

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

**AVALIAÇÃO DE PARÂMETROS GLOBAIS DE
DESEMPENHO DE BIORREACTORES PNEUMÁTICOS
ATRAVÉS DE FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

Guilherme Youssef Rodriguez

São Carlos - SP

Março / 2015

**AVALIAÇÃO DE PARÂMETROS GLOBAIS DE
DESEMPENHO DE BIORREACTORES PNEUMÁTICOS
ATRAVÉS DE FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

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

**AVALIAÇÃO DE PARÂMETROS GLOBAIS DE
DESEMPENHO DE BIORREATORES PNEUMÁTICOS
ATRAVÉS DE FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

Guilherme Youssef Rodriguez

Aluno de Doutorado

Prof. Dr. Alberto Colli Badino Júnior

Orientador do PPG-EQ/UFSCar

Prof. Dr. Rodrigo Béttega

Co-orientador do PPG-EQ/UFSCar

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de **Doutor em Engenharia Química**, área de concentração em **Pesquisa e Desenvolvimento de Processos Químicos**.

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

R696ap Rodriguez, Guilherme Youssef.
Avaliação de parâmetros globais de desempenho de
biorreatores pneumáticos através de fluidodinâmica
computacional / Guilherme Youssef Rodriguez. -- São
Carlos : UFSCar, 2015.
77 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos,
2015.

1. Biorreatores pneumáticos. 2. Retenção gasosa. 3.
CFD. I. Título.

CDD: 660.63 (20ª)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE TESE DE GUILHERME YOUSSEF RODRIGUEZ APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 25 DE MARÇO DE 2015.

BANCA EXAMINADORA:

Alberto Colli Badino Junior
Orientador, UFSCar



Rodrigo Béttega
Coorientador, UFSCar



Claudio Roberto Duarte
UFU



Marcel Otavio Cerri
UNESP



Gabriela Cantarelli Lopes
UFSCar



Ronaldo Guimarães Corrêa
UFSCar

Este trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Engenharia Bioquímica do Departamento de Engenharia Química (DEQ) da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar) e contou com o apoio financeiro do Programa de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás natural e Biocombustíveis (PRH-ANP/MCT N° 44).



anp
Agência Nacional
do Petróleo,
Gás Natural e Biocombustíveis



DEDICATÓRIA

Este trabalho é dedicado especialmente à minha família pelo amor e pelo incentivo em completar mais essa etapa da minha vida: meu pai Alberto, minha mãe Nádia e minha irmã Cinthia.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Alberto Colli Badino Jr. e ao Prof. Dr. Rodrigo Béttega pela orientação, amizade, confiança e profissionalismo. São mais do que orientadores: são amigos!

Aos meus pais (Alberto e Nádia) e minha irmã (Cinthia) pelo apoio e pela motivação, pois sempre estão presentes e são testemunhas de cada conquista da minha vida. Amo vocês!

À Maribel pela amizade, reforço, empenho e todo apoio prestado na geração das malhas e nas simulações em FLUENT. Sua participação foi essencial para o andamento do trabalho.

À Caroline pela amizade e prestatividade na obtenção de dados experimentais extras.

Ao Gabriel Justi e Gladson pelas dicas em CFD.

Ao técnico Amadeus pela amizade, auxílio e confiança.

Aos colegas de laboratório e amigos: Jorge, Mateus, Diego, Liliane e Cecília pelo companheirismo no ambiente laboratorial e descontração nos intervalos.

Ao Yo Konno, que proporcionou ao longo desses quatro anos, as famosas quartas-feiras de temaki ao lado dos meus amigos: Hugo, Maisa, Jéssica, Ana Maria e Margarita.

À Cíntia, Renata, Bruna e Gabriel ("Space") pela iniciativa em organizar as festinhas de aniversário, incentivando e mantendo a interação entre os pesquisadores da Engenharia Bioquímica.

A todos os amigos e colegas do DEQ/UFSCar, que são a minha família em São Carlos e que também me motivaram a chegar até aqui.

Ao CNPq (Procs: 478472/2011-0 e 140466/2011-8) e ao PRH-ANP/MCT N° 44) pelo auxílio financeiro.

EPÍGRAFE

“In order to understand the universe, you must first understand the language in which the universe is written. And this language is Mathematics.”

Autor desconhecido

RESUMO

Os biorreatores pneumáticos são equipamentos industriais isentos de partes móveis que têm a finalidade de converter matérias-primas em bioprodutos de interesse comercial pela ação de enzimas ou células. São promissores na indústria bioquímica, pois garantem boa transferência de oxigênio consumindo menos energia. Parâmetros globais de desempenho, como a retenção gasosa global e o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio são critérios importantes no projeto e seleção entre geometrias diferentes dos equipamentos mencionados. No presente trabalho foi realizada a modelagem e a simulação de biorreatores pneumáticos baseada na Fluidodinâmica Computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*) de forma a estimar a retenção gasosa global e o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio em três geometrias distintas: coluna de bolhas, *airlift* de cilindros concêntricos e *airlift split*. Os resultados simulados de cada parâmetro de desempenho foram verificados comparando-se com os valores experimentais reportados nos trabalhos de Thomasi et al. (2010) e Mendes e Badino (2015) para os fluidos água destilada, solução de glicerol 10 cP e solução de goma xantana 0,2% m/v (massa/volume) e vazão de alimentação específica de ar numa ampla faixa (0 a 5 min⁻¹). Foi empregada a suíte de aplicativos ANSYS® 14.5 para as simulações numéricas em CFD. Parâmetros importantes, como o diâmetro de bolha, exerceram grande influência nos resultados referentes ao coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio. Destaca-se, pelos resultados experimentais e simulados, que o biorreator pneumático do tipo *airlift* de cilindros concêntricos apresentou-se como a melhor alternativa para a retenção gasosa global e para o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (atingindo 14% e 0,06 s⁻¹ para a água destilada, respectivamente). Verificou-se que os resultados obtidos via CFD concordaram com a tendência majoritária dos dados experimentais, capturando os fenômenos mais relevantes das características hidrodinâmicas e da transferência de massa, mostrando que a modelagem dos diferentes sistemas com diferentes fluidos atendeu ao principal objetivo de obter modelos confiáveis para o projeto e comparação de desempenho de outras geometrias de biorreatores pneumáticos.

Palavras-chave: biorreatores pneumáticos, parâmetros globais, retenção gasosa, coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio, CFD

ABSTRACT

Pneumatic bioreactors are devices free of moving parts which have the purpose of converting raw materials in bio-products of commercial interest by the action of enzymes or cells. They are promising in the biochemical industry, ensuring good oxygen transfer and consuming less energy. Global performance parameters such as global gas hold up and the volumetric oxygen transfer coefficient are important criteria in the design and selection among different geometries of the mentioned devices. In the present work it was carried out modeling and simulation of pneumatic bioreactors based on Computational Fluid Dynamics (CFD) in order to estimate the global gas hold up and the volumetric oxygen transfer coefficient in three different geometries of pneumatic bioreactors: bubble column, concentric tube airlift and split tube airlift. The simulated results of each performance parameter were verified by comparison with the experimental values reported by Thomasi et al. (2010) and Mendes and Badino (2015) for the fluids distilled water, glycerol solution 10 cP and xanthan gum solution 0.2% w/v (weight/volume) in a wide range of specific air flow rate (0 to 5 min⁻¹). Application suite ANSYS® 14.5 was used for numerical simulations in CFD. Important parameters such as the bubble diameter played a great influence on results of the volumetric oxygen transfer coefficient. It can be observed by the experimental and simulated results that the concentric tube airlift bioreactor was the best alternative to the global gas hold up and the volumetric oxygen transfer coefficient (reaching 14% and 0.06 s⁻¹ for distilled water, respectively). It was found that the results obtained via the CFD agreed with the majority trend of experimental data, capturing the most important hydrodynamic phenomena and mass transfer characteristics, showing that the modeling of different systems with different fluids fulfilled the main objective of obtaining reliable models design and performance of other geometries of pneumatic bioreactors.

Keywords: pneumatic bioreactors, global parameters, gas hold up, volumetric oxygen transfer coefficient, CFD

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 1.1 – Esquema simplificado de um biorreator pneumático do tipo coluna de bolhas..... | 1 |
| Figura 3.1 – a) Esquema simplificado de um biorreator do tipo tanque agitado e aerado com 3 impelidores; b) Impelidor tipo Rushton..... | 6 |
| Figura 3.2 – Esquemas simplificados de biorreatores pneumáticos do tipo <i>airlift</i> : a) cilindros concêntricos; b) <i>split</i> | 7 |
| Figura 3.3 – Biorreatores operando em laboratório: a) tanque agitado e aerado; b) <i>airlift split</i> | 7 |
| Figura 3.4 – Regimes de circulação observados em biorreatores <i>airlift</i> de cilindros concêntricos | 8 |
| Figura 3.5 – Transferência de oxigênio da bolha de ar até o interior do microrganismo celular | 13 |
| Figura 3.6 – Interface gás-líquido e películas estagnadas de fluido..... | 14 |
| Figura 3.7 – Ábaco $Re \times Eö \times M$ para a determinação do formato das bolhas | 18 |
| Figura 4.1 – Modelos de biorreatores pneumáticos abordados no presente trabalho: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 27 |
| Figura 4.2 – Aspersores utilizados: a) cruzeta; b) espinha de peixe..... | 28 |
| Figura 4.3 – Geometrias computacionais dos 3 biorreatores pneumáticos em estudo: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 30 |
| Figura 4.4 – Aspectos qualitativos das malhas computacionais: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 31 |
| Figura 5.1 – Testes de independência de malha conduzidos no biorreator coluna de bolhas. a) 2 vvm; b) 5 vvm | 44 |
| Figura 5.2 – Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar em biorreator coluna de bolhas operando com água destilada: ensaios para a definição do modelo de coeficiente de arraste..... | 45 |
| Figura 5.3 – Dispersão das bolhas para o sistema água-ar no biorreator coluna de bolhas: a) 1 vvm; b) 5 vvm | 46 |
| Figura 5.4 – Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar para os fluidos Newtonianos: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 48 |
| Figura 5.5 – Retenção gasosa na região de descida em função da velocidade superficial de gás na região de subida | 49 |
| Figura 5.6 – Retenção gasosa na região de subida (a) e descida (b) em função da velocidade | |

| | |
|---|----|
| superficial de gás na região de subida | 50 |
| Figura 5.7 – Distribuição espacial da fração volumétrica de ar a 5 vvm após 5 s para o sistema água-ar: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 51 |
| Figura 5.8 – Distribuição espacial da fração volumétrica de ar a 5 vvm após 5 s para o sistema solução de glicerol-ar: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 51 |
| Figura 5.9 – Campos vetoriais de velocidade da água obtidos a 5 vvm após 5 s: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 52 |
| Figura 5.10 – Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio em função da vazão específica de ar para os fluidos Newtonianos: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 53 |
| Figura 5.11 – Dispersão das bolhas a 5 vvm obtida em biorreator coluna de bolhas: a) água destilada; b) solução de glicerol 10 cP | 55 |
| Figura 5.12 – Distribuição espacial de a) k_L (m/s) e b) "a" (m^{-1}) obtidos no biorreator <i>airlift</i> de cilindros concêntricos operando com solução de glicerol 10 cP a 3 vvm após 5 s | 55 |
| Figura 5.13 – Perfil de k_{La} em função de D_b obtido no biorreator colunas de bolhas operando com água destilada..... | 56 |
| Figura 5.14 – Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar para a solução de goma xantana 0,2% m/v: a) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; b) <i>airlift split</i> | 58 |
| Figura 5.15 – Distribuição espacial da fração volumétrica de ar a 5 vvm para o sistema solução de goma xantana-ar: a) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; b) <i>airlift split</i> | 59 |
| Figura 5.16 – Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio em função da vazão específica de ar para a solução de goma xantana-ar: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 60 |
| Figura A1 – Comparação entre o uso da condição de contorno <i>degassing condition</i> (a) e a situação na qual a interface gás-líquido é móvel e livre para se expandir (b)..... | 71 |
| Figura A2 – Aspectos qualitativos das malhas computacionais utilizadas nos ensaios preliminares: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 72 |
| Figura A3 – Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar: a) coluna de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 74 |
| Figura A4 – Distribuição espacial da fração volumétrica de ar a 5 vvm e $t=5$ s: a) colunas de bolhas; b) <i>airlift</i> de cilindros concêntricos; c) <i>airlift split</i> | 76 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|----|
| Tabela 4.1 – Relações geométricas dos três biorreatores de 5 L..... | 28 |
| Tabela 4.2 – Condições definidas no <i>software</i> FLUENT® 14.5..... | 40 |
| Tabela 5.1 – Parâmetros das malhas geradas nos três biorreatores pneumáticos..... | 44 |
| Tabela 5.2 – Números adimensionais estimados a 1 vvm para o sistema água-ar no biorreator coluna de bolhas | 46 |
| Tabela A1 – Condições utilizadas no CFX® 14.0 | 73 |

NOMENCLATURA

Notação dimensional

| | |
|---|-------------------------|
| L | Dimensão de comprimento |
| T | Dimensão de tempo |
| M | Dimensão de massa |

Variáveis

| | |
|------------------|--|
| a | Área interfacial específica das bolhas (L^{-1}) |
| A_{bolha} | Área interfacial da bolha (L^2) |
| A_D | Área da seção referente à região de descida (L^2) |
| A_S | Área da seção referente à região de subida (L^2) |
| C | Concentração de oxigênio ($M.L^{-3}$) |
| C_D | Coefficiente de arraste (-) |
| C_{DT} | Coefficiente do modelo de dispersão turbulenta (-) |
| C_D^{esf} | Coefficiente de arraste calculado para a esfera (-) |
| C_D^{elip} | Coefficiente de arraste calculado para a elipse (-) |
| C_D^{touca} | Coefficiente de arraste calculado para a touca (-) |
| $c_{i,j}^d$ | Constante da equação de força de arraste (-) |
| C_{sat} | Concentração de saturação de oxigênio ($M.L^{-3}$) |
| C_μ | Constante do modelo de turbulência k- ϵ (-) |
| $C_{\epsilon 1}$ | Constante do modelo de turbulência k- ϵ (-) |
| $C_{\epsilon 2}$ | Constante do modelo de turbulência k- ϵ (-) |
| $C_{\mu p}$ | Constante do modelo de turbulência induzida pela fase dispersa (-) |
| D_b | Diâmetro da bolha (L) |
| D_f | Diâmetro do orifício do aspersor (L) |
| D_h | Máxima dimensão horizontal da bolha (L) |
| D_L | Coefficiente de difusividade mássica ($L^2.T$) |
| Eö | Número de Eötvos (-) |
| F_D | Módulo da força de arraste ($M.L.T^{-2}$) |

| | |
|-------------------------|--|
| F_L | Módulo da força de sustentação ($M.L.T^{-2}$) |
| g | Módulo da aceleração da gravidade ($L.T^{-2}$) |
| \mathbf{g} | Vetor aceleração da gravidade ($L.T^{-2}$) |
| h | Distância vertical entre 2 pontos de tomada de pressão (L) |
| H_D | Altura da dispersão (L) |
| H_L | Altura inicial de líquido (L) |
| i | Subscrito que indica fase i |
| j | Subscrito que indica fase j |
| J | Função interna do modelo de Grace |
| k_c | Energia cinética turbulenta da fase contínua ($L^2.T^{-2}$) |
| k_i | Energia cinética turbulenta da fase i ($L^2.T^{-2}$) |
| k_L | Coefficiente convectivo de transferência de oxigênio na película líquida ($L.T^{-1}$) |
| k_{La} | Coefficiente volumétrico de transferência de oxigênio (T^{-1}) |
| K | Índice de consistência do fluido ($M.L^{-1}.T^{n-2}$) |
| M | Número de Morton (-) |
| \mathbf{M}_i | Vetor força interfacial total (por unidade de volume) agindo na fase i ($M.L^{-2}.T^{-2}$) |
| $\mathbf{M}_{i,j}^D$ | Vetor força de arraste (por unidade de volume) agindo na fase i devido à presença da fase j ($M.L^{-2}.T^{-2}$) |
| $\mathbf{M}_{i,j}^{DT}$ | Vetor força de dispersão turbulenta (por unidade de volume) agindo na fase i devido à presença da fase j ($M.L^{-2}.T^{-2}$) |
| $\mathbf{M}_{i,j}^L$ | Vetor força de sustentação (por unidade de volume) agindo na fase i devido à presença da fase j ($M.L^{-2}.T^{-2}$) |
| n | Índice de comportamento do fluido (-) |
| \dot{n}_{O_2} | Densidade de fluxo de transferência de oxigênio ($M.L^{-2}.T^{-1}$) |
| N | Número de orifícios do aspersor (-) |
| N_{O_2} | Velocidade volumétrica de transferência de oxigênio ($M.L^{-3}.T^{-1}$) |
| P_i | Pressão local exercida na fase i |
| Q_G | Vazão volumétrica de alimentação de ar ($L^3.T^{-1}$) |
| Re_b | Número de Reynolds de bolha (-) |
| \mathbf{S}_i | Vetor força externa total (por unidade de volume) agindo na fase i ($M.L^{-2}.T^{-2}$) |
| \mathbf{S}_i^E | Vetor força externa (por unidade de volume) devido ao empuxo ($M.L^{-2}.T^{-2}$) |

| | |
|----------------|---|
| t_0 | Tempo inicial (T) |
| t_L | Tempo gasto pelo líquido para dar uma volta completa no sistema (L) |
| $U_{G,S}$ | Velocidade superficial de ar na região de subida ($L.T^{-1}$) |
| U_L | Velocidade superficial de circulação do líquido ($L.T^{-1}$) |
| $U_{L,S}$ | Velocidade superficial do líquido na região de subida ($L.T^{-1}$) |
| $U_{L,D}$ | Velocidade superficial do líquido na região de descida ($L.T^{-1}$) |
| $v_{ent,G}$ | Velocidade de entrada do ar ($L.T^{-1}$) |
| \mathbf{v}_i | Vetor velocidade intersticial local da fase i ($L.T^{-1}$) |
| v_i | Módulo da velocidade intersticial local da fase i ($L.T^{-1}$) |
| \mathbf{v}_j | Vetor velocidade intersticial local da fase j ($L.T^{-1}$) |
| v_j | Magnitude (ou módulo) da velocidade intersticial local da fase j ($L.T^{-1}$) |
| \mathbf{v}_d | Vetor velocidade intersticial local da fase contínua ($L.T^{-1}$) |
| \mathbf{v}_c | Vetor velocidade intersticial local da fase dispersa ($L.T^{-1}$) |
| v_∞ | Velocidade terminal da bolha ($L.T^{-1}$) |
| V_G | Volume de ar presente no sistema após a aeração (L^3) |
| V_L | Volume de líquido avaliado antes da aeração do sistema (L^3) |
| x | Coordenada x (abscissa) |
| x_L | Distância percorrida pelo líquido em uma volta completa no sistema (L) |
| y | Coordenada y (ordenada) |
| z | Coordenada z (cota) |

Letras gregas

| | |
|------------------|--|
| α_c | Fração volumétrica da fase contínua (-) |
| α_d | Fração volumétrica da fase dispersa (-) |
| $\bar{\alpha}_G$ | Retenção gasosa global ou fração volumétrica global de ar (-) |
| $\dot{\gamma}$ | Taxa de deformação (T^{-1}) |
| ε_i | Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta da fase i ($L^2.T^{-3}$) |
| λ | Função interna do modelo de Grace |
| μ_L | Viscosidade dinâmica do líquido ($M.L^{-1}.T^{-1}$) |
| $\mu_{t,i}$ | Viscosidade turbulenta da fase i ($M.L^{-1}.T^{-1}$) |
| $\mu_{ef,i}$ | Viscosidade efetiva da fase i ($M.L^{-1}.T^{-1}$) |

| | |
|-------------------|---|
| μ_{tp} | Viscosidade do turbilhão induzido pela fase dispersa ($M.L^{-1}.T^{-1}$) |
| μ_{ts} | Viscosidade do turbilhão induzido pelo cisalhamento ($M.L^{-1}.T^{-1}$) |
| $\nu_{t,d}$ | Viscosidade cinemática turbulenta da fase dispersa ($L^2.T^{-1}$) |
| $\nu_{t,c}$ | Viscosidade cinemática turbulenta da fase contínua ($L^2.T^{-1}$) |
| ρ_c | Densidade da fase contínua ($M.L^{-3}$) |
| ρ_d | Densidade da fase dispersa ($M.L^{-3}$) |
| ρ_G | Densidade do ar ($M.L^{-3}$) |
| ρ_L | Densidade do líquido ($M.L^{-3}$) |
| ρ_{ref} | Densidade de referência ($M.L^{-3}$) |
| σ | Tensão superficial ($M.T^{-2}$); número de Prandtl turbulento (-) |
| σ_k | Constante do modelo de turbulência k- ϵ para a equação de k (-) |
| σ_ϵ | Constante do modelo de turbulência k- ϵ para a equação de ϵ (-) |
| τ | Tensão de cisalhamento ($M.L^{-1}.T^{-2}$) |
| ϕ | Vazão específica de ar (T^{-1}) |

Letras cirílicas e operadores matemáticos

| | |
|------------|--------------------------------|
| ∂ | Operador diferencial del (-) |
| ∇ | Operador diferencial nabla (-) |
| \times | Notação de produto vetorial |
| \otimes | Notação de produto diádico |

SUMÁRIO

| | |
|--|----|
| 1. INTRODUÇÃO..... | 1 |
| 2. OBJETIVO | 4 |
| 3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA..... | 5 |
| 3.1 Biorreatores pneumáticos | 5 |
| 3.1.1 Classificação..... | 5 |
| 3.1.2 Regimes de circulação | 8 |
| 3.1.3 Bolhas em biorreatores pneumáticos..... | 9 |
| 3.2 Variáveis globais, parâmetros diversos e conceitos relevantes | 9 |
| 3.2.1 Vazão específica de ar (ϕ) | 9 |
| 3.2.2 Velocidade superficial de ar na região de subida ($U_{G,S}$)..... | 10 |
| 3.2.3 Retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$)..... | 10 |
| 3.2.4 Velocidade superficial de circulação de líquido (U_L)..... | 11 |
| 3.2.5 Velocidade intersticial (v) | 12 |
| 3.2.6 Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_La) | 12 |
| 3.2.7 Fluidos Newtonianos e não-Newtonianos | 16 |
| 3.2.8 Caracterização das bolhas..... | 17 |
| 3.3 Aspectos da fluidodinâmica computacional..... | 18 |
| 3.3.1 Geometria do domínio | 20 |
| 3.3.2 Geração da malha computacional..... | 20 |
| 3.3.3 Pré-processamento..... | 21 |
| 3.3.4 Processamento | 21 |
| 3.3.5 Pós-processamento | 21 |
| 3.4 Trabalhos relacionados à hidrodinâmica de biorreatores pneumáticos | 21 |
| 3.4.1 Aspersão de ar em biorreatores pneumáticos | 22 |
| 3.4.2 Simulação da hidrodinâmica de biorreatores pneumáticos através da técnica de CFD | 23 |
| 3.4.3 Considerações finais | 26 |
| 4. MATERIAIS E MÉTODOS..... | 27 |
| 4.1 Aparato experimental | 27 |
| 4.2 Metodologia computacional | 28 |
| 4.2.1 Software..... | 28 |

| | |
|---|----|
| 4.2.2 Hardware | 29 |
| 4.2.3 Planejamento das simulações | 29 |
| 4.2.4 Geometria computacional..... | 29 |
| 4.2.5 Malha computacional | 30 |
| 4.2.6 Metodologia e modelagem matemática..... | 31 |
| 4.2.7 Condições de contorno e sumarização da etapa de pré-processamento | 39 |
| 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO | 43 |
| 5.1 Resultados auxiliares | 43 |
| 5.1.1 Testes de independência de malha | 43 |
| 5.1.2 Verificação da influência dos modelos de coeficiente de arraste..... | 44 |
| 5.2 Estimativa dos parâmetros globais de desempenho via CFD..... | 47 |
| 5.2.1 Fluidos Newtonianos - Água e solução de glicerol 10 cP | 47 |
| 5.2.2 Fluido não-Newtoniano - Água e solução de goma xantana 0,2% m/v | 57 |
| 6. CONCLUSÃO..... | 61 |
| SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS..... | 63 |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 64 |
| APÊNDICE | 69 |

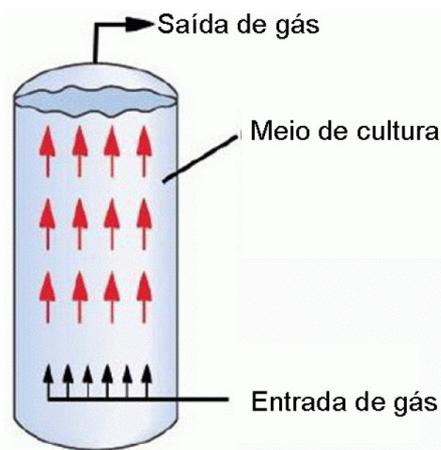
1. INTRODUÇÃO

Esta breve introdução tem por objetivo a apresentação sucinta dos temas e conceitos que serão abordados nessa pesquisa: biorreatores pneumáticos e fluidodinâmica computacional.

Biorreatores ou reatores bioquímicos são equipamentos que fornecem um ambiente físico e químico adequado para a produção de um composto de valor agregado que em geral é resultante da atividade catalítica de enzimas ou da rota metabólica de microrganismos como fungos e bactérias. Esses equipamentos operam em ambientes controlados de pH, temperatura, concentração de nutrientes e de oxigênio dissolvido a fim de que o produto de interesse seja gerado satisfatoriamente.

Os biorreatores pneumáticos são caracterizados pela ausência de partes móveis, que conferem trabalho de eixo, utilizadas para promover a mistura do sistema reacional. A homogeneização é feita exclusivamente através da injeção de gás, em geral ar ou ar enriquecido com oxigênio em cultivos aeróbios. A injeção é realizada no caldo de cultivo na base da coluna, conforme mostra a Figura 1.1. Essa modalidade de biorreator, comparativamente com o modelo convencional tipo tanque agitado e aerado, é capaz de reduzir o consumo de energia, aumentar a transferência de oxigênio, reduzir o cisalhamento celular e facilitar aspectos relacionados à implementação do sistema, como o projeto, construção e aumento de escala (THOMASI, 2010; CERRI, 2009). Por isso, essa categoria de biorreatores se mostra mais promissora atualmente em relação aos convencionais.

Figura 1.1 – Esquema simplificado de um biorreator pneumático do tipo coluna de bolhas



Fonte: CERRI, 2005

Biorreatores pneumáticos promovem contato gás-líquido (por exemplo, catálise

enzimática) e, em outros casos, gás-líquido-sólido (catálise heterogênea). De acordo com Merchuk (2003), os biorreatores pneumáticos possuem aplicações no tratamento de efluentes e em processos bioquímicos diversos. São utilizados em processos de desnitrificação, remoção de corantes em efluentes de indústrias têxteis, retirada de compostos fenólicos, oxidação de nitritos a nitratos, bio-oxidação de minerais, produção de enzimas por fermentação, cultura de algas, etc. O mesmo autor cita que o estudo da fluidodinâmica em biorreatores pneumáticos tem um grande apelo tecnológico, pois visa a melhoria e otimização de desempenho desses equipamentos.

Duas categorias principais de biorreatores pneumáticos são empregados atualmente na ciência, tecnologia e indústria: coluna de bolhas e *airlift*. Os primeiros promovem basicamente a gaseificação do meio reacional enquanto que os do segundo grupo são projetados para induzir a recirculação do meio ao longo do sistema através da colocação de anteparos específicos. Pode-se considerar que os biorreatores *airlift* possuem características intermediárias ao biorreator coluna de bolhas e do tipo tanque agitado e aerado (THOMASI, 2010). Embora a configuração desses sistemas seja relativamente simples, os fenômenos físicos envolvidos em cada um deles são complexos, principalmente aqueles relacionados à transferência de quantidade de movimento, calor e massa entre as fases que compõem o meio.

Quando se trata de estudos científicos envolvendo biorreatores pneumáticos gás-líquido, a literatura apresenta resultados que visam a otimização da geometria, a investigação da fração volumétrica gasosa e características das bolhas, obtenção de valores globais de alguma variável ou coeficiente que apresenta gradiente espacial, compreensão dos regimes de escoamento e questões referentes ao aumento de escala (*scale-up*). Para que essas pesquisas tenham fundamentação teórica, modelos matemáticos adequados devem ser propostos no intuito de estabelecer uma descrição matemática dos fenômenos envolvidos. Então, esses modelos matemáticos são resolvidos para que haja a comparação entre resultados calculados e experimentais. É nesse cenário que a Fluidodinâmica Computacional (sigla CFD, proveniente do inglês *Computational Fluid Dynamics*) vem ganhando mais espaço e destaque. Trata-se de uma técnica computacional que resolve numericamente equações de balanços locais de quantidade de movimento, massa e energia. A resolução numérica dessas equações fornece perfis espaciais e transientes de diversas variáveis, como velocidade, pressão, fração volumétrica, temperatura, entalpia, entropia, etc. Utilizando-se a técnica de CFD é possível

avaliar questões relacionadas aos fenômenos de transporte no interior de equipamentos, além de possibilitar a obtenção de informações onde a experimentação ainda é limitada.

Variáveis globais são empregadas como critérios quantitativos na avaliação do desempenho de biorreatores pneumáticos que permitem a comparação entre diferentes geometrias e possibilitam a escolha do melhor sistema que realizará uma determinada operação (SHAH ET AL., 1982; LAKOTA ET AL., 2002). Elas são dependentes do sistema e isso motiva estudos que abordam geometrias inovadoras e alternativas de biorreatores (CAMARASA ET AL., 1999; RUEM-GNAM ET AL., 2008). Dentre as principais variáveis globais estudadas em biorreatores pneumáticos, destacam-se a retenção gasosa global, o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio e a velocidade de cisalhamento.

O uso da técnica de CFD é justificada pelo desempenho melhorado e otimizado dos computadores atuais, o que permite a obtenção de resultados numéricos de maneira mais rápida e eficiente. A alocação de matrizes grandes na memória do computador agora é permitida, implicando na obtenção de resultados mais precisos e refinados. Além disso, como a técnica baseia-se na resolução de equações complexas, as respostas obtidas são generalizadas e possibilitam a previsão da operação real de um determinado processo para diferentes escalas. Isso reduz custos de implementação experimental, já que as simulações de modelos verificados experimentalmente retornam respostas confiáveis e semelhantes ao que se encontraria na prática em situações não ensaiadas.

Embora na literatura sejam encontrados diversos trabalhos publicados que modelam, simulam e verificam experimentalmente os comportamentos de biorreatores pneumáticos no que se referem à hidrodinâmica e transferência de oxigênio, não são encontrados na literatura trabalhos que analisam e comparam diferentes modelos de biorreatores operados com fluidos Newtonianos com diferentes viscosidades e não Newtonianos pseudoplásticos que simulam caldos fermentativos de microrganismos filamentosos, operados em altas vazões de alimentação de ar, de forma a melhor compreender o funcionamento desses equipamentos lançando mão de uma técnica de análise que é a fluidodinâmica computacional.

2. OBJETIVO

Em qualquer processo que tenha os atentos olhos da Ciência voltados para seus mecanismos, seja ele natural ou criado pelo Homem, há a necessidade de buscar padrões e traduzi-los em linguagem matemática para que o ser humano possa dominar aspectos da natureza para o seu próprio benefício, respeitando princípios da ética e da sustentabilidade. Levando em consideração que o desempenho dos computadores está muito mais avançado e otimizado, há a possibilidade de propor e implementar modelos matemáticos mais completos, além de obter resultados mais precisos e que são passíveis de comparação com os casos reais, facilitando a busca de padrões nos fenômenos mais relevantes.

Considerando a importância de avaliar com mais detalhes os fenômenos envolvidos no escoamento em biorreatores pneumáticos por meio do uso da Fluidodinâmica Computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*), o objetivo geral deste trabalho foi adotar, simular e verificar modelos matemáticos hidrodinâmicos que permitiram o cálculo da retenção gasosa global e do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio, variáveis globais que são usadas como critérios para a avaliação do desempenho de biorreatores pneumáticos e que estão vinculadas entre si. Foram abordadas três geometrias de biorreatores pneumáticos em escala de bancada (5 L): coluna de bolhas, *airlift* de cilindros concêntricos e *airlift split*. Esses biorreatores pneumáticos foram patenteados pelo grupo de pesquisa do Laboratório de Engenharia Bioquímica do DEQ/UFSCar. A fim de empregar fluidos de diferentes reologias, definiu-se e utilizou-se três fases líquidas diferentes: água destilada (Newtoniano), solução de glicerol 10 cP (Newtoniano, mais viscoso) e solução de goma xantana 0,2% m/v, fluido não Newtoniano que simula reologicamente um típico caldo de cultivo de microrganismos filamentosos para a produção de biocombustíveis e enzimas celulolíticas. Os ensaios numéricos e experimentais foram conduzidos considerando altas vazões de alimentação de ar, sendo que os resultados simulados foram confrontados com aqueles obtidos experimentalmente e apresentados por Thomasi (2010) e Mendes e Badino (2015). As simulações foram conduzidas no *software* FLUENT[®] 14.5.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Esta seção apresenta os principais fundamentos teóricos acerca de biorreatores pneumáticos e fluidodinâmica computacional que serão utilizados em ambas as partes deste trabalho, bem como as publicações que foram disseminadas sobre o tema desta pesquisa e que serviram de base para sua elaboração.

3.1 Biorreatores pneumáticos

Este tópico aborda, de maneira qualitativa, os conceitos fundamentais sobre biorreatores pneumáticos que são imprescindíveis na compreensão do tema desta pesquisa, como classificação, regimes de escoamento e a importância das bolhas. A fim de simplificar a apresentação, temas correlacionados à biorreatores pneumáticos e fluidodinâmica computacional que estejam muito além do escopo deste trabalho foram omitidos.

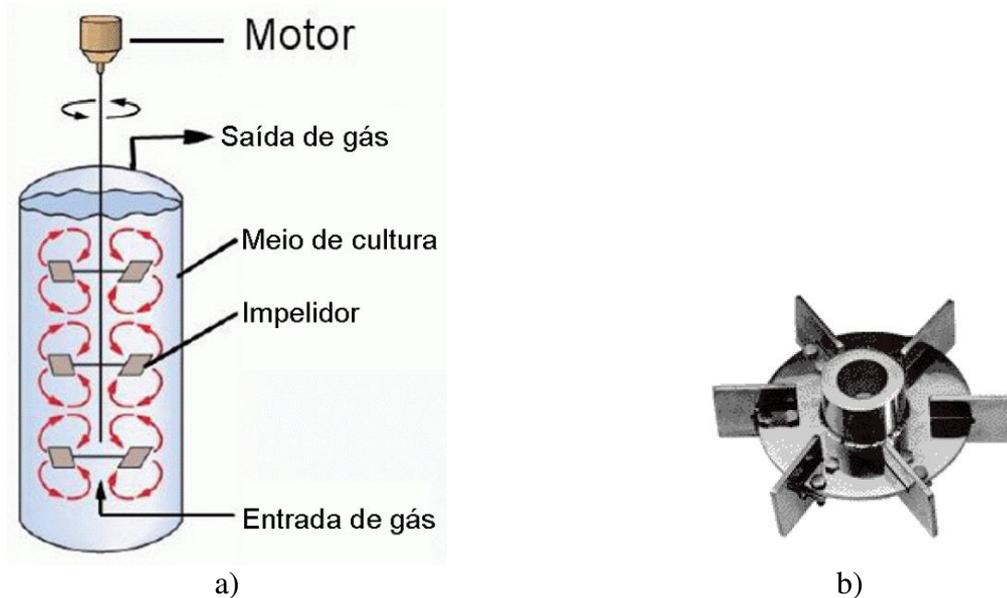
3.1.1 Classificação

Biorreatores ou reatores bioquímicos são equipamentos que fornecem um ambiente físico-químico adequado para a bioconversão de matérias-primas em produtos de valor agregado através do uso de células ou enzimas. Essas entidades biológicas devem operar em um meio conveniente para que a produção de metabólitos ocorra de maneira controlada e satisfatória. Condições como pH, temperatura, cisalhamento, agitação, concentração de oxigênio, vitaminas e sais são algumas variáveis que são controladas no interior de biorreatores. Em geral, gases são injetados no sistema, sendo que o tipo de gás utilizado varia conforme a entidade biológica empregada e a finalidade da operação. Ar enriquecido com oxigênio é frequentemente usado na oxigenação de meios de cultura onde se desenvolverão organismos celulares aeróbios. Nitrogênio puro é injetado no sistema quando se pretende expulsar o oxigênio do meio a fim de realizar ensaios para determinação do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (k_{LA}), que será explicado mais adiante.

A classificação dos biorreatores é feita conforme a presença ou a ausência de partes móveis que são usadas na homogeneização do meio. Biorreatores convencionais do tipo tanque agitado e aerado possuem impelidores conectados a eixos giratórios que promovem a mistura e apresentam aspersores (ou distribuidores) que efetuam a gaseificação do sistema (Figura 3.1). Já os biorreatores pneumáticos são desprovidos de trabalho mecânico, sendo que a homogeneização é feita exclusivamente pela injeção de gás na parte inferior do

equipamento via aspersor.

Figura 3.1 – a) Esquema simplificado de um biorreator do tipo tanque agitado e aerado com 3 impelidores; b) Impelidor tipo Rushton



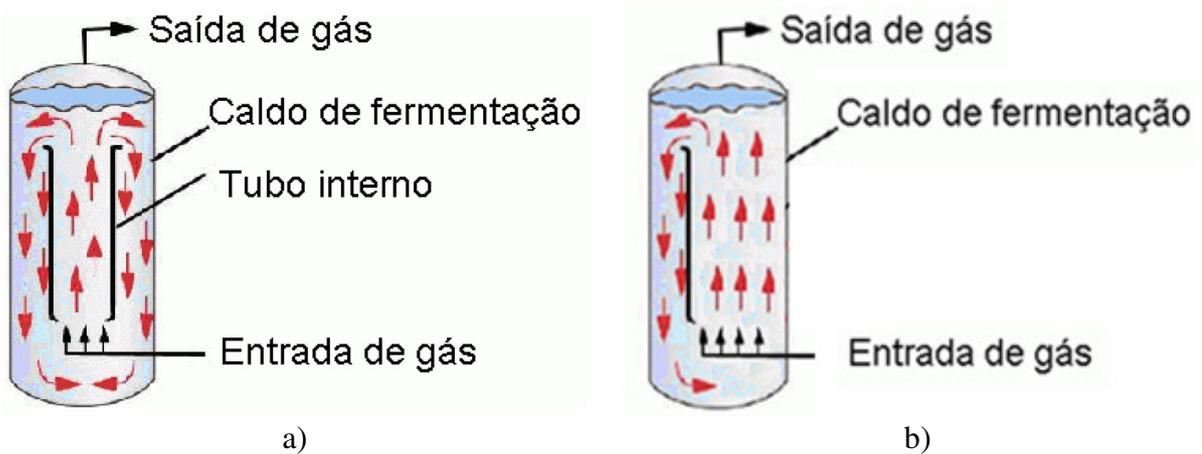
Fonte: CERRI, 2009

As duas principais categorias de biorreatores pneumáticos são biorreatores tipo coluna de bolhas e biorreatores tipo *airlift*. A configuração coluna de bolhas (Figura 1.1) apresenta uma constituição muito simples, pois não há anteparos e defletores que auxiliam/provocam recirculação interna de fluido. Enquanto o biorreator tipo coluna de bolhas trabalha basicamente com gaseificação do meio de cultivo, os modelos da categoria *airlift* são projetados para que o fluido recircule pelo sistema para promover homogeneização e, nesse caso, há duas regiões internas distintas: região de subida (*riser*) e região de descida (*downcomer*) (CHISTI, 1989). Dentro da categoria *airlift*, duas subcategorias são relevantes: biorreatores *airlift* de circulação interna e biorreatores *airlift* de circulação externa. Na primeira, a região de subida e descida se encontram na mesma cavidade, enquanto na última essas regiões são apresentadas em cavidades distintas.

Os dois tipos de biorreatores *airlift* de circulação interna são os de cilindros concêntricos e o *split* (Figuras 3.2a e 3.2b, respectivamente). A categoria cilindros concêntricos é caracterizada pela presença de um tubo interno, concêntrico à parede externa do biorreator. O gás é aspergido no interior desse tubo interno (*riser*) e seu movimento ascendente provoca a ascensão do líquido até o topo (também conhecido como região de separação). Boa parte do gás é liberada para o ambiente externo nessa região e o líquido

parcialmente degaseificado desce pela parte de fora do cilindro (*downcomer*) (THOMASI, 2010). Os elementos de fluido são, então, incorporados novamente no tubo interior quando encontram a corrente ascendente de gás, uma região de baixa pressão em virtude do efeito Bernoulli. No caso do biorreator *airlift split*, as regiões de subida e descida são separadas por uma placa vertical: o gás é aspergido em uma das metades e induz o líquido a descer pela outra região.

Figura 3.2 – Esquemas simplificados de biorreatores pneumáticos do tipo *airlift*: a) cilindros concêntricos; b) *split*



Fonte: CERRI, 2009

A Figura 3.3 mostra um biorreator tipo tanque agitado e aerado (3.3a) e um biorreator pneumático do tipo *airlift split* (3.3b) operando em laboratório.

Figura 3.3 – Biorreatores operando em laboratório: a) tanque agitado e aerado; b) *airlift split*



a)



b)

Fonte: THOMASI, 2010

3.1.2 Regimes de circulação

Conforme exposto nas definições anteriores, os biorreatores pneumáticos de circulação interna são projetados para que a fase líquida (ou meio de cultura) recircule pelo sistema, promovendo a homogeneização e facilitando os fenômenos de transferência de calor e massa. Assim, na região de separação localizada no topo da coluna, boa parte do gás é lançada para fora do biorreator seguido de procedimentos de assepsia, como filtração e esterilização. No entanto, parte do gás retorna na região de descida juntamente com o líquido. Van Benthum et al. (1999) observaram e categorizaram 3 regimes de circulação conforme a quantidade de gás que retorna pelo *downcomer*, conforme mostra a Figura 3.4.

O Regime I é caracterizado pela ausência de bolhas na região de descida. A vazão volumétrica de alimentação de gás não produz movimentação necessária no líquido que promova o arraste das bolhas no *downcomer*.

O Regime II é definido pela estagnação das bolhas de gás na região de descida. Isto ocorre porque a velocidade de líquido que retorna nessa região se iguala a velocidade das bolhas que tentam subir devido à força de empuxo.

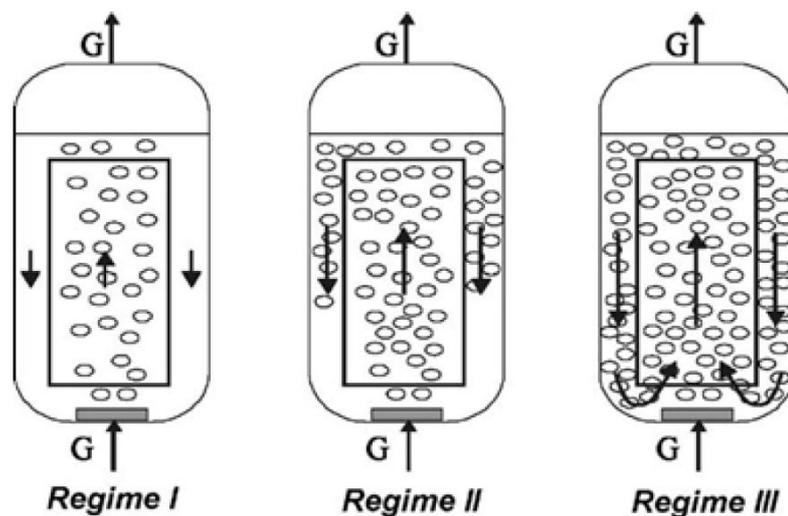


Figura 3.4 – Regimes de circulação observados em biorreatores *airlift* de cilindros concêntricos

Fonte: CERRI, 2009

O Regime III ocorre quando há recirculação total das bolhas de gás ao longo do biorreator. Isso é obtida em altas vazões de alimentação de gás.

3.1.3 Bolhas em biorreatores pneumáticos

As bolhas são alvos de importantes estudos vinculados aos biorreatores pneumáticos. A forma das bolhas e a maneira como elas se comportam no sistema podem inviabilizar uma operação de um biorreator devido, por exemplo, a uma precária transferência de oxigênio. Sabe-se que o fenômeno de coalescência, no qual bolhas menores se aglomeram e dão origem a bolhas maiores, dificultam a transferência de massa em virtude da menor área interfacial disponível (considerando o mesmo volume total de ar): é muito mais eficiente a presença de muitas bolhas pequenas do que poucas bolhas maiores.

Escoamentos de menor turbulência apresentam um ambiente favorável à coalescência. Por exemplo, quando se tem um processo conduzido em meio viscoso (baixos números de Reynolds) a superfície das bolhas se torna mais estável, facilitando a aglomeração de bolhas vizinhas e dificultando a quebra em unidades menores (SHAIKH e AL-DAHMAN, 2007). Efeitos de quebra podem ser favorecidos aumentando-se a tensão superficial (através da redução da temperatura, por exemplo) entre as bolhas de gás e o meio líquido (MOUZA ET AL., 2005).

3.2 Variáveis globais, parâmetros diversos e conceitos relevantes

Este tópico apresenta as principais variáveis referentes à operação de biorreatores pneumáticos, bem como os parâmetros de desempenho que serão o foco desse trabalho e que permitem a avaliação de um sistema. Além disso, outros conceitos relevantes serão apresentados a fim de contextualizar o conteúdo deste trabalho.

3.2.1 Vazão específica de ar (ϕ)

A vazão específica de ar é definida como o quociente entre a vazão volumétrica de alimentação de ar (Q_G) e o volume de líquido (ou meio de cultura) avaliado antes da aeração do sistema (V_L), conforme apresentado na Equação 3.1. É uma das variáveis independentes mais importantes no estudo e projeto de biorreatores, principalmente pneumáticos. Quando dois biorreatores geometricamente semelhantes de volumes diferentes operam sob mesmas vazões volumétricas de ar ambos os sistemas apresentarão diferentes níveis de aeração. No entanto, mantendo-se a vazão específica de ar, mesmo em volumes diferentes, garante-se que o nível de aeração seja equivalente. Isso facilita a comparação de

resultados quando se trata, por exemplo, de estudos focados em *scale-up*.

$$\phi = \frac{Q_G}{V_L} \quad (3.1)$$

A dimensão de ϕ é tempo⁻¹, sendo que min⁻¹ é a unidade mais adotada usualmente. Na prática é muito comum denotar min⁻¹ por "vvm" (leia-se "volume de ar por volume de meio por minuto"). Se um biorreator opera a uma vazão específica de 2 min⁻¹ (ou 2 vvm) significa que a cada minuto é injetado um volume de gás que corresponde a 2 vezes o volume inicial da fase líquida.

3.2.2 Velocidade superficial de ar na região de subida ($U_{G,S}$)

Sendo conhecido o valor da vazão de gás injetado (Q_G) e a área da seção transversal da região de subida (A_S) é possível determinar a velocidade superficial de ar na região de subida (Equação 3.2 - CHISTI, 1989), uma outra variável independente juntamente com ϕ . Muitas variáveis e parâmetros podem ser calculados e correlacionados em função dela. Ressalta-se, no entanto, que esse tipo de definição de velocidade não leva em consideração os espaços intersticiais preenchidos pelo líquido. Trata-se apenas de um valor médio de velocidade na região de subida que despreza efeitos locais.

$$U_{G,S} = \frac{Q_G}{A_S} \quad (3.2)$$

3.2.3 Retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$)

A retenção gasosa global representa a fração volumétrica de ar presente no sistema inteiro após a aeração do mesmo. É definida como a razão entre o volume do gás (V_G) e o volume da dispersão (V_L+V_G), conforme mostrado na Equação 3.3. Portanto, quando multiplicada por 100, obtém-se a porcentagem de ar presente no biorreator.

$$\bar{\alpha}_G = \frac{V_G}{V_L + V_G} \quad (3.3)$$

A retenção gasosa também pode ser avaliada em determinadas regiões do biorreator, conforme apresentado por Chisti (1989). As mais usadas são a retenção gasosa na região de subida ($\bar{\alpha}_{G,S}$) e na região de descida ($\bar{\alpha}_{G,D}$). De maneira geral, a retenção gasosa pode ser obtida em qualquer região vertical "z", desde que a diferença de pressão (ΔP) seja

conhecida nela. A Equação 3.4 foi proposta por Chisti (1989) e é oriunda da relação que avalia a pressão hidrostática entre dois pontos:

$$\bar{\alpha}_{G,z} = \frac{\rho_L}{\rho_L - \rho_G} - \frac{\Delta P}{(\rho_L - \rho_G) \cdot g \cdot h} \quad (3.4)$$

Onde h é a distância vertical entre os pontos de tomada de pressão.

Em biorreatores pneumáticos, a retenção gasosa global é um parâmetro de projeto muito importante. A partir dela, determina-se o tempo de residência do gás no líquido e a área interfacial específica de transferência de oxigênio (CERRI, 2009; THOMASI, 2010). Quanto maior a retenção gasosa, mais ar está disponível no sistema, fato essencial em cultivos aeróbios ou processos enzimáticos que dependem da transferência de oxigênio.

A retenção gasosa também apresenta valores locais ao longo do biorreator, assim como a temperatura e vetores velocidade. Chen et al. (1998) conduziram um estudo cujo objetivo era validar o perfil de retenção gasosa em um biorreator coluna de bolhas, utilizando técnicas de tomografia computadorizada. Os trabalhos de Hekmat et al. (2010) e Huang et al. (2010) valeram-se de modelos matemáticos e de correlações para determinar, através da Fluidodinâmica Computacional, perfis espaciais de retenção gasosa em biorreatores pneumáticos, avaliados em determinados instantes de tempo. Além disso, os próprios ensaios numéricos permitiram o cálculo da retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$), com posterior comparação com resultados experimentais.

3.2.4 Velocidade superficial de circulação de líquido (U_L)

A velocidade superficial de circulação de líquido é definida conforme a Equação 3.5 (CERRI, 2009):

$$U_L = \frac{x_L}{t_L} \quad (3.5)$$

Onde x_L é o módulo da trajetória que um elemento de fluido percorre para dar uma volta completa dentro do biorreator e t_L é o tempo gasto nesse percurso. Trata-se de uma variável dependente que é usada na caracterização de biorreatores *airlift*, bem como em estudos de tempo de residência.

Há também a velocidade superficial de líquido, que pode ser dividida em

velocidade superficial na região de subida ($U_{L,S}$) e descida ($U_{L,D}$). A relação entre essas duas velocidades é dada pela Equação 3.6, proveniente da conservação de massa de líquido no sistema (CERRI, 2009):

$$U_{L,S} \cdot A_S = U_{L,D} \cdot A_D \quad (3.6)$$

3.2.5 Velocidade intersticial (v)

O conceito de velocidade intersticial é aplicado quando se trata dos espaços nos quais o fluido (gás ou líquido) escoar. É como se uma fase estivesse parada enquanto a outra percola entre os interstícios da primeira. Por exemplo, no caso da velocidade intersticial do ar, é como se o líquido estivesse parado enquanto as bolhas de ar escoassem ao longo de fendas. Em aplicações que envolvem o escoamento de líquidos em leitos fixos porosos, como colunas de adsorção, o conceito de velocidade intersticial é muito relevante também. As Equações 3.7 e 3.8 mostram os cálculos das velocidades intersticiais de ar e de líquido, respectivamente. Essas variáveis dependentes são obtidas pelo quociente entre a velocidade superficial do fluido e a fração volumétrica do mesmo em uma determinada região "z" (subida ou descida) (CHISTI, 1989).

$$v_{G,z} = \frac{U_{G,z}}{\bar{\alpha}_{G,z}} \quad (3.7)$$

$$v_{L,z} = \frac{U_{L,z}}{\bar{\alpha}_{L,z}} = \frac{U_{L,z}}{1 - \bar{\alpha}_{G,z}} \quad (3.8)$$

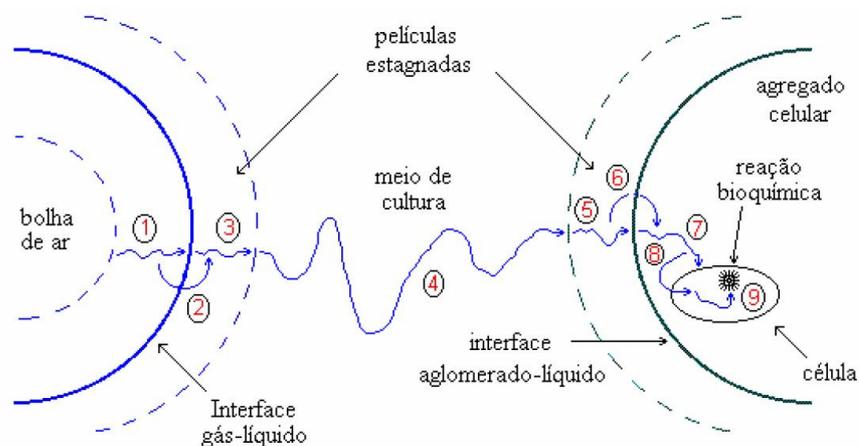
Onde $U_{i,z}$ é a velocidade superficial do fluido "i" (líquido (L) ou gás (G)) avaliada na região "z" (subida (S) ou descida (D)). O mesmo se aplica à fração volumétrica ($\bar{\alpha}$).

3.2.6 Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio ($k_L a$)

Em um biorreator no qual são produzidos biocompostos oriundos da rota metabólica de organismos aeróbios há uma demanda de oxigênio para satisfazer as necessidades respiratórias desses organismos. As bolhas que são formadas no processo de aeração apresentam compostos gasosos que não estão dissolvidos no meio de cultivo. Mas, através de mecanismos de transferência de massa, é possível que o oxigênio seja transportado da bolha para a fase líquida e penetre na estrutura celular em questão (Figura 3.5). Para o gás

disponibilizar o gás no meio é necessário vencer resistências de transporte descritas nessa figura, como películas estagnadas de fluido, interfaces, difusão no meio celular e o próprio meio de cultura. As resistências existentes estão relacionadas com as seguintes etapas: R1: difusão através da película estagnada de gás; R2: passagem através da interface; R3: difusão através da película estagnada de líquido; R4: transporte através do caldo; R5: difusão através da película estagnada externa ao agregado celular; R6: passagem pela interface do agregado celular; R7: difusão no interior do agregado celular; R8: passagem pela membrana celular; R9: difusão no citoplasma (CERRI, 2005).

Figura 3.5 – Transferência de oxigênio da bolha de ar até o interior do microrganismo celular

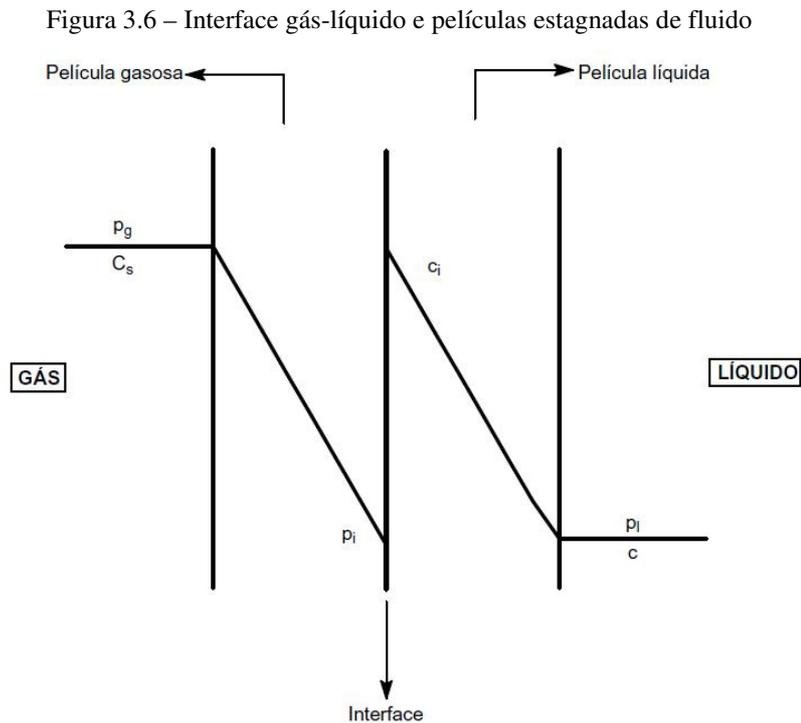


Fonte: BAILEY E OLLIS, 1986

Para calcular a velocidade de transferência de oxigênio do interior da bolha até o meio de cultura recorre-se ao modelo de película estagnada, conforme o diagrama representado pela Figura 3.6. A interface representa a superfície da bolha, sendo que as películas estagnadas são porções adjacentes a essa interface onde não ocorre homogeneização. Para que o oxigênio deixe o interior da bolha e migre ao seio do meio de cultura deve haver um gradiente de concentração desse gás entre essas 2 regiões. Para isso, devem ser considerados três fenômenos de transferência de massa: 1) transferência de oxigênio do interior da bolha até sua interface, passando pela película estagnada gasosa; 2) transferência de oxigênio através da interface da bolha; 3) transferência de oxigênio da interface até o meio de cultura, passando pela película estagnada líquida.

Na prática, no entanto, assume-se que a resistência ao transporte de oxigênio do interior da bolha até sua interface seja desprezível, pois há intensa movimentação de gás na bolha e a resistência imposta pelo filme líquido é muito maior comparada com a do filme

gasoso. Isso implica que a concentração de oxigênio na interface é numericamente igual àquela no interior da bolha, ou seja, $C_s=C_i$. De maneira análoga, a resistência ao transporte através da interface da bolha também pode ser desconsiderada. Logo, a única resistência que resta é a imposta pelo filme líquido. A quantificação dessa resistência é feita avaliando-se o inverso do coeficiente de transferência de oxigênio na película líquida, isto é, $1/k_L$. Dessa maneira, a densidade de fluxo de oxigênio (\dot{n}_{O_2}), no estado estacionário, avaliada entre a superfície da bolha e o meio de cultura é calculada através da Equação 3.9.



Fonte: THOMASI, 2010

$$\dot{n}_{O_2} = \frac{\text{Força motriz}}{\text{Resistência}} = \frac{C_s - C}{1/k_L} = k_L \cdot (C_s - C) \quad (3.9)$$

É muito mais conveniente expressar a densidade de fluxo de oxigênio, que está expressa em (massa/área.tempo), em termos volumétricos (massa/volume.tempo). Para isso, multiplica-se a Equação 3.9 pela área interfacial específica das bolhas, definida pela Equação 3.10.

$$a = \sum A_{\text{bolhas}}/V_L \quad (3.10)$$

Esse parâmetro quantifica a área interfacial de todas as bolhas que estão presentes em um volume unitário da fase líquida. Quanto maior for "a", maior a área

interfacial disponível para transferência de oxigênio entre as bolhas e o meio líquido.

A concentração de oxigênio no interior da bolha (C_s), agora denominada por C_{sat} (concentração de saturação), é definida como sendo a concentração de oxigênio obtida na fase líquida que está em equilíbrio com a pressão parcial de oxigênio calculada no interior da bolha. Essa definição decorre da Lei de Henry, que é aplicável para gases pouco solúveis como o oxigênio. A solubilidade deste gás em meios de cultura varia entre 8 a 10 mg/L. Assim, a Equação 3.9 resulta na Equação 3.11 (BAILEY E OLLIS, 1986). N_{O_2} é a velocidade volumétrica de transferência de oxigênio.

$$N_{O_2} = k_L a (C_{sat} - C) \quad (3.11)$$

Quando o oxigênio chega ao meio líquido, é necessário que o mesmo seja transportado ao interior da célula. A eficiência desse transporte irá depender de parâmetros do meio de cultura (viscosidade, solubilidade, etc), do tipo de microrganismo celular e da hidrodinâmica do sistema. Assim, um bom biorreator é aquele que fornece condições hidrodinâmicas adequadas para que a transferência de massa ocorra eficientemente desde a bolha até o interior da célula.

O $k_L a$, portanto, é uma variável global fundamental, pois está relacionada ao desempenho de biorreatores pneumáticos em processos de transferência de oxigênio (CERRI et al., 2010), necessários em cultivos aeróbios. Esse parâmetro é obtido pelo produto do coeficiente convectivo de transferência de oxigênio (k_L) e da área interfacial específica das bolhas (a). Normalmente, a influência de cada parâmetro (k_L e " a ") na transferência de oxigênio não são claras (CERRI ET AL., 2010). Assim, a separação desses parâmetros deve ser realizada para uma melhor compreensão do mecanismo de transferência de massa em sistemas gás-líquido (BOAUFU ET AL., 2001). Pesquisadores concluíram que os maiores valores de $k_L a$ ocorrem em altas vazões de alimentação de ar (GIOVANNETTONE E GULLIVER, 2008). Ambos, k_L e " a ", foram determinados separadamente por Wongsuchoto et al. (2003), verificando-se que o segundo é mais sensível à vazão de ar do que o primeiro. Logo, ao se conduzir ensaios que visam otimizar o valor do produto " $k_L \times a$ ", é necessário ter em mente que a partir de um certo nível de aeração (alto número de Reynolds), o valor de k_L é praticamente constante, sendo pouco afetado pela vazão de ar e geometria do sistema, já que é um parâmetro intrínseco do meio líquido. No entanto, " a " é muito mais sensível às condições operacionais, pois é função direta da retenção gasosa global. Partindo-se da definição dos

conceitos de retenção gasosa global (Equação 3.3) e da área interfacial específica das bolhas (Equação 3.10), chega-se à relação entre "a" e $\bar{\alpha}_G$, representada pela Equação 3.12.

$$a = \frac{6 \cdot \bar{\alpha}_G}{D_b (1 - \bar{\alpha}_G)} \quad (3.12)$$

onde D_b é o diâmetro da bolha de ar.

A Equação 3.12 permite a estimativa da área interfacial específica através do conhecimento do valor da retenção gasosa global e assumindo que as bolhas sejam perfeitamente esféricas e possuam o mesmo diâmetro. Assim, estudos que visam o aprimoramento da transferência de oxigênio podem ser conduzidos através do monitoramento da retenção gasosa global, uma vez que ela está diretamente relacionada ao valor de "a". Quanto ao parâmetro k_L , este pode ser estimado através de correlações propostas na literatura e seu valor depende do tipo de fluido e de parâmetros como morfologia das bolhas e regime de escoamento.

3.2.7 Fluidos Newtonianos e não-Newtonianos

Os fluidos Newtonianos são aqueles nos quais a tensão de cisalhamento e gradiente de velocidade (taxa de deformação ou taxa de cisalhamento) são proporcionais entre si, sendo que a constante de proporcionalidade é definida como a viscosidade dinâmica do fluido, tal como mostra a Equação 3.13:

$$\tau = -\mu \frac{dv}{dy} = -\mu \cdot \dot{\gamma} \quad (3.13)$$

Onde τ é a tensão de cisalhamento entre "lâminas" paralelas de fluido, μ é a viscosidade dinâmica e $\dot{\gamma}$ é a taxa de deformação ou de cisalhamento.

Fluidos não-Newtonianos são aqueles em que a Equação 3.13 não é aplicável, ou seja, a tensão de cisalhamento não é linear com a taxa de aeração. Para tais fluidos utilizam-se outras relações, como a equação de Ostwald de Waele, representada pela Equação 3.14:

$$\tau = -K \left(\frac{dv}{dy} \right)^n = -K \cdot \dot{\gamma}^n \quad (3.14)$$

onde K é o índice de consistência do fluido e n é seu índice de comportamento de

escoamento. Soluções de goma xantana apresentam comportamento pseudoplástico ($n < 1$) e simulam a reologia de um típico caldo fermentativo.

3.2.8 Caracterização das bolhas

Dentre os fatores que são importantes no escoamento bifásico gás-líquido está o formato das bolhas. Ele é influenciado fortemente pelo próprio tamanho das bolhas, pelas propriedades físicas do líquido e pelo modo de operação do sistema (KRISHNA, 2000). A fim de quantificar como esses parâmetros influenciam a característica morfológica das bolhas, Clift et al. (1978) propuseram um ábaco que envolve 3 números adimensionais: número de Reynolds de bolha (Re_b), número de Eötvos (Eö) e número de Morton (M), definidos pelas Equações 3.15, 3.16 e 3.17, respectivamente.

$$Re_b = \frac{\rho_L \cdot |v_G - v_L| \cdot D_b}{\mu_L} \quad (3.15)$$

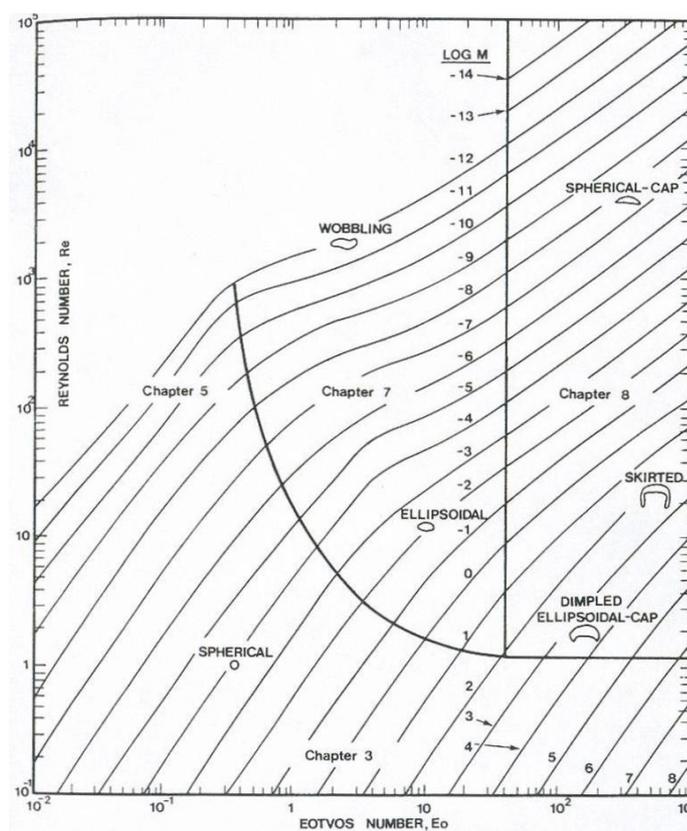
$$Eö = \frac{(\rho_L - \rho_G) \cdot g \cdot D_b^2}{\sigma} \quad (3.16)$$

$$M = \frac{(\rho_L - \rho_G) \cdot g \cdot \mu_L^4}{\rho_L^2 \cdot \sigma^3} \quad (3.17)$$

Onde ρ_L e ρ_G são as densidades do líquido e do gás, respectivamente, v_L e v_G são as velocidades intersticiais do líquido e do gás, respectivamente, μ_L é a viscosidade do líquido, σ é a tensão superficial obtida na interface gás-líquido, D_b é o diâmetro da bolhas e g é o valor da aceleração gravitacional.

O número de Reynolds de bolha representa numericamente a relação entre as forças inercial e viscosa que agem no escoamento. O número de Eötvos relaciona a força gravitacional e a força proveniente da tensão superficial. Já o número de Morton é simplesmente um arranjo adimensional numericamente conveniente entre algumas propriedades físicas. Calculados estes adimensionais, recorre-se ao ábaco representado pela Figura 3.7. Basta entrar com os valores obtidos e localizar a região correspondente para determinar a o formato das bolhas.

Figura 3.7 – Ábaco Re x Eö x M para a determinação do formato das bolhas



Fonte: CLIFT, 1978

3.3 Aspectos da fluidodinâmica computacional

A fim de contextualizar de maneira breve o tema da pesquisa e facilitar a compreensão do desenvolvimento do trabalho, serão abordados alguns tópicos sobre fluidodinâmica computacional.

A fluidodinâmica é a Ciência que estuda o movimento de meios fluidos. A importância em conhecer com mais detalhes os fenômenos envolvidos no escoamento reside na necessidade de se conhecer padrões físicos que permitam o domínio de um determinado processo de interesse industrial. Por exemplo, a compreensão dos fenômenos envolvidos no escoamento em biorreatores pneumáticos permite seu projeto e a melhoria do mesmo (otimização).

A Fluidodinâmica Computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*) é um conjunto de avançadas técnicas numéricas que possibilita a simulação computacional de escoamentos para previsões quantitativas dos fenômenos relacionados aos mesmos. Essas previsões quantitativas são perfis espaciais e transientes de variáveis como

pressão, velocidade, fração volumétrica, temperatura, etc. Os resultados são obtidos através da resolução numérica de equações diferenciais parciais provenientes dos fenômenos de transferência de quantidade de movimento, calor e massa e dos princípios de conservação. No entanto, tais equações apresentam uma alta complexidade de resolução e exigem métodos numéricos robustos. Além disso, a técnica permite a simulação computacional dos fenômenos de transporte envolvidos no problema para geometrias irregulares e complexas em condições generalizadas.

Para que as equações sejam resolvidas numericamente é necessária a implementação de métodos numéricos discretos, como por exemplo o método dos volumes finitos, usado pela maioria dos *softwares* de CFD. As equações diferenciais parciais são discretizadas e aplicadas para qualquer elemento de volume de controle finito que esteja no interior do domínio (região onde ocorre o escoamento e outros fenômenos de transferência). Assim, é necessário que a geometria desse domínio seja particionada em um grande número de células com volumes de controle finitos. Dadas as condições iniciais, de contorno e condições físicas, as equações de balanço discretizadas são resolvidas em cada célula. Essa resolução é feita iterativamente, sendo que a solução (perfis de velocidade, pressão, temperatura, concentração, etc.) é melhorada a cada passo. O processo termina quando um critério numérico de parada é satisfeito e a solução final é retornada para o usuário. Então, cabe ao usuário avaliar se a solução obtida é coerente com os valores obtidos experimentalmente ou se há a necessidade de melhorar alguma etapa da simulação (seja na definição das equações, das propriedades físicas ou de parâmetros associados ao método numérico utilizado).

Há muitas vantagens em usar as técnicas de CFD. As simulações retornam respostas de maneira rápida e barata, possibilitando a estimativa prévia de resultados experimentais. É possível investigar a influência de parâmetros físicos no desempenho global de um processo ou no comportamento de uma variável específica. Essa investigação pode ser feita em uma gama de possibilidades e muitas vezes pode conduzir a otimização do processo. É muito comum também o uso de CFD em projetos de aumento de escala (*scale-up*).

As desvantagens da técnica de CFD residem no fato de se obter soluções aproximadas ao caso real. Muitos fenômenos que ocorrem na prática podem não ser considerados devido a redução do esforço computacional ou simplesmente podem não estar perfeitamente representados pelas teorias científicas atuais. Além disso, os próprios métodos

numéricos propostos apresentam limitações que produzem erros associados. Portanto, vale lembrar que as previsões computacionais são baseadas em hipóteses e considerações, sendo que a Natureza não utiliza esses recursos.

A técnica de CFD apresenta 5 etapas básicas, conforme apresentado nas seções seguintes. Aspectos quantitativos, como definição das equações de balanços diferenciais, correlações, forças externas, parâmetros numéricos de resolução, entre outros, serão apresentados em Materiais e Métodos.

3.3.1 Geometria do domínio

Essa é a primeira etapa da técnica de CFD e consiste na geração da geometria do domínio. Através de ferramentas de desenho oferecidas por pacotes gráficos computacionais, realiza-se uma representação virtual do domínio real. Quanto mais avançados estiverem os recursos gráficos computacionais (placa de vídeo, *software* empregado, ferramentas de desenho, capacidade de processamento numérico, etc), mais detalhada e complexa a geometria poderá ser. Entende-se por "complexos" os domínios que não apresentam um padrão geométrico definido apenas pelas formas básicas, como triângulos, quadriláteros, círculos e polígonos regulares. Exemplos disso são o próprio corpo humano e uma hélice marinha.

3.3.2 Geração da malha computacional

A malha computacional é gerada após a geometria e consiste em subdividir o domínio em muitas partes pequenas e finitas, denominada células computacionais. A intersecção entre linhas de uma malha se chama nó e o elemento de volume formado entre os nós se chama célula. Quando se resolve numericamente as equações governantes, os resultados das variáveis (pressão, velocidade, etc) podem ser avaliados em cada nó da malha, fornecendo assim um perfil espacial discreto de cada grandeza. Há 2 tipos de malhas: estruturadas e não-estruturadas. As primeiras apresentam um padrão definido previamente em sua construção e, em geral, otimizam os cálculos posteriores por facilitar o endereçamento dos nós. As últimas não possuem um padrão regular, geralmente formadas por volumes de controle tetraédricos, e são computacionalmente onerosas. No entanto, são mais versáteis na subdivisão de geometria irregulares.

3.3.3 Pré-processamento

Após dividir o domínio em partes menores, é necessária a modelagem matemática do problema. Isto é feito pela seleção de modelos pré-definidos nos *softwares* comerciais. Além disso, todas as propriedades físicas do sistema, condições iniciais e de contorno, bem como os parâmetros dos métodos numéricos adotados são definidos nessa etapa. Em alguns *softwares*, é possível criar e alterar modelos pré-definidos conforme a necessidade do usuário.

Ao final do pré-processamento, um arquivo de dados contendo todas as informações do problema é gerado.

3.3.4 Processamento

Nessa etapa, o *solver*, que é o *software* que de fato resolve as equações governantes, lê o arquivo de dados gerado na etapa de pré-processamento. Então, as equações são resolvidas em cada volume de controle finito do domínio, dando início a um processo iterativo que pode demorar dias, semanas e até meses conforme a complexidade do problema e da capacidade de processamento do computador. Os cálculos terminam quando critérios numéricos de parada impostos pelo usuário são satisfeitos e um arquivo de resultados é gerado.

3.3.5 Pós-processamento

A etapa de pós-processamento é aquela na qual o arquivo de resultados gerado pelo *solver* é lido e convertido em informações visualmente interpretáveis. Os resultados relevantes podem ser exibidos na forma de gráficos, mapas de contorno, campos vetoriais e animações complexas. Perfis de temperatura, por exemplo, podem ser apresentados em um mapa de contorno, onde regiões mais frias são azuis e as mais quentes são vermelhas.

3.4 Trabalhos relacionados à hidrodinâmica de biorreatores pneumáticos

Este tópico se destina à apresentação dos trabalhos que tiveram relevância na proposição e desenvolvimento desta pesquisa e que foram reportados na forma de periódicos e documentação acadêmica (Dissertações e Teses).

3.4.1 Aspersão de ar em biorreatores pneumáticos

Conforme abordado anteriormente a injeção de gás é responsável pela movimentação do meio reacional em biorreatores pneumáticos. Portanto, esse procedimento promove a homogeneização do sistema, facilitando os processos de transferência de quantidade de movimento, calor e massa. Assim, a maneira como ocorre a aspersão de qualquer gás tem grande influência no desempenho global do processo. Em outras palavras, o formato do aspersor é capaz de alterar significativamente a hidrodinâmica de um biorreator pneumático, abrindo novas possibilidades de pesquisa.

Merchuk et al. (1998) verificaram a influência do tipo de aspersor no processo de mistura em *airlift* de cilindros concêntricos, considerando a água do mar como fluido. Os resultados apontaram que a geometria e o tamanho do poro são fatores consideráveis em sistemas cujos fluidos não favorecem a coalescência, como a água do mar. O aspersor foi capaz de modificar o regime de escoamento (uniforme, transiente e heterogêneo). Observou-se também que o tempo de mistura sofreu mais influência em baixas velocidades gasosas.

Contreras et al. (1999) estudaram a influência do tamanho do poro do aspersor na tensão de cisalhamento, dissipação de energia e transferência de massa em um biorreator *airlift* de cilindros concêntricos. O fluido adotado foi a água do mar, com o intuito de cultivar *Marine microalgae*, um organismo produtor de corantes naturais, ácidos graxos poliinsaturados e polissacarídeos. Os resultados apontaram que menores tamanhos reduzem a tensão de cisalhamento e aumentam a transferência de massa. Altas tensões foram verificadas nas regiões de fundo, ascensão e separação, áreas que influenciam o comportamento global do sistema e são determinantes no aumento de escala.

Polli et al. (2002) investigaram a influência da geometria do aspersor (anel perfurado ou placa perfurada) na distribuição do tamanho das bolhas próxima à região de aspersão. Parâmetros como tamanho dos furos, número de furos, distância entre eles e vazão de gás também foram variados. O estudo foi desenvolvido experimentalmente através da técnica fotográfica, sendo que modelos matemáticos baseados em balanços populacionais foram empregados e resolvidos através de *software* criado em linguagem FORTRAN[®] para prever o tamanho e distribuição das bolhas formadas no aspersor.

Badino et al. (2006, 2007) patentearam (agência financiadora: FAI-UFSCar) um aspersor tipo “cruzeta” instalado em biorreator *airlift* de cilindros concêntricos que

promoveu boa transferência de oxigênio, com menor consumo de energia, em comparação com biorreator convencional tipo tanque agitado e aerado.

3.4.2 Simulação da hidrodinâmica de biorreatores pneumáticos através da técnica de CFD

A grande maioria dos trabalhos desenvolvidos nesse assunto propõe modelos matemáticos baseados naqueles já existentes nos pacotes computacionais disponíveis, entre eles o FLUENT[®], CFX[®] e ASTRID CFD[®]. Tais modelos, oriundos das equações de conservação de quantidade de movimento, energia e massa, visam descrever o comportamento hidrodinâmico do sistema, a fim de prever parâmetros de processo indispensáveis na análise de desempenho desses equipamentos.

Cockx et al. (1997) propuseram um novo modelo hidrodinâmico para reatores de circulação interna de geometria retangular. O formalismo foi baseado em duas fases (líquido-gás), sendo que o modelos de caixa preta (1D) e fluidodinâmicos (3D) foram adotados. As equações de balanço foram resolvidas no *software* ASTRID CFD[®]. O modelo mostrou bons resultados quando comparado com ensaios experimentais, mas é restrito à geometria adotada.

Mudde e Van Den Akker (2001) apresentaram resultados de simulação bidimensional (2D) e tridimensional (3D) de um reator *airlift* retangular de circulação interna operando no estado estacionário a baixas vazões de alimentação de ar. Os cálculos de velocidade de líquido e de fração de gás foram conduzidos no *software* FLUENT[®] v. 4.5, considerando o modelo k-ε de turbulência. Os resultados, principalmente os referentes à região de separação, foram sensíveis à geometria do aspensor e ao fato dele estar, ou não, tocado à parede interna.

Van Baten et al. (2003) estudaram a hidrodinâmica de biorreatores *airlift* de circulação interna através da proposição e validação de modelos matemáticos baseados na turbulência em fase líquida (k-ε). As equações previram com boa concordância a fração volumétrica gasosa e as velocidades de líquido nas regiões de subida e descida, sendo que os autores valeram-se da hipótese de simetria axial. Todo o problema foi resolvido no *software* comercial CFX[®] 4.2 e 4.4.

Blazej et al. (2004) apresentaram os resultados da simulação gás-líquido realizadas no *software* comercial FLUENT[®], sendo que o aparato experimental consistiu de

um reator *airlift* de circulação interna. As equações foram obtidas de balanços de quantidade de movimento considerando o modelo de turbulência k- ϵ . Os dados calculados foram comparados experimentalmente através do monitoramento de uma partícula magnética e a perda de carga foi avaliada no intuito de obter a fração volumétrica gasosa. Os autores observaram que na região de subida o modelo se ajustou aos dados experimentais, mas erros grosseiros foram constatados na região de descida, indicando a busca de novas equações e refinamento/revisão das malhas adotadas na discretização.

Santos (2005) verificou a influência da fase contínua, da velocidade de entrada do gás, do tamanho das bolhas e de três correlações para forças de arraste em coluna de bolhas. O autor concluiu que para altas velocidades superficiais do gás os fenômenos de coalescência e quebra das bolhas devem ser considerados.

Li et al. (2009) estudaram o efeito da configuração do aspensor em uma coluna de bolhas cilíndrica através da técnica de CFD aliada à modelos de coalescência. Os autores verificaram grande influência na retenção gasosa global, tempo de mistura, turbulência e tamanho das bolhas. Ao aumentar o número de furos, observou-se um aumento na retenção gasosa global e uma diminuição do tamanho das bolhas.

Huang et al. (2010) conduziram um estudo que objetivou a simulação, verificação e comparação com dados da literatura do escoamento gás-líquido em reator *airlift* de circulação interna no estado estacionário. O regime permanente foi adotado pelo fato de economizar tempo de simulação e ser ideal no projeto de biorreatores em fase plena de operação. Vários modelos de estimativa do coeficiente de transferência de massa foram comparados, sendo que alguns não foram aplicáveis à situação prática. Além disso, os autores forneceram perfis espaciais teóricos da retenção gasosa ao longo do biorreator.

Hekmat et al. (2010) propuseram um estudo de modelagem para a determinação da distância ótima entre o tubo concêntrico e a parede do biorreator *airlift*, a fim de proporcionar maior mistura entre gás e líquido. Este trabalho foi semelhante ao proposto por Huang et al. (2010). Dentre as diferenças, Hekmat et al. (2010) forneceram perfis espaciais da retenção gasosa em instantes pré-determinados. Foi verificado que para maiores distâncias, houve maior mistura e menor fração volumétrica gasosa. O modelo matemático empregado foi verificado utilizando os resultados experimentais obtidos por Menzel et al. (1990).

Silva (2011) propôs o estudo das forças interfaciais que atuam no escoamento gás-líquido em uma coluna de bolhas de seção retangular com aeração centralizada. Todo o trabalho foi conduzido sob a formulação Euleriana para ambas as fases. Diversos modelos de força de arraste, sustentação, dispersão turbulenta e massa virtual foram analisados. Com base na comparação com valores experimentais de retenção gasosa global o autor definiu os melhores modelos. De todas as forças citadas, apenas a força de massa virtual não apresentou influência relevante quando considerada. Segundo o autor, todas as demais devem ser incluídas na simulação de sistemas que operem em condições semelhantes às aquelas estudadas pelo mesmo.

Bannari et al. (2011) propuseram o estudo de um biorreator *airlift* de cilindros concêntricos com agitação. Para modelar a distribuição do tamanho das bolhas no sistema água-ar, os autores usaram equações de coalescência baseados em modelos populacionais. Os autores validaram os modelos matemáticos via CFD e concluíram que a presença do agitador promoveu um aumento de 30% no coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio. No entanto, esse aumento é contrabalançado com pelo maior consumo de energia.

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

Lau et al. (2014) consideraram um modelo completo de coalescência e quebra de bolhas em abordagem Euleriana-Lagrangeana. Foi empregada uma coluna de bolhas de seção quadrada operando com água e ar. Os estudos foram conduzidos variando-se o número de Weber, a distribuição do tamanho das bolhas e a velocidade superficial de gás na região de subida. Os autores concluíram que o aumento do número de Weber causa mudanças na distribuição das bolhas, onde foram encontradas muitas bolhas pequenas devido a altas taxas de quebra. O aumento da velocidade superficial de gás provocou também o aparecimento de bolhas pequenas devido aos menores espaços disponíveis em decorrência de um aumento local na fração volumétrica gasosa.

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. Os autores empregaram um reator coluna de bolhas de seção quadrada operando com água e ar e concluíram que o modelo de Ishii e Zuber (1979) é recomendável para se obter melhores perfis de velocidade da fase gasosa. A combinação de modelos de arraste e sustentação forneceram boas predições nos perfis axiais de velocidade para ambas as fases. A adição da força de massa virtual e de dispersão turbulenta não provocou nenhum efeito notável na distribuição de velocidades. A força de lubrificação da parede provocou a superestimativa desses perfis.

3.4.3 Considerações finais

Com base na literatura pesquisada, observa-se que apesar de se encontrar na literatura diversos trabalhos relacionados com a modelagem de biorreatores pneumáticos via fluidodinâmica computacional, há a necessidade de mais estudos relacionados à investigação principalmente da influência da geometria, do tipo de fluido e das condições de operação na hidrodinâmica e na transferência de massa de biorreatores pneumáticos de diferentes características, que são usados para a produção de biocombustíveis e outras biomoléculas de importância comercial. Ainda, observa-se uma carência de trabalhos que buscam a modelagem em condições extremas de operação (altas vazões de ar) necessárias para que haja adequada transferência de oxigênio e que impõem condições de turbulência nos processos, distanciando-se das condições ideais de escoamento onde a modelagem prevê com maior segurança os fenômenos existentes. Adicionalmente, a técnica de CFD possibilita a implementação e resolução de modelos matemáticos complexos aplicados em geometrias mais detalhadas. O conhecimento no assunto é importante na redução de custos de implementação experimental, uma vez que a técnica permite obter resultados mais refinados que serão usados como previsão ao comportamento real. Além disso, permite a estimativa de importantes parâmetros de desempenho que nada mais são do que critérios de seleção e avaliação de biorreatores pneumáticos.

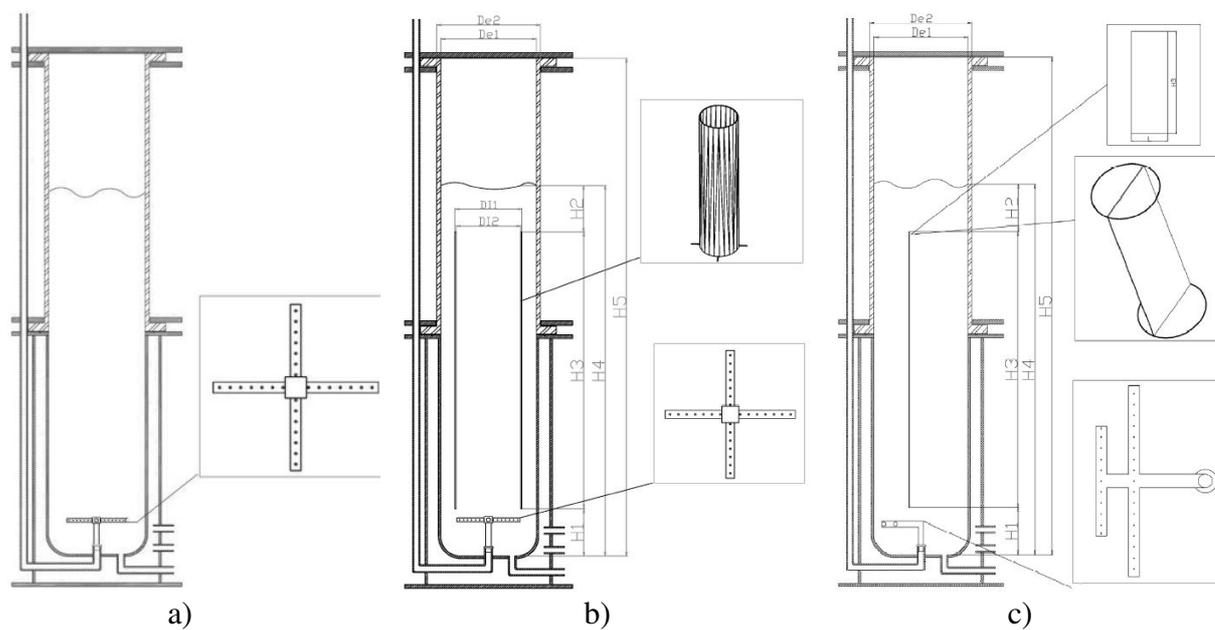
4. MATERIAIS E MÉTODOS

Esta seção apresenta o procedimento experimental e as técnicas numéricas adotadas ao longo deste trabalho.

4.1 Aparato experimental

Os aparatos utilizados estão apresentados nos trabalhos de Thomasi et al. (2010) e Mendes e Badino (2015). Foram estudadas três geometrias patenteadas de biorreatores pneumáticos apresentadas na Figura 4.1: coluna de bolhas, *airlift* de cilindros concêntricos e *airlift split*. Todos possuem 5 L de volume útil preenchido com água destilada. As 3 geometrias apresentam formato cilíndrico com 12,5 cm de diâmetro e 60,0 cm de altura, sendo 45 cm preenchidos inicialmente pela fase líquida. O detalhamento das relações geométricas conforme a notação da Figura 4.1 está apresentado na Tabela 4.1.

Figura 4.1 – Modelos de biorreatores pneumáticos abordados no presente trabalho: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



Fonte: THOMASI ET AL., 2010

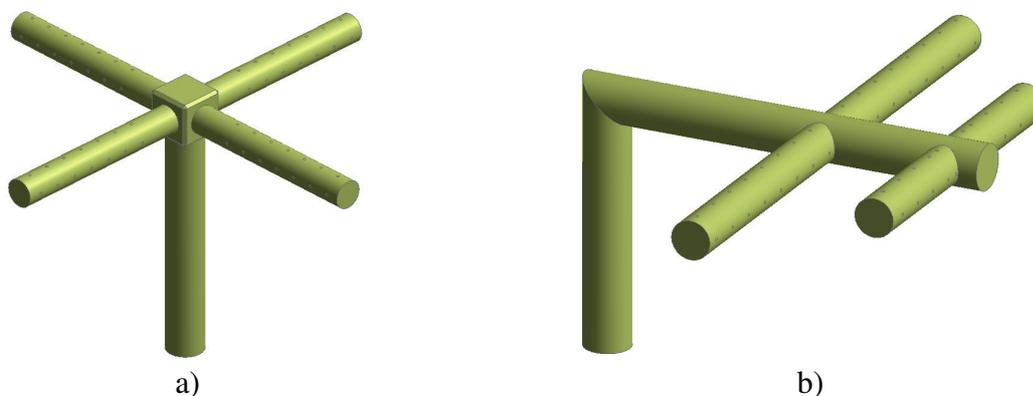
Tabela 4.1 – Relações geométricas dos três biorreatores de 5 L

| Medida | Coluna de bolhas | <i>Airlift</i> de cilindros concêntricos | <i>Airlift split</i> |
|---------------|------------------|--|----------------------|
| H1 (m) | - | 0,045 | 0,045 |
| H2 (m) | - | 0,055 | 0,055 |
| H3 (m) | - | 0,350 | 0,350 |
| H4 (m) | 0,450 | 0,450 | 0,450 |
| H5 (m) | 0,600 | 0,600 | 0,600 |
| De1 (m) | 0,125 | 0,125 | 0,125 |
| H4/De1 (m) | 3,60 | 3,60 | 3,60 |
| A_D/A_S (-) | - | 1,78 | 1,38 |
| DI2/De1 (-) | - | 0,60 | - |
| L (m) | - | - | 0,124 |

Fonte: adaptado de THOMASI ET AL., 2010

As geometrias coluna de bolhas e *airlift* de cilindros concêntricos possuem um aspersor do tipo cruzeta com 84 orifícios de 0,5 mm de diâmetro, espaçados igualmente em 5,0 mm (Figura 4.2a). O modelo *airlift split* possui o aspersor do tipo espinha de peixe, que dispõe de 78 orifícios de 0,5 mm com espaçamento variável (Figura 4.2b).

Figura 4.2 – Aspersores utilizados: a) cruzeta; b) espinha de peixe



Fonte: Acervo próprio

4.2 Metodologia computacional

4.2.1 Software

Todos os procedimentos característicos da Fluidodinâmica Computacional descritos na Seção 3.3 foram executados em *softwares* presentes na suíte de aplicativos ANSYS® 14.5. As geometrias computacionais dos biorreatores pneumáticos e dos aspersores utilizados foram geradas no ANSYS DesignModeler® 14.5, sendo que as malhas

computacionais foram produzidas usando recursos do Gambit v. 2.4. A etapa de pré-processamento e de processamento (simulações numéricas) foram conduzidas no *solver* ANSYS FLUENT[®] 14.5. Os gráficos foram gerados no ANSYS FLUENT[®] 14.5 e ANSYS CFD POST[®] 14.5, conforme a necessidade.

4.2.2 Hardware

Utilizou-se um servidor com placa-mãe Intel Server Board que dispõe de 2 processadores Intel Xeon 2.0 GHz (12 núcleos por processador) e 16 GB de memória RAM. A placa de vídeo QUADRO PNY 1 Gb foi necessária para a manipulação de objetos tridimensionais e a visualização de mapa de cores tridimensionais (*volume rendering*).

4.2.3 Planejamento das simulações

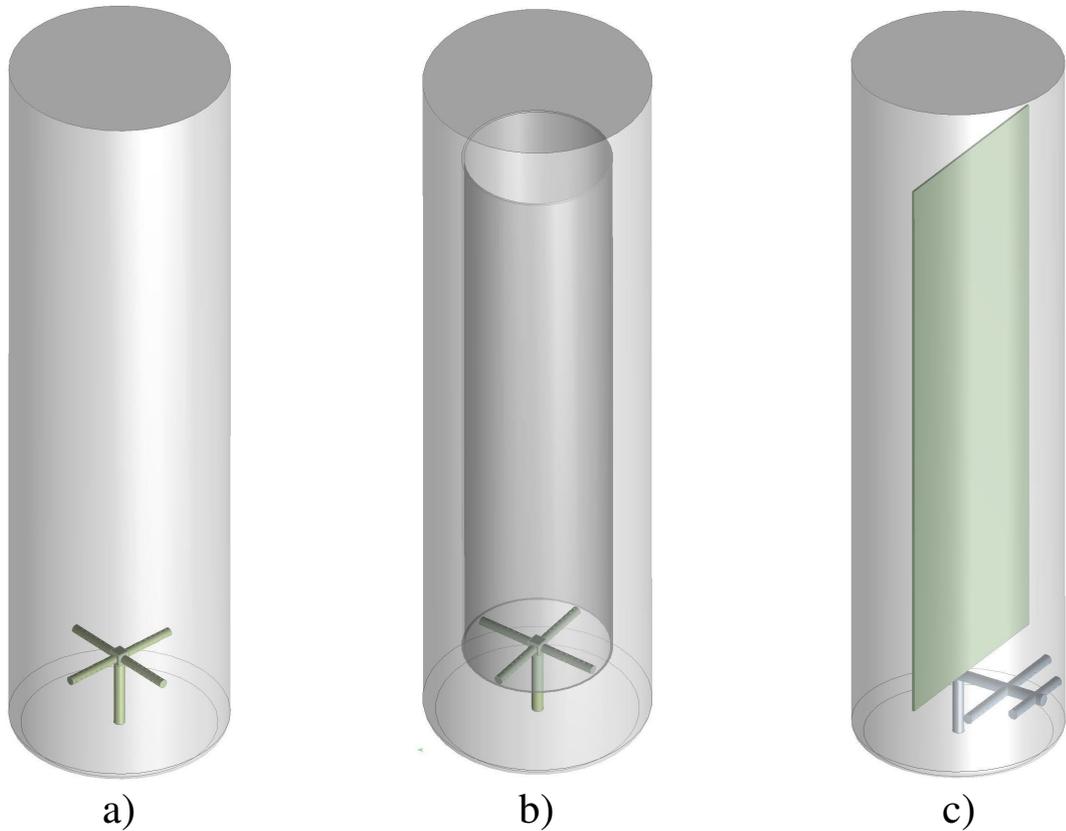
Esta subseção descreve qualitativamente como os ensaios computacionais foram conduzidos a fim de cumprir os objetivos propostos. Os detalhes numéricos, gráficos e outras informações quantitativas serão abordadas nas subseções seguintes e discutidas na seção Resultados e Discussão.

Para cada vazão específica de ar na faixa de 1 a 5 vvm foram preparadas simulações nas três geometrias (coluna de bolhas, *airlift* de cilindros concêntricos e *airlift split*), envolvendo os três fluidos: água destilada, solução de glicerol 10 cP e solução de goma xantana 0,2% m/v. Após o preparo das simulações (pré-processamento), iniciou-se o processo de resolução (processamento) para cada condição de vazão estabelecida. Ao final, através de recursos do *software* e da criação de funções customizadas (definição de novas variáveis a partir da combinação de outras já calculadas), os valores da retenção gasosa global e do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio foram obtidos (pós-processamento).

4.2.4 Geometria computacional

A geometria computacional consiste de uma réplica virtual do sistema em estudo, que neste caso são os três biorreatores pneumáticos. Partindo das dimensões fornecidas por Thomasi et al. (2010) (Figura 4.1 e Tabela 4.1), construiu-se as geometrias computacionais mostradas na Figura 4.3 através das ferramentas do ANSYS DesignModeler[®] 14.5.

Figura 4.3 – Geometrias computacionais dos 3 biorreatores pneumáticos em estudo: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



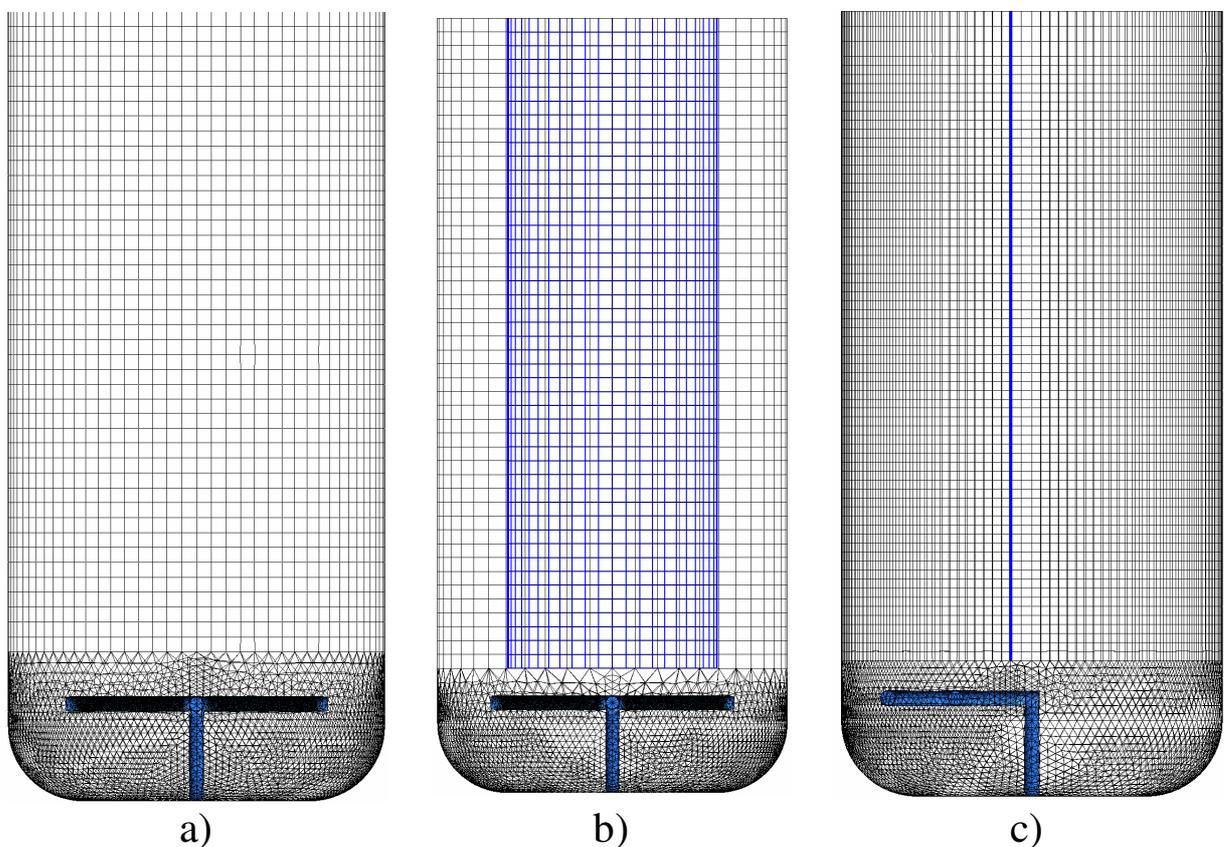
Fonte: Acervo próprio

4.2.5 Malha computacional

Adotou-se a estratégia de malha híbrida do tipo *tet/hex* em cada um dos três sistemas (Figura 4.4). A região de aspersão nos biorreatores pneumáticos é um local importante e ao mesmo tempo complicado do ponto de vista de modelagem e resolução numérica, visto que se têm altos gradientes de velocidade e fração volumétrica de gás. Além disso, o tamanho dos orifícios do aspersor é menor do que qualquer outro parâmetro geométrico do sistema, o que dificulta a geração de malha. Sabe-se que malhas tetraédricas são mais versáteis, pois se adequam praticamente a qualquer geometria. Por esta razão, em regiões próximas ao aspersor (nas bases das colunas), empregou-se malha essencialmente tetraédrica, sendo que nas regiões restantes foram geradas malhas hexaédricas. Refinamentos ao redor dos aspersores foram necessários em virtude dos altos gradientes de velocidade e fração volumétrica (BLAZEJ ET AL., 2004).

Cada uma das malhas apresentadas na Figura 4.4 apresenta 85% de elementos tetraédricos e 15% de elementos hexaédricos. A grande concentração de elementos na base da coluna é reflexo do tamanho dos orifícios do aspersor, onde suas pequenas escalas exigem elementos de menores tamanhos, porém bem mais numerosos. Testes de independência de malha (apresentados com mais detalhes em Resultados e Discussão) apontaram que a partir de 500.000 elementos os resultados foram pouco influenciados pela quantidade de células tridimensionais.

Figura 4.4 – Aspectos qualitativos das malhas computacionais: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



Fonte: Acervo próprio

4.2.6 Metodologia e modelagem matemática

Escoamento multifásico Euleriano heterogêneo compartmentado

O regime de escoamento no interior dos três biorreatores pneumáticos foi considerado como multifásico euleriano heterogêneo compartmentado. Assim, todos os modelos matemáticos foram desenvolvidos com base nesta consideração. O termo

"multifásico" refere-se a processos que apresentam duas ou mais fases imiscíveis, seja líquido-líquido, líquido-gás, sólido-líquido-gás ou outra combinação relevante. A palavra "Euleriano" refere-se à hipótese numericamente simplificadora de que ambas as fases são interpenetrantes e contínuas no espaço. Isso implica que o campo de fração volumétrica da fase gasosa retornado pela simulação é uma função contínua do espaço, não sendo possível detectar visualmente a forma e a precisa localização das bolhas. A designação "heterogêneo" significa que cada fase do sistema apresenta seu próprio campo de soluções, como campo de velocidade e fração volumétrica. As fases interagem entre si por meio de equações interfaciais de modo que o comportamento de uma fase individual altera o comportamento global do escoamento. Exemplo disso é a força de arraste promovida pelo líquido que age na superfície das bolhas. Isso será abordado mais adiante. O termo "compartimentado" refere-se a situações onde se tem fases particuladas dispersas em uma fase contínua. No caso deste trabalho a fase contínua é sempre o líquido e a fase dispersa são as bolhas de ar.

Conservação de massa e quantidade de movimento

A formulação matemática dos fenômenos envolvidos no escoamento de fluidos inicia-se nos princípios de conservação de massa, energia e quantidade de movimento. Esses princípios envolvem grandezas como concentração, temperatura e velocidade, que aparecem na forma de variáveis dependentes em equações diferenciais parciais. Portanto, a resolução dessas equações fornece perfis espaciais e transientes dessas variáveis, bem como outras grandezas que dependem delas.

Como todos os ensaios deste trabalho foram conduzidos isotermicamente, a equação de conservação de energia térmica não foi considerada. Assim, os dois princípios de conservação relevantes são o princípio de conservação de massa, designado usualmente por Equação da Continuidade (Equação 4.1) e o princípio de conservação da quantidade de movimento, também conhecido por Equação do Movimento (Equação 4.2). Estas são as Equações de Navier-Stokes. Cada equação apresentada é aplicável à ambas as fases (contínua e dispersa).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \cdot \rho_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \cdot \rho_i \cdot \mathbf{v}_i) = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \cdot \rho_i \cdot \mathbf{v}_i) + \nabla \cdot (\alpha_i (\rho_i \cdot \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i)) = -\alpha_i \cdot \nabla P_i + \nabla \cdot (\alpha_i \cdot \mu_{ef,i} (\nabla \mathbf{v}_i + (\nabla \mathbf{v}_i)^T)) + \mathbf{M}_i + \mathbf{S}_i \quad (4.2)$$

Onde \mathbf{v}_i , α_i , ρ_i , P_i e $\mu_{ef,i}$, representam, respectivamente, as seguintes grandezas locais referentes à fase "i": vetor velocidade intersticial, fração volumétrica, densidade, pressão e viscosidade efetiva. Esta última será comentada mais detalhadamente na subseção posterior, pois está vinculada ao conceito de turbulência. \mathbf{M}_i e \mathbf{S}_i denotam a transferência de quantidade de movimento devido às forças interfaciais e forças externas, respectivamente, e possuem grandeza de força por unidade de volume. Entidades vetoriais aparecem em negrito. O operador \otimes indica o produto diádico entre 2 vetores.

A principal fonte externa de transferência de quantidade de movimento é aquela promovida pela força de empuxo, que surge em virtude da diferença de densidade entre as fases líquida e gasosa (Equação 4.3).

$$\mathbf{S}_i^E = (\rho_i - \rho_{ref}) \cdot \mathbf{g} \quad (4.3)$$

Onde \mathbf{S}_i^E é o vetor força de empuxo (por unidade de volume) e ρ_{ref} é a densidade de referência, cujo valor deve ser numericamente igual à densidade da fase contínua.

\mathbf{M}_i é calculado como o somatório vetorial das forças interfaciais (por unidade de volume) presentes no sistema gás-líquido. Conforme abordado por Silva (2011), as principais forças interfaciais atuantes no sistema bifásico ar-água são a força de arraste, sustentação e dispersão turbulenta (Equação 4.4).

$$\mathbf{M}_i = \mathbf{M}_{i,j}^D + \mathbf{M}_{i,j}^L + \mathbf{M}_{i,j}^{DT} \quad (4.4)$$

Onde $\mathbf{M}_{i,j}^D$, $\mathbf{M}_{i,j}^L$ e $\mathbf{M}_{i,j}^{DT}$ são os vetores forças interfaciais (por unidade de volume) de arraste, sustentação e dispersão turbulenta, respectivamente.

Turbulência

A turbulência consiste em flutuações aleatórias temporais e espaciais que ocorrem no escoamento de fluidos. Ela acontece quando as forças inerciais que agem no fluido se tornam bem maiores do que as forças viscosas, fato que é caracterizado por altos números de Reynolds. A modelagem matemática da turbulência é muito complexa, pois se trata de um fenômeno tridimensional e transiente. A maior parte dos escoamentos que ocorrem na prática estão em regime turbulento. Por isso, a turbulência sempre foi alvo de estudos na Engenharia e ciências correlatas.

Em princípio, as equações de Navier-Stokes são capazes de descrever escoamentos laminares e turbulentos sem a necessidade de se modelar a turbulência. No entanto, a aplicação direta dessas equações na previsão de escoamentos turbulentos exige muito tempo e esforço computacional altíssimo, pois requerem que o método numérico utilize escalas de comprimento muito menores do que o menor volume de controle que se pode obter na geração da malha. O processo numérico no qual se considera diretamente as equações de Navier-Stokes se chama *Direct Numerical Simulation* (DNS)

Para que seja viável a previsão da turbulência usando esforços computacionais razoáveis utiliza-se modelos matemáticos adicionais, bem como a inserção de novas variáveis no sistema. Esses modelos foram especificamente desenvolvidos para que os efeitos de turbulência sejam considerados sem que haja a necessidade de gerar malha com volumes de controle ínfimos.

A fim de que seja possível adicionar modelos matemáticos de turbulência é necessário realizar modificações nas equações de Navier-Stokes através de definições de novas variáveis, como velocidade de flutuação e viscosidade turbulenta. Assim, os modelos de turbulência propostos são resolvidos juntamente com as equações de Navier-Stokes modificadas no propósito de calcular o campo de soluções. Essas passagens matemáticas não serão demonstradas rigorosamente neste texto e podem ser encontradas facilmente em outros trabalhos (SILVA, 2011).

O modelo $k-\varepsilon$ de turbulência é o mais recomendado em aplicações de Engenharia pois fornece resultados suficientemente precisos e esforço computacional moderado. Sabe-se que se trata de um método estável e robusto que pode ser empregado em situações típicas da indústria. Ele faz parte de um conjunto de modelos denominados Modelos de Duas Equações. No $k-\varepsilon$, a escala de velocidade turbulenta é calculada a partir da energia cinética turbulenta, representada pelo k , sendo que a escala de comprimento turbulenta é obtida a partir de k e de sua taxa de dissipação, representada pelo ε . Tem-se, então, duas equações de transporte adicionais.

Uma das premissas do modelo $k-\varepsilon$ é assumir que a turbulência é governada por uma viscosidade efetiva, que não é uma propriedade do fluido, mas sim do escoamento. O cálculo dessa viscosidade efetiva, que aparece na Equação 4.2, é feito pela soma entre as viscosidades cinemática (μ_i), turbulenta ($\mu_{\text{turb},i}$) e a viscosidade induzida pela fase dispersa

$(\mu_{\text{turb,disp}})$, conforme mostra a Equação 4.5.

$$\mu_{\text{ef},i} = \mu_i + \mu_{\text{turb},i} + \mu_{\text{turb,disp}} \quad (4.5)$$

A viscosidade cinemática (μ_i) é aquela definida pela Lei de Newton aplicada a escoamentos laminares.

A viscosidade turbulenta está associada a energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação, conforme mostra a Equação 4.6.

$$\mu_{\text{turb},i} = C_\mu \cdot \rho_i \cdot \left(\frac{k_i^2}{\varepsilon_i} \right) \quad (4.6)$$

Onde C_μ é uma constante.

As Equações 4.7 e 4.8 definem o modelo k- ε padrão, adotado em todo o trabalho. Elas representam, respectivamente, as equações para k e ε , sendo usadas para determinar o valor da viscosidade turbulenta.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \cdot \rho_i \cdot k_i) + \nabla \cdot \left(\alpha_i \left(\rho_i \cdot \mathbf{v}_i \cdot k_i - \left(\mu_i + \frac{\mu_{\text{t},i}}{\sigma_k} \right) \nabla k_i \right) \right) = \alpha_i \cdot (P_i - \rho_i \cdot \varepsilon_i) \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \cdot \rho_i \cdot \varepsilon_i) + \nabla \cdot \left(\alpha_i \cdot \rho_i \cdot \mathbf{v}_i \cdot \varepsilon_i - \left(\mu_i + \frac{\mu_{\text{t},i}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_i \right) = \alpha_i \cdot \frac{\varepsilon_i}{k_i} (C_{\varepsilon 1} \cdot P_i - C_{\varepsilon 2} \cdot \rho_i \cdot \varepsilon_i) \quad (4.8)$$

Onde $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k e σ_ε são constantes do modelo k- ε padrão.

Conforme um estudo auxiliar conduzido por Simcik et al. (2011), a escolha do modelo de turbulência possui um menor impacto no estudo de variáveis globais. A máxima diferença observada na retenção gasosa global quando se varia os modelos de turbulência foi de 4,9%.

Para escoamentos que envolvem bolhas é possível aprimorar o cálculo da turbulência através de um modelo que leva em consideração a turbulência provida pela fase dispersa, conforme desenvolvido por Sato et al. (1981) (Equação 4.9).

$$\mu_{\text{turb,disp}} = C_{\mu p} \cdot \rho_c \cdot \alpha_d \cdot D_p \cdot |\mathbf{v}_d - \mathbf{v}_c| \quad (4.9)$$

Forças interfaciais

Nesta subseção serão apresentadas as três forças interfaciais mais relevantes no escoamento gás-líquido e que aparecem na Equação 4.4: força de arraste, sustentação e dispersão turbulenta. Cabe salientar que apenas a força de arraste foi considerada neste trabalho devido à grande predominância da mesma, sendo que as demais forças estiveram presentes em ensaios suplementares descritos no Apêndice.

O arraste é a força interfacial mais importante no estudo de escoamentos multifásicos gás-líquido, principalmente em biorreatores pneumáticos, onde o movimento da fase gasosa provoca movimentação da fase líquida. Ela é função da velocidade local de deslizamento entre as fases (LUO e AL-DAHMAN, 2010), atuando paralelamente à direção do escoamento, mas em sentido oposto. Ou seja, age como uma resistência ao movimento.

O cálculo da força de arraste inicia-se pela definição imposta na Equação 4.10.

$$\mathbf{M}_{G,L}^D = \frac{3}{4} \alpha_G \cdot \rho_L \cdot \frac{C_D}{D_b} \cdot |\mathbf{v}_G - \mathbf{v}_L| \cdot (\mathbf{v}_G - \mathbf{v}_L) \quad (4.10)$$

Onde $\mathbf{M}_{G,L}^D$ é a força de arraste, por unidade de volume, que age na fase L como consequência do movimento da fase G.

A modelagem matemática da força de arraste baseia-se na formulação de correlações que estimam o coeficiente de arraste, C_D . Há muitas equações com esse propósito, mas aqui serão apresentadas apenas aquelas que possuem relevância no contexto deste estudo. As forças citadas a seguir foram testadas posteriormente para que se obter aquela mais adequada.

A correlação de Schiller e Naumann (1933) relaciona o número de Reynolds ao coeficiente de arraste (Equação 4.11). No entanto, é aplicável em sistemas onde a fase dispersa pode ser considerada como uma esfera rígida e não deformável.

$$C_D = \max \left(\frac{24}{Re_b} \left(1 + 0,15 \cdot Re_b^{0,687} \right); 0,44 \right) \quad (4.11)$$

Uma correlação mais elaborada é a de Grace et al. (1976), que possibilita o cálculo do coeficiente de arraste de acordo com a forma da bolha em um determinado regime de escoamento (Figura 3.7). As Equações 4.12, 4.13 e 4.16 avaliam o coeficiente de arraste para a esfera, elipse e touca, respectivamente

$$C_D^{esf} = \frac{24}{Re_b} \left(1 + 0,15 \cdot Re^{0,687} \right) \quad (4.12)$$

$$C_D^{elip} = \frac{4}{3} \cdot \frac{g \cdot D_b}{v_\infty^2} \cdot \frac{|\rho_L - \rho_G|}{\rho_L} \quad (4.13)$$

Onde v_∞ é a velocidade terminal da bolha, calculada pela Equação 4.14.

$$v_\infty = \frac{\mu_L}{\rho_L \cdot D_b} \cdot M^{-0,149} \cdot (J - 0,857) \quad (4.14)$$

Onde J é uma funcional definida pela Equação 4.15.

$$J = \begin{cases} 0,94\lambda^{0,751} & \text{para } 2 < \lambda \leq 59,3 \\ 3,42\lambda^{0,441} & \text{para } \lambda > 59,3 \end{cases} \quad \text{sendo } \lambda = \frac{4}{3} E\ddot{o} \cdot M^{-0,149} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\mu_{ref}} \right)^{-0,14} \quad (4.15)$$

$$C_D^{touca} = 8/3 \quad (4.16)$$

A limitação do valor do coeficiente de arraste usado na simulação deve seguir o critério imposto pela Equação 4.17.

$$C_D = \max \left(C_D^{esf}, \min \left(C_D^{elip}; C_D^{touca} \right) \right) \quad (4.17)$$

A força de sustentação age perpendicularmente à direção do escoamento e promove o deslocamento lateral das bolhas. É esse tipo de força que faz, por exemplo, o avião decolar e se manter estável ao longo de seu trajeto. Ela age lateralmente ao escoamento em objetos assimétricos. 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. No entanto, ela foi considerada apenas nos ensaios descritos no Apêndice e desprezada nas simulações principais. A omissão dessa força se deve ao fato de não se conhecer experimentalmente, com precisão, sua direção e magnitude. Além disso, é possível mesmo assim obter aproximação razoável com os dados experimentais (ZHANG ET AL., 2012).

A força de sustentação é calculada a partir do coeficiente de sustentação (Equação 4.19).

$$C_L = \frac{\mathbf{M}_{G,L}^L}{\alpha_d \cdot \rho_c \cdot (\mathbf{v}_d - \mathbf{v}_c) \times (\nabla \times \mathbf{v}_c)} \quad (4.18)$$

De maneira similar ao arraste, tem-se que o coeficiente de sustentação é estimado através de correlações propostas na literatura. O modelo mais relevante no contexto deste trabalho (bolhas em sistemas ar-água) foi proposto por Tomiyama (1998) (Equação 4.19). Esta correlação é aplicável à bolhas deformáveis e depende do número de Eötvos.

$$C_L = \begin{cases} \min[0,288 \cdot \tanh(0,121 \cdot \text{Re}_b; f(E\ddot{o}'))] & E\ddot{o}' \leq 4 \\ f(E\ddot{o}') & 4 < E\ddot{o}' \leq 10 \\ -0,27 & 10 < E\ddot{o}' \end{cases} \quad (4.19)$$

Onde $E\ddot{o}'$ é o número de Eötvos modificado (Equações 4.20, 4.21, 4.22) e $f(E\ddot{o}')$ é uma função dependente desse número (Equação 4.23).

$$E\ddot{o}' = \frac{g(\rho_L - \rho_G) \cdot D_H^2}{\sigma} \quad (4.20)$$

$$D_H = D_b \cdot (1 + 0,163 \cdot E\ddot{o}'^{0,757})^{1/3} \quad (4.21)$$

$$E\ddot{o} = \frac{g \cdot (\rho_L - \rho_G) \cdot D_b^2}{\sigma} \quad (4.22)$$

$$f(E\ddot{o}') = 0,00105E\ddot{o}'^3 - 0,0159E\ddot{o}'^2 - 0,0204E\ddot{o}' + 0,474 \quad (4.23)$$

A força de dispersão turbulenta também foi incluída apenas nos ensaios suplementares descritos no Apêndice e está relacionada ao transporte da fase dispersa provocado pelos vórtices turbulentos formados na fase contínua. A omissão dela deve-se ao fato da mesma contribuir pouco frente à relevância da força de arraste e da diferença de densidade entre o gás e o líquido (LUO E AL-DAHMAN, 2011; ZHANG ET AL., 2012). A correlação mais usada para o cálculo desta força foi proposta por Lopez de Bertodano (1991) (Equação 4.24) e é recomendada em escoamentos que possuem bolhas de tamanhos médios (3 a 6 mm).

$$\mathbf{M}_{L,G}^{DT} = -\mathbf{M}_{G,L}^{DT} = -C_{DT} \cdot \rho_L \cdot k_L \cdot \nabla \alpha_L \quad (4.24)$$

4.2.7 Condições de contorno e sumarização da etapa de pré-processamento

Basicamente, três tipos de condições de contorno foram usadas neste trabalho: uma condição de velocidade do ar que entra pelos orifícios do aspersor, uma condição de pressão atmosférica no topo dos biorreatores e condições de parede sem deslizamento aplicadas no tubo principal de cada sistema e nos anteparos internos (cilindro concêntrico, placa plana e aspersores).

Definiu-se a condição inicial de cada simulação impondo-se que os biorreatores estavam inicialmente preenchidos com a fase líquida até a cota de 45 cm, sendo que os 15 cm restantes consistiram de ar atmosférico.

A velocidade de entrada de ar foi relacionada com a vazão específica de ar através de um simples balanço de massa, conforme mostra a Equação 4.25.

$$v_{\text{ent,G}} = \frac{4 \cdot \Phi \cdot V_L}{\pi \cdot N \cdot D_f^2} \quad (4.25)$$

Onde N e D_f são a quantidade e o diâmetro dos orifícios no aspersor, respectivamente.

A Tabela 4.2 sumariza as condições usadas nas simulações e define resumidamente a etapa de pré-processamento no FLUENT® 14.5.

Tabela 4.2 – Condições definidas no *software* FLUENT® 14.5

| Fluidos | |
|--|--|
| Água | Fase contínua; T=28°C; $\rho=997 \text{ kg/m}^3$; $\mu=8,4 \times 10^{-4} \text{ Pa.s}$; $\sigma=0,072 \text{ N/m}$; $D_L=2,84 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ |
| Solução de glicerol 10 cP | Fase contínua; T=28°C; $\rho=1157 \text{ kg/m}^3$; $\mu=0,01 \text{ Pa.s}$; $\sigma=0,068 \text{ N/m}$; $D_L=4,16 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ |
| Solução de goma xantana 0,2% m/v | Fase contínua; fluido pseudoplástico; T=28°C; $\rho=1000 \text{ kg/m}^3$; K=0,472 Pa.s ⁿ ; n=0,36; $\sigma=0,070 \text{ N/m}$; $D_L=1,14 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ |
| Ar | Fase dispersa; $D_b=5 \text{ mm}$; $\rho=1,2 \text{ kg/m}^3$ |
| Contornos | |
| Orifícios do aspersor | $\alpha_L=0$; $\alpha_G=1$; velocidade de entrada do ar - Equação 4.25 |
| Topo | condição de pressão prescrita, P=1 atm |
| Parede | não deslizamento para ambas as fases |
| Turbulência | |
| Água | Modelo k- ϵ padrão: $C_\mu=0,09$; $C_{\epsilon 1}=1,44$; $C_{\epsilon 2}=1,92$; $\sigma_k=1$; $\sigma_\epsilon=1,3$ |
| Ar | Modelo k- ϵ padrão: $C_\mu=0,09$; $C_{\epsilon 1}=1,44$; $C_{\epsilon 2}=1,92$; $\sigma_k=1$; $\sigma_\epsilon=1,3$ |
| Forças interfaciais | |
| Arraste | Grace et al., (1976) |
| Parâmetros do <i>solver</i> | |
| <i>Solver</i> | <i>Pressure-Based; Eulerian; Implicit; Two phases</i> |
| <i>Velocity formulation</i> | <i>Absolute</i> |
| <i>Transient formulation</i> | <i>First Order Implicit</i> |
| <i>Pressure velocity coupling scheme</i> | <i>Phase Coupled SIMPLE</i> |
| <i>Gradient discretization</i> | <i>Least Squares Cell Based</i> |
| <i>Momentum discretization</i> | <i>Second Order Upwind</i> |
| <i>Volume fraction discretization</i> | QUICK |
| <i>Turbulent kinect energy</i> | <i>First Order Implicit</i> |
| <i>Turbulent dissipation rate</i> | <i>First Order Implicit</i> |
| Resíduo | RMS= 1×10^{-4} |
| Regime transiente | 25 iterações/passos no tempo; <i>timestep</i> = 1×10^{-4} s; 50000 passos no tempo; 5 s em tempo real; 8 dias de simulação para cada condição de vazão |

Fonte: Acervo próprio

4.2.8 Metodologia para a obtenção experimental e estimativa numérica dos parâmetros globais de desempenho

Retenção gasosa global ($\bar{\alpha}_G$)

A retenção gasosa global foi obtida pelo método de medida das alturas, descrito e utilizado por Thomasi et al. (2010), tanto para o levantamento dos dados experimentais (retirados do trabalho mencionado) quanto para os ensaios numéricos. Esse parâmetro global foi calculado através da manipulação da Equação 3.3 que resultou em uma relação que envolve a variável global com a altura inicial do líquido e a altura da dispersão após a aeração do sistema, conforme mostrado na Equação 4.26. Para cada condição de vazão, a altura da dispersão foi obtida experimentalmente e mediante recursos do *software*.

$$\bar{\alpha}_G = \frac{H_D - H_L}{H_D} \quad (4.26)$$

Coefficiente volumétrico de transferência de oxigênio ($k_L a$)

O $k_L a$ foi obtido experimentalmente em triplicata através do método dinâmico do degrau de pressão (CERRI et al., 2008). Resumidamente, através de uma mudança abrupta na pressão do sistema o eletrodo mede a concentração de oxigênio dissolvido no sistema ao longo do tempo. Então, ao aplicar a Equação 4.27, o $k_L a$ se torna um parâmetro a ser calculado por regressão não-linear.

$$C_e = C_o e^{-k_e(t-t_o)} + C_{sat} (1 - e^{-k_e(t-t_o)}) + \frac{k_e(C_{sat} - C_o)}{k_e - k_L a} (e^{-k_e(t-t_o)} - e^{-k_L a(t-t_o)}) \quad (4.27)$$

A estimativa numérica do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio foi realizada considerando que $k_L a$ é o produto entre dois outros parâmetros, o coeficiente convectivo de transferência de oxigênio (k_L) e a área interfacial específica das bolhas ("a"). O valor de k_L foi obtido com base na Teoria de Penetração de Higbie (Equação 4.28) descrito por Cerri et al. (2010).

$$k_L = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \sqrt{\frac{D_L}{\theta}} \quad (4.28)$$

sendo o parâmetro θ definido como tempo de renovação e descrito na Equação 4.29.

$$\theta = \frac{D_b}{v_{desl}} \quad (4.29)$$

A velocidade de deslizamento entre a bolha e o líquido foi calculada através da relação proposta por Ruen-gnam et al. (2008) (Equação 4.30).

$$v_{desl} = \frac{v_{\infty}}{1 - \alpha_G} \quad (4.30)$$

A velocidade terminal das bolhas foi estimada através da correlação proposta por Talaia et al. (2008) (Equação 4.31).

$$v_{\infty} = 0,694 \sqrt{\frac{g \cdot D_b \cdot (\rho_L - \rho_G)}{\rho_L}} \quad (4.31)$$

Obteve-se a área interfacial específica das bolhas através da Equação 3.12, já apresentada anteriormente.

$$a = \frac{6 \cdot \bar{\alpha}_G}{D_b (1 - \bar{\alpha}_G)} \quad (3.12)$$

Todas essas relações descritas foram incorporadas ao *software* FLUENT® 14.5 através do uso de funções customizadas. Para cada simulação conduzida, obteve-se a distribuição espacial para k_L e para "a". Em seguida, através do Teorema do Valor Médio, calculou-se os valores globais de k_L e "a" (Equações 4.32 e 4.33) e ambos foram multiplicados entre si para se ter finalmente o valor numérico de $k_L a$.

$$\bar{k}_L = \frac{\iiint k_L dV}{V} \quad (4.32)$$

$$\bar{a} = \frac{\iiint a dV}{V} \quad (4.33)$$

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Resultados auxiliares

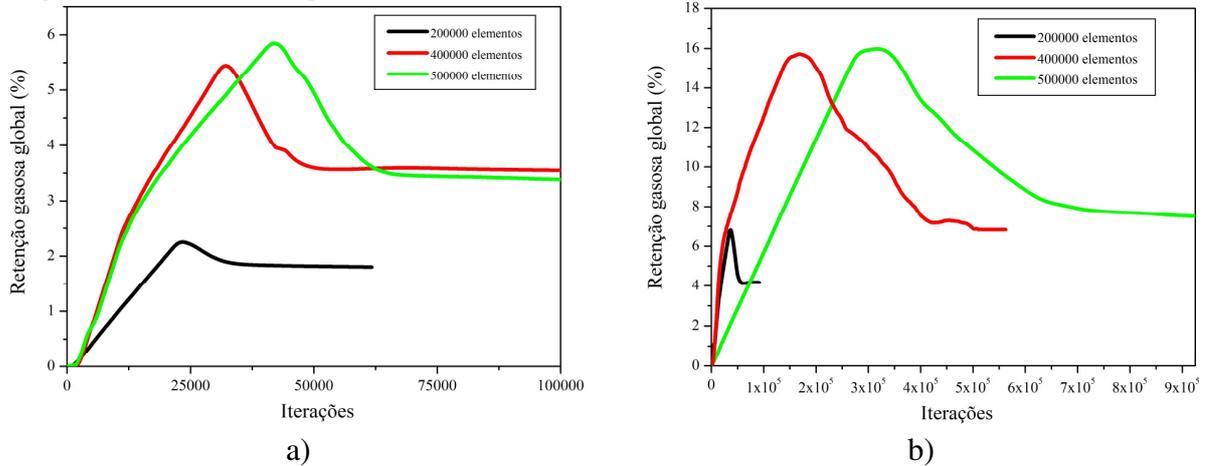
5.1.1 Testes de independência de malha

A fim de definir o número de elementos tridimensionais, foram realizados testes de independência de malha conduzidos à 2 e 5 vvm (Figuras 5.1 e 5.2, respectivamente) no biorreator coluna de bolhas utilizando-se água destilada como fase líquida. Escolheu-se a retenção gasosa global como a variável monitorada nos teste e empregou-se o modelo de Schiller e Naumann (1933). A metodologia utilizada para avaliá-la consistiu na aplicação do Teorema do Valor Médio (Equação 5.1), cuja rotina já está implementada na forma de uma função residente do ANSYS FLUENT[®] 14.5. Cabe salientar que os testes foram conduzidos em regime transiente, sendo que as iterações foram contabilizadas na abscissa a fim de explicitar o esforço numérico em cada caso (as curvas se estabilizam em torno de 3 segundos em tempo real de operação).

$$\bar{\alpha}_G = \frac{\iiint \alpha_G dV}{V} \quad (5.1)$$

Nota-se que a partir de 400.000 elementos (aproximadamente) os resultados de retenção gasosa global não diferiram significativamente daqueles obtidos usando 500.000 elementos (aproximadamente). No entanto, optou-se por adotar a última malha, já que ela está mais refinada em regiões significativas. Conforme mencionado anteriormente, esse refinamento local na região do aspersor e na região da interface gás-líquido é necessário e foi recomendado por diversos autores, incluindo Blazej et al. (2004) e Hekmat et al. (2010).

Figura 5.1 – Testes de independência de malha conduzidos no biorreator coluna de bolhas. a) 2 vvm; b) 5 vvm



Fonte: Acervo próprio

A Tabela 5.1 resume as características das malhas empregadas nos três modelos de biorreatores pneumáticos.

Tabela 5.1 – Parâmetros das malhas geradas nos três biorreatores pneumáticos

| Parâmetro | Valor/descrição |
|--------------------------------------|-----------------------------------|
| Número de elementos tridimensionais | aproximadamente 500.000 |
| Composição de elementos tetraédricos | 85% (região em torno do aspersor) |
| Composição de elementos hexaédricos | 15% |
| Espaçamento mínimo entre nós | 0,1 mm |
| Espaçamento máximo entre nós | 5 mm |

Fonte: Acervo próprio

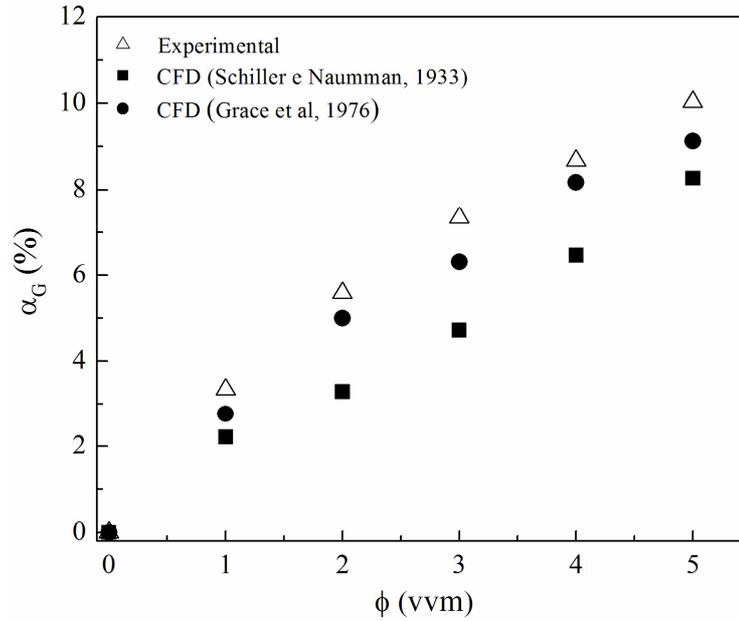
5.1.2 Verificação da influência dos modelos de coeficiente de arraste

Após definir o número de elementos da malha via teste de independência, outros ensaios auxiliares em CFD foram conduzidos objetivando a avaliação de modelos para cálculo do coeficiente de arraste, propostos por Schiller e Naumann (1933) e Grace et al. (1976). Conforme especificado anteriormente, apenas a força de arraste foi considerada nesses ensaios devido sua prevalência (forças adicionais foram impostas em ensaios suplementares descritos no Apêndice). A fim de que os resultados simulados possam ser comparados com aqueles obtidos por Thomasi (2010), foi necessário conduzir uma simulação transiente em CFD para cada vazão específica de 1 a 5 vvm no biorreator coluna de bolhas, operando com água destilada e ar.

Na Figura 5.2 são apresentados os resultados decorrentes das simulações, referentes ao sistema coluna de bolhas operado com água destilada e ar, usando os dois

modelos de coeficiente de arraste propostos, onde cada ponto das curvas correspondeu a uma simulação transiente em CFD (5 a 8 dias de simulação por ponto dependendo do modelo vigente).

Figura 5.2 – Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar em biorreator coluna de bolhas operando com água destilada: ensaios para a definição do modelo de coeficiente de arraste



Fonte: Acervo próprio

É possível verificar na Figura 5.2 que o modelo de Schiller e Naumann (1933) forneceu resultados de retenção gasosa global que subestimaram os valores experimentais, enquanto o modelo de Grace et al. (1976) gerou resultados mais coerentes. O sistema água-ar é sabidamente coalescente, isto é, favorece o aparecimento de bolhas maiores que se formam a partir da união de bolhas pequenas. Nas Figuras 5.3a e 5.3b são apresentadas imagens do biorreator de coluna de bolhas usado neste trabalho operando com o sistema água-ar a 1 e 5 vmm, respectivamente. Nesta figura é possível observar o aparecimento de bolhas amorfas (geometria indefinida), o que sugere a utilização de modelos que tentem acomodar esta realidade. A fim de verificar teoricamente a amorfologia das bolhas, foi necessário a estimativa dos números adimensionais Re_b , $Eö$ e M , conforme mostrado nas Equações 3.15, 3.16 e 3.17, respectivamente. Os resultados mostrados na Tabela 5.2 foram calculados a 1 vvm e permitiram comprovar que a forma experimental das bolhas, de acordo com a Figura 3.7, é de fato irregular. Sistemas ar-água são muito conhecidos por apresentar comportamentos desse tipo, diferentemente de sistemas onde a fase líquida é mais viscosa,

como em soluções de glicerol.

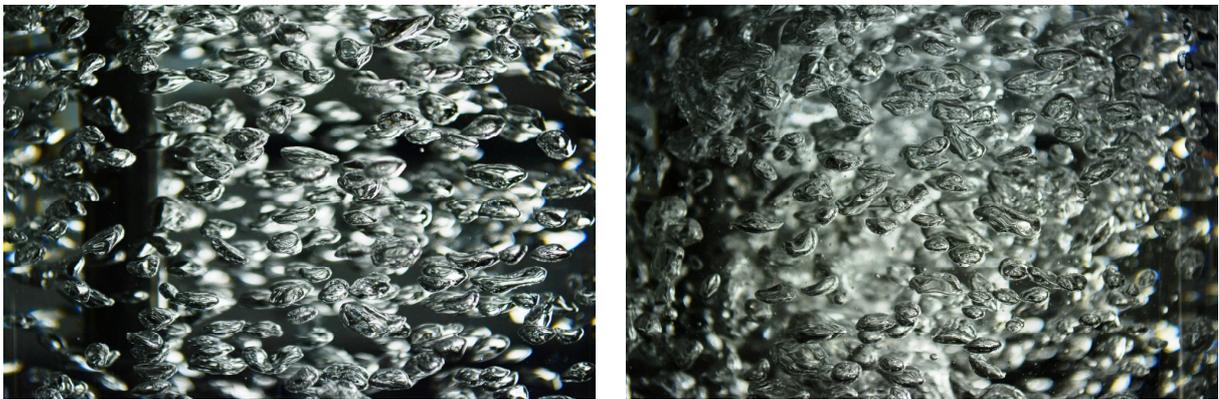
Tabela 5.2 – Números adimensionais estimados a 1 vvm para o sistema água-ar no biorreator coluna de bolhas

| Parâmetro | Valor |
|-----------|---------|
| Re_b | 1343,30 |
| Eö | 3,39 |
| $\log(M)$ | -10,88 |

Fonte: Acervo próprio

O cálculo realizado a 1 vvm foi representativo e permite inferir que, para o mesmo sistema ar-água mencionado, o aumento da vazão específica de ar provoca um aumento nos números de Reynolds e Eötvos. Isso faz com que se confirme através da Figura 3.7 o formato ainda mais irregular (*wobbling*) das bolhas em vazões maiores.

Figura 5.3 – Dispersão das bolhas para o sistema água-ar no biorreator coluna de bolhas: a) 1 vvm; b) 5 vvm



a)

b)

Fonte: Acervo próprio

Como o modelo proposto por Schiller e Naumann (1933) assume que as bolhas possuem apenas formatos esféricos, há uma dificuldade inerente na previsão do coeficiente de arraste, pois essas partículas no caso real são bem distorcidas e amorfas (geometricamente irregulares). O modelo de Grace et al. (1976) aproximou os resultados simulados de retenção gasosa global da Figura 5.2, pois previu de maneira mais adequada o coeficiente de arraste para bolhas no formato de esfera, elipse e touca. Essa melhora se deve ao fato de que essas possibilidades permitiram uma modelagem que tentou compensar os formatos geometricamente indefinidos que se observou no caso real.

5.2 Estimativa dos parâmetros globais de desempenho via CFD

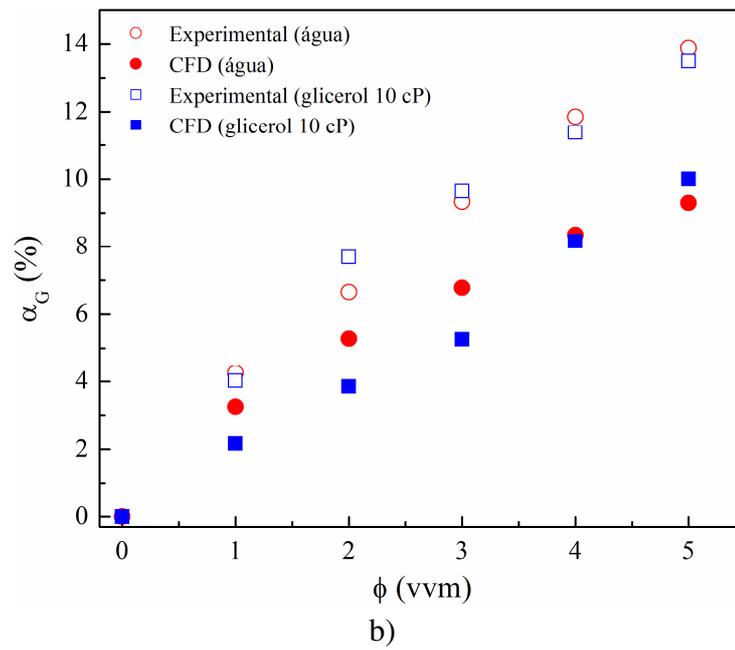
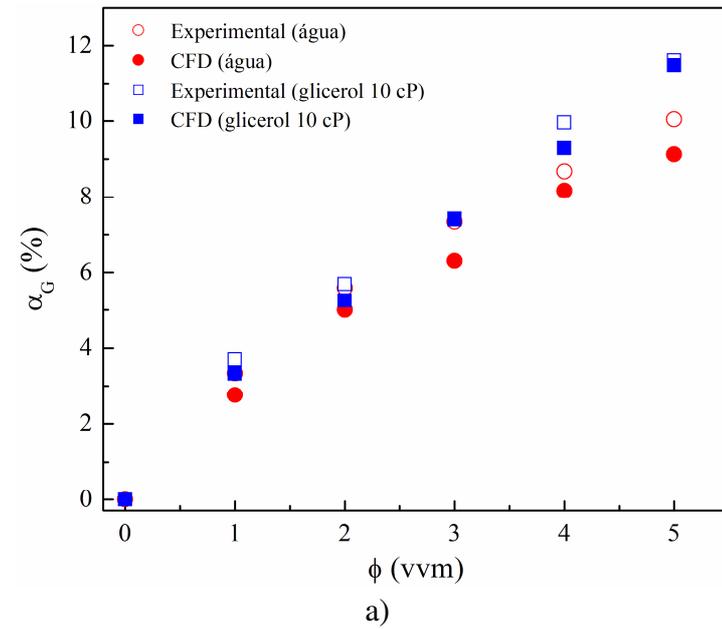
5.2.1 Fluidos Newtonianos - Água e solução de glicerol 10 cP

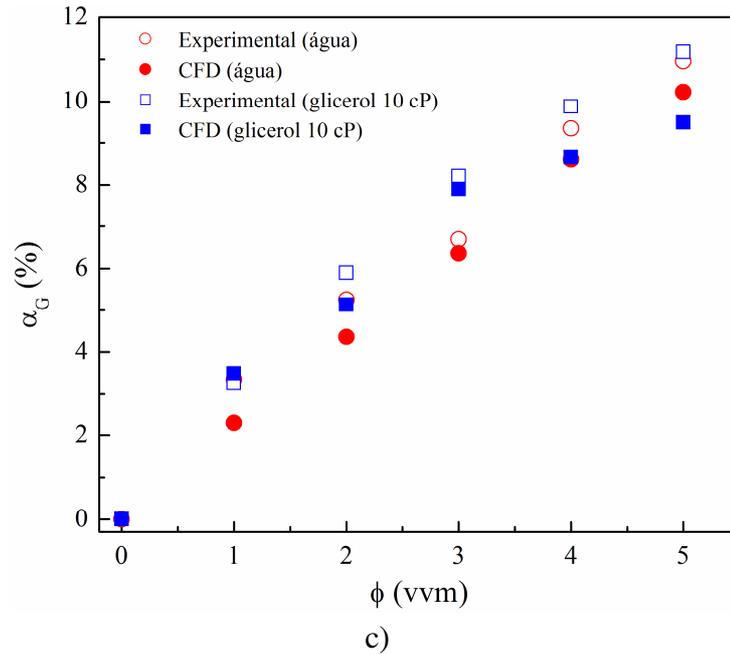
Retenção gasosa global

Os resultados referentes à retenção gasosa global estão resumidos na Figura 5.4. Dos três sistemas avaliados, a geometria *airlift* de cilindros concêntricos apresentou o melhor desempenho tanto para o fluido menos viscoso (água destilada) quanto para o mais viscoso (solução de glicerol 10 cP), pois sua configuração permitiu que maiores quantidades de ar ficassem presas dentro do sistema. Isto é muito importante em processos aeróbios que requerem grandes quantidades de oxigênio. No entanto, a fim de obter altos valores de retenção gasosa global é necessário operar o sistema em altas vazões específicas de ar. Para o *airlift* de cilindros concêntricos é possível chegar a $\approx 14,0\%$ e $\approx 13,5\%$ a 5,0 vvm quando o fluido é água destilada e solução de glicerol 10 cP, respectivamente.

Em todos os casos, a simulação em CFD mostrou a mesma tendência observada nos experimentos. No entanto, particularmente para ao *airlift* de cilindros concêntricos houve um desvio mais pronunciado nos resultados simulados via CFD, possivelmente devido à dificuldade do modelo em prever a retenção gasosa global na região de descida (SIMCIK ET AL., 2011). O maior erro relativo observado para o biorreator *airlift* de cilindros concêntricos foi de 33% para a água e 50% de solução de glicerol 10 cP, mostrando maior desvio para o fluido de maior viscosidade. Nas geometrias coluna de bolhas e *airlift split* os maiores erros relativos foram observados em baixas vazões, pois pequenos erros absolutos podem levar a maiores erros relativos em regiões de baixa retenção gasosa. No caso da geometria coluna de bolhas, os maiores erros relativos foram de 17% para a água e 10% de solução de glicerol 10 cP, enquanto que no *airlift split* os erros máximos foram de 31% para a água e 15% de solução de glicerol 10 cP, respectivamente.

Figura 5.4 – Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar para os fluidos Newtonianos: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*

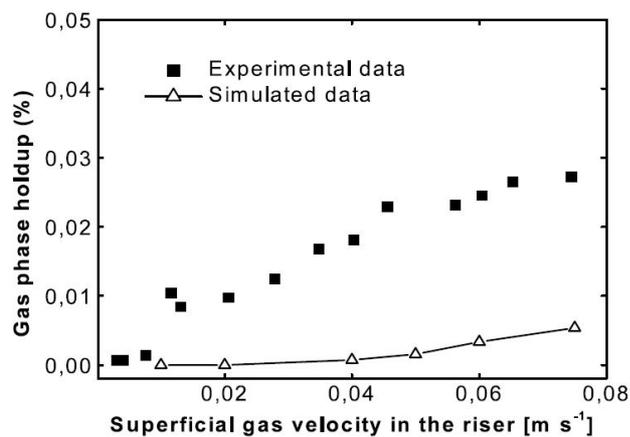




Fonte: Acervo próprio

Muitos autores têm relatado dificuldades na comparação entre a retenção gasosa global calculada e a experimental. Blazej et al. (2004) conduziram ensaios em biorreator *airlift* de cilindros concêntricos e obtiveram erros relativos que chegaram a 100% (Figura 5.5). Embora o eixo das abscissas esteja denotado pela velocidade superficial do ar na região de subida, é possível convertê-lo em vazão específica de ar. A vazão máxima não superou 0,5 vvm, ou seja, menor do que a vazão mais baixa abordada neste trabalho. É possível verificar que as simulações subestimaram todos os dados experimentais.

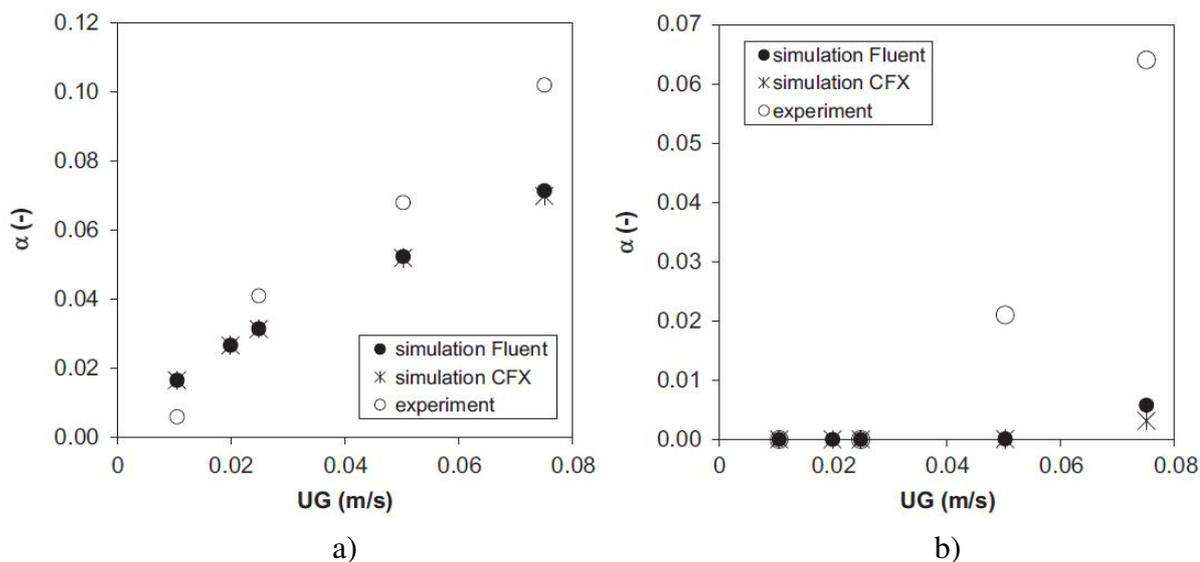
Figura 5.5 – Retenção gasosa na região de descida em função da velocidade superficial de gás na região de subida



Fonte: BLAZEJ ET AL., 2004

Simcik et al. (2011) também obtiveram dificuldades semelhantes na previsão da retenção gasosa global, conforme mostra a Figura 5.6, com erros relativos que superaram a 90% na condição mais alta (0,27 vvm).

Figura 5.6 – Retenção gasosa na região de subida (a) e descida (b) em função da velocidade superficial de gás na região de subida



Fonte: SIMCIK ET AL., 2011

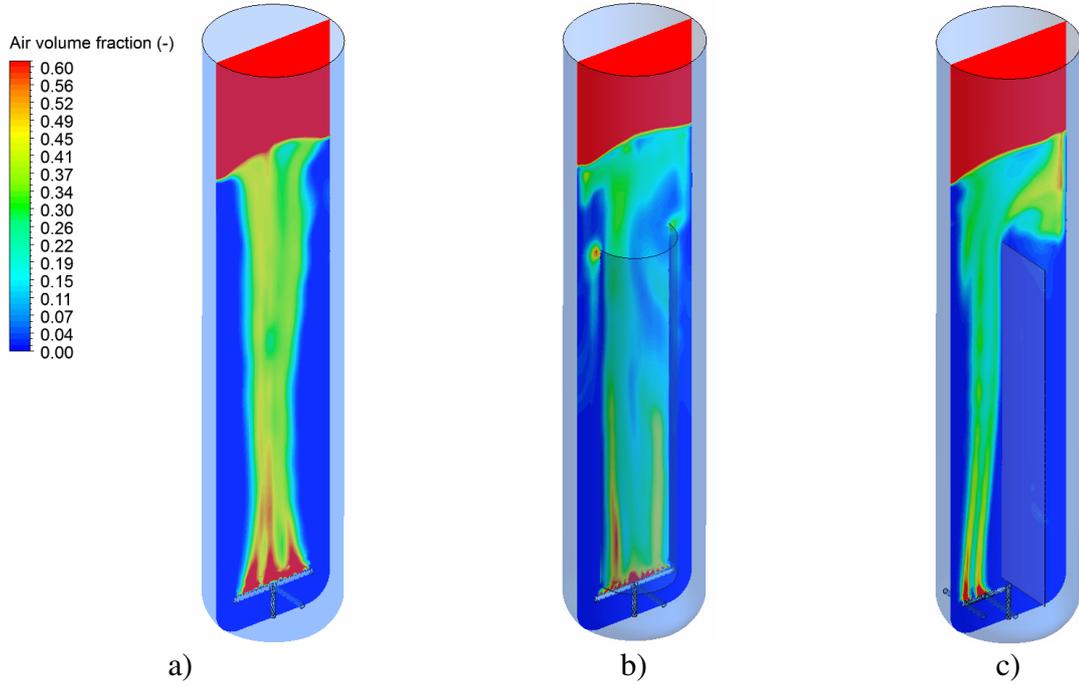
Uma das conclusões dos trabalhos publicados por Blazej et al. (2004) e Simcik et al (2011) foi a necessidade de aprimorar a modelagem matemática através dos fenômenos de coalescência e quebra de bolhas. Quando estas chegam próximo à interface gás-líquido é muito provável que seus tamanhos sejam maiores do que na base da coluna devido à expansão isotérmica, facilitando a ocorrência de coalescência. Além disso, o diâmetro de bolha médio foi considerado como sendo constante com a vazão de operação, o que é uma aproximação razoável.

As Figuras 5.7 e 5.8 mostram a distribuição espacial da fração volumétrica de ar para o sistema água-ar e solução de glicerol-ar a 5 vvm, respectivamente, nas três geometrias.

No caso real, a fração de ar na base das colunas (próximo ao aspersor) apresenta um perfil sigmoidal oscilatório devido a movimento lateral das bolhas (este efeito é mais pronunciado na geometria coluna de bolhas). A ausência deste comportamento nas Figuras 5.7 e 5.8 ocorreu devido a omissão de força de sustentação, que tende a deslocar as

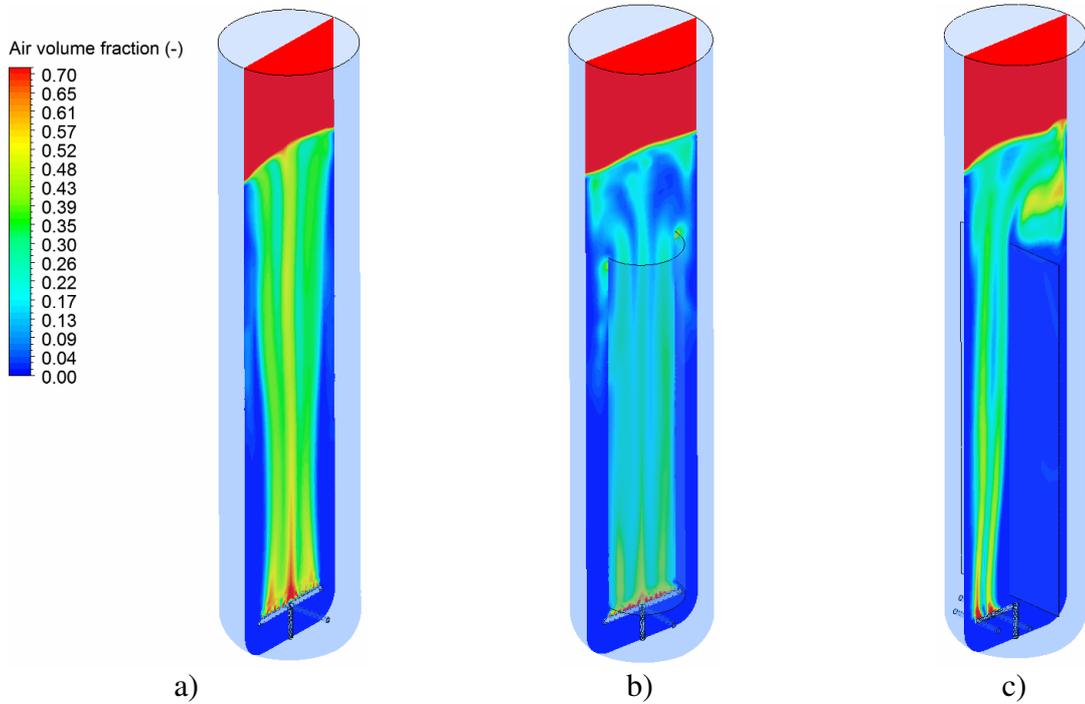
bolhas lateralmente.

Figura 5.7 – Distribuição espacial da fração volumétrica de ar a 5 vvm após 5 s para o sistema água-ar: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



Fonte:Acervo próprio

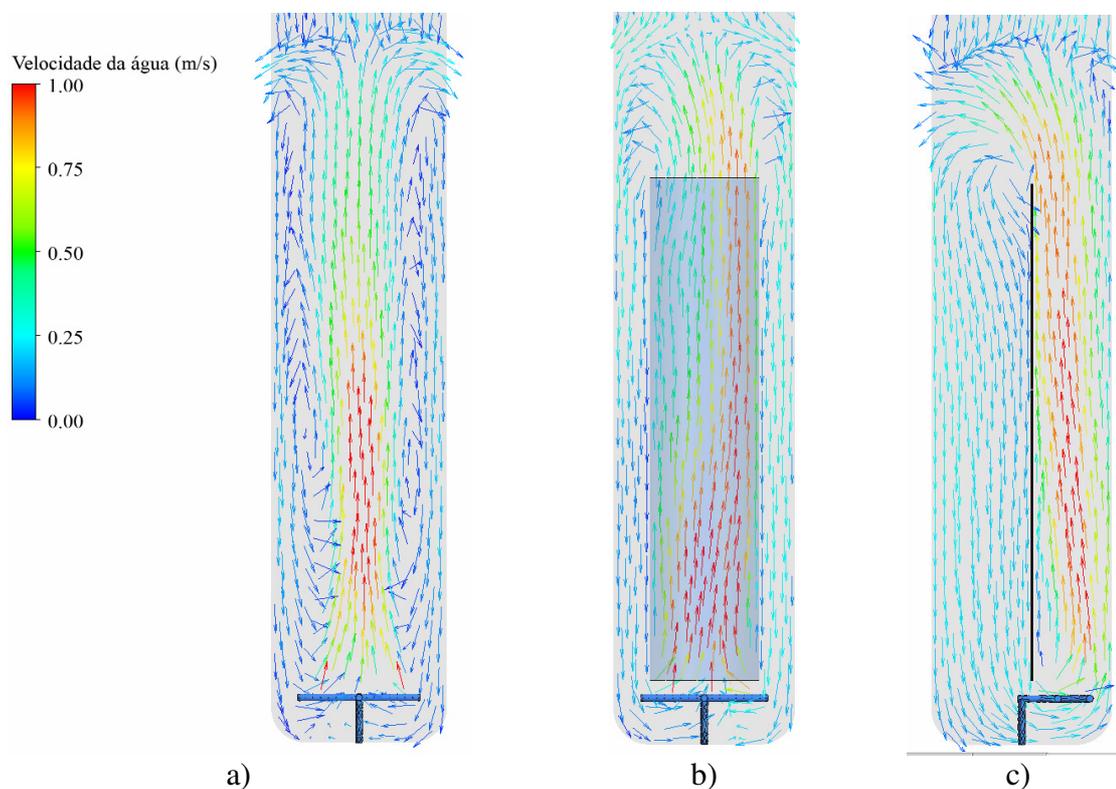
Figura 5.8 – Distribuição espacial da fração volumétrica de ar a 5 vvm após 5 s para o sistema solução de glicerol-ar: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



Fonte:Acervo próprio

Para verificar e ilustrar a movimentação da fase líquida provocada pela transferência de quantidade de movimento da fase gasosa, a Figura 5.9 exibe campos vetoriais de velocidade da água, obtidos em um plano longitudinal a 5 vvm nas três geometrias abordadas. Nela é possível averiguar a recirculação do líquido nos biorreatores *airlift* (Figuras 5.9b e 5.9c) e vórtices turbulentos que definem o comportamento caótico no biorreator coluna de bolhas (Figura 5.9a). Destaca-se, na base das três colunas, a "sucção" de porções da fase líquida adjacentes ao aspersor, promovida pela baixa pressão dessa região (alta velocidade de injeção do ar).

Figura 5.9 – Campos vetoriais de velocidade da água obtidos a 5 vvm após 5 s: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



Fonte:Acervo próprio

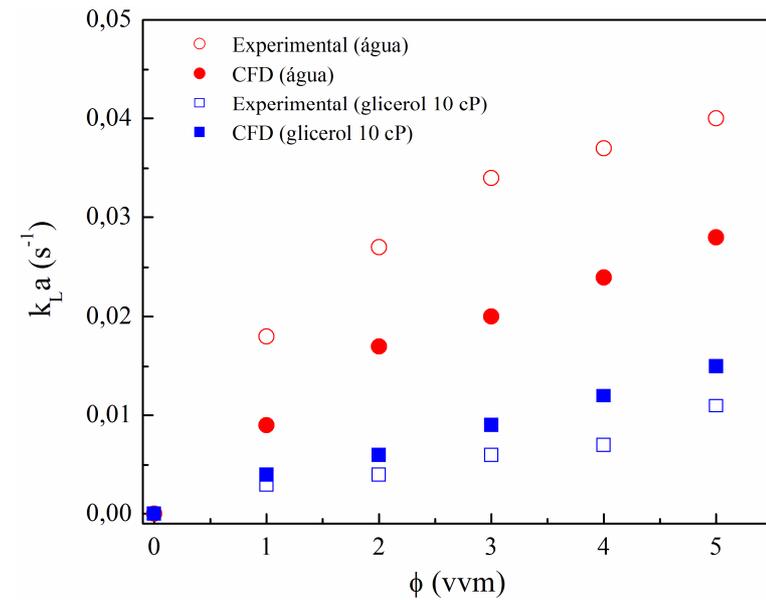
Coefficiente volumétrico de transferência de oxigênio

A Figura 5.10 mostra os resultados referentes ao coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio ($k_L a$). Para a variável em questão, a geometria *airlift* de cilindros concêntricos apresentou os melhores resultados, pois sua configuração favorece a recirculação, a mistura entre os fluidos e maior tempo de residência do gás, contribuindo para

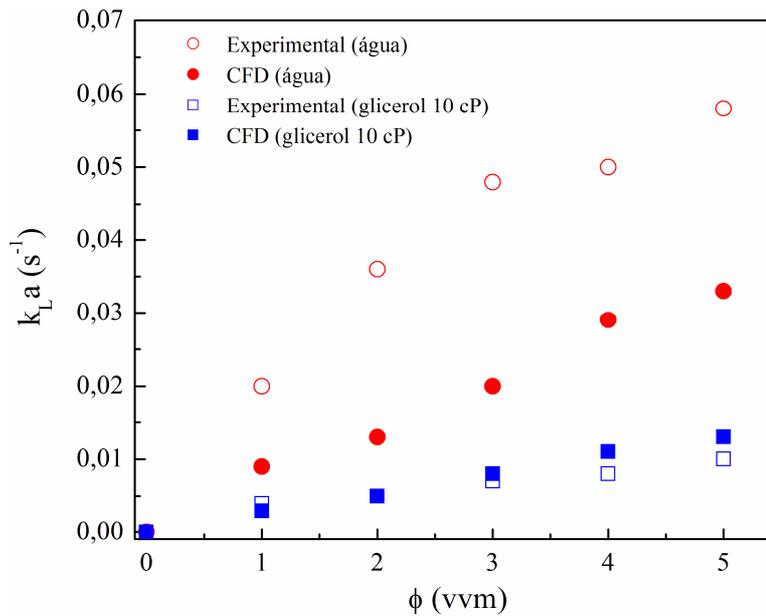
um melhor desempenho em termos de transferência de oxigênio.

A solução de glicerol é mais viscosa do que a água destilada, dificultando o transporte de oxigênio no meio. Isto é representado pelos baixos valores de $k_L a$ obtidos para a solução de glicerol. Por exemplo, para o *airlift* de cilindros concêntricos, o valor experimental de $k_L a$ foi em média 6 vezes menor em relação ao da água.

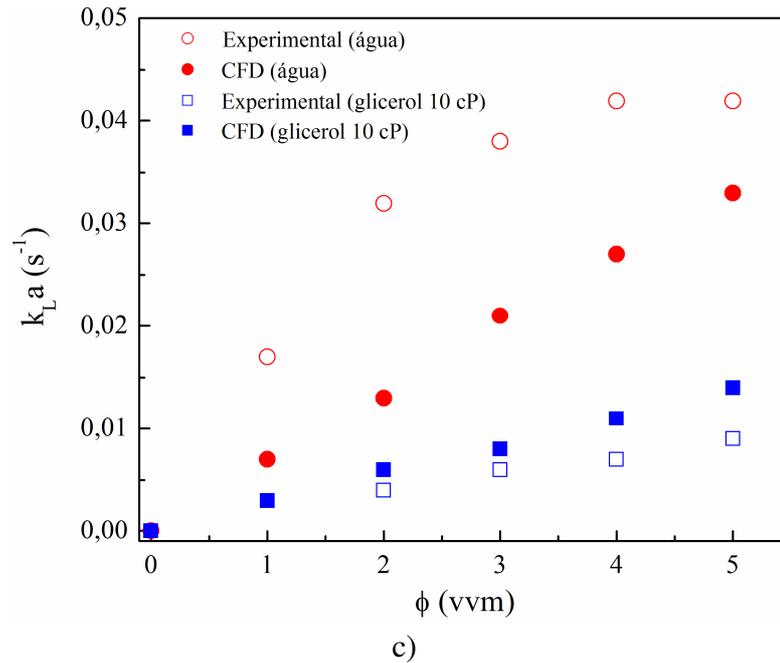
Figura 5.10 – Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio em função da vazão específica de ar para os fluidos Newtonianos: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



a)



b)

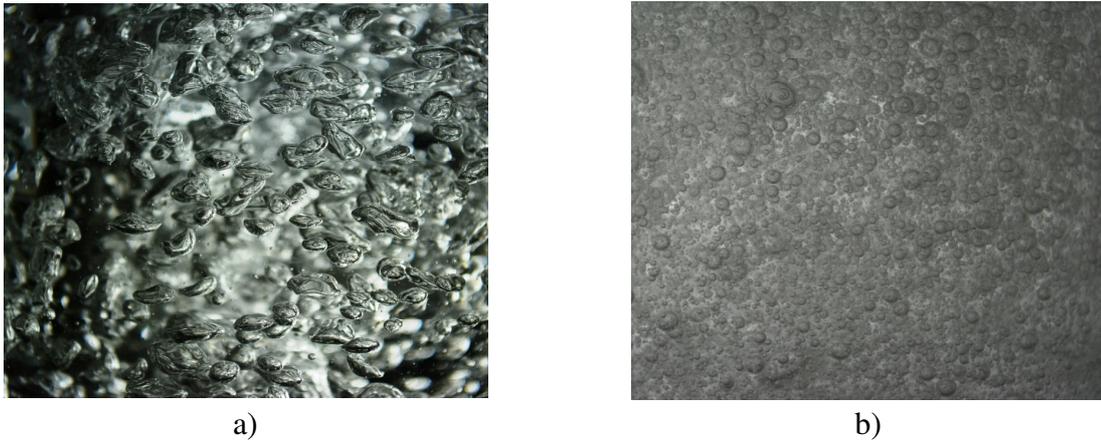


Fonte:Acervo próprio

Com relação às simulações em CFD observou-se que a modelagem proposta apresentou melhores resultados para a solução de glicerol 10 cP. A explicação para esse fato reside na sensibilidade do $k_L a$ com diâmetro de bolha. O parâmetro "a" (área interfacial específica das bolhas) depende inversamente do diâmetro de bolha (Equação 3.12), que foi de 5 mm de todos os ensaios. No entanto, a equação para o cálculo de "a" é correta apenas para bolhas perfeitamente esféricas e não considera a distribuição de tamanhos de partícula. É conhecido que o sistema água-ar apresenta tamanhos de partículas bem diferentes, com formas irregulares. Assim, a metodologia proposta para o cálculo de "a" gera melhores resultados para a solução de glicerol 10 cP, uma vez que as bolhas apresentam maior esfericidade (Figura 5.11).

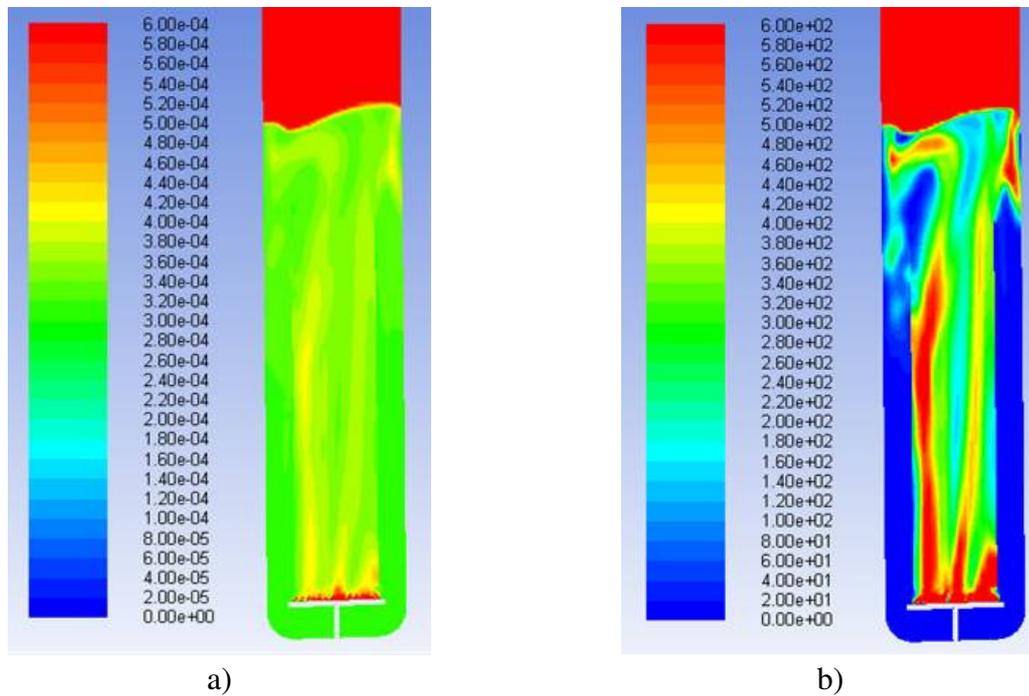
A Figura 5.12 exibe a distribuição espacial em um plano longitudinal das variáveis k_L e "a", necessários na estimativa do $k_L a$ global via CFD, conforme mencionado. Esses perfis foram integrados numericamente para que seja empregado o Teorema do Valor Médio. Nota-se que quanto mais ar há em uma determinada região, maior é o favorecimento de k_L e "a" nessa mesma região.

Figura 5.11 – Dispersão das bolhas a 5 vvm obtida em biorreator coluna de bolhas: a) água destilada; b) solução de glicerol 10 cP



Fonte:Acervo próprio

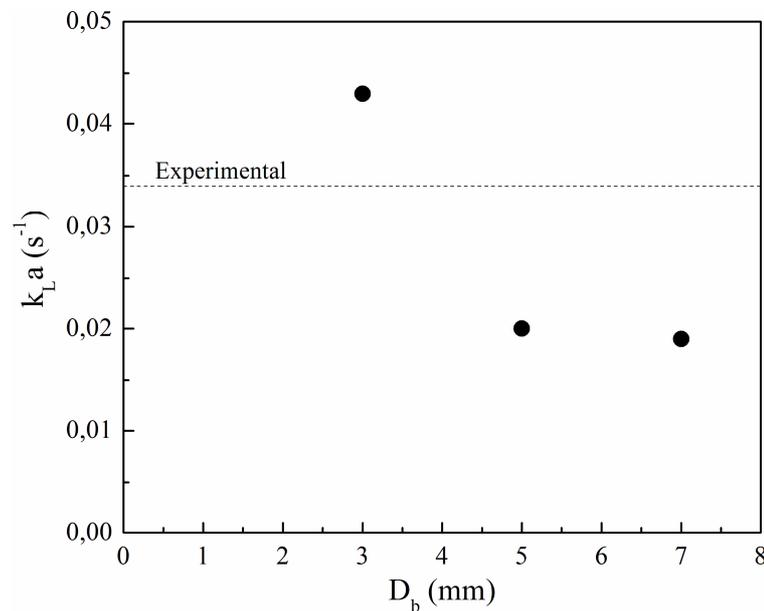
Figura 5.12 – Distribuição espacial de a) k_L (m/s) e b) " a " (m^{-1}) obtidos no biorreator *airlift* de cilindros concêntricos operando com solução de glicerol 10 cP a 3 vvm após 5 s



Fonte:Acervo próprio

A fim de verificar brevemente a influência do diâmetro da bolha no k_{La} , duas simulações adicionais foram realizadas no biorreator coluna de bolhas operando com água destilada, impondo diâmetros de 3,0 a 7,0 mm na condição de 3,0 vvm. Os resultados de k_{La} obtidos da simulação foram 0,043, 0,020 e 0,019 s^{-1} para 3,0, 5,0 e 7,0 mm de diâmetro bolha, respectivamente, enquanto que o valor experimental foi de 0,034 s^{-1} (Figura 5.13). A diminuição no diâmetro de 5,0 mm para 3,0 mm representou um aumento significativo no k_{La} (menor diâmetro, maior área interfacial). Portanto, a área interfacial específica é fortemente afetada pelo diâmetro da bolha.

Figura 5.13 – Perfil de k_{La} em função de D_b obtido no biorreator colunas de bolhas operando com água destilada



Fonte:Acervo próprio

Analisando-se novamente a Figura 5.10, observa-se que para todas as geometrias operando com água destilada o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio foi bastante subestimado pelas simulações em CFD. Este fato ocorre devido a especificação do diâmetro de bolha, que foi de 5,0 mm em todos os casos, visto que maiores diâmetros geram bolhas com menor área interfacial específica (ou seja, é um indicativo de que o diâmetro médio real das bolhas seja inferior a 5,0 mm). Para se ter uma boa transferência de oxigênio é melhor dispor de muitas bolhas pequenas ao invés de poucas bolhas grandes.

5.2.2 Fluido não-Newtoniano - Água e solução de goma xantana 0,2% m/v

Retenção gasosa global

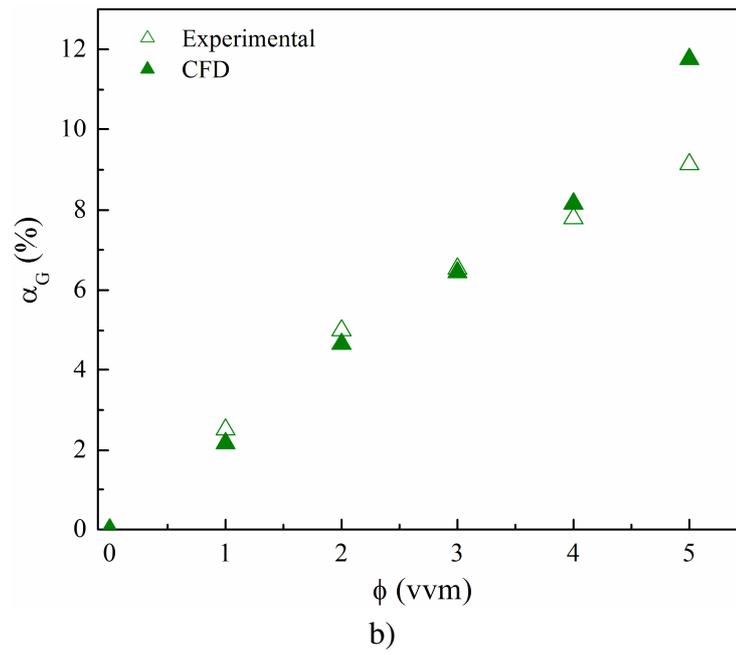
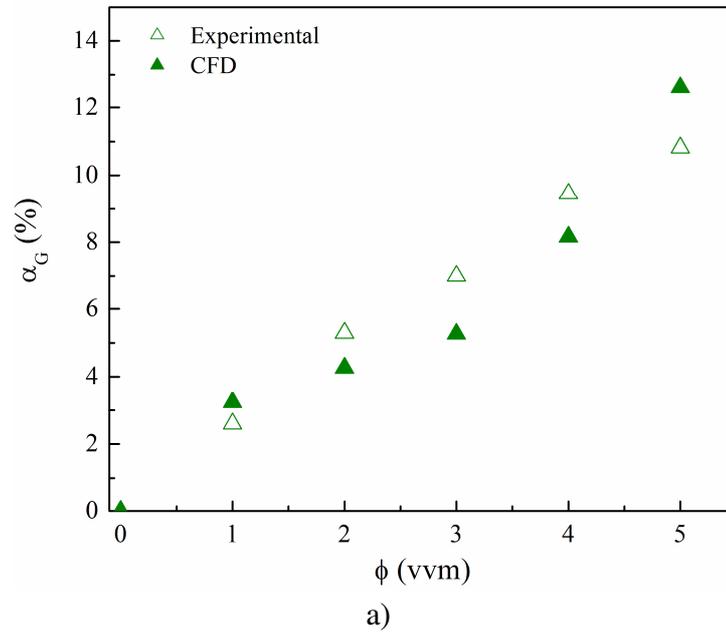
Os resultados referentes à retenção gasosa global para a solução de goma xantana estão resumidos na Figura 5.14. Considerando a relevância operacional dos biorreatores pneumáticos de circulação interna na produção de biocombustíveis (KETHEESAN e NIRMALAKHANDAN, 2011; BANNARI ET AL., 2012), não foram apresentados resultados referentes ao biorreator coluna de bolhas operando com solução de goma xantana (que simula a reologia de um caldo fermentativo). Nota-se que a geometria *airlift* de cilindros concêntricos foi a alternativa mais viável no intuito de reter o ar no sistema. A explicação para isso está no tempo de residência do gás: quanto maior esse tempo, maior é a retenção gasosa global (ANASTASIOU ET AL., 2013).

A Figura 5.15 ilustra a distribuição da fração volumétrica de ar ao longo dos dois biorreatores pneumáticos de circulação interna na vazão específica mais alta (5 vvm). Os perfis obtidos via CFD são coerentes com o comportamento real do sistema. Um exemplo disso é o acúmulo de gás no início da região de descida do biorreator *airlift split*. No entanto, a ascensão repentina da retenção gasosa global a 5 vvm da Figura 5.14b é devida a maior altura da dispersão observada na Figura 5.15b.

As simulações em CFD representaram adequadamente a tendência monotônica crescente da retenção gasosa global com a taxa de aeração do sistema esse tipo de fluido, também verificado por Anastasiou et al. (2013). As estimativas apresentaram melhor concordância para os resultados da geometria *airlift split*, tanto na tendência dos pontos quanto em seus valores propriamente ditos. Os maiores desvios relativos encontrados foram de 24% e 29% para a geometria *airlift* de cilindros concêntricos e *airlift split*, respectivamente.

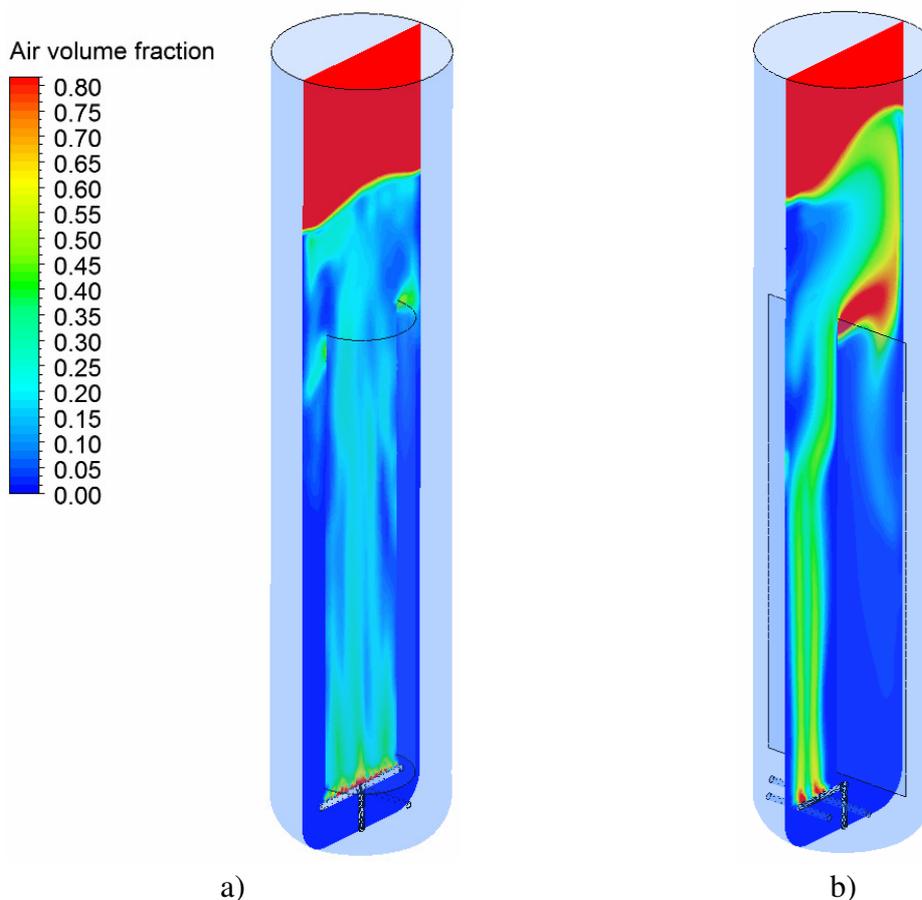
Isto é provavelmente devido à superestimativa numérica do regime heterogêneo de escoamento em altas vazões específicas de ar, o qual é caracterizado pelo aparecimento de grandes massas de ar, hidrodinâmica mais caótica e turbulenta (DENG et al., 2010; VÉLEZ-CORDERO e ZENIT, 2011).

Figura 5.14 – Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar para a solução de goma xantana 0,2% m/v: a) *airlift* de cilindros concêntricos; b) *airlift split*



Fonte:Acervo próprio

Figura 5.15 – Distribuição espacial da fração volumétrica de ar a 5 vvm para o sistema solução de goma xantana-ar: a) *airlift* de cilindros concêntricos; b) *airlift split*



Fonte:Acervo próprio

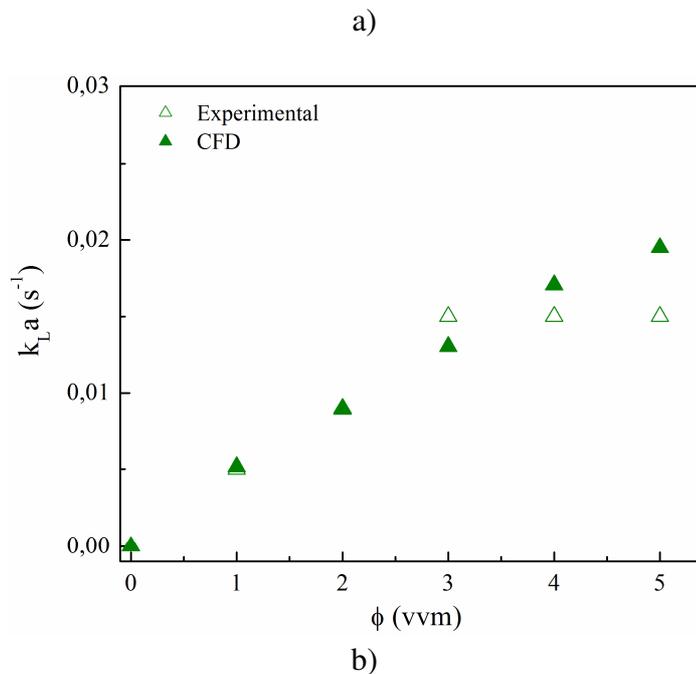
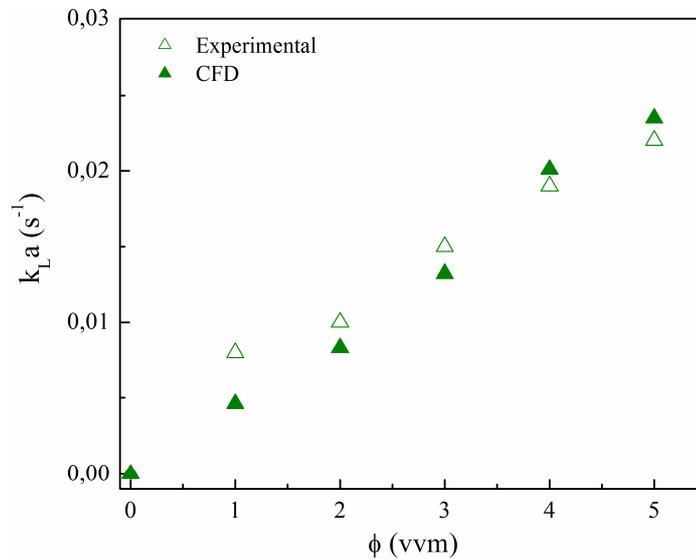
Coefficiente volumétrico de transferência de oxigênio

Os resultados referentes ao coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio obtidos para a solução de goma xantana 0,2% m/v estão sumarizados na Figura 5.16. Verificou-se, novamente, melhor desempenho da geometria *airlift* de cilindros concêntricos frente ao *airlift split*. Assim, o processo de transferência de massa é facilitado na primeira geometria e isso deve ser considerado na escolha do sistema que fará a produção de biocombustíveis e enzimas para a produção dos mesmos. Nota-se que $k_L a$ para a solução de goma xantana foi menor em relação ao $k_L a$ para a água, fato que corrobora os resultados obtidos por Deng et al. (2010).

As simulações em CFD representaram muito bem a tendência experimental observada no biorreator *airlift* de cilindros concêntricos, principalmente nas vazões iniciais dos ensaios em biorreator *airlift split*. Isso evidencia que a metodologia proposta para se

estimar $k_L a$ forneceu melhores resultados para o fluido não-Newtoniano. Não há trabalhos na literatura que enfatizem essa comparação a partir da técnica de CFD. Os maiores erros relativos observados foram de 49% e 30% para a geometria *airlift* de cilindros concêntricos e *airlift split*, respectivamente. Para a última geometria, houve um distanciamento progressivo da previsão numérica em relação aos valores experimentais. No entanto, na prática, esse fato pode se tornar menos relevante considerando que a maior parte dos cultivos não ultrapassam 2 vvm.

Figura 5.16 – Coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio em função da vazão específica de ar para a solução de goma xantana-ar: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



Fonte:Acervo próprio

6. CONCLUSÃO

Neste trabalho objetivou-se a estimativa computacional dos parâmetros de desempenho globais em biorreatores pneumáticos através da proposição de um modelo hidrodinâmico e posterior resolução através da técnica de CFD. O destaque de um trabalho como este reside na exploração de diferentes geometrias de biorreatores pneumáticos operando com diversos fluidos, proporcionando ferramentas que irão auxiliar na sua seleção. As principais conclusões deste estudo foram:

As simulações numéricas reproduziram de maneira consistente a tendência dos dados experimentais conforme a geometria e o fluido empregados. Isto é, a retenção gasosa global e o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio estimados numericamente via CFD responderam majoritariamente à tendência esperada dos dados experimentais, mostrando que a modelagem proposta capturou os efeitos mais relevantes de cada problema.

Os resultados mostraram que, independentemente do fluido, o biorreator *airlift* de cilindros concêntricos é a melhor alternativa para se obter maiores parâmetros globais de desempenho ($\bar{\alpha}_G$ e k_La), corroborando os dados experimentais. Isso indica que a hidrodinâmica no interior desse sistema favorece a homogeneização das fases e apresenta características que aumentam o tempo de residência do ar, contribuindo para uma melhor transferência de oxigênio.

O modelo para a estimativa do coeficiente de arraste teve forte influência na retenção gasosa global, conforme esperado. O modelo de Grace et al. (1976) se apresentou como a melhor opção para se estimar $\bar{\alpha}_G$ devido a sua capacidade de considerar vários formatos geométricos para a bolha. Isto é particularmente útil em sistemas onde a forma das bolhas é bastante instável, como o sistema água-ar.

O diâmetro de bolha possui uma influência numérica importante na estimativa de k_La uma vez que a área interfacial específica das bolhas é inversamente proporcional à esse parâmetro geométrico.

Os resultados estimados de k_La para a solução de glicerol 10 cP e de goma xantana 0,2% m/v apresentaram melhor concordância com dados experimentais, quando comparados com aqueles obtidos para a água destilada. Este comportamento indica que a modelagem matemática proposta para a estimativa de k_La foi mais coerente para os fluidos

mais viscosos. Isto está relacionado à maior esfericidade das bolhas nessas soluções, fato determinante para uma boa estimativa da área interfacial específica das bolhas.

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Após a realização desta Tese e uma análise crítica, sugere-se a seguir alguns tópicos a serem explorados em trabalhos futuros no intuito de preencher algumas lacunas que ainda estão abertas:

- Consideração da coalescência e distribuição de tamanho das bolhas na modelagem hidrodinâmica, principalmente quando o sistema for água-ar;
- Avaliar geometrias alternativas de biorreatores pneumáticos, visando o aprimoramento da transferência de oxigênio e o aumento do tempo de residência do ar;
- Simular a operação de um biorreator pneumático incluindo a modelagem cinética de reações de fermentação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AIBA, S.; HUMPHREY, A. E.; MILLIS, N. F. **Biochemical engineering**. 2nd edition. Tóquio: University of Tokyo Press, 1973.
- ANASTASIOU, A. D.; PASSOS, A. D.; MOUZA, A. A. Bubble columns with fine pore sparger and non-Newtonian liquid phase: Prediction of gas hold up. **Chemical Engineering Science**, v. 98, p. 331-338.
- BAILEY, J. E.; OLLIS, D. F. **Biochemical engineering**. New York: McGraw Hill, 1986.
- BANNARI, R.; BANNARI, A.; SELMA, B.; PROULX, P. Mass transfer and shear in an airlift bioreactor: using a mathematical model to improve reactor design and performance. **Chemical Engineering Science**, v. 66, p. 2057-2067, 2011.
- BANNARI, R.; BANNARI, A.; VERMETTE, P.; PROULX, P. A model for cellulase production from *Trichoderma reesei* in an airlift reactor. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 109, p. 2025-2038, 2012.
- BEHIN, J. Modeling of modified airlift loop reactor with a concentric double-draft tube. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 88, p. 919-927, 2010.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. **Fenômenos de transporte**. 2ª edição. Rio de Janeiro: LTC, 2004.
- BLAZEJ, M.; CARTLAND GLOVER, G. M.; GENERALIS, S. C.; MARKOS, J. Gas-liquid simulation of an airlift bubble column reactor. **Chemical Engineering and Processing**, v. 43, p. 137-144, 2004.
- BOAUIFI, M.; HEBRARD, G.; BASTOUL, D.; ROUSTAN, M. A comparative study of gas hold-up, bubble size, interfacial area and mass transfer coefficients in stirred gas-liquid reactor and bubble columns. **Chemical Engineering and Processing**, v. 40, p. 97-111, 2001.
- CAMARASA, E.; CARVALHO, E.; MELEIRO, L. A. C.; MACIEL FILHO, R.; DOMINGUES, A.; WILD, G.; PONCIN, S.; MIDOUX, N.; BOUILLARD, J. A hydrodynamic model for air-lift reactors. **Chemical Engineering and Processing**, v. 40, p. 121-128, 2001.
- CANEDO, E. L. Fenômenos de transporte. Rio de Janeiro: LTC, 2010.
- CERRI, M. O. Avaliação de transferência de calor e massa de um biorreator airlift de circulação interna de bancada para a produção de ácido clavulânico. 116p. **Dissertação (Mestrado em Engenharia Química)**, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2005.
- CERRI, M. O. Hidrodinâmica e transferência de oxigênio em três biorreatores airlift de circulação interna geometricamente semelhantes. **Tese (Doutorado em Engenharia Química)**, Universidade Federal de São Carlos, 2009.
- CERRI, M. O.; BALDACIN, J. C.; CRUZ, A. J. G.; HOKKA, C. O.; BADINO, A. C. Prediction of mean bubble size in pneumatic bioreactors. **Biochemical Engineering Journal**,

v. 53, p. 12-17, 2010.

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. **Biochemical Engineering Journal**, v. 39, p. 51-57, 2008.

CHEN, J.; GUPTA, P.; DEGALEESAN, S.; AL-DAHMAN, M. H.; DUDUKOVIC, M. P.; TOSELAND, P. A. Gas holdup distributions in large-diameter bubble columns measured by computed tomography. **Flow Measurement and Instrumentation**, v. 9, p. 91-101, 1998.

CHISTI, M. Y. **Air-lift bioreactors**. New York: Elsevier, 1989.

CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. **Bubbles, drops and particles**. San Diego: Academic Press, 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.

CONTRERAS, A.; GARCÍA, F.; MOLINA, E.; MERCHUK, J. C. Influence of sparger on energy dissipation, shear rate, and mass transfer to sea water in a concentric-tube airlift bioreactor. **Enzyme and Microbial Technology**, v. 25, p. 820-830, 1999.

COUVERT, A.; BASTOUL, D.; ROUSTAN, M.; LINÉ, A.; CHATELLIER, P. Prediction of liquid velocity and gas hold-up in rectangular air-lift reactors of different scales. **Chemical Engineering and Processing**, v. 40, p. 113-119, 2001.

DENG, Z.; WANG, T.; ZHANG, N.; WANG, Z. Gas holdup, bubble behavior and mass transfer in a 5m high internal-loop airlift reactor with non-Newtonian fluid. **Chemical Engineering Journal**, v. 160, p. 729-737, 2010.

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.

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 e uso do mesmo**. PI0701608-5, 2007.

GIOVANNETONE, J. P.; GULLIVER, J. S. Gas transfer and liquid dispersion inside a deep airlift reactor. **AIChE J.** v. 54, p. 850-861, 2008

GOGOVA, Z.; HANIKA, J. Model-Aided Design of a Three-Phase Gas-Lift Reactor for Oxidation Accompanied by Catalyst Reversible Deactivation. **Chemical Engineering Technology**, v. 32, p. 1929-1940, 2009.

GOUVEIA, E. R.; HOKKA, C. O.; BADINO JR, A. C. The effects of geometry and operational conditions on gas holdup, liquid circulation and mass transfer in an airlift reactor.

Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 20, p. 363-374, 2003.

GRACE, J. R.; WAIREGI, T.; NGUYEN, T. H. Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids. **Transactions of the Institution of Chemical Engineers**, v. 54, p. 167-173, 1976.

HEKMAT, A.; AMOOGHIN, A. E.; MORAVEJI, M. K. CFD simulation of gas-liquid flow behaviour in an air-lift reactor: determination of the optimum distance of the draft tube. **Simulation Modeling Practice and Theory**, v. 18, p. 927-945, 2010.

HUANG, Q.; YANG, C.; YU, G.; MAO, Z-S. CFD simulation of hydrodynamics and mass transfer in an internal airlift loop reactor using a steady two-fluid model. **Chemical Engineering Science**, v. 65, p. 5527-5536, 2010.

ISHII, M.; ZUBER, N. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. **A.I. Ch. E. Journal**, v. 25, p. 843-855, 1979.

KETHEESAN, B.; NIRMALAKHANDAN, N. Development of a new airlift-driven raceway reactor for algal cultivation. **Applied Energy**, v. 88, p. 3370-3376, 2011.

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. **Chem. Eng. Science**, v. 55, p. 3275-3286, 2000.

LAKOTA, A.; JAZBEC, M.; LEVEC, J. Impact of structured packing on bubble column mass transfer characteristics. Part 2. Analysis of gas-liquid mass transfer measurements. **Acta. Chim. Slov.**, v. 49, p. 587-604, 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.

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.

LOPEZ DE BERTODANO, M. Two-fluid model for two-phase turbulent jets. **Nuclear Engineering and Design**, v. 179, p. 65-74, 1991.

LUO, H-P.; AL-DAHMAN, M. H. Local gas hold up in a draft tube airlift reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 65, p. 4503-4510, 2010.

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.

MENDES, C. E.; BADINO, A. C. Oxygen transfer in different pneumatic bioreactors containing viscous Newtonian fluids. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 94, p. 456-465, 2015.

MENZEL, T.; WEIDE, T.; STAUDACHER, O.; ONKEN, U. Reynolds stress model for

bubble column reactor. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 29, p. 994-998, 1990.

MERCHUK, J. C.; CONTRERAS, A.; GARCÍA, F.; MOLINA, E. **Chemical Engineering Science**, v. 53, p. 709-719, 1998.

MERCHUK, J. C. Airlift bioreactors: review of recent advances. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 81, p. 324-337, 2003.

MOUZA, A. A.; DALAKOGLU, G. K.; PARAS, S. V. Effect of liquid properties on the performance of bubble column reactors with fine pore spargers. **Chem. Eng. Science**, v. 60, p. 1465-1475, 2005.

MUDE, 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.

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.

POURTOUSI, M.; SAHU, J. N.; GANESAN, P. Effect of interfacial force and turbulence models on predicting flow pattern inside the bubble column. **Chemical Engineering and Processing**, 75, 38-47, 2014

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.

SATO, Y; SADATOMI, M.; SEKOGUCHI, K. Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 7, p. 167-177, 1981.

SCHILLER, L. A.; NAUMANN, Z. A drag coefficient correlation. **VDI Zeits**, v. 77, p. 318, 1933.

SHAIKH, A.; AL-DAHMAN, M. H. A review on flow regime transition in bubble columns. **International Journal of Chemical Reactor Design**, v. 5, 2007.

SHAH, Y. T.; KELKAR, B. G.; GODBOLE, S. P. AND DECKWER, W. D. Design parameters estimations for bubble column reactors, **AIChE J.**, v. 28, p. 353-379, 1982

SILVA JÚNIOR, J. L. Investigação do escoamento bifásico gás-líquido em uma coluna de bolhas retangular por meio da técnica de CFD. 151f. **Dissertação (Mestrado em Engenharia Química)**, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2011.

SIMCIK, M.; MOTA, A.; RUZICKA, M. C.; VICENTE, A.; TEIXEIRA, J. CFD simulation and experimental measurement of gas hold up and liquid interstitial velocity in internal loop airlift reactor. **Chemical Engineering Science**, DOI 10.1016/j.ces.2011.01.059, 2011.

RUEN-GNAM, D.; WONGSUCHOTO, P.; LIMPANUPHAP, A.; CHARINPANITKUL, T.; PASAVANT, P. Influence of salinity on bubble size distribution and gas-liquid mass transfer

in airlift contactors. **Chemical Engineering Journal**, v. 141, p. 222-232, 2008.

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

THOMASI, S. S. Avaliação de parâmetros de desempenho de três modelos de biorreatores pneumáticos de bancada. 86f. **Dissertação (Mestrado em Engenharia Química)**, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2010.

THOMASI, S. S.; CERRI, M. O.; BADINO, A. C. Average shear rate in three pneumatic bioreactors. **Bioprocess and Biosystems Engineering**, v. 33, p. 979-988, 2010

TOMIYAMA, A. Struggle with computational bubble dynamics. **Third international conference on multi-phase flow**, Lyon, France, 1998.

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.

VAN BENTHUM, W. A. J.; VAN DER LANS, R. G. J. M.; VAN LOOSDRECHT; HEIJNEN, J. J. Bubble recirculation regimes in an internal-loop airlift reactor. **Chem. Eng. Sc.**, v. 54, p. 3995-4006, 1999.

VÉLEZ-CORDERO, J. R.; ZENIT, R. Bubble cluster formation in shear-thinning inelastic bubbly columns. **J. Non-Newton Fluid**, v. 166, p. 32-41, 2014.

WONGSHUCHOTO, P.; CHARINPANITKUL, T.; PASAVANT, P. Bubble size distribution and gas-liquid mass transfer in airlift contactors. **Chemical Engineering Journal**, v. 92, p. 81-90, 2003.

ZHANG, T.; WEI, C.; FENG, C.; ZHU, J. A novel airlift reactor enhanced by funnel internals and hydrodynamics prediction by the CFD method. **Bioresource Technology**, v. 104, p. 600-607, 2012.

APÊNDICE

Ensaio suplementares conduzidos no *software* CFX 14.0

Este Apêndice apresenta os resultados suplementares obtidos a partir de uma proposta preliminar ao trabalho principal que já foi desenvolvido, valendo-se do uso do *software* CFX[®] 14.0. Assumiu-se uma condição de contorno muito particular e simplificadora na interface gás-líquido: a *degassing condition*. A partir dos resultados retornados pela resolução do modelo matemático, calculou-se apenas a retenção gasosa global nas três geometrias propostas operando apenas com água destilada: coluna de bolhas, *airlift* de cilindros concêntricos e *airlift split*.

A condição de contorno *degassing condition* assume que a interface gás-líquido localizada no topo da coluna seja uma parede rígida na qual o gás deixa o sistema, permanecendo o líquido retido no domínio. Em outras palavras, essa superfície rígida torna-se um contorno de saída para a fase gasosa e uma parede sem atrito para o líquido (Figura A1). Não há expansão e mobilidade dessa interface. Este fato torna a modelagem matemática mais simples, embora a situação não corresponda ao fenômeno físico real. No entanto, trabalhos utilizando esta abordagem podem ser encontrados na literatura, onde verifica-se que resultados interessantes puderam ser obtidos a partir desse modelo simplificado.

Simcik et al. (2011) avaliaram a hidrodinâmica de um reator *airlift* de cilindros concêntricos considerando a hipótese *degassing condition*. O sistema estudado possuía 50 L, sendo que as vazões volumétricas de alimentação de ar variaram de 1,9 L/min a 13,6 L/min. Utilizando a definição representada pela Equação 3.1, a vazão específica de ar máxima utilizada pelos autores foi de 0,27 vvm. A sugestão dos autores em adotar a hipótese *degassing condition* se apresentou como uma alternativa em obter um modelo matemático simples e que fornecesse resultados satisfatórios referentes a variáveis específicas, como retenção gasosa global.

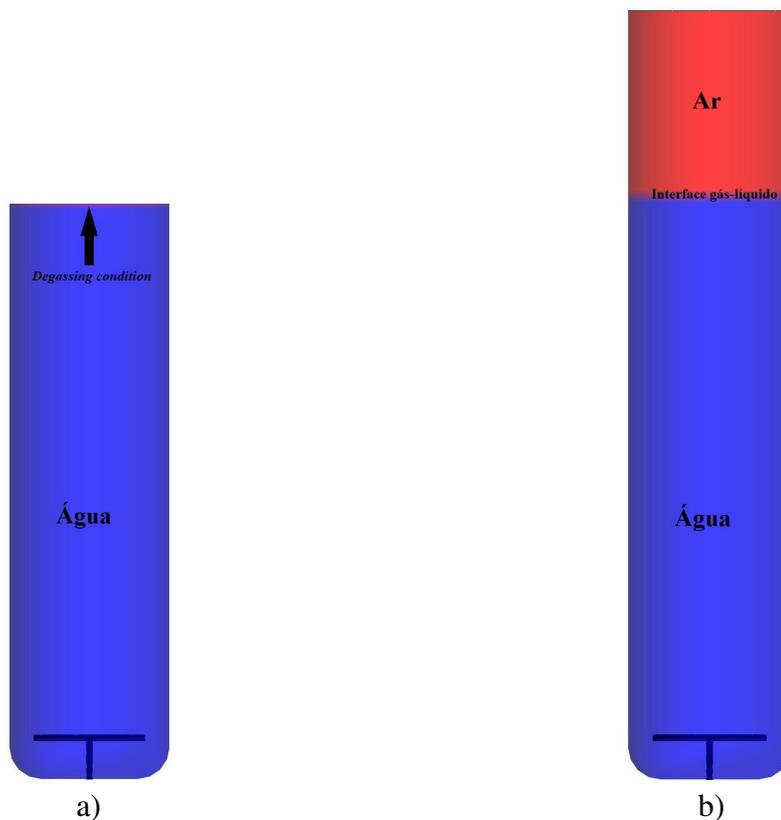
No intuito de averiguar condições difundidas na literatura e considerando a possibilidade de obter modelos matemáticos representativos com maior simplicidade, optou-se em conduzir preliminarmente ensaios numéricos impondo a condição *degassing condition* na interface gás-líquido de cada modelo de biorreator pneumático abordado. Isso significa que a interface, localizada em 45 cm a partir da base do sistema, não será móvel após a aeração do meio, já que existe uma superfície rígida que não permite a expansão volumétrica da

dispersão.

Esta etapa preliminar foi conduzida no *software* CFX[®] 14.0 da seguinte maneira:

- Para cada vazão específica de ar na faixa de 1 a 6 vvm foi adotada a hipótese *degassing condition* considerando apenas o sistema ar-água para as três geometrias (coluna de bolhas, *airlift* de cilindros concêntricos e *airlift split*);
- Devido à própria hipótese em questão foi necessário conduzir primeiramente uma simulação em estado estacionário para cada vazão a fim de que houvesse uma inicialização adequada dos campos de solução;
- A partir dessa solução inicial, para cada vazão, foi conduzida uma simulação em regime transiente a fim de verificar a dinâmica do sistema durante um período suficiente de tempo para a estabilização da retenção gasosa global;
- Através da aplicação do Teorema do Valor Médio, que retorna a média da fração volumétrica de ar ponderada pelos volumes finitos do domínio, foi possível obter a retenção gasosa global em cada passo no tempo. Esse valor global foi obtido através da integração numérica do perfil espacial da fração volumétrica de ar;
- Como a variável em questão possui oscilação, foi necessário extrair também o valor médio ao longo do tempo para se obter de fato a retenção gasosa global calculada.
- Os resultados calculados foram comparados com os valores experimentais obtidos por Thomasi (2010).

Figura A1 – Comparação entre o uso da condição de contorno *degassing condition* (a) e a situação na qual a interface gás-líquido é móvel e livre para se expandir (b)

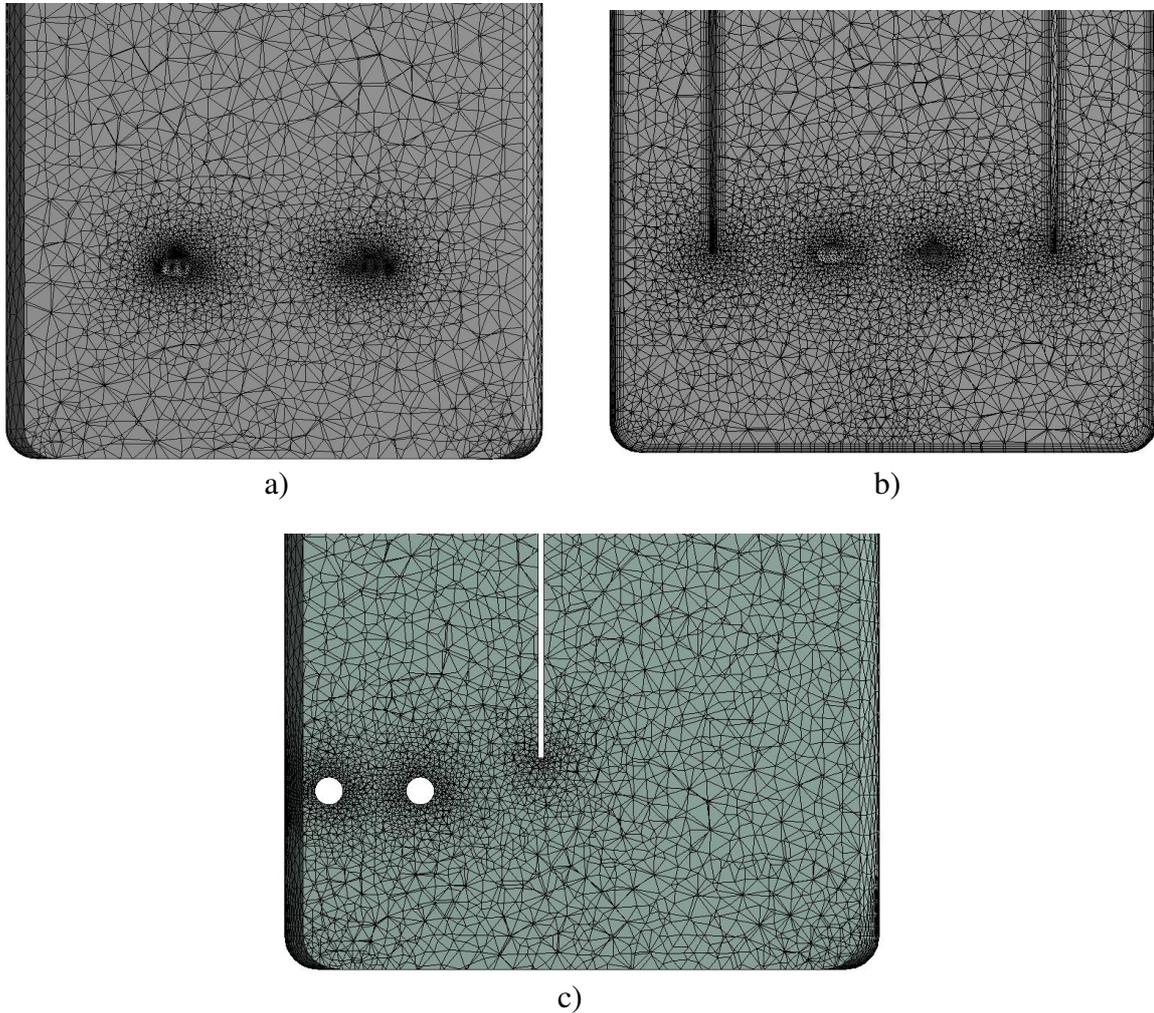


Fonte: Acervo próprio

A geometria computacional empregada foi a mesma daquela representada na Figura 4.4. A exceção é que a condição de contorno se localiza exatamente em 45 cm, a altura inicial da fase líquida. Ou seja, não há domínio computacional acima dessa cota, já que se trata de uma condição de fronteira.

Adotou-se malha 100% tetraédrica nesses ensaios preliminares, gerada do software ANSYS® Meshing 14.0. Impôs-se o número de elementos tridimensionais baseando-se no trabalho de Hekmat et al. (2010), o qual adotaram estratégia de malha semelhante em um biorreator *airlift* de cilindros concêntricos de maiores dimensões (altura=1,80 m; diâmetro=0,2 m; 120.000 elementos tetraédricos). Com base no estudo desenvolvido pelos autores, foram utilizados em cada uma das geometrias, aproximadamente 500.000 elementos, com espaçamento mínimo entre nós de 0,1 mm e máximo de 5 mm (Figura A2).

Figura A2 – Aspectos qualitativos das malhas computacionais utilizadas nos ensaios preliminares: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



Fonte: Acervo próprio

A Tabela A1 sumariza as condições utilizadas nas simulações conduzidas nesta etapa suplementar do trabalho, ou seja, nas simulações conduzidas no CFX[®] 14.0 considerando a hipótese *degassing condition* na interface gás-líquido. Os modelos de forças interfaciais adotados, bem como o modelo de turbulência k-ε padrão, foram aqueles recomendados no trabalho de Silva (2011).

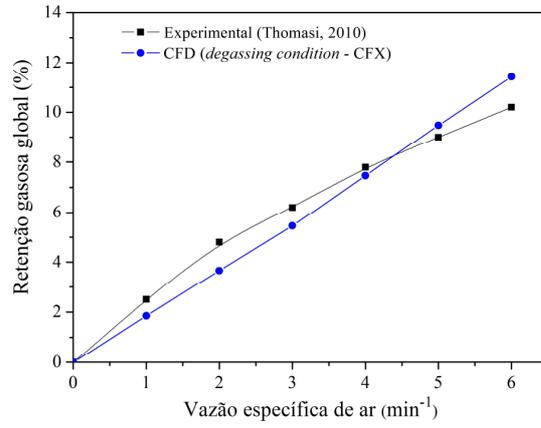
Tabela A1 – Condições utilizadas no CFX® 14.0

| Fluidos | |
|-----------------------------|---|
| Água | Fase contínua; T=28°C |
| Ar | Fase dispersa; $D_b=5$ mm; gás real (Standard Redlich-Kwong); T=28°C |
| Contornos | |
| Orifícios do aspersor | $\alpha_L=0$; $\alpha_G=1$; velocidade de entrada do ar - Equação 4.28 |
| Topo | <i>degassing condition</i> , P=1 atm, velocidade do ar perpendicular à superfície |
| Parede | água (sem deslizamento); ar (com deslizamento) |
| Turbulência | |
| Água | Modelo k- ϵ padrão: $C_\mu=0,09$; $C_{\epsilon 1}=1,44$; $C_{\epsilon 2}=1,92$; $\sigma_k=1$; $\sigma_\epsilon=1,3$ |
| Ar | <i>Dispersed phase zero equation</i> |
| Forças interfaciais | |
| $\sigma_{ar-água}$ | 0,072 N/m |
| Arraste | Grace et al. (1976) |
| Sustentação | Tomiya (1998) |
| Dispersão turbulenta | Lopez de Bertodano (1991) |
| Parâmetros do <i>solver</i> | |
| <i>Advection scheme</i> | <i>High Resolution</i> |
| <i>Turbulence numerics</i> | <i>First Order</i> |
| <i>Transient term</i> | <i>Second Order Backward Euler</i> |
| Resíduo | RMS= 1×10^{-4} |
| Estado estacionário | <i>physical timescale</i> =3 s; 500 iterações; 6 horas de simulação |
| Regime transiente | 20 iterações/passos no tempo; 5 s em tempo real; 6 horas de simulação <i>timestep</i> =0,01 s; 500 passos; inicializado com os resultados do estado estacionário |

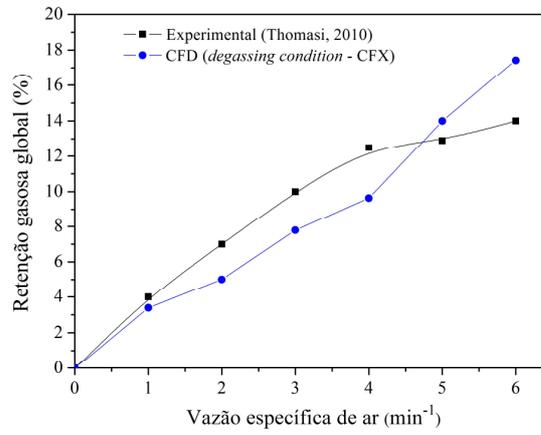
Fonte: Acervo próprio

A Figura A3 apresenta os perfis de retenção gasosa global em função da vazão específica de alimentação de ar obtidos experimentalmente (Thomasi, 2010) e numericamente (via CFD).

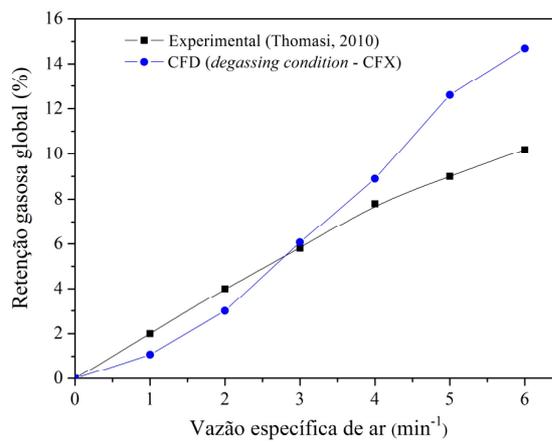
Figura A3 – Retenção gasosa global em função da vazão específica de ar: a) coluna de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



a)



b)



c)

Fonte: Acervo próprio

Cada ponto azul da Figura A3 correspondeu a uma simulação em estado estacionário e uma em regime transiente, conforme discutido. Considerando as dimensões do sistema (escala de bancada), foram simulados 5 segundos da operação real dos biorreatores, tempo suficiente para a estabilização da retenção gasosa global e de padrões de escoamento.

A retenção gasosa global foi obtida, nesta etapa do trabalho, através do Teorema do Valor Médio, que nada mais é do que uma média ponderada dos valores de fração volumétrica de ar obtidos em cada volume de controle da malha e cada passo no tempo, conforme mostra a Equação A1.

$$\bar{\alpha}_G = \frac{\int \iiint \alpha_G dV dt}{V \Delta t} \quad (A1)$$

De maneira geral observou-se que, em condições de baixa vazão específica de alimentação de ar ($\phi < 4$ vvm) a retenção gasosa global foi subestimada, sendo que nas demais condições a variável torna-se superestimada pelo modelo matemático proposto. Esse comportamento é muito provavelmente influenciado pelo contorno *degassing condition*. Quando as simulações são conduzidas em baixas vazões, esta condição hipotética faz com que a maior parte do gás deixe o sistema, contribuindo para a diminuição da retenção gasosa global calculada. Em contrapartida, a condição de contorno se torna incapaz de expulsar o gás eficientemente em altas vazões de operação, retendo-o no sistema e contribuindo para o aumento da fração gasosa calculada.

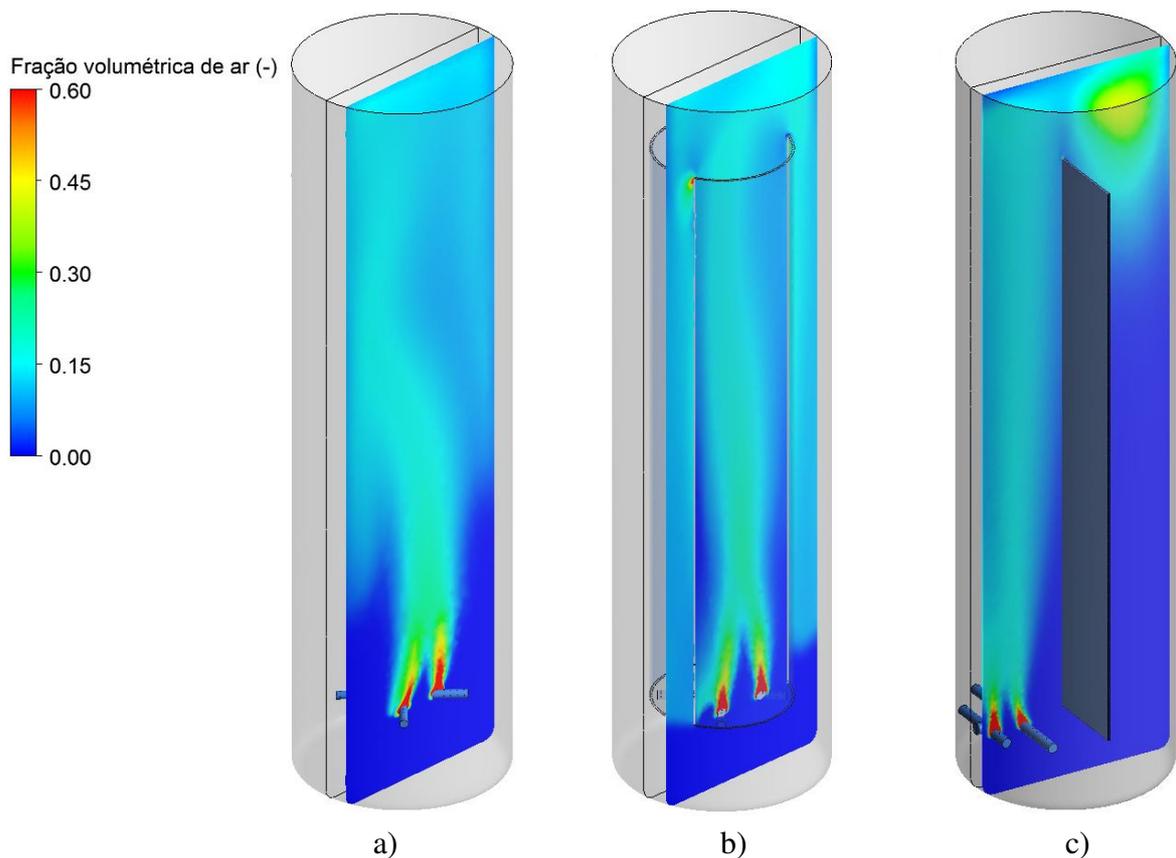
Embora os resultados tenham sido visualmente coerentes para a geometria coluna de bolhas, verifica-se que o erro relativo máximo foi de 25%, calculado a 1 vvm. As demais geometrias apresentam os seguintes erros máximos: *airlift* de cilindros concêntricos (erro relativo máximo=29% a 2 vvm); *airlift split* (46% de erro relativo máximo a 1 vvm). É muito importante que a retenção gasosa global calculada fique próxima aos dados experimentais no início da curva (até 4 vvm), faixa onde usualmente são conduzidos cultivos aeróbios de microrganismos. Altas vazões específicas de ar promovem altas tensões de cisalhamento no meio, o que provoca a morte do microrganismo.

Para ilustrar, a Figura A4 exhibe a distribuição espacial da fração volumétrica de ar referente aos biorreatores coluna de bolhas, *airlift* de cilindros concêntricos e *airlift split*, obtidas a 5 vvm após 5 segundos de operação.

A distribuição espacial da fração volumétrica de ar no biorreator coluna de bolhas (Figura A4a) possui um comportamento sigmoidal e caótico. Embora o biorreator coluna de bolhas esteja desprovido de anteparos, é possível notar recirculação de gás no sistema em regiões próximas à parede.

Em relação ao biorreator *airlift* do tipo cilindros concêntricos (Figura A4b) foi possível verificar que boa parte do gás alcançou toda a extensão da região de descida. Isso indica que a fase gasosa está recirculando pelo sistema, conforme o Regime III (Figura 3.4), promovendo a homogeneização do meio e melhorando a transferência de oxigênio. No caso da geometria tipo *split* (Figura A4c), observa-se acúmulo de gás na parte superior do *downcomer*, fato observado experimentalmente.

Figura A4 – Distribuição espacial da fração volumétrica de ar a 5 vvm e $t=5$ s: a) colunas de bolhas; b) *airlift* de cilindros concêntricos; c) *airlift split*



Fonte: Acervo próprio

Futuros ensaios numéricos referentes aos biorreatores *airlift* poderão apresentar problemas de modelagem se a interface gás-líquido não for móvel, pois os fenômenos de recirculação são mais predominantes e ocorrem bem próximos à interface para as geometrias

abordadas. Além disso, os resultados obtidos considerando a mobilidade da interface gás-líquido são mais promissores devido às possibilidades de se implementar modelos matemáticos mais realistas a um custo computacional razoável. Considerando parâmetros como custo computacional, facilidade de implementação e problemas de convergência, verificou-se que para os casos estudados neste trabalho, o *software* FLUENT foi uma alternativa mais adequada quando objetivou-se empregar a mobilidade da interface gás-líquido nas simulações, uma situação mais realista.