

**PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO PARANÁ
ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
MECÂNICA**

ROBERTO FRANCISCO DA SILVA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO TURBULENTO
MULTIFÁSICO EM REATORES TIPO AIRLIFT**

CURITIBA

2018

ROBERTO FRANCISCO DA SILVA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO TURBULENTO
MULTIFÁSICO EM REATORES TIPO AIRLIFT**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Escola Politécnica, da Pontifícia Universidade Católica do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Engenharia Mecânica.

Orientadora: Professora Dra. Viviana Cocco Mariani

CURITIBA

2018

ROBERTO FRANCISCO DA SILVA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO TURBULENTO
MULTIFÁSICO EM REATORES TIPO AIRLIFT**

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Pontifícia Universidade Católica do Paraná

Prof Dr. Fred Lacerda Amorim
Coordenador do programa

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof^a. Dra. Viviana Cocco Mariani - Orientadora
Pontifícia Universidade Católica do Paraná

Prof. Dr. Emerson Martim
Pontifícia Universidade Católica do Paraná

Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki
Universidade Federal do Paraná

Prof. Dr. Luís Mauro Moura
Pontifícia Universidade Católica do Paraná

Curitiba, ____ de _____ de 2018.

AGRADECIMENTOS

À professora Viviana Cocco Mariani, pela paciência e capacidade de me orientar nos momentos em que parecia não haver um caminho claro a seguir.

À minha esposa, pelo apoio incondicional.

À CAPES, por possibilitar a realização de mais esta etapa em minha formação acadêmica por meio da taxa concedida.

À PUCPR, por mais uma vez fazer parte de minha trajetória acadêmica: em 2016 com a Graduação em Engenharia Química, e agora, com o Mestrado em Engenharia Mecânica.

Ao PPGEM, por me concederem a oportunidade de realizar este trabalho.

Aos professores do PPGEM pelo conhecimento compartilhado.

Aos colegas e amigos que participam do PPGEM, pelo companheirismo e apoio.

Aos meus pais, pelo suporte e encorajamento.

Aos funcionários da PUCPR, em especial aos que participam diretamente do programa, como a secretária Jane, pelo profissionalismo, agilidade e eficiência.

E finalmente, a Deus que permitiu que tudo isso acontecesse e certamente, pelas oportunidades futuras.

“A Matemática é a única linguagem que temos em comum com a natureza.”
Stephen Hawking

RESUMO

O presente trabalho visou prever o comportamento fluidodinâmico de escoamentos multifásicos em reatores do tipo *airlift* agitados pneumaticamente, fazendo uso de técnicas de dinâmica dos fluidos computacional. Tais reatores podem ser utilizados para a biotransformação de esteroides, porém neste estudo as fermentações ocorreram com os microrganismos imobilizados em biofilmes. Primeiramente, fez-se necessária a validação e verificação de um caso da literatura com os dados numéricos encontrados neste trabalho. Para as simulações numéricas utilizou-se o software comercial Ansys CFX na versão 17.2 e o modelo multifásico Euleriano. Na validação, a velocidade superficial do ar variou entre 0,01 m/s e 0,075m/s e o modelo turbulento adotado foi o modelo $k-\varepsilon$ padrão. Foram estudadas as características globais de funcionamento de um *airlift*, a saber, fração volumétrica gasosa e velocidade do líquido no reator. Os resultados da validação e verificação foram adequados com os resultados obtidos na literatura. Foram comparados, ainda, os resultados obtidos pelos modelos de turbulência $k-\varepsilon$ padrão e o $k-\omega$ SST, ambos os modelos foram capazes de prever o escoamento no reator, no entanto, o modelo $k-\varepsilon$ padrão apresentou resultados mais acurados além de apresentar um custo computacional menor, por exigir malhas menos refinadas. Após a validação foram avaliadas três novas configurações capazes de acomodar os suportes do biofilme e os impactos destes no comportamento hidrodinâmico dos *airlifts*. A velocidade do líquido no *riser* apresentou um ligeiro incremento e no *downcomer* um decréscimo, não foram observados pontos de estagnação em todo o reator, indicando que as novas geometrias propostas seriam factíveis.

Palavras-chave: *Airlift*, Turbulência, Escoamento Multifásico, Mecânica dos Fluidos, Simulação Computacional.

ABSTRACT

The present work aimed to predict the fluid dynamics behavior of multiphase flows in pneumatically agitated airlift reactors, making use of computational fluid dynamics techniques. These reactors can be used for the biotransformation of steroids, however in this study the fermentations occurred with the microorganisms immobilized in biofilms. First, it was necessary to validate and verified a case from the literature where the numerical results of this study were compared with experimental and numerical data found in that work, respectively. For the numerical simulations the commercial software Ansys CFX in version 17.2 and the multiphase Eulerian model were used. In the validation, the air velocity varied between 0.01 m/s and 0.075 m/s and the turbulent model adopted was the standard k- ϵ model. We studied the global characteristics of an airlift, namely, gas holdup and liquid velocity in the reactor. The results of the validation and verification were adequate with the results obtained in the literature. The results of the standard k- ϵ and the k- ω SST were also compared, both models were able to predict the flow in the reactor, however, the standard k- ϵ model presented more accurate results besides presenting a lower computational cost, since it requires less refined meshes. After validation, three new configurations capable of accommodating the biofilm supports and their impacts on the hydrodynamic behavior of the airlifts were evaluated. The velocity of the liquid in the riser presented a slight increase and in the downcomer a decrease, no stagnation points were observed throughout the reactor, indicating that the proposed geometries would be feasible.

Keywords: Airlift, Turbulence, Multiphase Flow, Fluid Mechanics, Computational Simulation

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Tipos de biorreatores (a) STR; (b) coluna de bolhas; (c) <i>air-lift</i> ; (d) <i>plug-flow</i> ; (e) com células imobilizadas (leito fixo); (f) células imobilizadas (leito fluidizado); (g) com membranas planas; (h) <i>hollow fiber</i>	3
Figura 2 - Tipos de <i>airlifts</i> com (a) tubo dividido; (b) tubo interno concêntrico; (c) tubo interno concêntrico subdividido e (d) circulação externa.	5
Figura 3 - Regimes de circulação de bolhas no <i>downcomer</i> . a) estratificado com velocidade superficial do gás médias, b) bolhas avançando para a base do reator, c) bolhas presentes em todo o canal do <i>downcomer</i> com movimentos oscilatórios, d) regime de recirculação totalmente desenvolvido movimento retilíneo das bolhas.	9
Figura 4 - Geometria do <i>airlift</i>	29
Figura 5 - Representação das etapas para a utilização do software Ansys CFX.	30
Figura 6 - Malha bidimensional formada por triângulos mostrando os elementos e dois volumes de controle centrados em 1 e em 3.	32
Figura 7 - Malha não estruturada com detalhes de a) volume de controle centrado em 1 e b) elemento 132 com os sub-volumes de controle.	33
Figura 8 - Malha grosseira.	36
Figura 9 - Corte transversal mostrando os dois canais do reator. Parte externa com malha estruturada (<i>Downcomer</i>) e interna com malha não estruturada (<i>riser</i>).	37
Figura 10 - Malha utilizada por Šimčík <i>et al.</i> (2011)	37
Figura 11 - Cortes transversais mostrando a estrutura da malha grosseira.	40
Figura 12 - Detalhes da geometria da malha intermediária.	40
Figura 13 - Detalhes da malha refinada em cortes transversais.	41
Figura 14 - Corte longitudinal mostrando detalhes da malha refinada na região superior do reator.	41
Figura 15 – Detalhes da malha grosseira utilizada na simulação com o modelo turbulento $k - \omega$ SST. a) com 1 m de altura, b) no topo do reator e c) detalhe próximo à parede.	42

Figura 16 - Detalhes da malha intermediária utilizada na simulação com o modelo turbulento $k - \omega$ SST. a) com 1 m de altura, b) no topo do reator e c) detalhe próximo à parede.	42
Figura 17 - Detalhes da malha refinada utilizada na simulação com o modelo turbulento $k - \omega$ SST. a) com 1 m de altura, b) no topo do reator e c) detalhe próximo à parede.....	43
Figura 17 - Resultados obtidos experimentalmente e numericamente para a velocidade do líquido no <i>riser</i>	46
Figura 18 - Resultados obtidos experimentalmente e numericamente para a velocidade do líquido no <i>downcomer</i>	46
Figura 19 - Resultados obtidos experimental e numericamente para a fração volumétrica de gases no <i>riser</i>	47
Figura 20 - Resultados obtidos experimental e numericamente para a fração volumétrica de gases no <i>downcomer</i>	47
Figura 21 - Perfil de retenção de gás em: a) trabalho atual e b) obtido por Šimčík <i>et al.</i> (2011).....	49
Figura 22 – a) Vetores velocidade do líquido b) Distribuição da pressão no interior do <i>airlift</i> . Resultados da simulação com 0,025 m/s de velocidade do ar.....	49
Figura 24 - Valores encontrados para a velocidade do líquido no <i>riser</i> no estudo do refino de malha sem a influência da força de dispersão turbulenta.....	51
Figura 25 - Valores da velocidade do líquido no <i>downcomer</i> no estudo do refino de malha sem a influência da força de dispersão turbulenta	51
Figura 26 - Valores de retenção de gás no <i>riser</i> encontrados no estudo de refino de malha sem a influência da força de dispersão turbulenta	52
Figura 27 - Resultados para a velocidade do líquido no <i>riser</i> levando em consideração a força de dispersão turbulenta	52
Figura 28 - Velocidade do líquido no <i>downcomer</i> quando levado em conta a força de dispersão turbulenta	53
Figura 29 - Retenção de gás no <i>riser</i>	53
Figura 30 – Vetores para a velocidade do líquido obtidos com os modelos turbulentos: a) $k - \omega$ SST, b) $k - \epsilon$	55
Figura 31 – Curvas de nível para a energia cinética turbulenta encontradas nas simulações utilizando os modelos turbulentos: a) $k - \omega$ SST, b) $k - \epsilon$	55
Figura 32 - Geometria do reator com 1 suporte para biofilme.	56

Figura 33 – Representação vetorial da velocidade do líquido no <i>airlift</i>	57
Figura 34 – a) Perfil de velocidade do líquido, b) Perfil de velocidade do líquido limitado a 0,1 m/s.	57
Figura 35 – Energia cinética turbulenta. a) Reator com biofilme b) Reator sem biofilme	58
Figura 36 – Fração volumétrica de ar.	59
Figura 37 – Geometria do reator com 2 suportes de biofilme, caso 2.	60
Figura 38 – Perfil de: a) fração volumétrica de ar e b) velocidade do líquido.	61
Figura 39 – Representação vetorial da velocidade do líquido	61
Figura 40 - Geometria do reator com 3 suportes de biofilme, caso 3.	62
Figura 41 – Perfil de: a) velocidade da água no <i>airlift</i> . b) fração volumétrica de ar. ..	63
Figura 42 – Representação vetorial do perfil de velocidade da água no reator.	64
Figura 43 - Elemento hexaédrico.	70
Figura 44 - Elemento tetraédrico.	71
Figura 45 - Elemento prismático triangular	72
Figura 46 - Elemento piramidal	73

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores para y^+ nos modelos de turbulência baseados na viscosidade turbulenta presentes no código Ansys CFX 17.2	26
Tabela 2 – Dimensões do <i>airlift</i>	29
Tabela 3 – Características numéricas do problema utilizadas nas simulações com o modelo turbulento $k - \epsilon$ padrão.	38
Tabela 4 – Características numéricas do problema para as simulações utilizando o modelo turbulento $k - \omega$ SST.	38
Tabela 5 – Valores médios para o critério <i>Quality</i> nas malhas utilizadas com o modelo $k - \epsilon$ padrão.	39
Tabela 6 – Valores médios para o critério <i>Quality</i> nas malhas utilizadas com o modelo $k - \omega$ SST.....	39
Tabela 7 – Resultados obtidos nas simulações utilizando o modelo turbulento $k - \epsilon$ padrão	43
Tabela 8 – Resultados obtidos nas simulações utilizando o modelo turbulento $k - \omega$ SST	44
Tabela 9 – Valores encontrados para o número de Reynolds nas simulações numéricas.	50
Tabela 10 – Valores encontrados no canal de ascensão para os três casos simulados e experimentais do caso de 2011.....	65
Tabela 11 – Velocidade da água nos canais do <i>downcomer</i> (m/s).	65

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BSL	-	Modelo turbulento <i>Baseline</i>
CAD	-	<i>Computer Aided Design</i>
CFD	-	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DHT	-	di-hidro-testosterona
DNS	-	<i>Direct Numeric Simulation</i>
LES	-	<i>Large Eddy Simulation</i>
MVF	-	Método dos Volumes Finitos
MVFbEF	-	Método dos Volumes Finitos baseado em Elementos Finitos
RANS	-	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
Re	-	Número adimensional de Reynolds
RMS	-	<i>Root Mean Square</i>
SST	-	<i>Shear-Stress Transport</i>
STR	-	<i>Stired Tank Reactor</i>
UDS	-	<i>Upwind Difference Scheme</i>
VC / V	-	Volume de Controle

LISTA DE SÍMBOLOS

A	-	Área da projeção do corpo na direção do fluxo	$[m^2]$
A	-	Concentração de substrato fermentativo	$[kg\ m^{-3}]$
$A_{\alpha\beta}$	-	Área interfacial de transferência por unidade de volume	$[m^{-1}]$
A_d	-	Área do <i>downcomer</i>	$[m^2]$
A_r	-	Área do <i>riser</i>	$[m^2]$
C	-	Concentração de microrganismos	$[kg\ m^{-3}]$
C^*	-	Concentração de equilíbrio do gás no líquido	$[kg\ m^{-3}]$
C_D	-	Coefficiente de arrasto	$[-]$
C_L	-	Concentração de gás no líquido	$[kg\ m^{-3}]$
$c_{\alpha\beta}^{(d)}$	-	Coefficiente interfásico de arraste	$[kg\ s^{-1}\ m^{-3}]$
D	-	Força de arrasto	$[N]$
D	-	Diâmetro do tubo	$[m]$
D_e	-	Diâmetro externo da seção de escoamento	$[m]$
D_h	-	Diâmetro hidráulico ou equivalente	$[m]$
D_i	-	Diâmetro interno da seção de escoamento	$[m]$
d_β	-	Diâmetro das partículas da fase dispersa	$[m]$
E	-	Concentração de enzimas	$[kg\ m^{-3}]$
g	-	Aceleração da gravidade	$[m\ s^{-2}]$
J_{O_2}	-	Taxa de difusão de O_2	$[kg\ s^{-1}\ m^{-1}]$
k	-	Energia cinética turbulenta	$[m^2\ s^{-2}]$
k_l	-	Coefficiente de transferência de massa	$[m^2\ s^{-1}]$
k_{la}	-	Coefficiente global de transferência de massa	$[m\ s^{-1}]$
l_t	-	Escala de comprimento turbulento	$[m]$
$M_{\alpha\beta}$	-	Transferência de <i>momentum</i> entre as fases	$[N\ m^{-3}]$
N_i	-	Função de forma no nó i	$[-]$
n_j	-	Vetor normal a superfície	$[-]$
P	-	Pressão	$[Pa]$
P_k	-	Produção de energia cinética turbulenta	$[Pa]$
P_{tot}	-	Pressão total	$[Pa]$
P_{termo}	-	Pressão termodinâmica	$[Pa]$

R	-	Concentração de produto de reação	$[\text{kg m}^{-3}]$
S_{U_i}	-	Termo fonte da equação de Navier-Stokes	$[\text{N}]$
r	-	Fração volumétrica	$[-]$
t	-	Tempo	$[\text{s}]$
u^+	-	Grupo adimensional de escala de velocidade	$[-]$
u_t	-	Escala de velocidade turbulenta	$[\text{m s}^{-1}]$
U_t	-	Velocidade tangente à parede	$[\text{m s}^{-1}]$
u_τ	-	Velocidade de atrito	$[\text{m s}^{-1}]$
V	-	Volume	$[\text{m}^3]$
\mathbf{v}	-	Vetor velocidade	$[\text{m s}^{-1}]$
v_i	-	Velocidade na direção i	$[\text{m s}^{-1}]$
v_j	-	Velocidade na direção j	$[\text{m s}^{-1}]$
$\mathbf{v}'\mathbf{v}'$	-	Tensor de Reynolds	$[\text{m}^2 \text{s}^{-2}]$
y	-	Distância do primeiro nó a parede	$[\text{m}]$
y^+	-	Grupo adimensional de escala de comprimento	$[-]$

Letras Gregas

α_L	-	Área de interface	$[\text{m}^2]$
δ_{ij}	-	Delta de Kronecker	$[-]$
ε	-	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta	$[\text{m}^2 \text{s}^{-3}]$
θ	-	Coefficiente para modelo turbulento	$[-]$
μ	-	Viscosidade dinâmica	$[\text{Pa s}]$
μ_t	-	Viscosidade dinâmica turbulenta	$[\text{Pa s}]$
μ_{eff}	-	Viscosidade efetiva	$[\text{Pa s}]$
ν	-	Viscosidade cinemática	$[\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$
ν_t	-	Viscosidade cinemática turbulenta	$[\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$
ρ	-	Massa específica	$[\text{kg m}^{-3}]$
σ_t	-	Número de Schimidt turbulento	$[-]$
τ	-	Forças viscosas	$[\text{Pa s}]$
τ_w	-	Tensão cisalhante na parede	$[\text{Pa}]$
ϕ/φ	-	Propriedade qualquer	$[-]$
$\bar{\phi}$	-	Média da propriedade qualquer	$[-]$
ϕ'	-	Flutuação da propriedade qualquer	$[-]$

ω - Frequência turbulenta [Hz]

Subscritos

i_p - Ponto de integração

i, j - Notação direcional

α, β - Indicação de fases

t - Turbulento

Sobrescrito

D - Força de arrasto

DT - Força de dispersão turbulenta

L - *Lift force*

LUB - Força de lubrificação das paredes

MV - Força de massa virtual

T - Matriz transposta

SUMÁRIO

RESUMO	I
ABSTRACT	II
LISTA DE FIGURAS	III
LISTA DE TABELAS	VI
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	VII
LISTA DE SÍMBOLOS	VIII
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO.....	1
1.2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	7
1.3 JUSTIFICATIVA	13
1.4 OBJETIVOS	14
1.4.1 Objetivo geral.....	14
1.4.2 Objetivos específicos	14
1.5 ORGANIZAÇÃO DO MANUSCRITO	14
2 MODELAGEM MATEMÁTICA	15
2.1 INTRODUÇÃO	15
2.2 EQUAÇÕES GOVERNANTES.....	15
2.2.1 Equação da Conservação da Massa	15
2.2.2 Equação da Conservação da Quantidade de Movimento.....	16
2.2.3 Escoamento Multifásico.....	17
2.2.4 Transferência Interfásica de Quantidade de Movimento	19
2.2.5 Turbulência	21
2.3 DOMÍNIO COMPUTACIONAL E CONDIÇÕES DE CONTORNO	28
2.3.1 Reator de seção transversal circular.....	28
3 METODOLOGIA NUMÉRICA	29
3.1 <i>HIGH RESOLUTION</i>	35
4 RESULTADOS	35
4.1 VALIDAÇÃO NUMÉRICA	35
4.1.1 Introdução	35
4.1.2 Estudo de Malhas.....	36
4.1.3 Parâmetros de Funcionamento de <i>Airlifts</i>	44
4.2 TURBULÊNCIA.....	53
4.3 ESTUDO DA INFLUÊNCIA DOS SUPORTES PARA BIOFILMES	56

4.3.1	Reator com um suporte para biofilme – caso 1.....	56
4.3.2	Reator com dois suportes para biofilme – caso 2	60
4.3.3	Reator com três suportes para biofilme – caso 3	62
4.3.4	Comparação dos resultados.....	64
5	CONCLUSÕES	66
	REFERÊNCIAS.....	67
	APÊNDICE A – FUNÇÕES DE FORMA.....	70
	ELEMENTO HEXAÉDRICO.....	70
	ELEMENTO TETRAÉDRICO	71
	ELEMENTO PRISMÁTICO TRIANGULAR.....	72
	ELEMENTO PIRAMIDAL.....	73

1 INTRODUÇÃO

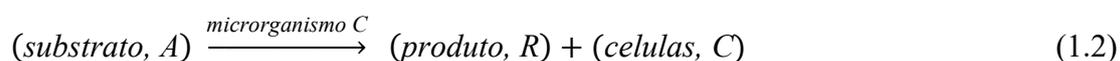
1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO

Na indústria química, o projeto e a operação dos vasos onde as reações ocorrem, conhecidos como reatores, são alguns dos mais importantes objetivos. Para que possam ser alcançados de forma satisfatória são necessários conhecimentos sobre a cinética e os mecanismos das reações. A seleção do sistema onde a reação irá ocorrer de forma mais eficiente e segura determina a viabilidade ou não de uma planta (LEVENSPIEL, 1999).

Ainda na indústria química, muitos produtos podem ser obtidos com auxílio de organismos vivos ou com seus metabolitos. Os processos onde ocorrem tais fenômenos são denominados de processos fermentativos. Segundo Levenspiel (1999) fermentação é definida como a transformação de um substrato em um produto pela ação de um processo biológico, fisiológico ou pela atuação de um ser vivo.

Segundo Levenspiel (1999), as fermentações podem ser divididas em dois grandes grupos: aqueles promovidos ou catalisados por microrganismos como leveduras, bactérias, fungos, algas entre outros; e aqueles promovidos por metabolitos de microrganismos ou também denominado processos fermentativos enzimáticos.

A principal distinção entre os dois tipos de fermentação é que onde há a ação de enzimas como catalisador não há crescimento enzimático, agindo como um reagente químico comum. Já nas fermentações microbianas, o microrganismo se reproduz e o agente catalítico está contido no interior da célula. As reações destes processos podem ser representadas pelas Eqs. (1.1) e (1.2) respectivamente (LEVENSPIEL, 1999).



Segundo Schimidell *et al.* (2001), não há consenso, mas alguns autores usam a denominação reatores bioquímicos quando se referem ao primeiro caso e reatores biológicos para aqueles que operam com células vivas. Dentre as células possíveis, as mais utilizadas e estudadas são as compostas por microrganismos em geral, cujo o emprego vem desde os anos 1940, por exemplo, aplicados na produção industrial de

uma diversidade de produtos de interesse econômico tais como enzimas, antibióticos, vitaminas, ácidos orgânicos, solventes ou ainda no tratamento de resíduos industriais ou domésticos.

A denominação microrganismo é muito abrangente e do ponto de vista da engenharia dependendo da espécie destes microrganismos, os reatores podem ter características bem diversas, principalmente no que se refere aos fenômenos de transporte que ocorrem no seu interior. Assim, por exemplo, reatores que operam com organismos unicelulares como bactérias ou leveduras possuem, em geral, um comportamento reológico bastante distinto daqueles que empregam fungos filamentosos (SCHMIDELL; LIMA; BORZANI, 2001).

Outra característica importante da fermentação é a concentração celular no meio de reação. Em casos onde haja necessidade de uma taxa de conversão elevada, a concentração celular pode atingir níveis que requeiram condições especiais de operação como agitação e aeração intensas (SCHMIDELL; LIMA; BORZANI, 2001).

Segundo Schmidell *et al.* (2001), a classificação dos biorreatores pode ser variada, no entanto os autores propuseram uma classificação mista apresentada a seguir, cujas as ilustrações estão representadas na Fig. 1.

(I) Reatores em fase aquosa (Fermentação submersa)

(I.1) Células/Enzimas livres

- Reatores agitados mecanicamente (STR: *stirred tank reactor*)
- Reatores agitados pneumaticamente
 - Coluna de bolhas (*bubble column*)
 - Reatores *air-lift*
- Reatores de fluxo pistonado (*plug-flow*)

(I.2) Células/Enzimas imobilizadas em suportes

- Reatores com leito fixo
- Reatores com leito fluidizado
- Outras concepções

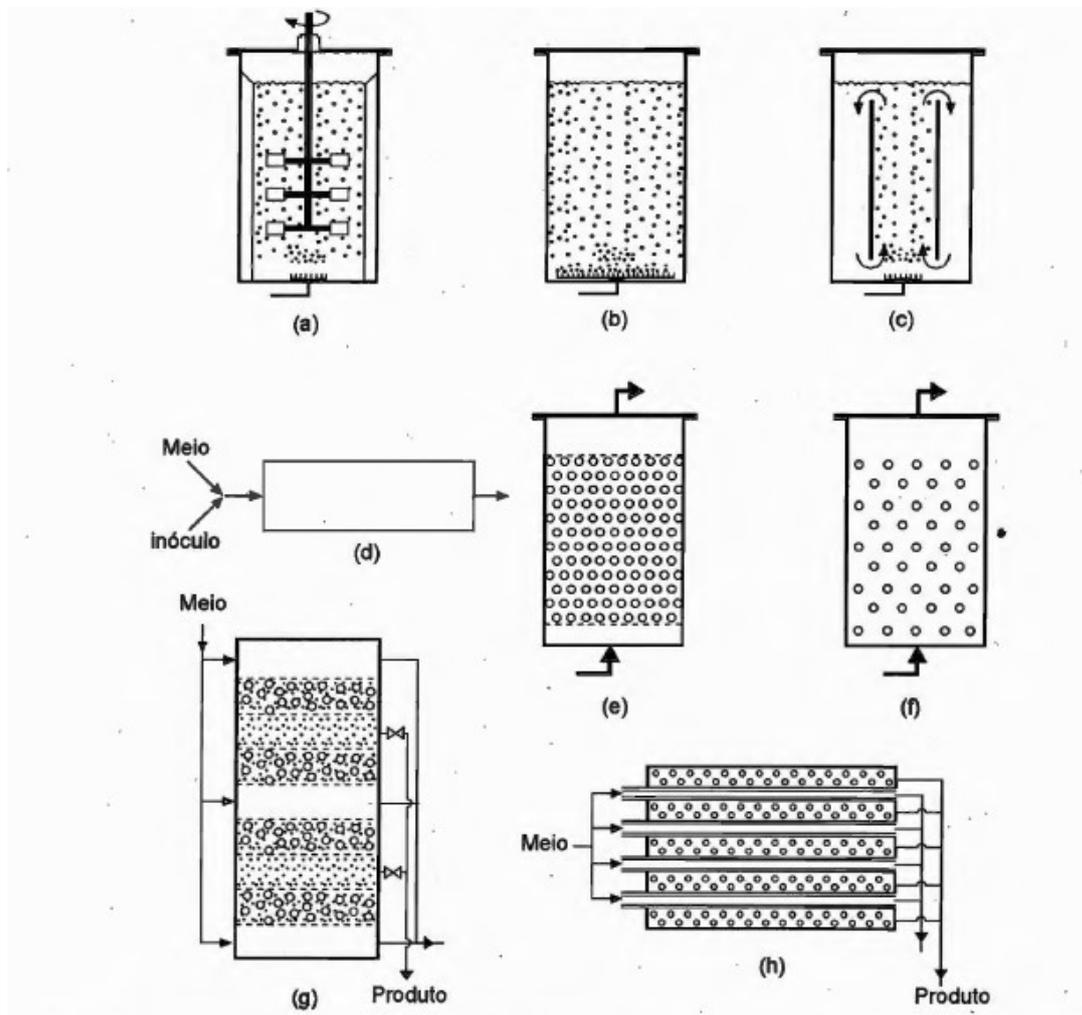
(I.3) Células/Enzimas confinadas entre membranas

- Reatores com membranas planas
- Reatores de fibra oca (*hollow-fiber*)

(II) Reatores em fase não-aquosa (Fermentação semissólida)

- Reatores estáticos (com bandejas)
- Reatores com agitação (tambor rotativo)
- Reatores com leito fixo
- Reatores com leito fluidizado gás-sólido

Figura 1 - Tipos de biorreatores (a) STR; (b) coluna de bolhas; (c) *air-lift*; (d) *plug-flow*; (e) com células imobilizadas (leito fixo); (f) células imobilizadas (leito fluidizado); (g) com membranas planas; (h) *hollow fiber*.



Fonte (SCHMIDELL; LIMA; BORZANI, 2001).

Como é possível observar a partir desta classificação, há uma grande variedade de configurações possíveis, no entanto, os mais utilizados são os reatores com agitação mecânica (STR), segundo Schmidell *et al.* (2001) cerca de 90% dos reatores utilizados industrialmente são STR.

Os modelos STR datam da década de 1940, quando sob os efeitos da segunda guerra mundial, foram adaptados desde a indústria química para o uso na primeira fermentação comercial moderna, para a produção do antibiótico penicilina.

Mesmo sendo o mais comum biorreator industrial para fermentações aeróbicas, o STR aerado não é a melhor opção para o cultivo microbiano. Existem sérios problemas relacionados. O primeiro é que o rendimento da distribuição dos gases em STR ocorre pelo tipo de agitador e as características do fluido. O segundo problema observado é que o grau de agitação necessário para se alcançar uma transferência de oxigênio satisfatória é na maioria das vezes suficiente para ocasionar danos aos microrganismos principalmente quando passam na região dos agitadores, devido às forças cisalhantes. Além disso, a energia mecânica adicionada para a agitação e a transferência de massa será alta, resultando numa baixa eficiência econômica, e ainda será dissipada na forma de calor que deverá ser retirado pelo sistema de controle de temperatura (SCHMIDELL; LIMA; BORZANI, 2001).

Outro ponto que deve ser considerado é a contaminação com espécies indesejadas, os STRs devem ter sistemas complexos de vedação nos eixos dos agitadores que impeçam a entrada de tais microrganismos. O desenvolvimento destes mecanismos acaba onerando os valores dos equipamentos e muitas vezes tornando-os menos robustos que outros modelos de biorreatores. E finalmente outro aspecto a ser considerado, em fermentações em meios com alta viscosidade e características de fluidos não newtonianos, a zona de aeração fica limitada a região dos agitadores enquanto o restante do reator permanece estagnado (CHISTI, 1989).

Tendo em mente tais dificuldades na utilização dos STRs, outros modelos de biorreatores passaram a ser estudados e reatores com agitação pneumática se mostraram promissores.

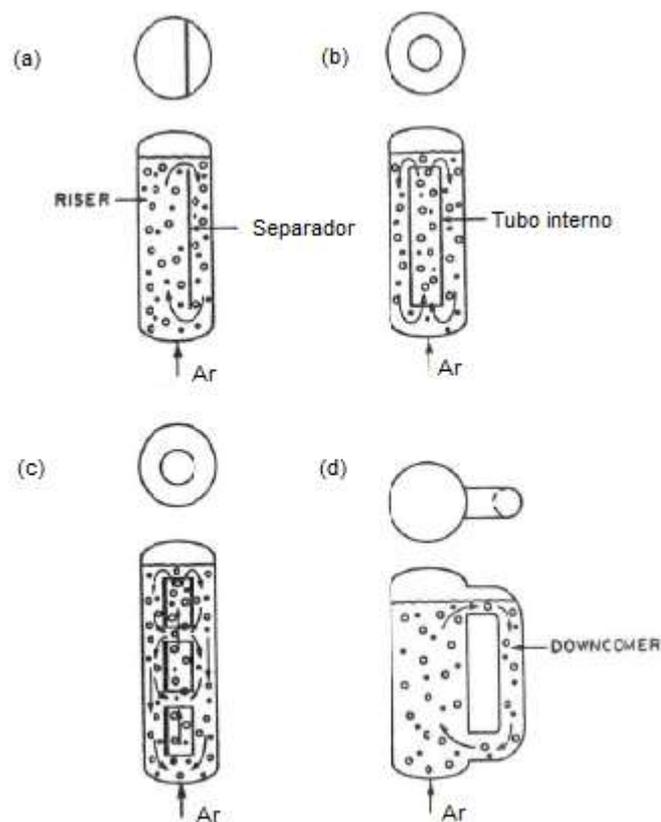
Os reatores agitados pneumaticamente se caracterizam pela ausência do agitador mecânico, e conseqüentemente todo o aparato responsável por sua movimentação. A agitação do líquido se dá pela injeção de um gás na parte inferior do reator. Em decorrência da falta do agitador mecânico, as tensões de cisalhamento são menores, quando comparado com os STRs e a energia mecânica não é dissipada na forma de calor tornando-os mais eficientes e econômicos, além de mais baratos (CHISTI, 1989).

Os reatores agitados pneumaticamente podem ser do tipo coluna de bolhas ou *airlifts*. A diferença entre eles é a presença de uma separação entre o canal que o gás é

injetado, onde o movimento da fase contínua é ascendente e o canal onde não há gás e apresenta um movimento descendente, ver Figs. 1b e 1c.

Ainda, do ponto de vista morfológico os *airlifts* podem ser classificados em dois grandes grupos: com circulação interna *internal-loop* – vide Fig. 2a a 2c que podem ser considerados como uma coluna de bolhas, olhe Fig. 1b com uma divisória entre o *riser* e o *downcomer*, e os com circulação externa *external-loop* ou *outer-loop*, onde o *riser* e o *downcomer* são dois tubos distintos ligados por tubos horizontais perto do topo e da base do reator, olhe Fig. 2d (CHISTI, 1989; MERCHUK; SIEGEL, 1988).

Figura 2 - Tipos de *airlifts* com (a) tubo dividido; (b) tubo interno concêntrico; (c) tubo interno concêntrico subdividido e (d) circulação externa.



Fonte: (CHISTI, 1989) adaptado.

Nos *airlifts* com tubo central, tanto a parte interna quanto a externa podem conter o dispersor de gás, portanto, a denominação depende de onde tal aparato está localizado. Os reatores com *external-loop* apresentam variações menores na geometria, no entanto podem apresentar projetos diferenciados na ligação superior entre o *riser* e o *downcomer*, e dependendo da configuração da região de separação dos gases estas

ligações podem apresentar resultados com significantes diferenças no funcionamento do reator.

Tanto os reatores com circulação interna ou externa apresentam seções transversais circulares, normalmente. No entanto houveram estudos em reatores com seções transversais retangulares ou quadradas devido aos interesses práticos nas indústrias (CHISTI, 1989; MUDDE; VAN DEN AKKER, 2001).

Em resumo, as opções de geometria para os biorreatores são inúmeras, no entanto, todas buscam um melhor rendimento para o equipamento. Os *airlifts* apresentam vantagens como: (i) menor força de cisalhamento, (ii) melhor mistura e (iii) escoamento mais previsível quando comparado com STRs ou colunas de bolha (CHISTI, 1989; MERCHUK; SIEGEL, 1988; SCHMIDELL; LIMA; BORZANI, 2001).

O estudo dos reatores tem relação direta com a análise do escoamento dos fluidos no seu interior. De forma generalizada, existem três abordagens para resolver problemas de dinâmica de fluidos: analítico, numérico e experimental. A abordagem analítica é utilizada em casos simples, com regimes laminares e condições iniciais e de contorno específicas, fornecendo a solução exata para as hipóteses utilizadas. Em problemas complexos a probabilidade de existir a solução analítica é diminuta. Abordagens numéricas fornecem a solução aproximada das equações de conservação, isto é, equações discretizadas.

As soluções numéricas podem ser obtidas através de diversos métodos numéricos (FERZIGER; PERIC, 2002), entre eles, os clássicos são diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos.

Na aplicação de métodos numéricos, as soluções apresentam erros de diferentes tipos (MÁRTINS; MARCHI, 2008), enquanto ao utilizar a abordagem experimental a precisão da solução obtida experimentalmente depende da incerteza de medição dos instrumentos utilizados (VERSTEEG; MALASKEKERA, 2007).

De uma maneira geral, uma combinação apropriada de métodos numéricos e experimentais é sempre desejável, ou seja, tais abordagens são complementares. Frequentemente soluções numéricas preliminares podem ser utilizadas para projetar um aparato experimental ou um equipamento, reduzindo assim o número de experimentos e fornecendo informações complementares.

No entanto, os primeiros estudos na área de *airlifts* foram conduzidos exclusivamente de forma empírica devido à falta de ferramentas e equipamentos para

os cálculos necessários. Com o avanço na capacidade computacional as simulações numéricas ganharam expressividade e vários trabalhos foram publicados com o intuito de validá-las, como será apresentado a seguir.

1.2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Os primeiros estudos sobre a eficiência dos *airlifts* datam da década de 1980, e estavam focados na necessidade de promover uma transferência de massa eficiente entre os fluidos. As aplicações destes equipamentos, na maioria dos casos, estavam focadas em fermentações ou em tratamento de esgoto onde existe a necessidade de oxigenação eficiente do meio (BELLO; ROBINSON; MOO - YOUNG, 1985; CHISTI, 1989; MERCHUK *et al.*, 1994; SIEGEL; MERCHUK, 1988).

Em 1980 Hsu e Dudukovic estudaram a influência da transição das bolhas em bolsões com dimensões na ordem do diâmetro do tubo central dos *airlifts*. Eles, ainda, encontraram correlações empíricas para prever a fração volumétrica de ar na mistura no *riser* do *airlift* e perda de carga no reator relacionando-as com a velocidade de recirculação do líquido no equipamento (HSU; DUDUKOVIĆ, 1980).

Segundo Chisti (1989) o modelo de transferência de massa, é um processo controlado somente pelo filme líquido, entre as duas fases presentes nos *airlifts* baseado em dois filmes estagnados e que obedecem a lei de Fick para difusão,

$$J_{O_2} = k_L(C^* - C_L) \quad (1.3)$$

onde J_{O_2} é a taxa de difusão do oxigênio, k_L é o coeficiente de transferência de massa baseado no filme líquido, C^* é a concentração de equilíbrio do gás no líquido e C_L é a concentração do gás no líquido.

Ele ainda relacionou a taxa de transferência e o fluxo de massa como,

$$a_L J_{O_2} = \frac{dC_L}{dt} \quad (1.4)$$

Para o caso específico do oxigênio a relação pode ser escrita como:

$$\frac{dC_L}{dt} = k_L a_L (C^* - C_L) \quad (1.5)$$

onde a_L é a área de interface por unidade de volume e C^* conforme citado anteriormente, é a concentração de saturação do gás no líquido.

Desta forma, para a otimização dos biorreatores, o produto $k_L a_L$ deveria ser o fator a ser maximizado pelas mudanças na geometria e pelo modo de operação dos equipamentos. Naquela época, as pesquisas eram experimentais e as correlações encontradas eram empíricas.

Siegel (1988) detectou a formação de bolsões de ar nas ligações horizontais dos reatores com *external-loop*, isto reduzia a área de circulação do fluido fazendo com que a velocidade do líquido flutuasse de acordo com a variação do tamanho destas bolhas na região de conexão. A ocorrência deste fenômeno reduzia de acordo com a redução da razão entre a área transversal do *downcomer/riser*, devido ao aumento da velocidade do líquido no tubo horizontal e no *downcomer*, inibindo desta forma a formação ou retenção de bolhas na primeira seção.

Siegel (1988) relatou, ainda, que vários autores conduziram experimentos em reatores relativamente baixos e com diâmetros pequenos. Quanto mais alto o reator, maior é o coeficiente de troca gasosa, devido ao maior tempo de residência do gás no equipamento.

Com relação aos pequenos diâmetros, observou-se o fenômeno de coalescência intenso devido ao maior número de coalisões entre as bolhas em regimes com altas velocidades superficiais do gás, o que acarreta uma menor área superficial de troca mássica e conseqüentemente um menor coeficiente $k_L a_L$.

Bello (1985) estudou quatro configurações de *airlift* com *external-loop* e três de tubos concêntricos para verificar as frações volumétricas de gás presente no *riser* e *downcomer* e o coeficiente volumétrico de transferência de massa global. Naquele estudo ele variou a razão entre as áreas das seções transversais do *downcomer* e *riser* (A_d/A_r). Com aquelas variações o que se verificou foram variações nas velocidades dos líquidos. Ele constatou que para uma determinada vazão volumétrica de gás, quanto maior a velocidade do líquido no *riser* menor a fração volumétrica de gás naquela região, isto devido ao menor tempo de residência das bolhas na coluna.

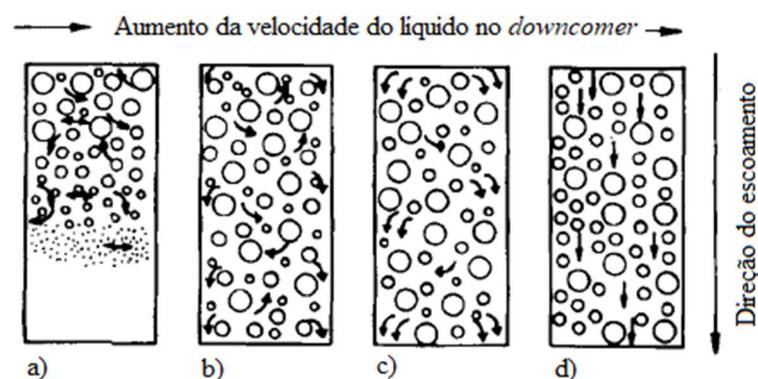
A movimentação dos fluidos no interior dos reatores era relacionada com a velocidade superficial do gás definida como a vazão volumétrica de injeção dividida pela área da seção transversal do *riser*, no entanto, uma nova abordagem foi proposta e denominada de velocidade superficial verdadeira. Tal definição consistia da antiga

definição mais a quantidade de gás que era recirculada pelo *downcomer*. A abordagem anterior poderia acarretar dados imprecisos da relação entre a velocidade superficial e a fração volumétrica de gás no reator(SIEGEL; MERCHUK; SCHUGERL, 1986).

Naquele mesmo estudo foram identificados os regimes possíveis para a circulação do gás no *downcomer*, os quais são ilustrados na Fig. 3. Os regimes são relacionados com o tempo de residência da mistura na região do separador de gás. Este tempo era determinado pelo tamanho e pela forma desta região. Quanto menor o tempo de residência, maior a taxa de recirculação de gás no *downcomer*.

De uma maneira geral foram identificados dois padrões principais no comportamento das bolhas quando no *downcomer*. Um com as bolhas apresentando um movimento retilíneo com velocidades elevadas, onde não eram notadas oscilações na sua trajetória descendente, vide Fig. 3d. E um outro movimento oscilante, desenvolvido principalmente em velocidades medianas do líquido e com baixo tempo de residência no separador, vide Figs. 3a a 3c.

Figura 3 - Regimes de circulação de bolhas no *downcomer*. a) estratificado com velocidade superficial do gás médias, b) bolhas avançando para a base do reator, c) bolhas presentes em todo o canal do *downcomer* com movimentos oscilatórios, d) regime de recirculação totalmente desenvolvido movimento retilíneo das bolhas.



Fonte: (SIEGEL; MERCHUK; SCHUGERL, 1986)

Em baixas vazões volumétricas e consequentemente velocidades baixas, tanto de gás como de líquido havia a separação completa do gás. Conforme a vazão era aumentada era possível observar a penetração de bolhas no *downcomer*, assim uma frente de bolhas começava a se formar. As bolhas maiores que 4 mm eram totalmente

separadas, as bolhas com tamanhos médios, entre 4 mm e 2 mm ficavam estagnadas na região superior do *downcomer* e as menores eram carregadas para baixo com o fluxo do líquido, vide Fig. 3a. Nestas condições os cálculos mostravam uma velocidade relativa baixa entre o líquido e o gás, e uma fração volumétrica de gás elevada no *downcomer*.

As bolhas moviam-se no sentido do líquido no *downcomer*, de acordo com o aumento da vazão no injetor, até que a oscilação das bolhas cessasse e se tornasse um regime retilíneo. Estudos posteriores classificaram a presença das bolhas na região do *downcomer* em, (i) regime 1 onde o *downcomer* estaria livre de bolhas, (ii) regime 2 ou de transição onde existem bolhas estagnadas no *downcomer* e (iii) regime 3 onde ocorre a real recirculação das bolhas do *downcomer* para o *riser* (HEIJNEN et al., 1997; VAN BENTHUM, 1999; VAN BENTHUM et al., 1999).

Siegel (1986) estudou ainda a influência da altura do aspersor dentro do *riser* e concluiu que quanto mais alta a localização do aspersor menor a fração volumétrica de gás no *riser* sem haver mudanças nos regimes no *downcomer*.

Siegel e Merchuk (1988) estudaram a geometria dos reatores e o número e a localização dos aspersores de gás foram relacionados com o coeficiente global de transferência de massa. Os autores observaram que um aspersor secundário próximo ao início do *downcomer* aumentava a recirculação das bolhas e mais do que isso, influenciava positivamente os valores do coeficiente global de transferência de massa (k_{la}), visto que as novas bolhas introduzidas apresentavam uma concentração de oxigênio mais elevada do que as que vinham da base do reator e já haviam liberado o oxigênio para o líquido e retirado o gás carbônico da solução.

Outro resultado obtido daquele trabalho diz respeito ao separador de gás no topo da geometria. Segundo eles, quanto mais eficiente a separação, menor a recirculação dos gases no *downcomer*. Consequentemente a velocidade do líquido aumenta, devido ao aumento na diferença da massa específica entre os dois canais. Assim o separador exerce influência na retenção de gases no *downcomer* e na velocidade do líquido. Como a retenção de gases no *riser* depende da velocidade do líquido, é então possível perceber a influência do separador de gases também nesta região.

A efetividade do desacoplamento do gás está relacionada com a geometria do separador e com a altura do nível do líquido acima do tubo central. A chance de uma bolha sair na superfície superior do reator irá depender da velocidade de ascensão, que está relacionada com o tamanho da bolha e com a velocidade do fluido, e a trajetória e

a velocidade do fluido passando do *riser* para o *downcomer* (MERCHUK; SIEGEL, 1988).

Heijnen *et al.* (1990) utilizou um *airlift* com modificações na estrutura para analisar processos aeróbicos e anaeróbicos realizados em um único biorreator para o tratamento de águas poluídas. Aquela proposta, no lugar de lagos de tratamento, utilizava microrganismos imobilizados em partículas de transporte que se movimentavam com o fluxo do fluido no reator (HEIJNEN *et al.*, 1990).

Os microrganismos imobilizados podem ser definidos como biofilmes que são o aglomerado de microrganismos aderidos entre si e/ou a superfícies. Ainda, segundo esta definição os microrganismos podem formar agregados, flóculos ou estar contido nos espaços de um material poroso (COSTERTON *et al.*, 1995).

Heijnen *et al.* (1990), verificou a influência de uma fase sólida na hidrodinâmica dos *airlifts*. Com o aumento de mais uma fase, a fase sólida, ocorreu um decréscimo na retenção de gases no reator e conseqüentemente uma redução no coeficiente global de transferência de massa (CHIRVASE; CARAMIHAI; MUNTEAN, 1998; HEIJNEN *et al.*, 1997; VAN BENTHUM, 1999; VAN BENTHUM *et al.*, 1999)

Com o avanço de hardwares e softwares, a utilização de simulações computacionais para resolver problemas envolvendo Dinâmica dos Fluidos tornou-se gradativamente parte do cotidiano das universidades, algumas indústrias e órgãos de pesquisa. Na literatura estas simulações são conhecidas como *Computational Fluid Dynamics* (CFD), e a sua aplicabilidade se expandiu tanto na área industrial quanto na área acadêmica.

As simulações computacionais começaram a ser feitas com o intuito de validar os resultados obtidos com base em dados experimentais encontrados na literatura ou ainda em experimentos conduzidos juntamente com as simulações.

Algumas vantagens da utilização de CFD são (VERSTEEG; MALASKEKERA, 2007):

- Substancial redução nos custos e no tempo de desenvolvimento de novos projetos;
- A habilidade de conduzir estudos onde os experimentos seriam difíceis ou impossíveis de serem conduzidos, como exemplo, grandes sistemas como a dinâmica dos gases em plataformas de petróleo;

- A capacidade de conduzir estudos apenas numéricos em ambientes com condições experimentais perigosas ou insalubres;
- Nível praticamente ilimitado de detalhes nos resultados.

Vários estudos foram conduzidos com para analisar a influência dos modelos matemáticos e numéricos nos resultados da dinâmica global dos *airlifts*. Os parâmetros analisados geralmente relacionam os valores de entrada do gás com os perfis de velocidade e retenção dos gases nas seções de interesse, o *riser* e o *downcomer* (BLAŽEJ *et al.*, 2004; MUDDE; VAN DEN AKKER, 2001; OEY *et al.*, 2001). Alguns dos estudos numéricos obtidos na literatura são citados na sequência.

Šimčík *et al.* (2011) estudaram a capacidade dos modelos utilizados em CFD de predizerem as características globais do escoamento em três configurações de tubo central em *airlifts*. Eles compararam os resultados numéricos aos dados experimentais obtidos paralelamente e observaram concordância nos valores dos perfis de velocidade do líquido, entretanto, para os valores de retenção gás os resultados numéricos foram inferiores aos experimentais.

Ebrahimifakhar *et al.* (2011) verificaram a influência da distância entre o tubo central e a parede externa do reator, isto é a área do *downcomer*, executando simulações bidimensionais com malhas não estruturadas. Eles concluíram que conforme a distância aumenta entre as paredes do tubo central e a parede externa, a retenção dos gases no tubo central diminui, no entanto, a velocidade e o nível de mistura gás-líquido aumenta de acordo com Bello *et al.* (1985).

Estudos numéricos sobre a forma, distribuição, coalescência e ruptura ou divisão das bolhas foram conduzidos por Arunkumar e Muthukumar, (2010). Aqueles autores estudaram diversas configurações nos padrões das bolhas comparando satisfatoriamente com os resultados experimentais de Blažej *et al.* (2004) e de forma semelhante com o modelo empírico proposto por Chisti (1985) quanto a parâmetros globais dos *airlifts*.

Zafar *et al.* (2013) verificaram a biotransformação do esteroide di-hidro-testosterona (DHT) em um potente inibidor da acetilcolina, que é um importante alvo terapêutico no tratamento do mal de Alzheimer. O DHT foi submetido à uma transformação microbiana e foram obtidos 8 metabolitos conhecidos, sendo que os metabolitos de 2 a 7 tem possível eficiência no tratamento da doença citada

previamente. A biotransformação foi conduzida em uma fermentação com os microrganismos livres, o que pode ocasionar um aumento da viscosidade ou mesmo a mudança de comportamento reológico do substrato. Este fenômeno pode ser contornado com a utilização de biofilmes, onde os microrganismos são imobilizados em suportes sólidos. No entanto, quando partículas sólidas, neste caso, suportes sólidos, são incorporadas à mistura em um reator do tipo *airlift* o fluxo dos fluidos sofre alteração. Ainda, quando os microrganismos são imobilizados sobre uma estrutura fixa, como placas ou paredes finas, não há aumento de viscosidade ou modificações na reologia da mistura. E o sistema todo pode ser tratado como uma mistura de ar e água dentro do equipamento.

Xu *et al.* (2015) estudaram a influência das bolhas, onde propuseram um modelo que contemplava bolhas com forma e tamanhos diferentes. Os resultados numéricos foram comparados com os valores obtidos por Šimčík *et al.* (2011) tanto experimental quanto numéricos. Os resultados para as frações volumétricas de gás no *riser* e *downcomer* foram mais próximos aos experimentais, entretanto, houve uma redução na precisão dos valores dos perfis de velocidades.

1.3 JUSTIFICATIVA

Através da revisão bibliográfica pode-se notar que inúmeros estudos vêm sendo conduzidos com a intenção de descrever adequadamente o escoamento dos fluidos nos *airlifts* para um melhor projeto destes equipamentos com o menor orçamento possível. Ficou evidenciado a relação entre a geometria, a vazão de ar e o deslocamento do líquido com a taxa de transferência de massa no interior de tais reatores. Entretanto muitos estudos ainda são necessários para a compreensão total dos fenômenos envolvidos nesta mistura de fases.

Conforme visto anteriormente, os *airlifts* são indicados em fermentações microbianas devido ao baixo consumo de energia, baixas tensões cisalhantes e a inexistência de partes móveis-sólidas em sua estrutura, o que leva a uma estanqueidade maior quando comparado com os que possuem partes móveis-sólidas. Deste modo este trabalho numérico visa estudar o escoamento interno em *airlifts* (i) verificando a influência de dois modelos de turbulência distintos k- ϵ padrão e k- ω SST na previsão do escoamento e (ii) alterando a geometria através de suportes internos (placas) verificando a influência no padrão do escoamento. Logo, o estudo do comportamento

de fluidos em reatores do tipo *airlift* com placas de biofilme – suportes - tem importância na tecnologia de tratamento de águas residuais e na biotransformação de substâncias conhecidamente nocivas ao ser humano e ao meio ambiente em produtos com valor, tanto econômico como ecológico.

1.4 OBJETIVOS

1.4.1 Objetivo geral

Avaliar numericamente a influência de placas de suporte para biofilme na hidrodinâmica e retenção de gases em reatores agitados pneumaticamente do tipo *airlif* com recirculação interna.

1.4.2 Objetivos específicos

Este estudo tem os seguintes objetivos específicos:

- Determinar o perfil de escoamento dos fluidos no reator com o aumento necessário do *downcomer* para a acomodação das placas de suporte para o biofilme.
- Investigar a influência do número de placas de suporte para biofilme nos perfis de velocidade do fluido.
- Investigar a formação de áreas de estagnação do fluido devido a presença dos suportes.
- Comparar os resultados obtidos com os modelos de turbulência $k - \varepsilon$ padrão e $k - \omega$ SST.

1.5 ORGANIZAÇÃO DO MANUSCRITO

Este trabalho está dividido em cinco capítulos. No capítulo 1 foi apresentada uma breve descrição de reatores *airlift*, bem como uma breve revisão da literatura sobre alguns estudos que envolvem os reatores *airlift* fornecendo resultados tanto experimentais quanto numéricos. O capítulo 2 descreve o modelo matemático utilizado na modelagem dos mecanismos físicos envolvidos no escoamento contidos neste estudo. A metodologia numérica utilizada no software Ansys CFX versão 17.2 será

introduzida no capítulo 3. Em seguida, no capítulo 4, são apresentados os resultados obtidos neste estudo. Inicialmente, são apresentados os resultados obtidos para a validação numérica, onde os valores obtidos para os perfis de velocidade e distribuição da fração volumétrica de ar utilizando os modelos turbulentos $k - \epsilon$ padrão e $k - \omega$ SST são comparados com resultados experimentais e numéricos obtidos por Šimčík et al. (2011).

Na sequência, foram conduzidos estudos de refino de malha para os dois modelos turbulentos citados e os resultados são apresentados nas páginas iniciais do capítulo 4. Com a comparação entre os modelos turbulentos efetuada, foi possível escolher o modelo mais adequado para a obtenção dos perfis de velocidade e retenção gasosa nas 3 novas geometrias capazes de acomodar os suportes de biofilme além de verificar a existência ou não de regiões de estagnação no escoamento da fase contínua no biorreator, os resultados obtidos para estes estudos são exibidos nas seções finais do capítulo 4. No capítulo 5 apresentam-se as conclusões e sugestões para estudos futuros.

2 MODELAGEM MATEMÁTICA

2.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo serão apresentados o conjunto de equações diferenciais parciais utilizadas para a descrição matemática dos fenômenos físicos que modelam o escoamento multifásico em reatores *airlift*. Primeiramente são apresentadas as equações de conservação de massa e quantidade de movimento e as hipóteses simplificativas assumidas para suas formulações. Posteriormente é introduzido o conceito de turbulência, seguido das equações médias de Reynolds e uma descrição do modelo de turbulência $k - \epsilon$ e $k - \omega$ SST. Na última seção serão ilustrados o domínio físico e as condições de contorno dos casos estudados.

2.2 EQUAÇÕES GOVERNANTES

2.2.1 Equação da Conservação da Massa

Definindo-se $\rho(x, t)$ como a massa por unidade de volume de um fluido na posição x no tempo t e de acordo com a lei de conservação da massa, a diferença entre a massa que entra e sai de um volume de controle corresponde à variação de massa no

interior deste mesmo volume de controle. Isto pode ser expresso matematicamente pela seguinte equação:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.1)$$

onde \mathbf{v} é o vetor velocidade.

A Eq. (2.1) é conhecida como a equação da continuidade ou de conservação de massa (ARIS, 1989).

2.2.2 Equação da Conservação da Quantidade de Movimento

Outra equação de conservação é a de Quantidade de Movimento, que para um contínuo é análoga a segunda lei de Newton para um ponto de massa. Assim a taxa da variação da quantidade de movimento linear é igual à resultante das forças que agem sobre o fluido. Esta relação pode ser escrita da seguinte forma.

$$\partial_t(\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \rho \mathbf{g} + (-\nabla P) + (-\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}) \quad (2.2)$$

O termo $\rho \mathbf{v} \mathbf{v}$ escrito em notação de componentes $\rho v_\alpha v_\beta$ indica a quantidade de movimento da direção α transportada para β pela v_β . O primeiro termo do lado direito da Eq. (2.2) é a força de corpo, o segundo termo são as forças normais à superfície do volume de controle representado pela pressão, o terceiro termo representa as forças viscosas do fluido e é definido para fluidos newtonianos como:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T + \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot \mathbf{v}) \quad (2.3)$$

onde o símbolo δ é o delta de Kronecker e é definido em notação de componentes como:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{para } i=j \\ 0 & \text{para } i \neq j \end{cases} \quad (2.4)$$

Os termos do lado esquerdo da Eq. (2.2) representam a aceleração de uma partícula material. O primeiro termo é a aceleração local e o segundo é a aceleração advectiva da partícula.

2.2.3 Escoamento Multifásico

Como este trabalho trata de um escoamento multifásico faz-se necessário algumas explicações sobre este conceito.

Um escoamento multifásico é aquele onde mais do que um fluido está presente. Em geral, os fluidos consistem em diferentes espécies químicas ou ainda diferentes fases termodinâmicas de uma mesma espécie, como exemplo temos: ar-água para o primeiro caso e vapor-água para o segundo.

É importante diferenciar o escoamento multifásico do multicomponente, este último, diz respeito a uma mistura de espécies químicas a nível molecular, não havendo distinção entre elas no escoamento. Desta forma, haverá somente um campo de velocidades e temperatura para ser calculado.

Os fluidos em um escoamento multifásico são considerados uma mistura ao nível macroscópico, no entanto, existem fases diversas e interfaces entre elas onde ocorrem os fenômenos de transporte interfásicos, além das forças que cada uma das fases poderá exercer sobre a outra.

Existem dois modelos principais implementados no Ansys CFX 17.2 para o tratamento de escoamentos multifásicos, eles dizem respeito a forma de observação do volume de controle. Um deles é o modelo Lagrangeano que acompanha o caminho de uma, ou mais, partículas materiais dentro da geometria estudada. O outro, que será o utilizado neste trabalho, é o modelo Euler-Euler onde se observam as mudanças no escoamento em cada volume de controle dentro da geometria utilizando para tal a abordagem estatística probabilística.

A modelagem multifásica emprega o conceito de interpenetração contínua, onde a mistura é considerada em uma escala de tamanho menor que a necessária para a solução. Desta forma, considera-se que ambas as fases estarão contidas em cada volume de controle (VC). Assim uma nova variável é levada em consideração, a fração volumétrica de cada fase no volume de controle, sendo calculada como a razão entre o volume da fase e o volume total do VC definida como:

$$r_{\alpha} = \frac{V_{\alpha}}{V_c} \quad (2.5)$$

O somatório das frações volumétricas é igual ao volume de controle ou:

$$\sum_{\alpha} r_{\alpha} = 1 \quad (2.6)$$

A massa específica total da mistura é dada pelo somatório das massas específicas de cada componente multiplicado por suas respectivas frações volumétricas como:

$$\rho = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} r_{\alpha} \quad (2.7)$$

onde α indica a fase em questão, ρ a massa específica e r a fração volumétrica.

A pressão total no escoamento multifásico é definida como:

$$P_{tot} = P_{termo} + \sum_{\alpha} \frac{1}{2} r_{\alpha} \rho_{\alpha} v_{\alpha}^2 \quad (2.8)$$

onde P_{termo} é a pressão estática ou termodinâmica e v é o vetor velocidade.

A transferência de *momentum*, calor e massa entre as fases é dependente da área de contato entre elas. Esta é caracterizada pela área interfacial por unidade de volume entre as fases α e β , definida como:

$$A_{\alpha\beta} = \frac{r_{\beta}}{d_{\beta}} \quad (2.9)$$

onde d_{β} é o diâmetro médio das partículas esféricas da fase β , e a fração volumétrica da fase é limitada em 0,8 como máximo e 10^{-7} como mínimo.

Partindo das equações de transporte Eq. (2.2) e da continuidade Eq. (2.1) que governam o escoamento de cada fase e que são dependentes do tempo, ainda, denominando cada fase com subscritos gregos e usando as variáveis definidas acima nas Eqs. (2.5) e (2.7) podemos escrever as equações ponderadas para cada fase como:

$$\partial_t(r_{\alpha}\rho_{\alpha}\mathbf{v}_{\alpha}) + \nabla \cdot (r_{\alpha}\rho_{\alpha}\mathbf{v}_{\alpha}\mathbf{v}_{\alpha}) = -r_{\alpha}\nabla P + \nabla \cdot [r_{\alpha}\mu_{\alpha,eff}(\nabla\mathbf{v}_{\alpha} + \nabla\mathbf{v}_{\alpha}^T)] + r_{\alpha}\rho_{\alpha}\mathbf{g} + M_{\alpha\beta} \quad (2.10)$$

$$\partial_t(r_{\alpha}\rho_{\alpha}) + \nabla \cdot (r_{\alpha}\rho_{\alpha}\mathbf{v}_{\alpha}) = 0 \quad (2.11)$$

onde $\mu_{\alpha,eff}$ é a soma da viscosidade do fluido α e a viscosidade turbulenta para o mesmo fluido, esta última é uma propriedade local e é avaliada de forma diferente de acordo com o modelo turbulento adotado.

Desta forma, sem levar em consideração energia e turbulência e considerando a geometria em três dimensões, são resolvidas 9 equações em cada volume de controle para as 9 variáveis desconhecidas: 3 velocidades para cada fase, as frações volumétricas de cada fase e a pressão.

2.2.4 Transferência Interfásica de Quantidade de Movimento

A transferência de *momentum* entre as fases, $M_{\alpha\beta}$, ocorre devido a forças interfaciais agindo na fase α por causa da interação com a fase β . A força total que age na fase α devido a ação de outras fases é definida como:

$$M_{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} M_{\alpha\beta} \quad (2.12)$$

As forças interfaciais entre duas fases são iguais e opostas, então o somatório das forças é nulo:

$$(M_{\alpha\beta} = -M_{\beta\alpha}) \rightarrow \sum_{\alpha} M_{\alpha} = 0 \quad (2.13)$$

O total das forças agindo entre as fases pode ser decorrente de vários fenômenos físicos independentes assim:

$$M_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}^D + M_{\alpha\beta}^L + M_{\alpha\beta}^{LUB} + M_{\alpha\beta}^{MV} + M_{\alpha\beta}^{DT} + M_S \quad (2.14)$$

onde $M_{\alpha\beta}^D$ é a força de arrasto, $M_{\alpha\beta}^L$ é a força de levante (*lift force*), $M_{\alpha\beta}^{LUB}$ representa a força de lubrificação das paredes, $M_{\alpha\beta}^{MV}$ é a força que representa a massa virtual, $M_{\alpha\beta}^{DT}$ é a força de dispersão turbulenta e M_S é a força referente a pressão de fase sólida.

As forças que apresentam maior influência no escoamento são a de arrasto e de dispersão turbulenta. Trabalhos foram publicados levando em conta os efeitos das forças de *lift* e de massa virtual, no entanto os resultados não apresentaram mudanças

significativas em relação a artigos anteriores que contabilizaram somente os efeitos da força de arrasto (BURNS *et al.*, 2004)

Burns *et al.* (2004), consideraram em seu trabalho as forças de arrasto e dispersão turbulenta entre as fases como uma equação somente. Na implementação do código, entretanto, elas são tratadas separadamente com um coeficiente interligando-as. E serão apresentadas a seguir.

A forma geral para a modelagem da força de arrasto entre as fases é dada por:

$$M_{\alpha\beta} = c_{\alpha\beta}^{(d)}(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta) \quad (2.15)$$

Note que $c_{\alpha\alpha} = 0$ e que $c_{\alpha\beta} = c_{\beta\alpha}$. Assim, o somatório de todas transferências interfásicas é zero.

O coeficiente $c_{\alpha\beta}^{(d)}$ pode ser determinado a partir do coeficiente adimensional de arrasto expresso como:

$$C_D = \frac{D}{\frac{1}{2}\rho_\alpha(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta)^2 A} \quad (2.16)$$

onde D é a força de arrasto, $(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta)$ é a velocidade relativa e A é a área da projeção do corpo na direção do fluxo. Ainda, α é considerada a fase contínua e β a fase dispersa.

Levando em consideração a hipótese que a forma e a dimensão das bolhas são definidas e constantes e inferindo a forma circular para a bolha, podemos derivar o coeficiente $c_{\alpha\beta}^{(d)}$ analiticamente e chegar na equação implementada no código da Ansys CFX 17.2:

$$c_{\alpha\beta}^{(d)} = \frac{C_D}{8} A_{\alpha\beta} \rho_\alpha |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| \quad (2.17)$$

A força de dispersão turbulenta resulta em uma dispersão adicional das regiões com altas frações volumétricas de cada fase para as regiões com baixas frações volumétricas devido as flutuações turbulentas. Isto é causado pela combinação dos redemoinhos da turbulência e das forças de arrasto entre as fases. Por exemplo, em um fluxo com duas fases, sendo uma dispersa, as partículas são arrastadas pelos redemoinhos da fase contínua por ação da força de arrasto. Isto resulta no movimento

das partículas de uma região com alta concentração delas para uma região com menor concentração. Portanto, este tipo de força torna-se importante em fluxos onde há turbulência com significativa força de arrasto entre as fases (BURNS *et al.*, 2004).

A equação que descreve o efeito desta força é:

$$M_{\alpha\beta}^{DT} = -M_{\beta\alpha}^{DT} = C_{DT} c_{\alpha\beta}^{(d)} \frac{\nu_{t\alpha}}{\sigma_{t\alpha}} \left(\frac{\nabla r_{\beta}}{r_{\beta}} - \frac{\nabla r_{\alpha}}{r_{\alpha}} \right) \quad (2.18)$$

O coeficiente C_{DT} é uma constante adimensional empírica que varia entre 0 e 1, dependendo da diferença da massa entre as fases. Para sistemas onde a fase dispersa é significativamente mais leve que a fase contínua, como é o caso de bolhas de ar em água, deve ser usado o valor igual a 1, $c_{\alpha\beta}^{(d)}$ é o coeficiente calculado na força de arrasto e que relaciona as duas forças, $\nu_{t\alpha}$ é a viscosidade cinemática turbulenta da fase contínua, $\sigma_{t\alpha}$ é o número de Schmidt turbulento que é ajustado em 0,9 no código Ansys CFX.

2.2.5 Turbulência

Na prática da engenharia, todos os escoamentos, mesmo os mais simples, tornam-se instáveis acima de um certo número de Reynolds. Em baixos valores do número de Reynolds (Re), o escoamento é laminar e em altos Re o escoamento se torna turbulento. Um estado de movimento caótico e randômico se desenvolve onde a velocidade e pressão flutuam aleatoriamente. Vários, senão muitos, dos escoamentos de interesse da engenharia são turbulentos. Assim, o regime turbulento não é de interesse teórico somente.

O número de Reynolds é uma medida relativa entre as forças inerciais associadas aos efeitos convectivos e as forças viscosas de um escoamento. Em experimentos foram observados que valores abaixo de 2300, o fluxo é suave e ocorre ordenadamente em camadas adjacentes; o fluxo com estas características é chamado de regime laminar. O número de Reynolds é definido como:

$$Re = \frac{\rho V D}{\mu} \quad (2.19)$$

onde Re é o número de Reynolds, ρ a massa específica do fluido, V é a velocidade, D é o comprimento característico e μ é a viscosidade. O comprimento característico para o escoamento no *riser* é o diâmetro interno do tubo. A geometria do *downcomer* é semelhante a dois tubos concêntricos, desta forma, faz-se necessário a utilização de um comprimento característico apropriado para o cálculo de Re nesta seção do reator. O diâmetro hidráulico é a razão entre a área da seção transversal e o perímetro em contato com o fluido e no caso de tubos concêntricos é expresso por:

$$D_h = D_e - D_i \quad (2.20)$$

onde D_h é o diâmetro hidráulico, D_e é o diâmetro externo da seção e D_i é o diâmetro interno.

Acima do número de Reynolds crítico os movimentos tornam-se instáveis, a velocidade e outras propriedades se alteram aleatoriamente em uma situação caótica. Este regime é chamado de escoamento turbulento ou regime turbulento.

Partículas que estavam separadas por distâncias relativamente longas são aproximadas pelos movimentos em forma de redemoinhos no regime turbulento. Desta forma, calor, massa e *momentum* são transferidos de uma forma mais efetiva. Isto explica os valores mais altos para os coeficientes difusivos encontrados em escoamentos com tais características. A turbulência e a transição à turbulência a partir de um regime laminar, são assuntos científicos que se colocam entre os mais estudados no último século. Isto mostra a dificuldade e os desafios enfrentados pelos pesquisadores desta área, e ainda, sinaliza que este assunto está bem longe de ser esgotado.

Em princípio, as equações de Navier-Stokes descrevem os dois regimes de escoamento sem a necessidade de informações adicionais. No entanto, escoamentos turbulentos com Re realísticos abrangem uma gama de escalas para o tamanho e tempo muito variáveis, as quais envolvem escalas de comprimento muito menores que o menor volume finito possível em uma malha prática para a discretização de um domínio computacional. A Simulação Numérica Direta (*Direct Numeric Simulation* DNS) destes escoamentos iriam requerer uma capacidade computacional várias vezes maior que as atualmente disponíveis.

Outro método para simplificar a solução dos escoamentos turbulentos consiste na filtragem do campo de velocidade tal que somente os redemoinhos maiores sejam

levados em consideração nos cálculos. As equações apresentam um modelo de influência dos turbilhões menores, mas não são incluídos nos cálculos. Desta forma uma redução no custo computacional foi alcançada. No entanto, ainda se trata de um custo relativamente alto por levar em conta explicitamente as instabilidades tridimensionais grandes. Este modelo é conhecido como *Large Eddy Simulation* (LES).

O método que atualmente é utilizado nos códigos computacionais comerciais para a solução de problemas turbulentos é baseado nas Equações Médias de Reynolds (*Reynolds Averaged Navier-Stokes* - RANS). O efeito da turbulência é sentido nas propriedades médias do escoamento, o custo computacional é modesto para uma precisão razoável nos resultados, estes são os principais motivos que levaram a utilização de modelos desta categoria na solução de problemas em aplicações de engenharia.

Reynolds decompôs as equações de transporte em um valor médio do vetor velocidade e outro relacionado a sua flutuação, sendo conhecidas como RANS. Desta forma a propriedade instantânea ϕ é definida como:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (2.21)$$

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi dt \quad (2.22)$$

Analisando a equação da transferência de quantidade de movimento aplicando a média temporal obtemos a seguinte equação:

$$\partial_t \mathbf{v} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nabla(\boldsymbol{\tau} - \mathbf{v}'\mathbf{v}') \quad (2.23)$$

No segundo termo do lado direito da Eq. (2.21) aparece o termo $-\mathbf{v}'\mathbf{v}'$ que é conhecido como tensões de Reynolds e podem ser modelados com base na hipótese de Boussinesq (1887) que diz que a tensão turbulenta é diretamente proporcional à taxa de deformação do escoamento médio, assim:

$$v'_i v'_j = \nu_t \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.24)$$

A Eq. (2.22) introduz o conceito da viscosidade turbulenta que é uma propriedade local do fluido $v_t = (x, t)$ e onde os modelos de turbulência desta categoria se baseiam. No entanto, a hipótese de Boussinesq é adequada para escoamentos próximos às superfícies sólidas sendo inadequada para o restante dos escoamentos. Kolmogorov (1942) propôs uma forma generalizada para este termo que inclui uma nova variável, k , para representar a energia cinética turbulenta, sendo definida como:

$$v'_i v'_j = v_t \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (2.25)$$

Assim, resta modelar v_t para o fechamento do sistema de equações.

Lauder e Spalding (1974) propuseram a modelagem da viscosidade turbulenta como sendo proporcional ao produto entre uma escala de velocidade turbulenta $u_t(x, t)$ e uma escala de comprimento turbulento $l_t(x, t)$, assim:

$$v_t \sim u_t l_t \quad (2.26)$$

Eles definiram para escoamentos com altos números de Reynolds $u_t \sim k^{1/2}$ e $l_t \sim k^{3/2}/\varepsilon$, resultando na equação da viscosidade turbulenta e dada por:

$$v_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.27)$$

Sendo C_μ uma constante empírica que assume o valor de 0,09 e ε a taxa de dissipação da energia turbulenta.

As equações de transporte para k e ε foram modeladas como:

$$\partial_t k + \nabla \cdot (\mathbf{v}k) = \nabla \cdot \left[\left(\nu + \frac{v_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] - \varepsilon \quad (2.28)$$

$$\partial_t \varepsilon + \nabla \cdot (\mathbf{v}\varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\nu + \frac{v_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} v_t \frac{\varepsilon}{k} (\partial_i v_j + \partial_j v_i) \partial_i v_j - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.29)$$

onde C_μ - vide Eq. (2.25) = 0,09; $C_{1\varepsilon} = 1,44$; $C_{2\varepsilon} = 1,92$; $\sigma_k = 1,0$ e $\sigma_\varepsilon = 1,3$ (LAUNDER; SPALDING, 1974).

Uma singularidade pode aparecer se este modelo for utilizado próximo à superfícies sólidas pois a energia cinética k torna-se nula na parede (YANG; SHIH; SHIHT, 1993). Nos escoamentos ao longo de superfícies sólidas existe uma região longe delas que é dominado exclusivamente pelas forças inerciais e uma fina camada onde os efeitos viscosos são importantes. Próximo às paredes a velocidade média do fluxo depende somente da distância y da parede, da massa específica do fluido, da viscosidade μ e da tensão cisalhante da parede τ_w , desta forma o campo de velocidade próximo às paredes pode e deve ser calculado por uma função diferente das equações do modelo k- ϵ padrão (VERSTEEG; MALASKEKERA, 2007).

Para contornar este problema utiliza-se uma função logarítmica de parede, onde um novo parâmetro adimensional importante para a verificação da qualidade das malhas é introduzido e conhecido como y^+ . A função parede usada por Launder e Spalding (1974) com algumas alterações quando implementadas no código Ansys CFX é apresentada como:

$$u^+ = \frac{U_t}{u_\tau} = \frac{1}{k} \ln(y^+) + C \quad (2.30)$$

onde:

$$y^+ = \frac{\rho \Delta y u_\tau}{\mu} \quad (2.31)$$

$$u_\tau = \left(\frac{\tau_w}{\rho} \right)^{1/2} \quad (2.32)$$

ainda, u^+ é a velocidade próximo à parede, u_τ é a velocidade de fricção, U_t a velocidade tangente e distante Δy da parede, y^+ é a distância adimensional da parede, τ_w é a tensão cisalhante, k é a constante de von Karman e C é a constante relacionada com a rugosidade da parede. Os valores indicados para o y^+ nos diversos modelos de turbulência são apresentados na Tabela 1.

O modelo k- ϵ é muito utilizado e eficiente em escoamentos com o número de Reynolds elevado e afastado das paredes. Outro modelo turbulento de duas equações e também amplamente utilizado é o k- ω introduzido por Wilcox em 1988. Este se baseia em uma frequência turbulenta ao invés de um comprimento turbulento e o seu ponto forte está na eficiência dos cálculos próximo a paredes com Reynolds baixo. Sendo que

a relação entre a viscosidade turbulenta, energia cinética turbulenta e a frequência turbulenta é dada por:

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (2.33)$$

onde ω é a frequência turbulenta. As equações do modelo $k-\omega$ são:

$$\partial_t \rho k + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k1}} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (2.34)$$

$$\partial_t \rho \omega + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \omega) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 1}} \right) \nabla \omega \right] + \alpha_1 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_1 \rho \omega^2 \quad (2.35)$$

com:

$$P_k = \mu_t \nabla \mathbf{v} (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \quad (2.36)$$

Tabela 1 – Valores para y^+ nos modelos de turbulência baseados na viscosidade turbulenta presentes no código Ansys CFX 17.2

Modelo turbulento	y^+
$k - \varepsilon$	$Re > 10^5$ $20 < y^+ < 100$ $N^* = 10$
$k - \omega$	$2000 < Re < 10^5$
BSL Reynolds <i>Stress</i>	$y^+ < 1-2$
$k - \omega$ <i>Shear Stress Transport</i>	$N^* = 15$

Fonte: Ansys (2012)

Menter (1994), propôs um modelo híbrido formado pelo modelo $k-\omega$ próximo às paredes e pelo $k - \varepsilon$ nas demais regiões com alterações para deixá-las em função de ω . Nesta proposição as equações do modelo de Wilcox são multiplicadas por uma função $F1$ e as equações transformadas do modelo $k - \varepsilon$ multiplicadas por $(1 - F1)$ em seguida estas equações são somadas dando origem ao modelo conhecido como *Baseline* (BSL). As equações resultantes são:

$$\partial_t \rho k + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k2}} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \rho \omega + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \omega) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 1}} \right) \nabla \omega \right] + (1 - F1) 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \partial_x k \partial_x \omega + \alpha_2 \frac{\omega}{k} P_k - \\ \beta_2 \rho \omega^2 \end{aligned} \quad (2.38)$$

Os coeficientes deste novo modelo são uma combinação linear dos coeficientes correspondentes dos dois modelos dos quais foi derivado.

$$\theta_3 = F1\theta_1 + (1 - F1)\theta_2 \quad (2.39)$$

A função F1 é igual a 1 junto às superfícies sólidas e seu valor é reduzido até zero em regiões afastadas. Tornando desta forma, o modelo BSL igual ao $k - \omega$ junto à parede e igual ao $k - \epsilon$ em regiões afastadas. Em regiões intermediárias, o modelo assume uma versão híbrida formada pela combinação dos dois modelos de origem. Os coeficientes utilizados no código Ansys CFX são: $\beta' = 0,09$; $\alpha_2 = 0,44$; $\sigma_{\omega 1} = 2$; $\sigma_{\omega 2} = 1,168$; $\beta_2 = 0,0828$ e $\sigma_{k2} = 1$.

Ainda segundo Menter (1994), o modelo BSL não é capaz de prever o correto descolamento da camada limite junto a superfícies lisas. Isto devido ao fato de nenhum dos modelos de origem levar em consideração o transporte das tensões de Reynolds, proporcionando, assim, valores superestimados para a viscosidade turbulenta.

Para contornar este problema o modelo SST adota uma formulação para a viscosidade turbulenta com um limitador que previne que este parâmetro seja superestimado. No modelo SST, a viscosidade turbulenta é definida como:

$$\nu_t = \frac{\alpha_1 k}{\max(\alpha_1 \omega, \Omega F2)} \quad (2.40)$$

sendo $\alpha_1 = 0,556$.

A função F2 possui um papel semelhante ao de F1, mas neste caso F2 serve para restringir o limitador de ν_t à camada limite. Para os escoamentos em geral Ω é o valor absoluto da vorticidade. As funções F1 e F2 têm suas formulações baseadas na distância do ponto à superfície mais próxima e são definidas da seguinte forma:

$$F1 = \tanh \left\{ \left[\min \left(\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \frac{4\rho k}{CD_{k\omega} \sigma_{\omega 3} y^2} \right) \right]^4 \right\} \quad (2.41)$$

onde y é a distância até a parede mais próxima e:

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \partial_x k \partial_x \omega, 10^{-1} \right) \quad (2.42)$$

$$F2 = \tanh \left\{ \left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \right]^2 \right\} \quad (2.43)$$

2.3 DOMÍNIO COMPUTACIONAL E CONDIÇÕES DE CONTORNO

Serão estudados dois biorreatores neste trabalho, o primeiro estudado por Šimčík *et al.* (2011) e posteriormente por Xu *et al.* (2015) com variação no tratamento das bolhas de ar, no entanto, com a mesma geometria. O segundo será uma proposta para a fermentação com biofilmes e a sua influência na dinâmica dos fluidos, com uma geometria distinta. Ambas as geometrias são circulares, no entanto, o segundo caso a região do *downcomer* será aumentada devido ao aumento do diâmetro do tubo externo para que seja possível a alocação dos suportes para o biofilme.

2.3.1 Reator de seção transversal circular

O trabalho conduzido por Šimčík *et al.* (2011) utilizou um reator do tipo *airlift* com circulação interna e três configurações distintas do tubo interno. Para o estudo atual será levado em conta somente um domínio computacional cuja geometria é apresentada na Fig. 4 e suas dimensões na Tabela 2. Os fluidos utilizados foram ar e água, ambos considerados incompressíveis e o sistema isotérmico. Foram utilizadas as propriedades dos fluidos à temperatura de 298,15 K e pressão de 101.325 Pa.

A geometria e o tamanho das bolhas foram considerados constantes, na forma de esfera com 0,005 m. Não foram levadas em consideração os fenômenos de coalescência e ruptura das bolhas. O coeficiente de arrasto C_D foi calculado considerando uma velocidade relativa de 0,23 m/s e o diâmetro de bolha citado resultando em um valor de 1,215 para este coeficiente adimensional.

Foram utilizadas velocidades superficiais de ar entre 0,01 a 0,075 m/s no aspersor. Nas condições iniciais a velocidade do líquido foi ajustada em zero e a do ar

em 0,25 m/s. A superfície superior do líquido foi considerada como fronteira de saída para o gás, o que no Ansys CFX recebe a denominação de *degassing*, nesta condição o líquido é retido e o ar passa livremente. Para as paredes a condição de não deslizamento é utilizada, logo as velocidades são nulas. O passo de tempo adotado foi de 0,005 segundos para todas as simulações.

Os pontos de medição das propriedades foram ajustados de acordo com os utilizados no estudo experimental, sendo 1,175 m acima do aspersor em ambos os canais, *riser* e *downcomer*.

Figura 4 - Geometria do *airlift*.

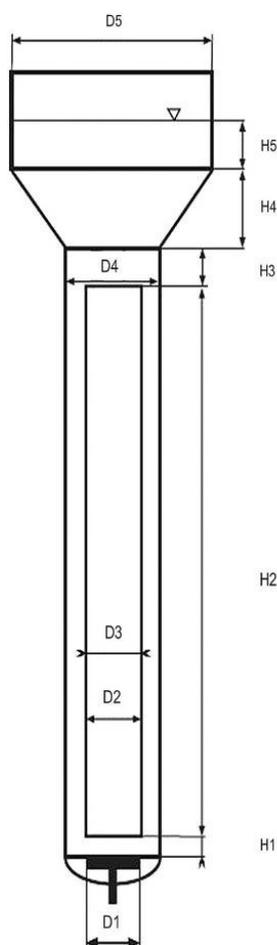


Tabela 2 – Dimensões do *airlift*

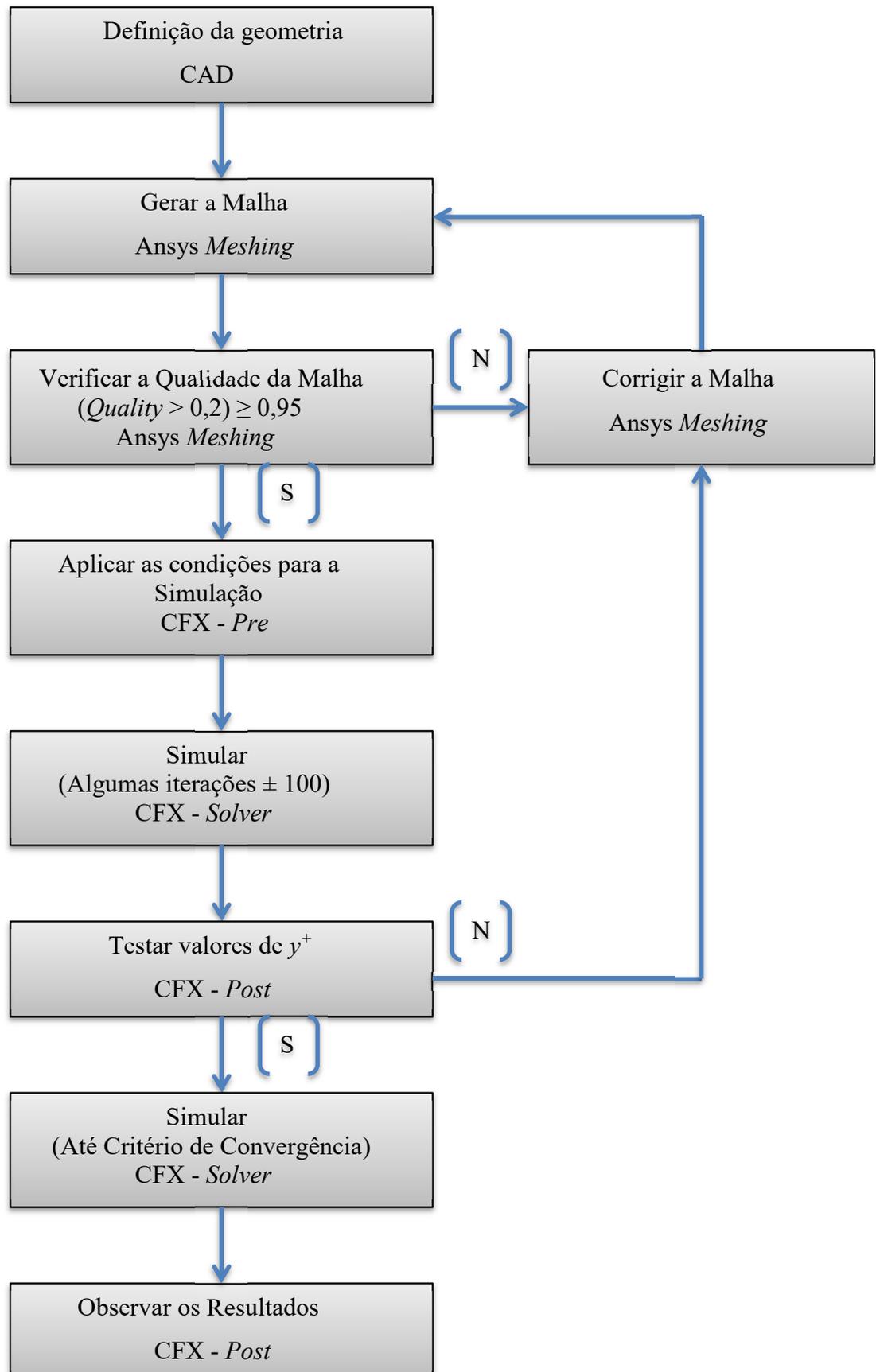
(mm)	
D1	100
D2	62
D3	70
D4	142
D5	420
H1	23
H2	1200
H3	200
H4	170
H5	120

Fonte: (ŠIMČÍK *et al.*, 2011)

3 METODOLOGIA NUMÉRICA

O código utilizado neste trabalho, Ansys CFX, utiliza o Método dos Volumes Finitos baseado em elementos (MVFbEF). Para a utilização deste software são

Figura 5 - Representação das etapas para a utilização do software Ansys CFX.



necessários alguns procedimentos que devem ser efetuados em uma determinada ordem cronológica. A Fig. 5 mostra estas etapas em forma de um fluxograma.

A primeira etapa é a construção da geometria que será estudada, que deve ser um sólido tridimensional, 3D. Esta figura pode ser construída com o *Ansys Design Modeler* ou com outro software CAD (*Computer Aided Design*) e depois deve ser exportada para o Ansys CFX. Neste trabalho a geometria foi criada com o AutoCAD e posteriormente tratada com o *Design Modeler* para a união das regiões do *downcomer* e o restante do reator.

A geometria é discretizada em seguida, ou seja, dividida em pequenos volumes de controle. Esta etapa é conhecida como geração da malha, existem alguns softwares para essa etapa. Foi utilizado para este procedimento o software *Ansys Meshing* que além de gerar a malha, permite também avaliá-la quanto a qualidade de refino. O critério de avaliação adotado para a qualidade de malha foi o *Quality* que avalia a relação entre a base do polígono e a sua altura, sendo que o valor 1 representa um volume de controle perfeito e 0 um volume degenerado.

As condições de contorno bem como a definição dos critérios de convergência são fornecidas no CFX – Pre. Após a inserção das condições de contorno a simulação está pronta para rodar, o que ocorre com a solução do problema de forma iterativa no CFX - *Solver*

Após a convergência, os resultados são examinados no CFX – *Post*. O resultado do parâmetro y^+ , importante para análises em escoamentos turbulentos, é visível nesta etapa do processo, portanto, sendo um critério importante para verificar também a qualidade da malha principalmente nas regiões próxima a parede, porque os modelos de turbulência disponíveis na literatura, tratam a parede de forma diferenciada, e cada um exige um refino específico na região próxima as paredes. Então, é tido como boa prática a solução de algumas iterações para que seja avaliado os valores do parâmetro y^+ em seguida sendo feita a sua análise. Caso os valores atendam às exigências do modelo de turbulência adotado dá-se sequência na solução do escoamento.

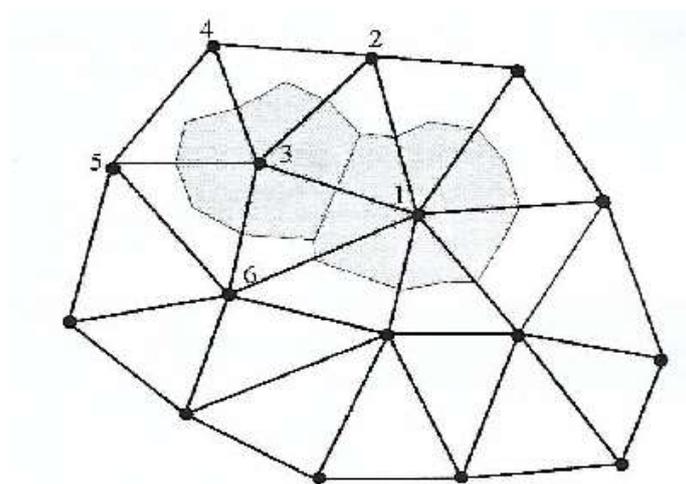
O método numérico utilizado no CFX, MVFbEF, realiza balanços sobre volumes de controle criados a partir de elementos, e o conceito dos elementos provem do método numérico conhecido como Elementos Finitos. Desta forma, a base teórica em questão é a do Método dos Volumes Finitos (MVF) cuja literatura é vasta (PATANKAR, 1980; MALISKA, 2014; VERSTEEG; MALASKEKERA, 2007),

assim faz-se necessário somente uma breve apresentação sobre o assunto que é fundamental porque é a base deste estudo.

O MVF consiste em discretizar o domínio usando uma malha formada por elementos geométricos conhecidos como volumes finitos. Na Fig. 6 podemos observar uma malha bidimensional com geometria triangular dos elementos, ainda podemos definir os elementos 123, 234, 345 e assim por diante. A área sombreada centrada em 1, por exemplo, é o volume de controle onde serão realizados os balanços de conservação para se obter as equações aproximadas, ou seja, o sistema linear de equações para cada variável. Assim, para cada escalar teremos um sistema linear com um número de equações igual ao número de volumes de controle, ou igual ao número de vértices dos elementos.

Todas as propriedades dos fluidos e os resultados das variáveis são armazenados nos vértices dos elementos, ou no centro do volume. O volume é construído pelo método das medianas que consiste na ligação de cada centroide do elemento ao ponto médio de cada face como demonstrado na Fig. 7a, o ponto de integração localiza-se na face entre o centroide e o ponto médio de cada face.

Figura 6 - Malha bidimensional formada por triângulos mostrando os elementos e dois volumes de controle centrados em 1 e em 3.



Fonte: MALISKA (2014).

Após a discretização espacial as equações de conservação de massa e de *momentum*, Eq. (2.1) e Eq. (2.2), são integradas sobre cada volume de controle e o teorema de Gauss é aplicado para converter integrais de volume em integrais de superfície, as integrais de volume correspondem ao termo fonte ou de acúmulo, e as de

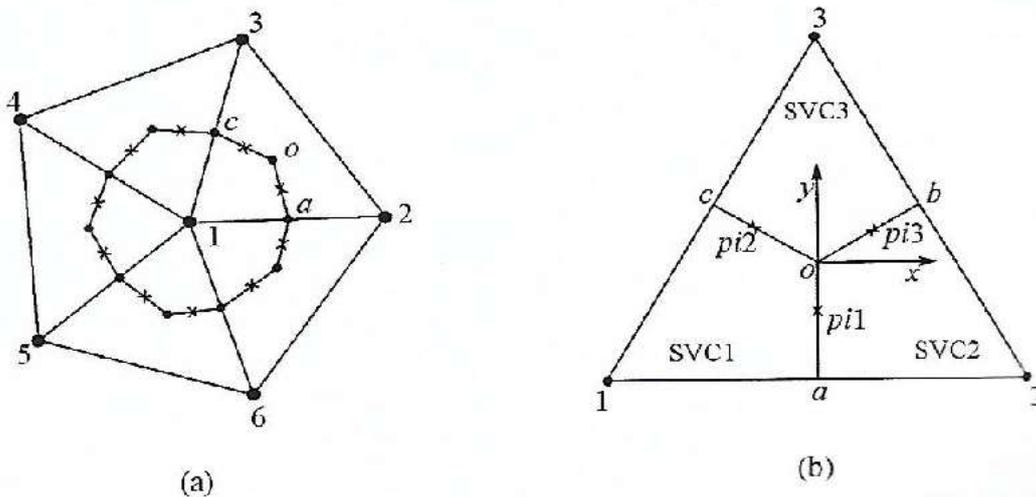
superfície correspondem a soma dos fluxos através das faces dos volumes de controle. Em seguida são discretizadas tendo como resultado as seguintes equações:

$$V \left(\frac{\rho - \rho^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} m_{ip} = 0 \quad (3.1)$$

$$V \left(\frac{\rho U_i - \rho^0 U_i^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} m_{ip} (U_i)_{ip} = \sum_{ip} (P \Delta n_i)_{ip} + \sum_{ip} \left(\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \Delta n_j \right)_{ip} + S_{U_i} V \quad (3.2)$$

onde $m_{ip} = (\rho U_j \Delta n_j)_{ip}$, V é o volume de controle, Δt é o passo de tempo, Δn_j é o vetor apontando para o exterior da superfície do volume de controle, os somatórios são sobre todos os pontos de integração do volume de controle e o sobrescrito 0 refere-se ao passo de tempo anterior. Vale destacar aqui que as equações dos modelos de turbulência são discretizadas de forma análoga ao apresentado previamente para equações da conservação da massa e quantidade de movimento.

Figura 7 - Malha não estruturada com detalhes de a) volume de controle centrado em 1 e b) elemento 132 com os sub-volumes de controle.



Fonte: MALISKA (2014)

Os campos de soluções e outras propriedades são armazenadas nos nós da malha. Contudo, muitos destes termos devem ser avaliados nos pontos de integração. O Ansys CFX utiliza as funções de forma para efetuar estas aproximações. As funções de forma descrevem as varrições de uma variável ϕ em um elemento da seguinte forma:

$$\varphi = \sum_{i=1}^{N_{\text{nós}}} N_i \varphi_i \quad (3.3)$$

onde N_i é a função de forma para o nó i e φ_i é o valor da variável φ no nó i . O somatório é sobre todos os nós do elemento em questão e uma das propriedades chave das funções de forma pode ser representada como:

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{nós}}} N_i = 1 \quad (3.4)$$

onde, no nó j $N_i = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$

As funções de forma utilizadas no Ansys CFX são lineares em termos de coordenadas paramétricas. Elas são usadas para calcular diversas quantidades geométricas tais como o ponto de integração e os vetores normais a superfície do volume de controle. As funções de forma tri-lineares suportadas para os diversos elementos de malha são apresentadas no apêndice A.

Em algumas situações, é necessário o cálculo de termos gradientes nos nós e isto é feito no Ansys CFX utilizando o teorema da divergência de Gauss através da seguinte equação:

$$\nabla \varphi = \frac{1}{V} \sum_{ip} (\varphi \Delta \vec{n})_{ip} \quad (3.5)$$

onde $\Delta \vec{n}$ é o vetor normal a superfície que aponta para fora do volume de controle no ponto de integração. E φ é calculado com auxílio da Eq. (3.3).

Para a interpolação dos termos advectivos do conjunto de equações diferenciais parciais de conservação Eq. (2.1) e Eq. (2.2), existem três formas distintas disponíveis no pacote Ansys CFX, as quais são: *Upwind*, *Blend Factor* e *High Resolution* e que seguem a seguinte equação:

$$\varphi_{ip} = \varphi_{up} + \beta \nabla \varphi \cdot \Delta \vec{r} \quad (3.6)$$

onde φ_{up} é o valor da função no volume a montante e \vec{r} é o vetor do volume a montante em direção ao volume ip . São os valores de β e $\nabla\varphi$ que definirão as diferentes interpolações, no entanto, neste trabalho utilizou-se somente o modelo *High Resolution* descrito a seguir.

3.1 HIGH RESOLUTION

É um esquema que utiliza uma equação especial não linear para o cálculo dos valores de β em cada nó. O fluxo advectivo é então avaliado usando os valores de β e $\nabla\varphi$ oriundos do nó a montante. Esta equação é baseada no princípio de delimitação (*Boundedness Principle*) utilizado por Barth e Jespersen (1989). Esta metodologia envolve, primeiro o cálculo dos limites de φ , máximo e mínimo em cada nó baseado nos nós adjacentes e no próprio nó. Em seguida, para cada ponto de integração ao redor do nó a Eq. (3.6) é resolvida assegurando-se, sempre, que os valores de φ não ultrapassem os limites calculados. O valor nodal de β é o valor mínimo de todos os pontos de integração ao redor do nó em questão e não deve exceder 1.

4 RESULTADOS

4.1 VALIDAÇÃO NUMÉRICA

4.1.1 Introdução

Neste capítulo serão apresentados os resultados da validação numérica do reator estudado por Šimčík *et al.* (2011), seguindo todos os procedimentos e condições de contorno utilizadas por aqueles autores, já citadas na seção 2.3.1 deste documento, bem como a geometria também já detalhada previamente na Figura 4.

Foram conduzidas cinco simulações para cada modelo turbulento, onde foram variadas as velocidades superficiais do gás, que representam vazões volumétricas distintas passando pela área do aspersor. Neste caso, foi considerada como sendo a área total do *riser*, com diâmetro de 62 mm. As velocidades avaliadas são: 0,01; 0,02; 0,025; 0,05 e 0,075 m/s que correspondem as seguintes vazões, aproximadamente: 1,9; 3,6; 4,5; 9,1 e 13,6 l/min do ar.

Foram investigadas as características básicas de funcionamento do reator, isto é, a velocidade do líquido e a retenção de ar, ou fração volumétrica de ar, tanto no *riser*

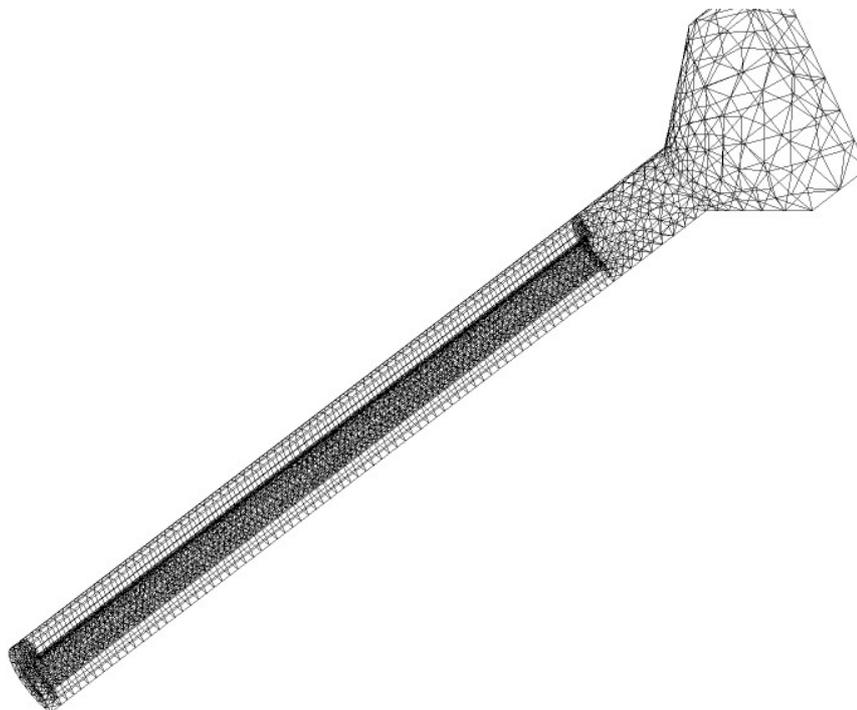
como no *downcomer*. Os resultados numéricos obtidos, tanto para o modelo $k - \epsilon$ padrão quanto para o modelo $k - \omega$ SST, foram comparados com valores experimentais e numéricos de Šimčík *et al.* (2011). Além destes resultados, serão apresentados os resultados sobre o refino de malhas e a sua influência nos valores encontrados.

4.1.2 Estudo de Malhas

A malha gerada inicialmente seguiu um procedimento de refino semelhante ao utilizado por Šimčík *et al.* (2011), a única diferença deste trabalho com aquele foi o plano de simetria adotado neste estudo, que dividiu o reator em dois no plano longitudinal, usando a condição de simetria.

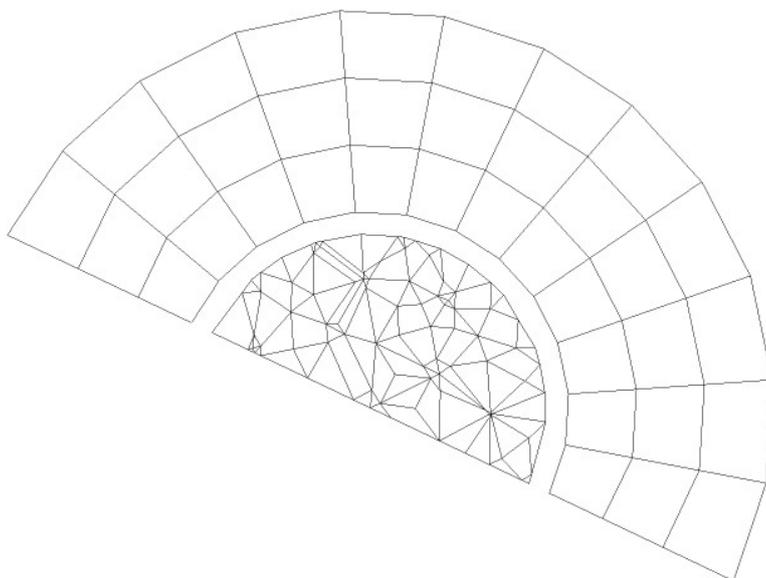
Uma das malhas obtida previamente é apresentada na Fig. 8, cujo corte transversal é ilustrado na Fig. 9, e a malha obtida no trabalho de Šimčík *et al.* (2011) está na Fig. 10. É possível observar na Fig. 10 que a malha utilizada é estruturada contendo elementos hexaédricos e não apresenta refino próximo as paredes, ao passo que na Fig. 9 a malha estruturada localiza-se somente na região do *downcomer* e também não possui refino próximo da região das paredes.

Figura 8 - Malha grosseira.



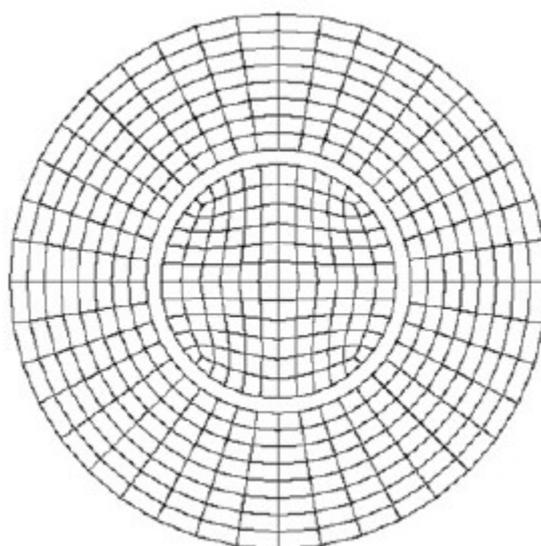
Fonte: O autor (2018).

Figura 9 - Corte transversal mostrando os dois canais do reator. Parte externa com malha estruturada (*Downcomer*) e interna com malha não estruturada (*riser*).



Fonte: O autor (2018).

Figura 10 - Malha utilizada por Šimčík *et al.* (2011)



No estudo do refino de malhas a velocidade superficial do gás foi ajustada em 0,025 m/s e o passo de tempo de 0,005 s, valor suficiente para atingir a convergência

em todos os níveis de refino de malha com exceção da malha refinada para o modelo $k - \omega$ SST onde o passo de tempo foi ajustado em 0,001 s.

No processo de refino das malhas desejava-se obter o dobro de elementos em cada dimensão, portanto, o fator de multiplicação adotado foi de 2^3 para cada etapa de refino. O critério de convergência adotado foi $RMS \leq 10^{-5}$, no entanto, observou-se que após um $RMS \leq 10^{-4}$ não haviam mais variações nos valores das variáveis nos pontos de medição indicando que o regime de escoamento permanente havia sido alcançado. As informações das malhas numéricas obtidas para as simulações com o modelo turbulento $k - \epsilon$ padrão encontram-se na Tabela 3 e as utilizadas no modelo $k - \omega$ SST na Tabela 4.

Tabela 3 – Características numéricas do problema utilizadas nas simulações com o modelo turbulento $k - \epsilon$ padrão.

Malha	Número de elementos	Número de nós	y^+ médio	y^+ máximo	Interpolação
Grosseira	51.379	212.055	85,5	307,7	<i>High Resolution</i>
Intermediária	382.035	661.166	40,15	122,3	<i>High Resolution</i>
Refinada	2.960.753	4.586.582	26,38	91,15	<i>High Resolution</i>

Fonte: O autor (2018)

Tabela 4 – Características numéricas do problema para as simulações utilizando o modelo turbulento $k - \omega$ SST.

Malha	Número de elementos	Número de nós	y^+ médio	y^+ máximo	Interpolação
Grosseira	853.659	324.806	1,35	2,25	<i>High Resolution</i>
Intermediária	1.422.684	2.825.109	0,92	2,6	<i>High Resolution</i>
Refinada	4.798.001	8.793.428	0,11	1,27	<i>High Resolution</i>

Fonte: O autor (2018)

O critério de qualidade de malha *Quality*, encontrado no código Ansys CFX, leva em consideração a relação entre a área da base e a altura do elemento, apresentando uma escala como resultado com variação entre 0 e 1, sendo que 1 é um elemento ótimo e 0 um elemento degenerado. Os valores médios do critério e o desvio padrão para cada

refino são ilustrados na Tabela 5 para o modelo $k - \varepsilon$ padrão e na Tabela 6 para o modelo $k - \omega$ SST.

Tabela 5 – Valores médios para o critério *Quality* nas malhas utilizadas com o modelo $k - \varepsilon$ padrão.

Malha	<i>Quality</i>	S^2
Grosseira	0,825	0,226
Intermediária	0,828	0,110
Refinada	0,850	0,095

Fonte: O autor (2018)

Tabela 6 – Valores médios para o critério *Quality* nas malhas utilizadas com o modelo $k - \omega$ SST.

Malha	<i>Quality</i>	S^2
Grosseira	0,506	0,338
Intermediária	0,472	0,369
Refinada	0,554	0,382

Fonte: O autor (2018)

Com relação ao *Quality*, é possível perceber que quanto maior o grau de refinamento da malha próximo às paredes, menor a qualidade dos elementos. Para o refino da malha, a altura da camada de elementos adjacente a parede é fixada, desta forma a relação avaliada no critério *Quality*, a relação entre a altura e a área da base do elemento, torna-se distorcida e, por conseguinte o valor obtido é menor.

Outro parâmetro que foi utilizado para a determinação da qualidade da malha é o valor do y^+ , definido anteriormente, e cujo valores de referência são apresentados na Tabela 1.

Nas Tabela 3 e 4 foram apresentados os valores médios e máximos encontrados em cada malha para cada modelo turbulento, observou-se que com o aumento do refino nas malhas os valores encontrados reduziram, isto pode ser explicado pela relação direta entre o parâmetro e a distância do primeiro nó da malha e a parede – vide Eq. (2.29).

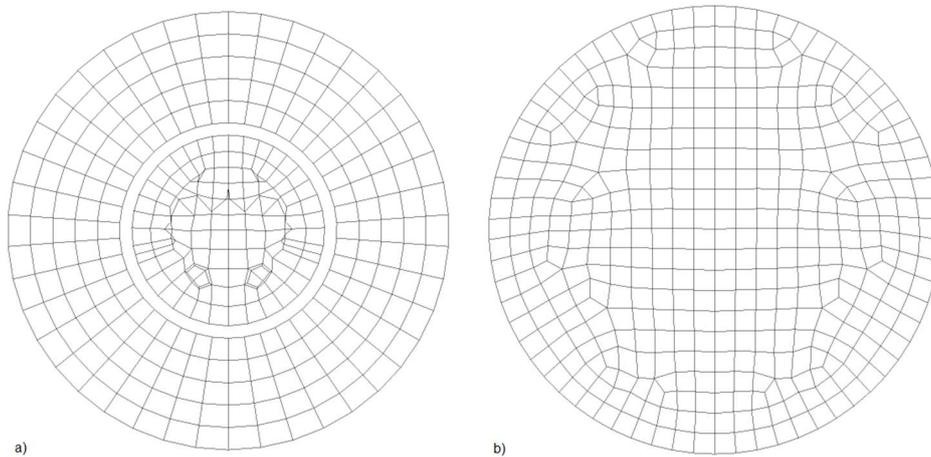
A malha refinada para o modelo $k - \varepsilon$ padrão manteve os valores do y^+ no intervalo de referência, podendo desta forma ser considerada uma malha adequada.

Para o modelo turbulento $k - \omega$ SST os valores médios de y^+ estavam no intervalo indicado desde a malha grosseira, os valores máximos encontrados estavam localizados nos elementos junto a espessura do tubo central da geometria, nesta região não houve possibilidade de refino da malha visto que se trata de uma parede de 4 mm de espessura.

As Figs. 11 a 13 apresentam detalhes das três malhas encontradas para o modelo $k - \epsilon$ padrão, grosseira, intermediária e refinada, respectivamente. A Fig. 14 apresenta um corte transversal da malha refinada do mesmo modelo turbulento, onde é possível observar o refino próximo às paredes.

Figura 11 - Cortes transversais mostrando a estrutura da malha grosseira.

a) Com 1 m de altura e b) no topo da geometria.



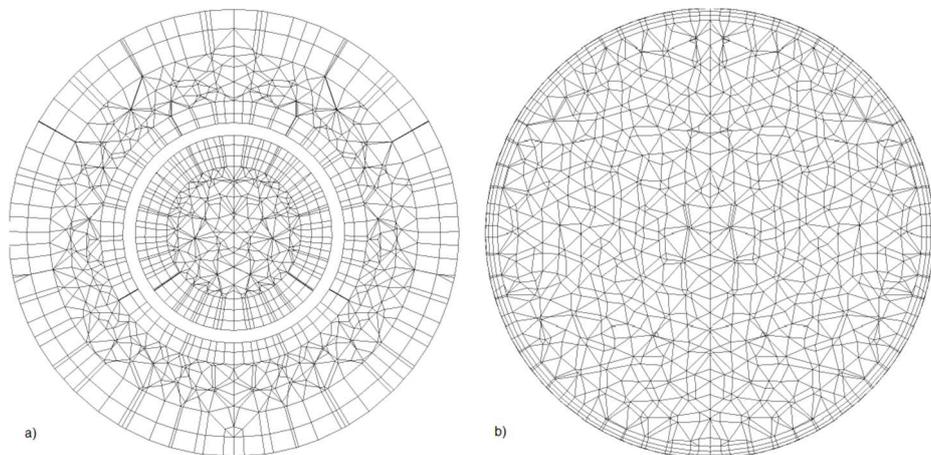
a)

b)

Fonte: O autor (2018).

Figura 12 - Detalhes da geometria da malha intermediária.

a) Corte transversal na altura de 1m e b) vista do topo da geometria.



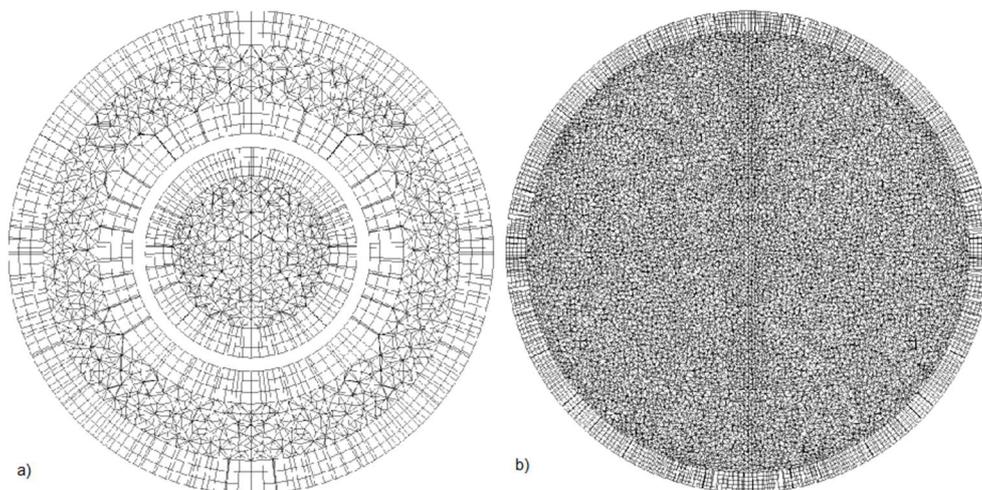
a)

b)

Fonte: O autor (2018).

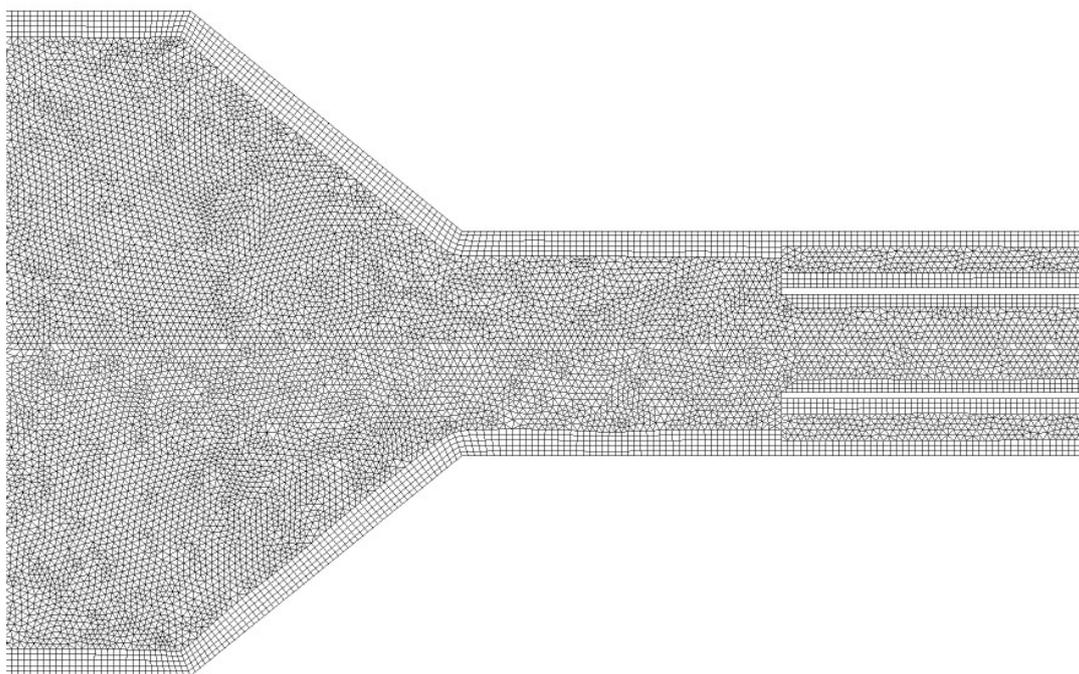
Figura 13 - Detalhes da malha refinada em cortes transversais.

a) com 1 m de altura e b) topo da geometria



Fonte: O autor (2018).

Figura 14 - Corte longitudinal mostrando detalhes da malha refinada na região superior do reator.

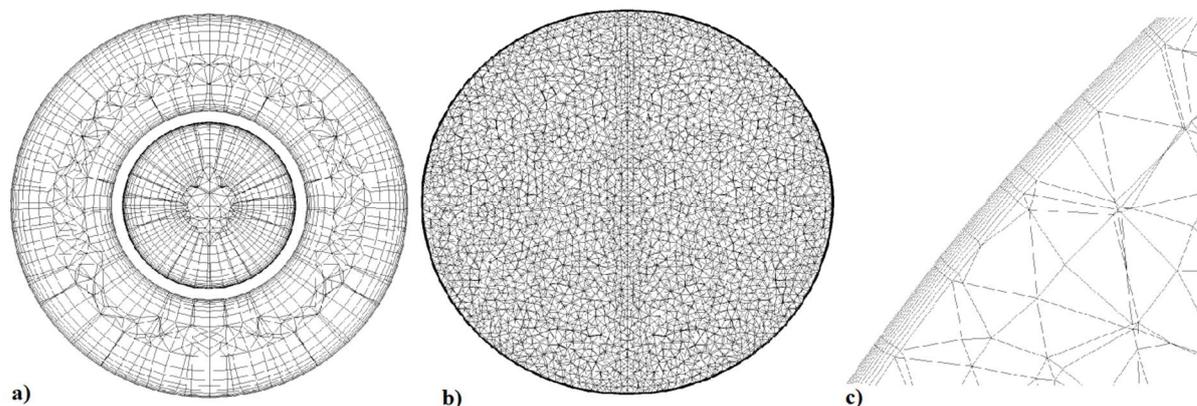


Fonte: O autor (2018).

As Figs 15 a 17 mostram os detalhes das malhas obtidas para as simulações utilizando o modelo turbulento $k - \omega$ SST, para a adequação dos valores do parâmetro

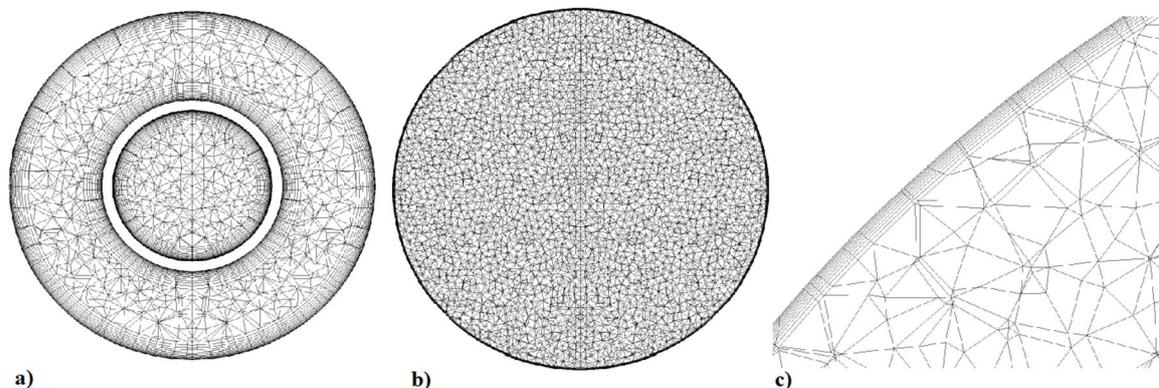
y^+ fez-se necessário a redução da altura da primeira camada de elementos e consequentemente as demais até a parte interna da geometria, com isso, o número de elementos obtidos foi substancialmente maior que os obtidos no modelo $k - \epsilon$ padrão, como apresentado nas Tabelas 3 e 4. Outro ponto a ser considerado é a qualidade dos elementos obtidos na malha, conforme citado anteriormente, a altura dos elementos próximos a parede foi fixado em décimos de milímetro para que o parâmetro y^+ atendesse os valores adequados e com isso o valor obtido para o critério *Quality* reduziu em cerca de 50% quando comparado com os resultados encontrados nas malhas para o modelo $k - \epsilon$ padrão, vide Tabelas 5 e 6.

Figura 15 – Detalhes da malha grosseira utilizada na simulação com o modelo turbulento $k - \omega$ SST. a) com 1 m de altura, b) no topo do reator e c) detalhe próximo à parede.



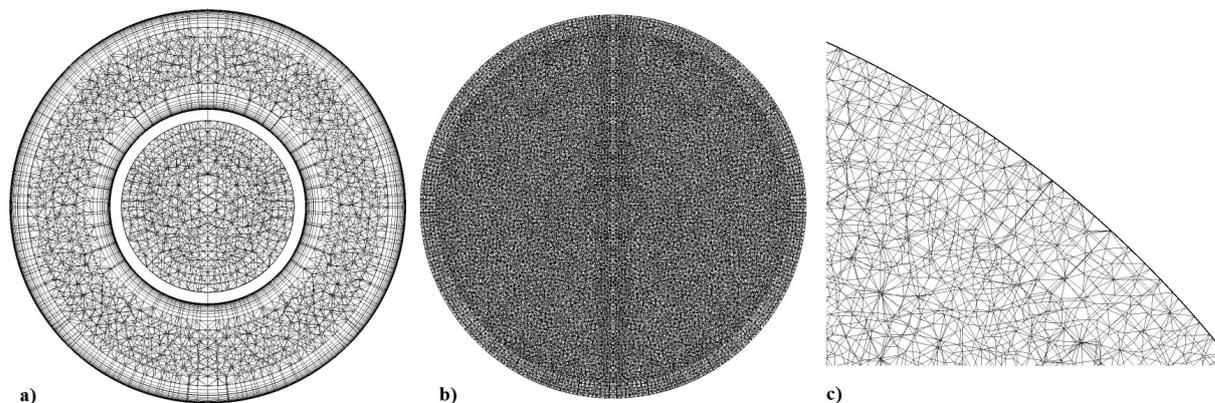
Fonte: O autor (2018).

Figura 16 - Detalhes da malha intermediária utilizada na simulação com o modelo turbulento $k - \omega$ SST. a) com 1 m de altura, b) no topo do reator e c) detalhe próximo à parede.



Fonte: O autor (2018).

Figura 17 - Detalhes da malha refinada utilizada na simulação com o modelo turbulento $k - \omega$ SST. a) com 1 m de altura, b) no topo do reator e c) detalhe próximo à parede.



Fonte: O autor (2018).

Os resultados obtidos com o modelo $k - \epsilon$ padrão são apresentados na Tabela 7 e os do modelo $k - \omega$ SST na Tabela 8. A fração volumétrica de ar no downcomer é nula até no experimento, desta forma foram omitidos das tabelas que expressam os resultados.

Tabela 7 – Resultados obtidos nas simulações utilizando o modelo turbulento $k - \epsilon$ padrão

Malha	Velocidade no <i>riser</i> (m/s)	Velocidade no <i>downcomer</i> (m/s)	Fração volumétrica de ar - riser	Tempo de simulação
Experimental	0,542	0,131	0,040	
Grosseira	0,610	0,134	0,036	3 h 32 min
Intermediária	0,595	0,126	0,043	6 h 51 min
Refinada	0,642	0,132	0,042	5 dias

Fonte: O autor (2018)

Tabela 8 – Resultados obtidos nas simulações utilizando o modelo turbulento

k – ω SST

Malha	Velocidade no <i>riser</i> (m/s)	Velocidade no <i>downcomer</i> (m/s)	Fração volumétrica de ar - <i>riser</i>	Tempo de simulação
Experimental	0,542	0,131	0,040	
Grosseira	0,634	0,133	0,028	6 h 51 min
Intermediária	0,623	0,133	0,028	16 h 16 mi
Refinada	0,680	0,138	0,029	9 dias

Fonte: O autor (2018)

4.1.3 Parâmetros de Funcionamento de *Airlifts*

Os parâmetros, ou variáveis, estudados por Šimčík *et al.* (2011) foram as velocidade do líquido no *riser* e *downcomer* bem como a fração volumétrica de ar nestes canais. Aqueles autores estudaram tanto numérica quanto experimentalmente o reator proposto e compararam os resultados para validar seus resultados numéricos. Utilizando as diretrizes daquele trabalho foram realizadas novas simulações neste estudo e comparados os resultados experimentais e numéricos. Os resultados são apresentados nas Figs. 17 a 20.

Os dados apresentados primeiramente, são resultados de simulações utilizando as malhas mostradas nas Figs. 8 e 9 para o modelo k – ϵ padrão e na Fig. 15 para o modelo k – ω SST. Os pontos de verificação dos resultados foram localizados de acordo com o posicionamento dos sensores utilizados no aparato experimental e capturaram os valores do vértice da malha mais próximo das coordenadas geométricas estipuladas. Os dados mostram concordância entre os valores numéricos usando o modelo k – ϵ padrão e os experimentais, os valores para a velocidade no *riser* foram superestimados com o modelo k – ω SST.

É possível notar que as velocidades do líquido em ambas as seções do reator e a fração volumétrica do ar no *riser* aumentam com o aumento da vazão de ar. Entretanto, quando os valores numéricos são comparados com os dados experimentais aparecem divergências nos resultados para as simulações com as maiores vazões

volumétricas de ar. As discrepâncias foram notadas tanto na velocidade do líquido quanto na retenção dos gases ou fração volumétrica destes. Para a velocidade do líquido as diferenças não são significativas ficando entre 0,7% e 4,4% sendo que os valores aumentam com o aumento da vazão de ar.

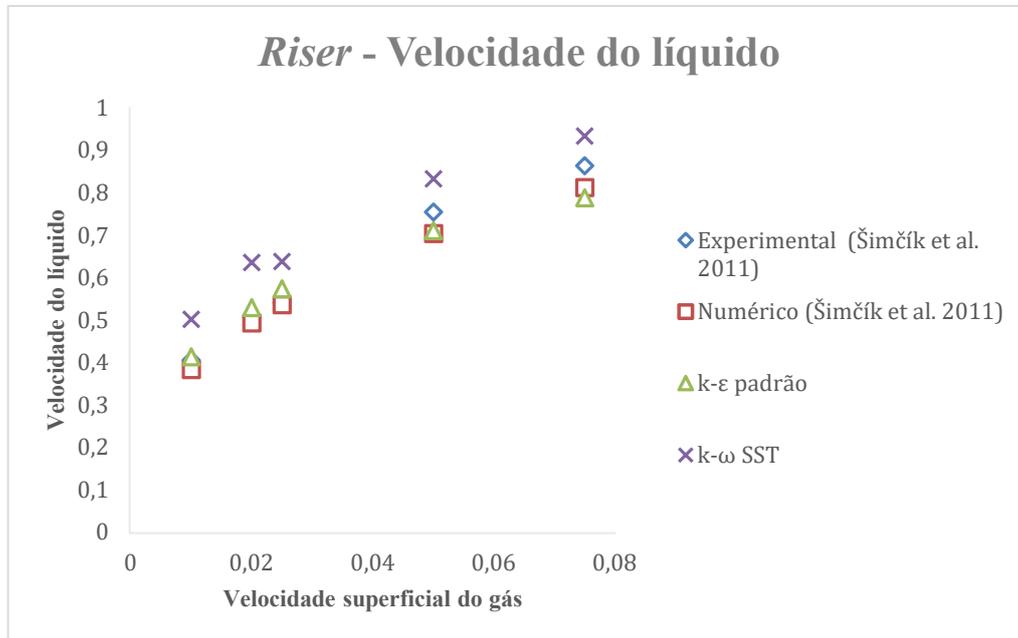
A situação fica crítica para a retenção de gases que chega a ser 30% menor no *riser* na simulação com a maior vazão e no *downcomer* a predição não chega a 1/10 do valor experimental. Com a maior velocidade superficial do ar simulada, o regime das bolhas no reator está na transição do primeiro estágio, onde as bolhas saem totalmente da superfície, e o segundo estágio onde elas começam a ficar estagnadas na entrada do *downcomer*, vide Fig. 3a.

Para Šimčík *et al.* (2011) a razão das discrepâncias na retenção de gases nos dutos do reator tem relação com erros no método experimental para a estimativa dos valores, visto que os valores experimentais foram obtidos por meio da diferença de pressão entre os canais e que a velocidade do líquido interfere no valor medido da pressão.

Estudos posteriores relacionam os valores subestimados para a retenção de gases, tanto local quanto de forma global, com a falta de modelos matemáticos que incorporem a distribuição dos tamanhos de bolhas e seus diferentes formatos. Visto que tanto a forma quanto o tamanho das bolhas não são constantes e variam ao longo do reator.

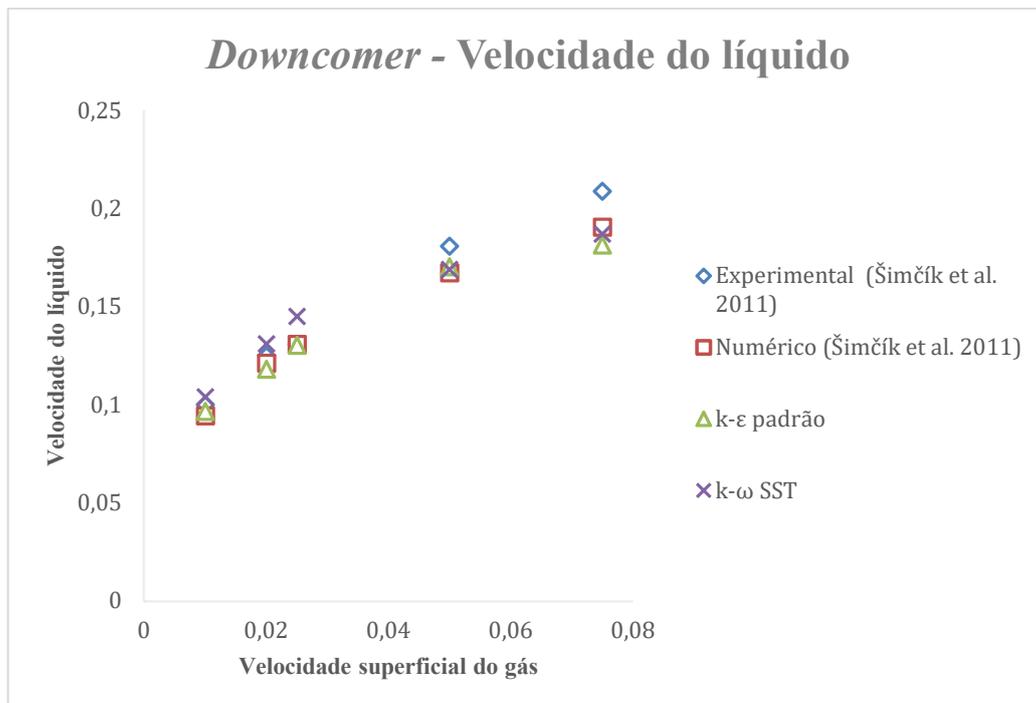
Xu *et al.* (2015) utilizaram naquele trabalho um modelo proposto inicialmente para resolver sistemas em leitos fluidizados e posteriormente adaptado para reatores pneumáticos do tipo coluna de bolhas. Onde duas classes de bolhas são consideradas na formulação das equações de conservação de massa e *momentum*, a saber, classe de bolhas pequenas e grandes. Os resultados na predição da retenção de gases foram consideravelmente melhores que aqueles apresentados por Šimčík *et al.* (2011) no entanto, houve um decréscimo na predição das velocidades do líquido nos canais.

Figura 18 - Resultados obtidos experimentalmente e numericamente para a velocidade do líquido no *riser*



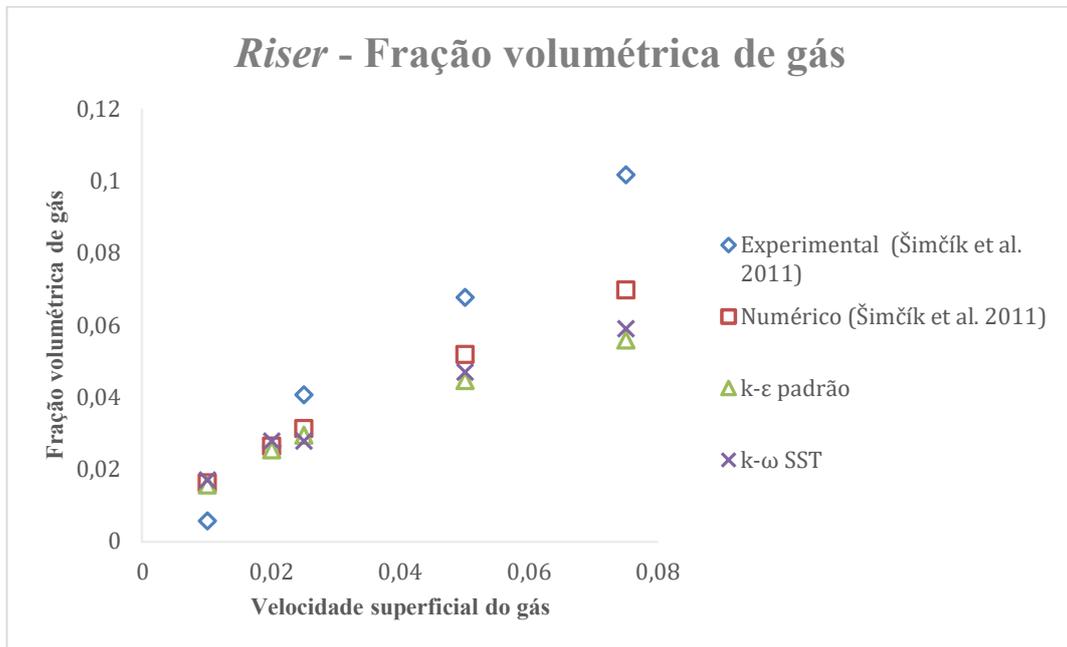
Fonte: O autor (2018).

Figura 19 - Resultados obtidos experimentalmente e numericamente para a velocidade do líquido no *downcomer*



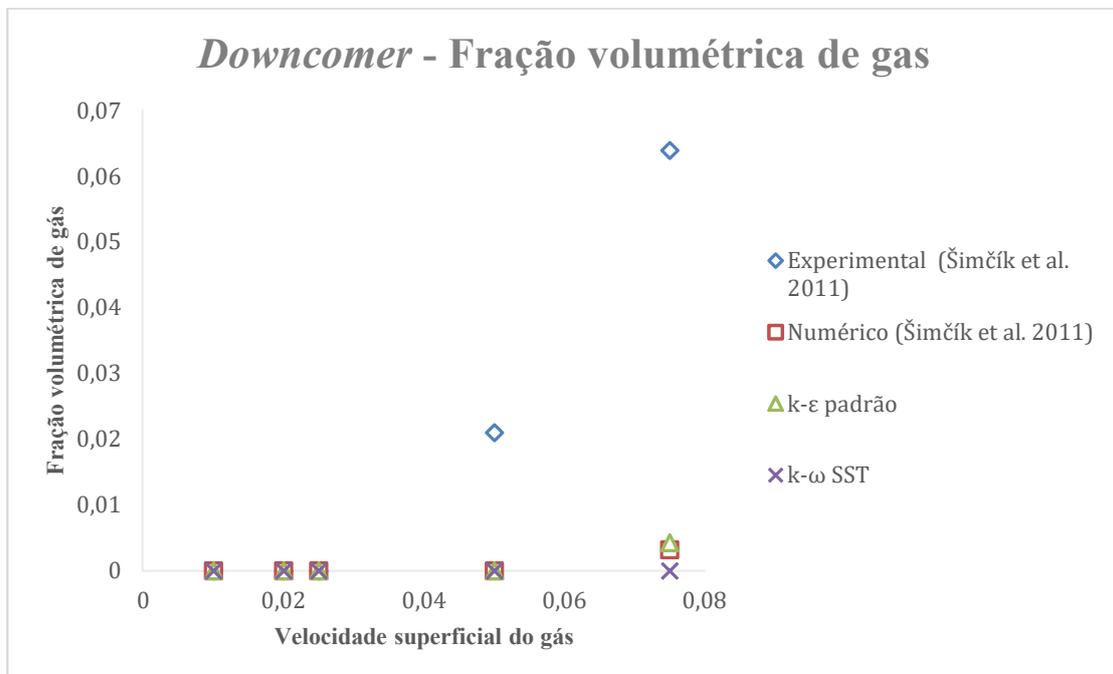
Fonte: O autor (2018).

Figura 20 - Resultados obtidos experimental e numericamente para a fração volumétrica de gases no *riser*.



Fonte: O autor (2018).

Figura 21 - Resultados obtidos experimental e numericamente para a fração volumétrica de gases no *downcomer*.



Fonte: O autor (2018).

Outro estudo levou em consideração o efeito da coalescência e da ruptura das bolhas. Em regimes com baixa velocidade superficial do gás a colisão entre as bolhas é pequena assim como as forças turbulentas, fatores que minimizam os efeitos de coalescência e ruptura das bolhas. Entretanto, quando o regime proporciona o aparecimento de bolhas grandes, o sistema se torna heterogêneo e os fenômenos de coalescência e ruptura aparecem (EBADI AMOOGHIN *et al.*, 2015).

As equações de transporte e de conservação de massa foram modeladas de acordo com a área interfacial entre as bolhas e o líquido. Várias expressões para o coeficiente de arrasto foram consideradas. Os resultados foram satisfatórios para velocidades baixa e média do gás, para as altas velocidades superficiais o modelo ainda apresentou erros consideráveis, no entanto os autores indicam a falta de conhecimento na seleção das expressões do coeficiente de arrasto e a sua relação com os modelos de forças interfaciais entre as fases como causa principal de tais discrepâncias (EBADI AMOOGHIN *et al.*, 2015).

A Fig. 21 ilustra o perfil de retenção de gases, ou fração volumétrica, obtido no trabalho de Šimčík *et al.* (2011) e no presente estudo com a velocidade superficial do ar ajustada a 0,05 m/s. Note que é possível visualizar a semelhança entre ambos resultados na região inferior do reator.

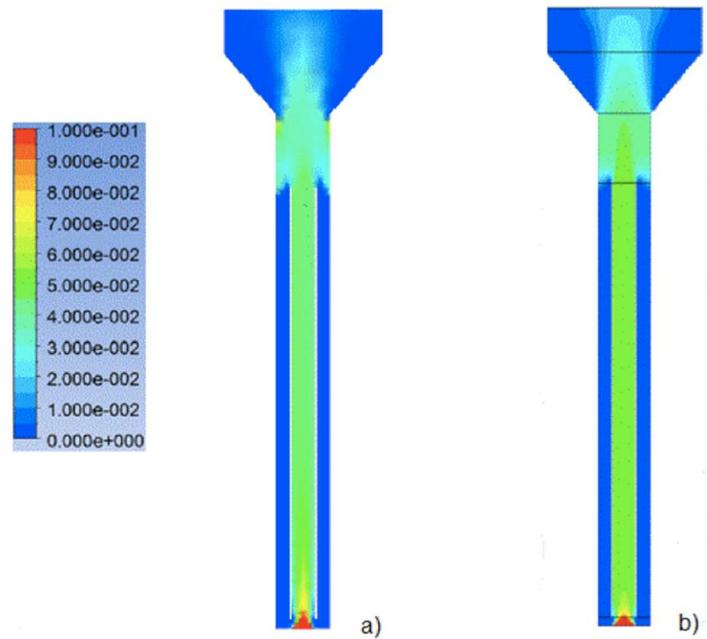
A Fig. 22 a) apresenta vetores representando o perfil de velocidade da água na simulação conduzida com 0,025m/s de velocidade superficial de ar. É possível observar as zonas de recirculação na região de desprendimento do ar na parte superior do reator, ainda é possível identificar mais uma recirculação na região onde o tubo central termina, na parte superior do *downcomer*. As maiores velocidades do líquido são encontradas na região inferior do *riser*, onde a água retorna do *downcomer* e é acelerada com a entrada do fluxo de ar.

A movimentação do ar pelo diferencial de massa específica entre os fluidos gera uma redução na pressão na região de maior velocidade, este fenômeno pode ser considerado a força motriz da circulação do líquido, a Fig. 22 b) mostra a distribuição da pressão no reator na simulação com 0,025m/s de velocidade superficial do ar.

Para a confirmação do regime de escoamento turbulento, foram calculados os valores do número de Reynolds (Eq. 2.19) para as velocidades do líquido encontradas no reator. As velocidades consideradas neste cálculo são as encontradas nos pontos de medição em cada canal do equipamento. O comprimento característico no *riser* é o próprio diâmetro interno do tubo. No *downcomer*, entretanto, utilizou-se o diâmetro

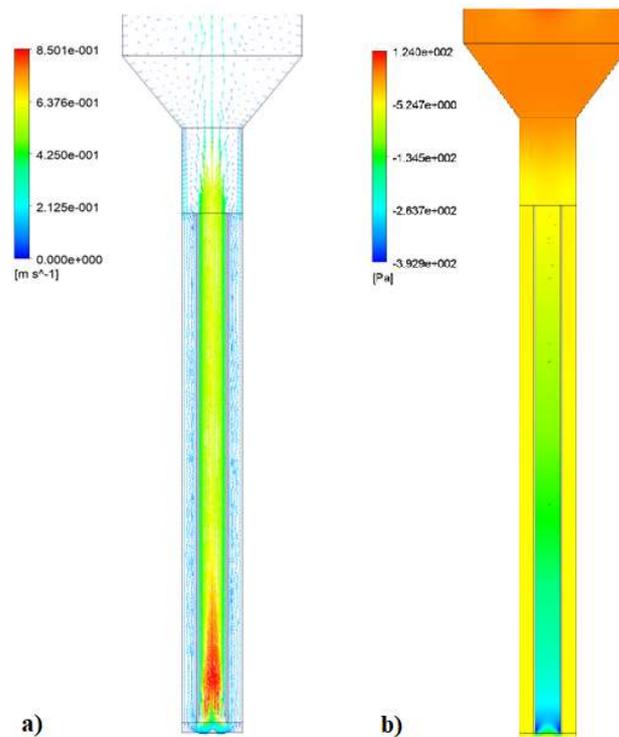
equivalente calculado com a Eq. (2.20). Os resultados obtidos estão descritos na Tabela 9.

Figura 22 - Perfil de retenção de gás em: a) trabalho atual e b) obtido por Šimčík *et al.* (2011)



Fonte: O autor (2018).

Figura 23 – a) Vetores velocidade do líquido b) Distribuição da pressão no interior do *airlift*. Resultados da simulação com 0,025 m/s de velocidade do ar.



Fonte: O autor (2018).

Conforme mencionado anteriormente, valores acima de 2.300 para este parâmetro indicam que o escoamento é turbulento. Assim sendo, comprovou-se que, mesmo nas menores velocidades do ar, o regime encontrado é turbulento em ambas as seções do *airlift*.

Tabela 9 – Valores encontrados para o número de Reynolds nas simulações numéricas.

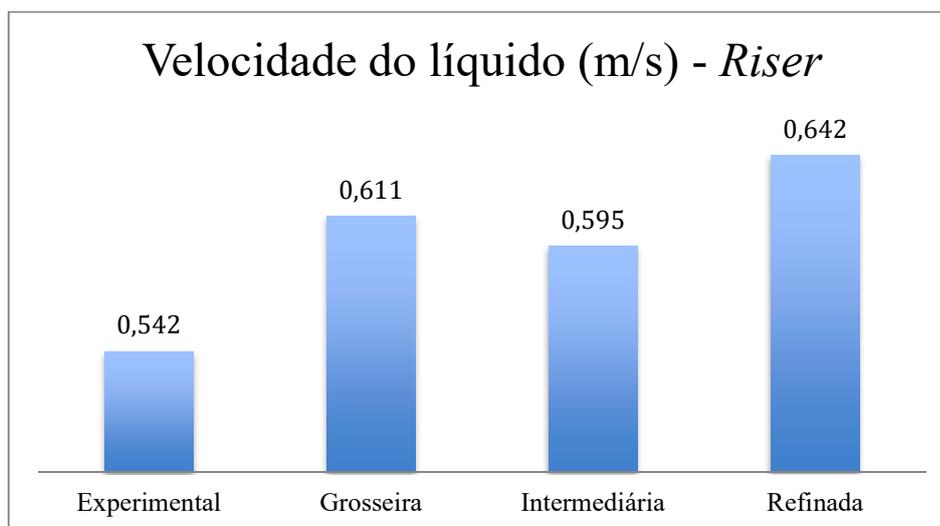
Velocidade do ar (m/s)	<i>Riser</i>	<i>Downcomer</i>
0,010	28.756	7.800
0,020	36.808	9.537
0,025	39.913	10.512
0,050	49.420	13.755
0,075	54.778	14.640

Fonte: O autor (2018).

Concomitantemente com o estudo do refino de malhas foi conduzido um estudo referente a influência da força interfacial entre as fases de dispersão turbulenta, neste estudo paralelo o modelo turbulento adotado foi o $k - \epsilon$ padrão. Inicialmente foi estabelecido o perfil de velocidades e de retenção de gás no reator sem levar em conta a dispersão turbulenta e os resultados são apresentados nas Figs. 24 a 26. É possível observar que os valores para a velocidade do líquido no *riser* são superestimados, variando entre 10% e 18,5% quando comparados com o valor experimental. Para a velocidade do líquido no *downcomer* a variação encontrada foi de -3,4% na malha intermediária, 2,5% na malha grosseira e 0,9% na malha refinada. Para a retenção de gás no *riser* as diferenças foram -11,4% na malha grosseira, 5,5% na intermediária e 2,7% na refinada.

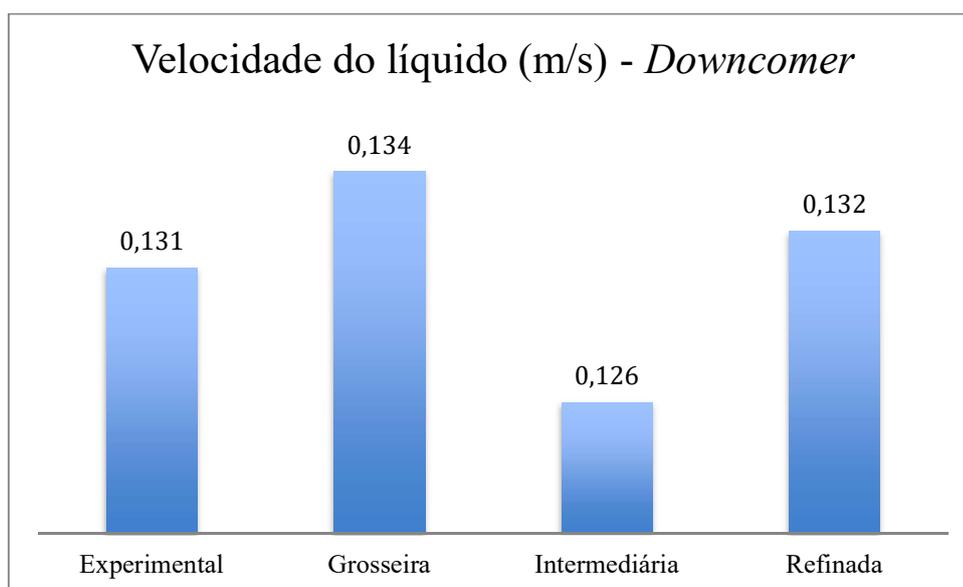
Quando a dispersão turbulenta foi levada em consideração os resultados para a velocidade do líquido no *riser* melhoraram a precisão, tendo o erro máximo de aproximadamente 6,5% na malha refinada. Na velocidade do líquido no *downcomer* não houve influência tendo como erro máximo 2% na malha grosseira. Houve uma subestimação para o valor de retenção de gás no *riser*. Os resultados são apresentados nas Figs. 27 a 29.

Figura 24 - Valores encontrados para a velocidade do líquido no *riser* no estudo do refino de malha sem a influência da força de dispersão turbulenta



Fonte: O autor (2018).

Figura 25 - Valores da velocidade do líquido no *downcomer* no estudo do refino de malha sem a influência da força de dispersão turbulenta

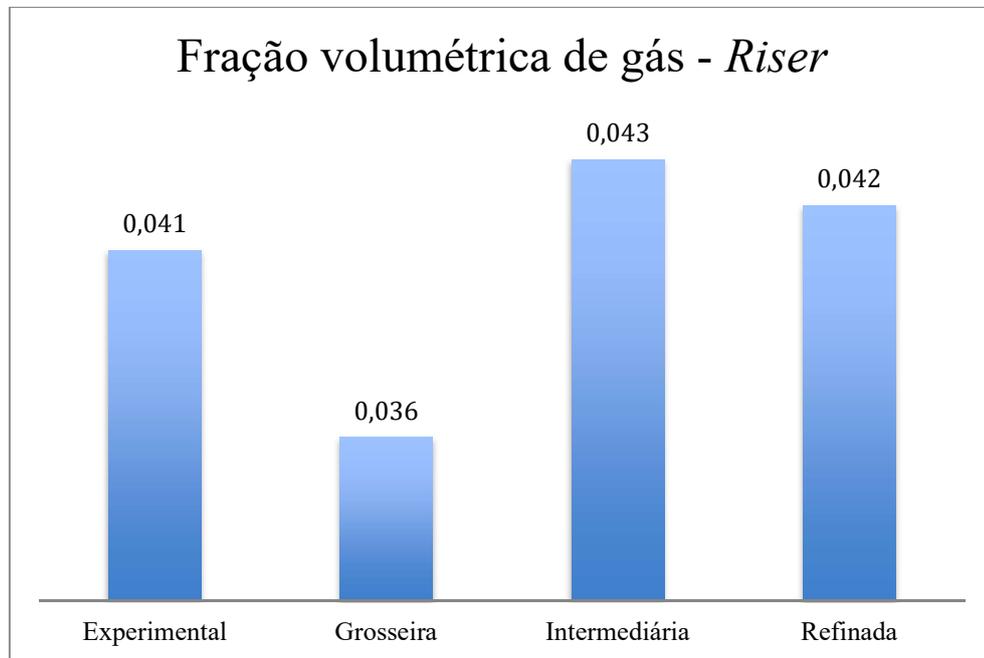


Fonte: O autor (2018).

Os resultados demonstram que a influência da força de dispersão turbulenta é relevante principalmente para a velocidade do líquido no canal de ascensão do reator visto que é a região onde existe a maior fração volumétrica da fase dispersa. Com relação ao estudo do refino de malhas, percebeu-se que houveram alterações nos resultados quando comparados os valores encontrados na malha sem qualquer refino e

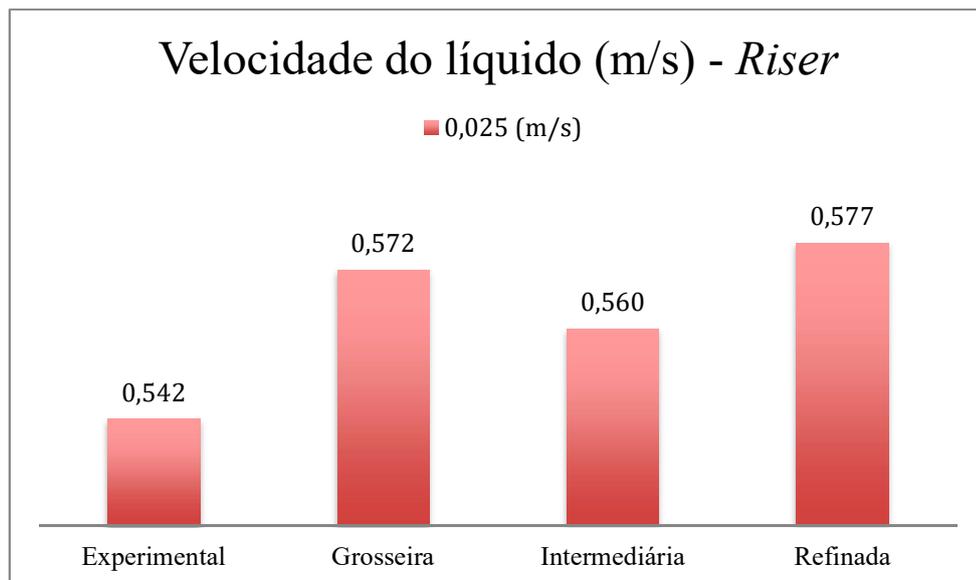
os obtidos nos três casos com refino, indicando influência da malha, o que não é relatado em Šimčík *et al.* (2011).

Figura 26 - Valores de retenção de gás no *riser* encontrados no estudo de refino de malha sem a influência da força de dispersão turbulenta



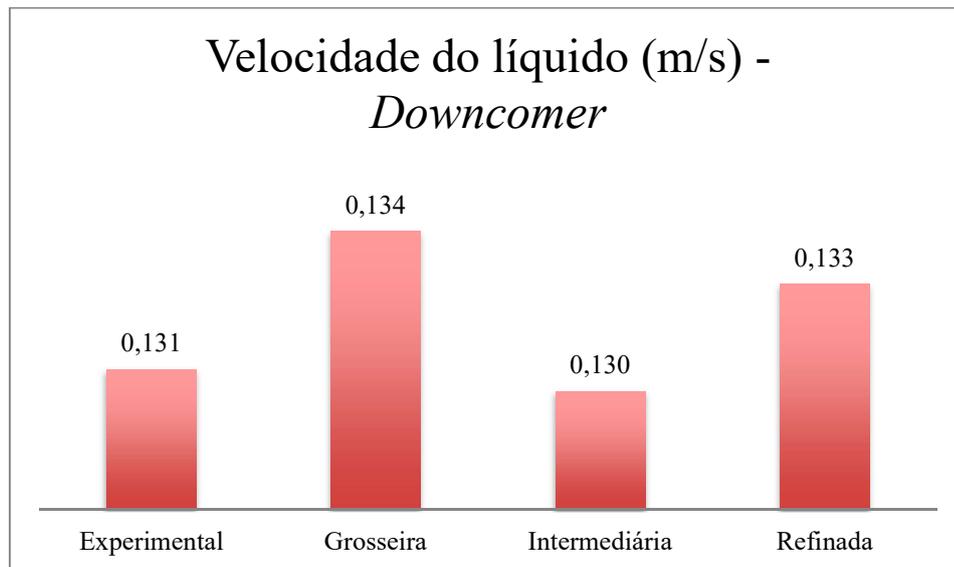
Fonte: O autor (2018).

Figura 27 - Resultados para a velocidade do líquido no *riser* levando em consideração a força de dispersão turbulenta



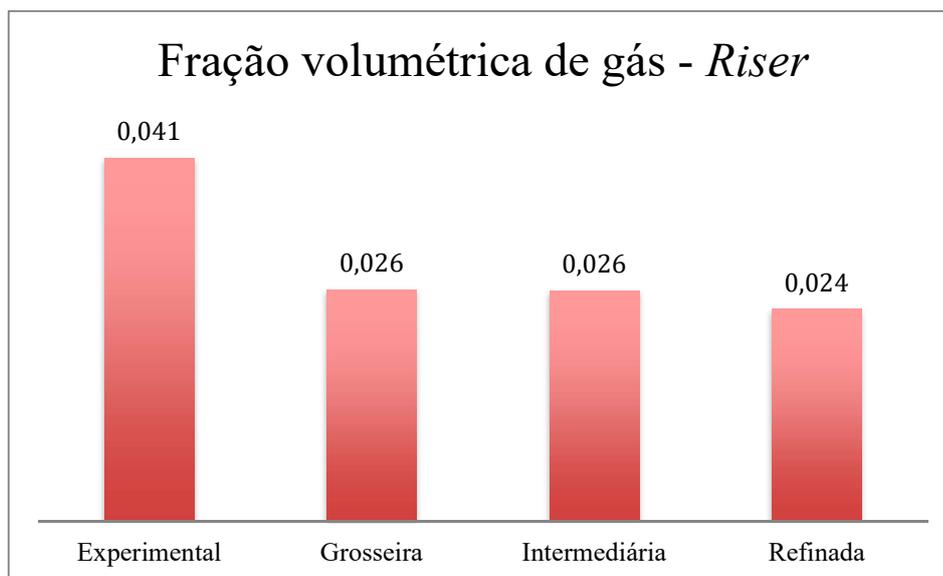
Fonte: O autor (2018).

Figura 28 - Velocidade do líquido no *downcomer* quando levado em conta a força de dispersão turbulenta



Fonte: O autor (2018).

Figura 29 - Retenção de gás no *riser*.



Fonte: O autor (2018).

4.2 TURBULÊNCIA

Para a comparação dos modelos turbulentos fez-se necessário a geração de novas malhas para o modelo $k-\omega$ SST devido a necessidade da adequação para o valor do parâmetro y^+ . A malha utilizada neste caso foi a malha grosseira, visto que já

obedecia aos critérios de qualidade e y^+ exigidos, os dados desta malha foram apresentados na Tabela 4 e na Fig. 15.

O valor médio do critério *Quality* apresentou uma redução considerável, quando comparado com a malha obtida para o modelo turbulento $k - \epsilon$ e refino intermediário, passando de 0,828 para 0,506 devido a distorção nos elementos causada pelo valor fixo da altura.

Quando os modelos turbulentos são comparados é possível observar que ambos são capazes de prever o escoamento no equipamento, conforme apresentados nas Tabelas 7 e 8, com resultados superestimados para a velocidade no *riser* e subestimados para a fração volumétrica de ar no *riser*.

Quando analisada a influência das malhas, ambos os modelos apresentaram poucas alterações nos resultados das variáveis, indicando a independência dos resultados em relação às malhas.

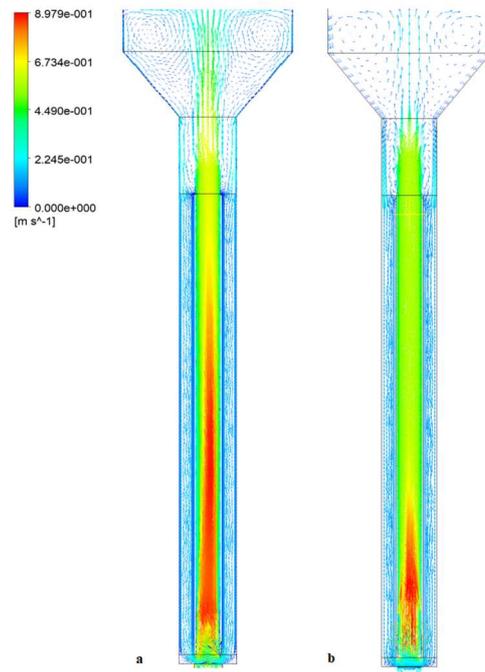
A Fig. 30 traz uma demonstração dos vetores que representam a velocidade do líquido encontrados com os modelos turbulentos em comparação nesta etapa. É possível verificar que os perfis de velocidade são semelhantes, inclusive os locais de recirculação. Assim neste quesito, não há um modelo preferencial.

A Fig. 31 apresenta as curvas de nível para a energia cinética turbulenta nas duas simulações, indicando os locais onde a turbulência é maior e assim, onde ocorre a maior agitação. Pode-se notar que não são idênticos, entretanto, não há variação significativa da região onde se encontram os valores mais altos, indicando que ambos os modelos foram capazes de prever a localização onde a turbulência é maior

Outro ponto que deve ser considerado na comparação entre os modelos turbulentos é o custo computacional. Devido a necessidade de um refino maior próximo às paredes para a adequação do parâmetro y^+ , o número de nós obtidos na malha para o modelo $k - \omega$ SST é consideravelmente maior, e assim, o tempo despendido para as simulações também foi elevado.

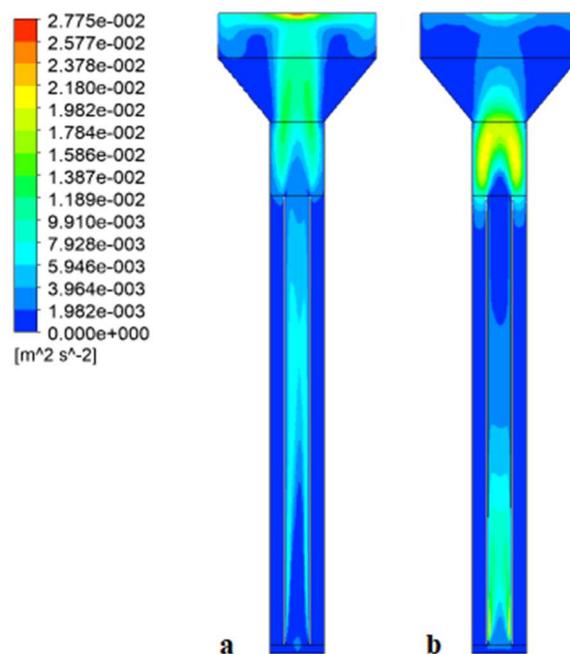
Tendo em vista os resultados apresentados, e a capacidade dos dois modelos de prever o escoamento no equipamento, o ponto a ser considerado é o custo computacional. Assim, o modelo que será adotado no estudo da geometria é o $k - \epsilon$ padrão.

Figura 30 – Vetores para a velocidade do líquido obtidos com os modelos turbulentos:
a) $k - \omega$ SST, b) $k - \epsilon$.



Fonte: O autor (2018).

Figura 31 – Curvas de nível para a energia cinética turbulenta encontradas nas simulações utilizando os modelos turbulentos: a) $k - \omega$ SST, b) $k - \epsilon$.



Fonte: O autor (2018).

4.3 ESTUDO DA INFLUÊNCIA DOS SUPORTES PARA BIOFILMES

Para a acomodação dos suportes para o biofilme fez-se necessário a alteração da geometria do *airlift*, o diâmetro externo passou de 140 mm para 242 mm e o diâmetro da seção de separação passou de 420 mm para 520 mm, o restante das medidas são as mesmas encontradas na Fig. 4 e utilizadas nas simulações anteriores.

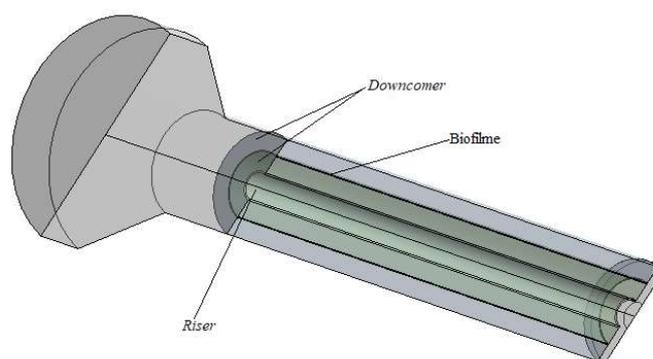
Estas alterações na geometria têm influência na circulação dos fluídos no interior do reator, segundo a literatura disponível, quando ocorre um aumento na área do *downcomer* obtém-se um aumento na velocidade do líquido no *riser* e uma redução da fração volumétrica do ar nesta mesma seção do reator. Ocorre, ainda, um aumento na eficiência da agitação (EBRAHIMIFAKHAR et al., 2011; HEKMAT; AMOOGHIN; MORAVEJI, 2010).

4.3.1 Reator com um suporte para biofilme – caso 1

A geometria é apresentada na Fig. 32 como ilustração. A malha obtida para este caso continha 693.774 nós e 416.072 elementos com um valor médio para o critério *Quality* de 0,7619. A altura da primeira camada de elementos na malha foi de 1,5 mm na região interna do *riser* e 3,0 mm nas outras paredes, com isso o valor máximo para o y^+ encontrado foi de 69,02.

A velocidade do líquido encontrada no ponto de medição no *riser* foi de 0,612 m/s e a fração volumétrica de ar neste mesmo ponto foi de 0,0256. Quando estes valores são comparados com os encontrados na simulação sem alteração da geometria observa-se o aumento da velocidade do líquido e a redução da fração volumétrica do ar no *riser*, o que está em conformidade com a literatura.

Figura 32 - Geometria do reator com 1 suporte para biofilme.

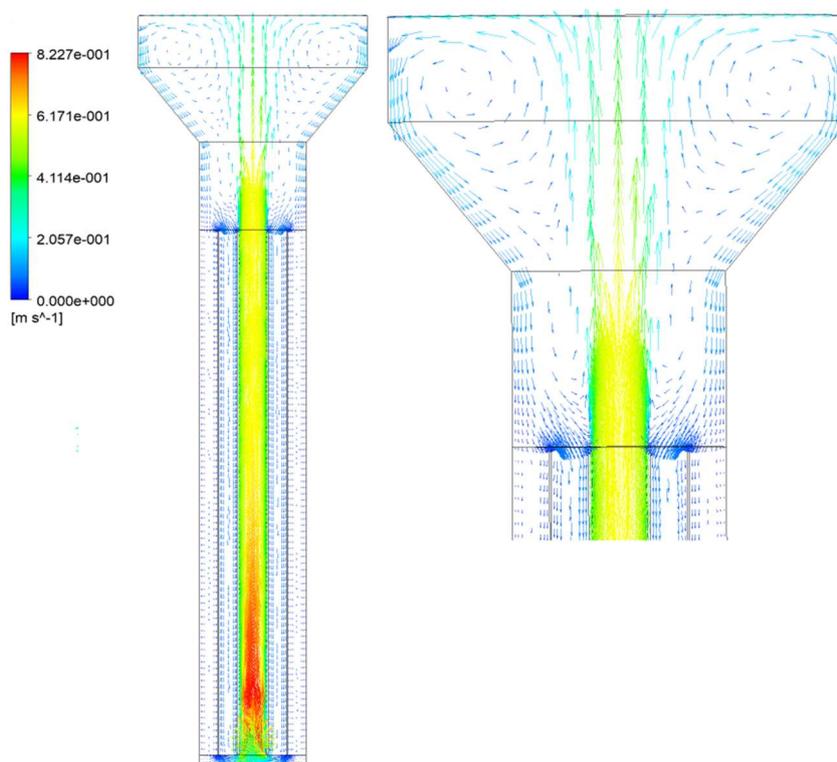


Fonte: O autor (2018).

Com o aumento da região do *downcomer* houve a formação de uma recirculação mais acentuada na saída do *riser* sobre a entrada do *downcomer* como demonstrado na Fig. 33, formou-se ainda um canal preferencial para o retorno do líquido através do anel mais interno do *downcomer* reduzindo assim a circulação na região mais externa do reator, no entanto não houve estagnação do líquido conforme visualizado na Fig. 34 onde o valor da velocidade foi limitado em 0,1 m/s, os valores encontrados nos pontos de medição foram 0,0765 m/s no canal interno e 0,0325 m/s no canal mais externo do *downcomer*.

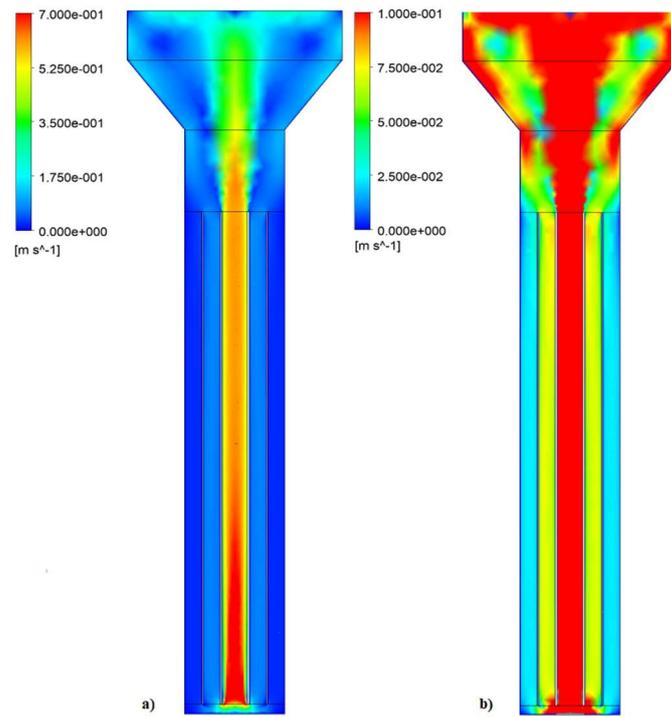
A região onde se encontrou a maior energia cinética turbulenta coincide com a do reator sem biofilme, mas com menor intensidade. A Fig. 35 apresenta os dois reatores com a indicação da energia cinética turbulenta e é possível notar que além da parte inferior do *riser* a maior agitação ocorre próximo as recirculações no topo dos reatores.

Figura 33 – Representação vetorial da velocidade do líquido no *airlift*.



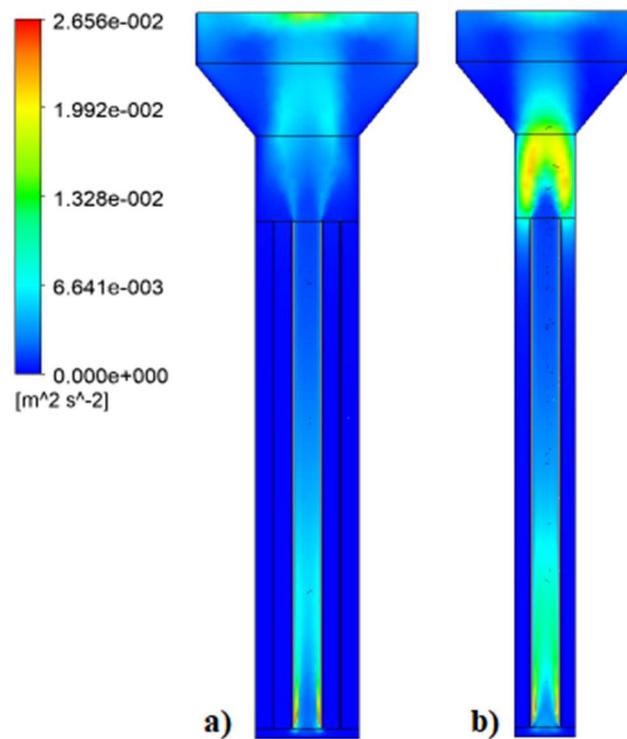
Fonte: O autor (2018).

Figura 34 – a) Perfil de velocidade do líquido, b) Perfil de velocidade do líquido limitado a 0,1 m/s.



Fonte: O autor (2018).

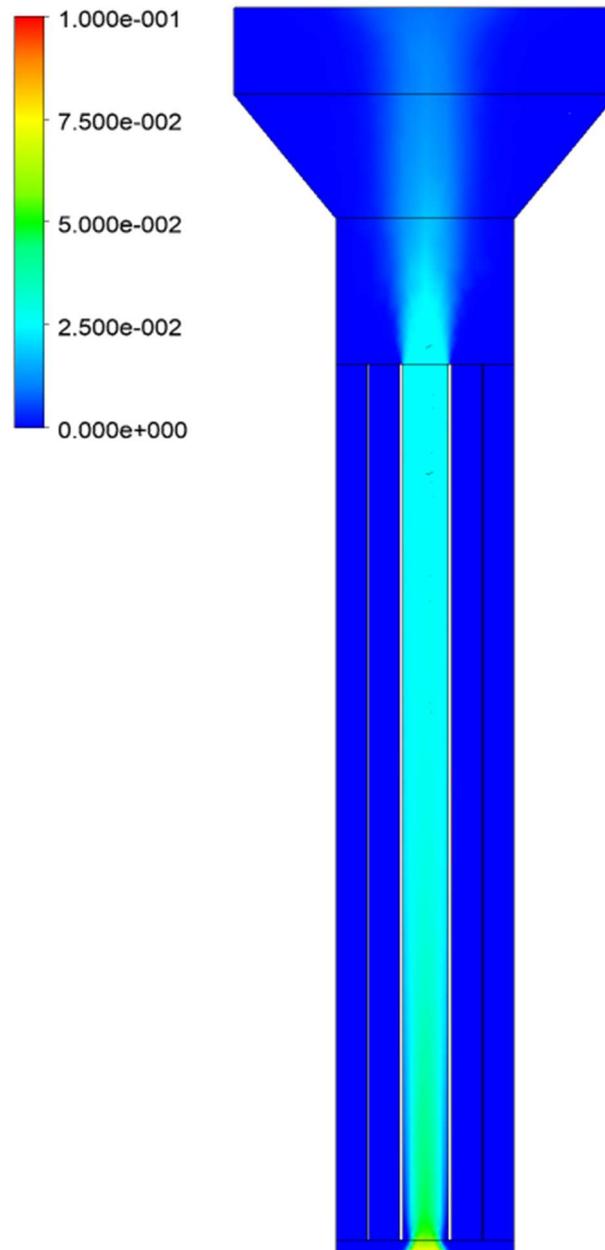
Figura 35 – Energia cinética turbulenta. a) Reator com biofilme b) Reator sem biofilme



Fonte: O autor (2018).

A região que contém a maior fração volumétrica de ar se restringe ao *riser* e logo acima dele, conforme é possível observar na Fig. 36. Segundo a literatura, essa maior concentração de ar na região do *riser* incrementa a diferença entre as massas específicas da mistura nos canais, ocasionando a maior velocidade ascendente no centro do reator (CHISTI, 1989).

Figura 36 – Fração volumétrica de ar.

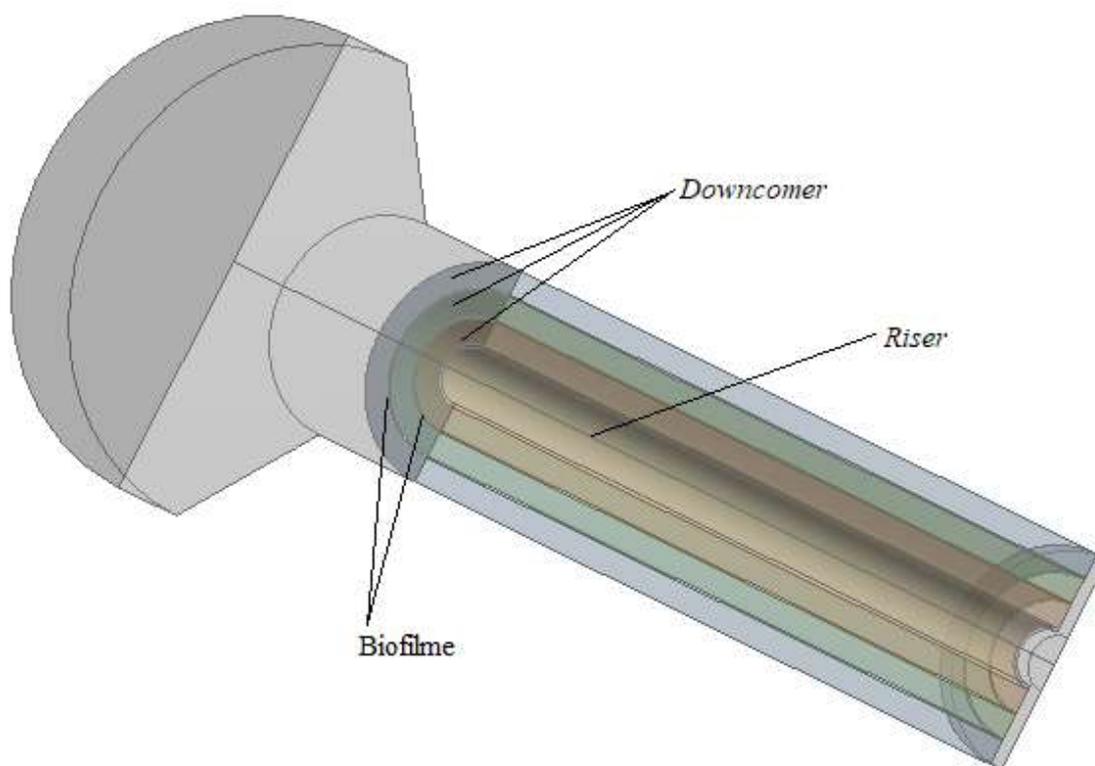


Fonte: O autor (2018).

4.3.2 Reator com dois suportes para biofilme – caso 2

A Fig. 37 ilustra a geometria utilizada como domínio computacional para o caso com dois suportes para o biofilme. A malha obtida contém 191.109 nós e 745.765 elementos com um *Quality* médio de 0,784. O refino nas paredes utilizou 1,5 mm de altura para a primeira camada de elementos na parede interna do *riser* e 3,0 mm no restante incluindo aquelas formadas pelo biofilme. O valor máximo encontrado para o parâmetro y^+ foi 61,83. A velocidade do líquido no *riser* foi de 0,614 m/s e a fração volumétrica do ar 0,0257. As velocidades nos canais do *downcomer* foram 0,1 m/s, 0,0316 m/s e 0,0189 m/s respectivamente do canal mais interno ao externo. Percebeu-se que mesmo com velocidade baixa não houve estagnação em nenhum dos canais. A Fig. 38 mostra o perfil de velocidades no reator e o da fração volumétrica de ar.

Figura 37 – Geometria do reator com 2 suportes de biofilme, caso 2.

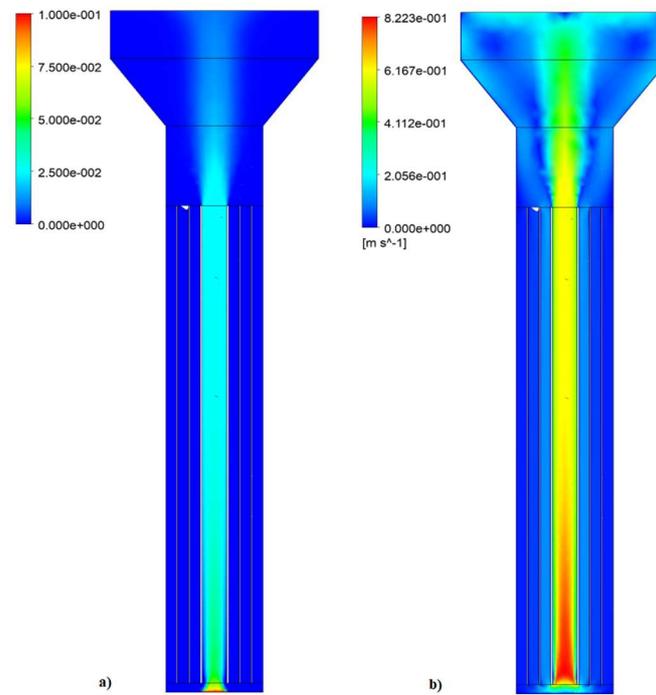


Fonte: O autor (2018).

O padrão de recirculação no topo do *airlift* não se alterou com a inserção de uma nova parede de biofilme, isto é visível na Fig. 39 que apresenta os vetores para a velocidade do líquido no reator, existe sim uma distribuição preferencial na circulação

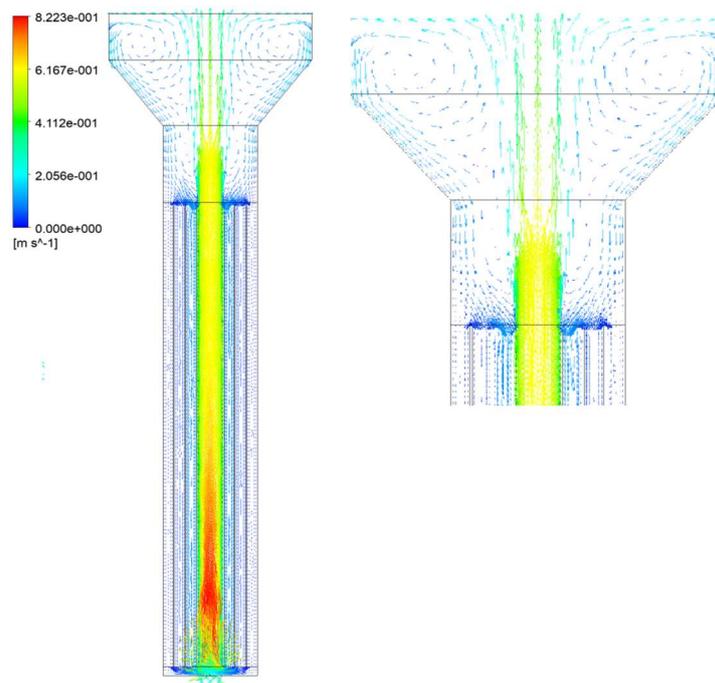
do líquido pelos canais mais internos do *downcomer* como observado nos valores citados anteriormente para esta variável.

Figura 38 – Perfil de: a) fração volumétrica de ar e b) velocidade do líquido.



Fonte: O autor (2018).

Figura 39 – Representação vetorial da velocidade do líquido

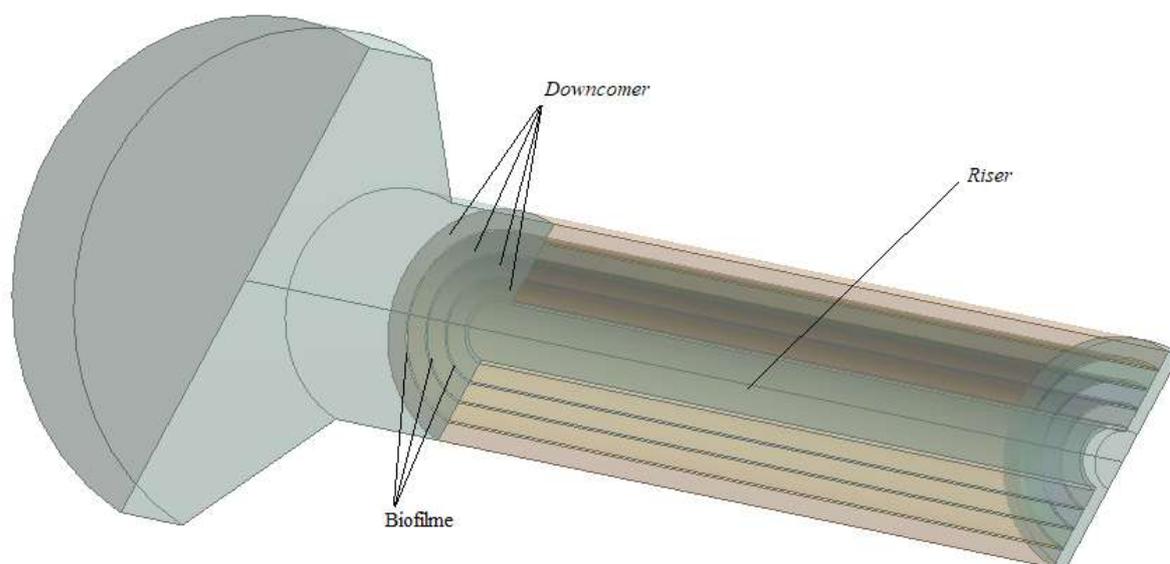


Fonte: O autor (2018).

4.3.3 Reator com três suportes para biofilme – caso 3

A geometria utilizada na simulação para o reator com 3 suportes de biofilme é apresentada na Fig. 40. A malha gerada apresentou 317.386 nós e 1.128.254 elementos. O refino da malha próximo as paredes foi o mesmo utilizado nas malhas anteriores e encontrou-se um valor máximo de 56,14 para o parâmetro y^+ . As velocidades para o líquido encontradas nos pontos de medição foram: 0,617 m/s no *riser*, 0,070 m/s, 0,058 m/s, 0,037 m/s e 0,029 m/s nos canais mais interno ao mais externo, respectivamente, do *downcomer*. O perfil de velocidade do líquido é apresentado graficamente na Fig. 41 a).

Figura 40 - Geometria do reator com 3 suportes de biofilme, caso 3.



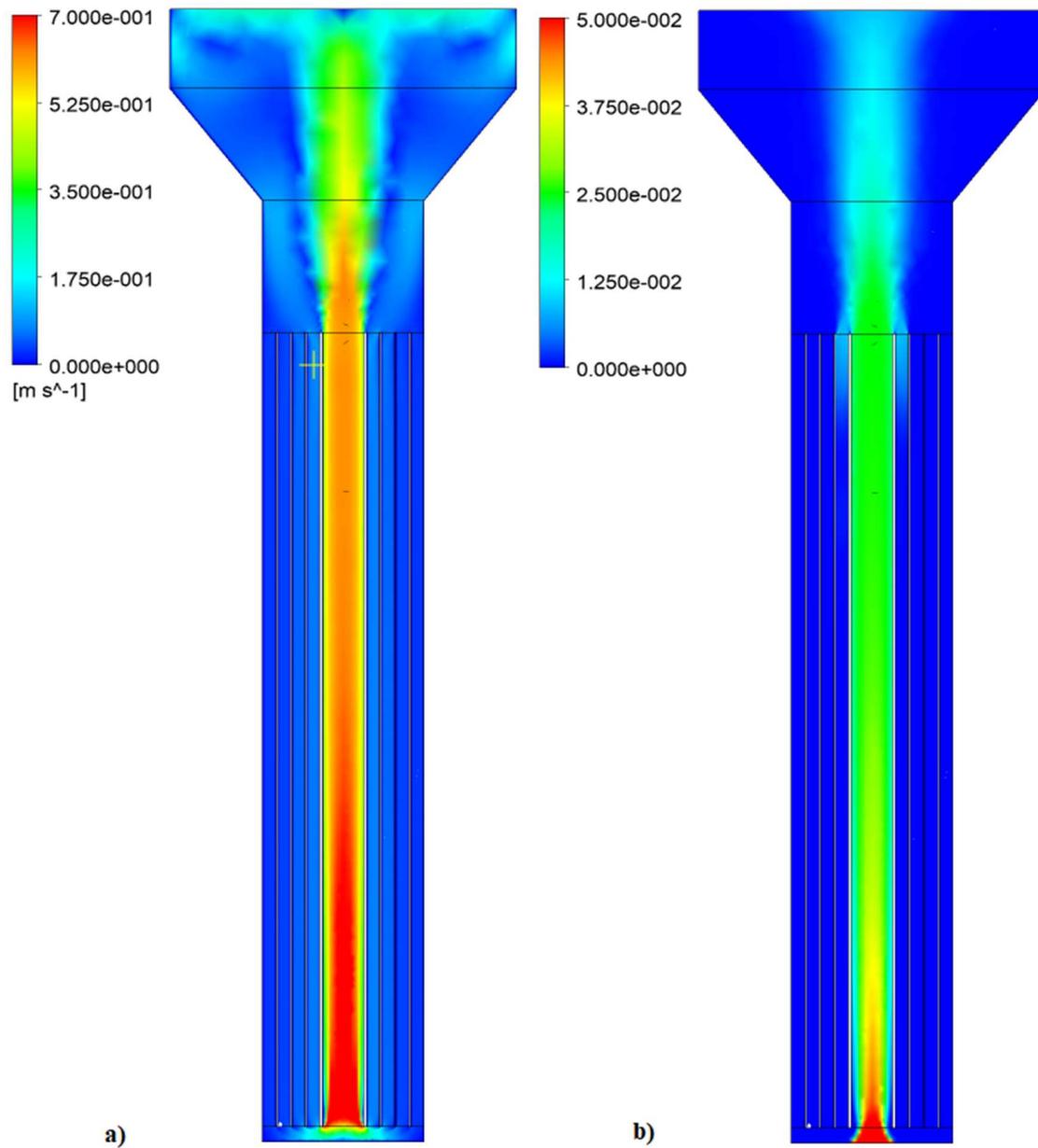
Fonte: O autor (2018).

A fração volumétrica de ar no *riser* encontrada foi 0,025 não apresentando variação quando comparada com as simulações anteriores, no entanto, encontrou-se um valor de 0,0065 no canal mais interno do *downcomer*, o valor habitual para este parâmetro era aproximadamente 10^{-8} . A Fig. 41 b) apresenta graficamente a distribuição da fração volumétrica de ar no interior do reator.

Quando se observa o padrão de recirculação da água no topo do *riser*, ver Fig. 42, é possível dar uma explicação para a retenção de ar no *downcomer*, as bolhas de ar podem ser arrastadas pelo fluxo de água para o interior do primeiro canal do *downcomer* e permanecer aprisionadas devido a pequena distância entre as paredes, a velocidade

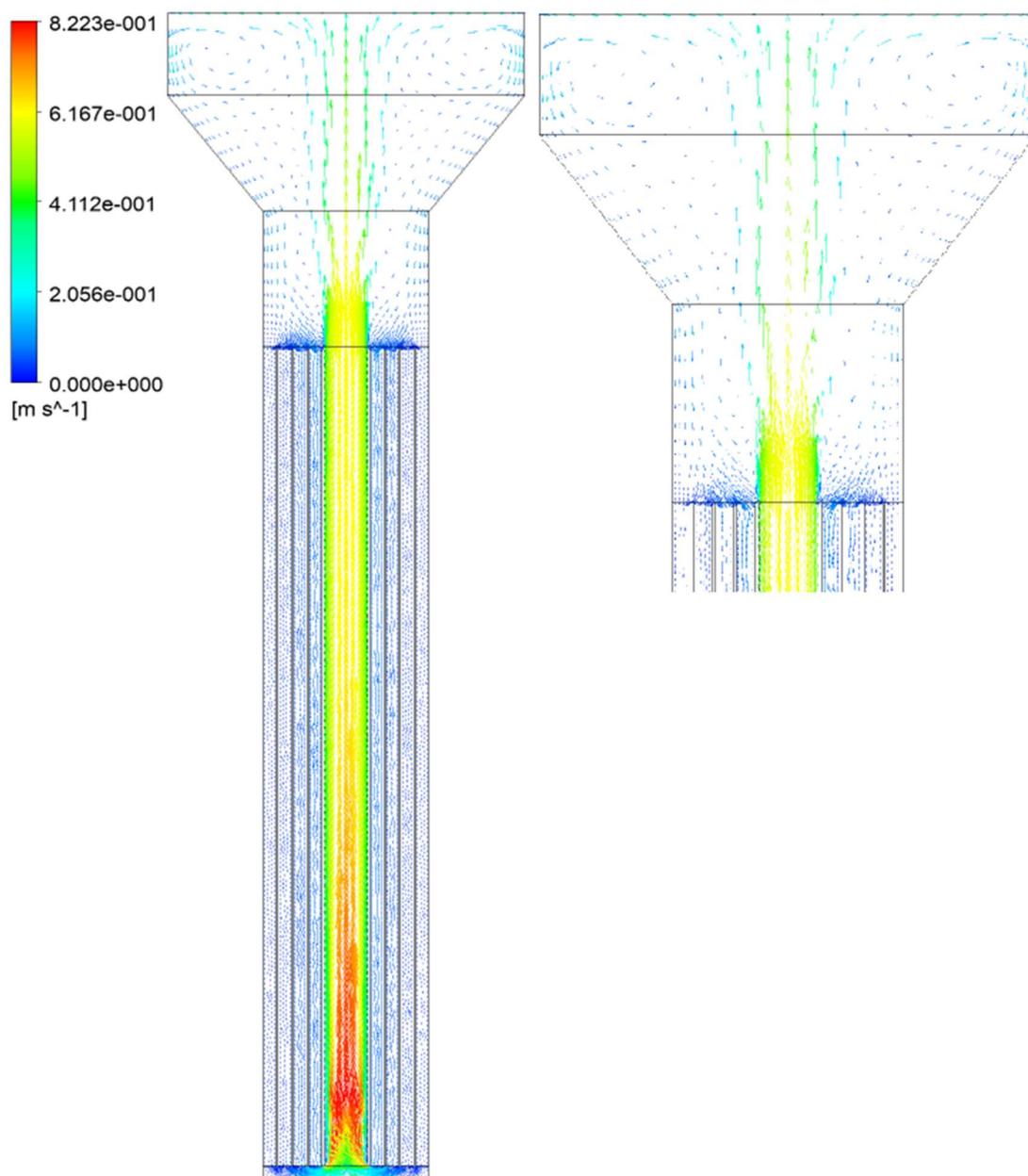
do líquido não é suficiente para arrastá-las até o fundo do reator mas é capaz de retê-las no início do canal.

Figura 41 – Perfil de: a) velocidade da água no *airlift*. b) fração volumétrica de ar.



Fonte: O autor (2018).

Figura 42 – Representação vetorial do perfil de velocidade da água no reator.



Fonte: O autor (2018).

4.3.4 Comparação dos resultados

A velocidade da água no *riser* não apresentou variações significativa entre os três casos estudados, bem como a fração volumétrica do ar, no entanto, quando comparadas com os valores obtidos para a geometria original observou-se um aumento na velocidade e uma redução na fração volumétrica de gás, fato explicado na seção 4.3.1. Os valores encontrados para aquelas variáveis são apresentados na Tabela 10.

Tabela 10 – Valores encontrados no canal de ascensão para os três casos simulados e experimentais do caso de 2011.

	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Experimental
Velocidade do líquido (m/s)	0,612	0,614	0,617	0,542
Fração volumétrica do ar	0,0256	0,0257	0,0250	0,0410

Fonte: O autor (2018).

Observou-se que quando o canal descendente foi dividido, criou-se um caminho preferencial para o líquido. Este caminho localiza-se nos subcanais mais internos, entretanto, não houve estagnação nos mais externos. Os valores encontrados nos canais mais externos e internos são apresentados na Tabela 11.

Tabela 11 – Velocidade da água nos canais do *downcomer* (m/s).

	Caso 1	Caso 2	Caso 3
Canal interno	0,033	0,019	0,029
Canal externo	0,077	0,100	0,070

Fonte: O autor (2018).

Desta forma a nutrição e a oxigenação dos microrganismos pode ser mantida mesmo com a presença das três camadas de biofilme, mas faz-se necessário a verificação experimental dos níveis de oxigênio e nutrientes presentes no caldo fermentativo, isto porquê quanto maior a biomassa maior o consumo dos nutrientes. Ainda sobre a relação de biomassa, em geral quanto maior a quantidade de microrganismos maior será a produção do composto desejado.

Em geral o que se tem como objetivo em fermentações comerciais é a maximização da produção e a redução dos custos, portanto, a configuração onde se obteria a maior quantidade de produto em um determinado período é a que utiliza as três camadas de biofilme. Ainda quando se compara com outros reatores, os agitados mecanicamente por exemplo, tem-se um melhor aproveitamento energético segundo a literatura citada anteriormente.

5 CONCLUSÕES

Neste trabalho foram realizadas simulações numéricas com o objetivo principal de analisar a influência de paredes extras formadas por biofilme no canal descendente de reatores do tipo *airlift* com circulação interna.

Para isso fez-se necessário verificar se simulações numéricas eram capazes de representar corretamente o escoamento dentro destes reatores, visto que se trata de um escoamento multifásico. Para isso fez-se a verificação através de um caso de literatura publicado por Šimčík *et al.* (2011) onde os resultados numéricos foram comparados aos resultados experimentais. Foi constatado que as simulações são capazes de prever o comportamento dos fluidos de forma aceitável, mesmo com divergências nos valores para a variável fração volumétrica de ar, acreditando-se que tais desvios devem-se aos resultados experimentais e não numéricos. Para este fato, estudos foram conduzidos por diversos pesquisadores tentando solucionar o problema, no entanto, não houve até o momento uma solução adequada, ou por falta de modelos matemáticos apropriados ou por uma forma de redução das incertezas nas medições experimentais.

Outro estudo realizado neste trabalho foi a comparação entre os modelos matemáticos que descrevem escoamentos turbulentos, aqui comparou-se o modelo $k - \epsilon$ padrão, que é um modelo amplamente utilizado, ao modelo $k - \omega$ SST que também é bastante utilizado, mas com algumas particularidades. Os resultados obtidos com o modelo $k - \epsilon$ padrão foram os mais adequados quando comparados com os valores experimentais além de exigirem menor tempo computacional devido a malhas menos refinadas próximo a parede.

Para a alocação das paredes de biofilme foi necessário que a geometria do reator fosse modificada. Devido a esta alteração o escoamento no interior do reator também sofreu modificações. Os resultados obtidos foram os preditos pela literatura, e não houve nenhum impedimento na utilização das paredes de biofilme. Portanto, no intuito de maximizar a produção deve ser utilizado a maior biomassa possível, que neste estudo, é a utilização das três camadas de biofilme.

Tendo em mente que as reações fermentativas são exotérmicas e que a oxigenação e a retirada de gases produzidos pelos microrganismos é feita por transporte de massa entre as fases, poderiam ser conduzidos novos estudos em CFD levando em consideração estas variáveis na proposição de sistemas de refrigeração para os reatores e na vazão de ar necessária para a manutenção da vida dos microrganismos.

REFERÊNCIAS

ARIS, R. **Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics**. New York: Dover Publications, Inc., 1989.

ARUNKUMAR, R. P.; MUTHUKUMAR, K. Phenomenological simulation model for the prediction of hydrodynamic parameters of an internal loop airlift reactor. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 10, p. 4995–5000, 2010.

BARTH, T. J.; JESPERSEN, D. C. THE DESIGN AND APPLICATION OF UPWIND SCHEMES ON UNSTRUCTURED MESHES. **AIAA journal**, 1989.

BECK, J. V.; ARNOLD, K. J. **Parameter Estimation in Engineering and Science**. 1. ed. New York: John Wiley & Sons, 1977.

BELLO, R. A.; ROBINSON, C. W.; MOO-YOUNG, M. Gas holdup and overall volumetric oxygen transfer coefficient in airlift contactors. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 27, n. 3, p. 369–381, 1985.

BLAŽEJ, M. et al. Gas-liquid simulation of an airlift bubble column reactor. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 43, n. 2, p. 137–144, 2004.

BURNS, A. D. et al. The Favre averaged drag model for turbulent dispersion in Eulerian multi-phase flows. **5th International Conference on Multiphase Flow**, n. 392, p. 1–17, 2004.

CHIRVASE, A. A.; CARAMIHAI, M.; MUNTEAN, O. Gas holdup and liquid velocity in internal airlift reactors. **Revue Roumaine de Chimie**, v. 43, n. 10, p. 981–989, 1998.

CHISTI, M. Y. **Airlift bioreactors**. 1 ed ed. New York: Elsevier Ltd, 1989.

COSTERTON, J. W. et al. Microbial biofilms. **Annu. Rev. Microbiol.**, v. 49, p. 711–745, 1995.

EBADI AMOOGHIN, A. et al. Computational fluid dynamics simulation of bubble coalescence and breakup in an internal airlift reactor: ANALYSIS of effects of a draft tube on hydrodynamics and mass transfer. **Applied Mathematical Modelling**, v. 39, n. 5–6, p. 1616–1642, 2015.

EBRAHIMIFAKHAR, M. et al. CFD simulation of the hydrodynamics in an internal air-lift reactor with two different configurations. **Frontiers of Chemical Science and Engineering**, v. 5, n. 4, p. 455–462, 2011.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. 3 ed ed. Berlin: Springer-Verlag Publishing Company, Inc., 2002.

HEIJNEN, J. J. et al. A simple hydrodynamic model for the liquid circulation velocity in a full-scale two- and three-phase internal airlift reactor operating in the gas recirculation regime. **Chemical Engineering Science**, v. 52, n. 15, p. 2527–2540,

1997.

HEIJNEN, S. J. et al. Large-scale anaerobic/aerobic treatment of complex industrial wastewater using immobilized biomass in fluidized bed and air-lift suspension reactors. **Chemical Engineering & Technology**, v. 13, n. 1, p. 202–208, 1990.

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 Modelling Practice and Theory**, v. 18, n. 7, p. 927–945, 2010.

HSU, Y. C.; DUDUKOVIĆ, M. P. 18 Gas holdup and liquid recirculation in gas-lift reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 35, n. 1–2, p. 135–141, 1980.

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

LEVENSPIEL, O. **Chemical reaction engineering**. 3 ed ed. New York: John Wiley & Sons, 1999. v. 38

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2 ed ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.

MÁRTINS, M. A.; MARCHI, C. H. Estimate of iteration errors in computational fluid dynamics. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, v. 53, n. 3, p. 234–245, 2008.

MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. **AIAA Journal**, v. 32, n. 8, p. 1598–1605, 1994.

MERCHUK, J. C. et al. Concentric-tube airlift reactors: Effects of geometrical design on performance. **AIChE Journal**, v. 40, n. 7, p. 1105–1117, 1994.

MERCHUK, J. C.; SIEGEL, M. H. Air-lift reactors in chemical and biological technology. **Journal of Chemical Technology & Biotechnology**, v. 41, n. 2, p. 105–120, 1988.

MUDDE, R. F.; VAN DEN AKKER, H. E. A. 2D and 3D simulations of an internal airlift loop reactor on the basis of a two-fluid model. **Chemical Engineering Science**, v. 56, n. 21–22, p. 6351–6358, 2001.

OEY, R. S. et al. Simulation of a slurry airlift using a two-fluid model. **Chemical Engineering Science**, v. 56, n. 2, p. 673–681, 2001.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. 1 ed ed. New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

SCHMIDELL, W.; LIMA, U. D. E. A.; BORZANI, W. **Biotecnologia Industrial: Engenharia Bioquímica Vol. 2**. São Paulo: E. Blücher, 2001.

SIEGEL, M. H.; MERCHUK, J. C. Mass transfer in a rectangular air-lift reactor: Effects of geometry and gas recirculation. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 32, n. 9, p. 1128–1137, 1988.

SIEGEL, M. H.; MERCHUK, J. C.; SCHUGERL, K. Air-lift reactor analysis: Interrelationships between riser, downcomer, and gas-liquid separator behavior, including gas recirculation effects. **AIChE Journal**, v. 32, n. 10, p. 1585–1596, 1986.

ŠIMČÍK, M. et al. CFD simulation and experimental measurement of gas holdup and liquid interstitial velocity in internal loop airlift reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 66, n. 14, p. 3268–3279, 2011.

VAN BENTHUM, W. The biofilm airlift suspension extension reactor. Part I: Design and two-phase hydrodynamics. **Chemical Engineering Science**, v. 54, n. 12, p. 1909–1924, 1999.

VAN BENTHUM, W. A. J. et al. Bubble recirculation regimes in an internal-loop airlift reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 54, n. 18, p. 3995–4006, 1999.

VERSTEEG, H. K.; MALASKEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics**. 2 ed. ed. Harlow: Pearson Prentice Hall, 2007. v. M

XU, T. et al. CFD simulation of internal-loop airlift reactor using EMMS drag model. **Particuology**, v. 19, p. 124–132, 2015.

YANG, Z.; SHIH, T. H.; SHIHT, T. H. New Time Scale Based κ - ϵ Model for Near-Wall Turbulence. **AIAA Journal**, v. 31, n. 7, p. 1191–1198, 1993.

ZAFAR, S. et al. Molecular docking simulation studies on potent butyrylcholinesterase inhibitors obtained from microbial transformation of dihydrotestosterone. **Chemistry Central journal**, v. 7, n. 1, p. 164, 2013.

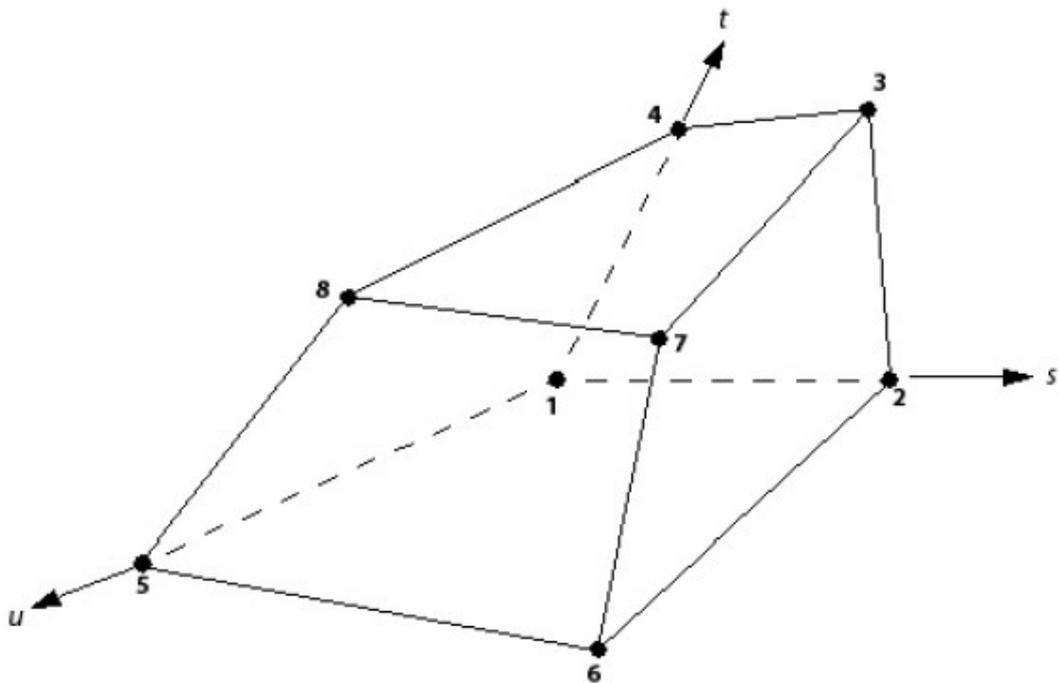
APÊNDICE A – FUNÇÕES DE FORMA

Conforme visto na seção 3 deste trabalho o código Ansys CFX utiliza funções de forma para aproximações das propriedades nos pontos de integração da malha e cada elemento tem uma função própria.

As diversas funções de forma possíveis são apresentadas a seguir, bem como as formas geométricas de cada elemento.

ELEMENTO HEXAÉDRICO

Figura 43 - Elemento hexaédrico.



Fonte: Ansys CFX (2012).

As funções de forma para os nós de um elemento hexaédrico são:

$$N_1(s,t,u) = (1-s)(1-t)(1-u)$$

$$N_2(s,t,u) = s(1-t)(1-u)$$

$$N_3(s,t,u) = s t (1-u)$$

$$N_4(s,t,u) = (1-s) t (1-u)$$

$$N_5(s,t,u) = (1-s)(1-t) u$$

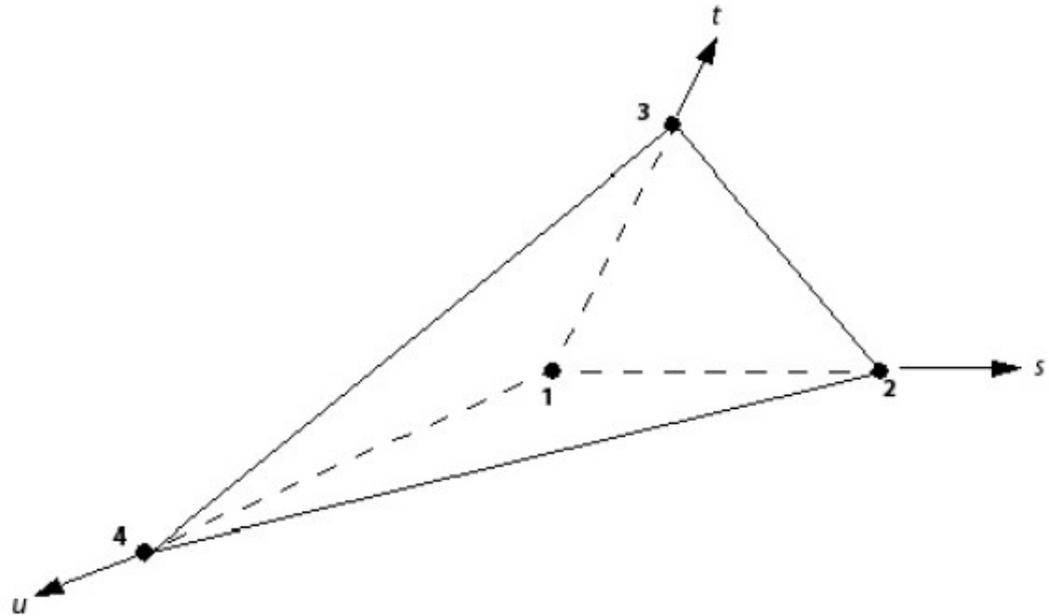
$$N_6(s,t,u) = s (1-t) u$$

$$N_7(s,t,u) = s t u$$

$$N_8(s,t,u) = (1-s) t u$$

ELEMENTO TETRAÉDRICO

Figura 44 - Elemento tetraédrico.



Fonte: Ansys CFX (2012).

As funções de forma para os nós de um elemento tetraédrico são:

$$N_1(s,t,u) = 1 - s - t - u$$

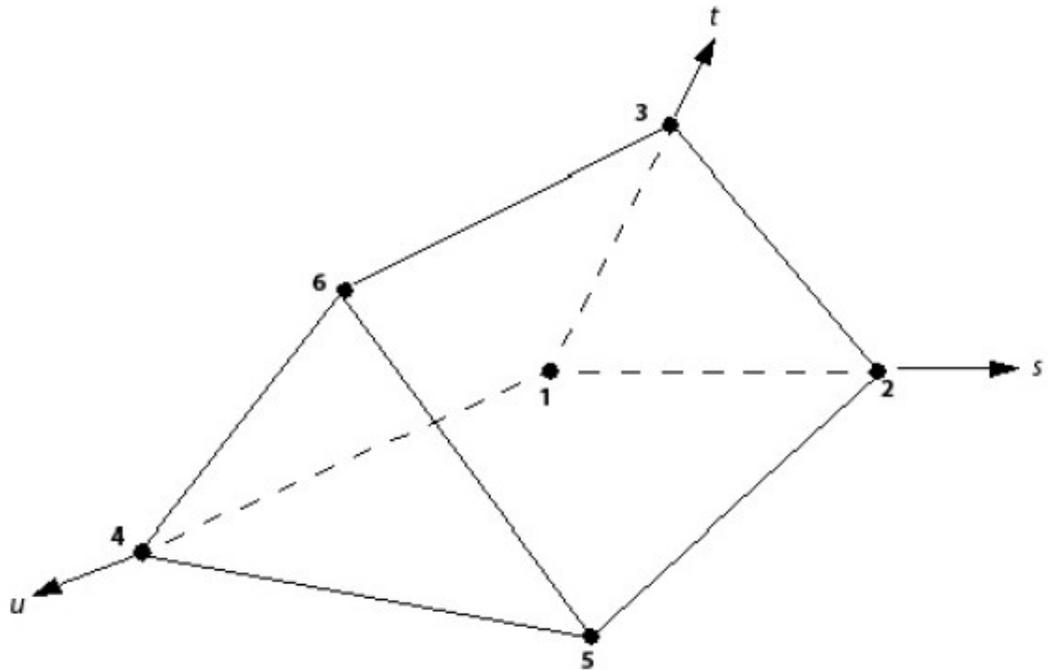
$$N_2(s,t,u) = s$$

$$N_3(s,t,u) = t$$

$$N_4(s,t,u) = u$$

ELEMENTO PRISMÁTICO TRIANGULAR

Figura 45 - Elemento prismático triangular



Fonte: Ansys CFX (2012).

As funções de forma são:

$$N_1(s,t,u) = (1 - s - t)(1 - u)$$

$$N_2(s,t,u) = s(1 - u)$$

$$N_3(s,t,u) = t(1 - u)$$

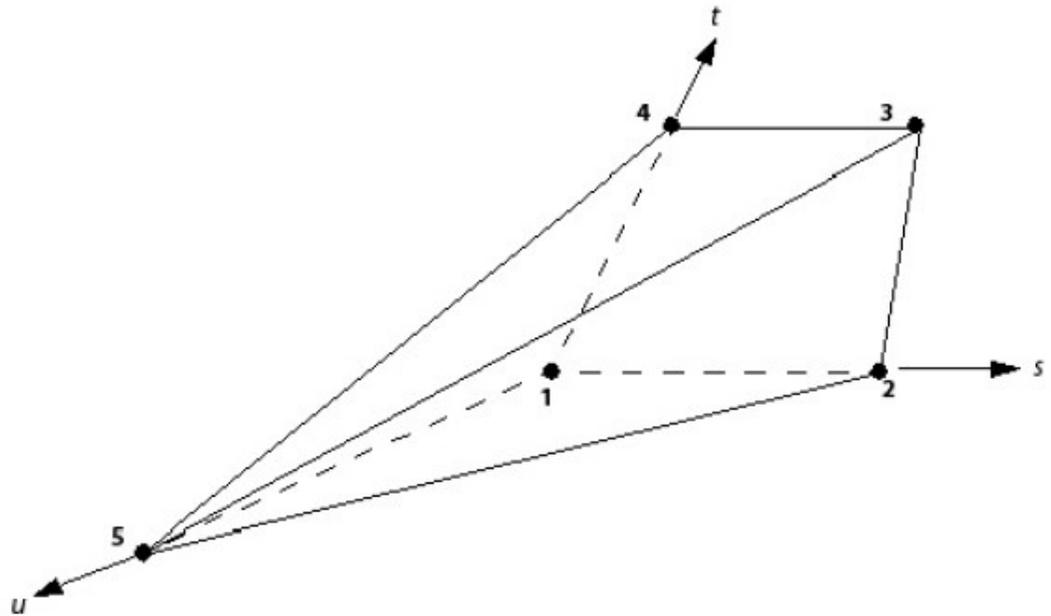
$$N_4(s,t,u) = (1 - s - t)u$$

$$N_5(s,t,u) = su$$

$$N_6(s,t,u) = tu$$

ELEMENTO PIRAMIDAL

Figura 46 - Elemento piramidal



Fonte: Ansys CFX (2012).

Para os elementos piramidais as funções de forma em cada nó são:

$$N_1(s,t,u) = (1-s)(1-t)(1-u)$$

$$N_2(s,t,u) = s(1-t)(1-u)$$

$$N_3(s,t,u) = s t (1-u)$$

$$N_4(s,t,u) = (1-s) t (1-u)$$

$$N_5(s,t,u) = u.$$