}_1}{\partial x_3} & \frac{\partial \tilde{v}_1}{\partial v_1} & \dots & \frac{\partial \tilde{v}_1}{\partial v_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \tilde{v}_n}{\partial x_1} & \frac{\partial \tilde{v}_n}{\partial x_2} & \frac{\partial \tilde{v}_n}{\partial x_3} & \frac{\partial \tilde{v}_n}{\partial v_1} & \dots & \frac{\partial \tilde{v}_n}{\partial v_n} \end{bmatrix} \quad (71)$$

Diversos modelos para a frequência de agregação foram propostos na literatura e é imprescindível escolher aquele que é apropriado para uma dada situação física. Infelizmente, o termo de agregação da EBP não está fechado, pois $f_2(\tilde{x}, \tilde{v}, x', v', t)$ ainda é desconhecido e, frequentemente, nas análises que usam balanço populacional, pode-se fazer a seguinte aproximação:

$$f_2(\tilde{x}, \tilde{v}, x', v', t) = f(x, v, t) f(x', v', t) \quad (72)$$

Tal suposição implica que não existe correlação estatística entre as partículas com estado (\tilde{x}, \tilde{v}) e (x, v) no instante t , sendo esta suposição plausível quando se trata de uma ampla população de partículas (RAMKRISHNA, 2000).

3.9.1.2 Processos de Quebra

O processo de quebra pode ser denominado como a ruptura de uma partícula dispersa em pelo menos outra duas, podendo ser ocasionada por três mecanismos: a colisão da partícula contra uma superfície sólida, a interação da partícula com campos cisalhantes, ou através da ação da turbulência (ARAÚJO, 2006).

A colisão da partícula contra uma superfície sólida é mais evidente em partículas sólidas, que podem ser lascadas ou atritadas com a superfície de outra partícula, parede ou impelidor. O segundo mecanismo, interação da partícula com campos cisalhantes, ocorre devido à interação da partícula com a fase contínua. Neste caso, o impacto não é mais com uma superfície rígida, e sim com turbilhões (*eddies*). O contato da fase dispersa com o campo cisalhante do meio contínuo pode, de fato, provocar oscilações de formato na partícula fluida por meio da ação das forças inerciais e coesivas, e, como consequência, promover a quebra. Isto ocorre somente quando a energia cinética turbulenta fornece energia superficial suficiente para fragmentar a partícula (LUO & SVENDSEN, 1996). Assim sendo, é possível dizer que os modelos de quebra se baseiam em três teorias básicas: a colisão entre partículas e superfície rígida, a colisão entre partículas fluidas e os turbilhões, ou a ruptura em virtude da deformação da partícula por influência da fase contínua.

A literatura contempla diversos trabalhos que tratam dos mecanismos de quebra de partículas, concluindo que este fenômeno pode ocorrer devido às colisões ou influência do campo de escoamento. Alguns modelos de quebra usando o conceito de colisões foram propostos (DAVIS, 1989; CAMPBELL & WEBB, 2001; CAMPBELL *et al.*, 2001). O segundo mecanismo de quebra se aplica a partículas fluidas, como bolhas ou gotas, e ocorre pela exposição destas a um campo de escoamento turbulento (HINZE, 1955; SHINNAR, 1961; COULALOGLOU & TAVLARIDES, 1977; NARSIMHAN *et al.*, 1979; TSOURIS & TAVLARIDES, 1994; LUO & SVENDSEN, 1996).

Portanto, a quebra por turbulência é induzida pela ação de pequenos vórtices (também chamados de turbilhões) que bombardeiam a superfície da partícula, ocasionando deformações nesta. Ou seja, a energia cinética do movimento turbulento da fase contínua provoca um aumento de energia superficial da partícula através das deformações (SILVA, 2008; SANTOS, 2010). Assim, a fragmentação da partícula

acontece quando o movimento turbulento fornece um aumento suficiente da energia superficial para causar a quebra.

Se o processo de quebra de partículas ocorrer independentemente uma da outra, pode-se definir uma taxa específica de quebra, $b(x, v, y, t)$, interpretada como a fração de partículas com estado (x, v) que quebram por unidade de tempo, no instante t , em um ambiente descrito por y . Então o número médio de partículas perdidas por unidade de tempo é dado por:

$$D_b(x, v, y, t) = b(x, v, y, t)f(x, v, t) \quad (73)$$

O segundo mecanismo considera a quebra causada pela turbulência e com isso, as taxas de nascimento e morte por quebra na EBP são dadas pela Equação 74 (RAMKRISHNA, 2000):

$$B_b(x, v, y, t) = \frac{1}{\delta} \int_{\Omega_{x'}} \int_{\Omega_{v'}} \vartheta(x', v', y, t)b(x', v', y, t) \times P(x, v|x', v', y, t)f(x', v', t)dV_{v'}dV_{x'} \quad (74)$$

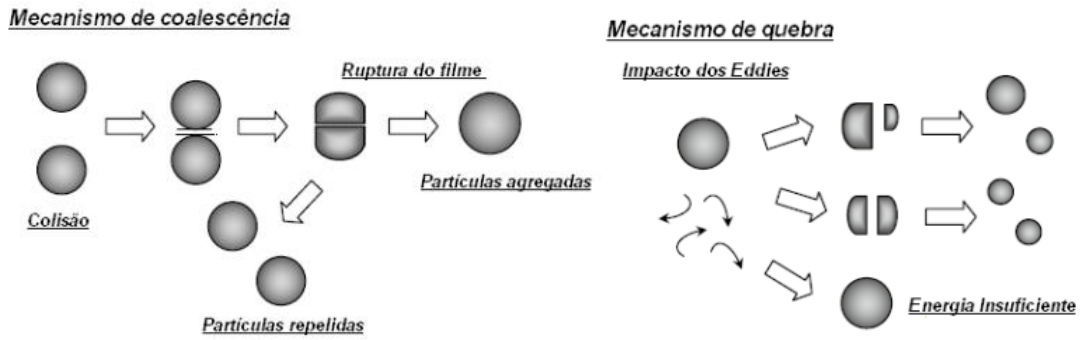
em que $\vartheta(x', v', y, t)$ é o número médio de partículas formado pela quebra da partícula de estado (x', v') ($\vartheta \geq 2$), $P(x, v|x', v', y, t)$ é a função de densidade de probabilidade das partículas formadas pela quebra de uma partícula de estado (x', v') , em um ambiente Y , no instante t , vir a possuir o estado (x, v) , e $b(x, v, y, t)$ é a taxa específica de quebra, ou seja, é a fração de partículas no estado (x, v) que quebra em uma unidade de tempo.

3.9.1.3 Simplificações e Hipóteses Adotadas

Devido à complexidade em modelar os termos da equação de balanço populacional (EBP) é essencial para sua solução que sejam consideradas hipóteses capazes de simplificar seu equacionamento original, sem que ocorram prejuízos nas características físicas intrínsecas a cada problema. As hipóteses físicas e de modelagem apresentadas nesta seção são amplamente utilizadas na solução da EBP e no desenvolvimento de funções de quebra e agregação (RAMKRISHNA, 2000).

Primeiramente, vale destacar as simplificações feitas na nomenclatura das equações, nas quais as funções de quebra e coalescência, exemplificadas na Figura 18, são dependentes das propriedades da fase contínua, que podem ser o campo de velocidades, a dissipação de energia turbulenta, as propriedades físicas do meio contínuo, dentre outras (SILVA, 2008).

Figura 18 - Mecanismos de coalescência e quebra de partículas.



Fonte: Yeoh e Tu (2010).

A morte e o nascimento por agregação envolvem pelo menos três posições: duas partículas com posições x' e \tilde{x} , e uma gerada com posição x . Porém, para problemas práticos de Engenharia, formular a EBP considerando estas três posições não é necessário, sendo comum considerar que $x' \approx \tilde{x} \approx x$, ou seja, a agregação é local, sob a hipótese de que:

$$a(x, v, x', v'; y, t) = a(x, \tilde{v}, v', t) \delta(x' - x) \delta(\tilde{x} - x) \quad (75)$$

A suposição de que as três posições utilizadas são próximas resulta nas Equações 76 e 77, que são simplificações das Equações 58 e 59.

$$B_a(x, v, t) = \frac{1}{\delta} \int_{\Omega_{v'}} a(x, \tilde{v}, v', t) f(x, \tilde{v}, t) f(x, v', t) \frac{\partial(\tilde{v})}{\partial(v)} dV_{v'} \quad (76)$$

$$D_a(x, v, t) = \int_{\Omega_{v'}} a(x, v, v', t) f(x, v, t) f(x, v', t) dV_{v'} \quad (77)$$

Ao considerar que o problema seja multivariado, isto é, um vetor de n variáveis internas, juntamente com a hipótese colocada na Equação 75, a matriz jacobiana de transformação de coordenadas pode ser simplificada como demonstrado na Equação 67.

$$\frac{\partial(\tilde{v})}{\partial(v)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial v_1} & \dots & \frac{\partial \tilde{v}}{\partial v_n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \tilde{v}_n}{\partial v_1} & \dots & \frac{\partial \tilde{v}_n}{\partial v_n} \end{bmatrix} \quad (78)$$

Todavia, quando o problema é monovariado, ou seja, possui apenas uma variável interna, o jacobiano de transformação de coordenadas se torna unitário. Quando se trata de uma propriedade aditiva na coalescência, por exemplo, considerando o jacobiano para a massa m da partícula, têm-se:

$$m' + \tilde{m} = m \quad (79)$$

$$\frac{\partial(m-m')}{\partial(m)} = 1 \quad (80)$$

O processo de quebra pode ser modelado considerando uma hipótese semelhante à demonstrada na Equação 75. Porém, este processo de quebra acontece em uma escala de tempo muito menor do que a evolução da população e, portanto, a quebra pode ser considerada instantânea. Assim, as posições das partículas mãe x e filha x' podem ser consideradas como iguais. Ao aplicar-se tal hipótese à Equação 63 para nascimento por quebra obtém-se a Equação 81.

$$B_b(x, v, y, t) = \int_{\Omega_{v'}} \vartheta(x, v', t) b(x, v', t) P(x, v|x, v', t) f(x, v', t) dV_{v'} \quad (81)$$

Neste trabalho, a dedução dos métodos lida com a EBP monovariada e, com a finalidade de mostrar a forma final da EBP utilizando o volume da partícula v , como variável interna, a Equação 82 reporta sua versão simplificada com os termos de quebra e coalescência, considerando quebra binária ($\vartheta(x, v', t) = 2$), difusão isotrópica, e \bar{u} como a velocidade característica associada ao espaço físico ($\bar{u} = \dot{X}$).

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f(x, v, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{u} f(x, v, t)) - \nabla \cdot [D_\alpha \nabla f(x, v, t)] = \\ & \frac{1}{2} \int_0^v a(x, \tilde{v}, v', t) f(x, \tilde{v}, t) f(x, v', t) d\tilde{v} - \int_0^\infty a(x, v, v', t) f(x, v, t) f(x, v', t) dv' + \\ & 2 \int_v^\infty b(x, v', t) P(x, v|x, v', t) f(x, v', t) dv' - b(x, v, t) f(x, v, t) \end{aligned} \quad (82)$$

3.9.2 Métodos de Solução da Equação de Balanço Populacional

Existem várias maneiras de resolver a equação de balanço populacional e a metodologia apropriada depende da natureza do problema. A Equação de Balanço Populacional é uma equação integro-diferencial que nem sempre pode ser resolvida analiticamente e, portanto, uma aproximação numérica deve ser aplicada, sendo a solução analítica viável somente em casos muito simples, que geralmente não são aplicáveis a situações reais (LIOU *et al.*, 1997; PATIL & ANDREWS, 1998; LAGE, 2002; MCCOY & MADRAS, 2003). Contudo, os métodos de solução analítica são importantes, visto que podem ser utilizados para testar e validar novas técnicas de solução numéricas, sendo as técnicas analíticas mais comuns os métodos de aproximações sucessivas, das características, das gerações sucessivas e o método de transformada de Laplace (SANTOS, 2010).

Dentre os métodos numéricos, os mais comuns são os métodos estocásticos (Monte Carlo), das classes, dos resíduos ponderados, dos momentos e os métodos

híbridos (incluindo suas variantes). No entanto, o método das classes, o QMOM (MCGRAW, 1997), o DQMOM (MARCHISIO & FOX, 2005) e o PPDC (BOVE *et al.*, 2005) são os mais relevantes para o acoplamento CFD-PBM, sendo que nesta revisão será abordado apenas o método das classes, utilizado neste estudo.

3.9.2.1 Método das Classes (Modelo Discreto)

O método das classes, ou de ordem zero, como chamado por Kostoglou e Karabelas (1994), é baseado em um processo de discretização da distribuição em um número finito de classes (geralmente tamanhos de partícula). Formado pela divisão do domínio do tamanho das partículas e adotando um valor constante de tamanho em cada classe, transforma-se a equação integro-diferencial em um sistema de equações diferenciais com solução bem estabelecida (SANTOS, 2010). De acordo com Kumar e Ramkrishna (1996), os métodos de ordem zero podem ser separados em duas vertentes: os internamente consistentes, e as metodologias de discretização inconsistentes com respeito à propriedade integral analisada. A consistência interna implica que a discretização da EBP submetida a um operador integral é igual à forma discreta deste operador aplicada à EBP discretizada (RAMKRISHNA, 2000). Essa técnica é eficiente, rápida e acurada, o que torna este método adequado para o acoplamento CFD-PBM. A variável interna (tamanho de partícula) é subdividida em i subintervalos ($P_n = \{v_1 = 0, v_2, \dots, v_{n+1} = \infty\}$), sendo N_i o número de partículas no subintervalo i .

$$N_i(x, t) = \int_{r_i}^{r_{i+1}} f(x, v, t) dv \quad (83)$$

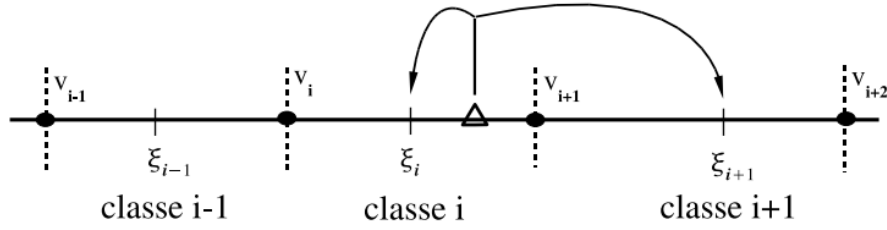
O primeiro trabalho que empregou a discretização da EBP utilizou uma metodologia relativamente simples, aplicando o teorema do valor médio. Bleck (1970) sugeriu que essa discretização na variável interna segue uma progressão geométrica, $v_{i+1} = 2v_i$. No entanto, essa abordagem ainda não era internamente consistente. Hounslow *et al.* (1988) avaliou a coalescência de gotas em tanques agitados usando o volume da partícula como variável interna discretizada em uma malha geométrica com fator de expansão igual a 2 ($v_{i+1} = 2v_i$), desenvolvendo um equacionamento conservativo, no qual um conjunto de equações foi utilizado para conservar o número e massa das gotas em sistemas com coalescência pura, conforme demonstrado na Equação 84, na qual N_i é o número de partículas no ponto i da malha e $a_{i,j}$ é a frequência de coalescência aplicada a partículas nos pontos i e j da malha.

$$\frac{dN_i}{dt} = N_{i-1} \sum_{j=1}^{i-2} 2^{j-i+1} a_{i-1,j} N_j + \frac{1}{2} a_{i-1,i-1} N_{i-1}^2 - N_i \sum_{j=1}^{i-1} 2^{j-i} a_{i,j} N_j - N_i \sum_{j=1}^{i_{max}} a_{i,j} N_j \quad (84)$$

Este método possui como principal desvantagem a inflexibilidade em termos de malha, impossibilitando o refinamento das classes, além da necessidade de desenvolver novas equações para conservar propriedades da distribuição diferentes de massa e número de partículas (SANTOS, 2010). O método proposto por Hounslow foi estendido no estudo de Lister *et al.* (1995), possibilitando o refino em progressão geométrica das classes ($v_{i+1}/v_i = 2^{1/q}$), sendo q um número inteiro maior que zero. Hill e Ng (1995) desenvolveram equações análogas à Equação 73 para o fenômeno de quebra com refino de malha. Wynn (2004) teve como foco de estudo a flexibilidade da malha utilizando uma formulação variada do método de Hounslow, aplicando o método a problemas com coalescência e reação. Contudo, este autor comenta sobre a necessidade de realizar testes de malha para verificar se existe perda de massa no último intervalo de volume. No estudo de Alexopoulos *et al.* (2004; 2005), esquemas numéricos para resolver a EBP com nucleação, crescimento e agregação simultânea foram realizados, utilizando colocação ortogonal em elementos finitos, e o método de Hounslow estendido por Lister *et al.* (1995). Os autores relataram que, nos casos em que a taxa de crescimento de partículas foi alta, existem limitações na acurácia da abordagem numérica proposta por Hounslow *et al.* (1988) quando comparada ao método de elementos finitos.

Com intuito de ultrapassar o problema de flexibilidade da malha, Kumar e Ramkrishna (1996) propuseram um método de discretização com uma abordagem mais geral e flexível, possibilitando o uso de malhas mais grosseiras ou refinadas e com diferentes faixas de tamanho. A técnica concentra a população de partículas com determinada faixa de tamanho em torno de um único ponto (chamado pivô ou abscissa), fixo no espaço das variáveis internas, utilizando uma função Delta de Dirac (δ). O subdomínio entre dois pontos da malha v_i e v_{i+1} é chamado de seção I_i , na qual o tamanho de partícula é representado pelo ponto na malha ξ_i (abscissa), tal que $v_i < \xi_i < v_{i+1}$ (Silva, 2008). A Figura 19 apresenta uma representação esquemática da malha.

Figura 19 - Representação de como a técnica do pivô fixo lida com a formação de novas partículas que não coincidem com um pivô existente; • limites das classes, | pivô (ξ_i), Δ nova partícula formada por agregação ou quebra.



Fonte: Silva (2008).

Cabe ressaltar que, esta abordagem possui um problema intrínseco, visto que os fenômenos de quebra e coalescência podem gerar partículas cuja propriedade não pertence a nenhum dos pivôs representativos da malha, gerando problemas de inacurácia numérica da solução (SANTOS, 2010). O conjunto de equações necessárias para conservar tanto o número quanto a massa das partículas por meio da técnica do pivô fixo é representada pela Equação 85, na qual $\delta'_{j,k}$ equivale ao delta de Kronecker e n é o número de pontos discretizados na malha.

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{\xi_{i-1} \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_{i+1}}^{j \geq k} \left[1 - \frac{1}{2} \delta'_{j,k} \right] \eta_i a(\xi_j, \xi_k) N_j N_k - N_i \sum_k^n a(\xi_j, \xi_k) N_k + \sum_{j \geq k}^n K_{i,k} b(\xi_k) N_j - b(\xi_i) N_i \quad (85)$$

em que:

$$\eta_i = \begin{cases} \frac{\xi_{i+1} - (\xi_j + \xi_k)}{\xi_{i+1} - \xi_i} & \text{quando } \xi_i \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_{i+1} \\ \frac{(\xi_j + \xi_k) - \xi_{i-1}}{\xi_i - \xi_{i-1}} & \text{quando } \xi_{i-1} \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_i \end{cases} \quad (86)$$

e

$$K_{i,k} = \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} \frac{\xi_{i+1} - v}{\xi_{i+1} - \xi_i} P(v|\xi_k) dv + \int_{\xi_{i-1}}^{\xi_i} \frac{v - \xi_{i-1}}{\xi_i - \xi_{i-1}} P(v|\xi_k) dv \quad (87)$$

Ao utilizar uma malha discretizada em volume com fator geométrico igual a 2, as Equações 85 a 87 levam a um equacionamento idêntico ao descrito em Hounslow *et al.* (1988).

A metodologia do pivô fixo (KUMAR & RAMKRISHNA, 1996) foi estendida por Kumar *et al.* (2006) ao considerar uma nova abordagem para a redistribuição de partículas geradas por coalescência na malha. Este método considera a média do volume

das partículas para definir o local no qual a nova partícula gerada será alocada. Ainda que a acurácia tenha sido melhorada, e o uso de malhas mais gerais tenha sido possibilitado em processos de coalescência pura, o método é limitado, visto que usa a formulação original (KUMAR & RAMKRISHNA, 1996) para tratar a quebra, sendo estendido para casos multivariados nas propriedades internas da partícula (KUMAR *et al.*, 2007).

Para superar a falta de acurácia nas predições de gradientes altamente não lineares presentes na distribuição de partículas, Kumar e Ramkrishna (1996) propuseram uma nova abordagem, chamada de método do pivô móvel, a qual permite que a não uniformidade da distribuição em cada seção I_i , provocada pelos efeitos de quebra ou coalescência, seja considerada mudando a localização do pivô. Ou seja, os pivôs são tratados como quantidades dinâmicas, e suas posições mudam conforme a distribuição varia. Assim, acoplado à equação de conservação do número de partículas, torna-se necessário deduzir as equações para as mudanças de posição dos pivôs, que se movimentam de forma a compensar a evolução da função de distribuição devido às novas partículas formadas (SILVA, 2008; SANTOS, 2010).

As equações que conservam massa e número pela técnica do pivô móvel estão colocadas abaixo.

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{\substack{j \geq k \\ v_{i-1} \leq (\xi_j + \xi_k) \leq v_{i+1}}} \left[1 - \frac{1}{2} \delta'_{j,k} \right] a(\xi_j, \xi_k) N_j N_k - N_i \sum_{k=1}^{i_{max}} a(\xi_i, \xi_k) N_k + \sum_{j \geq i}^{i_{max}} b(\xi_i) N_j \bar{B}_{i,j}^{(1)} - b(\xi_i) N_i \quad (88)$$

$$\frac{d\xi_i}{dt} = \frac{1}{N_i} \sum_{\substack{j \geq k \\ v_{i-1} \leq (\xi_j + \xi_k) \leq v_{i+1}}} \left[1 - \frac{1}{2} \delta'_{j,k} \right] [(\xi_j + \xi_k) - \xi_i] a(\xi_j, \xi_k) N_j N_k - \frac{1}{N_i} \sum_{j \geq i}^{i_{max}} b(\xi_i) N_j [\bar{B}_{i,j}^{(v)} - \xi_i \bar{B}_{i,j}^{(1)}] \quad (89)$$

em que:

$$\bar{B}_{i,j}^{(1)} = \int_{v_1}^{v_{1+1}} P(v|\xi_j) dv \quad (90)$$

$$\bar{B}_{i,j}^{(v)} = \int_{v_1}^{v_{1+1}} v P(v|\xi_j) dv \quad (91)$$

Apesar da alta acurácia do método, um alto custo computacional é observado quando a variação da distribuição no espaço físico é considerada. Com intuito de otimizar a localização dos pivôs na malha e minimizar o erro da discretização da EBP aplicada a sistemas de tanques agitados em batelada ou contínuo, Attaraki *et al.* (2003) propuseram

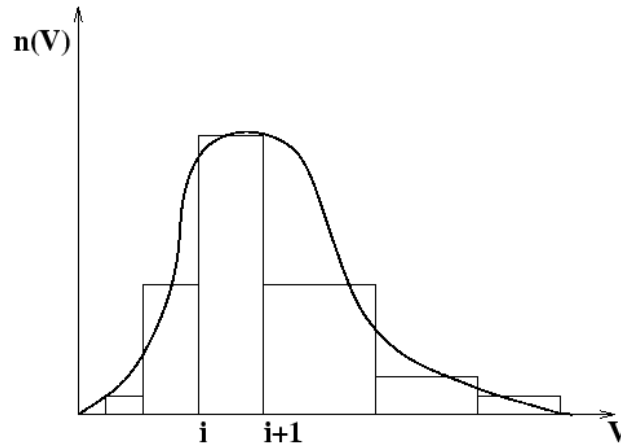
dois algoritmos utilizando a técnica do pivô móvel e mostraram que as equações de densidade numérica e as equações do pivô (Equações 88 e 89) poderiam ser resolvidas de maneira sequencial no tempo quando o número de classes fosse suficientemente alto.

Com intuito de comparar as metodologias de solução, Nopens *et al.* (2005) utilizaram três tamanhos de malha distintos, com 25 (grosseira), 31 e 46 (refinada) classes e mediram o tempo computacional até que a simulação atingisse o estado estacionário. Os autores destacaram a dependência dos resultados com o método numérico utilizado, e também com o grau de refino da malha, devido ao fenômeno de encarceramento de partículas em alguma classe (fora a última), em que a quebra e a coalescência não são mais possíveis. Para o caso da combinação dos dois fenômenos (quebra e coalescência combinados), o método de Hounslow atingiu o estado estacionário mais rápido do que todos os métodos, enquanto o método do pivô móvel exibiu um alto custo computacional, o qual aumentou a medida em que o número de classes usadas crescia.

O trabalho de Hu *et al.* (2005) desenvolve uma formulação fundamentada em diferenças finitas para resolver as EBP homogêneas e monovariadas, na qual o algoritmo utilizado parte de aproximações por série de Taylor da densidade de partículas para alcançar expressões algébricas para a evolução temporal do número e do volume das partículas da população em um domínio discretizado em classes. Neste método, as integrais dos termos de quebra e coalescência devem ser avaliadas no intervalo discretizado de cada classe e, para isso, os autores usaram a quadratura de Gauss-Legendre. Os autores apresentaram resultados de casos com coalescência e crescimento simultâneos, quebra pura e crescimento e nucleação simultânea, sendo que todos possuem solução analítica e obtiveram ótima concordância entre os resultados numéricos e analíticos, contudo os fenômenos simulados e as funções de quebra e coalescência foram muito simples, necessitando de mais simulações com funções de quebra e coalescência e situações físicas mais realísticas devem para avaliar melhor o método (SANTOS, 2010).

No *software ANSYS FLUENT*, o modelo baseia-se na representação da distribuição contínua de tamanhos de partículas (do inglês *Particle Size Distribution - PSD*) em termos de um conjunto de classes de tamanhos discretos ou *bins*, conforme ilustrado na Figura 20.

Figura 20 - Distribuição de Tamanho de Partícula representada pelo Método Discreto



Fonte: ANSYS Fluent Guide (2018).

A equação de balanço populacional é escrita em termos da fração volumétrica da partícula de tamanho i , conforme Equação 92

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \alpha_i) + \nabla \cdot (\rho_s u_i \alpha_i) + \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{G_V \rho_s \alpha_i}{V} \right) = \rho_s V_i (B_{ag,i} - D_{ag,i} + B_{br,i} - D_{br,i}) + 0^i \rho_s V_0 \dot{n}_0 \quad (92)$$

na qual ρ_s é a densidade da fase secundária e α_i é a fração volumétrica da partícula de tamanho i . definida pela Equação 93

$$\alpha_i = N_i V_i \quad i = 0, 1, 2, \dots, N - 1 \quad (93)$$

sendo

$$N_i(t) = \int_V^{V^{i+1}} n(V, t) dV \quad (94)$$

e V_i é o volume da partícula de tamanho i . No *software* a fração de α , chamada f_i é introduzida como a variável da solução, sendo esta fração definida conforme Equação 95, na qual α é a fração volumétrica total da fase secundária.

$$f_i = \frac{\alpha_i}{\alpha} \quad (95)$$

A taxa de nucleação \dot{n}_0 aparece na equação discretizada para a fração de volume do menor tamanho V_0 . A notação 0^i significa que este termo em particular, neste caso $\rho_s V_0 \dot{n}_0$, aparece na Equação 92 apenas no caso do menor tamanho de partícula. A taxa de crescimento na Equação 92 é discretizada da seguinte forma (HOUNSLOW *et al.*, 1988):

$$\frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{G_V \rho_s \alpha_i}{V} \right) = \rho_s V_i \left[\left(\frac{G_{V,i-1} N_{i-1}}{V_i - V_{i-1}} \right) - \left(\frac{G_{V,i} N_i}{V_{i+1} - V_i} \right) \right] \quad (96)$$

A coordenada de volume é discretizada como (Hounslow *et al.*,1988): $V_{i+1}/V_i = 2^q$ onde $q = 1, 2, \dots$ e é referido como o "fator de razão". As taxas de natalidade e mortalidade de partículas são definidas da seguinte forma, conforme Equações 97 a 100:

$$B_{ag,i} = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n a_{k,j} N_k N_j x_{k,j} \xi_{k,j} \quad (97)$$

$$D_{ag,i} = \sum_{j=1}^n a_{i,j} N_i N_j \quad (98)$$

$$B_{br,i} = \sum_{j=i+1}^n g(V_j) N_j \beta(V_i | V_j) \quad (99)$$

$$D_{br,i} = g(V_i) N_i \quad (100)$$

sendo

$$a_{i,j} = a(V_i, V_j) \quad (101)$$

$$\xi_{k,j} = \begin{cases} 1 & \text{para } V_i < V_{ag} < V_{i+1}, \text{ onde } i \leq N - 1 \\ 0 & \end{cases} \quad (102)$$

V_{ag} é o volume de partículas resultante da agregação das partículas k e j , e é definido como

$$V_{ag} = [x_{k,j} V_i + (1 - x_{k,j}) V_{i+1}] \quad (103)$$

sendo

$$x_{k,j} = \frac{V_{ag} - V_{i+1}}{V_i - V_{i+1}} \quad (104)$$

Se V_{ag} for maior ou igual ao maior tamanho de partícula V_N , então a contribuição para a classe $N-1$ é dada pela Equação 105. Observe que não há quebra para a menor classe de partículas.

$$x_{k,j} = \frac{V_{ag}}{V_N} \quad (105)$$

Em relação aos fenômenos de quebra e coalescência, a formulação de quebra padrão para o método discreto no *ANSYS FLUENT* é baseada no método de Hagesather (2002), no qual as fontes de quebra são distribuídas nos respectivos compartimentos de tamanho, preservando a massa e a densidade numérica. Para o caso em que a razão entre tamanhos de compartimentos sucessivos pode ser expressa como 2^n onde $n=1,2,\dots$, a fonte em *bin* i , ($i=1,\dots,N$) pode ser expresso como

$$B_b(i) = \sum_{k=i+1, i \neq N}^N \Omega_b(v_k, v_i) + \sum_{k=i, i \neq N}^i x_{i+1,k} \Omega_b(v_{i+1}, v_k) + \sum_{k=1, i \neq 1}^{i-1} (1 - x_{i,k}) g(v_{i+1} \Omega_b(v_{i+1}, v_k)) \quad (106)$$

sendo

$$\Omega_b(v_{i+1}, v_k) = N_k g(v_k) \beta(v_k, v_i) \quad (107)$$

Uma formulação matematicamente mais rigorosa é dada por Ramkrishna (2000), onde a taxa de quebra é expressa conforme Equação 108.

$$B_b(i) = \sum_i^N n_{i,k} g(v_k) N_k \quad (108)$$

onde

$$n_{i,k} = \int_{v_i}^{v_{i+1}} v_{i+1} \frac{v_{i+1} - v}{v_{i+1} - v_i} \beta(v_k, v) dv + \int_{v_{i-1}}^{v_i} \frac{v - v_{i-1}}{v_i - v_{i-1}} \beta(v_k, v) dv$$

A formulação de Ramkrishna pode ser lenta devido ao grande número de pontos de integração necessários. No entanto, para formas simples de β , as integrações podem ser realizadas com relativa facilidade. A formulação de Hagesather requer menos pontos de integração e a diferença de precisão com a formulação de Ramkrishna pode ser corrigida por uma escolha adequada de tamanhos de caixas. Para manter o tempo computacional razoável, um valor médio de volume é usado para a dissipação turbulenta de vórtices quando o modelo Luo é usado em conjunto com a formulação de Ramkrishna (ANSYS FLUENT Guide, 2018).

A aplicação do balanço populacional utilizando o método das classes, também chamado de modelo Discreto, pode ser realizada através de duas abordagens distintas, os Modelos Discretos Homogêneo e Não-Homogêneo. No presente trabalho, foi adotada a abordagem Discreta Não Homogênea, em virtude do menor custo computacional envolvido, conforme a pesquisa de Rodrigues *et al.* (2019).

3.9.2.1.1 Modelo Discreto Não Homogêneo

Uma das limitações existentes no método discreto homogêneo é que todas as classes são atribuídas à mesma fase secundária e, portanto, são considerados com o mesmo momento de fase. Tal consideração não é adequada para casos de modelagem em que tamanhos grandes e pequenos de bolhas tendem a segregar devido a diferentes campos de momento. O método discreto não homogêneo supera essa limitação ao permitir que grupos de classes sejam anunciados por diferentes velocidades de fase. Portanto, quando o modelo discreto não homogêneo é ativado, o modelo de Balanço Populacional pode ser aplicado a mais de uma fase secundária.

O modelo Discreto Não- Homogêneo possibilita que diferentes classes possuam diferentes velocidades de fase, ou seja, é possível acrescentar mais de uma fase secundária, indicando diferentes velocidades para cada uma, o que permite que uma mesma classe de partículas esteja presente em diferentes fases secundárias (RODRIGUES, 2018). A equação geral de transporte para a fração da classe discreta f_i pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i f_i) + \nabla \cdot (f_i \alpha_i \vec{u}_p) = S_{bi} \quad (109)$$

Como todas as classes pertencem a uma única fase no método discreto homogêneo, a fonte de massa líquida para a fase em caso de quebra e coalescência é zero e pode ser expressa como:

$$\sum_{i=1}^M S_{bi} = 0 \quad (110)$$

A Figura 21(a), demonstra esquematicamente este fato do método discreto homogêneo, em que todas as classes são regidas pela mesma velocidade de fase u_p . Em contraste, o método discreto não homogêneo mostrado na Figura 21(b), permite que as classes sejam atribuídas a várias fases. Neste método, M classes por fase são distribuídas em N fases para um total de $M \times N$ classes. As classes f_i e f_M são mantidas pela velocidade de fase u_{p_i} e assim por diante.

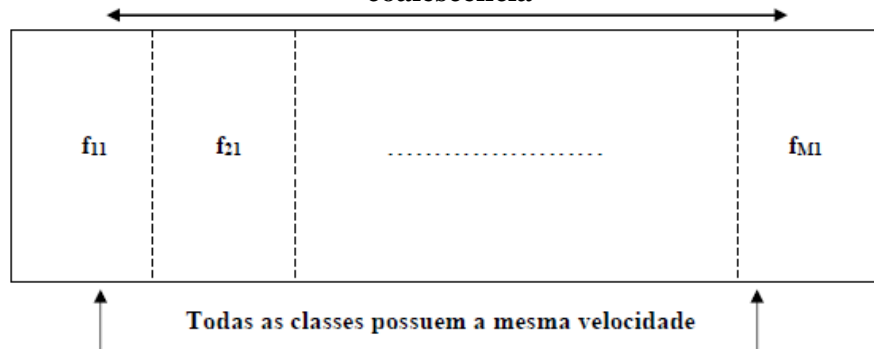
A Figura 21(a) mostra que cada classe, indicada por sua respectiva fração (f_i), só pode migrar para as demais classes através de interações de quebra ou coalescência. Um exemplo seria que, para uma bolha pertencente à classe 1, ou seja, o menor diâmetro, alcançar a classe 3, são necessárias interações de coalescência para aumentar seu diâmetro e, assim ser transferida para outra classe, ou seja, outro intervalo que contemple o novo tamanho da bolha. Além disso, para o mesmo exemplo, tem-se que as bolhas pertencem a uma mesma fase e, conseqüentemente, possuem a mesma velocidade.

Na Figura 21(b), observa-se a existência da possibilidade de aplicar as equações de balanço populacional para diferentes fases (S_i), cada uma com sua velocidade U_{p_i} , o que representa uma importante característica do modelo Discreto Não- Homogêneo. Para melhor compreensão, supõe-se que uma bolha f_{21} , ou seja, pertencente à classe 2 da fase secundária S_1 e velocidade U_{p1} , coalesça e passe a pertencer à classe 5. O aumento de tamanho faz com que sua velocidade possa ser alterada para U_{p3} e, portanto, torna-se

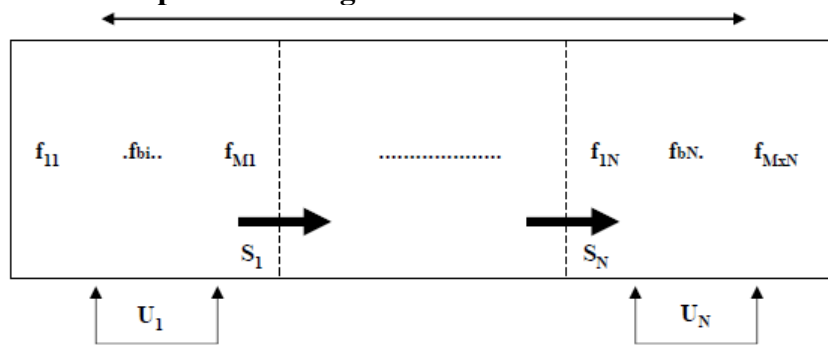
possível a transferência desta a bolha para a fase S_3 , a qual apresenta a velocidade U_{p3} , e ser considerada como pertencente à fração f_{53} .

Figura 21 - Representação dos modelos Discretos. a) Princípio do modelo Discreto Homogêneo. b) Princípio do modelo Discreto Não –Homogêneo.

a) **Classes interagem uma com as outras por meio de fenômenos de quebra e coalescência**



b) **Classes podem interagir e atravessar cada uma das fases**



Fonte: Adaptado de ANSYS (2013b) (Rodrigues, 2018).

Na Figura 21, cada símbolo equivale (para $i=1...N$):

N – número de fases secundárias, a qual indica o total de fases secundárias envolvidas na simulação;

M – número de intervalos (classes). Um intervalo, ou classe, equivale a uma determinada faixa de tamanho que caracteriza esta classe, ou seja, o número de intervalos indica o total de faixas de tamanho que são considerados na simulação;

f_{bi} – fração referente à classe b para uma dada fase i , indicando uma faixa específica de tamanho, sendo que os subíndices a definem e a localizam dentro da simulação;

S_i – fase i , a qual indica uma das N fases envolvidas na simulação;

U_i – velocidade da fase i , termo que indica a velocidade de determinada fase envolvida na simulação.

A soma das fontes de classes em qualquer fase não é necessariamente igual a zero, pois as classes em uma determinada fase podem migrar para outra fase por quebra ou coalescência, criando assim uma fonte de massa líquida para essa fase. A fonte de massa líquida para uma determinada fase pode ser expressa como a soma das fontes de classes pertencentes a essa fase:

$$S_i = \sum_{i=i}^M S_{bi} \quad (111)$$

Para quebra e coalescência a soma sobre todas as fontes de fase é zero

$$\sum_{i=i}^N S_{bi} = 0 \quad (112)$$

também semelhante ao modelo discreto homogêneo

$$\sum_{i=i}^M f_i = 0 \quad (113)$$

O método discreto não homogêneo é atualmente limitado apenas à quebra e coalescência. Além disso, para a distribuição de tamanho de bolhas, não é utilizado somente um diâmetro médio de *Sauter*, ou seja, a fase ar é separada em duas fases, uma com bolhas menores e outra com bolhas maiores, utilizando assim dois diâmetros médios de *Sauter* no acoplamento com as equações de conservação de quantidade de movimento para representar toda a distribuição de tamanho de bolhas do sistema. Frente ao exposto, a equação de transporte para uma fração discreta f_{bi} pode ser descrita conforme Equação 96 (adaptado de ANSYS, 2013b):

Sendo cada termo corresponde a:

f_{bi} – fração de massa pertencente ao intervalo b para a fase secundária i ;

S_i – termo de geração total de massa para a fase secundária i ;

S_{bi} – termo de geração total de massa do intervalo b para a fase secundária i ;

N – número de fases secundárias presentes no escoamento;

M – número de intervalo por fase secundária.

O acoplamento das equações de balanço populacional (que modelam as fases secundárias) às equações de conservação de quantidade de movimento se dá através da utilização do diâmetro médio de *Sauter* (d_{32}), o qual é responsável pela representação da bolha da fase secundária (fase ar) na continuidade dos cálculos fluidodinâmicos. Desta forma, ao se separar bolhas pequenas e grandes em fases distintas, considera-se dois

diâmetros diferentes que são aplicados às equações de conservação de quantidade de movimento. A Equação 114 apresenta a definição do diâmetro médio de Sauter.

$$d_{32i} = \frac{\sum N_b L_b^3}{\sum N_b L_b^2} \quad (114)$$

na qual N_b representa a fração de massa pertencente ao intervalo b para a fase secundária i , e L_b representa o diâmetro médio do intervalo b na fase secundária i .

3.10 Modelos de Coalescência e Quebra utilizados

O fenômeno de coalescência é caracterizado pela formação de uma bolha a partir de duas outras com diâmetros menores, enquanto a quebra permite a formação de novas bolhas menores a partir de bolhas com maiores diâmetros (RODRIGUES, 2018).

Os núcleos de quebra e agregação dependem da natureza da aplicação física. Por exemplo, na dispersão gás-líquido, os grãos são funções da dissipação turbulenta local da fase líquida. Neste trabalho, optou-se pelo modelo Turbulento para modelar a coalescência, enquanto a quebra foi modelada adotando-se o modelo de Luo (LUO & SVENDSEN, 1996).

3.10.1 Modelo Turbulento de Coalescência

O núcleo de coalescência (LUO & SVENDSEN, 1996) é expresso como

$$a = (V, V') \quad (115)$$

O núcleo de coalescência a tem unidades de m^3/s , e às vezes é definido como um produto de duas quantidades:

- a frequência de colisões entre partículas de volume V e partículas de volume V' ;
- a "eficiência de agregação" (ou seja, a probabilidade de partículas de volume V coalescer com partículas de volume V').

A taxa de natalidade de partículas de volume V devido à agregação é dada por

$$B_{ag} = \frac{1}{2} \int_0^V a(V - V', V') n(V - V') n(V') dV' \quad (116)$$

onde partículas de volume $(V - V')$ se agregam com partículas de volume V' para formar partículas de volume V . O fator $1/2$ é incluído para evitar contabilizar cada evento de colisão duas vezes.

A taxa de mortalidade de partículas de volume V' devido à agregação é dada por:

$$D_{ag} = \int_0^{\infty} a(V, V')n(V)n(V')dV' \quad (117)$$

Durante os processos de mistura, a energia mecânica é fornecida ao fluido. Essa energia cria turbulência dentro do fluido. A turbulência cria redemoinhos, que por sua vez ajudam a dissipar a energia. A energia é transferida dos maiores vórtices para os menores vórtices nos quais é dissipada através de interações viscosas. O tamanho dos menores vórtices é a microescala de Kolmogorov, η , que é expressa em função da viscosidade cinemática e da taxa de dissipação de energia turbulenta:

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \quad (118)$$

No campo de fluxo turbulento, a agregação pode ocorrer por dois mecanismos:

- mecanismo de subfaixa viscosa: isso é aplicado quando as partículas são menores que a microescala Kolmogorov, ν ;
- mecanismo de subfaixa inercial: é aplicado quando as partículas são maiores que a microescala de Kolmogorov. Neste caso, as partículas assumem velocidades independentes.

Para a subfaixa viscosa, as colisões de partículas são influenciadas pelo cisalhamento local dentro do redemoinho. Com base no trabalho de Saffman e Turner (1956), a taxa de colisão é expressa como,

$$a(L_i, L_j) = \zeta_T 2^{3/2} \sqrt{\pi} \frac{(L_i + L_j)^2}{4} \sqrt{(U_i^2 + U_j^2)} \quad (119)$$

onde U_i^2 é a velocidade quadrática média para a partícula i .

O coeficiente de eficiência de captura empírica da colisão turbulenta descreve a interação hidrodinâmica e atrativa entre as partículas em colisão. Higashitani *et al.* (1983) propuseram a seguinte relação:

$$\zeta_T = 0,732 \left(\frac{5}{N_T}\right)^{0,242}; N_T \geq 5 \quad (120)$$

sendo N_T a razão entre a força viscosa e a força de Van der Waals,

$$N_T = \frac{6\pi\mu(L_i + L_j)^3 \lambda}{8H} \quad (121)$$

na qual H é a constante de Hamaker, uma função do material da partícula, e λ é a taxa de deformação

$$\lambda = \left(\frac{4\epsilon}{15\pi\nu} \right)^{0,5} \quad (122)$$

3.10.2 Modelo de Luo para Quebra

A expressão da taxa de quebra (Luo e Svendsen, 1996), é expressa como

$$g(V')\beta(V|V') \quad (123)$$

onde,

$g(V')$ = frequência de quebra; ou seja, a fração de partículas de volume V' quebrando por unidade de tempo ($\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$);

$\beta(V|V')$ = função de densidade de probabilidade (PDF) de partículas saindo do volume V' para uma partícula de volume V .

A taxa de natalidade de partículas de volume V devido à quebra é dada por

$$B_{br} = \int_{\Omega_v} \rho g(V')\beta(V|V')n(V')dV' \quad (124)$$

onde $g(V')n(V')dV'$ partículas de volume V' quebram por unidade de tempo, produzindo $\rho g(V')n(V')dV'$ partículas, das quais uma fração $\beta(V|V')dV$ representa partículas de volume V . ρ é o número de partículas filhas produzidas por pai (por exemplo, duas partículas para quebra binária).

A taxa de mortalidade de partículas de volume V devido à quebra é dada por

$$D_{br} = g(V)n(V) \quad (125)$$

O PDF $\beta(V|V')$ também é conhecido como função de distribuição de fragmentação de partículas, ou distribuição de tamanho filha. Várias formas funcionais da função de distribuição de fragmentação foram propostas, embora as seguintes restrições físicas devam ser atendidas: o número normalizado de partículas em quebra deve somar a unidade, as massas dos fragmentos devem somar a massa da partícula original e o número de fragmentos formado deve ser representado corretamente. Matematicamente, essas restrições podem ser escritas da seguinte forma:

- Para a condição de normalização:

$$\int_0^{V'} \beta(V|V')dV = 1 \quad (126)$$

- Para conservação de massa

$$\rho \int_0^{V'} m(V)\beta(V|V')dV = m(V') \quad (127)$$

Para quebra binária, β é simétrico em torno de $V/V' = 0,5$; ou seja,

$$\beta(V' - V|V') = \beta(V|V') \quad (128)$$

Os modelos Luo e Lehr são núcleos integrados, os quais abrangem tanto a frequência de quebra quanto o PDF das partículas de quebra. A taxa de quebra geral por unidade de volume é geralmente escrita (LEHR *et al.*, 2002) como:

$$\Omega_{br}(V|V') = \Omega_B(V')\eta(V|V')[1/m^3/sec] \quad (129)$$

onde a partícula original tem um volume V' e a partícula filha tem um volume V . Na expressão anterior, $\Omega_B(V')$ é a frequência de quebra e $\eta(V|V')$ é a função normalizada de distribuição de partículas filhas. Para quebra binária, o núcleo de quebra deve ser simétrico em relação a de $V/V' = 0,5$

A forma geral é a integral sobre o tamanho dos redemoinhos λ que atingem a partícula com diâmetro d (e volume V). A integral é tomada sobre o tamanho do redemoinho adimensional $\xi = \lambda/d$. A forma geral é

$$\Omega_{br}(V|V') = K \int_{\xi_{min}}^1 \frac{(1+\xi)^2}{\xi^n} \exp(-b\xi^m) d\xi \quad (130)$$

onde os parâmetros são como mostrados na Tabela 1.

Tabela 1 - Parâmetros do modelo Luo e Lehr

	$K[1/m^3/sec]$	n	b	m
Luo	$0,9238\epsilon^{1/3}d^{-2/3}\alpha$	11/3	$12(f^{2/3} + (1-f)^{2/3} - 1)\sigma\rho^{-1}\epsilon^{-2/3}d^{-5/3}$	-11/3
Lehr	$1,19\epsilon^{-1/3}d^{-7/3}\sigma\rho^{-1}f^{-1/3}$	13/3	$2\sigma\rho^{-1}\epsilon^{-2/3}d^{-5/3}f^{-1/3}$	-2/3

Fonte: ANSYS FLUENT Guide (2018).

3.10.3 Modelo de Laakkonen para Quebra

Sob condições turbulentas, as principais razões para a quebra das bolhas são as flutuações de pressão turbulenta ao longo da superfície e as colisões entre bolhas. Devido a esses fenômenos, a bolha começa a se deformar até se fragmentar em duas ou mais bolhas filhas (GILLI, 2020). O mecanismo, para que ocorra esse rompimento, é descrito por meio de um equilíbrio entre a diferença da pressão dinâmica em torno da partícula, a

qual age externamente, τ_i e sua tensão superficial τ_s , sendo as tensões viscosas desprezadas. Desta forma, a bolha quebra apenas dependendo do nível de deformação, ou seja, do número de Weber ($We = \tau_i/\tau_s$) (LIAO & LUCAS, 2009).

O primeiro modelo foi proposto por Coualoglou e Tavlarides (1977), referindo-se à natureza turbulenta da dispersão líquido-líquido, o qual afirma que a gota oscila e se deforma devido a flutuações de pressão locais. Todavia, a quebra só irá ocorrer se sua energia cinética for maior que sua energia de superfície. O modelo de quebra proposto é descrito pela Equação 131.

$$g(V') = c_1 L^{-2/3} \varepsilon^{1/3} \exp \left[-\frac{c_2 \sigma}{\rho_g \varepsilon^{2/3} L^{5/3}} \right] \quad (131)$$

Se o efeito de “amortecimento” das gotas nas magnitudes turbulentas locais, em altas frações de retenção gasosa, forem contabilizados, a expressão original se torna:

$$g(V') = c_1 L^{-2/3} \frac{\varepsilon^{1/3}}{1+\alpha_g} \exp \left[-\frac{c_2 \sigma (1+\alpha_g)^2}{\rho_g \varepsilon^{2/3} L^{5/3}} \right] \quad (132)$$

onde $c_1=0,00481$ e $c_2=0,08$ são constantes numéricas.

Prince e Blanch (1990) destacaram em seu trabalho que, no caso de sistemas gás-líquido, o modelo de Coualoglou e Tavlarides (1977) prevê tamanhos de bolhas muito pequenos quando comparados aos experimentais, podendo este fato estar relacionado a densidade da fase gasosa. Tal parâmetro, utilizado para o caso de sistemas gás-líquido, é muito menor para as dispersões líquido-líquido e, portanto, a densidade da fase contínua é usada no caso de sistemas gás-líquido, conforme demonstrado na Equação 133 (LASHERAS *et al.*, 2002):

$$g(V') = c_1 L^{-2/3} \frac{\varepsilon^{1/3}}{1+\alpha_g} \exp \left[-\frac{c_2 \sigma (1+\alpha_g)^2}{\rho_L \varepsilon^{2/3} L^{5/3}} \right] \quad (133)$$

Alopaesus *et al.* (2002) modificaram o modelo de Narsimhan e Gupta (1979) adicionando à frequência de colisão da gota, uma dependência da taxa de dissipação turbulenta, considerando a força viscosa do fluido dentro da gota, anteriormente desprezada, levando a Equação 134.

$$g(V') = c_3 \varepsilon^{1/3} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{c_4 \frac{\sigma}{\rho_L \varepsilon^{2/3} L^{5/3}} + c_5 \frac{\mu_g}{\sqrt{\rho_g \rho_L} \varepsilon^{1/3} L^{4/3}}} \right) \quad (134)$$

Laakkonen *et al.* (2006) substituiu a viscosidade da fase dispersa pela viscosidade da fase contínua, segundo a teoria de que as tensões viscosas que resistem à ruptura

dependem da viscosidade do líquido ao redor da bolha e não da viscosidade do gás. Com isso a Equação final pode ser expressa como:

$$g(V') = c_3 \varepsilon^{1/3} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{c_4 \frac{\sigma}{\rho_L \varepsilon^{2/3} d^{5/3}} + c_5 \frac{\mu_L}{\sqrt{\rho_g \rho_L} \varepsilon^{1/3} d^{4/3}}} \right) \quad (135)$$

onde, ε representa a dissipação turbulenta da fase líquida, σ a tensão superficial, d o diâmetro da partícula e μ_L a viscosidade do líquido. As constantes presentes na expressão possuem valores de 2,52, 0,04 e 0,01, respectivamente. Neste modelo, as duas últimas constantes são obtidas através da teoria da turbulência e são independentes do sistema estudado.

A função de densidade de probabilidade (PDF) de partículas saindo do volume V' para uma partícula de volume V é dada por:

$$\beta(V|V') = \frac{30}{V'} \left(\frac{V}{V'} \right)^2 \left(1 - \frac{V}{V'} \right)^2 \quad (136)$$

na qual, V' e V são os volumes das partículas mãe e filha, respectivamente. Este modelo representa uma alternativa ao modelo amplamente empregado de Luo, pois possui uma expressão mais simples para a função de densidade de probabilidade da partícula filha e, portanto, requer um custo computacional significativamente menor.

CAPÍTULO 4 – AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DO DIÂMETRO DA BOLHA E DA FORÇA DE SUSTENTAÇÃO POR FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

4.1 Introdução

Em bioprocessos submersos, o movimento do líquido no interior do reator, marcado por uma dada velocidade de circulação de líquido, gera turbulência no meio reacional. O diâmetro de bolha (d_B) é um parâmetro de extrema importância para a compreensão tanto dos fenômenos de transferência de massa, quanto de movimento.

O tamanho da bolha influencia na transferência de massa e nos parâmetros hidrodinâmicos, como a retenção gasosa e a taxa de cisalhamento média. Compreender os fenômenos hidrodinâmicos e de transferência em biorreatores pneumáticos é essencial na análise, projeto, operação e otimização de processos industriais. Em simulações de escoamento multifásico, as forças interfaciais podem desempenhar um papel importante devido à transferência de quantidade de movimento através da interface em escoamentos multifásicos, influenciando os padrões dinâmicos dos fluidos. Em colunas de bolhas, destacam-se as forças de arrasto, sustentação, dispersão turbulenta e massa virtual (Tabib *et al.*, 2008). Por essas razões, a fluidodinâmica computacional (CFD) tem sido amplamente aplicada na modelagem e simulação desses sistemas de escoamento (Ziegenhein *et al.*, 2017; Yang *et al.*, 2018).

A fluidodinâmica computacional permite simular as transferências de momento, calor e massa em biorreatores com base em alguns parâmetros fundamentais (Yang *et al.*, 2018), sendo a abordagem Euler-Euler a mais utilizada para modelar o comportamento de biorreatores de coluna de bolhas em fase densa (Laborde-Boutet *et al.*, 2009; Ekambara e Dhotre, 2010; Li e Zhong, 2015), devido ao baixo custo computacional, quando se opera sistemas com grande quantidade de bolhas. Neste capítulo, a retenção gasosa global, as taxas de cisalhamento média e máxima, além do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio, de um biorreator coluna de bolhas de seção quadrada foram avaliadas por meio de simulações por CFD e comparadas aos resultados obtidos experimentalmente e por meio de correlações semiempíricas, a fim de se comprovar a validade do modelo matemático aplicado.

4.2 Estado da arte

A injeção de gás é responsável pela movimentação do meio reacional em biorreatores pneumáticos, promovendo a homogeneização do sistema e, portanto, facilitando os processos de transferência de quantidade de movimento, calor e massa. Logo, a forma como acontece a aspensão de um gás, irá influenciar significativamente o desempenho global do processo, ou seja, o formato do aspersor pode alterar a hidrodinâmica de um biorreator pneumático.

Huang *et al.* (2010) realizaram a simulação do escoamento gás-líquido em reator *airlift* de circulação interna no estado estacionário, com posterior verificação e comparação com dados da literatura. Adotou-se o regime permanente com o objetivo de economizar tempo de simulação e, este ser ideal no projeto de biorreatores em fase plena de operação. Vários modelos de estimativa do coeficiente de transferência de massa foram comparados, sendo alguns não aplicáveis à situação prática., sendo fornecidos perfis espaciais teóricos da retenção gasosa ao longo do biorreator.

Silva (2011) propôs o estudo das forças interfaciais que atuam no escoamento gás-líquido em um reator coluna de bolhas de seção retangular com aeração centralizada, sendo as simulações conduzidas sob a formulação Euleriana para ambas as fases. O autor investigou diferentes modelos de força de arraste, sustentação, dispersão turbulenta e massa virtual. Por meio de comparações com valores experimentais de retenção gasosa global, foram definidos os melhores modelos. Dentre as forças analisadas, apenas a força de massa virtual não apresentou influência relevante quando considerada, sendo recomendado pelo autor, a inclusão de todas as demais na simulação de sistemas que operem em condições semelhantes àquelas estudadas pelo mesmo.

Zhang *et al.* (2012) desenvolveram um biorreator *airlift* de cilindros concêntricos com um funil interno. Dados obtidos numericamente por CFD foram comparados aos resultados experimentais para o sistema água-ar. Os autores concluíram que a presença do funil colaborou para o aumento máximo de 15% na retenção gasosa global, sendo que a energia cinética turbulenta foi reduzida em até 7,8%, demonstrando que a geometria proposta tem impacto positivo em cultivos celulares muito sensíveis ao cisalhamento.

Masood e Delgado (2014) conduziram uma análise de sensibilidade que visava verificar a influência dos modelos de forças de arraste, sustentação, dispersão turbulenta e lubrificação da parede nos perfis axiais de velocidade de líquido e gás. Foi utilizado um reator coluna de bolhas de seção quadrada, operando com água e ar, e como resultado, os

autores concluíram que o modelo de Ishii e Zuber (1979) é recomendável para obtenção de melhores perfis de velocidade da fase gasosa. A combinação de modelos de arraste e sustentação forneceu boas previsões nos perfis axiais de velocidade para ambas as fases, enquanto a adição da força de massa virtual e de dispersão turbulenta não provocou nenhum efeito notável na distribuição de velocidades. Já a força de lubrificação da parede provocou uma superestimativa desses perfis.

O estudo conduzido por Rodriguez *et al.* (2015) avaliou por meio de CFD o desempenho de três biorreatores pneumáticos com geometrias diferentes (coluna de bolhas, *airlift* de dutos concentricos e *split*) de 5L, utilizando dois fluidos Newtonianos de viscosidades distintas. Os resultados obtidos por CFD para retenção de gasosa foram consistentes com os dados experimentais, e indicaram que o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio ($k_L a$) foi fortemente influenciado pelo diâmetro e forma da bolha.

Trabalhos como os de McClure *et al.* (2014), Huang *et al.* (2018), Rodriguez *et al.* (2015) e Esperança *et al.* (2019; 2020) consideraram a força de arrasto como a única força interfacial na avaliação de parâmetros hidrodinâmicos como a retenção gasosa, velocidade superficial de líquido, fração volumétrica de gás local, obtendo perfis em concordância com dados experimentais e literatura.

Alguns estudos apresentam informações detalhadas sobre a influência da força de sustentação em escoamentos gás-líquido. Zhang *et al.* (2006) relataram maior influência desta força em colunas mais altas enquanto que Ekambara e Dhotre (2010) avaliaram diferentes modelos de turbulência utilizando as forças interfaciais, incluindo a de sustentação. Dijkhuizen *et al.* (2010) investigaram a influência da força de sustentação na segregação de bolhas pequenas e grandes em biorreatores coluna de bolhas

A taxa de cisalhamento ($\dot{\gamma}$) é um parâmetro dependente do gradiente de velocidade local e das propriedades reológicas do fluido. Em virtude da complexidade envolvida em sua determinação, esforços consideráveis têm sido realizados para desenvolver metodologias e correlações para avaliação da taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) a fim de associá-la ao desempenho de biorreatores (Shi *et al.*, 1990).

Nishikawa *et al.* (1977) utilizaram uma analogia que correlacionava $\dot{\gamma}_m$ ao coeficiente convectivo de transferência de calor medido na serpentina de resfriamento e na camisa de um biorreator coluna de bolhas de 32 L. Schumpe e Deckwer (1987)

propuseram a utilização do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{LA}) como um parâmetro característico para correlacionar com $\dot{\gamma}_m$, pois este parâmetro apresenta uma maior dependência em relação à viscosidade aparente. Chisti e Mooyoung (1989) criticaram a aplicação de correlações simples, disponíveis na literatura para a previsão de $\dot{\gamma}_m$ (Nishikawa *et al.*, 1977; Henzler, 1980; Kawase e Mooyoung, 1986; Schumpe e Deckwer, 1987), pois consideravam apenas a velocidade superficial do gás como variável independente, apresentando assim uma ampla faixa de variação ($0,2 < \dot{\gamma}_m$ (s-1) < 1000), quando aplicados para estimar $\dot{\gamma}_m$ em sistemas ar-água.

Shi *et al.* (1990) utilizaram uma análise por analogia para correlacionar $\dot{\gamma}_m$ e a velocidade intersticial do líquido no *downcomer* (V_{LD}) num biorreator *airlift* de circulação externa de 40 L, operado com soluções de glicerol, carboximetil celulose e goma xantana. Esta variável foi utilizada como parâmetro-chave, pois a taxa de cisalhamento é função das velocidades relativas das fases líquida e gasosa. Al-Masry e Chetty (1996), utilizando a metodologia anterior em um biorreator *airlift* de circulação externa de 700 L, verificaram a existência de dependência entre a taxa de cisalhamento média e as propriedades reológicas do fluido, e obtiveram diferentes correlações para soluções de goma xantana e carboximetil celulose.

Cerri *et al.* (2009) propuseram uma metodologia para correlacionar $\dot{\gamma}_m$ com a velocidade superficial de gás no *riser* (U_{GR}) e os parâmetros reológicos do fluido (K e n), através de uma análise por analogia com k_{LA} num biorreator *airlift* de dutos concêntricos de 5 L, pois a transferência de oxigênio ocorre através da área interfacial das bolhas de ar distribuídas uniformemente por todo o biorreator, tornando sua escolha como parâmetro de analogia adequada.

Thomasi *et al.* (2010) utilizaram a metodologia proposta por Cerri *et al.* (2008) para comparar as magnitudes da taxa de cisalhamento em biorreatores coluna de bolhas, *airlift split* e de dutos concêntricos de 5 L, sendo feito cultivos de *Streptomyces clavuligerus* em batelada a 3,5 vvm. Durante o cultivo, amostras do caldo foram retiradas para a determinação de K e n , com a posterior estimativa de $\dot{\gamma}_m$. Como resultado, os autores encontraram os maiores e menores valores de $\dot{\gamma}_m$ os biorreatores *airlift* de dutos concêntricos e coluna de bolhas, respectivamente. Os menores valores de concentração celular e do índice de consistência do caldo (K) foram obtidos para o biorreator *airlift* de dutos concêntricos quando comparado ao biorreator coluna de bolhas.

Embora a metodologia proposta por Cerri *et al.* (2009) para a determinação da taxa de cisalhamento média em estudos envolvendo a avaliação do desempenho de biorreatores possua uma importante contribuição, a abordagem ainda é limitada, pois não permite a previsão da taxa de cisalhamento média para fluidos newtonianos ($n = 1$). Além disso, devido a indisponibilidade de uma metodologia que quantifique experimentalmente a taxa de cisalhamento, de forma direta, não é possível a identificação de uma abordagem capaz de prever com precisão a taxa de cisalhamento média em biorreatores pneumáticos (Esperança, 2018).

Apesar de existirem na literatura diversos estudos que contribuíram para o entendimento do efeito da taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) sobre células e microrganismos, ainda existe uma certa dificuldade na determinação do valor real deste parâmetro em biorreatores pneumáticos. Nesse aspecto, a fluidodinâmica computacional (CFD) é uma ferramenta importante, pois permite estimar a taxa de cisalhamento local e média em diferentes geometrias de biorreator, fluidos e condições de operação, e tem sido aplicada na avaliação do desempenho de biorreatores de circulação interna para análise hidrodinâmica, sendo verificada uma boa concordância entre valores previstos e experimentais (Esperança, 2018).

Ainda que a ferramenta CFD seja amplamente utilizada, poucos estudos realizaram uma estimativa da taxa de cisalhamento ou da tensão de cisalhamento em biorreatores (Bannari *et al.*, 2011; Anastasiou *et al.*, 2013; Garcia *et al.*, 2014; Mavaddat *et al.*, 2014; Pawar, 2017; Pawar, 2018), sendo os valores obtidos não confirmados e altamente divergentes em ordem de magnitude daqueles relatados na literatura clássica de biorreatores pneumáticos. Neste sentido, Esperança *et al.* (2019), avaliaram a $\dot{\gamma}_m$ em um biorreator *airlift* de dutos concêntricos de 5L, estabelecendo uma analogia entre o escoamento previsto numericamente (usando CFD) e o previsto através de perfis universais de velocidade (equacionamentos bem estabelecidos na literatura) para líquidos em dutos lisos de seção circular e anular. Os autores obtiveram uma boa concordância, em ordens de magnitude, entre as taxas de cisalhamento médias baseadas em CFD e os valores obtidos através de perfis de velocidade universal, indicando que a simulação CFD é uma ferramenta valiosa para a previsão de $\dot{\gamma}_m$.

4.3 Materiais e Métodos

4.3.1 Software Ansys Fluent ® 14.5

O software *Ansys Fluent* 14.5 foi utilizado para as simulações CFD, sendo sua escolha baseada em sua vasta aplicação na literatura relacionada a fluidodinâmica computacional e a situações-problema ligados à indústria. Para a geração da geometria e malha computacional, foram utilizadas as ferramentas *DesignModeler* e *Meshing*, respectivamente, ambas da suíte Workbench inclusa no pacote ANSYS, sendo a alocação das condições de contorno realizadas junto à geometria do sistema.

4.3.2 Hardware

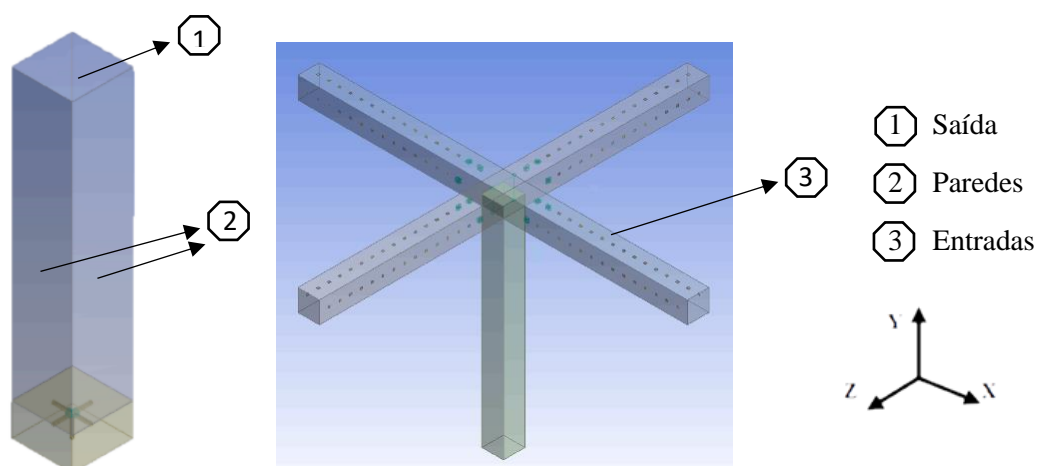
As simulações foram realizadas no Laboratório de Simulação de Escoamentos Multifásicos (LabSEM) em computador com sistema operacional Windows 7 Professional SP1 - 64 bits, processador AMD Ryzen 7 3700x de 8 núcleos com frequência de 3,59 GHz 32 GB de memória RAM e placa de vídeo GeForce GT 1030.

4.3.3 Geometria do Biorreator

A descrição da geometria do biorreator utilizado para a simulação do escoamento bifásico encontra-se na Figura 22, assim como as condições de contorno utilizadas. A geometria foi baseada no domínio computacional previamente descrito por Rodriguez *et al.* (2015) e Esperança *et al.* (2019), os quais estudaram biorreatores de circulação interna com geometria equivalente à utilizada neste estudo.

A geometria apresentada na Figura 22 (b) representa as entradas do sistema. A alimentação é realizada por meio da injeção de gás nos orifícios do aspersor com um medidor e controlador de vazão de gás, sendo aplicadas vazões específicas de alimentação de ar de 1 a 5 vvm (volume de gás por volume de líquido por minuto), com o intuito de alcançar velocidades de 4,57 a 22,67 m/s. A condição de contorno *Pressure_outlet* foi aplicada no topo do reator, como condição de saída.

Figura 22 - Geometria do biorreator pneumático coluna de bolhas estudado e condições de contorno aplicadas: (a) coluna (b) aspersion tipo cruzeta de 180 orifícios



Fonte: O autor (2022).

Tais dispositivos apresentam o cilindro externo confeccionado em vidro borossilicato transparente, acoplado a uma base e tampa superior, além de um aspersion tipo cruzeta, sendo confeccionados de aço inoxidável 316L, sendo as informações sobre o equipamento apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2 - Informações construtivas do biorreator coluna de bolhas.

Descrição/ Dimensões	Valores
Volume total (m ³)	0,01
Altura total da coluna (mm)	750
Diâmetro externo (mm)	142
Altura do Aspersion (mm)	50
Número de orifícios	180
Entrada – orifício do aspersion (mm)	0,45
Espaçamento entre furos (mm)	5
Nível de líquido sem aeração (mm)	510

Fonte: O autor (2022).

4.3.4 Teste GCI (Grid Convergence Index) – Independência De Malha

Antes de conceituar o método de estimação de erro, é importante definir a diferença entre o erro de discretização e a incerteza numérica. Quando o erro da solução numérica é provocado apenas por erros de truncamento, a diferença entre a solução analítica exata do sistema de equações diferenciais parciais de uma variável qualquer (Φ) e a sua solução numérica (ϕ) é denominada erro de discretização (E), conforme Equação 137:

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (137)$$

Uma outra forma de se calcular este parâmetro se dá através da equação geral do erro de discretização, definida por Marchi (2001) e demonstrada pela Equação 138.

$$E(\phi) = C_1 h^{p_L} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + \dots \quad (138)$$

na qual os coeficientes C_i são independentes do tamanho (h) dos elementos. Os expoentes de h para os termos não nulos na equação do erro de truncamento são chamados de ordens verdadeiras (p_v). As ordens verdadeiras são números inteiros positivos que constituem uma série aritmética e seguem a relação $p_L < p_2 < p_3 < p_4 < \dots$.

Por definição, o menor expoente de h na equação de geral do erro de discretização é chamado de ordem assintótica (p_L) sendo sempre um número maior ou igual a unidade. Quando o valor de $h \rightarrow 0$, o primeiro termo domina o erro de discretização (E). Em um gráfico logarítmico de E vs. h , a inclinação da curva de E obtida em relação ao eixo das abscissas quando $h \rightarrow 0$, tenderia à ordem assintótica (p_L), sendo que, quanto maior a inclinação, maior a ordem assintótica e, desta forma, maior a taxa de redução do erro de discretização com o refino da malha (Morais, 2004).

O cálculo do erro de discretização pode ser realizado somente se a solução analítica do modelo matemático do problema for conhecida. Todavia, a solução analítica é conhecida para uma pequena faixa de problemas, com condições de contorno bastante específicas. Desta forma, é necessário que seja estimado um valor para a solução analítica e, com isso, o valor da estimativa do erro de discretização poderá ser calculado (Morais, 2004). Tal estimativa é chamada de incerteza (U) da solução numérica (MARCHI, 2001; METHA, 1996; CHAPRA & CANALE, 1994) e é calculada por meio diferença entre a solução analítica estimada, com uma solução numérica onde $h \rightarrow 0$, para a variável de interesse (ϕ_∞) e a sua solução numérica (ϕ), conforme apresentado na Equação 139.

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (139)$$

A incerteza de uma solução numérica é calculada utilizando os estimadores de erros, sendo necessário que estes possuam características como confiabilidade e acurácia. Os melhores estimadores de erros são aqueles capazes de fornecer uma incerteza com magnitude um pouco maior que a magnitude do erro de discretização (MARCHI, 2001).

Apresentado primeiramente por Roache (1993; 1994 e 1997) o *Grid Convergence Index* (GCI) possui como objetivo principal relacionar o valor do erro numérico entre

duas malhas, obtido com uma estudo qualquer de refinamento, independentes dos valores de razão de refino e ordem aparente utilizadas com o valor de erro numérico para o mesmo problema com a mesma malha, sendo estes valores iguais a dois. Este método baseia-se na metodologia de Extrapolação de Richardson, a qual está relacionada com a determinação de uma solução mais precisa a partir de soluções obtidas pela discretização do domínio (ROACHE, 1994).

O método GCI consiste em analisar as soluções encontradas para diferentes refinamentos da malha numérica e, por meio de cálculos específicos, o valor da resposta extrapolada obtida a partir da resposta de cada malha é comparado, permitindo que o erro percentual referente a cada malha seja encontrado. Este método é utilizado para a análise de independência de malha, pois possibilita que o valor numérico de erro seja associado as diferentes malhas testadas e, desta forma, é possível avaliar e quantificar a necessidade de refinar a malha para uma determinada solução numérica (CELIK *et al.*, 2008).

4.3.4.1. Determinação do tamanho representativo da malha (h)

O tamanho representativo da malha (h) pode ser denominado como uma medida que equivale a uma dimensão característica da malha, admitindo-se que todas as células da malha possuem geometrias uniformes e regulares. Para o caso de malhas 3D, os elementos possuem geometria cúbica, na qual a grandeza h representa a aresta de uma célula, considerando que todas as células da malha possuem tal geometria. Nestes casos, a definição para o domínio computacional é descrita pela Equação 140.

$$h_i = \left[\frac{1}{N_i} \sum_{i=1}^{N_i} (\Delta V_i) \right]^{1/3} \quad (140)$$

na qual N_i é o número total de elementos e ΔV_i equivale ao volume de cada célula computacional na malha i .

4.3.4.2. Escolha de três configurações de malha e obtenção da resposta simulada

O teste de independência da malha é fundamentado na resposta de três refinamentos de malhas distintos, identificadas pelos subscritos 1, 2 e 3 em seus tamanhos representativos (h), os quais equivalem às malhas refinada, média e grosseira (menos refinada), respectivamente. As simulações de cada malha retornam uma resposta de interesse, denominada como f_1 , f_2 e f_3 , obedecendo o critério para identificação dos tamanhos respectivos (h_i).

Para a seleção da melhor malha a ser utilizada, utilizou-se a razão de refinamento ($r(i+1), i$) definida pela razão entre $h_{(i+1)}$ e h_i . De acordo com Celik *et al.* (2008) o valor da razão de refinamento r_{ij} deve ser maior que 1,3 e ser constante entre as três estruturas de malha, ou seja, deve-se manter as características em todas as malhas. As razões de refinamento foram calculadas por meio das Equações 141 e 142, para que então fosse calculada a ordem aparente (p).

$$r_{21} = \frac{h_2}{h_1} \quad (141)$$

$$r_{32} = \frac{h_3}{h_2} \quad (142)$$

4.3.4.3. Cálculo da ordem aparente (p) do método

A ordem aparente (p) é descrita pelas Equações 143 – 146 abaixo.

$$p = \frac{1}{\ln(r_{21})} \left| \ln \left| \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right| \right| + q(p) \quad (143)$$

$$q(p) = \ln \left| \frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s} \right| \quad (144)$$

$$s = \text{sinal} \left(\frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right) \quad (145)$$

$$s(x) = \begin{cases} -1, & \text{para } x < 0 \\ 0, & \text{para } x = 0, \text{ onde } x = \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \\ 1, & \text{para } x > 0 \end{cases} \quad (146)$$

Sendo $\varepsilon_{32} = f_3 - f_2$ e $\varepsilon_{21} = f_2 - f_1$ as diferenças das respostas simuladas.

4.3.4.4. Cálculo da resposta extrapolada (f_{ext})

Derivadas da extrapolação de Richardson, as respostas extrapoladas foram determinadas através dos valores das respostas simuladas das três malhas utilizadas, quando o tamanho característico da malha tendeu a zero ($h \geq 0$), conforme as Equações 147 e 148.

$$f_{ext}^{21} = \frac{r_{21}^p (f_1 - f_2)}{r_{21}^p - 1} \quad (147)$$

$$f_{ext}^{32} = \frac{r_{32}^p (f_2 - f_3)}{r_{32}^p - 1} \quad (148)$$

4.3.4.5. Cálculo dos erros relativos e erros relativos extrapolados

O erro relativo entre as malhas, considerando-se as três malhas analisadas, foi dado por meio da relação entre as respostas simuladas, sendo descrito para as malhas 1 e 2 (e_a^{21}) pela Equação 149. Já o erro relativo extrapolado (e_{ext}^{21}), é a relação entre a resposta simulada e a resposta extrapolada, sendo descrito pela Equação 150. Os erros relacionados às malhas 2 e 3 foram obtidos de forma análoga.

$$e_a^{21} = \left| \frac{f_1 - f_2}{f_1} \right| \quad (149)$$

$$e_{ext}^{21} = \left| \frac{f_{ext}^{21} - f_1}{f_{ext}^{21}} \right| \quad (150)$$

4.3.4.6. Cálculo do GCI_{21} , GCI_{32} e GCI_3

Os erros referentes a discretização das malhas refinada (1) e média (2) foram calculados através das Equações 151 e 152 (GCI_{21} e GCI_{32}). O erro referente à discretização da malha menos refinada (GCI_3) foi determinado pela Equação 153, conforme descrito por Roache (1994).

$$GCI_{21} = F_s \frac{e_a^{21}}{(r_{21}^p - 1)} \quad (151)$$

$$GCI_{32} = F_s \frac{e_a^{32}}{(r_{32}^p - 1)} \quad (152)$$

$$GCI_3 = F_s \frac{e_a^{32} \cdot r_{32}^p}{(r_{32}^p - 1)} \quad (153)$$

Para o cálculo dos erros referentes à discretização das malhas (Equações 134-136), utilizou-se um fator de segurança, definido como F_s , o qual multiplica o termo de erro relativo, anteriormente mencionado. Os valores utilizados para este fator são de $F_s=1,25$ quando são utilizados três refinamentos de malhas, e $F_s= 3$ quando se utiliza dois refinamentos de malhas (SLATER, 2008). O fator de segurança deve ser entendido como um intervalo de 95% de confiança no erro relativo estimado (SCHWER, 2008).

Cabe ressaltar que os valores dos erros referentes à discretização das malhas, GCI_{21} e GCI_{32} , representam os erros de discretização da malha mais refinada na comparação duas a duas. Desta forma, GCI_{21} equivale ao erro da malha 1 (refinada) e GCI_{32} , ao da malha 2 (média) e, com isso, a solução numérica convergida (f_i) obtida para cada malha está no intervalo [$f_i \cdot (1 - GCI_i)$; $f_i \cdot (1 + GCI_i)$] com nível de confiança de 95%, sendo GCI_i o erro de discretização da malha em que se obteve a resposta f_i .

4.3.4.7. Intervalo de resposta assintótica

Este parâmetro representa a resposta esperada para refinamento tendendo a zero, ou seja, resposta independente do refinamento da malha adotada, sendo um fator que deve ser analisado quando se aplica essa metodologia de estimativa de erro. Esta análise pode ser realizada por meio de um parâmetro α , que indica o quão próximas do valor assintótico estão as respostas simuladas, o qual é representado pela razão expressa na Equação 154 (ELSAYED & LACOR, 2011). Valores de α próximos a 1 demonstram que a solução encontrada está mais próxima da resposta assintótica.

$$\alpha = \frac{r_{32}^p GCI_{12}}{GCI_{23}} \quad (154)$$

Neste trabalho, o refinamento das três diferentes malhas (refinada, média e grosseira) foi baseado nas recomendações de Celik *et al.* (2008) e nos trabalhos de Rodriguez *et al.* (2015) e Esperança *et al.* (2018), sendo as características de cada malha utilizada descritas na Tabela 2 do capítulo Resultados (seção 6.1). As variáveis resposta escolhidas foram a retenção gasosa global e o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio, pois são parâmetros globais do sistema e importantes para a avaliação hidrodinâmica em biorreatores. Nas simulações do teste GCI foi utilizado um diâmetro médio e constante de 5 mm, sendo considerada somente a força de arrasto.

4.3.5 Simulações Numéricas

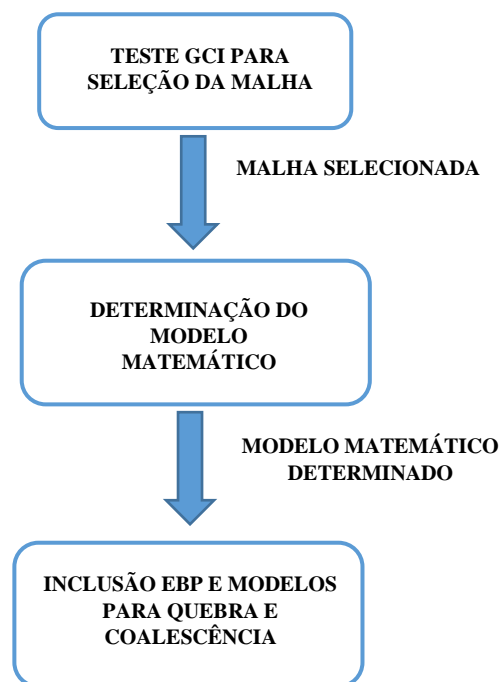
Para a realização das simulações, foi adotado o roteiro disponível em trabalhos prévios do Grupo de Pesquisa (BÉTTEGA, 2009; RODRIGUES, 2015 e ESPERANÇA, 2018). Inicialmente foram construídas malhas computacionais com diferentes configurações para verificar, dentre as malhas testadas, quais os melhores tamanhos de célula, disposição e configuração a serem utilizados nas simulações. Tais testes foram feitos por meio da aplicação das malhas a um mesmo modelo matemático, analisando-se a característica da resposta pelo método GCI, o qual possibilitou a aplicação de malha adequada, com melhor relação entre o total de células computacionais e o tempo de processamento para convergência dos resultados.

Após a seleção da malha, os parâmetros da simulação, assim como os valores para as condições de contorno foram adotados conforme literatura (RODRIGUES *et al.*, 2015; ESPERANÇA *et al.*, 2019). As simulações foram realizadas em regime transiente até que fosse alcançada uma condição de tempo simulado na qual seja possível considerar a

operação em regime estacionário com pequenas oscilações nas respostas. O tempo de escoamento real considerado para as simulações foi de 5 s, sendo este valor baseado nos trabalhos prévios de Esperança *et al.* (2017; 2019). Nestes estudos, o tempo simulado foi definido para ser pelo menos duas vezes o tempo de circulação de líquido obtido experimentalmente, com o intuito de garantir o comportamento de estado pseudoestável. O estado pseudo estacionário é uma hipótese matemática feita quando um sistema contém um processo regido por escalas de tempo muito diferentes entre si e, à medida que essas escalas temporais aumentam, torna-se mais válido assumir que o processo, o qual ocorre muito rapidamente, se encontra em estado estacionário.

Por fim, após o término das simulações, os resultados foram avaliados através de gráficos e perfis gerados pelo *CFD-Post*, disponível na suíte *Workbench* inclusa no pacote *ANSYS*. A Figura 23 apresenta, resumidamente, as principais etapas de simulações realizadas neste trabalho.

Figura 23- Fluxograma representativo das etapas de simulações realizadas.



Fonte: O autor (2022).

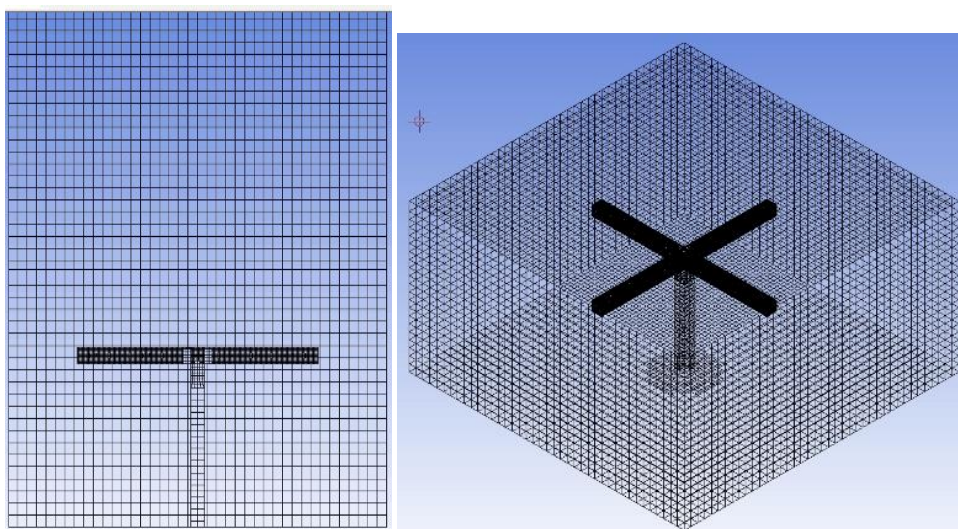
4.3.5.1 Malha numérica

Na construção da malha, disposta na Figura 24, o domínio computacional foi subdividido em volumes menores para que fosse obtida uma malha com células

hexaédricas, garantindo uma maior estabilidade da solução numérica, visto que as propriedades que relacionam características da malha com estabilidade e minimização de erros numéricos se baseiam nas medidas da célula, tais como a razão de aspecto (*aspect ratio*) e *skewness*.

Nas regiões próximas ao aspersor, o espaçamento mínimo entre os nós foi definido como 0,45 mm, e ao longo do reator adotou-se um valor de 4 mm, com o intuito de se obter um maior refinamento na região de entrada do ar e, um menor número total de elementos, para se alcançar um menor custo computacional.

Figura 24 - Detalhes da malha computacional para a base do biorreator e do aspersor.



Fonte: O autor (2022).

4.3.5.1 Determinação do Modelo Matemático

O equacionamento do modelo multifásico *Euler-Euler* é fundamentado na resolução das equações da continuidade, momento e energia para cada uma das fases envolvidas. A variável responsável por associar o equacionamento destas fases é a fração volumétrica. O equacionamento de cada modelo está descrito detalhadamente em ANSYS (2013a).

Quanto aos modelos de turbulência, arrasto e sustentação empregados na simulação, foram utilizados os modelos κ - ϵ *realizable*; Grace *et al.* (1976) e Tomiyama (2004), respectivamente. A adoção destes modelos foi baseada em diferentes artigos da literatura.

Nas Tabelas 3 e 4, estão disponíveis informações sobre as condições avaliadas nas simulações, com o intuito de se obter um modelo adequado para a simulação do biorreator

coluna de bolhas. Inicialmente, em um estudo preliminar, fixaram-se os modelos $\kappa\text{-}\varepsilon$ *realizable* e Grace *et al.* (1976), variando-se os diâmetros médios de bolha para observar os efeitos destas variações sobre a resposta simulada. Em seguida, sob as mesmas condições, foi fixado o modelo de Tomiyama (2004) para representar a força de sustentação, para observar sua influência na resposta simulada, buscando desta forma mapear o melhor equacionamento para a composição do modelo matemático.

Na determinação da interação entre as fases líquida e gasosa, as equações de quantidade de movimento foram resolvidas considerando-se diferentes forças interfaciais. Nesse estudo considerou-se tensão superficial constante (σ) para o sistema gás-líquido (ar-água). As simulações foram realizadas utilizando a água como fase contínua ($\rho_L=997 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, $\mu_L=8.49\cdot 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s}$, $\sigma=0.072 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ e temperatura de 28°C).

Tabela 3 - Modelos e parâmetros numéricos das simulações realizadas.

Informação	Condição usada
Modelo multifásico	Euler
Modelo de turbulência	$\kappa\text{-}\varepsilon$ <i>realizable</i>
Modelo de Interação entre fases	
Arrasto	Grace et al. (1976)
Sustentação	Tomiyama (2004)
Gravidade	9,81 m/s^2
Tensão superficial	0,072 N/m
Interpolação para Eq. Momento	Second Order Implicit
Interpolação para Eq. Fração Volumétrica	First Order Upwind
Interpolação para Eq. Energia Cinética Turbulenta	Second Order Upwind
Interpolação para Eq. Taxa Dissipação Cinética	Second Order Upwind
Resíduos	RMS= $1\cdot 10^{-4}$
Regime Transiente	25 iterações/time step, time step= 10^{-4} s, 50.000-time steps, tempo simulado=5 s
Fatores de Relaxação	Valores do <i>software</i> (entre 0.5 e 1.0)

Fonte: O autor (2022).

A condição de contorno para a injeção de ar foi definida como a velocidade na saída dos orifícios do aspersor, no qual a fração volumétrica de ar foi considerada igual a 1. Os valores da velocidade variaram de 4,57 a 22,86 m/s para cada orifício do aspersor, a fim de se alcançar vazões específicas de ar de 1,0; 3,0 e 5,0 vvm. Foi adotada como condição de contorno a pressão prescrita na saída no topo do biorreator, e a condição de não deslizamento foi utilizada para a interação entre as paredes do biorreator e as fases líquida e gasosa.

Tabela 4 - Dados operacionais e condições de contorno.

Especificação	Tipo de condição de contorno	
Entrada – orifícios do aspersor (ar)	<i>Velocity_inlet</i>	4,57 a 22,86 m/s
Diâmetros de bolha	-	1) 4 mm 2) 5 mm 3) 6 mm
Saída – topo do biorreator	<i>Pressure_outlet</i>	1 atm
Paredes	<i>Wall (Non-slip condition for both phases)</i>	-

Fonte: O autor (2022).

Devido às diferentes variações utilizadas nesta etapa do trabalho, a Tabela 5 apresenta uma listagem das simulações realizadas, sendo atribuídos códigos a cada uma, assumindo-se os diferentes diâmetros de bolha e a inserção ou não do modelo de força de sustentação em cada simulação. De modo geral, nesta etapa, a estratégia utilizada foi determinar a influência da força de sustentação e do diâmetro de bolha médio para, então, seguir com as simulações envolvendo a distribuição de diâmetros, apresentada na seção seguinte, sendo mantidas as condições de contorno, modelos multifásico, de turbulência e arrasto constante para todos os casos. Para compreender a nomenclatura, o estudo de caso NLF-4-1, por exemplo, considera as seguintes condições: NLF (não foi considerada a força de sustentação), dB=4 mm e $\phi_{ar}=1$ vvm, respectivamente.

Tabela 5 - Casos simulados utilizando a fluidodinâmica computacional

Caso	Diâmetro da bolha (mm)	Vazão (vvm)	Força de sustentação	Caso	Força de sustentação
NLF-4-1		1	N	LF-4-1	S
NLF-4-3	4	3	N	LF-4-3	S
NLF-4-5		5	N	LF-4-5	S
NLF-5-1		1	N	LF-5-1	S
NLF-5-3	5	3	N	LF-5-3	S
NLF-5-5		5	N	LF-5-5	S
NLF-6-1		1	N	LF-6-1	S
NLF-6-3	6	3	N	LF-6-3	S
NLF-6-5		5	N	LF-6-5	S

Fonte: O autor (2022).

4.3.6 Determinação experimental e estimativa de parâmetros de desempenho

4.3.6.1 Retenção Gasosa Global (α_G)

A retenção gasosa global foi obtida pelo método de medida das alturas descrito e utilizado por Thomasi *et al.* (2010). Valores de retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$) foram obtidos para vazões específicas de alimentação de ar de 1,0; 3,0 e 5,0 vvm e calculados através

da Equação 155, na qual H_D e H_L referem-se às alturas da dispersão gás-líquido e do líquido, respectivamente.

$$\bar{\alpha}_G = \frac{H_D - H_L}{H_D} \quad (155)$$

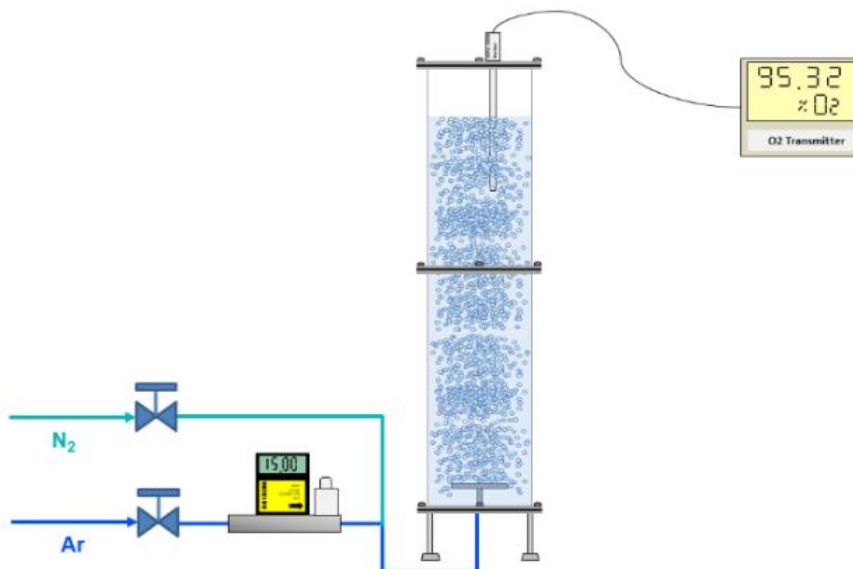
Os níveis de líquido (H_L) e da dispersão (H_D) foram obtidos a partir de imagens obtidas com uma câmera modelo *Nikon D5200*. Os ensaios foram realizados em triplicata.

Os valores de retenção gasosa global obtidos a partir das simulações de fluidodinâmica computacional foram calculados adotando-se uma superfície para a fração volumétrica da fase ar e, em seguida, utilizando a ferramenta *Iso-clip*, foi criada uma *clip-surface* para que, por meio de uma integral de superfície, utilizando uma média ponderada da área do equipamento, fosse encontrada a altura da dispersão gás-líquido.

4.3.6.2 Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_{LA})

A determinação experimental de k_{LA} foi realizada em triplicata utilizando o método dinâmico de nitrogênio (Figura 25) (CERRI *et al.*, 2008), no qual através de uma mudança abrupta na pressão do sistema, obtém-se valores da concentração de oxigênio dissolvido em função do tempo.

Figura 25 - Ilustração do aparato experimental para medição da concentração de oxigênio dissolvido em função do tempo.



Fonte: O autor (2022).

O método consiste em utilizar um eletrodo para monitorar a variação da concentração de oxigênio dissolvido (OD) no meio líquido (C_e) em função do tempo (t)

através de um ensaio degrau ($N_2 \rightarrow Ar$). Inicialmente, promove-se a saturação da fase de oxigênio líquido por meio de suprimento de ar, calibrando-se o eletrodo para esta condição de saturação ($C_{sat} = 100\%$). Em seguida, o oxigênio é removido do meio líquido por meio da injeção de nitrogênio até que a condição de $C_e = 0\%$ seja atingida. Por fim, interrompe-se o fornecimento de nitrogênio, passando-se a fornecer ar com vazão constante até a saturação de oxigênio na fase líquida. Conhecendo os valores de k_e e C_{sat} , o ajuste da Equação 156 (AIBA *et al.*, 1973) aos dados experimentais de C_e versus t permite estimar o valor de k_La por meio de regressão não linear pelo método dos mínimos quadrados.

$$C_e = C_o e^{-k_e(t-t_0)} + C_{sat}(1 - e^{-k_e(t-t_0)}) + \frac{k_e(C_{sat}-C_o)}{k_e - k_La}(e^{-k_e(t-t_0)} - e^{-k_La(t-t_0)}) \quad (156)$$

onde k_e é a constante de atraso do eletrodo, τ_e é o tempo de resposta do eletrodo, C_{sat} é a concentração de oxigênio dissolvido na saturação com ar (ou solubilidade), C_e é a concentração de oxigênio dissolvido na fase líquida lida pelo eletrodo e C_o é a concentração de oxigênio dissolvido no tempo inicial.

O atraso do eletrodo $k_e (=1/\tau_e)$ foi obtido a partir de um ensaio triplicado, no qual o eletrodo inicialmente imerso em uma atmosfera de N_2 ($C_e=0$) foi repentinamente introduzido em água saturada com oxigênio em diferentes vazões de ar. A concentração de oxigênio dissolvido lida pelo eletrodo (C_e) foi monitorada ao longo do tempo. O tempo de resposta do eletrodo (τ_e) foi o tempo necessário para C_e atingir 63,2% do valor final ($C_{sat}=100\%$). As constantes de atrasos (k_e), e seus respectivos desvios padrões, encontradas para as vazões analisadas são descritas na Tabela 6.

Tabela 6 - Constantes de atraso para as vazões de 1, 3 e 5 vvm.

Vazão (ϕ – vvm)	Constante de Atraso (k_e)
1	$0,05592 \pm 0,00196$
3	$0,10006 \pm 0,00684$
5	$0,09412 \pm 0,0084$

Fonte: O autor (2022).

A estimativa do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_La) foi realizada considerando este como o produto entre o coeficiente convectivo de transferência de oxigênio (k_L) e a área interfacial de troca de massa (a). O valor do

coeficiente convectivo foi obtido com base na Teoria de Penetração de Higbie (Equação 157), de acordo com proposto por Cerri *et al.* (2010).

$$k_L = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{D_L}{\theta}} \quad (157)$$

Nas equações que se seguem, D_L equivale ao coeficiente de difusividade mássica e possui valor de $2,1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, θ é o tempo de renovação (Equação 158), V_{desl} é a velocidade de deslizamento, obtida como resultado das simulações em CFD, através da definição de uma integral de superfície de velocidade de entrada para a fase fluida, sendo considerada a média ponderada da área para a superfície de entrada do reator.

$$\theta = \frac{D_B}{V_{\text{desl}}} \quad (158)$$

Estas relações foram inseridas ao *software Fluent 14.5* por meio da definição de uma função customizada. Para cada simulação conduzida, a distribuição espacial para k_L e para "a" foi obtida e, em seguida, por meio do Teorema do Valor Médio, foram calculados os valores globais de k_L e "a" (Equações 159 e 160) e ambos foram multiplicados entre si para se alcançar o valor numérico de $k_L a$.

$$\bar{k}_L = \frac{\iiint k_L dV}{V} \quad (159)$$

$$\bar{a} = \frac{\iiint a dV}{V} \quad (160)$$

Para os valores de "a" foi realizado um cálculo de "a" local nas simulações, por meio da retenção gasosa local. Para isso, foram utilizados dados simulados de velocidade de gás e velocidade de líquido e, utilizada a Equação a abaixo, na qual d_B se refere ao diâmetro da bolha.

$$a = \frac{6\alpha_G}{d_B} \quad (161)$$

Foram utilizados outros dois modelos, disponíveis na literatura, para o cálculo de k_L . As Equações 162 e 163 representam os modelos de Ndiaye *et al.* (2018) e de renovação de superfície de Danckwerts (1951) combinado à teoria de turbulência isotrópica de Kolmogorov .

$$k_L = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{D_L |U_g - U_l|}{d_B}} \quad (162)$$

na qual U_g e U_l correspondem as velocidades do gás e do líquido, respectivamente, e d_B , ao diâmetro médio da bolha.

$$k_L = K D_L^{0,5} \left(\frac{\varepsilon}{\vartheta_l} \right)^{0,25} \quad (163)$$

sendo ϑ_l a viscosidade dinâmica do líquido, ε a taxa de dissipação turbulenta local, prevista com o modelo $k - \varepsilon$, e K uma constante cujo valor é de 0,4, conforme sugerido por Lamott e Scott (1990), e adotado por autores como Ginbum *et al* (2009), Buffo *et al.* (2012) e Haringa *et al.* (2017). Em ambas as equações, D_L representa o coeficiente de difusão do oxigênio na água, cujo valor é de $2 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$.

4.3.6.3 Taxas de Cisalhamento Média ($\dot{\gamma}_m$) e Máxima ($\dot{\gamma}_{max}$)

Os valores de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) foram estimados por meio da correlação semiempírica proposta por Pérez *et al.* (2006), na qual, para reatores colunas de bolhas, a única fonte de agitação é a entrada de energia pneumática fornecida pela expansão isotérmica do gás que entra pelo aspensor. Para tais casos, a taxa de cisalhamento média depende exclusivamente da velocidade superficial do gás e das propriedades reológicas do fluido.

O cálculo de $\dot{\gamma}_m$ (Equação 164) foi estimado por meio das relações entre o consumo de potência (P_G) (Equação 165), o volume de líquido, o índice de consistência (K) e o índice de escoamento (n) do líquido. Para água (fluido Newtoniano), n é igual a 1 e K é igual à viscosidade dinâmica (μ). Na Equação 165, Q_G representa a vazão volumétrica de gás. O consumo de potência (P_G) foi calculado levando-se em consideração a densidade da dispersão gás-líquido (ρ_d) calculada pela Equação 166, considerando os dados experimentais de retenção gasosa ($\bar{\alpha}_G$).

$$\dot{\gamma}_m = \left(\frac{1}{K} \frac{P_G}{V} \right)^{\left(\frac{1}{n+1} \right)} \quad (164)$$

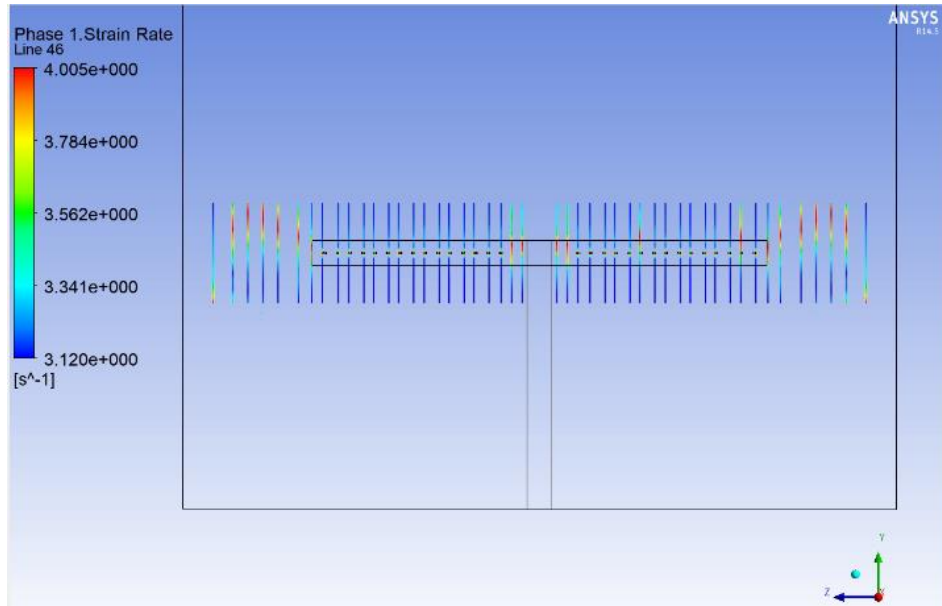
$$P_G = Q_G P_a \ln \left[1 - \frac{\rho_d g h_d}{P_a} \right] \quad (165)$$

$$\rho_d = \rho_L (1 - \bar{\alpha}_G) + \rho_G \bar{\alpha}_G \quad (166)$$

Os valores da taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) foram também obtidos numericamente, adotando um procedimento de média de volume para a distribuição espacial da taxa de cisalhamento ($\dot{\gamma}$) em todo o volume do biorreator.

A taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{\max}$) na região próxima aos orifícios do aspersor foi estimada a partir dos dados obtidos nas simulações. Através da ferramenta *CFD-Post*, foram construídas linhas verticais ao longo das astes do aspersor no eixo YZ, conforme Figura 26, gerando-se um gráfico de dados.

Figura 26 – Análise da Taxa de Cisalhamento Máxima por meio da ferramenta *CFD-Post*



Fonte: Autor (2022)

Em seguida, estes dados foram exportados para o Excel, sendo o valor de $\dot{\gamma}_{\max}$ analisado. Ao final, foi realizado um ajuste da equação de proporcionalidade (Equação 167) proposta por Esperança *et al.* (2020).

$$\dot{\gamma}_{\max} = k \frac{4 \cdot Q_{AR}}{N_{\text{orif}} \cdot \pi \cdot d_{\text{orif}}^3} \quad (167)$$

em que k é uma constante que depende das condições pré estabelecidas para a modelagem, ou seja, as variações do diâmetro de bolha e da vazão de alimentação de ar (Q_{AR}), e a inclusão ou não da força de sustentação.

4.4 Resultados e Discussão

4.4.1 Teste de Independência de Malhas

Tres malhas distintas – refinada, média e grosseira – foram construídas para a aplicação do método GCI, sendo o número de elementos de cada malha baseados na razão recomendada em sua descrição. Os numeros de elementos utilizados são apresentados na Tabela 7. O tamanho característico foi determinado por meio da aplicação da Equação

57, e representa o valor da aresta da célula computacional com a suposição de todas as células cúbicas e idênticas.

Tabela 7 - Total de elementos e tamanho característico das malhas utilizadas no GCI.

Malha	Nº de Elementos	Tamanho característico das células (mm)
1 – Refinada (M ₁)	769.338	2,89
2 – Média (M ₂)	527.773	3,28
3 – Grosseira (M ₃)	293.376	3,99

Fonte: O autor (2022).

Neste estudo as simulações foram realizadas utilizando o software *ANSYS FLUENT* 14.5, com uma malha hexaédrica, estruturada 3D. A condição de contorno para a entrada foi estabelecida como velocidade de alimentação de gás e, para saída, foi considerada uma condição de pressão prescrita. Foi estabelecida ainda uma condição de não deslizamento para as paredes. Para se obter uma malha adequada, o teste de independência de malhas foi realizado para três domínios computacionais distintos (M₁, M₂ e M₃), sendo utilizadas como variáveis resposta a retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$), coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{La}) e taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$). Estas variáveis foram simuladas a uma vazão de 3 vvm e seus resultados são apresentados na Tabela 8.

Tabela 8 - Resultados das simulações do teste de malha.

Malha	$\bar{\alpha}_G$	k_{La}	$\dot{\gamma}_m$
M ₁	0,0995	0,0225	9,33
M ₂	0,0966	0,0216	8,99
M ₃	0,0526	0,00879	7,45

Fonte: O autor (2022).

Foi escolhida a malha M₂, uma vez que houve pouca variação entre os resultados obtidos utilizando as malhas mais refinada (M₁) e a intermediária (M₂) em termos percentuais, conforme Tabela 9.

Tabela 9 - Diferenças entre os resultados das simulações do teste de malha em termos percentuais.

Malha	% $\bar{\alpha}_G$	% k_{La}	% $\dot{\gamma}_m$
M ₁ e M ₂	3,00	4,17	3,78

M_2 e M_3 83,65 145,73 20,67

Fonte: O autor (2022).

Os valores de GCI calculados encontram-se na Tabela 10.

Tabela 10 - Valores calculados de GCI.

Malha	GCI (%)
M_1	0,01194
M_2	0,0223
M_3	0,0272

Fonte: O autor (2022).

Analisando os resultados, é possível observar que os refinamentos adotados para aplicação do teste de independência da malha foram satisfatórios, sendo o valor da resposta assintótica (α) de 66,2%. Observa-se também, por meio dos valores de GCI obtidos para cada malha, que os erros de discretização são baixos.

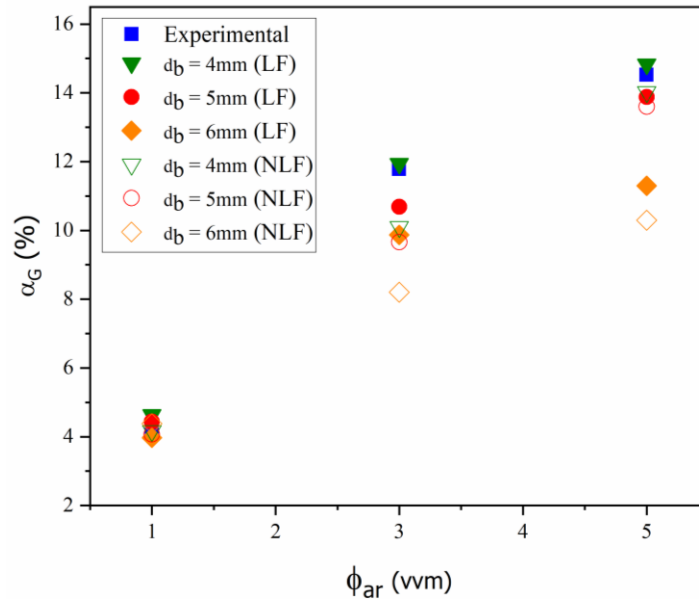
A malha exibiu valores de *skewness* inferiores a 0,5, e *orthogonal quality* maiores que 0,8, indicando que a qualidade da malha foi adequada. Além disso, os elementos da malha apresentaram valores de *aspect ratio* inferiores a 1,9, o que confirmou a qualidade da malha utilizada neste estudo.

Para a análise da influência da força de sustentação e do diâmetro da bolha na hidrodinâmica e cisalhamento do biorreator coluna de bolhas, foi adotada a abordagem Euler, adotada em todas as simulações que utilizaram somente a força de arrasto, mantendo-se o modelo κ - ε *realizable* e o de Grace *et al.* (1976) para representar esta força, com o intuito de se observar a influência da força interfacial e diâmetros de bolhas analisados. A resposta para os parâmetros hidrodinâmicos e cisalhamento analisados está apresentada nas subseções que seguem.

4.4.2 Retenção Gasosa Global ($\bar{\alpha}_G$)

Os resultados das simulações em termos de retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) estão resumidos na Figura 27, sendo comparados os modelos com (LF4-1 a LF6-1) e sem a força de sustentação (NLF4-1 a NLF6-1) aos resultados obtidos experimentalmente.

Figura 27 - Retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas com e sem a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-5).



Fonte: O autor (2022).

Analisando a Figura 31, para os três diâmetros de bolhas estudados, o diâmetro de 4 mm demonstrou maior concordância com os valores obtidos experimentalmente. As porcentagens de fração volumétrica globais apresentadas foram de 4,63, 11,94 e 14,83% para os casos LF4-1, LF4-3 e LF4-5, respectivamente. Além disso, observa-se que os diâmetros de 4 e 5 mm apresentaram valores de retenção gasosa global próximos, especialmente para o caso LF5-5, o qual apresentaram valores em torno de 14%. Os menores valores de retenção gasosa global foram encontrados para o diâmetro de 6 mm (LF6-1 a LF6-5), o qual expressou valores de 4,48, 9,87 e 11,3%. Os resultados da retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$) em função da vazão específica de alimentação de ar (ϕ_{ar}) obtidos pela fluidodinâmica computacional demonstraram resultados qualitativamente coerentes, visto que o valor da retenção gasosa é inversamente proporcional ao diâmetro de bolha. A área interfacial das bolhas é dada pela relação que quantifica a área interfacial de todas as bolhas que estão presentes em um volume unitário da fase líquida, conforme Equação 168:

$$a = \sum A_{bolha}/V_L \quad (168)$$

Tal parâmetro é muito sensível às condições operacionais do sistema, visto que é função direta da retenção gasosa global. Por meio da definição dos conceitos de retenção gasosa global (Equação 155) e da área interfacial específica das bolhas (Equação 161), é

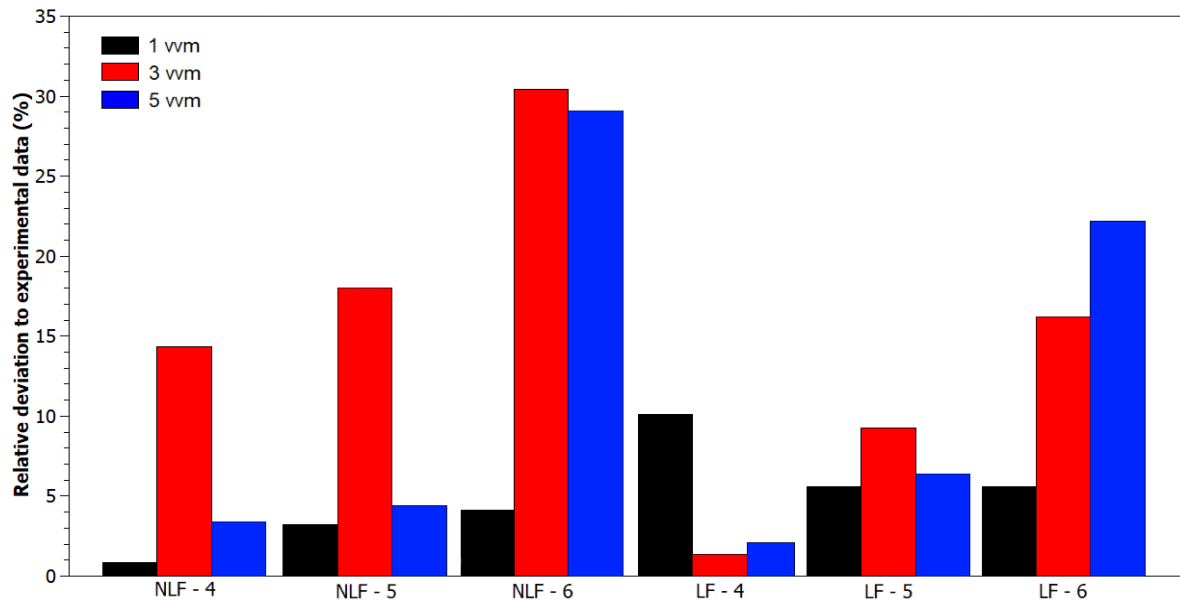
obtida a relação entre "a" e $\bar{\alpha}_G$, representada pela Equação 4, a qual demonstra a relação de proporcionalidade entre o diâmetro da bolha e a retenção gasosa global.

Em relação a simulações em que a força de sustentação não foi inserida, o diâmetro de bolha que melhor expressou valores de retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$) foi o de 4 mm, sendo as frações volumétricas encontradas de 4,17, 10,1 e 14,0, em termos percentuais, para os casos NLF4-1, NLF4-3 e NLF4-5. Para os casos NLF6-1 a NLF6-5, observa-se que os valores de $\bar{\alpha}_G$ estimados por CFD foram subestimados quando comparado aos experimentais (3,97, 8,2 e 10,3%), estando este comportamento dentro do esperado, já que a retenção gasosa diminui com o aumento do diâmetro da bolha.

Huang *et al.* (2018) e McClure *et al.* (2014) analisaram o efeito da fração volumétrica de gás no comportamento de um biorreator coluna de bolhas com 390 mm de diâmetro interno e altura de 2000 mm utilizando o modelo CSBS (*Constant Single Bubble Size*), considerando somente a força de arrasto. Variando a velocidade superficial de gás entre 0,11 e 0,35 m/s, os autores encontraram boa concordância entre os resultados experimentais e os dados de retenção gasosa global obtidos pela CFD, demonstrando que o modelo possibilitou a obtenção de resultados satisfatórios.

A Figura 28 apresenta as diferenças relativas entre os resultados simulados para a retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$) em função dos diâmetros de bolhas no biorreator coluna de bolhas para os modelos com e sem força de sustentação, evidenciando a influência da força de sustentação nas respostas obtidas.

Figura 28 - Diferenças Relativas para Retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para os modelos com e sem força de sustentação. (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm



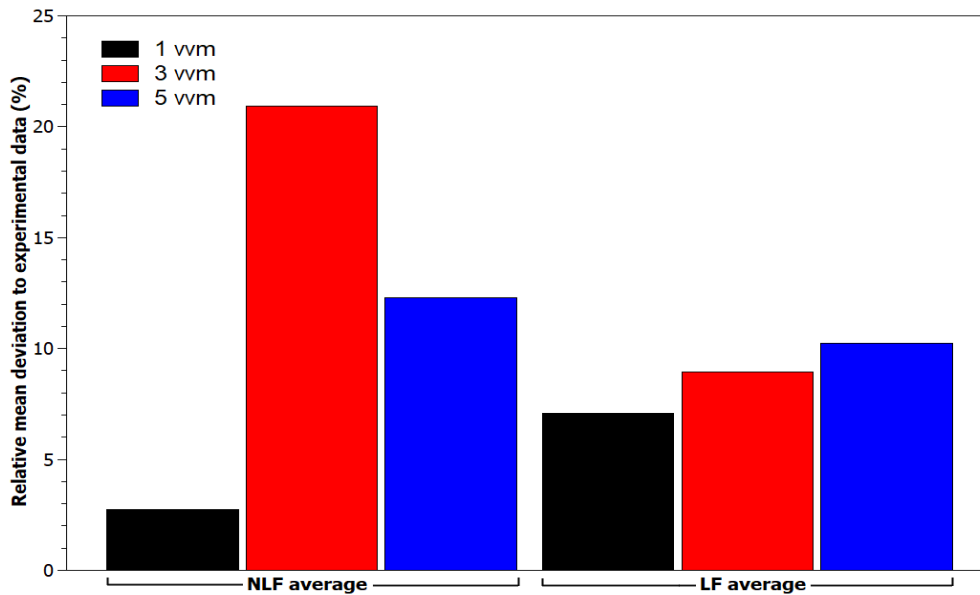
Fonte: O autor (2022).

Comparando os resultados de $\bar{\alpha}_G$ por CFD com os obtidos experimentalmente, as diferenças relativas (%) dos dados experimentais para o diâmetro de 4,0 mm, para as três vazões empregadas (1, 3 e 5 vvm) foram de 0,85, 14,35 e 3,39 para as simulações sem a força de sustentação (casos NLF4-1 a NLF6-5) e de 10,08, 1,35 e 2,11 para as simulações com a força de sustentação (casos LF4-1 a LF6-5). Para o diâmetro de 5,0 mm as diferenças relativas encontradas foram de 5,57, 9,26 e 4,43 e 3,23, 18 e 6,35 para os casos sem e com a inserção da força de sustentação, respectivamente. Para o maior diâmetro utilizado (6 mm), as diferenças relativas foram de 4,14, 30,40 e 29,08 para os casos NLF4-1 a NLF6-5, e 5,61, 16,22 e 22,19 para os casos LF4-1 a LF6-5.

Quando comparados os valores simulados pela fluidodinâmica computacional utilizando a força de sustentação (casos LF4-1 a LF6-5) aos que não a consideraram (casos NLF4-1 a NLF6-5), observa-se que os resultados de $\bar{\alpha}_G$ foram superiores quando a força de sustentação foi inserida nas simulações para as todas as vazões e diâmetros de bolha avaliados neste estudo.

Frente aos resultados expostos, com o intuito de demonstrar a eficácia da inserção da força de sustentação nas simulações, a Figura 29 traz o desvio médio dos resultados de retenção gasosa global, em função da vazão específica de ar, obtidos nas simulações com os dados experimentais para os três diâmetros estudados.

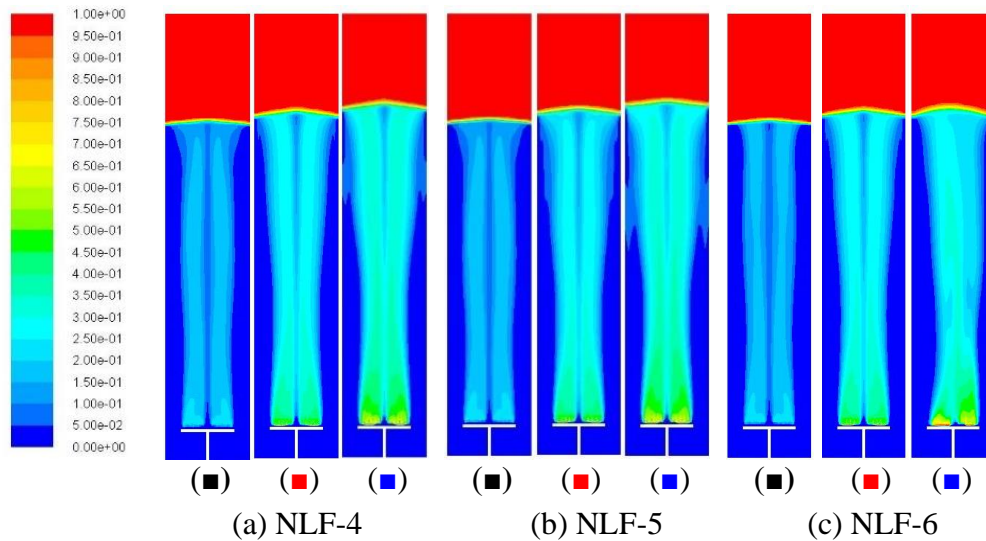
Figura 29 – Desvio Médio relativo da retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) para as simulações com e sem a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-5). (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm



Fonte: O autor (2022).

Por meio dos dados demonstrados acima, observa-se que, ao inserir a força de sustentação no modelo matemático utilizado nas simulações, o desvio médio entre os resultados experimentais e simulados, foi menor para todos os casos estudados (LF4-1 a LF6-5), em especial para o caso no qual o diâmetro aplicado foi igual a 4 mm para a vazão específica de ar de 3 vvm, ressaltando a importância de se considerar esta força nas simulações. Uma análise qualitativa entre os resultados da retenção gasosa, com e sem a força de sustentação também foi realizada. Os resultados dos contornos de fração volumétrica do gás estão ilustrados nas Figuras 30 (a-c) e 31 (a-c), para os diâmetros de 4, 5 e 6 mm, respectivamente.

Figura 30 - Distribuições espaciais da fração volumétrica no biorreator coluna de bolhas sem força de sustentação operados com vazões de alimentação de ar (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm



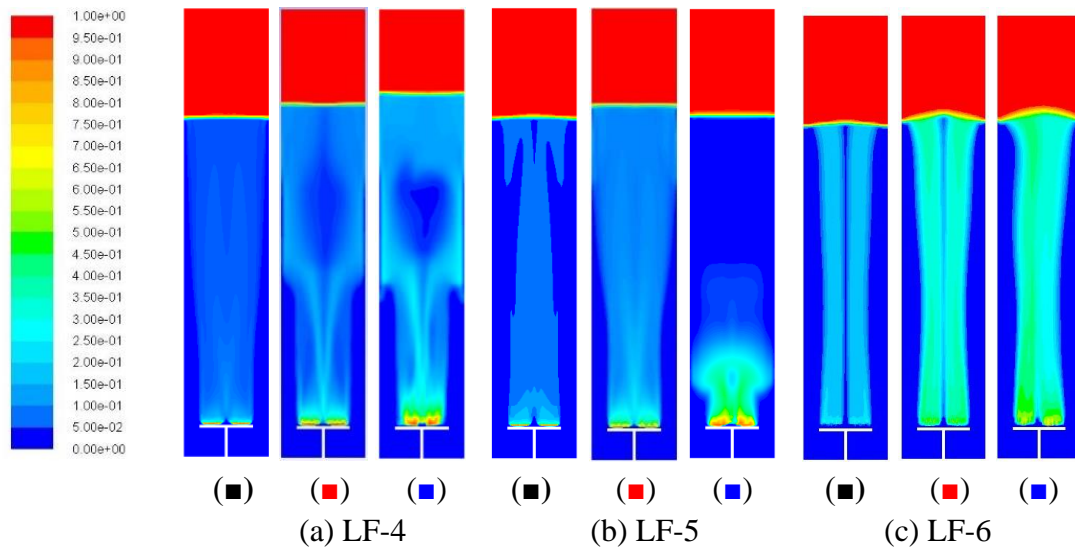
Fonte: O autor (2022).

Nos casos reais, ou seja, experimentais, a fração de ar na base da coluna (região próxima ao aspersor) apresenta um perfil sigmoidal oscilatório devido a um movimento lateral das bolhas (RODRIGUEZ *et al.*, 2015). Todavia, conforme Figuras 30(a) a (c), observa-se a ausência deste comportamento, pois, a força de sustentação, que tende a deslocar as bolhas lateralmente, não foi considerada na modelagem.

A fração volumétrica ao longo do reator, para as menores vazões, apresenta uma distribuição na qual o ar encontra-se mais concentrado na região acima do aspersor, sendo que a pluma de bolhas é melhor distribuída ao longo do diâmetro do biorreator para as vazões mais altas, principalmente para os diâmetros de bolha de 4 e 5 mm (Figuras 30(a) e (b)), enquanto que, para o diâmetro de 6 mm, esse comportamento é mais pronunciado para a vazão média de 3 vvm (Figura 30 (c)).

A adição da força de sustentação ao arraste provoca o aumento da fração volumétrica global média do gás, conforme citado anteriormente. Observa-se nas Figuras 31(a), (b) e (c), que as simulações onde a força de sustentação foi considerada gera uma distribuição mais homogênea da fase dispersa, com deslocamento lateral das bolhas, resultando em maior retenção do gás na dispersão. Observa-se, ainda, que a adição desta força nas simulações promove uma distribuição mais suave da fração volumétrica de gás ao longo do biorreator, sendo essa distribuição percebida em regiões próximas ao aspersor, resultando, portanto, no perfil com melhor simetria entre os apresentados nas Figuras 31(a) e (b) para as vazões de 3 e 5 vvm.

Figura 31 - Distribuições espaciais da fração volumétrica no biorreator coluna de bolhas com força de sustentação operado com vazões de alimentação de ar de (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm



Fonte: O autor (2022).

Para a menor vazão de alimentação de ar e menor diâmetro de bolhas, caso LF4-1, a distribuição de fração volumétrica de gás para um tempo simulado de 5 segundos não foi formada ao longo do biorreator, sendo a pluma de bolhas formada somente em regiões próximas à base do equipamento.

Para o maior diâmetro utilizado (6 mm), observa-se um comportamento similar ao apresentado pelas simulações sem a força de sustentação, todavia o perfil delineado pelas bolhas ascendentes é mais organizado e mais bem distribuído ao longo do diâmetro do biorreator, ou seja, os resultados encontrados para o diâmetro de 6 mm demonstraram maior coerência, considerando o comportamento da figura anterior. Cabe lembrar que, para este valor de diâmetro, a retenção gasosa global exibiu as menores diferenças entre os valores das simulações com e sem a força de sustentação. Além disso, ao compararmos as simulações com a maior vazão utilizada (5 vvm) é demonstrado que, ao não utilizar a força de sustentação nas simulações, o gás concentra-se na região do aspersor.

Tabib *et al.* (2008), assim como no presente estudo, analisaram os efeitos das forças interfaciais, em simulações utilizando fluidodinâmica computacional, na retenção gasosa global em biorreator coluna de bolhas. Os autores encontraram que na presença da força de sustentação, os perfis de fração volumétrica de gás ao longo do reator se apresentaram mais simétricos.

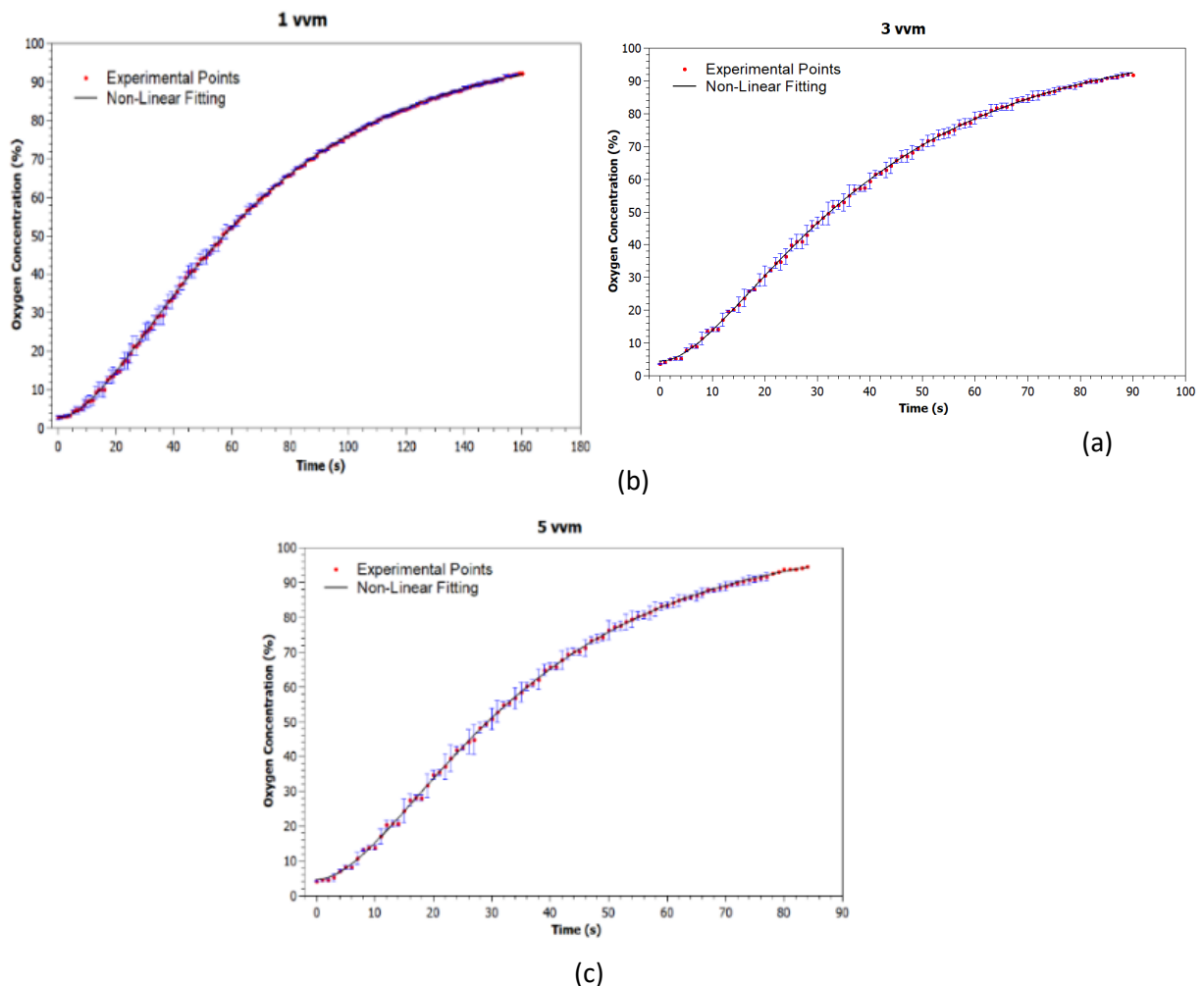
De modo geral, analisando as Figuras 30(a) e (b) e 31(a) e (b), observa-se que a força de sustentação atuou na homogeneização do escoamento, concordando com os

casos relatados na literatura (ZHANG *et al.*, 2006; DIJKHUIZEN *et al.*, 2010; YANG *et al.*, 2017), ainda que as Figuras 30 (a) e (b) não tenham conseguido atingir o estado pseudoestacionário, necessitando de um maior tempo de simulação. Além disso, a consideração da força de sustentação, em adição à de arraste, não provocou aumento significativo no custo computacional para a maioria dos casos simulados.

4.4.3 Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio

A Figura 32 ilustra os dados experimentais e os ajustes não lineares da concentração de oxigênio dissolvido em função do tempo (C_e vs t) para taxas de fluxo de ar específicas de (a) 1,0, (b) 3,0 e (c) 5,0 vvm.

Figura 32 - Perfis de oxigênio para diferentes vazões de ar específicas em um biorreator de coluna de bolhas de ar-água.



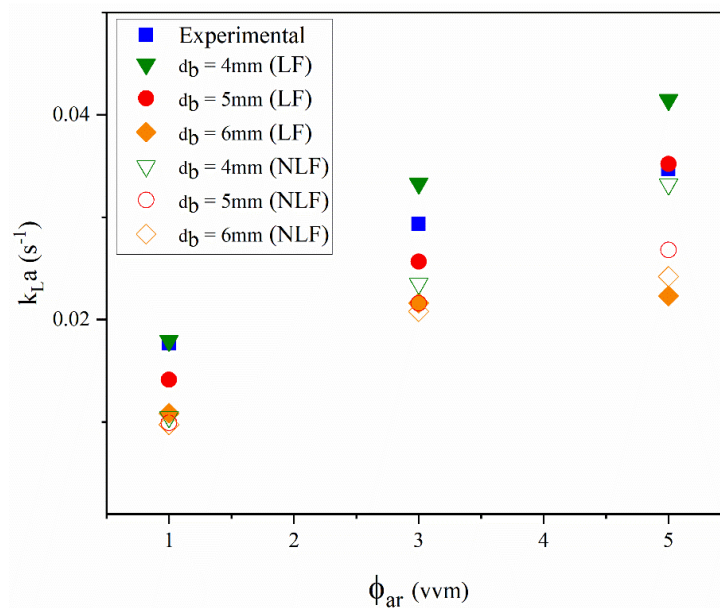
Fonte: O autor (2022).

Analisando a Figura 32, é possível observar que houve alta aderência dos valores previstos pela Equação 156 aos dados experimentais obtidos para C_e vs t . Os valores

obtidos para a constante de atraso (k_e) e seus respectivos desvios padrão após ajuste por regressão não linear pelo método dos mínimos quadrados para as vazões de ar de 1, 3 e 5 vvm foram $0,05592 \pm 0,00196$, $0,10006 \pm 0,00684$ e $0,09412 \pm 0,0084$, respectivamente.

A Figura 33 ilustra os resultados referentes ao coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{La}), estimados com base em resultados simulados, considerando os diâmetros de 4,0; 5,0 e 6,0 mm, e os dados experimentais para as vazões de 1,0; 3,0 e 5,0 vvm.

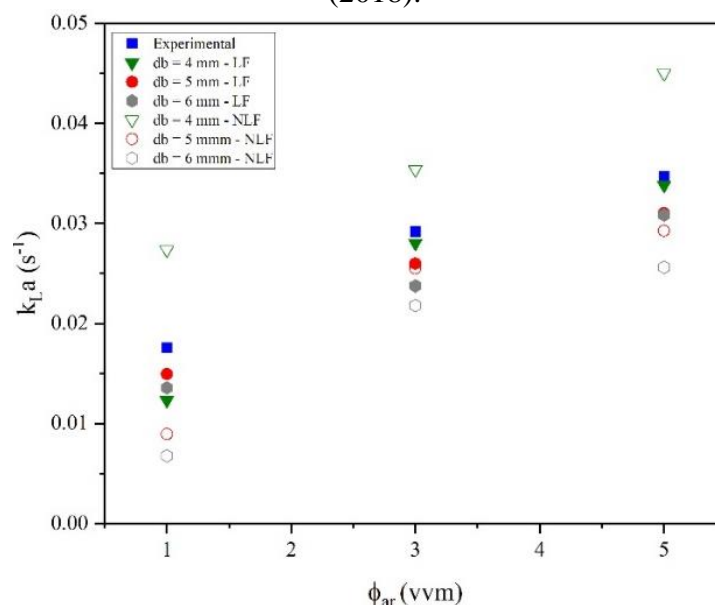
Figura 33 - Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas com e sem a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-5).



Fonte: O autor (2022).

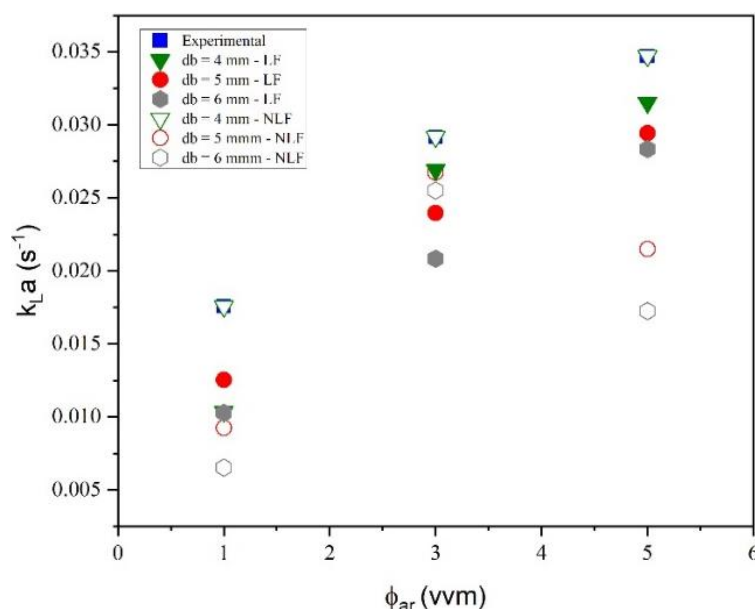
Em relação aos demais modelos propostos para a análise do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{La}), os resultados obtidos estão descritos nas Figuras 34 e 35 para os modelos de Ndiaye *et al.* (2018) e Danckwerts (1951), respectivamente.

Figura 34 – Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio ($k_{L,a}$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas com e sem a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-5) para o modelo de Ndiaye *et al.* (2018).



Fonte: O autor (2022).

Figura 35- Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio ($k_{L,a}$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas com e sem a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-5) para o modelo de Danckwerts (1951).



Fonte: O autor (2022).

De acordo com as Figuras 33, 34 e 35 os resultados obtidos por meio das simulações CFD para o sistema água-ar em biorreator coluna de bolhas divergiram dos dados obtidos experimentalmente para todas as vazões estudadas, sendo as melhores

concordâncias observadas para o modelo proposto por Ndiaye *et al.* (2018). O melhor ajuste aos pontos experimentais foi observado para o menor diâmetro de bolha e maiores vazões de ar, com emprego da força de sustentação (casos LF4-1 a LF4-5) e para diâmetro de 5 mm e vazão de 1 vmm (caso LF5-1), empregados neste estudo.

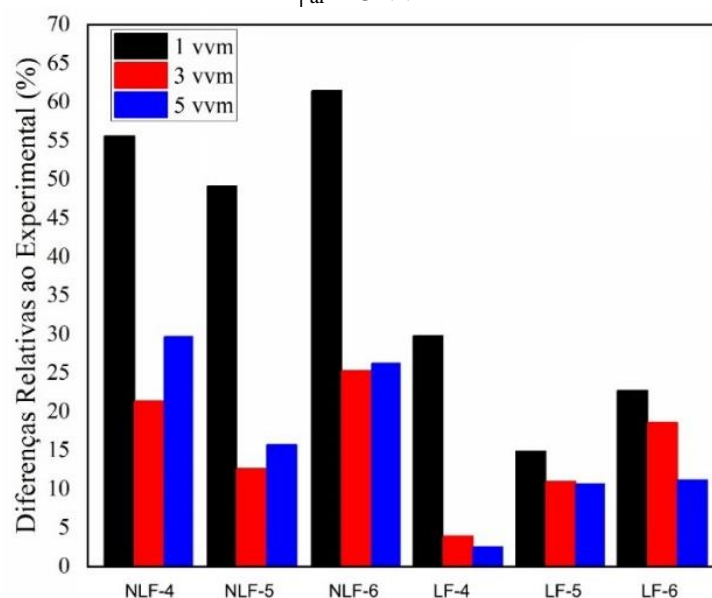
Nos casos em que a força de sustentação não foi empregada (NLF4-1 a NLF6-5), observa-se que para o menor diâmetro empregado os valores de k_{LA} foram superestimados, em todas as vazões empregadas, enquanto para os diâmetros de 5 e 6 mm, houve uma subestimação destes valores, em especial para as vazões de 1 e 5 vvm. As melhores previsões dos valores simulados de k_{LA} aos dados experimentais nos casos LF4-1 a LF4-5, reside no fato de que a diminuição no diâmetro da bolha acarreta aumento do valor da área interfacial, demonstrando que a mesma é fortemente afetada pelo diâmetro da bolha. Além disso, a partir de um dado nível de aeração (alto número de Reynolds), o valor de k_L é praticamente constante, ou seja, pouco afetado pela vazão de ar e geometria do sistema, visto que é um parâmetro intrínseco do meio líquido. Todavia, o parâmetro "a" apresenta uma alta sensibilidade às condições operacionais, pois é função direta da retenção gasosa global.

Outro ponto importante a ser destacado é a sensibilidade do k_{LA} com diâmetro de bolha. O parâmetro "a" (área interfacial específica das bolhas) é inversamente dependente do diâmetro de bolha (Equação 4), que foi constante para os casos analisados (4,0 5,0 e 6,0 mm). Todavia, a equação para o cálculo de "a" é correta apenas para bolhas perfeitamente esféricas, além de não considerar a distribuição de tamanhos de bolha (RODRIGUEZ *et al.*, 2015). Não obstante, sabe-se que o sistema água-ar apresenta tamanhos de bolha bem diferentes, com formas irregulares, fato este que pode ter contribuído para a divergência entre os dados experimentais e numéricos.

Ao analisar as Figuras 33 a 35 observa-se que tanto para as simulações que consideraram a força de sustentação quanto para as que não consideraram, o k_{LA} foi subestimado pelas simulações CFD. Isso pode ter sido ocasionado pela especificação de um diâmetro de bolha médio e constante, uma vez que maiores diâmetros geram bolhas com menor área interfacial específica, ou seja, tais resultados podem sugerir que o diâmetro médio real das bolhas seja inferior ao menor diâmetro avaliado neste estudo.

A Figura 36 apresenta as diferenças relativas para os dados experimentais, feita através da média da diferença entre os dados simulados e experimentais, considerando o modelo de Ndiaye *et al.* (2018) para a obtenção dos valores simulados de k_{La} .

Figura 36 - Diferenças Relativas para Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para os modelos com e sem força de sustentação. (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm



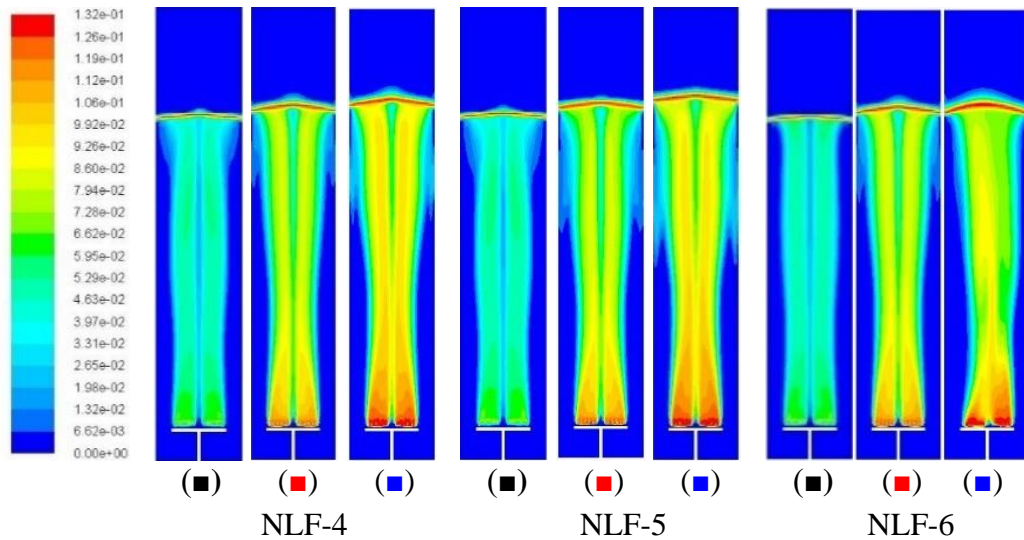
Fonte: O autor (2022).

As maiores diferenças relativas foram encontradas para as simulações que consideraram somente a força de arrasto no modelo matemático (casos NLF4-1 a NLF6-5), sendo que a menor vazão aplicada (1 vvm) demonstrou os valores mais elevados (40,69, 43,92 e 44,82%). As menores diferenças relativas entre os dados simulados e experimentais, foram encontradas para os casos LF4-1 e LF5-5, ou seja, para os casos em que a força de sustentação foi inserida no modelo, para os diâmetros de 4 e 5 mm e vazões de 1 e 5 vvm, respectivamente.

Rodriguez *et al.* (2015) estudaram a hidrodinâmica de três biorreatores pneumáticos (coluna de bolhas, *airlift* de dutos concêntricos e *airlift split cylinder* de 5 L) experimental e numericamente para sistemas com fluidos Newtonianos. Com o intuito de se verificar a influência do diâmetro de bolhas no k_{La} , os autores realizaram ensaios adicionais, com diâmetros de 3 a 7 mm na condição de 3 vvm. Os resultados para o biorreator coluna de bolhas operando com água-ar demonstraram que o k_{La} foi altamente sensível ao diâmetro de bolha, sendo que quanto maior o diâmetro utilizado, menor será o valor de k_{La} .

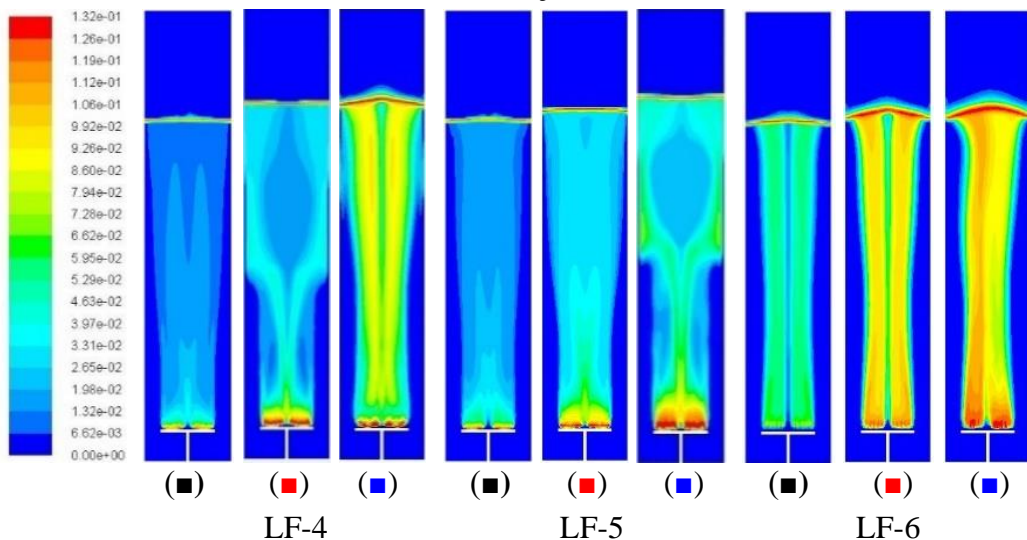
As Figuras 47(a) a (c) e 48(a) a (c) exibem os contornos de k_{LA} global obtidos via fluidodinâmica computacional (CFD), para os diâmetros de 4, 5 e 6mm e simulações do modelo sem e com a força de sustentação, respectivamente.

Figura 37 - Distribuição espacial de k_{LA} para o biorreator coluna de bolhas operando nas vazões de (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm sem a força de sustentação.



Fonte: O autor (2022).

Figura 38 - Distribuição espacial de k_{LA} para o biorreator coluna de bolhas operando nas vazões de (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm com a força de sustentação.



Fonte: O autor (2022).

Por meio desses perfis, é possível observar que quanto mais ar há em uma determinada região, maior é o favorecimento desta variável nessa mesma região. Rahimi *et al.* (2018) avaliaram a hidrodinâmica e a transferência de oxigênio em biorreatores coluna de bolha de bancada (0,15 m de diâmetro e 0,75 m de altura inicial de líquido)

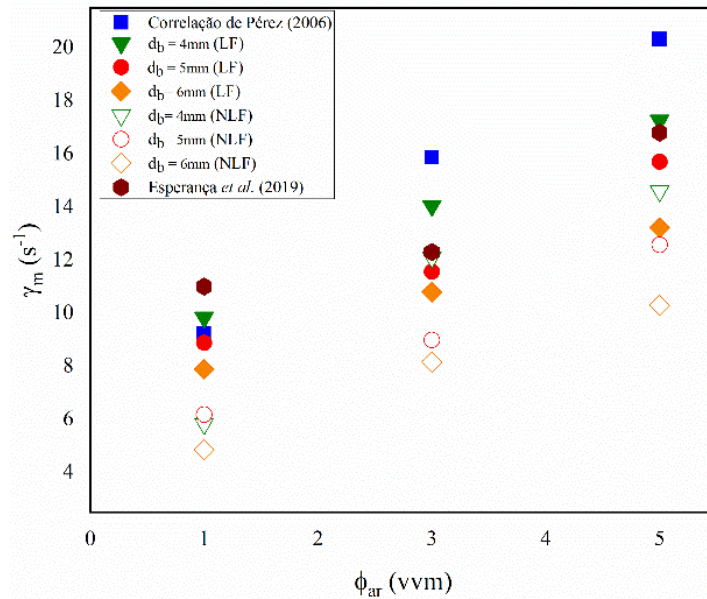
utilizando o modelo multifásico Euler-Euler nas simulações por fluidodinâmica computacional por meio do *software OpenFoam*. Foi utilizado um diâmetro médio e constante de bolha de 6 mm e velocidade superficial de gás de 0,1 m/s. Os autores utilizaram para o cálculo numérico do coeficiente convectivo de transferência de oxigênio (k_L) a teoria de penetração de Higbie (1935), assim como no presente estudo, e encontraram boa concordância entre os dados experimentais e simulados para a transferência de oxigênio.

Os resultados obtidos para o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio, com e sem a inserção da força de sustentação na modelagem matemática, sugerem que o uso desta força é recomendado nas simulações, visto que favorece o movimento lateral das bolhas, auxiliando na mistura entre os fluidos, recirculação e no maior tempo de residência do gás, o que contribui para um melhor desempenho em termos de transferência de oxigênio no biorreator. Para os casos em que são empregados menores diâmetros médios de bolhas, tal fato é mais visível, pois, para se obter uma boa transferência de oxigênio é melhor dispor de muitas bolhas pequenas ao invés de poucas bolhas grandes, devido à alta sensibilidade do parâmetro “a” ao diâmetro da bolha.

4.4.4 Taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$)

A Figura 39 sumariza os resultados de taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) com e sem a força de sustentação, para a modelagem considerado diâmetros 4,0 5,0 e 6,0 mm e vazões de 1, 3 e 5 vvm, comparando os resultados numéricos aos obtidos pela correlação proposta por Pérez (2006) (com intuito de avaliar a ordem de magnitude do parâmetro) e pelos resultados obtidos por Esperança *et al.* (2019).

Figura 39 - Taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) em função da vazão específica de ar com e sem o modelo de força de sustentação (LF4-1 a LF6-5 e NLF4-1 a NLF6-1).



Fonte: O autor (2022).

Os valores da taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) obtidos por meio da fluidodinâmica computacional à baixa vazão de alimentação de ar (1 vvm) exibiram uma estreita faixa de variação para os casos NLF4-1, NLF5-1 e NLF6-1 (6,18, 5,83 e 4,85 s^{-1}) e LF4-1, LF5-1 e LF6-1 (8,41, 7,72 e 6,88 s^{-1}), sendo que estes valores demonstraram uma boa concordância com os dados estimados pela Equação 151 e com os valores obtidos por Esperança *et al.* (2019) utilizando CFD.

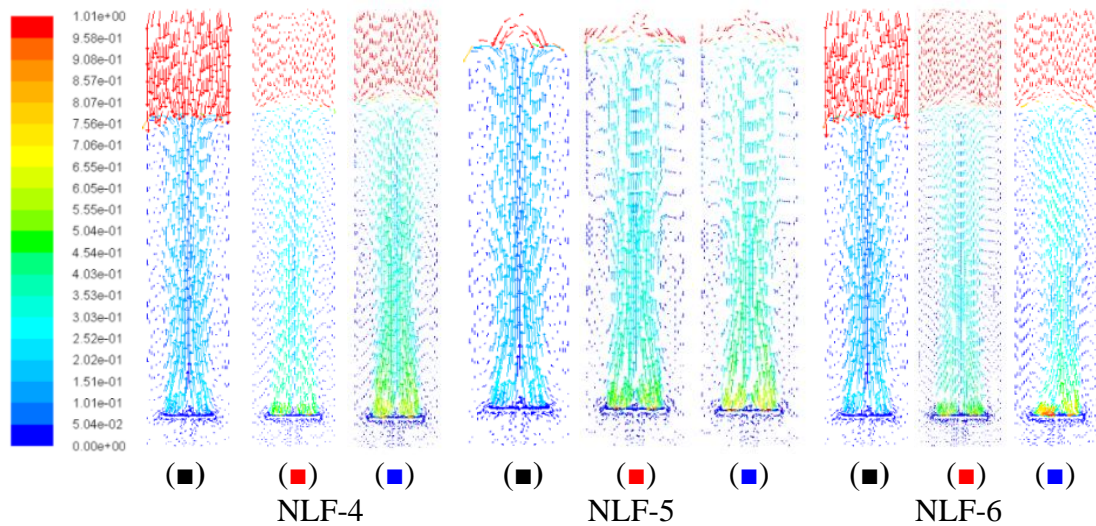
Para as maiores vazões de alimentação de ar (3 e 5 vvm), observa-se que tanto nas simulações que utilizaram o modelo considerando a força de sustentação quanto para as que não a consideraram, os valores de taxa de cisalhamento média obtidos por meio de simulação CFD foram inferiores aos valores estimados a partir da retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$), utilizando a correlação proposta por Pérez (2006), para os diâmetros estudados (4, 5 e 6 mm). As simulações em que a força de sustentação foi utilizada, para os diâmetros de 4 e 5 mm e vazões de 1, 3 e 5 vvm (casos LF-4 e LF-5), apresentaram valores de $\dot{\gamma}_m$ próximos aos obtidos por Esperança *et al.* (2019), demonstrando a mesma ordem de magnitude.

Analisando a Figura 39, observa-se que a taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) exibiu menores valores para maiores diâmetros de bolha, sendo estes valores inferiores aos observados pela estimativa através da Equação 151 que é função da vazão de ar, do consumo de potência e da retenção gasosa obtida a partir de dados experimentais. Apesar

das diferenças observadas nos valores da taxa de cisalhamento obtidos por CFD, pela correlação de Pérez e pelas simulações em CFD de Esperança *et al.* (2019), o comportamento geral e a ordem de magnitude dos valores de $\dot{\gamma}_m$ simulados concordaram com aqueles a que foram comparados.

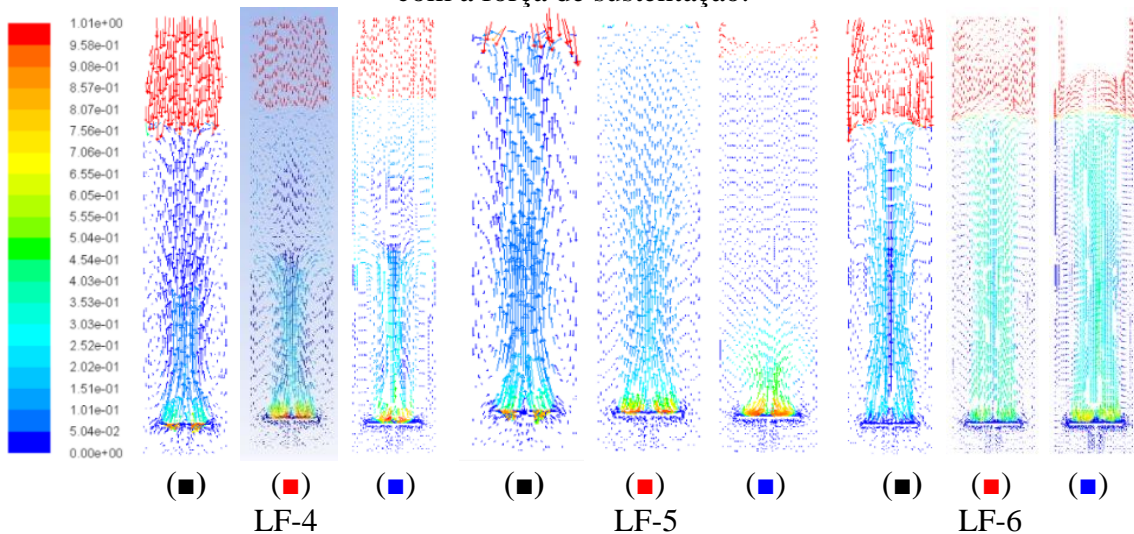
Neste sentido, as Figuras 40 e 41 apresentam o perfil da velocidade do líquido, sem e com a inserção da força de sustentação, respectivamente, com intuito de verificar a influência desta força neste parâmetro, o qual está fortemente associado à taxa de cisalhamento.

Figura 40 - Distribuição espacial da velocidade do líquido para o biorreator coluna de bolhas operando nas vazões de (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm sem a força de sustentação.



Fonte: O autor (2022).

Figura 41 – Distribuição espacial da velocidade do líquido para o biorreator coluna de bolhas operando nas vazões de (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm com a força de sustentação.



Fonte: O autor (2022).

Por meio da análise das Figuras 40 e 41, é possível observar que a inserção da força interfacial de sustentação no modelo matemático utilizado nas simulações, fez com que a velocidade do líquido atingisse valores mais elevados.

Deste modo, as simulações nas quais a força de sustentação foi considerada, exibiram maiores valores de taxa de cisalhamento média, podendo este fato residir na influência desta força na velocidade do líquido, já que $\dot{\gamma}_m$ depende deste parâmetro. A inserção da força de sustentação nas simulações resulta em maiores valores de velocidade de líquido, demonstrando maior proximidade aos observados em casos experimentais (Zhang *et al.*, 2006).

Os resultados obtidos por Esperança *et al.* (2019), para o sistema água-ar, considerando somente a força de arrasto, demonstraram que as taxas de cisalhamento médias obtidas por simulação CFD divergiram dos valores previstos por correlações que utilizam os perfis de velocidade do líquido, porém os valores apresentaram a mesma ordem de grandeza e comportamento em relação à velocidade do líquido.

4.4.5 Taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$)

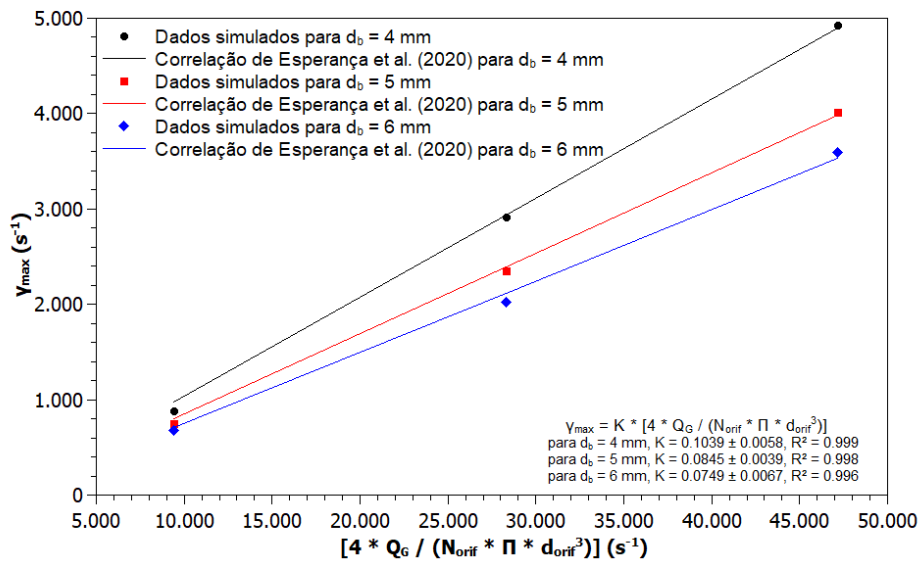
A taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$) foi avaliada por fluidodinâmica computacional para os modelos desconsiderando e considerando a força de sustentação para diferentes diâmetros de bolha. Desta forma foi possível ajustar a Equação 154 proposta por Esperança *et al.* (2020) e obter a constante de proporcionalidade k para os diferentes sistemas. Os ajustes da Equação 154 aos dados experimentais estão ilustrados na Figura 42 e 43 para as simulações que consideraram ou não a força de sustentação, respectivamente.

As constantes de proporcionalidade (k) foram obtidas considerando-se o diâmetro de bolha e o uso ou não da força de sustentação. Os valores de k , com seus respectivos desvios padrões, para os casos que desconsideraram a força de sustentação (NLF4-1 a NLF6-5) foram de $0,1039 \pm 0,0058$, $0,1845 \pm 0,0039$ e $0,0749 \pm 0,0067$. Para os casos que utilizaram a força de sustentação (LF4-1 a LF6-5) os valores obtidos de k (com os desvios padrões) foram $0,1156 \pm 0,0141$, $0,0898 \pm 0,0064$ e $0,0849 \pm 0,0067$.

Analisando estes valores, é possível observar que a inserção da força de sustentação nas simulações faz com que k decresça a medida em que se aumenta o diâmetro da bolha, sendo este comportamento oposto ao exibido pela constante

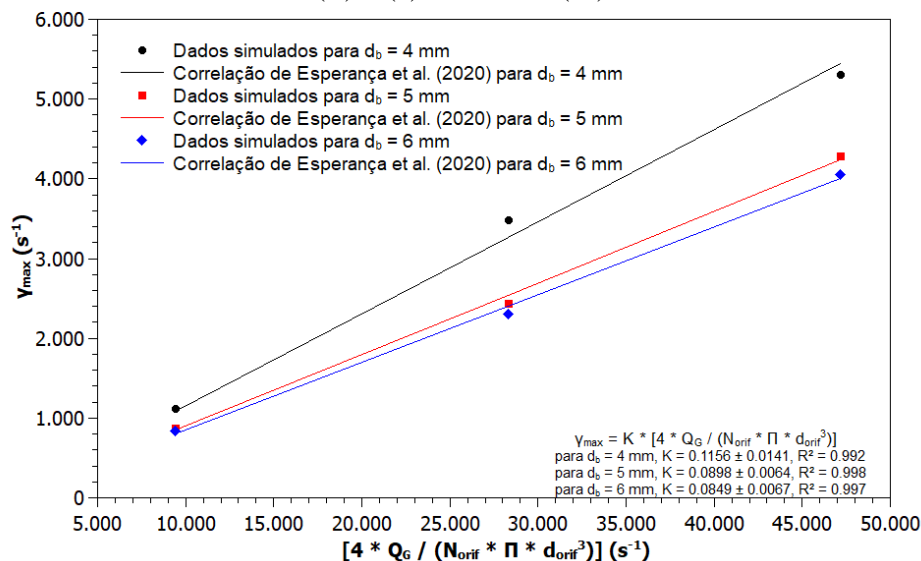
encontrada para o caso em que esta força foi desconsiderada. Tal comportamento pode estar ligado ao fato de que a medida que o diâmetro da bolha aumenta, a fração volumétrica de gás pode tornar-se instável (Lucas *et al.*, 2005), levando a maiores gradientes de velocidades, o que influencia na taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{\max}$), utilizada no ajuste da Equação 154.

Figura 42 - Ajuste entre a taxa de cisalhamento máxima obtida por CFD e estimada pela Equação proposta por Esperança *et al.* (2020) no biorreator coluna de bolhas para o modelo sem a força de sustentação (NLF4-1 a NLF6-5). (a) $d_B=4$ mm (●), (b) $d_B=5$ mm (■) e (c) $d_B=6$ mm (◆).



Fonte: O autor (2022).

Figura 43 - Ajuste entre a taxa de cisalhamento máxima obtida por CFD e estimada pela Equação proposta por Esperança *et al.* (2020) no biorreator coluna de bolhas para o modelo com a força de sustentação (NLF4-1 a NLF6-5). (a) $d_B=4$ mm (●), (b) $d_B=5$ mm (■) e (c) $d_B=6$ mm (◆).



Fonte: O autor (2022).

Observa-se na Figura 42 que os valores de taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$) obtidos nas simulações sem a força de sustentação apresentaram maiores valores para os casos em que se utilizou o diâmetro de bolhas de 6 mm (NLF6-1 a NLF6-5), com o maior valor exibido pelo caso NLF6-5, o qual considera a maior vazão empregada (5 vvm). Além disso, é possível observar que para as vazões de 1 e 5 vvm, os valores de $\dot{\gamma}_{max}$ para os diâmetros de 4, 5 e 6 mm exibiram valores muito próximos.

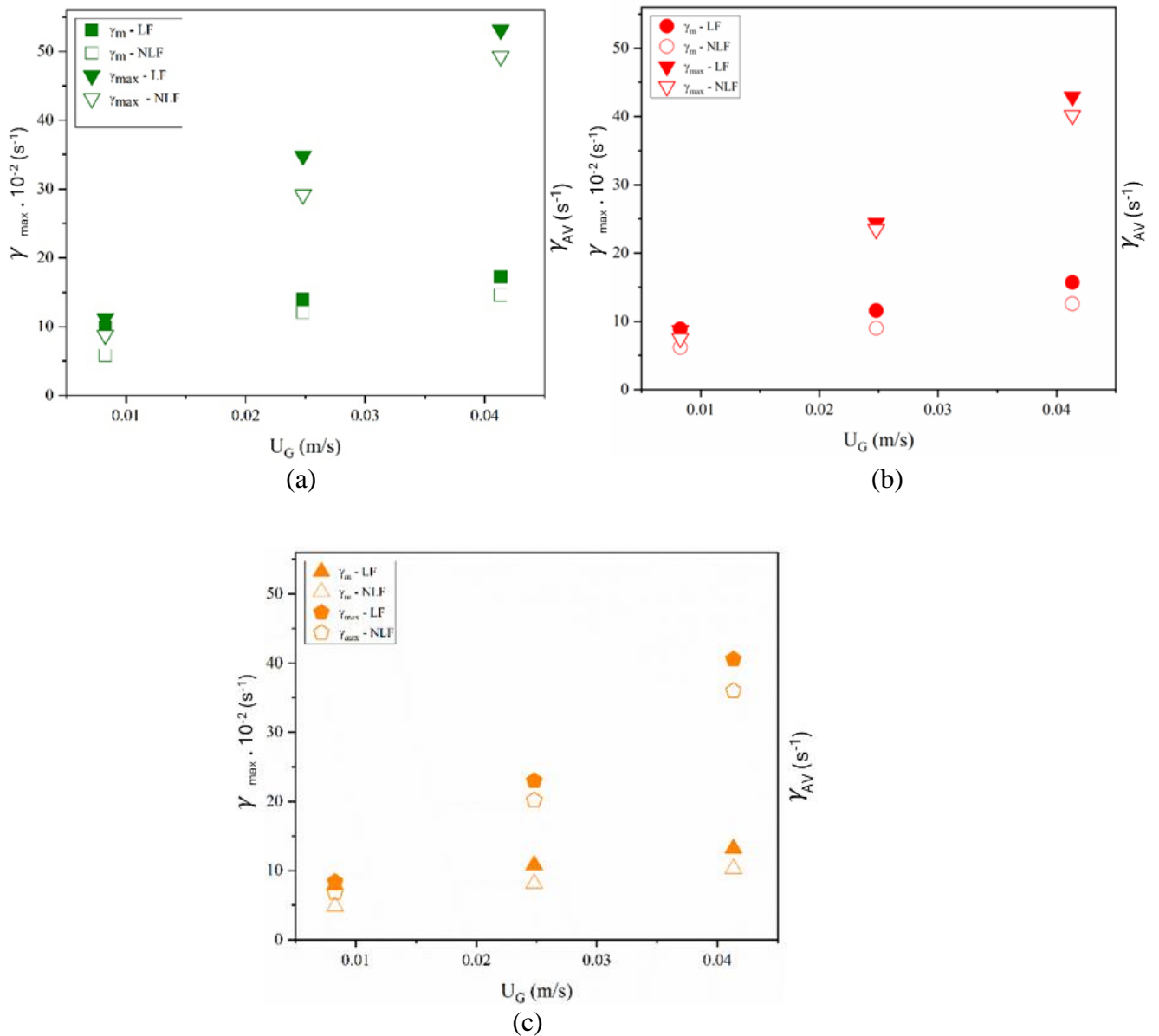
No entanto, para os casos LF4-1 a LF6-5, ou seja, simulações que consideraram a força de sustentação, observa-se que os maiores valores de $\dot{\gamma}_{max}$ foram obtidos para o menor diâmetro analisado (4 mm) em todas as vazões (LF4-1 a LF4-5). Para as vazões de 3 e 5 vvm, é possível perceber que estes valores oscilaram para os diâmetros de 5 e 6 mm, sendo que o maior valor de $\dot{\gamma}_{max}$ encontrado para o diâmetro de 6 mm e vazão de 3 vvm, enquanto que para a vazão de 5 vvm, o diâmetro de 5 mm exibiu maior valor. Os valores calculados por meio da correlação demonstraram boa concordância com os valores obtidos pela simulação CFD, apresentando mesma ordem de grandeza.

Em estudo realizado por Jesus *et al.* (2017) comparando biorreatores convencional com agitação (equipado com impelidores), foi verificado que o nível de cisalhamento não depende apenas da presença ou ausência de agitação mecânica, mas também das condições de operação, tais como a velocidade de agitação e vazão de gás, podendo ser estes comportamentos efeito do parâmetro utilizado para quantificar o ambiente de cisalhamento.

Em geral, as condições de cisalhamento em diferentes biorreatores foram analisadas por meio da taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$). Todavia, a utilização da taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$) representa uma alternativa mais acertiva de comparação entre biorreatores, pois descreve a pior condição à qual um microrganismo pode ser exposto no interior de um biorreator (Esperança, 2018).

Assim, com intuito de demonstrar a influência da força de sustentação no cisalhamento, foram feitas comparações das taxas de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$) e média ($\dot{\gamma}_m$) no biorreator coluna de bolhas, sendo os valores obtidos por simulações CFD, conforme Figura 44 (a), (b) e (c).

Figura 44 – Comparação entre as taxas de cisalhamento média e máxima em biorreator coluna de bolhas, com e sem a força de sustentação para os diâmetros de (a) $d_B=4\text{mm}$, (b) $d_B=5\text{mm}$ e (c) $d_B=6\text{mm}$.



Fonte: O autor (2022).

Valores da taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$), considerando as três vazões e os três diâmetros empregados neste estudo, variaram de 7,89 a 17,25 s^{-1} quando a força de sustentação foi inserida no modelo matemático (casos LF4-1 a LF6-5) e de 4,85 a 14,59 s^{-1} para os casos em que esta força não foi considerada (NLF4-1 a NLF6-5). No entanto, os valores da taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$) ficaram na faixa de 840 a 5.312 s^{-1} para os casos LF4-1 a LF6-5 e de 680 a 4.928 s^{-1} para NLF4-1 a NLF6-5. Por meio desta comparação, é possível observar que, no intervalo de variação da velocidade superficial

de gás estudado, os casos em que a força de sustentação foi considerada demonstraram valores de taxa de cisalhamento média e máxima mais elevadas.

Sabe-se que a força de sustentação esta relacionanda ao movimento lateral da fase dispersa, neste caso as bolhas, atuando lateralmente em escoamentos ascendentes, onde há gradientes na velocidade do líquido. Quanto maior este gradiente, maior será formação de turbilhões (*eddies*), favorendo a troca de energia mecânica entre estes vórtices, tornando o sistema mais turbulento, em especial na região de injeção de ar, o que favorece os fenômenos de quebra e coalescência. Desta forma, a inserção da força de sustentação auxilia no aumento dos valores da taxa de cisalhamento máxima, pois favorece que exista uma maior formação de bolhas nesta área específica do reator.

Corroborando com o estudo de Esperança *et al.* (2019), os resultados encontrados no presente trabalho mostraram que a taxa de cisalhamento máxima é um parâmetro mais adequado para ser utilizado na avaliação do desempenho do biorreator do que a taxa de cisalhamento média, visto que, devido a diferença na ordem de magnitude das duas grandezas, pode-se dizer que existe uma distribuição espacial não uniforme da taxa de cisalhamento média no interior do equipamento. Além disso, as condições de operação demonstraram desempenhar um papel fundamental na determinação do ambiente de cisalhamento. Frente aos resultados encontrados nesta etapa das pesquisa, optou-se por considerar as forças interfaciais de arrasto e sustentação no modelo matemático adotado para as simulações com equações de balanço populacional.

4.5 Considerações Finais

Primeiramente, aplicou-se o GCI e foram obtidos, de maneira satisfatória, os erros referentes à discretização de cada uma das malhas analisadas e, assim, a malha intermediária (M_2) foi definida como suficiente para a realização das simulações. Na comparação entre os diâmetros médios e constantes utilizados neste estudo (4, 5 e 6 mm), o menor diâmetro analisado demonstrou maior concordância entre os dados experimentais e os estimados pela fluidodinâmica computacional, sendo os melhores ajustes encontrados para a maior vazão aplicada neste estudo (5 vvm).

Em relação a comparação entre as simulações que utilizaram ou não a força de sustentação, os resultados demonstraram que os valores previstos para os parâmetros hidrodinâmicos e de transferência de massa analisados (retenção gasosa global $\bar{\alpha}_G$, coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio k_{LA} e taxas de cisalhamento média

$\dot{\gamma}_m$ e máxima $\dot{\gamma}_{\max}$), quando esta força era inserida ao modelo matemático usado, foram maiores e mais próximos aos estimados experimentalmente ou por correlações.

Para a taxa de cisalhamento máxima, foram obtidos valores para a constante de proporcionalidade (k). O valor do diâmetro de bolha utilizado e a existência ou não da força de sustentação levaram a valores diferentes deste parâmetro. Foi observado que a variação no diâmetro de bolhas, para a faixa empregada neste estudo, demonstrou maior influência sobre os valores da taxa de cisalhamento máxima quando foi considerada a força de sustentação, sendo que este comportamento está dentro do esperado, pois a taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{\max}$) depende do gradiente de velocidade local, o qual é influenciado pela força de sustentação.

CAPÍTULO 5 – AVALIAÇÃO DO MODELO ACOPLADO CFD-PBM NA ANÁLISE DE PARÂMETROS DE DESEMPENHO POR FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

5.1 Introdução

O comportamento de partículas é crucial para a análise do desempenho de equipamentos nos quais acontecem escoamentos multifásicos polidispersos, em grande parte dos problemas práticos e, deste modo, é necessário realizar um estudo capaz de caracterizar da melhor maneira possível o comportamento espacial e dinâmico de uma população de partículas. Para preencher essa lacuna, com um custo computacional reduzido, em 1916 surge a teoria de balanço populacional (RAMKRISHNA, 2000).

Equações de balanço populacional (EBP) são amplamente utilizadas na descrição matemática da dinâmica de população de partículas em processos envolvendo sistemas particulados, como por exemplo mudanças na distribuição de tamanhos das partículas, processos de cristalização, processos envolvendo aerossóis, dispersões, “sprays”, moagem de sólidos, combustão de combustíveis sólidos, etc. Além disso, as equações de balanço populacional são usadas em processos fermentativos para descrever o estado (as características importantes) da população de microrganismos. Embora os processos envolvidos no crescimento e na reprodução de microrganismos sejam bastante distintos dos processos que envolvem crescimento, aglomeração e quebra de partículas em polimerização ou em cristalização, a formulação matemática do balanço populacional é aplicável a todos os casos (ULIANA, 2007).

5.2 Estado da Arte

As modelagens que utilizam a abordagem de tamanho de bolha constante, assumem que o diâmetro das bolhas permanece inalterado durante as simulações de CFD, o que significa que a influência da quebra e da coalescência de bolhas é desprezada. Os resultados obtidos por esta abordagem são bastante influenciados pelos valores do diâmetro da bolha utilizado. Todavia, a variação de tamanhos de bolha devido à coalescência e a quebra das mesmas é considerada nas modelagens que utilizam uma abordagem de tamanho de bolha variável. Em teoria, a adoção de abordagens que utilizam um tamanho de bolhas variável é mais razoável, sendo necessário selecionar modelos adequados de quebra e coalescência de bolhas.

Grande parte das pesquisas são realizadas com base em modelagens que utilizam abordagens de tamanho de bolha constante, enquanto os estudos que adotam o método acoplado CFD-modelo de balanço populacional (PBM) são relativamente pequenos (ZHANG *et al.*, 2020). O modelo acoplado CFD-PBM pode ser usado para simular de forma mais efetiva uma coluna de bolhas, pois incorpora o uso de CFD para fornecer o campo de fluxo e retenção gasosa e o uso de um modelo de balanço populacional para fornecer a distribuição de tamanho de bolha local (YANG *et al.*, 2018).

Polli *et al.* (2002) investigaram a influência da geometria do aspersor na distribuição do tamanho das bolhas próxima à região de entrada, variando parâmetros como tamanho dos furos, número de furos, distância entre eles e vazão de gás. O estudo foi desenvolvido experimentalmente, por meio da técnica fotográfica, empregando-se modelos matemáticos baseados em balanços populacionais, resolvidos com a utilização de um *software* criado em linguagem FORTRAN® para prever o tamanho e distribuição das bolhas formadas no aspersor.

Bannari *et al.* (2011) estudaram um biorreator *airlift* de cilindros concêntricos com agitação. A modelagem da distribuição do tamanho das bolhas no sistema água-ar, foi realizada utilizando as equações de balanço populacional com modelo de coalescência. Os autores validaram os modelos matemáticos por CFD e concluíram que a presença do agitador promoveu um aumento de 30% no coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio, porém houve um maior consumo de energia.

Xing *et al.* (2013) investigaram o efeito da viscosidade do líquido no comportamento hidrodinâmico da coluna de bolhas por estudo experimental e simulação numérica com modelo CFD acoplado ao modelo de balanço populacional (PBM). A retenção gasosa global e as frações volumétricas de bolhas pequenas e grandes foram determinadas pelo método dinâmico de desprendimento de gás. Com o uso dos modelos de quebra e coalescência e da distribuição do tamanho de bolhas para descrever as forças interfaciais, o modelo acoplado CFD-PBM pôde descrever a dependência da retenção gasosa global e das frações volumétricas de bolhas à viscosidade do líquido nos regimes homogêneo e heterogêneo.

Lau *et al.* (2014) utilizaram um modelo de quebra e coalescência de bolhas com uma abordagem Euleriana-Lagrangeana. Foi empregada um reator coluna de bolhas de seção quadrada operando com água e ar, sendo os estudos conduzidos com a variação do

número de Weber, distribuição do tamanho de bolhas e velocidade superficial de gás na região de subida. Como resultado, os autores concluíram que o aumento do número de Weber traz mudanças na distribuição das bolhas, sendo encontrado um elevado número de bolhas pequenas, devido à altas taxas de quebra. Além disso, o aumento da velocidade superficial de gás também provocou o surgimento de bolhas pequenas, devido aos menores espaços disponíveis em decorrência de um aumento local na fração volumétrica gasosa.

Han *et al.* (2017) investigaram a hidrodinâmica de um biorreator airlift, sendo estudados um fluido não-Newtoniano e água. As simulações foram conduzidas utilizando CFD aliado às equações de balanço populacional e aos modelos de quebra e coalescência para descrever a distribuição de tamanho de bolhas. Os resultados simulados demonstraram diferentes perfis de velocidade no topo do equipamento para a água e o fluido não-Newtoniano, estando de acordo com os dados experimentais. Além disso, uma boa concordância entre simulações e experimentos foi obtida em termos de retenção gasosa global e diâmetro de bolha médio de Sauter.

Zhang *et al.* (2018) propuseram um modelo de fator de correção, com base no modelo de coalescência de bolhas de Luo, para pressões de acordo com os resultados experimentais da literatura. O modelo CFD acoplado às equações de balanço populacional foi usado para simular uma coluna de bolhas de alta pressão. Os resultados da simulação com e sem o fator de correção foram comparados com os resultados experimentais, sendo verificado que o modelo acoplado CFD-PBM modificado pode prever os comportamentos hidrodinâmicos sob várias condições de operação.

Alam *et al.* (2020), utilizou a modelagem multifásica CFD aliada ao modelo de balanço populacional (PBM) para prever a distribuição do tamanho de microbolhas, investigando dois modelos de coalescência (modelo Luo e modelo Turbulento) e dois modelos de quebra (modelo Luo e modelo Lehr) e os resultados comparados aos dados experimentais obtidos pela Velocimetria de Imagem de Partículas (PIV). Os autores obtiveram boa concordância entre os resultados numéricos e experimentais, sendo a combinação do modelo de coalescência turbulenta e o modelo de quebra de Lehr a que apresentou melhor compatibilidade com resultados experimentais.

Zhang *et al.* (2020) utilizaram o modelo acoplado CFD-PBM, aplicando os modelos discreto homogêneo e não homogêneo, com modelos de quebra e coalescência

de bolhas, sendo os resultados precisos em amplas condições de operação e propriedades do líquido, para um mesmo conjunto de parâmetros do modelo. No geral, o modelo acoplado mostrou boa concordância quando a velocidade superficial do gás, pressão de operação, viscosidade do líquido e tensão superficial foram os fatores determinantes na quebra e coalescência das bolhas, e as forças na interface gás-líquido foram calculadas usando a retenção gasosa local e a distribuição do tamanho da bolha.

Li *et al.* (2021) verificaram os efeitos de um distribuidor de gás circular com a abertura para baixo e um tubo trocador de calor circular na hidrodinâmica de um reator de coluna de bolhas em escala piloto empregando a modelagem CFD-PBM, utilizando o modelo discreto de balanço populacional. As simulações indicaram que a estrutura circular do trocador de calor levou a uma dispersão significativa da fase gasosa, induzindo um fluxo de circulação mais forte. Além disso, uma altura axial adequada do distribuidor de gás auxilia no aumento da retenção gasosa.

Zhang *et al.* (2021) investigaram o efeito das força de sustentação, dispersão turbulenta, de lubrificação da parede e massa virtual, além da turbulência induzida por bolhas (BIT) na simulação do modelo fluidodinâmico aliado ao modelo de balanço populacional (CFD-PBM), utilizando o modelo discreto, de colunas de bolhas de ar-água operadas a 0,01, 0,05, 0,10, 0,11 e 0,23 m/s e os resultados da simulação indicam que o retenção gasosa local, velocidade axial do líquido, distribuição global do tamanho da bolha (BSD) e o diâmetro médio global de Sauter são significativamente afetados pela força de sustentação.

As seções a seguir apresentam os resultados obtidos para a distribuição de tamanho de bolhas e para as simulações com as equações de balanço populacional, associadas aos modelos de quebra e coalescência.

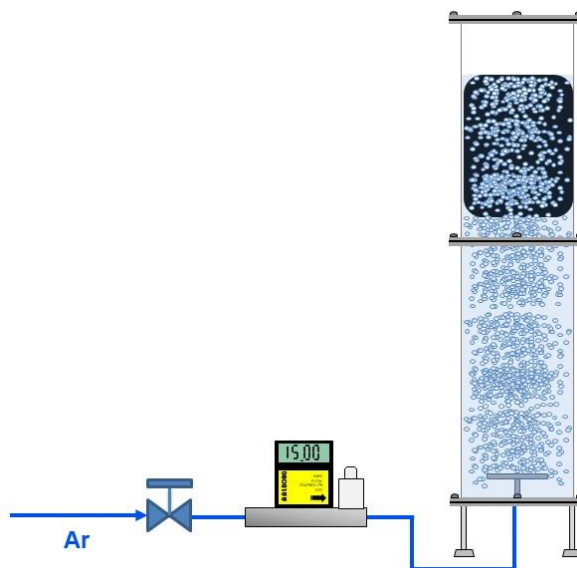
5.3 Materiais e Métodos

5.3.1 Distribuição de Tamanhos de Bolhas

A geração das bolhas em diferentes vazões de gás se deu com a utilização de um reator pneumático de 10 L, tipo coluna de bolhas de seção quadrada (142 x 142 mm), construído em acrílico, conforme mostrado na Figura 45. O aspensor de gás empregado para aeração do reator foi do tipo cruzeta com 180 furos, apresentando orifícios de 0,5 mm de diâmetro e espaçamento entre os furos de 5 mm, distribuindo-se ao longo das hastes do aspensor (Badino *et al.*, 2004). Água destilada foi utilizada como fase líquida, e

ar atmosférico comprimido, oriundo de compressor a óleo, foi utilizado como fase gasosa para geração das bolhas. A vazão de ar foi controlada e medida com a utilização de um fluxômetro de massa (GFC-17, Aalborg), posicionado antes da entrada de ar no reator e após a válvula de controle de pressão da linha de ar. A válvula de ajuste de pressão da linha de ar comprimido foi ajustada para 2,0 bar.

Figura 45 - Aparato Experimental utilizado para a verificação da Distribuição de Tamanho de Bolhas



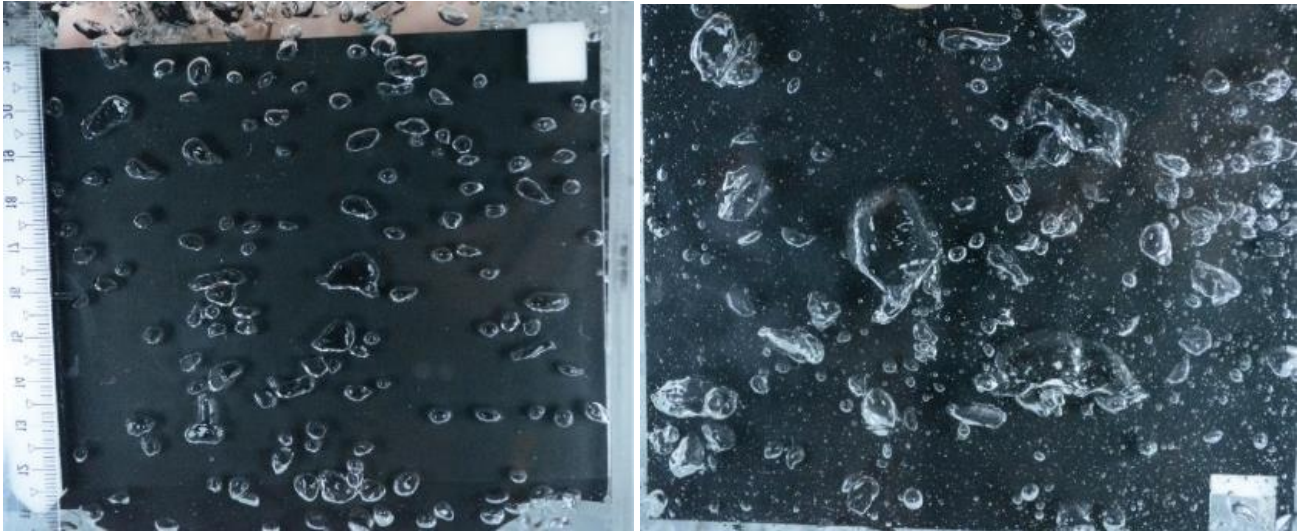
Fonte: Autor (2022)

As vazões de ar utilizadas para a aeração do reator e posterior determinação da distribuição do diâmetro das bolhas geradas foram 10, 30 e 50 L.min⁻¹, que correspondem respectivamente a 1, 3 e 5 vvm (razão da vazão volumétrica de gás em L.min⁻¹ pelo volume do reator em L). A determinação da distribuição do diâmetro de Sauter das bolhas geradas, foi realizada por aquisição e tratamento de imagens das bolhas obtidas em uma das faces do reator, conforme reportado em diversos trabalhos da literatura (TESAR *et al.*, 2009; BRITTLE *et al.*, 2015; SONG *et al.*, 2021) e mostrado na Figura 46. As imagens das bolhas foram obtidas utilizando a câmera Nikon D5200 com lentes Nikon DX (AF-S NIKKOR 18-55 mm 1: 3,5-5,6 G).

Foi configurado o tempo de abertura do obturador para o valor de 1/4000 s, com o objetivo de realizar a captura da imagem das bolhas em movimento com nitidez. Porém, devido ao baixo tempo de abertura do obturador, houve a necessidade de suprir a iluminação externa, posicionando duas lâmpadas LED de 50 W em cada lateral do reator.

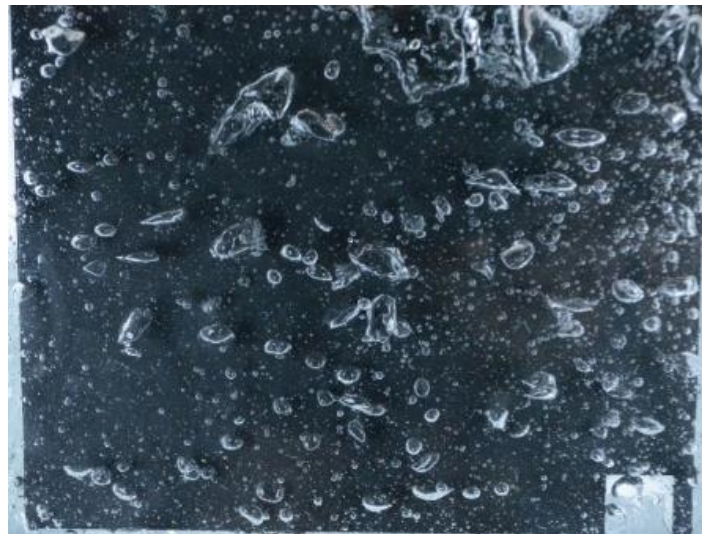
Além disso, utilizou-se um anteparo de cor escura interno ao reator, de modo a gerar um contraste entre o fundo da imagem e as bolhas.

Figura 46 - Imagens das bolhas obtidas para as vazões operadas em uma das faces do biorreator coluna de bolhas: (a) $\phi_{ar}=1$ vvm; (b) $\phi_{ar}=3$ vvm; (c) $\phi_{ar}=5$ vvm.



(a)

(b)



(c)

Fonte: O autor (2022).

O anteparo preto foi posicionado e fixado à cerca de 5,0 mm de distância da parede interna de uma das faces do reator, de modo a proporcionar uma amostragem das bolhas que em seu caminho de subida, passavam entre o anteparo e a uma das faces do reator para serem fotografadas. As fotos foram tiradas em triplicata para cada condição de vazão de ar, com o posicionamento de uma escala em milímetros na face externa do reator, na qual as fotos foram obtidas. Os valores da escala (mm) para cada imagem obtida foram

utilizados no posterior tratamento das imagens para determinação da distribuição do diâmetro das bolhas. O tratamento das imagens foi realizado com o *software* aberto *ImageJ*.

Para o tratamento das imagens foi fixada uma escala de 1000 micras e 8 bits, sendo as imagens binárias. Em seguida as figuras foram delineadas em branco e as bolhas separadas e preenchidas, para então delimitar-se a área de interesse. A distribuição foi obtida por meio da contagem das bolhas preenchidas no *software*, e ao final, foi gerado um arquivo com os valores dos maiores e menores diâmetros, sendo este exportado para o Excel, para o então tratamento dos dados.

Mohagheghian *et al.* (2020) utilizaram um reator coluna de bolhas aliado a um aspersor poroso, que cobria cerca de 90% da seção transversal da coluna, para estudar a mistura de um escalar passivo sob difusão induzida por bolhas, sendo investigados os efeitos da velocidade superficial do gás (até 69 mm/s) e das vibrações verticais externas (amplitudes até 10 mm, frequência <23 Hz) na escala de tempo de mistura. Seguindo a metodologia proposta pelos autores para a determinação de bolhas e análise dos resultados, os dados foram tratados por meio dos cálculos do diâmetro equivalente e de Sauter (Equação 114), definido como a razão do volume representativo de bolhas para a área de superfície da bolha. A Equação 169 representa o cálculo do diâmetro equivalente.

$$d_{eq} = \frac{d_{maior}}{(AR)} \quad (169)$$

na qual AR é a razão de aspecto da bolha definida como d_{maior}/d_{menor} .

Após a obtenção da distribuição de tamanho de bolhas, os dados foram ajustados por meio do modelo de regressão de Rosin-Rammler-Bennet (RRB), descrito pelas Equações 170 a 172.

$$X = 1 - e^{-(D/D')^n} \quad (170)$$

$$\frac{dX}{dD} = \frac{n}{D'} \left(\frac{D}{D'}\right)^{n-1} \cdot e^{-(D/D')^n} \quad (171)$$

Após a linearização, as equações podem ser reescritas como:

$$n[\ln(D) - \ln(D')] = \ln \left[\ln \left(\frac{1}{1-X} \right) \right] \quad (172)$$

onde, para $D = D'$ tem-se $X = 1 - e^{-1}$; $D' = D_{63,2}$, ou seja, 63% das partículas apresentam diâmetro menor que o valor de $D_{63,2}$ (parâmetro ajustado pelo modelo) e n , o

adimensional. A partir desses modelos e de seus parâmetros associados é possível estabelecer equações para o cálculo do diâmetro médio de Sauter (CREMASCO, 2012).

Para o modelo RRB, tem-se uma reta ao se representar em forma gráfica $\ln(D)$ vs. $\ln[(\ln 1/(1-X))]$. Através deste gráfico, o modelo é analisado e seus parâmetros determinados através do método de regressão linear da equação característica (Equação 173). Para os casos em que $n < 1$, utiliza-se a Equação 169, que representa o diâmetro médio de Sauter, caracterizando-se como um dos métodos mais utilizados em sistemas particulados, no qual x_i representa a distribuição de frequência e D_i o diâmetro médio entre fração mássica passante e a retida (CREMASCO, 2012).

$$d_{ps} = \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^n x_i/D_i\right)} \quad (173)$$

Para determinar o valor do diâmetro médio de Sauter para esse modelo, utiliza-se a Equação 174, a qual é válida para $n > 1$, onde n é o coeficiente angular da reta. A forma “S” é verificada para $n > 1$ (Massarani, 1984).

$$d_{ps} = \frac{D'}{\Gamma(1-1/n)} \quad (174)$$

A função gama para um dado número x positivo é utilizada no cálculo, sendo esta uma extensão da função fatorial, com seu argumento deslocado para 1, para números reais e complexos, possuindo valores tabelados, conforme disposto na Tabela 11, para a faixa utilizada neste trabalho. Para $x > 0$ a função $\Gamma(x)$ é definida como:

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{r-1} dx \quad (175)$$

Tabela 11 – Valores da função gama ($\Gamma(x)$) para x variando de 1,31 a 1,73, com incremento de 0,01

x	$\Gamma(x)$
1,31	0,896
1,32	0,89464
1,33	0,89338
1,34	0,89222
1,35	0,89115
1,36	0,89018
1,37	0,88931
⋮	⋮
1,70	0,90864
1,71	0,91057
1,72	0,91258
1,73	0,91467

Fonte: O autor (2022).

5.3.2 Simulações Numéricas com aplicação das Equações de Balanço Populacional (EBP)

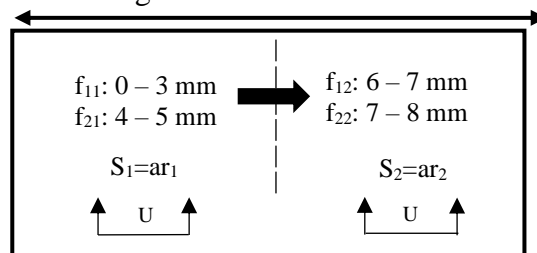
As simulações nas quais aplicou-se as equações de balanço populacional foram realizadas a partir do módulo presente no *Ansys Fluent* 14.5, sendo utilizado o modelo Discreto Não-Homogêneo. Por meio destas simulações buscou-se, inicialmente, comparar a ação dos fenômenos de quebra e coalescência na fluidodinâmica do biorreator e, em seguida, a influência do balanço populacional nos parâmetros hidrodinâmicos foi analisada por meio da comparação dos resultados com os obtidos para as simulações com diâmetro médio.

Para as simulações com as equações de balanço populacional, foram utilizados como referência os trabalhos de Lehr *et al.* (2002), Altero (2016) e Rodrigues *et al.* (2019), os quais utilizaram em seus trabalhos duas fases secundárias para o modelo Discreto Não-Homogêneo: uma contendo as bolhas menores e outra as bolhas de maior diâmetro.

Para uma melhor compreensão sobre as fases envolvidas nas simulações, assim como suas classes, a Figura 47 demonstra uma representação das fases e classes utilizadas, fazendo um paralelo com a representação do princípio do modelo Discreto Não-Homogêneo, descrito pela Figura 21.

Figura 47 - Representação das fases e classes utilizadas nas simulações com EBP's.

Classes podem interagir e atravessar cada uma das fases ar_1 e ar_2 .



Fonte: Adaptado de Rodrigues (2018).

Conforme disposto na figura, as fases secundárias são ar_1 e ar_2 , com suas respectivas classes, sendo as velocidades de cada fase no interior do biorreator descritas por U_1 e U_2 . As principais características das simulações com as equações de balanço populacional estão representadas na Tabela 12.

Tabela 12 - Modelos e parâmetros numéricos das simulações EBP realizadas.

Informação	Condição usada
Modelo multifásico	Euler
Modelo de turbulência	$\kappa\text{-}\varepsilon$ <i>realizable</i>
Modelo equações balanço populacional	Modelo Discreto Não-Homogêneo
Fenômenos envolvidos	Coalescência: modelo turbulento; Quebra – Modelo de Luo
Modelo de Interação entre fases	Arrasto - Grace et al. (1976); Sustentação - Tomiyama (2004)
Interpolação para Eq. Momento	Second Order Implicit
Interpolação para Eq. Fração Volumétrica	First Order Upwind
Interpolação para Eq. Energia Cinética Turbulenta	Second Order Upwind
Interpolação para Eq. Taxa Dissipação Cinética Regime Transiente	Second Order Upwind tempo simulado=5 s

Fonte: O autor (2022).

As condições simuladas utilizadas neste estudo com aplicação das equações de balanço populacional e os modelos avaliados estão listados na Tabela 13. Quatro condições diferentes foram testadas para observar a influência dos fenômenos de coalescência e quebra de bolhas nos parâmetros hidrodinâmicos do biorreator de coluna de bolhas. A primeira condição simulada (EBP), a mais simples, considerou apenas a aplicação de equações de balanço populacional, sem que houvesse a inserção dos modelos que representam os fenômenos de quebra e coalescência nas simulações de distribuição de tamanho de bolhas.

Tabela 13 - Códigos e características das simulações realizadas com EBP (Equações de Balanço Populacional).

#	Código da Simulação	Modelo de Quebra	Modelo de Coalescência
1	EBP	-	-
2	EBP-B	Laakkonen (Laakkonen <i>et al.</i> (2006)	-
3	EBP-C	-	Turbulento (Abrahamson, 1975; Saffman and Turner, 1956)
4	EBP-B-C	Laakkonen (Laakkonen <i>et al.</i> (2006)	Turbulento (Abrahamson, 1975; Saffman and Turner, 1956)

Fonte: O autor (2022)

O segundo caso utilizado na simulação (EBP-B), levou em consideração as equações de balanço populacional e a quebra de bolhas no modelo matemático utilizado. Para este caso, foi utilizado para representar o fenômeno de quebra, o modelo de Laakkonen (LAAKKONEN *et al.* 2006). O terceiro caso utilizado na simulação (EBP-C), utilizou as equações de balanço populacional, considerando a coalescência de bolhas,

representadas pelo modelo Turbulento (ABRAHAMSON, 1975; SAFFMAN & TURNER, 1956). A última situação simulada, caso EBP-B-C, considerou além das equações de balanço populacional, os fenômenos de quebra (segundo o modelo de Luo) e coalescência (segundo o modelo turbulento), com o intuito de se analisar a interação entre esses dois fenômenos.

Na Tabela 14 estão descritas as condições operacionais e de contorno para os casos simulados. A velocidade de entrada de gás foi utilizada como condição de contorno, sendo utilizadas para as fases ar₁ e ar₂, as frações de fase para cada faixa de diâmetro aplicada.

Tabela 14 - Dados operacionais e condições de contorno para as simulações EBP.

Especificação	Tipo de condição de contorno
Entrada – orifícios do aspersor (ar)	$\phi_{ar} = 1 \text{ vvm}$ ar ₁ e ar ₂ = 2,285 m/s
	$\phi_{ar} = 3 \text{ vvm}$ ar ₁ e ar ₂ = 6,86 m/s
	$\phi_{ar} = 5 \text{ vvm}$ ar ₁ e ar ₂ = 11,43 m/s
	$\phi_{ar} = 1 \text{ vvm}$ Fase ar ₁ : 1,0-2,0 = 0,1867 2,01-3,17 = 0,8132
	Fase ar ₂ : 3,18-5,0 = 0,5577 5,01-8,13 = 0,4423
	$\phi_{ar} = 3 \text{ vvm}$ Fase ar ₁ : 0,61-1,93 = 0,9076 1,94-3,87 = 0,0924
	Fase ar ₂ : 3,88-5,45 = 0,5996 5,46-8,90 = 0,4004
	$\phi_{ar} = 5 \text{ vvm}$ Fase ar ₁ : 0,49-2,0 = 0,9487 2,01-4,01 = 0,0513
	Fase ar ₂ : 4,02-6,50 = 0,6923 6,51-9,23 = 0,3077
	Diâmetros de bolha
Saída – topo do biorreator	<i>Pressure_outlet</i> 1 atm
Paredes	<i>Wall (Non-slip condition for both phases)</i> -

Fonte: O autor (2022)

5.4 Resultados e Discussão

5.4.1 Distribuição de Tamanho de Bolhas

A distribuição de tamanho de bolhas considerada neste trabalho é apresentada na Tabela 15 e foi obtida, experimentalmente pelo autor, conforme descrito na seção 5.3.1, por meio da análise de imagens pelo *ImageJ* e tratamento dos dados obtidos em *Excel*.

Tabela 15 - Distribuição de tamanho de bolhas no biorreator coluna de bolhas

Diâmetro de bolha (dB) - mm	Frequência (N _i) - %		
	$\phi_{ar} = 1 \text{ vvm}$	$\phi_{ar} = 3 \text{ vvm}$	$\phi_{ar} = 5 \text{ vvm}$
7-8	6,28	1,21	0,45
6-7	3,51	0,77	0,31
5-6	12,18	0,99	0,57
4-5	27,68	1,96	1,14
3-4	40,96	3,41	1,95
2-3	9,41	4,90	3,05
1-2	0,0	13,54	9,73
0-1	0,0	73,22	82,80

Fonte: O autor (2022).

Seguindo a recomendação de separar as bolhas em duas fases secundárias (ar_1 e ar_2), optou-se por considerar as de 0 a 5 mm pertencentes à fase de bolhas pequenas (ar_1) e as de 6 a 8 mm pertencentes à fase de bolhas grandes (ar_2). Além disso, considerou-se que cada fase ar foi dividida em dois intervalos. Assim, ponderando-se as frequências de cada diâmetro dos intervalos considerados em suas respectivas fases, tem-se os valores apresentados na Tabela 16, juntamente com a fração volumétrica calculada para cada intervalo.

Observa-se na Tabela 16 que as fases ar_1 e ar_2 possuem dois intervalos (ar_1 : 0 a 3 mm e 4 a 5 mm; ar_2 : 6 a 8 mm e 8 a 12 mm). Os valores totais de fração de fase foram obtidos pela soma das frações da Tabela 14 dos respectivos diâmetros, para cada vazão específica de ar , e os valores obtidos foram utilizados para o cálculo da fração volumétrica de cada fase. Para a determinação do percentual na ponderou-se o percentual acumulado com o total de cada fase.

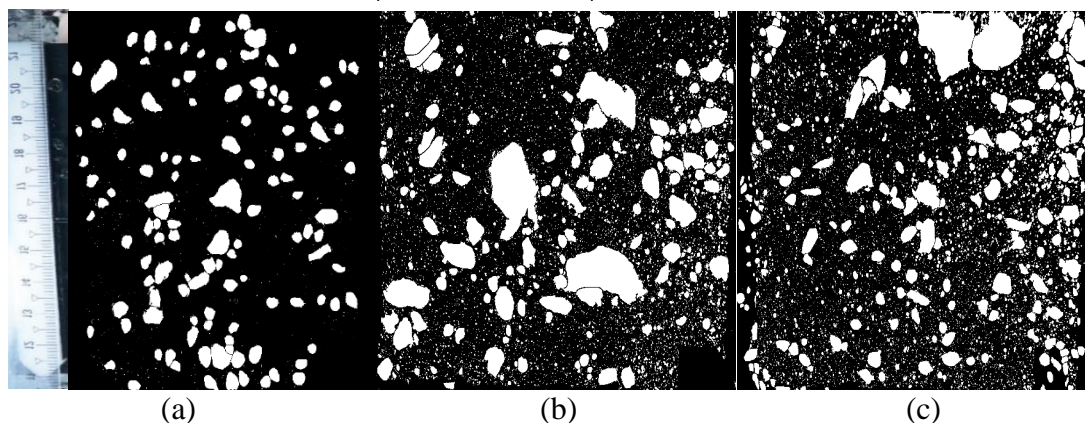
Tabela 16 - Frações de ar adotadas nas simulações com Equações de Balanço Populacional

ϕ_{ar} (vvm)	Fase	Faixa total distribuição (mm)	Total de cada fase (%)	Fração volumétrica cada fase	Intervalo usado (mm)	% acumulada	% na fase
1	air ₁	1,0-3,14	50,40	0,5040	1,0-2,0	9,41	18,68
					2,01-3,14	40,96	81,32
	air ₂	3,15-7,94	49,60	0,4960	3,15-5,0	27,68	55,77
					5,01-7,94	21,95	44,23
	air ₁ + air ₂	1,0-12,0	100	-	-	-	-
3	air ₁	0,61-3,87	95,08	0,9508	0,61-1,93	86,30	90,76
					1,94-3,87	8,77	9,24
	air ₂	3,88-8,9	4,92	0,0492	3,88-5,45	2,95	59,96
					5,46-8,9	1,98	40,04
	air ₁ + air ₂	0,5-12,0	100	-	-	-	-
5	air ₁	0,49-4,01	97,53	0,9753	0,49-2,0	92,53	94,87
					2,01-4,01	5,00	5,13
	air ₂	4,02-9,23	2,47	0,0247	4,02-6,50	1,71	69,23
					6,51-9,23	0,76	30,77
	air ₁ + air ₂	0,3-9,23	100	-	-	-	-

Fonte: O autor (2022).

Após o tratamento das imagens pelo *ImageJ*, foram obtidas as distribuições de bolhas para as vazões analisadas, conforme disposto na Figura 48 (a) a (c). Observa-se que, à medida em que a vazão específica de ar aumenta, o comportamento das bolhas torna-se mais caótico e formam-se mais bolhas de menores diâmetros.

Figura 48 - Distribuição de Tamanho de Bolhas para as vazões de (a) $\phi_{ar}= 1$ vvm, (b) $\phi_{ar}= 1$ vvm e (c) $\phi_{ar}= 5$ vvm.



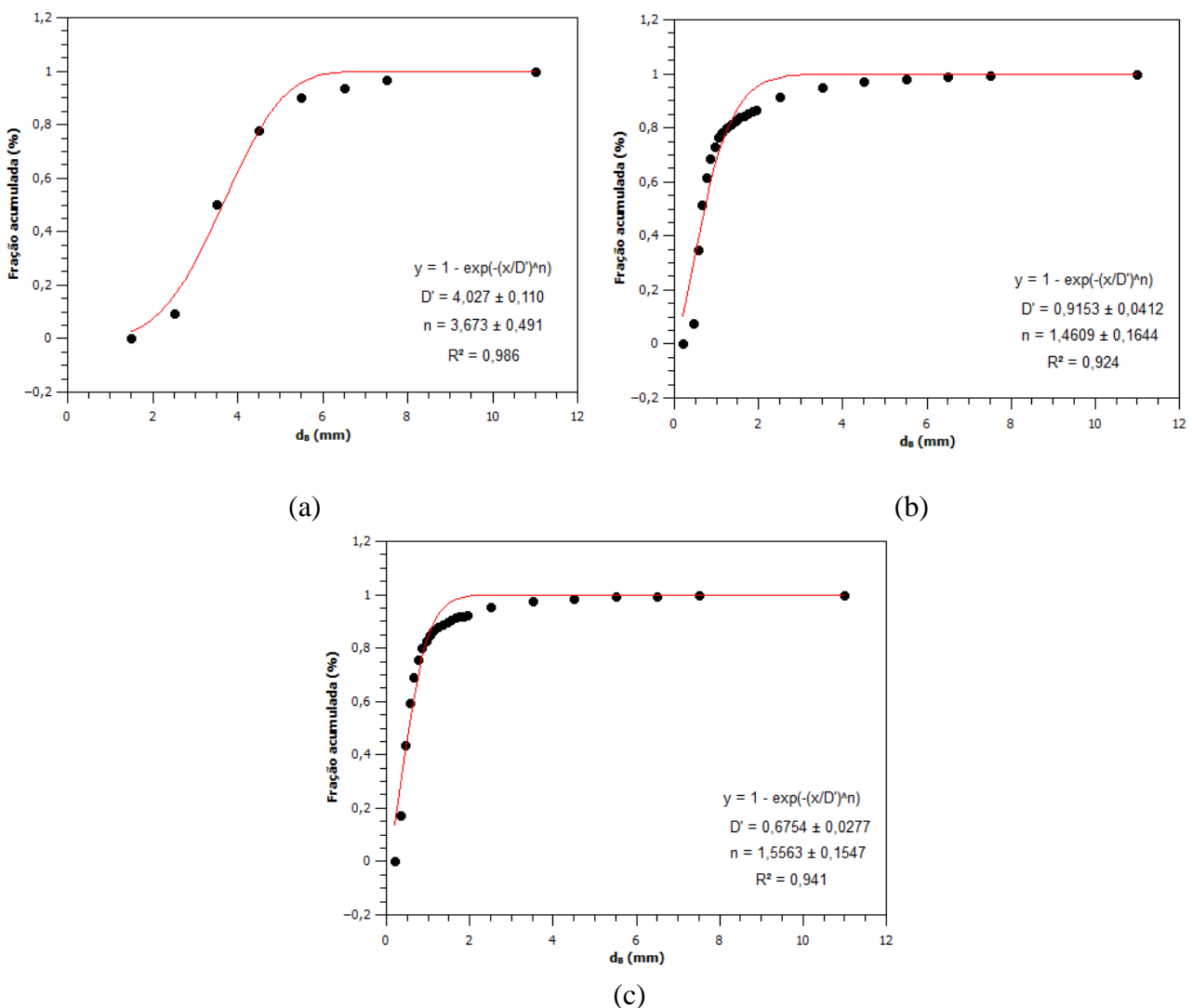
Fonte: O autor (2022).

O método experimental utilizado para a verificação da distribuição de tamanho de bolhas considera somente um plano do equipamento, o que pode ter influenciado nos altos

valores para o diâmetro de Sauter para as vazões de 3 e 5 vvm, visto que não é ponderado todo o volume do biorreator, podendo haver sobreposições de imagens, além da perda de dados em outros pontos do equipamento. Assim, ao analisar as imagens por meio do *software ImageJ*, uma bolha pode ter se sobreposto a outra, criando uma sombra que induz a percepção de que há somente uma bolha maior, fazendo com que os dados exportados pelo programa demonstre diâmetros máximos muito altos, aumentando a discrepância entre os valores máximos e mínimos de diâmetros da imagem, influenciando diretamente no cálculo do diâmetro médio de Sauter para determinada vazão.

Os ajustes realizados por meio do modelo de regressão RRB para a distribuição de bolhas experimental são demonstrados nas Figuras 49 (a) a (c), para as vazões de 1, 3 e 5, respectivamente.

Figura 49 - Ajuste da distribuição de bolhas experimental pelo Modelo RRB para as vazões específicas de ar de: (a) 1 vvm; (b) 3 vvm e (c) 5 vvm.



Fonte: O autor (2022).

Verifica-se, por meio das figuras que o modelo RRB ajustou bem os pontos experimentais, sendo os diâmetros (D_{63}) encontrados após o ajuste de 4,027, 0,9153 e 0,6754, ou seja, 63% das bolhas presentes na distribuição apresentaram valores inferiores aos encontrados para D_{63} , estando este comportamento condizente com o esperado, em especial para as maiores vazões, pois o aumento da velocidade de entrada de ar nos orifícios do aspersor ocasiona uma diminuição do tamanho das bolhas, devido à grande turbulência no local, o que favorece o fenômeno de quebra, estando a maior porcentagem de distribuições acumuladas para as vazões de 3 e 5 vvm, concentradas nos tamanhos de bolhas menores que 1 mm.

O diâmetro médio de Sauter é uma das principais propriedades avaliadas na distribuição de tamanho de partículas, pois permite mensurar a acurácia da distribuição do tamanho de diâmetros nas fases delimitadas no modelo de balanço populacional, ou seja, se o diâmetro médio de Sauter está errado, os kernels certamente estarão incorretos. O diâmetro de Sauter é frequentemente a média de tamanho de bolha mais útil para o biorreator coluna de bolhas, sendo que maiores diâmetros geram bolhas com maior empuxo, o que leva a maiores velocidades. Para os casos estudados, o diâmetro médio de Sauter após 5 segundos de simulação para as fases ar_1 e ar_2 , estão descritos na Tabela 17.

Tabela 17 – Diâmetros médios de Sauter para as simulações utilizando o modelo acoplado CFD-PBM após um tempo de real de simulação de 5 s.

Casos Simulados								
Vazão específica de ar (Φ_{ar})	EBP		EBP-B		EBP-C		EBP-BC	
	ar_1	ar_2	ar_1	ar_2	ar_1	ar_2	ar_1	ar_2
1	1,49	4,78	1,50	4,79	1,48	4,22	1,69	4,38
3	2,57	5,91	2,60	6,56	2,27	4,54	2,46	4,83
5	2,80	6,39	2,82	6,69	2,67	4,56	2,77	5,35

Fonte: O autor (2023).

Após o tempo de simulação utilizado, observa-se que, para todos os casos, houve um aumento do diâmetro médio de bolha com o aumento da velocidade superficial de gás (representada na tabela pela vazão específica de ar), o que pode retratar que, para o sistema estudado, há uma maior influência do efeito de coalescência. Observa-se também, que para o caso EBP, sem a consideração de interações, a fase ar_2 , a qual contém bolhas maiores, demonstrou valores numéricos próximos àquele encontrado

experimentalmente para as vazões de 1, 3 e 5 vvm. Para o caso EBP-BC, simulações que consideraram tanto as interações de quebra quanto de coalescência, para a fase ar₂ os valores para o diâmetro de Sauter apresentaram um maior ajuste em relação aos valores encontrados experimentalmente, sugerindo que os diâmetros mínimo e máximo desta fase estão condizentes com os dados experimentais. Quanto aos valores encontrados para a fase ar₁, ou seja, fase contendo os menores diâmetros, para todos os casos simulados, os diâmetros médios de Sauter permaneceram na faixa delimitada para esta fase, demonstrando conformidade com a distribuição de tamanho de bolhas determinado experimentalmente.

Pohorecki *et al.* (2005) utilizaram fluidos newtonianos de baixa viscosidade operados em reatores coluna de bolhas para analisar o diâmetro. Os autores observaram que houve uma redução de d_B com o aumento da velocidade superficial de gás (U_{GR}). Em relação à escala do biorreator, Akita & Yoshida (1974) utilizaram um reator coluna de bolhas de seção quadrada, assim como utilizado no presente estudo, no qual o diâmetro da coluna apresentou influência direta sobre d_B em fluidos newtonianos de 0,58 a 21,14 cP.

A Tabela 18 apresenta os diâmetros médios de Sauter encontrados utilizando os dados obtidos experimentalmente por meio da análise das imagens e os diâmetros médios obtidos após as simulações com modelo acoplado CFD-PBM.

Tabela 18 - Diâmetros de Sauter encontrados para as vazões de 1, 3 e 5 vvm.

Vazão específica de ar (ϕ_{ar})	Experimental	EBP	EBP-B	EBP-C	EBP-BC
1	5,22 ± 2,24	4,78	3,14	2,85	3,03
3	5,18 ± 2,12	4,24	4,58	3,41	3,65
5	5,05 ± 2,011	4,59	4,75	3,62	4,06

Fonte: O autor (2022).

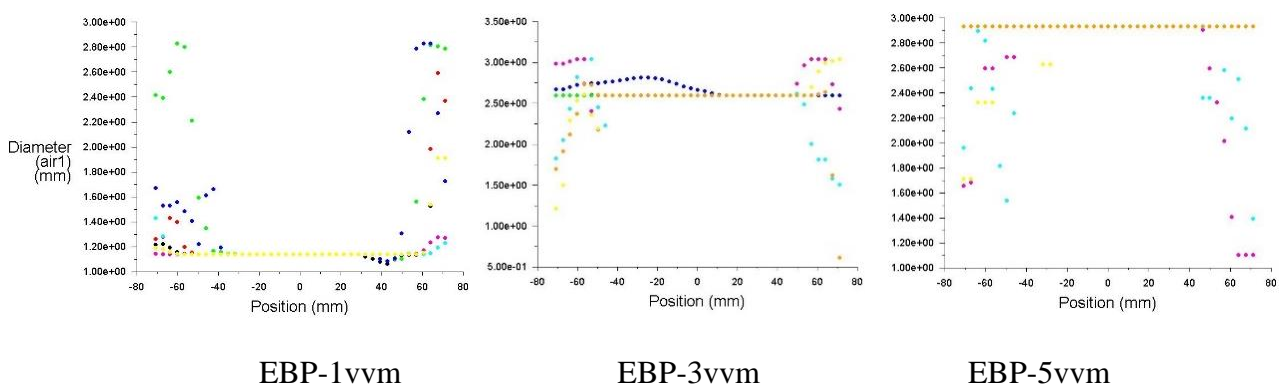
Observa-se que há uma diferença entre os valores encontrados através dos dados experimentais e os valores obtidos por meio das simulações CFD-PBM para os casos em que se considerou as interações de quebra e/ou coalescência. Tal diferença pode estar relacionada ao fato de que, para o cálculo do diâmetro médio de Sauter utilizando os dados experimentais, as bolhas com diâmetros maiores exercem um peso maior na equação utilizada, ou seja, ainda que existe uma quantidade considerável de bolhas

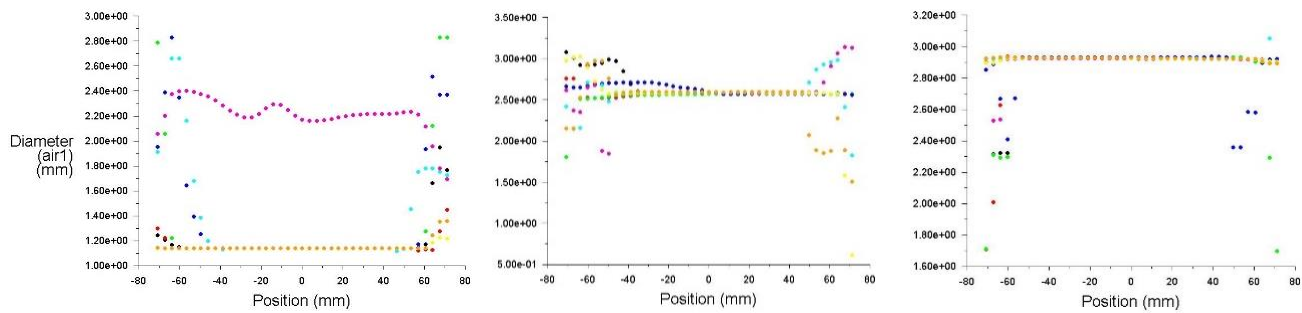
pequenas, sua influência é muito menor que aquela exercida por uma baixa quantidade de bolhas grandes, fazendo com que o valor encontrado para o diâmetro de Sauter esteja divergente daquele encontrado após o ajuste. Além disso, tal comportamento também faz com que o valor deste diâmetro médio esteja divergente do valor esperado para os casos com maiores vazões, visto que, 80% da distribuição de bolhas para as vazões de 3 e 5 vvm encontram-se localizada na faixa de diâmetros menores.

Mendes (2016) avaliou o diâmetro médio da bolha em três modelos de biorreatores pneumáticos (coluna de bolhas, *airlifts* de duto concêntrico e *split cylinder*) e duas escalas (5 e 10 L) utilizando a água como fase contínua, e obteve como resultado diâmetros variando entre cerca de 4,8 e 6,6 mm, corroborando com os valores encontrados neste estudo. Além disso, a autora observou que os valores de d_B foram maiores em reatores *airlift*, sendo observado este comportamento em 60% dos tratamentos com reatores de 5 L e 90% em reatores de 10 L. Quanto à escala do equipamento, foi observado que, para a água, 73% dos tratamentos apresentaram maiores valores de d_B em reatores de 10 L.

A Figura 50 mostra os diâmetros para as fase ar_1 e ar_2 em função da posição no biorreator, sendo utilizadas as posições $y= 25, 50, 100, 150, 200, 250, 300$ e 326 mm do plano de simetria axial.

Figura 50 – Diâmetro de bolhas (d_B) em função posição (mm) no biorreator coluna de bolhas operando na vazão de de alimentação de ar $\phi_{ar} = 1, 3$ e 5 vvm para: (a) fase ar_1 e (b) fase ar_2 dos casos estudados.

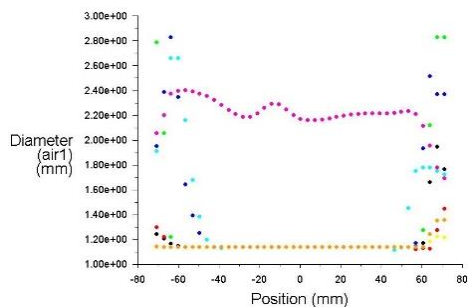




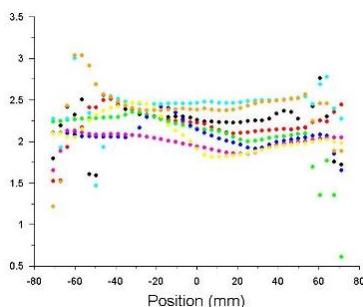
EBP-B-1vvm

EBP-B-3vvm

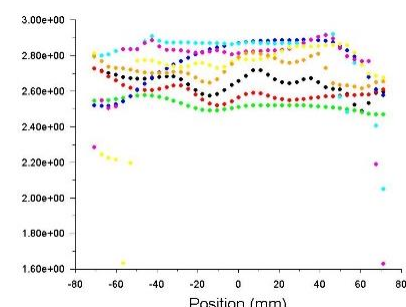
EBP-B-5vvm



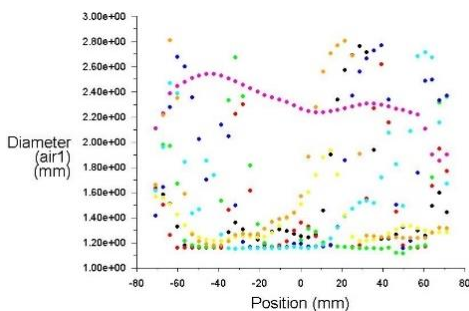
EBP-C-1vvm



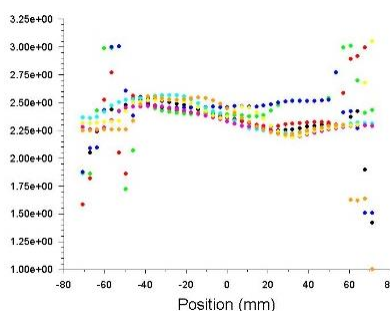
EBP-C-3vvm



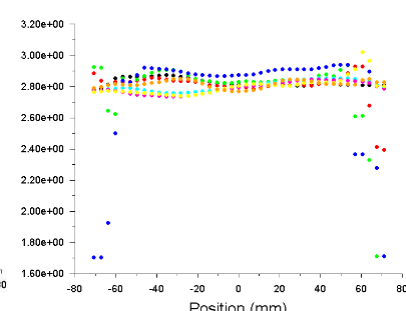
EBP-C-5vvm



EBP-BC-1vvm

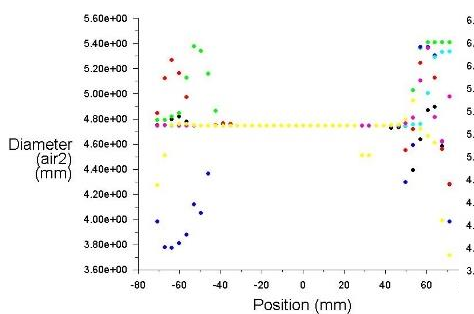


EBP-BC-3vvm

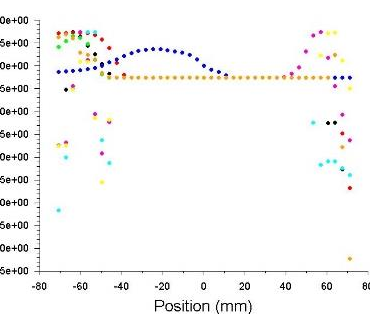


EBP-BC-5vvm

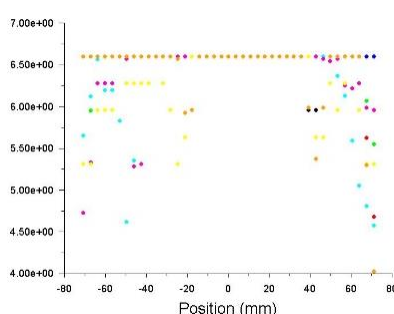
(a)



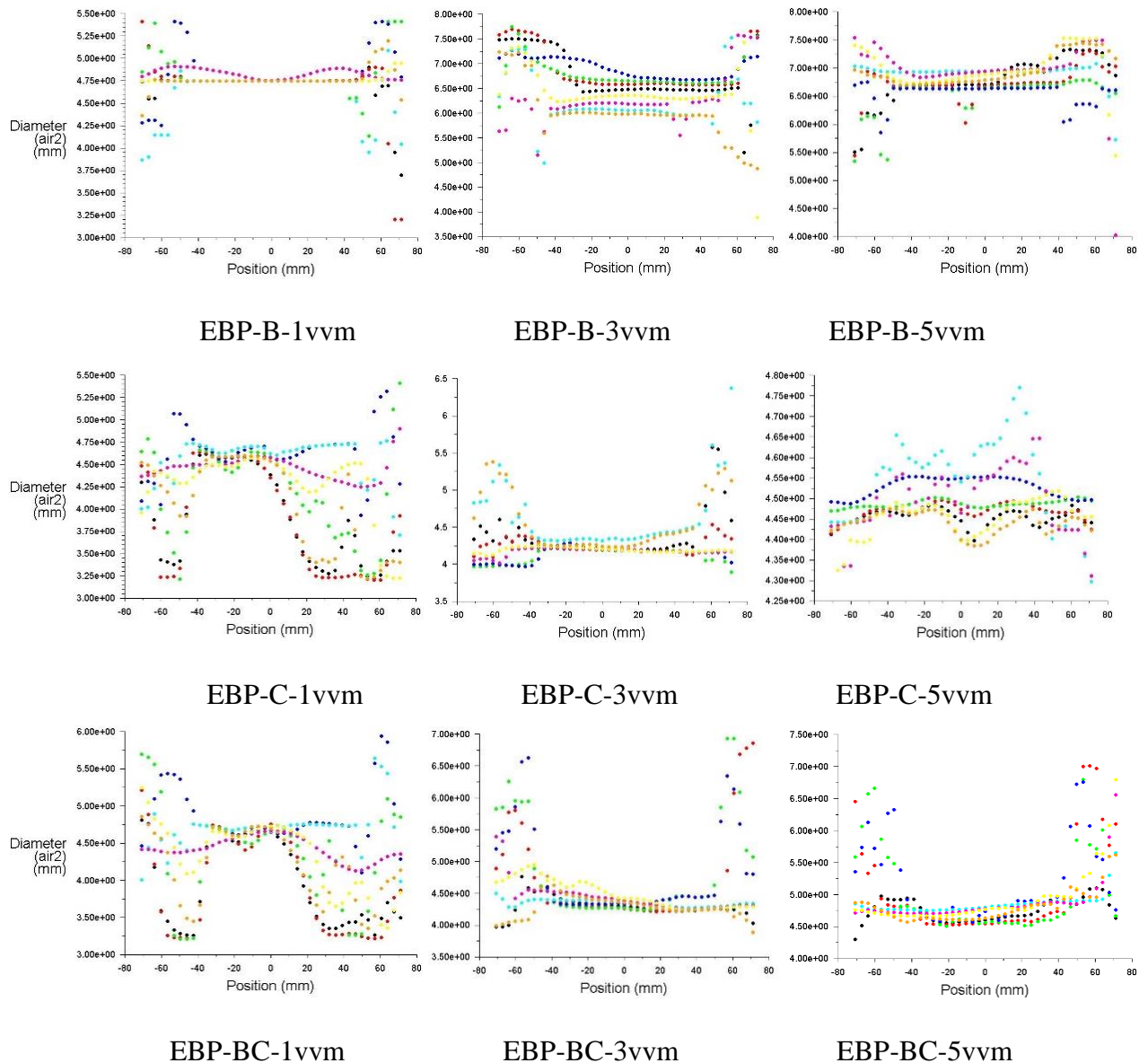
EBP-1vvm



EBP-3vvm



EBP-5vvm



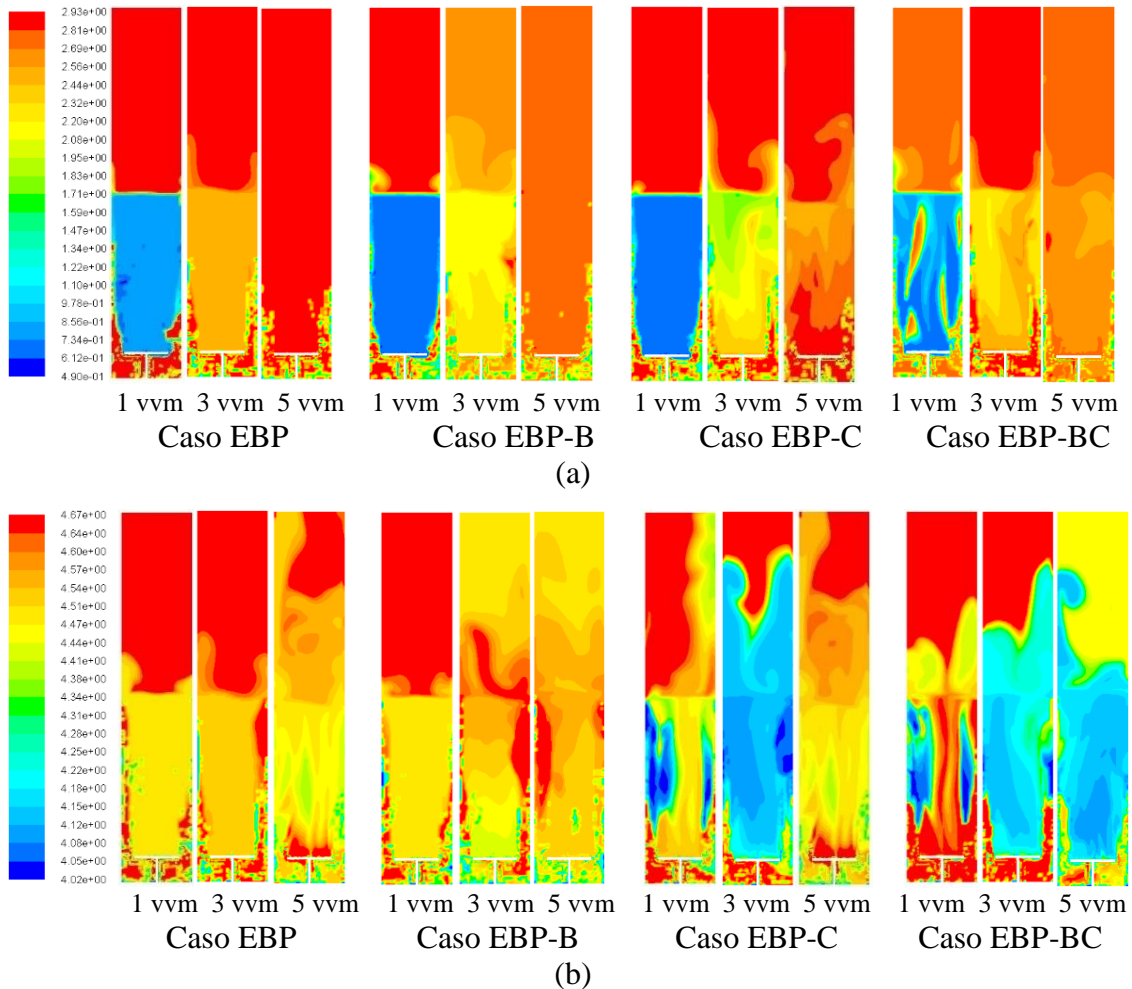
(b)

Fonte: O autor (2023).

Observa-se, analisando a Figura acima, que a medida que a vazão aumenta, as bolhas formadas tornam-se maiores, para ambas as fases dispersas (ar_1 e ar_2), porém este crescimento ocorre dentro da faixa delimitada para cada uma. À medida que a posição analisada aumenta axialmente, maiores as bolhas encontradas. O diâmetro médio de Sauter (d_{32}) é um parâmetro de projeto importante, pois define a área interfacial gás-líquido disponível para transferência de massa dentro do biorreator coluna de bolhas. Desta forma, existem diversos fatores que influenciam este diâmetro e, conseqüentemente, a formação de bolhas, incluindo as propriedades físico-químicas de ambas as fases, tais como a tensão superficial, viscosidade do líquido e densidade do líquido e do gás (Sarhan

et al., 2018). A Figura 51 demonstra o perfil de distribuição espacial da formação das bolhas para ambas as fases, ar_1 e ar_2 .

Figura 51– Distribuição espacial dos diâmetros de bolhas no biorreator coluna de bolhas operando na vazão de $\phi_{ar} = 1, 3$ e 5 vvm para (a) Fase ar_1 (b) Fase ar_2 .



Fonte: O autor (2023).

Corroborando com os dados apresentados pela Figura 50, a análise qualitativa da distribuição de tamanhos de diâmetros, demonstra que as maiores bolhas estão contidas nas porções mais altas da coluna, representada pela cor vermelha nas Figuras acima. Além disso, conforme se aumenta a velocidade de injeção de gás (aqui apresentada pela vazão em vvm), maiores são as bolhas formadas.

É possível verificar também, por meio da Figura 51, que para o modelo sem interação (EBP) e para a fase dispersa ar_1 , ou seja fase em que estão contidas as menores bolhas, em especial para a vazão de 5 vvm, há a formação de bolhas, porém não há um perfil delineado devido à ausência de modelos de quebra e coalescência nas simulações iniciais. Ainda assim, observa-se que a fase com bolhas maiores (Figura 51(b)) possui um

perfil mais ascendente, visto que bolhas maiores possuem maior velocidade. A fase ar_1 , possui um perfil com formação de bolhas mais próxima ao aspersor, sendo este comportamento condizente com o verificado para a caso real. Devido ao alto valor da retenção gasosa global encontrado na região próxima à entrada de gás, o resultados indicam que as bolhas se dissipam mais eficientemente ao longo da altura do biorreator, sendo este comportamento mais evidenciado para os casos em que ambos os efeitos, de quebra e coalescência (casos EBP-BC), foram considerados nas simulações.

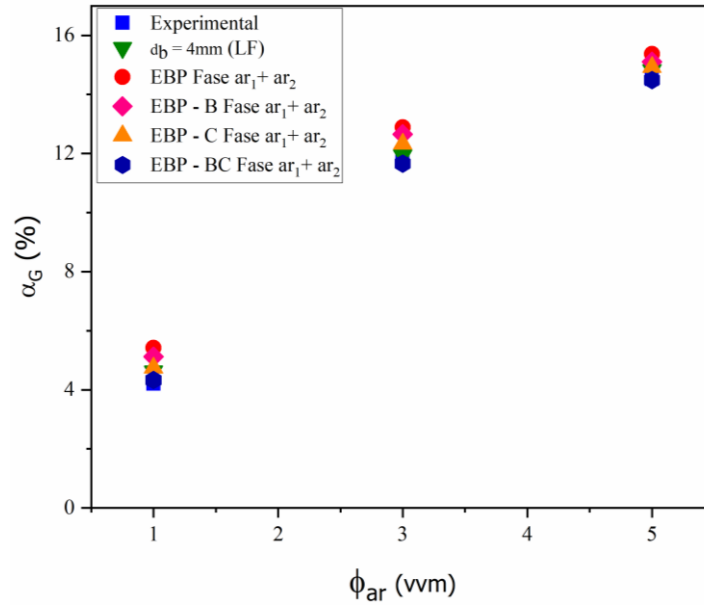
As simulações nas quais foram utilizadas as equações de balanço populacional buscaram demonstrar a influência dos fenômenos de quebra e coalescência nos parâmetros hidrodinâmicos e na distribuição de ar no interior do biorreator, por meio dos modelos turbulento e de Laakkonen, respectivamente. Para o modelo de quebra de bolhas, considerou-se a quebra binária, em que uma bolha se quebra e origina duas bolhas de diâmetros menores.

5.4.2 Retenção Gasosa ($\bar{\alpha}$)

Os resultados das simulações em termos de retenção gasosa global total ($\bar{\alpha}$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) estão resumidos na Figura 52, para os casos EBP, EBP-B, EBP-C e EBP-BC, sendo comparados aos resultados numéricos (caso LF4-1 – LF4-5) e obtidos experimentalmente.

A retenção gasosa foi obtida por simulação CFD acoplada às Equações de Balanço Populacional (EBP) e os resultados comparados aos dados experimentais e previamente simulados sem estas equações, ou seja, considerando um diâmetro médio e constante. Os resultados encontrados para as simulações que consideram um diâmetro médio e constante apresentaram uma boa concordância com os dados experimentais, confirmando a confiabilidade da simulação. O diâmetro de Sauter que apresentou os melhores resultados foi o de 4 mm, sendo estes comparados aos resultados obtidos para as simulações que utilizaram o modelo acoplado CFD – EBP.

Figura 52 – Retenção gasosa total ($\bar{\alpha}$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para os modelos de balanço populacional.

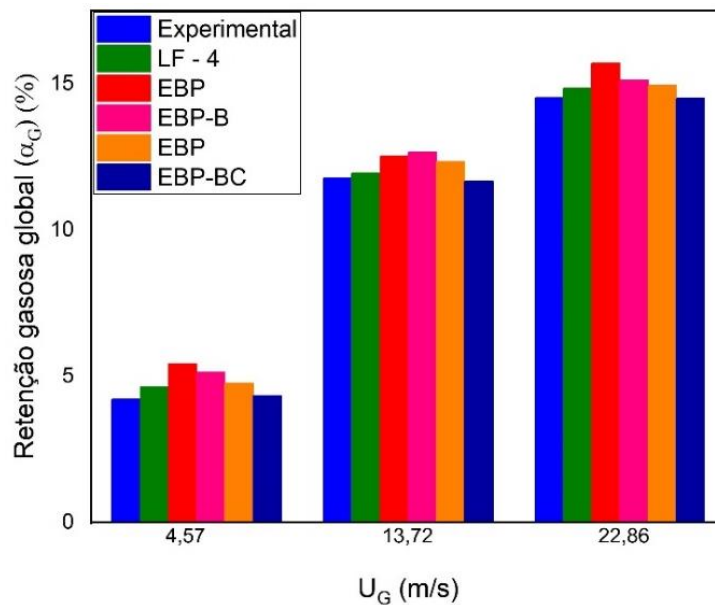


Fonte: O autor (2023).

De acordo com a Figura 52, é possível observar que a inclusão do modelo de balanço populacional nas simulações, sem a consideração dos fenômenos de quebra e/ou coalescência, resultou em valores de retenção gasosa próximas aos valores encontrados para as simulações em que se considerou a inclusão da força de sustentação e um diâmetro de 4mm (casos LF4-1 a LF4-5). As simulações em que os efeitos de quebra ou coalescência foram incluídos no modelo de balanço populacional apresentaram valores mais próximos aos encontrados experimentalmente, sendo que as simulações que consideraram a inclusão somente do efeito de coalescência nas equações de balanço populacional, apresentaram resultados mais próximos aqueles encontrados experimentalmente.

Para as simulações em que ambos os efeitos foram considerados (casos EBP-BC), os resultados demonstraram um maior ajuste em relação aos dados obtidos experimentalmente, com valores percentuais de 4,33, 11,66 e 14,49 para as velocidades de injeção de ar de 4,57, 13,72 e 22,86 m/s, respectivamente. Para uma melhor visualização dos resultados, a Figura 53 apresenta os valores obtidos nas simulações utilizando os modelos de balanço populacional em forma de barras, sendo estes valores comparados aos dados experimentais e obtidos numericamente para um diâmetro médio e constante de 4 mm, utilizando a força de sustentação (casos LF4-1 a LF4-5).

Figura 53 - Retenção gasosa ($\bar{\alpha}$) para o biorreator coluna de bolhas em função da velocidade de injeção de ar.



Fonte: O autor (2023).

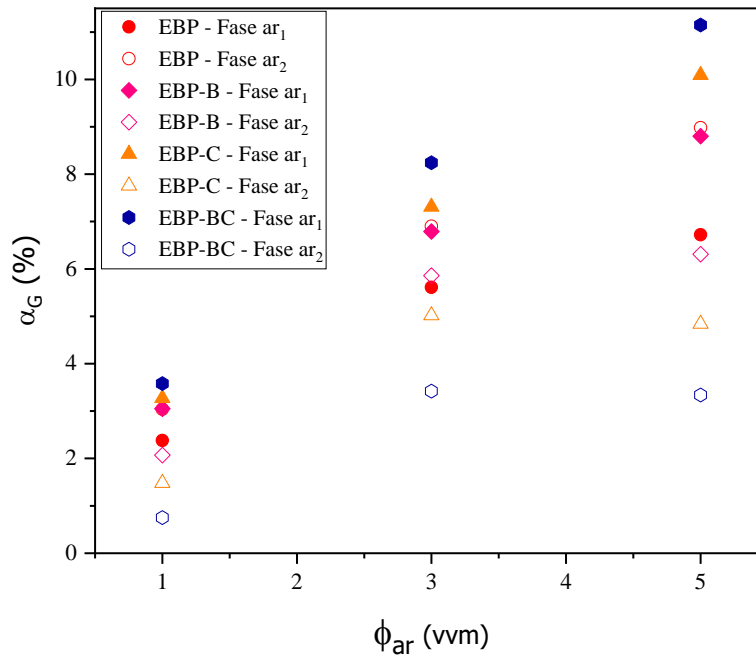
Por meio desta Figura, é possível observar que o valor da retenção gasosa para a simulação que considerou o acoplamento dos modelos CFD-EBP exibiu valores próximo aqueles previamente encontrados para a mesma velocidade de injeção de gás, considerando o tempo total de simulação de 5 segundos.

A velocidade do gás (U_G) é o parâmetro operacional mais importante em um reator coluna de bolhas. Sabe-se que seu efeito na retenção gasosa global é atribuído a um aumento na quantidade de gás alimentado na coluna, fazendo com que para maiores velocidades ocorra uma recirculação mais forte, resultando em uma maior dispersão das bolhas pela coluna e em maiores valores de retenção gasosa. Em regimes heterogêneos, a retenção gasosa para as bolhas maiores aumenta significativamente, porém para a fase contendo bolhas menores, seu valor é pouco alterado. A não consideração das interações de quebra e coalescência no modelo acoplado CFD-EBP, demonstrou valores próximos aos encontrados para os casos em que se considerou um diâmetro médio e constante, comprovando a funcionalidade do modelo.

Em relação ao comportamento desta variável para cada fase dispersa, a Figura 54 demonstra os resultados em termos da vazão específica de ar, para as fases ar_1 e ar_2 dos casos simulados utilizando os modelos de balanço populacional. Uma vez que as bolhas

maiores possuem um forte efeito de aceleração da pluma, a força de arrasto acaba decrescendo e retardando o aumento de $\bar{\alpha}_G$ para a fase ar_1 , a qual contém as menores bolhas, com o aumento de U_G .

Figura 54 - Retenção gasosa ($\bar{\alpha}$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para as fases ar_1 e ar_2 dos modelos de balanço populacional.



Fonte: O autor (2023).

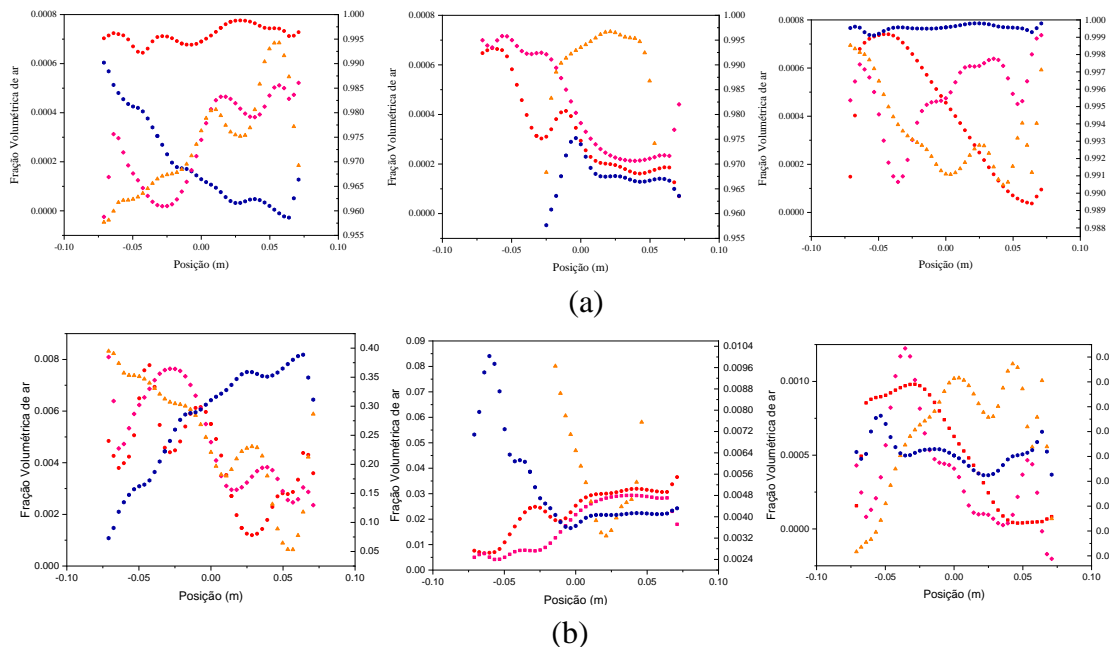
Observa-se que, quando não há inclusão dos efeitos de quebra e coalescência (caso EBP), o maior valor deste parâmetro é encontrado para a fase ar_2 , a qual concentra as maiores bolhas. Todavia, ao incluir a quebra (caso EBP-B) ou a coalescência (caso EBP-C) nas equações de balanço populacional, este comportamento muda, e as maiores frações volumétricas de ar são encontradas na fase ar_1 , a qual engloba os menores diâmetros de bolha. Tal comportamento pode ser justificado, em especial para as maiores vazões, pelo fato de que a maior porcentagem total de fração volumétrica está contida para a fase ar_1 , apresentando um valor de 97,53% para a vazão de 5 vvm.

As Figuras 55 (a) e 55 (b) demonstram a distribuição da fração volumétrica das fases ar_1 e ar_2 , na posição $y = 515$ mm do plano de simetria axial yz do biorreator. A posição $y = 515$ mm foi selecionada devido ao fato da altura inicial do líquido ser de 510 mm, e essa ser uma posição mais próxima da interface gás-líquido, ou seja, mais próxima

da região da dispersão, sendo os dados de fração volumétrica obtidos após o tempo real de simulação de 5 segundos, para as vazões de 1, 3 e 5 vvm.

Por meio das Figuras, é possível observar que, corroborando com os resultados descritos anteriormente, quando não há interação, a fase ar₁ apresenta os maiores valores de retenção gasosa global e, ao inserir interações de quebra ou coalescência, a fase ar₂ passa a apresentar maiores frações volumétricas, levando assim a maiores valores para este parâmetro. Para o caso EBP-BC, ou seja, quando considerados ambos os efeitos de quebra e coalescência, as maiores frações volumétricas foram encontradas para a fase ar₂, na qual está contida a maior faixa de bolhas.

Figura 55 - Retenção gasosa ($\bar{\alpha}$) em função posição (mm) no biorreator coluna de bolhas operando com vazão de alimentação de ar $\phi_{ar} = 1, 3$ e 5 vvm para (a) Fase ar₁, (b) Fase ar₂ para os casos (●) EBP, (◆) EBP-B, (▲) EBP-C e (●) EBP-BC



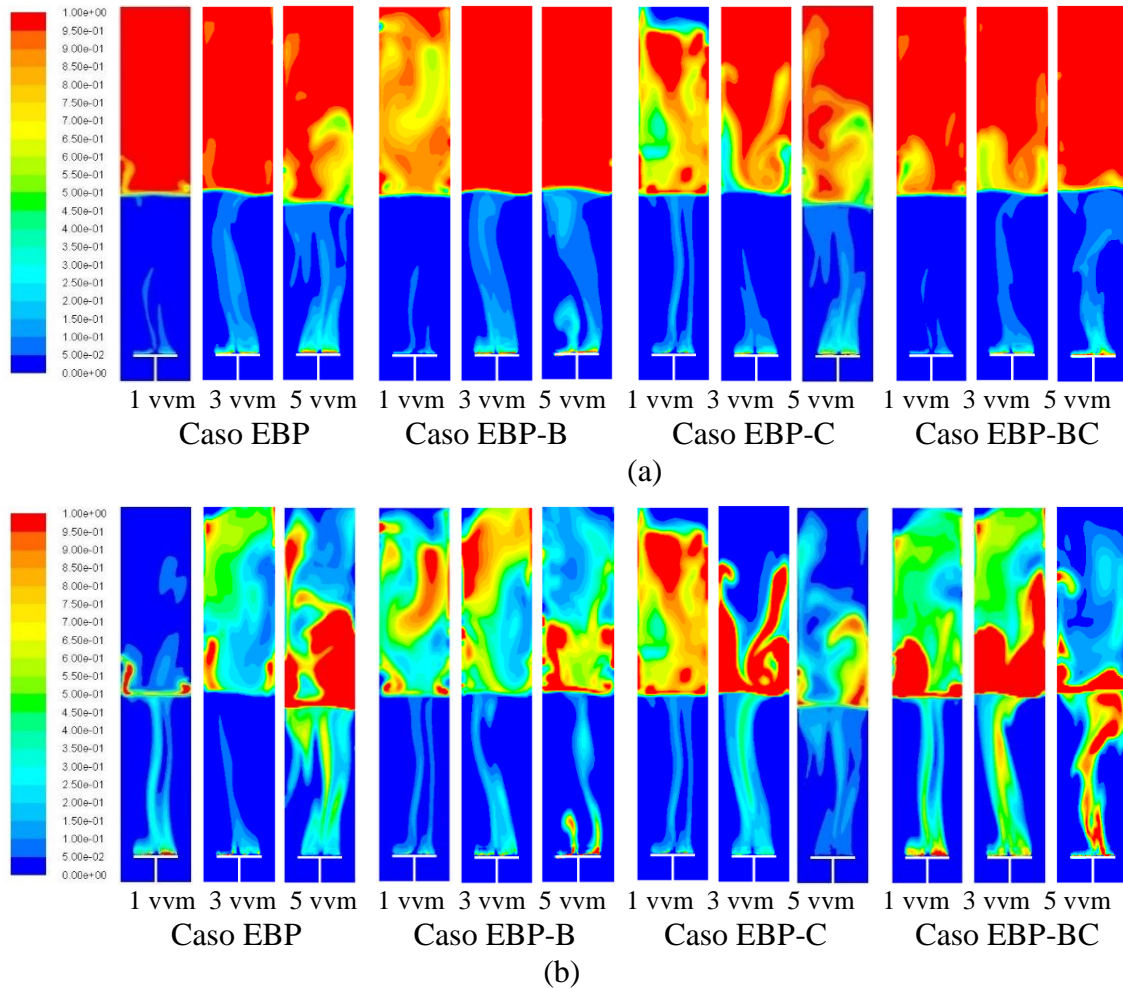
Fonte: O autor (2023).

Nos casos simulados com um diâmetro médio fixo e constante, observou-se que, com a inserção da força de sustentação, houve uma homogeneização do escoamento, com um perfil mais organizado e bem distribuído. Quando inseridas as equações de balanço populacional no modelo matemático, observa-se que, para o tempo de simulação analisado, as bolhas menores (fase ar₁) estão mais concentradas na região próxima ao aspersor, enquanto que as bolhas com maiores diâmetros (fase ar₂) possuem uma dispersão mais rápida. Além disso, devido a consideração da força de sustentação no modelo matemático, o escoamento apresenta um perfil mais bem distribuído, assim como nos casos em que considerou-se um diâmetro médio e fixo.

Uma análise qualitativa entre os resultados da retenção gasosa para as fases dispersas também foi realizada. Os resultados dos contornos de fração volumétrica do gás estão ilustrados nas Figuras 56(a) e 56 (b) para as fases ar_1 e ar_2 , respectivamente, e casos EBP, EBP-B, EBP-C e EBP-BC.

Pode-se observar nestas figuras a tendência de movimento do gás para o topo do biorreator. A circulação de gás é mais pronunciada nas regiões próximas ao aspersor para a fase dispersa na qual estão contidas as menores bolhas (fase ar_1) e para o modelo sem interação (casos EBP).

Figura 56 - Distribuições espaciais da fração volumétrica no biorreator coluna de bolhas operando com vazão de alimentação de ar $\phi_{ar} = 1, 3$ e 5 vvm para: (a) Fase ar_1 (b) Fase ar_2 .



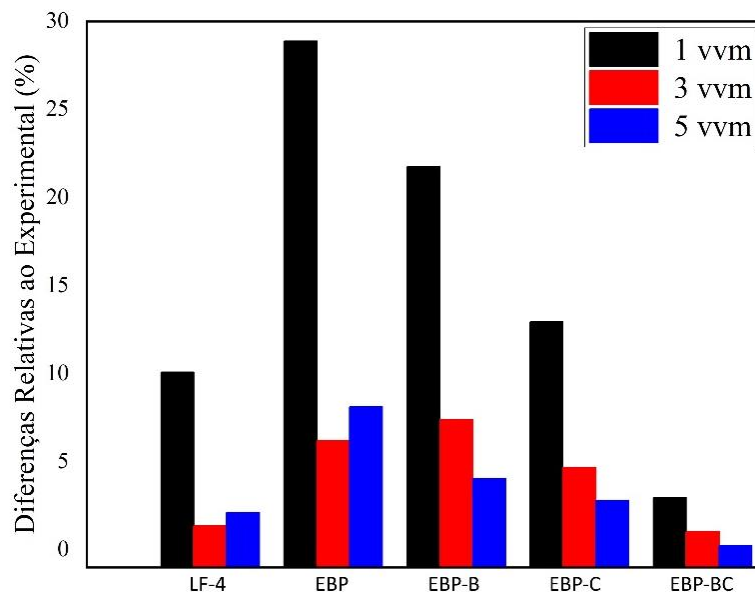
Fonte: O autor (2023).

Quando inserido o modelo de quebra e/ou coalescência nas equações de balanço populacional, o gás passa a se deslocar para as porções mais altas do equipamento, devido a maior movimentação das bolhas. Para a fase com as maiores bolhas (fase ar_2), a circulação de gás demonstra um perfil mais concentrado nas regiões mais altas do

biorreator, devido a maior velocidade das bolhas. As simulações que consideraram as interações de quebra e coalescência no modelo de balanço populacional, apresentaram maior homogeneização do escoamento, com um perfil mais organizado e bem distribuído, estando sua representação mais próxima do observado experimentalmente.

A Figura 57 apresenta as diferenças relativas dos valores numéricos encontrados para as simulações com os modelos de balanço populacional em relação ao experimental.

Figura 57 - Diferenças Relativas para Retenção gasosa ($\bar{\alpha}$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para os modelos de balanço populacional. (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm



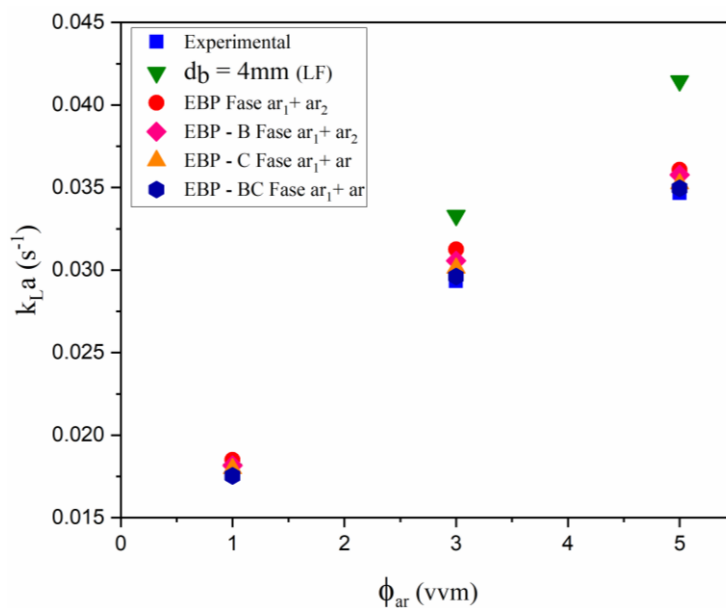
Fonte: O autor (2023).

De acordo com a Figura acima, para as simulações em que não foram consideradas nenhuma interação (casos EBP), as diferenças relativas em relação aos valores experimentais ultrapassam os dados encontrados para as simulações que consideraram um diâmetro médio e constante de 4 mm (LF-4), com valores percentuais de 28,87, 6,19 e 8,11 para as vazões de 1, 3 e 5 vvm. Ao inserir os efeitos de quebra e ou coalescência (casos EBP-B e EBP-C), os valores para as diferenças relativas começam a decrescer, sendo possível observar uma maior predominância dos efeitos de coalescência, os quais apresentaram valores percentuais de 12,94, 4,66 e 2,8 em relação aos experimentais. As menores porcentagens foram encontradas para os casos que consideraram ambos os efeitos (EBP-BC), em especial para as maiores vazões, com valores de 2,95, 1,03 e 0,23%, para as vazões de 1, 3 e 5 vvm, respectivamente.

5.4.3 Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_{La})

Para a avaliação do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{La}), foi utilizado o modelo proposto por Ndiaye *et al.* (2018), sendo os valores encontrados numericamente para os modelos de balanço populacional comparados aos valores experimentais e encontrados nas simulações para um diâmetro médio e constante de 4 mm (LF-4). Os resultados, em termos da vazão específica de ar (ϕ_{ar}), estão sumarizados na Figura 58.

Figura 58 – Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas.



Fonte: O autor (2023).

De acordo com a Figura 58, os resultados obtidos por meio das simulações CFD para o sistema água-ar em biorreator coluna de bolhas, empregando os modelos de balanço populacional, demonstraram concordância em relação aos dados obtidos experimentalmente para todas as vazões estudadas, sendo as melhores previsões observadas para o modelo em que se considerou ambas as interações de quebra e coalescência. O modelo em que tais interações não foram consideradas (caso EBP) apresentou a maior divergência em relação aos pontos experimentais, todavia os resultados numéricos obtidos para este modelo demonstraram um melhor ajuste quando comparado aos dados obtidos para um diâmetro médio e constante (casos LF4-1 a LF4-5) empregado neste estudo.

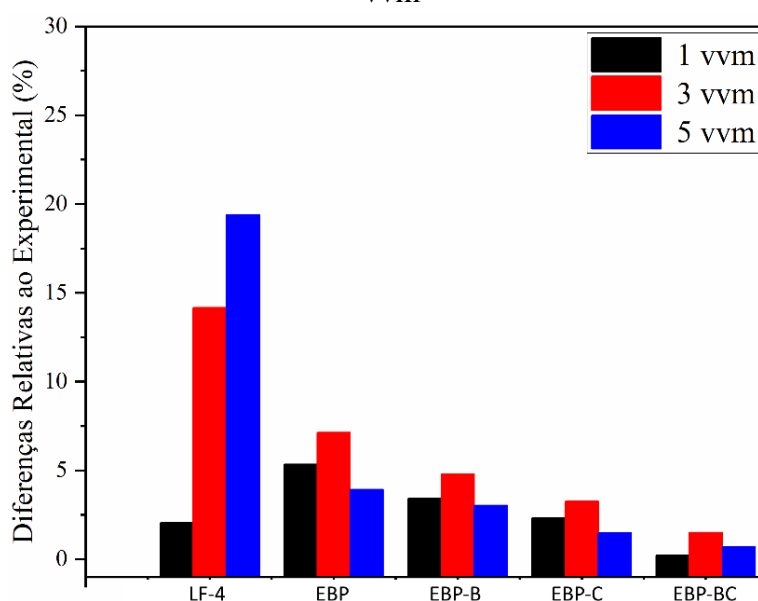
Para os casos em que a interação de quebra foi empregada no modelo de balanço populacional (caso EBP-B), observa-se que foram obtidos valores muito próximos aos

encontrados para o caso sem interações. Quando somente os efeitos de coalescência foram considerados no modelo, os valores numéricos obtidos nas simulações (caso EBP-C), apresentaram maior concordância aos dados experimentais, em especial para a menor vazão empregada. Os valores de k_{LA} , em todas as vazões empregadas, apresentaram as melhores previsões em relação aos dados experimentais, para o modelo de balanço populacional com interações de quebra e coalescência (caso EBP-BC), modelo este que mais se aproxima do caso real, observado experimentalmente.

Conforme dito anteriormente, o parâmetro k_{LA} apresenta uma alta sensibilidade com diâmetro de bolha e, para os casos avaliados neste estudo, foi considerado uma distribuição de tamanho de bolhas no modelo acoplado CFD-PBM. A consideração desta distribuição nas simulações do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio pode ter acarretado na melhor previsão deste parâmetro, visto que o parâmetro "a" é função direta da retenção gasosa global, a qual é fortemente influenciada pela distribuição de tamanho de bolhas, pois a fração de fase é calculada considerando o diâmetro médio global, calculado por meio da média ponderada da massa em todo o volume da coluna.

A Figura 59 apresenta as diferenças relativas para os dados experimentais, realizada por meio do cálculo da média da diferença entre os dados simulados e experimentais.

Figura 59 - Diferenças Relativas para Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_{LA}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para os modelos de balanço populacional. (■) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 3$ vvm, (■) $\phi_{ar} = 5$ vvm



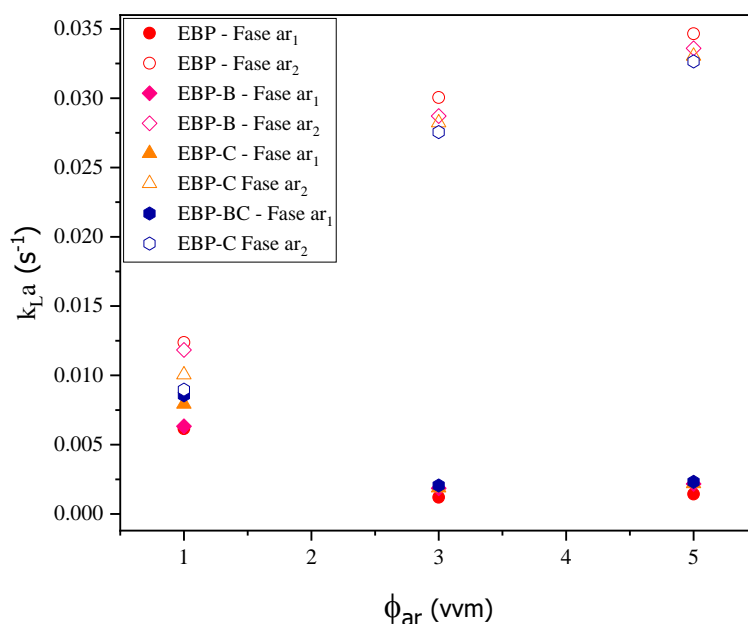
Fonte: O autor (2023).

De acordo com a Figura, as simulações com o modelo acoplado CFD-PBM demonstraram menores diferenças relativas quanto ao experimental, quando comparadas ao modelo que utilizou um diâmetro médio e constante nas simulações (caso LF-4). Para o caso em que não foram consideradas as interações (EBP), para a menor vazão utilizada, a diferença relativa ao experimental foi maior que o caso LF-4. Todavia, ao aumentar a vazão, o modelo de balanço populacional, demonstrou melhores resultados.

Ao inserir nas equações de balanço populacional, os efeitos de quebra e coalescência (casos EBP-B e EBP-C), as diferenças relativas foram inferiores aos casos LF-4 e EBP, com valores percentuais de 3,41, 4,8 e 3,02 para o caso EBP-B e 2,33, 3,26 e 1,47 para o caso EBP-C e vazões de 1, 3 e 5 vvm, respectivamente. As menores diferenças relativas foram encontradas para as simulações que consideram ambos os efeitos (quebra e coalescência), representadas pelo caso EBP-BC, com valores de 0,23, 1,51 e 0,69%. Esses resultados demonstram que o modelo acoplado pode prever com sucesso a tendência de variação de k_{La} com a velocidade do gás, representada aqui pela vazão específica de ar.

Quanto aos resultados para cada fase dispersa, a Figura 60 apresenta estes valores em termos da vazão específica de ar, para as fases ar_1 e ar_2 dos casos simulados utilizando os modelos de balanço populacional.

Figura 60 - Coeficiente Volumétrico de Transferência de Oxigênio (k_{La}) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas para as fases ar_1 e ar_2 dos modelos de balanço populacional.



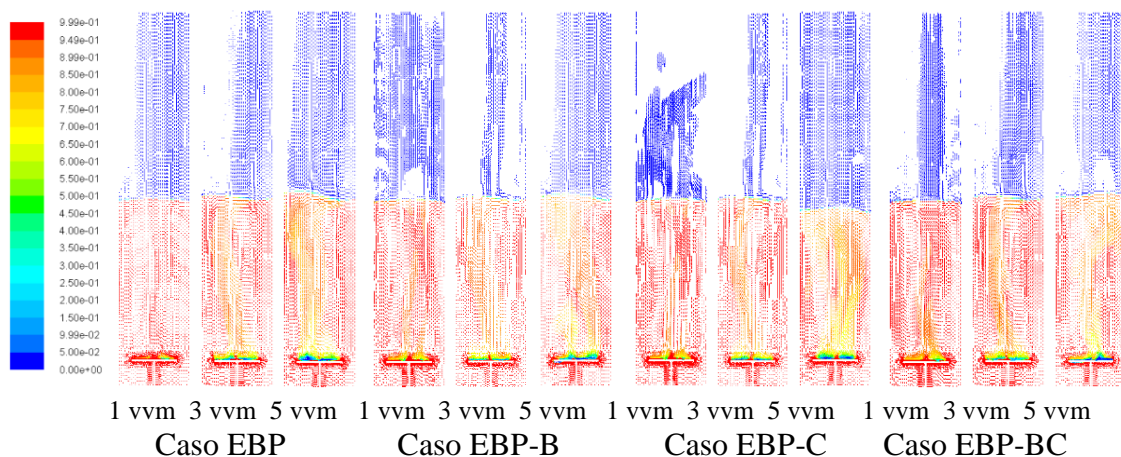
Fonte: O autor (2023).

Para o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio, observa-se um comportamento semelhante ao apresentado pela retenção gasosa global, a qual demonstrou valores superiores para o caso EBP-C. Observa-se que a fase ar_1 , contendo as menores bolhas, demonstra valores previstos de k_{LA} , maiores que a fase dispersa ar_2 . Devido ao fato do parâmetro “a” possuir uma alta sensibilidade às condições operacionais, por ser função direta da retenção gasosa ($\bar{\alpha}$), a fase que contém as maiores bolhas, apresenta menores valores de k_{LA} , pois para esta fase são encontrados menores valores de retenção gasosa global. Além disso, por possuir maior velocidade, as maiores bolhas estão concentradas na porção mais alta da coluna, na qual o valor de k_L é pouco afetado pela vazão de ar.

5.4.4 Taxa de Cisalhamento Média ($\dot{\gamma}_m$)

A taxa de cisalhamento ($\dot{\gamma}$) é um parâmetro que depende do gradiente de velocidade local e das propriedades reológicas do fluido. Assim, com o intuito de averiguar e ilustrar a movimentação da fase líquida provocada pela transferência de quantidade de movimento da fase gasosa (fases ar_1 e ar_2), a Figura 61 apresenta campos vetoriais de velocidade da água, os quais foram obtidos em um plano longitudinal para as vazões específicas de ar de 1, 3 e 5 vvm, ou seja, 10, 30 e 50 L/min, respectivamente.

Figura 61 - Distribuição espacial da velocidade do líquido para o biorreator coluna de bolhas operando na vazão de $\phi_{ar} = 1, 3$ e 5 vvm.



Fonte: O autor (2023).

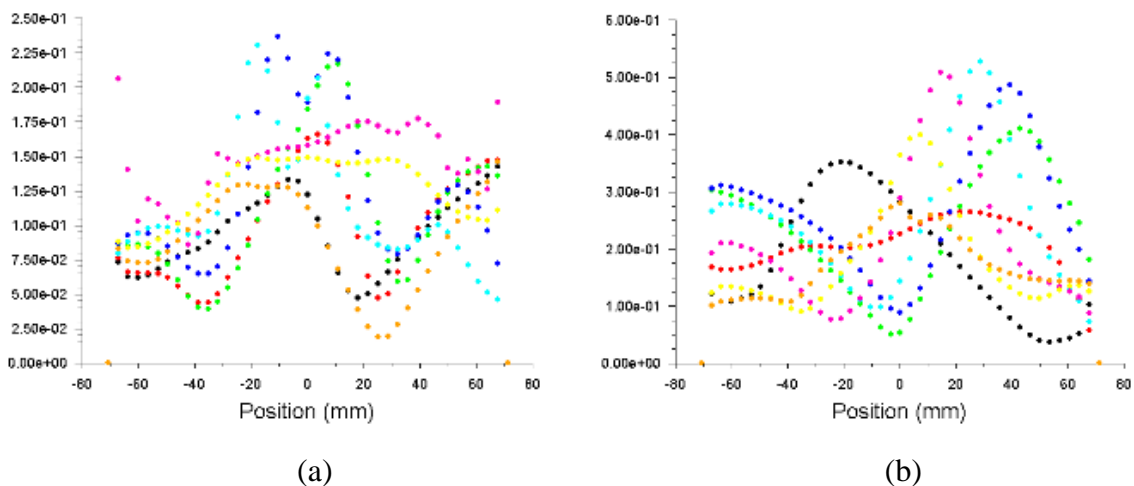
Nestas Figuras, é possível verificar a existência de vórtices turbulentos, os quais definem o comportamento caótico no biorreator coluna de bolhas. Além disso, destaca-se, que na base da coluna, ocorre a "sucção" de porções da fase líquida adjacentes ao aspersor, sendo esta promovida pela baixa pressão dessa região, causada pela alta

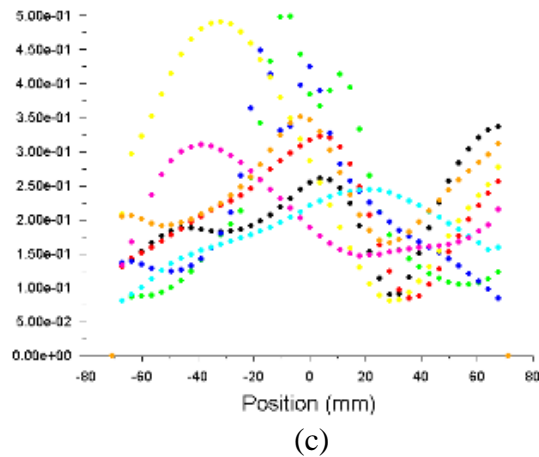
velocidade de injeção do ar. Além disso, a Figura 62 demonstra a fluxo descendente de água ao longo de ambas as paredes do biorreator e o fluxo ascendente na região de entrada de gás.

É possível observar que inicia-se um padrão rotacional no meio da coluna, sendo este padrão mais forte na metade inferior do equipamento, devido aos vórtices turbulentos formados nesta região. Tal padrão de fluxo pode auxiliar na explicação do fato de bolhas menores (fase ar₁) permanecerem na região inferior e central da coluna enquanto as bolhas maiores (fase ar₂) tendem a deslocar-se mais rapidamente para a região superior do biorreator. O fluxo descendente ao longo das paredes ainda é pouco visível devido ao baixo tempo de simulação, todavia, um forte fluxo ascendente no meio da parte inferior da coluna pode ser observado. Este fluxo ascendente tende a derivar em direção à parte superior das paredes, sendo este fluxo mais visível para as vazões mais altas, em especial para os casos em que se consideraram as interações de quebra e coalescência. Este comportamento de mistura é capaz de explicar porque as bolhas se espalham pela porção superior da coluna e, demonstra que, para o sistema estudado, há uma predominância do efeito de coalescência das bolhas.

A Figura 62 ilustra as velocidades do líquido em diferentes posições axiais do biorreator ($y = 25, 50, 150, 200, 250, 300$ e 326 mm) do plano de simetria axial yz , para um tempo total de simulação de 5 segundos, considerando as simulações com ambos os efeitos de quebra e coalescência (casos EBP-BC)

Figura 62 – Velocidade do líquido em função posição (mm) no biorreator coluna de bolhas operando com vazão de alimentação de ar de (a) $\phi_{ar} = 1$ vvm, (b) $\phi_{ar} = 3$ vvm e (c) $\phi_{ar} = 5$ vvm





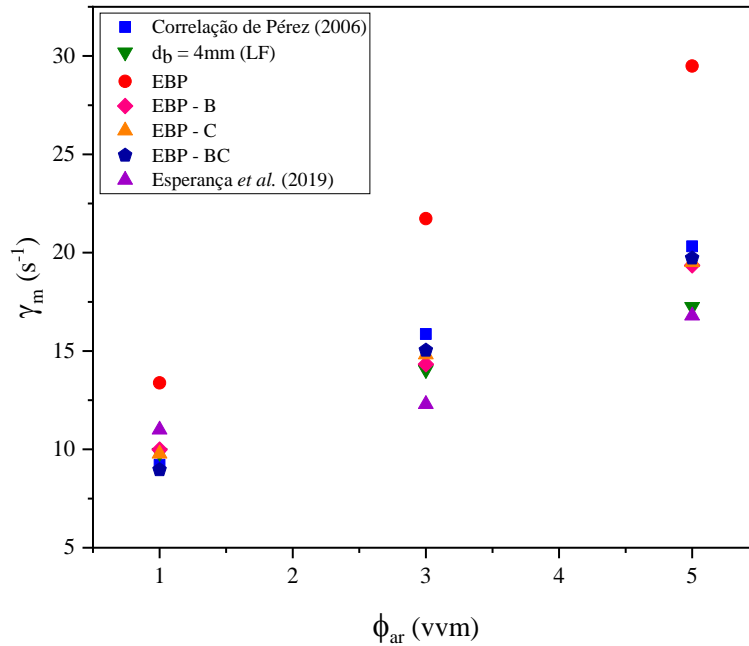
Fonte: O autor (2023).

Observa-se que, corroborando com os dados apresentados pela Figura 61, a velocidade da fase líquida apresenta maiores valores para as alturas próximas ao aspersor, causadas pela “sucção” da fase líquida devido à alta velocidade de injeção de gás, sendo o efeito de aceleração do fluido causado pela troca de quantidade de movimento entre as fases. À medida que a posição aumenta, é possível verificar um comportamento com menores velocidades de líquidos, o qual auxilia na subida mais rápida de bolhas com maiores diâmetros.

A Figura 63 sumariza os dados simulados de taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$), em função da vazão específica de ar, para os modelos de balanço populacional. Os resultados previstos nas simulações são comparados àqueles encontrados por meio de simulações para um diâmetro médio e constante, considerando a força de sustentação no modelo matemático (caso LF-4), aos dados obtidos através de correlação semi-empírica e pelos resultados obtidos por Esperança *et al.* (2019) (com intuito de avaliar a ordem de magnitude do parâmetro).

De acordo a Figura, a inserção das equações de balanço populacional, sem a consideração das interações de quebra e coalescência (caso EBP), acarretaram uma superestimação para a taxa de cisalhamento média, com valores de 13,38, 21,73 e 29,49 s^{-1} , quando comparados aos observados pela estimativa através da Equação 151, que é função da vazão de ar, do consumo de potência e da retenção gasosa obtida a partir de dados experimentais.

Figura 63 – Taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) no biorreator coluna de bolhas.



Fonte: O autor (2023).

Ao inserir os efeitos de quebra no modelo matemático (casos EBP-B) os valores para $\dot{\gamma}_m$ foram de 9,99, 14,33 e 19,36 s^{-1} , sendo estes valores próximos aos encontrados para os casos em que se utilizou um diâmetro médio e constante, com a consideração da força de sustentação (caso LF-4). Para as simulações em que somente o efeito de coalescência foi considerado no modelo (casos EBP-C), os valores para taxa de cisalhamento média demonstraram uma melhor previsão em relação àqueles encontrados por meio da correlação de Pérez (2006), a saber 9,78, 14,82 e 19,51 s^{-1} , para as vazões de 1, 3 e 5 vvm, respectivamente.

Os valores da taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) obtidos por meio do modelo acoplado CFD-PBM à baixa vazão de alimentação de ar (1 vvm) exibiram uma estreita faixa de variação para os casos em que as interações de quebra e/ou coalescência foram consideradas (9,99, 9,78 e XX s^{-1}), sendo que estes valores demonstraram uma boa concordância com os dados estimados pela correlação de Pérez (2006) e com os valores obtidos por Esperança *et al.* (2019) utilizando CFD.

Para as maiores vazões de alimentação de ar (3 e 5 vvm), os casos EBP-B, EBP-C e EBP-BC, ou seja, casos que consideraram as interações no modelo matemático, apresentaram valores de taxa de cisalhamento média inferiores aos estimados por meio da retenção gasosa ($\bar{\alpha}$), utilizando a correlação proposta por Pérez (2006). As simulações

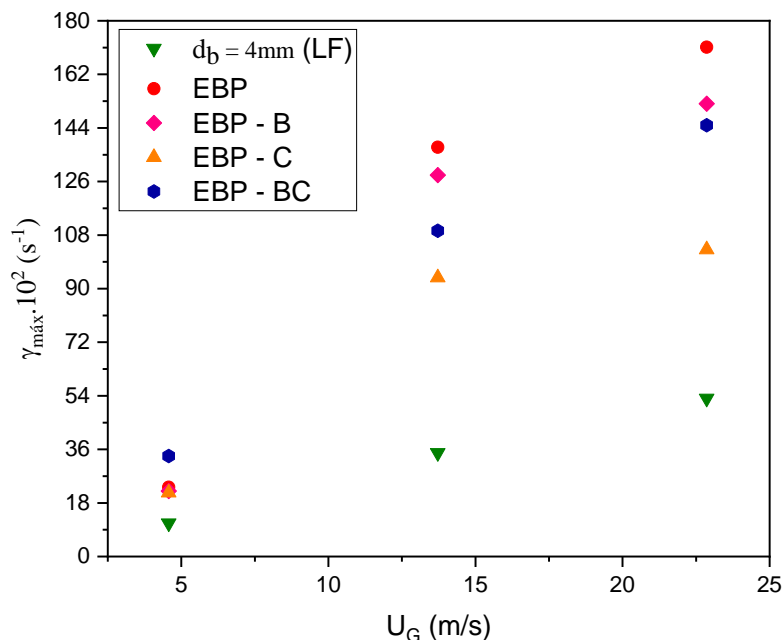
em que as interações de quebra e coalescência foram utilizadas, para as vazões de 1, 3 e 5 vvm, exibiram valores de $\dot{\gamma}_m$ próximos aos obtidos por Esperança *et al.* (2019), demonstrando a mesma ordem de magnitude.

Apesar das diferenças observadas nos valores da taxa de cisalhamento obtidos por CFD para as simulações com equação de balanço populacional e sem interações (caso EBP), o comportamento geral e a ordem de magnitude dos valores de $\dot{\gamma}_m$ simulados concordaram com os dados obtidos utilizando a correlação de Pérez e as simulações em CFD de Esperança *et al.* (2019).

5.4.5 Taxa de Cisalhamento Máxima ($\dot{\gamma}_{max}$)

Os dados simulados para a taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$), em função da vazão específica de ar, para os modelos de balanço populacional estão dispostos na Figura 64, na qual os resultados previstos nas simulações são comparados aos dados simulados para um diâmetro médio e constante, considerando a força de sustentação no modelo matemático (caso LF-4).

Figura 64 - Taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{max}$) em função da velocidade de injeção de gás (U_G) no biorreator coluna de bolhas.



Fonte: O autor (2023).

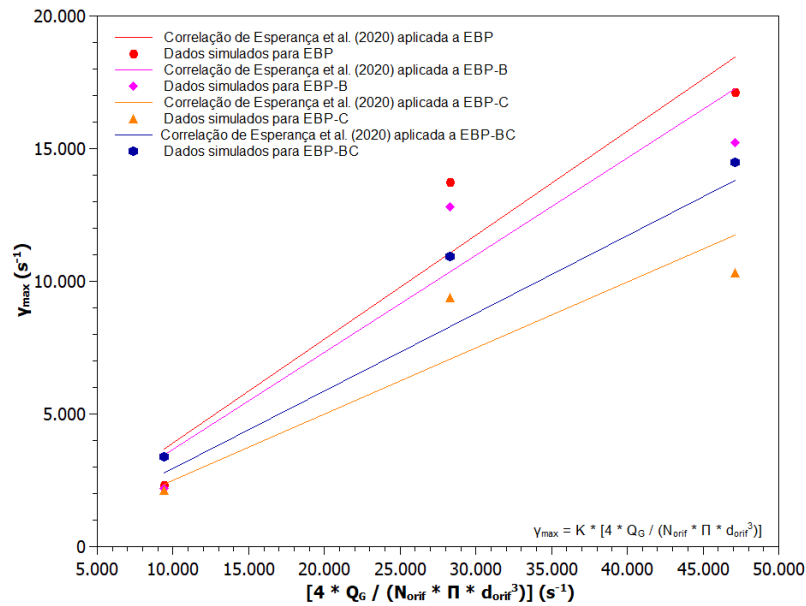
Analisando a Figura 64, observa-se que a inserção das equações de balanço populacional no modelo matemático, resultou em valores superiores de taxa de

cisalhamento máxima em relação ao modelo com diâmetro médio e constante (2.329,60, 13.750,77 e 17.113,71 s⁻¹). Quando considerado os efeitos de quebra e coalescência (casos EBP-B e EBP-C), a taxa de cisalhamento máxima decresce para todas as vazões aplicadas, apresentando valores de 2.199,54, 12.815,93 e 15.213,79 s⁻¹, quando considerado somente a quebra, e 2.144,33, 9372,29 e 10.312,56 s⁻¹, quando considerado somente a coalescência, para as vazões de 1,3 e 5 vvm, respectivamente. Para os casos em que se considerou ambos os efeitos de quebra e coalescência (EBP-BC), houve um aumento em relação aos casos EBP-B e EBP-C, sendo os valores simulados para a taxa de cisalhamento máxima de 3.375,47, 10.947,14 e 14.489,82, para as vazões de 1, 3 e 5 vvm, respectivamente.

No entanto, ainda que a consideração dos efeitos de quebra e coalescência tenha levado a valores superiores em comparação aos casos que consideraram somente uma das interações, os valores de $\dot{\gamma}_{\max}$ encontrados permaneceram inferiores em relação aos valores das simulações em sem interações (casos EBP). Tal comportamento pode ser explicado pelo fato de que, ao inserir as interações de quebra e coalescência no modelo matemático, as flutuações turbulentas aumentam afetando a distribuição da velocidade do líquido, a qual está diretamente relacionada à taxa de cisalhamento. Além disso, a força de sustentação, utilizada nas simulações com modelo acoplado CFD-PBM, afeta as taxas de coalescência e de quebra de bolhas, sendo que, para um sistema água-ar, esta força tende a empurrar bolhas menores (<5,8mm) em direção a região da parede e bolhas maiores (>5,8mm) em direção à região central da coluna, o que pode levar a uma diminuição da velocidade do líquido na região próxima ao aspesor, na qual é analisada a taxa de cisalhamento máxima.

A partir dos dados simulados para a taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{\max}$) foi possível ajustar a Equação 154 proposta por Esperança *et al.* (2020) e obter a constante de proporcionalidade k para os diferentes sistemas estudados. Os ajustes da Equação 154 aos dados simulados estão ilustrados na Figura 65.

Figura 65 - Ajuste entre a taxa de cisalhamento máxima obtida por CFD e estimada pela Equação proposta por Esperança *et al.* (2020) no biorreator coluna de bolhas para os modelos de balanço populacional: EBP (●), EBP-B (◆), EBP-C (▲) e EBP-BC (●).



Fonte: O autor (2023).

As constantes de proporcionalidade (k) foram obtidas considerando-se os modelos de balanço populacional e a consideração dos efeitos de quebra e coalescência. Os valores de k , com seus respectivos desvios padrões, para os casos estudados estão dispostos na Tabela 19.

Tabela 19 – Constantes de Proporcionalidade (k), com seus respectivos desvios padrões, para os modelos simulados após um tempo de real de simulação de 5 s.

Constante de Proporcionalidade (k)			
EBP	EBP-B	EBP-C	EBP-BC
0,3897±0,0399	0,3537±0,0427	0,2480±0,0347	0,3293±0,0248
R ² =0,92	R ² =0,88	R ² =0,82	R ² =0,96

Fonte: O autor (2023).

Analisando estes valores, é possível observar que a inserção das equações de balanço populacional considerando as interações de quebra e/ou coalescência nas simulações, faz com que k decresça. O valor da constante de proporcionalidade (k) encontrado para as simulações que consideraram um diâmetro médio e constante (casos LF-4) foi de 0,1156±0,0141, sendo este valor inferior aos valores encontrados para o modelo acoplado CFD-PBM.

Conforme demonstrado pelas simulações em que se analisou diferentes diâmetros, o parâmetro k possui uma sensibilidade ao diâmetro de bolhas, sendo que a medida em que o diâmetro aumenta, o valor de k decresce. Como nas simulações com modelo acoplado CFD-PBM é considerada uma distribuição de tamanho de bolhas, observa-se um maior gradiente de velocidade, influenciando na taxa de cisalhamento máxima ($\dot{\gamma}_{\max}$), utilizada no ajuste proposto por Esperança *et al.* (2020). Embora os valores simulados tenham divergido dos valores ajustados pela Equação 154, em todos os casos, a mesma ordem de grandeza foi encontrada.

5.5 Considerações Finais

O modelo definido através das simulações que consideraram um diâmetro médio e constante de bolhas foi usado nas simulações com as equações de balanço populacional, tanto para as simulações com interações quanto para as que não as utilizaram.

As simulações que incluíram as equações de balanço populacional no modelo matemático (modelo acoplado CFD-EPB), representadas pelos casos EBP, EBP-B, EBP-C e EBP-BC, demonstraram a formação de bolhas nas faixas delimitadas, experimentalmente, para a distribuição de tamanhos de bolhas para as fases ar_1 e ar_2 de cada caso, comprovando o funcionamento do modelo.

O modelo CFD-EPB forneceu simulações precisas de uma coluna de bolhas operada com diferentes condições operacionais ($U_G = 4,57\text{--}22,86$ m/s) sem a necessidade de ajuste dos parâmetros do modelo, apresentando resultados de parâmetros hidrodinâmicos e de transferência de oxigênio com valores previstos mais próximos aos encontrados experimentalmente ou por meio de correlações disponíveis na literatura, sendo o modelo acoplado CFD-EPB com efeitos de quebra e coalescência o que resultou em melhores previsões.

Neste trabalho, a fluidodinâmica computacional (CFD) foi utilizada para avaliar a retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$), coeficiente volumétrico de oxigênio (k_{LA}) e taxas de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) e máxima ($\dot{\gamma}_{max}$) em um biorreator coluna de bolhas de seção quadrada, empregando-se diferentes valores de diâmetro médio de bolha para simulações com e sem a força de sustentação e o modelo acoplado CFD-PBM com e sem a consideração das interações de quebra e coalescência.

Dos resultados obtidos na presente tese, é possível concluir que:

- A aplicação do teste GCI permitiu a obtenção dos erros de discretização de cada malha analisada, possibilitando a escolha malha mais adequada para as simulações dos parâmetros hidrodinâmicos e de transferência de oxigênio;
 - Na comparação entre os diâmetros médios e constantes utilizados neste estudo (4, 5 e 6 mm), o menor diâmetro analisado demonstrou maior concordância entre os dados experimentais e os estimados pela fluidodinâmica computacional;
 - A utilização da força de sustentação no modelo matemático, demonstrou valores previstos para a retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$), coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{LA}), e taxas de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) e máxima ($\dot{\gamma}_{max}$), maiores e mais próximos aos estimados experimentalmente ou por correlações disponíveis na literatura;
 - A variação no diâmetro de bolhas, para a faixa empregada neste estudo, demonstrou maior influência sobre os valores da taxa de cisalhamento máxima quando utilizada a força de sustentação, visto que, este parâmetro possui alta sensibilidade ao gradiente de velocidade local, o qual é influenciado pela força de sustentação;
 - As simulações que incluíram as equações de balanço populacional no modelo matemático (modelo acoplado CFD-EPB), demonstraram a formação de bolhas nas faixas delimitadas, experimentalmente, para a distribuição de tamanhos de bolhas para as fases ar_1 e ar_2 de cada caso, comprovando o funcionamento do modelo;
 - O modelo CFD-PBM forneceu simulações mais precisas, em relação às simulações com um diâmetro médio e constante, de uma coluna de bolhas operada com diferentes condições operacionais ($U_G = 4,57\text{--}22,86$ m/s) sem a necessidade de ajuste dos parâmetros do modelo, com valores previstos mais próximos aos encontrados experimentalmente.

- A inserção da força de sustentação nas simulações de balanço populacional, pode ter contribuído com o maior ajuste dos dados numéricos aos experimentais, visto que esta força influencia a frequência de colisão entre bolhas, a frequência de colisão de bolhas com redemoinhos turbulentos e os parâmetros hidrodinâmicos, que afetam ainda mais as taxas de coalescência e quebra de bolhas, além da distribuição do tamanho de bolhas em biorreatores colunas de bolhas;

- Houve uma diferença significativa na ordem de magnitude entre as taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) e máxima ($\dot{\gamma}_{max}$), para os modelos matemáticos analisados neste estudo. Verificou-se que, a consideração da força de sustentação acarretou em maiores valores para este parâmetro. Além disso, para as simulações em que o modelo acoplado CFD-PBM foi utilizado, a diferença na ordem de magnitude entre a taxa de cisalhamento média e máxima, foi mais significativa em relação às simulações que consideraram um diâmetro médio e constante de bolhas.

Considerando os resultados obtidos nesta tese, sugere-se alguns temas a serem abordados em pesquisas futuras, afim de lapidar o modelo matemático para a avaliação de biorreatores pneumáticos utilizando CFD:

- Estudo de diferentes tipos de aspersores em conjunto com o modelo de balanço populacional, experimental e por CFD, em biorreatores coluna de bolhas para avaliar seu impacto na transferência de oxigênio;

- Estudo do balanço populacional em bioreatores penumáticos dos tipos dutos concêntricos e *split cylinder*;

- Estudo comparativo entre diferentes modelos de balanço populacional em biorreatores pneumáticos, considerando dados experimentais, para avaliar a taxa de cisalhamento máxima.

CAPÍTULO 7 – LISTA DE PUBLICAÇÕES

- **ARTIGOS CIENTÍFICOS PUBLICADOS EM CONGRESSOS NACIONAIS**

1) **“Analysis of the interfacial force effect on simulated oxygen transfer of a bubble column bioreactor using computational fluid dynamics”**

Congresso: PSE-BR (Maio/22) – Apresentação oral.

2) **“Numerical and experimental estimation of global gas holdup in a bubble column bioreactor using computational fluid dynamics (CFD)”**

Congresso: CBCFD (Julho/22) – Apresentação oral.

3) **“Analysis of interfacial force effect on the simulated hydrodynamics of a bubble column bioreactor using computational fluid dynamics”**

Congresso: SINAFERM (Agosto/22)

4) **“Análise da influência do diâmetro médio da bolha na hidrodinâmica de um biorreator coluna de bolhas através da fluidodinâmica computacional”**

Congresso: ENEMP (Outubro/22).

5) **“Avaliação da influência da força de sustentação na taxa de cisalhamento máxima de um biorreator coluna de bolhas através da fluidodinâmica computacional”**

Congresso: ENEMP (Outubro/22).

- **CAPÍTULOS DE LIVRO ACEITOS PARA PUBLICAÇÃO**

“Análise da influência do diâmetro médio da bolha na taxa de cisalhamento média de uma coluna de bolhas através da fluidodinâmica computacional”

Livro Digital: Innovate - Engenharia química.

- **ARTIGOS CIENTÍFICOS PUBLICADOS**

“Analysis of the interfacial force effect on simulated oxygen transfer of a bubble column bioreactor using computational fluid dynamics”

Revista: Digital Chemical Engineering.

- **ARTIGOS CIENTÍFICOS EM AVALIAÇÃO / FINALIZAÇÃO / CONSTRUÇÃO**

1) **“Numerical-experimental evaluation of hydrodynamics and oxygen transfer in a bubble column bioreactor using computational fluid dynamics”**

Revista: Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering

Estágio: em revisão.

3) **“Lift force effect on the shear rate in bubble column using computational fluid dynamics”**

Revista: a ser selecionada.

Estágio: em construção.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABDULMOHSIN, R. S.; ABID, B. A.; AL-DAHMAN, M. H. Heat transfer study in a pilot-plant scale bubble column. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 89, n. 1, p. 78–84, jan. 2011.

ADINARAYANA, K. et al. Continuous neomycin production by immobilized cells of *Streptomyces marinensis* NUV-5 in an airlift bioreactor. *Process Biochemistry*, v. 39, n. 11, p. 1407–1414, 2004.

AHAMED, A.; VERMETTE, P. Effect of mechanical agitation on the production of cellulases by *Trichoderma reesei* RUT-C30 in a draft-tube airlift bioreactor. *Biochemical Engineering Journal*, v. 49, n. 3, p. 379–387, maio 2010.

AKITA, K.; YOSHIDA, F. Bubble size, interfacial area, and liquid-phase mass transfer coefficient in bubble columns. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, v. 13, p. 84–90, 1974.

ALAM H. S., SOELAIMAN T.A.F., SOETIKNO P., SUGIARTO A.T. Population Balance and Computational Fluid Dynamics Modeling of Swirl Flow Microbubble Generator. *International Conference on Sustainable Energy Engineering and Application (ICSEEA)*, 2020.

ALEXOPOULOS, A. H., ROUSSOS, A. I., KIPARISSIDES, C. Part I: dynamic evolution of the particle size distribution in particulate processes undergoing combined particle growth and aggregation. *Chemical Engineering Science*, v. 59, pp. 5751-5769, 2004.

ALEXOPOULOS, A. H., ROUSSOS, A. I., KIPARISSIDES, C. Part II: dynamic evolution of the particle size distribution in particulate processes undergoing particle nucleation, growth and aggregation. *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 4157-4169, 2005.

ALOPAEUS, V., KOSKINEN, J., KESKINEN, K. I.; MAJANDER, J. 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, 2002.

ALLEN, H. S. The motion of a sphere in a viscous fluid. In: *Philosophical Magazine*, v. 50, pp. 323-338, 1900.

AL-MASRY, W. A.; CHETTY, M. On the estimation of effective shear rate in external loop airlift reactors: non-Newtonian fluids. *Global Environmental Biotechnology*, v. 18, p. 153–166, 1996.

AL-MASRY, W. A. Effect of liquid volume in the gas-separator on the hydrodynamics of airlift reactors. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, v. 74, n. 10, p. 931–936, out. 1999c.

ALMEIDA, L. C. Avaliação da modelagem do transporte de área interfacial em escoamentos dispersos usando balanço populacional. *Dissertação de Mestrado*, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, Brasil, RJ, 2012.

AL-NASERI, H., SCHLEGEL, J.P., AL-DAHMAN, M.H. The effects of internals and low aspect ratio on the fully developed flow region and bubble properties in a pilotplant bubble column. *Exp. Therm. Fluid Sci.* 104, 284–301, 2019.

ALTERO, H. R. Representação da estrutura de escoamento bifásico água/ar em unidade de flotação com emprego de CFD. [s.l.] 109 f. Dissertação de Mestrado em Engenharia Hidráulica e Saneamento. Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo, 2016.

AMANULLAH, A. et al. Effects of agitation intensity on mycelial morphology and protein production in chemostat cultures of recombinant *Aspergillus oryzae*. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 62, n. 4, p. 434–446, 1999.

ANASTASIOU, A. D.; PASSOS, A. D.; MOUZA, A. A. Bubble columns with fine pore sparger and non-Newtonian liquid phase: Prediction of gas holdup. *Chemical Engineering Science*, v. 98, p. 331-338, 2013.

ANSYS Inc. 2.4 GAMBIT, User's Guide.

ANSYS Inc. Fluent 14.5, User's Guide.

ARAUJO, J. M., 2006, Estudo dos modelos de quebra e coalescência para escoamentos polidispersos. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, Brasil, RJ.

AUTON, T. R. The lift force on a spherical body in a rotational flow. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 183, pp. 199-218, 1987.

ATTARAKIH, M. M., BART, H. J., FAQIR, N. M. Optimal moving and fixed grids for the solution of discretized population balance in batch and continuous systems: droplet breakage. *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 1251-1269, 2003.

BADINO, A. C.; CERRI, M. O.; HOKKA, C. O. Biorreator pneumático de circulação interna e uso do mesmo. Brasil 2004.

BANNARI, R. et al. Mass transfer and shear in an airlift bioreactor: Using a mathematical model to improve reactor design and performance. *Chemical Engineering Science*, v. 66, n. 10, p. 2057-2067, 2011.

BASHEER, A. A.; SUBRAMANIAM, P. Hydrodynamics, mixing and selectivity in a partitioned bubble column. *Chemical Engineering Journal*, v. 187, p. 261–274, abr. 2012.

BEHIN, J. Deinking in bubble column and airlift reactors: Influence of wastewater of Merox unit as pulping liquor. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 90, n. 8, p. 1045–1051, ago. 2012.

BEHIN, J. et al. Ozone assisted electrocoagulation in a rectangular internal-loop airlift reactor: Application to decolorization of acid dye. *Journal of Water Process Engineering*, v. 8, p. 171–178, 2015.

BEHRAD, A. et al. Bio-processing of copper from combined smelter dust and flotation concentrate : A comparative study on the stirred tank and airlift reactors. *Journal of Hazardous Materials*, v. 241-242, p. 197–206, 2012.

- BESAGNI, G., GALLAZZINI, L., INZOLI, F. Effect of gas sparger design on bubble column hydrodynamics using pure and binary liquid phases. *Chem. Eng. Sci.* 176, 116, 2018.
- BÉTTEGA, R. Contribuições ao estudo da fluidodinâmica em leitos de jorro utilizando-se CFD. [s.l.] 153 f. Tese de Doutorado em Engenharia Química. Departamento de Engenharia Química. Universidade Federal de São Carlos, 2009.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N., *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons Inc.: Nova York, 1960.
- BLECK, R. A Fast Approximate Method for Integrating the Stochastic Coalescence Equation. *Geophysical Research Oceans*, v. 49, pp. 77-80, 1970.
- BOVE, S., Computational fluid dynamics of gas-liquid flows including bubble population balances, Ph.D. Thesis, Esbjerg Institute of Engineering, Dinamarca, 2005.
- BOVE, S., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. H. A novel algorithm for solving population balance equations: the parallel parent and daughter classes. Derivation, analysis and testing. *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 5, pp. 1449-1464, 2005
- BOUSSINESQ, J. Théorie de l'Écoulement Tourbillant. *Mem. Présentés par Divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr.*, v. 23, pp. 46-50, 1877.
- BRAGA, A. et al. Aroma production by *Yarrowia lipolytica* in airlift and stirred tank bioreactors: Differences in yeast metabolism and morphology. *Biochemical Engineering Journal*, v. 93, p. 55–62, 2015.
- BRAUER, H. Turbulenz in mehrphasigen Strömungen. *Chem. Ing. Tech.*, v. 51, n. 10, pp. 934-948, 1979
- BRENNEN, C. E., *Fundamentals of Multiphase Flow*. 1st ed. Cambridge University Press, 2005.
- BURNS, L. F.; RICE, R. G. Circulation in bubble columns. *AIChE Journal*, v. 43, n. 6, p. 1390–1401, 1997.
- CAMARASA, E., VIALA, C., PONCIN, S., et al. Influence of coalescence behaviour of the liquid and of gas sparging on hydrodynamics and bubble characteristics in a bubble column. *Chemical Engineering and Processing*, v. 38, n. 4-6, pp. 329-344, 1999.
- CAMEBPLL, G. M., WEBB, C. On predicting roller milling performance: Part I: the breakage equation. *Powder Technology*, v. 115, n. 3, pp. 234-242, 2001.
- CAMEBPLL, G. M., BUNN, P. J., WEBB, C., et al. On predicting roller milling performance: Part II. The breakage function. *Powder Technology*, v. 115, n. 3, pp. 243-255, 2001.
- CELIK, I.B., GHIA, U., ROACHE, P.J., FREITAS, C.J. Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications, *J. Fluids Eng. Trans. ASME* 130 (2008).

CERRI, MO, POLICARPO, LM, BADINO, AC (2010) Gas hold-up and mass transfer in three geometrically similar internal loop airlift reactors using Newtonian fluids. *Int J Chem Reactor Eng* 8:1–22

CERRI, M.O., FUTIWAKI, L., JESUS, C.D.F., CRUZ, A.J.G., BADINO, A.C. Average shear rate for non-Newtonian fluids in a concentric-tube airlift bioreactor, *Biochem. Eng. J.* 39 (2009) 51–57.

CERRONE, F. et al. Efficient removal of pollutants from olive washing wastewater in bubble-column bioreactor by *Trametes versicolor*. *Chemosphere*, v. 84, n. 2, p. 254–9, jun. 2011.

COULALOGLOU, C. A.; TAVLARIDES, L. L. Description of interaction processes in agitated liquid-liquid dispersions. *Chemical Engineering Science* V.32, 1289–1297, 1977.

CHAI, L.-Y. et al. Partial nitrification in an air-lift reactor with long-term feeding of increasing ammonium concentrations. *Bioresource Technology*, v. 185, p. 134–142, 2015.

CHEN, R. C., REESE, J., FAN, L. S. Flow structure in a three-dimensional bubble column and three-phase fluidized bed. *AIChE Journal*, v. 40, n. 7, pp. 1093-1104, 1994.

CHEN, P., DUDUKOVIĆ, M. P., SANYAL, J. Three-dimensional Simulation of bubble column flows with bubble coalescence and breakup. *AIChE J.* 51 (3), 696-712, 2005.

CHEN, A.; WANG, Z.; YANG, J. Influence of bubble size on the fluid dynamic behavior of a DAF tank: A 3D numerical investigation. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2016.

CHISTI, Y. *Airlift bioreactors*. London: Elsevier Applied Science, 1989.

CHISTI, Y.; MOO-YOUNG, M. On the calculations of shear rate and apparent viscosity in airlift and bubble column bioreactors. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 34, n. 11, p. 1391-1392, 1989.

CLIFT, R., GRACE, J. R., WEBER, M. E., *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press: Londres, 1978.

COCKX, A.; LINÉ, A.; ROUSTAN, M.; DO-QUANG, Z.; LAZAROVA, V. Numerical simulation and physical modeling of the hydrodynamics in an air-lift internal loop reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 52, p. 3787-3793, 1997.

COULALOGLOU, C. A., TAVLARIDES, L. L. Description of interaction processes in agitated liquid-liquid dispersions. *Chemical engineering Science*, v. 32, pp. 1289-1297, 1977

COX, R. G., MASON, S. G. Suspended Particles in Fluid Flow Through Tubes. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 3, pp. 291-316, 1971.

CUNHA, F. M. et al. Sequential solid-state and submerged cultivation of *Aspergillus niger* on sugarcane bagasse for the production of cellulase. *Bioresource Technology*, v. 112, p. 270–4, maio 2012.

- CREMASCO, M. A. Operações Unitárias em Sistemas Particulados e Fluidomecânicos. São Paulo: Edgar Blucher, 2012. p. 126-157.
- CROWE, C., SOMMERFELD, M., TSUJI, Y., 1998, Multiphase Flows with Droplets and Particles. CRC Press. DECKWER, W. D., Bubble Column Reactors. 2nd ed. John Wiley & Sons LTD, 1992.
- DAVIS. On the statistics of randomly broken objects. Chemical Engineering Science, v. 44, n. 9, pp. 1799-1805, 1989.
- DEEN, N. G., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. H. Large eddy simulation of the gas-liquid flow in a square cross-sectioned bubble column. Chemical Engineering Science, v. 56, pp. 6341-6349, 2001.
- DELNOIJ, E., LAMMERS, F. A., KUIPERS, J. A. M., et al. Dynamic simulation of dispersed gas-liquid two-phase flow using a discrete bubble model. Chemical Engineering Science, v. 52, n. 9, pp. 1429-1458, 1997.
- DENG, Z. et al. Mass-transfer behaviors in alcohol solutions in an internal-loop airlift reactor of 5-m height. Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 50, n. 20, p. 11537–11543, 2011.
- DIJKHUIZEN, W.; VAN SINT ANNALAND, M.; KUIPERS, J. A. M. Numerical and experimental investigation of the lift force on single bubbles. Chemical Engineering Science, v. 65, p. 1274-1287, 2010.
- DHANASEKHARAN, K. M. et al. A generalized approach to model oxygen transfer in bioreactors using population balances and computational fluid dynamics. Chemical Engineering Science, v. 60, n. 1, p. 213–218, jan. 2005.
- DHOTRE, M.T., NICENO, B., SMITH, B.L. Large eddy simulation of a bubble column using dynamic sub-grid scale model. Chem. Eng. J. 136, 337, 2008.
- DREW, D. A., LAHEY, R. T. Some supplemental analysis concerning the virtual mass and lift force on a sphere in a rotating and straining flow. International Journal of Multiphase Flow, v. 16, pp. 1127-1130, 1990.
- DREW, D. A., PASSMAN, S. L., Theory of Multicomponent Fluids. 1st ed. Springer, 1999.
- EKAMBARA, K.; DHOTRE, M.T. CFD simulation of bubble column. Nuclear Engineering and Design, Vol. 240, p. 936-969, 2010.
- ELSAYED, K.; LACOR, C. Numerical modeling of the flow field and performance in cyclones of different cone-tip diameters. Computers and Fluids, v. 51, n. 1, p. 48–59, 2011.
- ENWALD, H., PEIRANO, E., ALMSTEDT, A.-E. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. International Journal of Multiphase Flow, v. 22, n. Supp. 1, pp. 21-66, 1996.

ESPERANÇA, M. N. et al. Gas hold-up and oxygen mass transfer in three pneumatic bioreactors operating with sugarcane bagasse suspensions. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, v. 37, n. 5, p. 805–812, 28 set. 2014.

ESPERANÇA, M. N. Contribuição ao estudo do desempenho de biorreatores airlift de circulação interna: análise das condições operacionais e da geometria do equipamento. (Doutorado em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2018.

ESPERANÇA, M.N., MENDES, C.E, RODRIGUEZ, G.Y., CERRI, M.O., BÉTTEGA, R., BADINO, A.C. Average shear rate in airlift bioreactors: searching for the true value, *Bioprocess Biosyst. Eng.* 42 (2019) 995–1008.

ESPERANÇA, M.N., MENDES, C.E, RODRIGUEZ, G.Y., CERRI, M.O., BÉTTEGA, R., BADINO, A.C. Sparger design as key parameter to define shear conditions in pneumatic bioreactors. *Biochemical Engineering Journal* 157 (2020).

FAI-UFSCAR. Badino, A. C.; Hokka, C. O.; Cerri, M. O. Biorreator pneumático de circulação interna e uso do mesmo. PI0404703-6 - BR200404703-6A, 2006.

FAI-UFSCAR. Badino, A. C.; Hokka, C. O.; Cerri, M. O. Sistema reacional pneumático uso do mesmo. PI0701608-5, 2007.

FONTANA, R. C.; POLIDORO, T. A.; DA SILVEIRA, M. M. Comparison of stirred tank and airlift bioreactors in the production of polygalacturonases by *Aspergillus oryzae*. *Bioresource Technology*, v. 100, n. 19, p. 4493–8, out. 2009.

FORD, B., LOTH, E. Forces on ellipsoidal bubbles in a turbulent shear layer. *Physics of Fluids*, v. 10, n. 1, pp. 178-188, 1998.

FREITAS, C.; TEIXEIRA, J. A. Oxygen mass transfer in a high solids loading three-phase internal-loop airlift reactor. *Chemical Engineering Journal*, v. 84, n. 1, p. 57–61, set. 2001.

GALÍNDEZ-MAYER, J. et al. Phenol and 4-chlorophenol biodegradation by yeast *Candida tropicalis* in a fluidized bed reactor. *Biochemical Engineering Journal*, v. 38, n. 2, p. 147–157, fev. 2008.

GARCIA, S. et al. CFD simulation of multiphase flow in an airlift column photobioreactor. *Global Nest Journal*, v. 16, n. 6, p. 1121-1134, 2014.

GARCIA-OCHOA, F.; GOMEZ, E. Bioreactor scale-up and oxygen transfer rate in microbial processes: an overview. *Biotechnology Advances*, v. 27, n. 2, p. 153–76, 2009.

GEMELLO, L., PLAIS, C., AUGIER, F., MARCHISIO, D.L. Population balance modelling of bubble columns under the heterogeneous flow regime. *Chem. Eng. J.* 372, 590–604, 2019.

GILLI, E. 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. 2020. (Mestrado em Engenharia Química e Processos Sustentáveis). Colégio de Engenharia Química e de Materiais. Instituto Politécnico de Turim. Turim, Itália.

GRACE, J.R., WAIREGI, T., NGUYEN, T.H. Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids, *Process Saf. Environ. Prot.* 54 (1976) 167–173.

GRIMA, E. M.; CHISTI, Y.; MOOYOUNG, M. Characterization of shear rates in airlift bioreactors for animal cell culture. *Journal of Biotechnology*, v. 54, n. 3, p. 195-210, 1997.

GUPTA, A., ROY, S. Euler-Euler simulation of bubbly flow in a rectangular bubble column: experimental validation with radioactive particle tracking. *Chem. Eng. J.* 225, 818, 2013.

HAGESAETHER L., JAKOBSEN H.A.1, AND SVENDSEN H.F. A model for Turbulent Binary Breakup of Dispersed Fluid Particles. *Chemical Engineering Science*, 57(16):3251-3267, 2002.

HAN, M., SHA, Z., LAARI, A., KOIRANEN T. CFD-PBM Coupled Simulation of an Airlift Reactor with Non-Newtonian Fluid. *Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP Energies nouvelles*, v.72, n.26, 2017.

HARPER, W. R. An exact theory of the coagulation of spherical particles arising from thermal agitation. *Transaction of Faraday Society*, v. 32, pp. 1139-1144, 1936.

HEIJNEN, J. J.; VAN'T RIET, K. Mass transfer, mixing and heat transfer phenomena in low viscosity bubble column reactors. *Chemical Engineering Journal*, v. 28, p. B21–B42, 1984.

HEYDARIAN, S. M.; BONAKDARPOUR, B.; MIRHOSEINI, J. Polygalacturonase production by *Aspergillus* sp. in air-lift and agitated fermentor. *Iranian Journal of Chemical and Chemical Engineering*, v. 28, n. 1, p. 103–107, 2009.

HENZLER, H. J. AERATION OF RELATIVELY VISCOUS-LIQUIDS. *Chemie Ingenieur Technik*, v. 52, n. 8, p. 643-652, 1980. ISSN 0009-286X.

HIGASHITANI, K. YAMAUCHI, K., MATSUNO Y., HOSOKAWA, G. Turbulent Coagulation of Particles Dispersed in a Viscous Fluid. *Chemical Engineering Journal Japan*, 16(4):299-304, 1983.

HILL, P., NG, K. New discretisation procedure for the breakage equation. *AIChE Journal*, v. 41, n. 5, pp. 1204-1216, 1995.

HINZE, J. O. Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersions processes. *AIChE Journal*, v. 1, n. 3, pp. 289-295, 1955

HOUNSLOW, M. J., RYALL, R. L., MARSHALL, V. R. A discretized population balance for nucleation, growth and aggregation. *AIChE Journal*, v. 34, n. 11, pp. 1821-1832, 1988.

HOWARTH, W. J. Coalescence of drops in a turbulent flow field. *Chemical Engineering Science*, v. 19, n. 1, pp. 33-38, 1964.

HU, Q., ROHANI, S., JUTAN. A. New numerical method for solving the dynamic population balance equations. *AIChE Journal*, v. 51, n. 11, pp. 3000-3006, 2005.

- HUANG, Q. et al. CFD simulation of hydrodynamics and mass transfer in an internal airlift loop reactor using a steady two-fluid model. *Chemical Engineering Science*, v. 65, n. 20, p. 5527-5536, 2010.
- HUANG, Z., MCCLURE, D.D., BARTOB, G. W., FLETCHER, D. F., KAVANAGH, J. M. Assessment of the impact of Bubble size modeling in CFD simulations on alternative Bubble column configurations operating in the heterogeneous regime. *Chemical Engineering Science*, 186, 88-101, 2018.
- HULBURT, H., KATZ, S. Some problems in particle technology. A statistical mechanical formulation. *Chemical Engineering Science*, v. 19, pp. 555-574, 1964.
- ISHII, M., *Thermo-fluid Dynamic Theory of Two-phase Flow*. Eyrolles: Paris, 1975.
- ISHII, M.; ZUBER, N. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. *AIChE Journal*, v. 25, n. 5, p. 843–855, 1979.
- ISHII, M., HIBIKI, T., *Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow*. 1st ed. Springer: Nova York, EUA, 2006.
- JAMIALAHMADI, M.; MULLER-STEINHAGEN, H. Bubble formation and coalescence in bubble columns. *Chemical Engineering & Technology*, v. 61, n. 9, p.715–718, 1989.
- JESUS, S. S. de; NETO, J. M.; MACIEL, R. Hydrodynamics and mass transfer in bubble column, conventional airlift, stirred airlift and stirred tank bioreactors, using viscous fluid: A comparative study. *Biochemical Engineering Journal*, v. 118, p.70-81, 2017.
- JIN, B.; YIN, P.; LANT, P. Hydrodynamics and mass transfer coefficient in three-phase air-lift reactors containing activated sludge. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 45, n. 7, p. 608–617, jul. 2006.
- JONES, S. M. J.; HARRISON, S. T. L. Aeration energy requirements for lipid production by *Scenedesmus* sp. in airlift bioreactors. *Algal Research*, v. 5, n. Jul, p. 249–257, 2014.
- JULIÁ, J. E. et al. Hydrodynamic characterization of a needle sparger rectangular bubble column: Homogeneous flow, static bubble plume and oscillating bubble plume. *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 22, p. 6361–6377, 2007.
- KAKSONEN, A. H. et al. Iron oxidation and jarosite precipitation in a two-stage airlift bioreactor. *Hydrometallurgy*, v. 150, p. 227–235, 2014.
- KAHAR, P. et al. Production of epsilon-polylysine in an airlift bioreactor (ABR). *Journal of Bioscience and Bioengineering*, v. 93, n. 3, p. 274–80, jan. 2002.
- KANTARCIN, BORAK F, ULGEN K (2005) Bubble column reactors. *Process Biochem* 40:2263–2283.
- KARAMANEV, D. G. Rise of gas bubbles in quiescent liquids. *AIChE Journal*, v. 40, n. 8, p. 1418–1421, 1994.
- KAWAGOE, M. et al. Application of bubble column fermentors to submerged culture of *Schizophyllum commune* for production of L-malic acid. *Journal of Fermentation and Bioengineering*, v. 84, n. 4, p. 333–336, 1997.

KAWASE, Y.; MOOYOUNG, M. Influence of non-newtonian flow behavior on mass-transfer in bubble-columns with and without draft tubes. *Chemical Engineering Communications*, v. 40, n. 1-6, p.67-83, 1986. ISSN 0098-6445.

KIM, S. W.; KANG, S. W.; LEE, J. S. Cellulase and xylanase production by *Aspergillus niger* KKS in various bioreactors. *Bioresource Technology*, v. 59, n. 1, p. 63–67, jan. 1997.

KLEIN, J. et al. Biotransformation of glucose to gluconic acid by *Aspergillus niger* — study of mass transfer in an airlift bioreactor. *Biochemical Engineering Journal*, v. 10, p. 197–205, 2002.

KOSTOGLU, M., KARABELAS, A. J. Evaluation of zero order methods for simulating particle coagulation. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 163, pp. 420-431, 1994.

KRISHNA, R., URSEANU, M. I., VAN BATEN, J. M., et al. Rise velocity of a swarm of large gas bubbles in liquids. *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 171-183, 1999.

KRISHNA, R., VAN BATEN, J. M., URSEANU, M. I. Three-phase Eulerian simulations of bubble column reactors operating in the churn-turbulent regime: a scale up strategy. *Chemical Engineering Science*, v. 55, pp. 3275-3286, 2000.

KRISHNA, R.; VAN BATEN, J.M. Scaling up bubble column reactors with the aid of CFD. *Chemical Engineering Research and Design*, Vol. 79, no: 3, p. 283-309, 2001.

KRISHNA, R., VAN BATEN, J. M. Eulerian simulations of bubble columns operating at elevated pressures in the churn turbulent flow regime. *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 6249-6258, 2001.

KULKARNI, A. A; JOSHI, J. B. Bubble formation and bubble rise velocity in gas - liquid systems: A Review. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 44, p. 5873–5931, 2005.

KUMAR, S., RAMKRISHNA, D. On the solution of population balance equations by discretization. Part I. A fixed pivot technique. *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, pp. 1311-1332, 1996.

KUMAR, S., RAMKRISHNA, D. On the solution of population balance equations by discretization. Part II. A moving pivot technique. *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, pp. 1333-1342, 1996.

KUMAR, J., PEGLOW, M., WARNECKE, G., et al. Improved accuracy and convergence of discretized population balance for aggregation: The cell average technique. *Chemical Engineering Science*, v. 61, pp. 3327-3342, 2006.

KUMAR, J., PEGLOW, M., WARNECKE, G., et al. The cell average technique for solving multi-dimensional aggregation population balance equations, 2007.

LAACKONEN, M., ALOPÆUS, V. &AITTAMAA, J. Validation of bubble breakage, coalescence and mass transfer models for gas-liquid dispersion in agitated vessel. *Chemical Engineering Science* V.61, 218–228, 2006.

- LABORDE-BOUTET, C., LARACHI, FA., DROMARD, N., DELSART, O., SCHWEICH, D. CFD simulation of bubble column flows: Investigations on turbulence models in RANS approach. *Chemical Engineering Science*, 64 (2009), 4399-4413.
- LAGE, P. Vaporização de Gotas Multicomponentes em Campos Convectivos e Radiantes. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, Brasil, RJ, 1992
- LAGE, P. L. C. Comments on the by D.P. Patil and J.R.G. Andrews [*Chemical Engineering Science* 53(3) 599-601]. *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 19, pp. 4253-4254, 2002.
- LAU, Y. M.; BAY, W.; DEEN, N. G.; KUIPERNS, J. A. M. Numerical study of bubble break-up in bubbly flows using a deterministic Euler–Lagrange framework. *Chemical Engineering Science*, v. 108, p. 9-22, 2014.
- LAUX, H., JOHANSEN, S. T. A CFD analysis of the air entrainment rate due to a plunging steel jet combining mathematical models for dispersed and separated multiphase flows (1999). *Fluid Flow Phenomena in Metal Processing*. TMS, Warrendale, PA. USA.
- LEGENDRE, D., MAGNAUDET, J. A note on the lift force on a spherical bubble or drop in a low-Reynolds-number shear flow. *Physics of Fluids*, v. 9, n. 1, pp. 3572-3574, 1997.
- LEGENDRE, D., MAGNAUDET, J. The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 368, pp. 81-126, 1998.
- LEHR, F.; MILLIES, M.; MEWES, D. Bubble-size distributions and flow fields in bubble columns. *AIChE Journal*, v. 48, n. 11, p. 2426–2443, 2002.
- LENNARTSSON, P. R.; NIKLASSON, C.; TAHERZADEH, M. J. A pilot study on lignocelluloses to ethanol and fish feed using NMMO pretreatment and cultivation with zygomycetes in an air-lift reactor. *Bioresource Technology*, v. 102, n. 6, p. 4425–32, 2011.
- LEMOINE, R. et al. An algorithm for predicting the hydrodynamic and mass transfer parameters in bubble column and slurry bubble column reactors. *Fuel Processing Technology*, v. 89, n. 4, p. 322–343, abr. 2008.
- LEONARD, C., FERRASSE, J.H., LEFEVRE, S., VIAND, A., BOUTIN, O. Gas hold up in bubble column at high pressure and high temperature. *Chem. Eng. Sci.* 200,186–202, 2019.
- LEWIS, W. K.; WHITMAN, W. G. Principles of gas absorption. *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 16, n. 12, p. 1215-1220, 1924.
- LI, Z. J. et al. Estimation of hyphal tensile strength in production-scale *Aspergillus oryzae* fungal fermentations. *Biotechnology and bioengineering*, v. 77, n. 6, p. 601–13, 2002.
- LI, G.; YANG, X.; DAI, G. CFD simulation of effects of the configuration of gas distributors on gas-liquid flow and mixing in a bubble column. *Chem. Eng. Science*, v. 64, p. 5104-5116, 2009.

- LI, D.; FU, X.; KIM, S. M. Production of chum salmon cystatin from the recombinant *Saccharomyces cerevisiae* optimized using response surface methodology. *Biotechnology and Bioprocess Engineering*, v. 15, n. 2, p. 314–323, 2010.
- LI, W., ZHONG, W. CFD simulations of hydrodynamics of gas – liquid – solid three-phase bubble column. *Powder Technology*, 766-788, 2015.
- LI L., LIAN W., BAI B, ZHAO Y., LI P., ZHANG Q., HUANG W. CFD-PBM investigation of the hydrodynamics in a slurry bubble column reactor with a circular gas distributor and heat exchanger tube. *Chem. Eng. Science X*, 9, 2021.
- LIAO, Y.; LUCAS, D. A literature review of theoretical models for drop and bubble breakup in turbulent dispersions. *Chemical Engineering Science* V.64, 3389–3406, 2009.
- LIU, J.-J., SRIENC, F., FREDRICKSON, A. G. Solutions of population balance models based on a successive generations approach. *Chemical Engineering Science*, v. 52, n. 9, pp. 1529-1540, 1997.
- LISTER, J. D., SMITH, D. J., HOUNSLOW, M. J. Adjustable discretized population balance for growth and aggregation. *AIChE Journal*, v. 41, n. 3, pp. 591-603, 1995.
- LIU, L. X., LITSTER, J. D., IVESON, S. M., et al. Coalescence of Deformable Granules in Wet Granulation Processes. *AIChE Journal*, v. 46, n. 3, pp. 529-539, 2000.
- LOPEZ DE BERTODANO, M. Two-fluid model for two-phase turbulent jets. *Nuclear Engineering and Design*, v. 179, p. 65-74, 1991.
- LOTH, E. Numerical approaches for motion of dispersed particles, droplets and bubbles. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 26, pp. 161-223, 2000.
- LUCAS, D.; PRASSER, H.-M.; MANERA, A. Influence of the lift force on the stability of a Bubble column. *Chem. Eng. Science*, Vol. 60, p. 3609-3619, 2005.
- LUCAS, M. S. et al. Ozonation kinetics of winery wastewater in a pilot-scale bubble column reactor. *Water Research*, v. 43, n. 6, p. 1523–1532, abr. 2009.
- LUO, H.; SVENDSEN, H. F. Theoretical Model for Drop and Bubble Breakup in Turbulent Dispersions. *AIChE Journal*, v. 42, n. 5, p. 1225–1233, 1996.
- LUO, H. P.; AL-DAHMAN, M. H. Macro-mixing in a draft-tube airlift bioreactor. *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 6, p. 1572-1585, 2008.
- LUO, H.-P.; AL-DAHMAN, M. H. Local gas holdup in a draft tube airlift bioreactor. *Chemical Engineering Science*, v. 65, n. 15, p. 4503–4510, ago. 2010.
- MAKAGIANSAR, H. Y. et al. The influence of mechanical forces on the morphology and penicillin production of *Penicillium chrysogenum*. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, v. 9, p. 83-90, 1993.
- MANOLOV, R. J. Influence of agitation rate on growth and ribonuclease production by free and immobilized *Aspergillus clavatus* cells. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, v. 33, n. 3, p. 157–167, 1992.

- MANTZARIS, N. V. A cell population balance model describing positive feedback loop expression dynamics. *Computers and Chemical Engineering*, v. 29, n. 4, pp. 897-909, 2005.
- MARCHISIO, D. L., FOX, R. O. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, v. 36, n. 1, pp. 43-73, 2005.
- MARCHISIO, D.L., FOX R.O. *Computational Models for Polydisperse Particulate and Multiphase Systems*, Cambridge Series in Chemical Engineering, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2013.
- MASOOD, R. M. A.; DELGADO, A. Numerical investigation of the interphase forces and turbulence closure in 3D square bubble columns. *Chemical Engineering Science*, v. 108, p.154-168, 2014.
- MASSARANI, G. *Problemas de sistemas particulados*. São Paulo: Edgard Blucher, 1984.
- MAVADDAT, P. et al. Modeling and CFD-EBP simulation of an airlift bioreactor for PHB production. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, v. 9, n. 4, p. 562-573, 2014.
- MENDES, C. E. Avaliação das condições hidrodinâmicas, de transferência de oxigênio e de cisalhamento em diferentes modelos e escalas de reatores pneumáticos. 2016 (Doutorado). Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos.
- MENDES, C.E., BADINO, A.C. Hydrodynamics of Newtonian and non-Newtonian liquids in internal-loop airlift reactors, *Biochem. Eng. J.* 109 (2016) 137–152.
- MEHRNIA, M. R. et al. Gas hold-up and oxygen transfer in a draft-tube airlift bioreactor with petroleum-based liquids. *Biochemical Engineering Journal*, v. 22, n. 2, p. 105–110, jan. 2005.
- MERCHUK, J. C. et al. Studies of mixing in a concentric tube airlift bioreactor with different spargers. *Chemical Engineering Science*, v. 53, n. 4, p. 709-719, 1998.
- MERCHUK, J. C.; BENZVI, S. A novel approach to the correlation of mass transfer rates in bubble-columns with non-Newtonian liquids. *Chemical Engineering Science*, v. 47, n. 13-14, p. 3517-3523, 1992.
- MERCHUK, J. C.; BERZIN, I. Distribution of energy dissipation in airlift reactors. *Chemical Engineering Science*, v. 50, n. 14, p. 2225-2233, 1995.
- MERCHUK, J. C.; GLUZ, M. Bioreactors, air-lift reactors. In: JOHN WILEY AND SONS (Ed.) . *Encyclopedia of Bioprocess Technology*. 2002. p. 320–394.
- MICHELE, V., CFD modeling and measurement of liquid flow structure and phase holdup in two- and three-phase bubble columns, Ph.D. Thesis, Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, 2002.

- MOLLER, F., LAVETTY, C., SCHLEICHER, E., LOSCHAU, M., HAMPEL, U., SCHUBERT, M. Hydrodynamics, mixing and mass transfer in a pilot-scale bubble column with dense internals. *Chem. Eng. Sci.* 202, 491–507, 2019.
- MOHAGHEGHIAN S., GHAJAR A., ELBING B. R. Effect of Vertical Vibration on the Mixing Time of a Passive Scalar in a Sparged Bubble Column Reactor. *Fluids*, v.5, n.6, 2020.
- MORADI, S. et al. 3 dimensional hydrodynamic analysis of concentric draft tube airlift reactors with different tube diameters. *Mathematical and Computer Modelling*, v. 57, n. 5-6, p. 1184-1189, 2013.
- MORAIS, E. L. Verificação de soluções numéricas de escoamentos laminares obtidas com o método dos volumes finitos e malhas não-estruturadas. 2004 (Mestrado). Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Paraná, Curitiba.
- MOSTOUFI, N.; MEHRNIA, M. R.; VALI, M. Hydrodynamics of an Airlift Bioreactor Treating Petroleum-based Liquids: Experiment and CFD. *Energy Sources Part a-Recovery Utilization and Environmental Effects*, v. 36, n. 12, p. 1296-1304, 2014.
- MOUSTIRI, S. et al. A unified correlation for predicting liquid axial dispersion coefficient in bubble columns. *Chemical Engineering Science*, v. 56, p. 1041–1047, 2001.
- MUDDE, R. F.; VAN DEN AKKER, H. E. A. 2D and 3D simulations of an internal airlift loop reactor on the basis of a two-fluid model. *Chemical Engineering Science*, v. 56, p.6351-6358, 2001.
- MUDDE, R.F.; HARTEVELD, W.K.; VAN DEN AKKER, H.E.A. Uniform Flow in Bubble Columns. *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 48, p. 148-158, 2009.
- MCCLURE, D. D., KAVANAGH, J. M., FLETCHER, D. F., BARTON, G. W., Jan, 2014. Development of a CFD model of bubble column bioreactors: Part two - comparison of experimental data and CFD predictions. *Chem. Eng. Technol.* 37 (1) 131-140.
- MCCOY, B. J., MADRAS, G. Analytical solution for a population balance equation with aggregation and fragmentation. *Chemical Engineering Science*, v. 58, n. 13, pp. 3049-3051, 2003
- MCGRAW, R. Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments. *Aerosol Science and Technology*, v. 27, pp. 255-265, 1997.
- MCLAUGHLIN, J. B. Inertial migration of a small sphere in linear shear flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 224, pp. 261-274, 1991.
- NAJAFABADY, N. M.; RASOUL-AMINI, S.; GHASEMI, Y. Production of biodiesel by a naturally isolated strain of *Chlorella vulgaris* in bubble column photobioreactor. *Journal of Biotechnology*, v. 150, p. 371–371, nov. 2010.
- NAJAFPOUR, G. D. *Biochemical Engineering and Biotechnology*. 2nd. ed. Oxford: Elsevier, 2015.

- NARSIMHAN, G., GUPTA, J. P., RAMKRISHNA, D. A model for transitional breakage probability of droplets in agitated lean liquid-liquid dispersions. *Chemical Engineering Science*, v. 34, n. 2, pp. 257-265, 1979.
- NAYAK, B. K.; ROY, S.; DAS, D. Biohydrogen production from algal biomass (*Anabaena* sp. PCC 7120) cultivated in airlift photobioreactor. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 39, n. 14, p. 7553–7560, 2013.
- NDIAYE M, GADOIN E, GENTRIC C. CO₂ gas–liquid mass transfer and kLa estimation: numerical investigation in the context of airlift photobioreactor scale-up. *Chem Eng Res Des* 133:90–102, 2018.
- NERE, N. K., RAMKRISHNA, D. Solution of population balance equation with pure aggregation in a fully developed turbulent pipe flow. *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 1, pp. 96-103, 2006.
- NEWTON, I., *Philosophiae Naturalis: Principia Mathematica*. Societatis Regalis Sodali, 1686.
- NISHIKAWA, M.; KATO, H.; HASHIMOTO, K. Heat-transfer in aerated tower filled with non-Newtonian liquid. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, v. 16, n. 1, p. 133-137, 1977.
- NOPENS, I., BEHEYDT, D., VANROLLEGHEM, P. A. Comparison and pitfalls of different discretised solution methods for population balance models: a simulation study. *Computers and Chemical Engineering*, v. 29, pp. 367-377, 2005.
- OHTA, N. et al. Comparison of neomycin production from *Streptomyces fradiae* cultivation using soybean oil as the sole carbon source in an air-lift bioreactor and a stirred-tank reactor. *Journal of Fermentation and Bioengineering*, v. 79, n. 5, p. 443–448, 1995.
- ÖZCAN, E.; SARGIN, S.; GÖKSUNGUR, Y. Comparison of pullulan production performances of air-lift and bubble column bioreactors and optimization of process parameters in air-lift bioreactor. *Biochemical Engineering Journal*, v. 92, p. 9–15, 2014.
- PAINMANAKUL, P. et al. Effect of surfactants on liquid-side mass transfer coefficients. *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 22, p. 6480–6491, nov. 2005.
- PARICHAY, K. D., KUMAR, R., RAMKRISHNA, D. Coalescence of drops in stirred dispersion. A white noise model for coalescence. *Chemical Engineering Science*, v. 42, n. 2, pp. 213-220, 1987.
- PATIL, D. P., ANDREWS, J. R. G. An analytical solution to continuous population balance model describing floc coalescence and breakage: A special case. *Chemical Engineering Science*, v. 53, n. 3, pp. 599-601, 1998.
- PAWAR, S. B. CFD analysis of flow regimes in airlift reactor using Eulerian-Lagrangian approach. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 95, n. 3, p.420-431, Mar 2017. ISSN 0008-4034.

PAWAR, S. B. Computational fluid dynamics (CFD) analysis of airlift bioreactor: effect of draft tube configurations on hydrodynamics, cell suspension, and shear rate *Bioprocess Biosystems Engineering*, v. 41, n. 1, p. 31-45, 2018.

PEREZ, J. A. S. et al. Shear rate in stirred tank and bubble column bioreactors. *Chemical Engineering Journal*, v. 124, n. 1-3, p. 1-5, 2006.

POHORECKI, R. et al. Diameter of bubbles in bubble column reactors operating with organic liquids. *Trans IChemE*, v. 83, n. A7, p. 827–832, 2005.

POISEUILLE, J. L. M. Recherches experimentales sur le mouvement des liquides dans les tubes de très petits diametres. In: *Comptes Rendus*, v. 12, pp. 112-115, Academie des Sciences, 1841.

POLLI, M.; STANISLAO, M. D.; BAGATIN, R.; BAKR, E. A.; MASI, M. Bubble size distribution in the sparger region of bubble columns. *Chemical Engineering Science*, v. 57, p. 197-205, 2002.

PRINCE, M. J.; BLANCH, H. W. Bubble coalescence and break-up in air sparged bubble column., *American Institute of Chemical Engineering Journal*, 1990. V.36, 1485–1499.

RAIMUNDO, P.M., CLOUPET, A., CARTELLIER, A., BENEVENTI, D., AUGIER, F. Hydrodynamics and scale-up of bubble columns in the heterogeneous regime: Comparison of bubble size, gas holdup and liquid velocity measured in 4 bubble columns from 0.15 m to 3 m in diameter. *Chem. Eng. Sci.* 198, 52–61, 2019.

RAHIMI, M., J., SITARAMAN, H., HUMBIRD, D., STICKEL, J. J. Computational fluid dynamics study of full-scale aerobic bioreactors: Evaluation of gas-liquid mass transfer, oxygen uptake, and dynamic oxygen distribution. *Chemical Engineering Research and Design*, 2018.

RAMKRISHNA, D. *Population Balance - Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. Academic Press, San Diego, 2000.

RAMKRISHNA, D., MAHONEY, A. W. Population balance modeling. Promise for the future. *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 595–606, 2002.

RAMPURE, M. R., KULKARNI, A. A., RANADE, V. V. Hydrodynamics of Bubble column reactors at high gas velocity: experiments and computational fluid dynamics (CFD) simulations (2007). *Ind. Eng. Chem. Res.* 46, 8431-8447.

RANDOLPH, A. D., LARSON, M. A., *Theory of Particulate Processes*. 2nd ed. Academic Press: Nova York, EUA, 1988.

RIGOPOULOS, S. Population balance modelling of polydispersed particles in reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. In Press, Corrected Proof, 2010.

ROACHE, P. J. Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies. *Journal of Fluids Engineering*, v. 116, n. 3, p. 405–413, 1994.

RODRIGUES, J. P. Avaliação de modelos matemáticos para a simulação do escoamento água – ar na flotação por ar dissolvido utilizando fluidodinâmica computacional. 2018.

(Doutorado em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos.

RODRIGUES, J. P, BATISTA, J.M, BÉTTEGA, R. Application of population balance equations and interaction models in CFD simulation of the bubble distribution in dissolved air flotation. *Colloids and Surfaces A*, 577, p. 723-732, 2019.

RODRIGUEZ, G. Y. Avaliação de parâmetros globais de desempenho de biorreatores pneumáticos através de Fluidodinâmica Computacional. 2015. (Doutorado em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos.

RODRIGUEZ, G.Y., VALVERDE-RAMIREZ, M., MENDES, C.E., BETTEGA, R., BADINO, A.C. Global performance parameters for different pneumatic bioreactors operating with water and glycerol solution: experimental data and CFD simulation, *Bioprocess Biosyst. Eng.* 38 (2015) 2063–2075.

ROSA, E. S. Escoamento multifásico isotérmico: modelos de multifluidos e de mistura. Porto Alegre: Bookman, 2012.

ROLLBUSCH P., BOTHE, M., BECKER. M., LUDWIG, M., GRÜNEWALD, M., SCHLÜTER, M., FRANKE R. Bubble columns operated under industrially relevant conditions – Current understanding of design parameters, *Chem. Eng. Sci.* 126, 660–678, 2015.

ROUKAS, T.; MANTZOURIDOU, F. Effect of the aeration rate on pullulan production and fermentation broth rheological properties in an airlift reactor. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, v. 76, n. 4, p. 371–376, 2001.

RUSCHE, H., Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions, Ph.D. Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, Reino Unido, 2002.

RZEHAK R, ZIEGENHEIN T, KRIEBITZSCH S, KREPPER E, LUCAS D. (2017) *Chem Eng Sci* 157:147–158.

SAFFMAN, P. G, TURNER, J. S. On the Collision of Droplets in Turbulent Clouds. *Journal of Fluid Mechanics*, 1:16-30, 1956.

SAHU, J. N. et al. Performance of a modified multi-stage bubble column reactor for lead(II) and biological oxygen demand removal from wastewater using activated rice husk. *Journal of hazardous materials*, v. 161, n. 1, p. 317–324, 15 jan. 2009.

SALEHI, Z. et al. Aerobic biodegradation of p-nitrophenol by acclimated waste activated sludge in a slurry bubble column. *Process Biochemistry*, v. 46, n. 1, p. 284–289, jan. 2011.

SANTOS, C. M. Simulação tridimensional com sistema gás-líquido em colunas de bolhas. 96 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

SANTOS, F. P. Resolução da equação de balanço populacional pelo método de quadratura direta baseado em momentos generalizados. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, Brasil, RJ, 2010.

SARDEING, R.; PAINMANAKUL, P.; HÉBRARD, G. Effect of surfactants on liquid-side mass transfer coefficients in gas-liquid systems: A first step to modeling. *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 19, p. 6249–6260, out. 2006.

SATO, Y., SEKOGUCHI, K. Liquid velocity distribution in two-phase bubble flow. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 2, pp. 79-95, 1975.

SATO, Y., SADATOMI, M., SEKOGUCHI, K. Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow - I Theory. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 7, pp. 167-177, 1981.

SEGRÉ, G., SILBERBERG, A. Behaviour of macroscopic rigid spheres in Poiseuille flow Part 1. Determination of local concentration by statistical analysis of particle passages through crossed light beams. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 14, pp. 115-135, 1962.

SIEGEL, M. H.; ROBINSON, C. W. Applications of airlift gas-liquid-solid reactors in biotechnology. *Chemical Engineering Science*, v. 47, n. 13/14, p. 3215–3229, 1992.

SILVA, L. F. L. R. Desenvolvimento de Metodologias para Simulação de Escoamentos Polidispersos usando Código Livre. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, Brasil, RJ, 2008.

SILVA, J. L. Investigação do Escoamento Bifásico Gás-Líquido em uma Coluna de Bolhas Retangular por meio da Técnica CFD. 2011. (Mestrado em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas.

SILVA, M. K.; D'ÁVILA, M. A.; MORI, M. Study of the interfacial forces and turbulence models in a bubble column. *Comput. Chem. Eng.* 44, 34, 2012.

SILVA, C. R. et al. Stripping of ethanol with CO₂ in bubble columns: Effects of operating conditions and modeling. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 102, p. 150–160, 2015.

SIMONNET, M. et al. Experimental determination of the drag coefficient in a swarm of bubbles. *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 3, p. 858–866, fev. 2007.

SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G. Applicability of the standard k- ϵ turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns: Part I. Detailed numerical simulations. *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 2273-2284, 1999.

SONEGO, J. L. S. et al. Extractive batch fermentation with CO₂ stripping for ethanol production in a bubble column bioreactor: experimental and modeling. *Energy & Fuels*, v. 28, n. 12, p. 7552–7559, 2014.

SUNDARESAN, S. Modeling the Hydrodynamics of Multiphase Flow Reactors: Current Status and Challenges. *AIChE Journal*, v. 46, n. 6, pp. 1102-1105, 2000.

SCHLICHTING, H., *Boundary-Layer Theory*. 7th ed. McGraw-Hill: Nova York, 1979.

SCHMIDELL, W. et al. (Eds.). *Biotecnologia Industrial: Engenharia Bioquímica*. 2 ed. São Paulo: Edgard Blücher, 2001.

- SCHUMPE, A.; DECKWER, W. D. Viscous media in tower bioreactors -Hydrodynamic characteristics and mass-transfer properties. *Bioprocess Engineering*, v. 2, n. 2, p. 79-94, 1987.
- SCHWARZERA, H.-C., SCHWERTFIRMB, F., MANHARTB, M., et al. Predictive simulation of nanoparticle precipitation based on the population balance equation. *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 1, pp. 167-181, 2006.
- SHAH, Y. T. et al. Design parameters estimations for bubble column reactors. *AIChE Journal*, v. 28, n. 3, p. 353–379, 1982.
- SHAMLOU, P. A. et al. Gas holdup and liquid circulation rate in concentric-tube airlift bioreactors. *Chemical Engineering Science*, v. 49, n. 3, p. 303–312, 1994.
- SHI, L. K.; RIBA, J. P.; ANGELINO, H. Estimation of effective shear rate for aerated non-Newtonian liquids in airlift bioreactor. *Chemical Engineering Communications*, v. 89, p. 25-35, 1990.
- SHI, W.B., YANG, X.G., SOMMERFELD, M., YANG, J., CAI, X.Y., GUANG, LI, ZONG, Y. Modelling of mass transfer for gas-liquid two-phase flow in bubble column reactor with a bubble breakage model considering bubble-induced turbulence. *Chem. Eng. J.* 371, 470–485, 2019.
- SHINNAR, R. On the behavior of liquid dispersions in mixing vessels. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 10, pp. 259-275, 1961.
- SMAGALAA, T. G., MCCOY, B. J. Population balance modeling of polymer branching and hyperbranching. *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 1, pp. 3-17, 2006.
- SNAPE, J. B. et al. Liquid-phase properties and sparger design effects in an external-loop airlift reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 50, n. 20, p. 3175–3186, 1995.
- STOKES, G. G. On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums. *Cambridge Philosophical Society Transactions*, v. 9, pp. 8-106, 1851.
- STRÖM, H.; BONDELIND, M.; SASIC, S. A novel hybrid scheme for making feasible numerical investigations of industrial three-phase flows with aggregation. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 52, n. 29, p. 10022–10027, 2013.
- ULIANA, M. Soluções de equação de balanço populacional pelo método de classes com aplicação a processo de polimerização em suspensão. 2007. (Mestrado em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. São Paulo, SP.
- VALENTAS, K. J., AMUNDSON, A. R. Breakage and coalescence in dispersed phase systems. *Industrial and Engineering Chemistry: Fundamentals*, v. 5, n. 4, pp. 533-542, 1966.
- VAN BATEN, J. M., KRISHNA, R. Eulerian simulations for determination of the axial dispersion of liquid and gas phases in bubble columns operating in the churn turbulent regime. *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 503-512, 2001.

- VAN BATEN, J. M.; ELLENBERGER, J.; KRISHNA, R. Hydrodynamics of internal air-lift reactors: experiments versus CFD simulations. *Chemical Engineering and Processing*, v.42, p. 733-742, 2003.
- VIAL, C. et al. A simple method for regime identification and flow characterisation in bubble columns and airlift reactors. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 40, n. 2, p. 135–151, fev. 2001.
- VISWANATHAN, K.; RAO, D. S. Circulation in bubble columns. *Chemical Engineering Science*, v. 38, n. 1, p. 474–478, 1983.
- TABIB, M. V., ROY, S. A., JOSHI, J. B., 2008. CFD simulation of Bubble column-an analysis of interphase forces and turbulence models. *Chem. Eng. J.* 139, 589-614.
- TALAIA, M. A. R. Terminal velocity of a bubble rise in a liquid column. In: *Proceedings of World Academy of Science Engineering and Technology*, v. 22, pp. 264-268, 2008.
- TAVARES, L. Z.; DA SILVA, E. S.; DA CRUZ PRADELLA, J. G. Production of poly(3-hydroxybutyrate) in an airlift bioreactor by *Ralstonia eutropha*. *Biochemical Engineering Journal*, v. 18, n. 1, p. 21–31, abr. 2004.
- TOMIYAMA, A., 2004. Drag lift and virtual mass forces acting on a single bubble. In: *Third International Symposium on Two-Phase Flow Modeling and Experimentation 2004*.
- THOMASI, S.S., CERRI, M.O., BADINO, A.C. Average shear rate in three pneumatic bioreactors, *Bioprocess Biosyst. Eng.* 33 (2010), 979–988.
- TRAGER, M. Comparison of airlift and stirred reactors for fermentation with *Aspergillus niger*. *Journal of Fermentation and Bioengineering*, v. 68, n. 2, p. 112–116, 1989.
- TSOURIS, C., TAVLARIDES, L. L. Breakage and coalescence models for drops in turbulent dispersions. *AIChE Journal*, v. 40, pp. 395-406, 1994.
- TSUCHIYA, K., OHSAKI, K., TAGUCHI, K. Large and Small Bubble Interaction Patterns in a Bubble Column. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 22, n. 1, pp. 121-132, 1996.
- TSUJI, Y., MORIKAWA, Y., SHIOMI, H. LDV measurements of an air-solid two-phase flow in a vertical pipe. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 139, pp. 417-434, 1984.
- TURHAN, K.; TURGUT, Z. Decolorization of direct dye in textile wastewater by ozonization in a semi-batch bubble column reactor. *Desalination*, v. 242, n. 1-3, p. 256–263, jun. 2009.
- YANG, G., GUO, K., WANG, T. Numerical simulation of the bubble column at elevated pressure with a CFD-PBM coupled model. *Chemical Engineering Science* 170, 251-262, 2017.
- YANG, N., XIAO, Q. A mesoscale approach for population balance modeling of bubble size distribution in bubble column reactors. *Chem. Eng. Sci.* 170, 241–250, 2017.

- YANG, G., ZHANG, H., LUO, J., WANG, T. Drag force of bubble swarms and numerical simulations of a bubble column with a CFD-PBM coupled model. *Chemical Engineering Science* 192, 714-724, 2018.
- YEOH, G. H., TU, J. Gas-Liquid Flows. In: *Computational Techniques for Multiphase Flows*, Butterworth-Heinemann, pp. 351-456, Oxford, 2010.
- YONGMING, Z. et al. An internal airlift loop bioreactor with *Burkholderia pickettii* immobilized onto ceramic honeycomb support for degradation of quinoline. *Biochemical Engineering Journal*, v. 11, n. 2-3, p. 149–157, set. 2002.
- YUGUO, Z.; ZHAO, W.; XIAOLONG, C. α -Amylase production by *Bacillus subtilis* with dregs in an external-loop airlift bioreactor. *Biochemical Engineering Journal*, v. 5, p. 115–121, 2000.
- YUN, J. et al. Production of tropane alkaloids by small-scale bubble column bioreactor cultures of *Scopolia parviflora* adventitious roots. *Bioresource Technology*, v. 98, p. 1748–1753, 2007.
- WANG, T.F., WANG, J.F., JIN, Y. Population balance model for gas-liquid flows: Influence of bubble coalescence and breakup models. *Ind. Eng. Chem. Res.* 44, 7540–7549, 2005.
- WANG, T.F., WANG, J.F. Numerical simulations of gas–liquid mass transfer in bubble columns with a CFD–PBM coupled model. *Chem. Eng. Sci.* 62, 7107, 2007.
- WANG, L. K.; FAHEY, E. M.; WU, Z. Dissolved air flotation. In: WANG, L.K., Hung, Y.T., Shammas, N.K. (eds.) *Physicochemical treatment processes*. Totowa, Humana Press, Inc. p. 431–500, 2005.
- WECKER, A.; ONKEN, U. Influence of dissolved oxygen concentration and shear rate on the production of pullulan by *Aureobasidium pullulans*. *Biotechnology letters*, v. 13, n. 3, p. 155–160, 1991.
- WEI, C. et al. Volumetric mass transfer coefficient of oxygen in an internal loop airlift reactor with a convergence-divergence draft tube. *Chemical Engineering & Technology*, v. 23, n. 7, p. 597–603, 2000.
- WILD, G., PONCIN, S., LI, H.-Z., et al. Some Aspects of the Hydrodynamics of Bubble Columns. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, v. 1, n. R7, pp. 1-36, 2003.
- WONGWICHARN, A.; HARVEY, L. M.; MCNEIL, B. Secretion of heterologous and native proteins, growth and morphology in batch cultures of *Aspergillus niger* B1-D at varying agitation rates. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, v. 74, n. 8, p. 821–828, 1999.
- WYNN, E. J. W. Simulating Aggregation and Reaction: New Hounslow DPB and Four-Parameter Summary. *AIChE Journal*, v. 50, n. 3, pp. 578-588, 2004.
- XING, C., WANG, T., WANG, J. Experimental study and numerical simulation with a coupled CFD-PBM model of the effect of liquid viscosity in a bubble column. *Chemical Engineering Science* 95 (2013), 313-322.

XU, T. et al. CFD simulation of internal-loop airlift reactor using EMMS drag model. *Particuology*, v. 19, p. 124-132, 2015.

ZAHRDNÍK, J., FIALOVÁ, M., RUZICKA, M., et al. Duality of the gas-liquid flow regimes in bubble column reactors, *Chemical Engineering Science*, v. 52, n. 21-22, pp. 3811-3826, 1997.

ZIEGENHEIN, T., RZEHAKE, R., MA, T., LUCAS, D. Towards a unified approach for modeling uniform and non-uniform bubbly flows. *Can. J. Chem. Eng.* 95 (2017), 170-179.

ZHANG, D.; DEEN, N.G.; KUIPERS, J.A.M. Numerical simulation of the dynamic flowbehavior in a bubble column: A study of closures for turbulence and interface forces. *Chem. Eng. Science*, Vol. 61, p. 7593-7608, 2006.

ZHANG, T. et al. A novel airlift reactor enhanced by funnel internals and hydrodynamics prediction by the CFD method. *Bioresource Technology*, v. 104, p.600-607, 2012.

ZHANG, B., KONG, L., JIN, H., HE, G., YANG, S., GUO, X. CFD simulation of gas–liquid flow in a high-pressure bubblecolumn with a modified population balance model. *Chinese J.Chem. Eng.* 26, 1350–1358, 2018.

ZHANG, XI-BAO; LUO, ZHENG-HONG. Effects of bubble coalescence and breakup models on the simulation of bubble columns. *Chem. Eng. Science*, Vol. 226, 2020.

ZHANG H., SAYYAR A., WANG Y, WANG T. Generality of the CFD-PBM coupled model for bubble column simulation. *Chem. Eng. Science*, Vol. 219, 2020.

ZHANG, XI-BAO, ZHENG, RU-QIU., LUO, ZHENG-HONG. CFD-PBM simulation of bubble columns: Effect of parameters in the class method for solving EBPs. *Chem. Eng. Science*, Vol. 226, 2020.