



ALICE MONTEIRO VARDIERO DO NASCIMENTO

**ESTUDO DA HIDRODINÂMICA DE UM BIORREATOR
AIRLIFT DE CIRCULAÇÃO INTERNA VIA SIMULAÇÃO
CFD**

**LAVRAS – MG
2023**

ALICE MONTEIRO VARDIERO DO NASCIMENTO

**ESTUDO DA HIDRODINÂMICA DE UM BIORREATOR AIRLIFT DE
CIRCULAÇÃO INTERNA VIA SIMULAÇÃO CFD**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Universidade Federal de Lavras, como parte
das exigências do Curso de Engenharia
Química, para a obtenção do título de Bacharel.

Prof.^a Dr.^a Isabele Cristina Bicalho
Orientadora

**LAVRAS – MG
2023**

ALICE MONTEIRO VARDIERO DO NASCIMENTO

**ESTUDO DA HIDRODINÂMICA DE UM BIORREATOR AIRLIFT DE
CIRCULAÇÃO INTERNA VIA SIMULAÇÃO CFD**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Universidade Federal de Lavras, como parte
das exigências do Curso de Engenharia
Química, para a obtenção do título de Bacharel.

Prof.^a Dr.^a Isabele Cristina Bicalho
Orientadora

**LAVRAS – MG
2023**

AGRADECIMENTOS

Ao escrever essa breve seção de agradecimentos não poderia me esquecer do Salmo 34:19 que diz que *“Muitas são as aflições do justo, mas o Senhor de todas o livra”*. O caminho até aqui foi árduo e muitas vezes foi como um deserto, mas Deus sempre foi meu oásis e minha força. Agradeço primeiramente à Ele por seu amor constante e fiel em minha vida, que me sustentou e me trouxe até aqui.

Agradeço aos meus pais Sebastião e Reny, meus exemplos de vida, e aos meus irmãos Vinícius e Felipe, pelo amor incondicional, pelas palavras de incentivo, pelos conselhos, pelos sacrifícios que fizeram para que eu pudesse chegar até aqui e, enfim, por serem meu abrigo todos os dias. O sonho de me tornar Engenheira Química se tornou realidade por causa de vocês e sou imensamente grata por tudo que fizeram por mim.

Agradeço à juventude da Primeira Igreja Presbiteriana de Lavras, vocês se tornaram minha família nesses quase cinco anos em que morei em Lavras. Obrigada por todos os momentos de riso, alegria e até de dor em que estivemos juntos, vou guardar vocês para sempre em minha vida.

Agradeço à Natália, Gabrielle, Dayane e Sarah, minhas companheiras ao longo de toda a graduação, pela amizade, pelas palavras de incentivo, pela força e pelos conselhos. A jornada não foi fácil, mas com vocês por perto os dias se tornaram mais claros e leves.

Agradeço à minha orientadora Isabele, por todo apoio e conselhos ao longo de todo o desenvolvimento deste trabalho, e principalmente por ter aceitado o desafio de me orientar nessa reta final. A realização deste trabalho só foi possível por causa de você.

Agradeço aos professores do curso de Engenharia Química da UFLA por todo o conhecimento compartilhado, pelos conselhos, e por contribuírem tanto à minha formação profissional.

Finalmente, agradeço à UFLA por todas as oportunidades de desenvolvimento e pelos momentos únicos que me proporcionou ao longo de todos esses anos. Obrigada pelas salas de aula, pelos laboratórios de pesquisa, pelo querido centro de convivência, pelos ipês coloridos, pelo verde das árvores, pelas trilhas por onde caminhei, enfim, dessa universidade jamais me esquecerei. Não digo adeus, mas um “até breve” querida Universidade Federal de Lavras.

“Bendito seja Deus, que não me rejeita a oração, nem aparta de mim a sua graça. ”

(Salmos 66:20)

*“Mas os que esperam no Senhor renovam as suas forças, sobem com asas como águias,
correm e não se cansam, caminham e não se fatigam. ”*

(Isaías 40:31)

RESUMO

Biorreatores são equipamentos utilizados para converter matérias-primas em produtos de valor agregado através do uso de células ou enzimas como biocatalisadores. Os biorreatores pneumáticos são caracterizados pela ausência de partes móveis em sua configuração, sendo a agitação e aeração do meio reacional realizada através da injeção de gás na base do equipamento. A Fluidodinâmica Computacional (CFD) tem se mostrado como uma importante ferramenta nos estudos de otimização envolvendo biorreatores pneumáticos. Por meio de técnicas de CFD é possível estudar os fenômenos de transporte que ocorrem no interior desses equipamentos com um maior nível de detalhamento, o que auxilia no projeto, operação e variação de escala de biorreatores. Portanto, no presente trabalho escolheu-se estudar a hidrodinâmica de um biorreator *airlift* de circulação interna através da modelagem numérica do escoamento ar-água no equipamento por meio de técnicas de CFD. Para validar a modelagem numérica utilizada no trabalho, os resultados obtidos através das simulações CFD foram comparados com os resultados experimentais do trabalho de Ziegenhein et al. (2016), sendo analisados os parâmetros de desempenho retenção gasosa e velocidade de circulação de líquido. Visando avaliar a influência do modelo de arraste nos resultados, foram utilizados os modelos de arraste de Schiller e Naumann (1933) e de Grace et al. (1976). As simulações foram realizadas utilizando a versão acadêmica do *software* ANSYS Fluent® 2022 R2. Para simplificar as simulações, considerou-se um diâmetro uniforme para as bolhas de ar. Na região do *riser*, verificou-se uma boa concordância entre os valores simulados e experimentais, sendo o modelo de arraste de Grace et al. (1976) o que permitiu a melhor aproximação entre os dados, tanto para a velocidade de circulação de líquido quanto para retenção gasosa. Do ponto de vista hidrodinâmico observou-se que o perfil de retenção gasosa não varia com a altura do biorreator, sendo o escoamento das bolhas caracterizado por um perfil estreito e contínuo ao longo do equipamento. Na região do *downcomer*, houve uma boa aproximação entre os valores da velocidade de circulação de líquido simulados e experimentais, porém para a retenção gasosa, os resultados simulados não foram satisfatórios para nenhum dos dois modelos de arraste testados, visto que, a presença da fase gasosa nessa região foi praticamente nula, ao contrário do que era esperado experimentalmente. Acredita-se que a ausência de bolhas nessa região foi devido ao desprendimento das mesmas da fase líquida ao atingirem o topo do biorreator, visto que a mistura gás-líquido não retornou para descer pelo *downcomer* após subir pelo *riser*, em razão do valor da altura do biorreator simulado não ter sido suficiente para permitir tal movimento de retorno. Ainda que não tenham sido obtidos resultados satisfatórios para a região do *downcomer*, considera-se que o presente trabalho trouxe contribuições positivas ao campo de estudo da hidrodinâmica de biorreatores pneumáticos, visto que foi possível validar uma metodologia para modelar o escoamento ar-água na região do *riser* em um biorreator *airlift* de circulação interna por meio da técnica de CFD.

Palavras-chave: biorreator pneumático, hidrodinâmica, retenção gasosa, velocidade de circulação de líquido, fluidodinâmica computacional.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Biorreator do tipo tanque agitado e aerado.	20
Figura 2 – Vista interna de um biorreator do tipo tanque agitado e aerado com impelidor do tipo Rushton.....	20
Figura 3 – Biorreator coluna de bolhas.	22
Figura 4 – Regiões de escoamento de um biorreator <i>airlift</i>	23
Figura 5 – Escoamento cíclico em biorreatores <i>airlift</i>	23
Figura 6 – Diferentes geometrias utilizadas na região de mistura.....	24
Figura 7 – Biorreator <i>airlift</i> de circulação externa.	25
Figura 8 – Biorreatores <i>airlift</i> de circulação interna. a) <i>Airlift</i> de tubos concêntricos. b) <i>Airlift split</i>	25
Figura 9 – Regimes de circulação em um biorreator <i>airlift</i> de circulação interna.	26
Figura 10 – Etapas de uma simulação CFD.	29
Figura 11 – Exemplo de malha estruturada.	30
Figura 12 – Exemplo de malha não-estruturada.....	31
Figura 13 – Relação entre o formato das bolhas e os adimensionais Re_b e E_o	37
Figura 14 – Geometria do problema de estudo.....	41
Figura 15 – Região de entrada de ar do biorreator.	42
Figura 16 – Geometria do domínio computacional.	43
Figura 17 – Região de entrada de ar vista sob o plano xz.	43
Figura 18 – Malha mais refinada aplicada ao domínio computacional.	44
Figura 19 – Vista interna do <i>riser</i> para malha menos refinada.	44
Figura 20 – a) Retenção gasosa ao longo do tempo monitorada no ponto escolhido; b) Localização na geometria do ponto monitorado.....	48
Figura 21 – a) Variação da retenção gasosa no <i>riser</i> ao longo do eixo x para as duas malhas testadas; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.....	49
Figura 22 – a) Velocidade de circulação do líquido em $y = 0,2$ metros; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.	50
Figura 23 – a) Velocidade de circulação do líquido em $y = 0,6$ metros; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.	51
Figura 24 – a) Retenção gasosa na região do <i>riser</i> em $y = 0,6$ metros; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.	52
Figura 25 – Distribuição das bolhas no <i>riser</i> em $y = 0,2$ metros.....	53

Figura 26 – a) Retenção gasosa na região do <i>downcomer</i> para diferentes alturas; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.	54
Figura 27 – a) Comparação entre valores simulados de retenção gasosa no <i>downcomer</i> ; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.	55
Figura 28 – Perfil de contorno de fração volumétrica para a fase gasosa no plano xy.	56
Figura 29 – Perfil de contorno de fração volumétrica para a fase gasosa em $y = 0,2$ metros. ...	57
Figura 30 - Perfil de contorno de fração volumétrica para a fase gasosa em $y = 0,6$ metros.	57
Figura 31 – Perfil vetorial da velocidade de circulação da fase líquida no plano xy.	58
Figura 32 – Perfil vetorial de circulação de líquido no plano xy, com detalhe para a região de mistura do biorreator.	59
Figura 33 – Perfil vetorial de circulação de líquido no plano xy, com detalhe para a região da base do biorreator.	60

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Processos químicos e bioquímicos com transferência de massa gás-líquido	18
Tabela 2 – Configurações definidas na etapa de pré-processamento	46

LISTA DE SÍMBOLOS

A_D	Área da seção transversal do <i>downcomer</i>	(m ²)
A_R	Área da seção transversal do <i>riser</i>	(m ²)
C_D	Coeficiente de arraste interfacial	(-)
C_D^{esf}	Coeficiente de arraste para bolhas em formato de esfera	(-)
C_D^{elip}	Coeficiente de arraste para bolhas em formato de elipse	(-)
C_D^{touca}	Coeficiente de arraste para bolhas em formato de touca	(-)
C_μ	Constante do modelo de turbulência $k - \epsilon$	(-)
$C_{\mu p}$	Constante do modelo de turbulência $k - \epsilon$	(-)
$C_{\epsilon 1}$	Constante do modelo de turbulência $k - \epsilon$	(-)
$C_{\epsilon 1}$	Constante do modelo de turbulência $k - \epsilon$	(-)
D_b	Diâmetro da bolha	(m)
$E\ddot{o}$	Número de Eötvos	(-)
g	Aceleração da gravidade	(m.s ⁻²)
J	Função interna do modelo de Grace et al. (1976)	(-)
k_i	Energia cinética turbulenta da fase “i”	m ² .s ⁻²
M	Número de Morton	(-)
M_i	Transferência de quantidade de movimento por unidade de volume devido às forças interfaciais atuantes na fase “i”	(kg.m ⁻² .s ⁻²)
$M_{i,j}^D$	Força de arraste por unidade de volume atuante na fase “i” devido à presença da fase “j”	(kg.m ⁻² .s ⁻²)
$M_{i,j}^L$	Força de sustentação por unidade de volume atuante na fase “i” devido à presença da fase “j”	(kg.m ⁻² .s ⁻²)
$M_{i,j}^{TD}$	Força de dispersão turbulenta por unidade de volume atuante na fase “i” devido à presença da fase “j”	(kg.m ⁻² .s ⁻²)

$M_{i,j}^{VM}$	Força de massa virtual por unidade de volume atuante na fase “i” devido à presença da fase “j”	(kg.m ⁻² .s ⁻²)
$M_{G,L}^D$	Força de arraste por unidade de volume atuante na fase líquida devido à presença da fase gasosa	(kg.m ⁻² .s ⁻²)
P_i	Pressão da fase “i”	(kg.m.s ⁻²)
Q_G	Vazão de alimentação de gás no <i>riser</i>	(m ³ .s ⁻¹)
Re_b	Número de Reynolds da bolha	(-)
ρ_i	Densidade da fase “i”	(kg.m ⁻³)
ρ_{ref}	Densidade de referência	(kg.m ⁻³)
ρ_L	Densidade da fase líquida	(kg.m ⁻³)
ρ_c	Densidade da fase contínua	(kg.m ⁻³)
S_i	Transferência de quantidade de movimento por unidade de volume devido às forças externas atuantes na fase “i”	(kg.m ⁻² .s ⁻²)
S_i^E	Força de empuxo por unidade de volume atuante na fase “i”	(kg.m ⁻² .s ⁻²)
σ	Tensão superficial	(kg.s ⁻²)
σ_k	Constante do modelo de turbulência $k - \epsilon$	(-)
σ_ϵ	Constante do modelo de turbulência $k - \epsilon$	(-)
t_L	Tempo gasto por um elemento de fluido para percorrer a distância x_L	(s)
U_G	Velocidade superficial do gás no <i>riser</i>	(m.s ⁻¹)
U_{CL}	Velocidade superficial de circulação do líquido	(m.s ⁻¹)
V_G	Volume de gás no biorreator	(m ³)
V_L	Volume de líquido no biorreator	(m ³)
x_L	Distância percorrida por um elemento de fluido ao longo do biorreator	(m)

α_d	Fração volumétrica da fase dispersa	(-)
α_G	Fração volumétrica da fase gasosa	(-)
α_i	Fração volumétrica da fase “i”	(-)
ε	Retenção gasosa em um ponto no espaço do biorreator	(-)
ε_G	Retenção gasosa global no biorreator	(-)
ε_R	Retenção gasosa no <i>riser</i>	(-)
ε_D	Retenção gasosa no <i>downcomer</i>	(-)
ε_i	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta da fase i	$\text{m}^2.\text{s}^{-3}$
λ	Função interna do modelo de Grace et al. (1976)	(-)
μ_i	Viscosidade dinâmica da fase “i”	$(\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1})$
$\mu_{ef,i}$	Viscosidade efetiva da fase “i”	$(\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1})$
μ_L	Viscosidade dinâmica da fase líquida	$(\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1})$
μ_{ref}	Viscosidade de referência da fase líquida	$(\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1})$
$\mu_{turb,i}$	Viscosidade turbulenta da fase “i”	$(\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1})$
v_i	Velocidade da fase “i”	$(\text{m}.\text{s}^{-1})$
v_G	Velocidade da fase gasosa	$(\text{m}.\text{s}^{-1})$
v_L	Velocidade da fase líquida	$(\text{m}.\text{s}^{-1})$
v_∞	Velocidade terminal da bolha	$(\text{m}.\text{s}^{-1})$
v_d	Velocidade da fase dispersa	$(\text{m}.\text{s}^{-1})$
v_c	Velocidade da fase contínua	$(\text{m}.\text{s}^{-1})$
∂	Operador diferencial del	(-)
∇	Operador diferencial nabla	
\times	Notação de produto vetorial	(-)

⊗ Notação de produto diádico

(-)

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	16
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	18
2.1.	Biorreatores.....	18
2.1.1.	Biorreatores convencionais.....	20
2.1.2.	Biorreatores pneumáticos	21
2.1.2.1.	Coluna de bolhas.....	21
2.1.2.2.	<i>Airlift</i>	22
2.1.2.3.	Regimes de circulação	25
2.1.3.	Parâmetros de desempenho em biorreatores <i>airlift</i>	26
2.1.3.1.	Velocidade superficial do gás	27
2.1.3.2.	Velocidade superficial de circulação do líquido.....	27
2.1.3.3.	Retenção Gasosa	28
2.2.	Fluidodinâmica Computacional.....	28
2.2.1.	Criação da geometria	29
2.2.2.	Geração da malha computacional	30
2.2.2.1.	Tipos de malhas	30
2.2.2.2.	Teste de independência de malhas.....	31
2.2.3.	Pré-processamento	32
2.2.4.	Processamento	32
2.2.5.	Pós-processamento.....	32
2.3.	Modelagem matemática.....	33
2.3.1.	Abordagem Fenomenológica.....	33
2.3.2.	Equações de Conservação da Massa e Quantidade de Movimento	34
2.3.3.	Forças interfaciais	35
2.3.3.1.	Arraste.....	35
2.3.3.2.	Sustentação	37
2.3.3.3.	Dispersão Turbulenta.....	38
2.3.3.4.	Massa virtual.....	38
2.3.4.	Turbulência	38
3.	METODOLOGIA	41
3.1.	Criação da geometria e geração da malha	41
3.2.	Pré-Processamento.....	45

3.3.	Processamento	47
4.	RESULTADOS E DISCUSSÃO	48
4.1.	Teste de Independência de Malhas	48
4.2.	Influência dos modelos de arraste	50
4.3.	Aspectos hidrodinâmicos	55
5.	CONSIDERAÇÕES FINAIS	61
	REFERÊNCIAS	63

1. INTRODUÇÃO

Biorreatores são equipamentos utilizados para converter matérias-primas em produtos de valor agregado por meio da atividade catalítica de enzimas, microrganismos e células animais ou vegetais. Esses equipamentos fornecem um ambiente físico e químico adequado para a produção de um produto de interesse através de sua operação em condições controladas de temperatura, pH, oxigênio dissolvido e concentração de nutrientes específicos (RODRIGUEZ, 2015).

Dentre a vasta diversidade de configuração de biorreatores existentes, destacam-se o convencional do tipo tanque agitado e aerado e os biorreatores pneumáticos. Os modelos convencionais são agitados mecanicamente por meio de impelidores conectados a um eixo central, sendo a injeção de gás realizada através de um aspersor localizado na base do equipamento. Já os biorreatores pneumáticos são definidos pela ausência de partes móveis, sendo a agitação do meio reacional promovida pela injeção de gás, em geral ar ou ar enriquecido com oxigênio, na base do equipamento. Esse modelo de biorreator apresenta algumas vantagens frente ao modelo convencional como menor consumo de energia, aumento da transferência de oxigênio, redução do cisalhamento celular, menor possibilidade de contaminação durante o processo, facilidade de construção e aumento de escala (BADINO ET AL., 2016).

Os biorreatores pneumáticos podem ser divididos em duas categorias principais: coluna de bolhas e *airlift*. Em ambas as configurações a homogeneização e aeração do meio reacional é feita por meio da injeção de gás na base do equipamento. O modelo *airlift* possui uma configuração muito similar ao coluna de bolhas, sendo a principal diferença atribuída à inserção de anteparos específicos no interior do vaso reacional o que possibilita a recirculação do líquido no interior do equipamento, o que não acontece no modelo de coluna de bolhas. Devido ao escoamento cíclico que ocorre no biorreator *airlift*, as fases gasosa e líquida são postas mais intimamente em contato o que contribui para maiores taxas de transferência de calor e massa quando comparada ao modelo de coluna de bolhas.

Todavia, a ampla utilização de biorreatores pneumáticos em escala industrial ainda é limitada por alguns fatores, dentre eles a falta de uma compreensão mais profunda acerca dos mecanismos envolvidos nos fenômenos de transferência de quantidade de movimento, calor e massa nesses equipamentos, o que torna difícil o aumento de escala desses biorreatores (MENDES, 2016). Nesse cenário, a Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics*, sigla CFD) tem se mostrado como uma importante ferramenta nos estudos de otimização envolvendo biorreatores pneumáticos. Por meio de técnicas de CFD é possível

estudar os fenômenos de transporte que ocorrem no interior desses equipamentos com um maior nível de detalhamento, obtendo informações fundamentais para o projeto e análise de desempenho dos biorreatores.

As técnicas de simulação computacional consistem na resolução de equações de balanços locais de quantidade de movimento, massa e energia através de métodos numéricos, possibilitando a obtenção de perfis espaciais e transientes de diversas variáveis como velocidade, pressão, fração volumétrica, temperatura, entre outras. O rápido avanço no poder de processamento dos computadores vem permitindo a utilização das técnicas de CFD para estudar problemas cada vez mais complexos. Algumas das vantagens no uso de CFD são: diminuição de custos com montagem de experimentos; obtenção de resultados mais rápidos; obtenção de informações sobre o escoamento em regiões de difícil medição experimental; flexibilidade na alteração de parâmetros de projeto e minimização de riscos (BICALHO, 2015).

O presente trabalho teve como objetivo analisar a hidrodinâmica de um biorreator *airlift* de circulação interna através da modelagem numérica do escoamento gás-líquido no equipamento por meio de técnicas de CFD. Para validar a modelagem numérica utilizada no trabalho, os resultados obtidos através das simulações CFD foram comparados com os resultados experimentais do trabalho de Ziegenhein et al. (2016). Os parâmetros de desempenho analisados foram a retenção gasosa e a velocidade de circulação de líquido, sendo os mesmos analisados localmente em diferentes posições nas regiões do *riser* e *downcomer*.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Esta seção destina-se a fornecer os principais fundamentos teóricos utilizados no presente trabalho, com foco em biorreatores pneumáticos do tipo *airlift* e fluidodinâmica computacional.

2.1. Biorreatores

Biorreatores, também conhecidos como reatores bioquímicos, são dispositivos utilizados para converter matérias-primas em produtos de valor agregado através do uso de células (animais ou vegetais) e enzimas como biocatalisadores. Para que a produção do produto de interesse na reação bioquímica ocorra de maneira satisfatória, os biorreatores devem fornecer um ambiente físico-químico adequado para tal e isso ocorre por meio do controle de condições como pH, temperatura, cisalhamento, agitação, concentração de oxigênio, vitaminas e sais no interior desses dispositivos. Esses dispositivos são utilizados em sua maioria em operações de transferência de massa gás-líquido, sendo que o tipo de gás injetado no meio reacional varia de acordo com a entidade biológica utilizada e a finalidade da operação. A Tabela 1 apresenta alguns processos químicos e bioquímicos que utilizam o fenômeno de transferência de massa gás-líquido.

Processo	Elemento transferido	Produto
Hidrogenação de lipídios (óleos e gorduras)	H ₂	Gordura hidrogenada (margarina)
Carbonatação de alcális	CO ₂	Carbonatos e bicarbonatos
Oxidação de glicose	O ₂	Gliconatos (cálcio, magnésio, sódio e zinco)
Cultivo de algas e cianobactérias	CO ₂	Carboidratos, lipídeo (biodiesel) e fármacos
Cultivo de leveduras	O ₂	Fermento biológico, proteína unicelular e lipídeo (biodiesel)
Cultivo de bactérias (<i>Clostridium sp.</i>)	Gás de síntese (CO/ CO ₂ /H ₂)	Biocombustíveis (etanol e butanol)

Cultivo de bactérias (<i>Escherichia coli.</i>)	O ₂	Vacinas
Cultivo de bactérias e fungos filamentosos	O ₂	Ácidos orgânicos, antibióticos, enzimas e vitaminas
Cultivo de células	O ₂	Anticorpos monoclonais, fatores VIII e IX (hemofilia), hormônios, interferon e vacinas
Fermentação extrativa	CO ₂ /N ₂	Combustíveis (etanol e butanol)

Fonte: Badino et al. (2016)

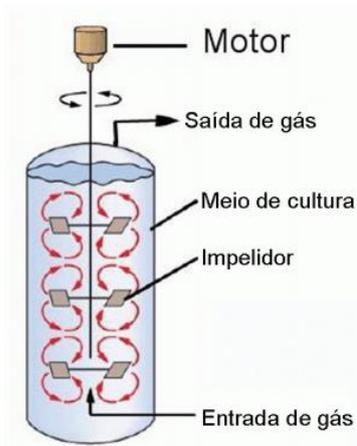
Badino et al. (2016) apresenta alguns exemplos de processos conduzidos em biorreatores, dentre os quais alguns serão citados a seguir. Dentre os processos existentes, a aplicação mais utilizada é a transferência de oxigênio da fase gasosa para a fase líquida, utilizada em cultivos aeróbios ou reações enzimáticas que demandem oxigênio. Em alguns cultivos anaeróbios, é utilizado um gás inerte visando a homogeneização do sistema reacional e transferência de calor. Uma outra aplicação relacionada com sistemas anaeróbios se dá quando o elemento transferido da fase gasosa é utilizado como substrato para os microrganismos, como no caso de cultivos *Clostridium sp.*, onde o gás de síntese (CO/CO₂/H₂) é utilizado para produção de biocombustíveis como butanol e etanol. Também observa-se aplicações em que a fase gasosa pode ser utilizada como veículo para extração ou arraste de um componente presente na fase líquida, sendo esta operação conhecida como esgotamento ou *stripping*. Um caso conhecido de *stripping* é a produção de etanol através do cultivo de *Saccharomyces cerevisiae* em biorreatores pneumáticos, que utiliza gás carbônico (CO₂) como gás de arraste, em que parte do etanol presente na fase líquida se vaporiza e é arrastado pela corrente de CO₂ minimizando o problema de inibição pelo produto e aumenta a produtividade do processo.

Embora existam diversos modelos de biorreatores, os mais comumente utilizados em bioprocessos são os biorreatores convencionais do tipo tanque agitado e aerado, tendo estes grande aplicação em escala industrial e os biorreatores pneumáticos, utilizados majoritariamente em escala laboratorial, sendo que este último pode ainda ser dividido entre dois tipos: coluna de bolhas e *airlift*.

2.1.1. Biorreatores convencionais

Os biorreatores podem ser classificados conforme a presença ou ausência de partes móveis em sua configuração. Biorreatores convencionais são caracterizados pela presença de impelidores, conectados a um eixo giratório, que tem a função de promover a agitação e homogeneização do meio reacional. A injeção de gás é feita por meio de aspersores, localizados na base do equipamento. A Figura 1 ilustra a configuração de um biorreator do convencional do tipo tanque agitado e aerado.

Figura 1 – Biorreator do tipo tanque agitado e aerado.



Fonte: Cerri (2005).

Dentre os vários modelos de impelidores existentes, o mais utilizado é o do tipo turbina de seis pás planas ou tipo Rushton. A Figura 2 mostra o interior de um biorreator convencional do tipo tanque agitado e aerado com dois impelidores do tipo Rushton.

Figura 2 – Vista interna de um biorreator do tipo tanque agitado e aerado com impelidor do tipo Rushton.



Fonte: Thomasi (2010).

Ainda que esse modelo de biorreator seja o mais utilizado em escala industrial, devido à sua alta eficiência, Badino et al. (2016) afirma que é necessário ter cautela quanto à sua aplicação em bioprocessos que utilizam células ou microrganismos, visto que a tensão cisalhante à qual os organismos são expostos podem afetá-los de forma irreversível, causando alterações morfológicas, produção de compostos indesejáveis e até mesmo morte celular. Além disso as partes móveis presentes no biorreator podem contribuir para uma maior possibilidade de contaminação durante o processo, caso não sejam mantidos altos padrões de limpeza e esterilização do equipamento.

As desvantagens observadas no uso de biorreatores do tipo tanque agitado e aerado podem ser minimizadas através do uso de biorreatores pneumáticos, os quais serão melhor detalhados a seguir.

2.1.2. Biorreatores pneumáticos

Biorreatores pneumáticos são classificados como biorreatores não convencionais devido ao fato de não possuírem partes móveis em sua configuração. Nesses dispositivos, a agitação do meio reacional é feita unicamente pela injeção de um gás na base do equipamento, garantindo assim a homogeneização e gaseificação do meio. A configuração não convencional desses equipamentos os posiciona como vantajosos em relação aos biorreatores do tipo tanque agitado e aerado.

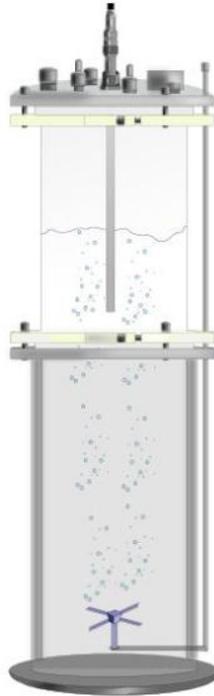
Badino et al. (2016) apresenta algumas vantagens da utilização de biorreatores pneumáticos: acentuada redução no consumo energético visto que a agitação e gaseificação são feitas de forma conjunta, menor cisalhamento imposto às células no interior do equipamento devido à ausência de impelidores, menor possibilidade de contaminação durante o processo já que não existem partes móveis e conseqüentemente redução com custos de limpeza e esterilização do equipamento.

Os biorreatores pneumáticos podem ser divididos em duas classes principais: coluna de bolhas e *airlift*.

2.1.2.1. Coluna de bolhas

O biorreator do tipo coluna de bolhas apresenta uma configuração bastante simples, sendo composto por uma coluna, equipada com um aspersor em sua base por onde um gás ou uma mistura de gases são injetados promovendo a mistura e aeração do meio reacional. O gás, escoando ascendentemente, em razão de sua menor densidade, e arrasta consigo o líquido gerando um movimento aleatório e caótico no interior do equipamento. A Figura 2 ilustra um biorreator do tipo coluna de bolhas.

Figura 3 – Biorreator coluna de bolhas.



Fonte: Mendes (2016).

2.1.2.2. *Airlift*

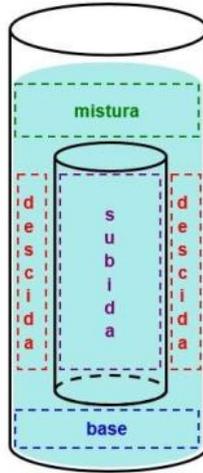
Ao contrário do modelo coluna de bolhas, em que o escoamento apresenta um perfil caótico e aleatório da fase líquida devido ao escoamento ascendente de gás, no modelo *airlift* verifica-se um escoamento cíclico, resultado da inserção de anteparos específicos em seu interior, como tubos (*draft tubes*) ou placas (BADINO ET AL, 2016). Devido a esse perfil de escoamento os biorreatores *airlift* são designados como reatores de circulação ou *loop reactors*.

Em um biorreator *airlift*, existem quatro regiões ou zonas específicas por onde o escoamento ocorre, sendo elas:

- Subida (*riser*): região na qual o gás é borbulhado no biorreator e o líquido escoar de forma ascendente.
- Descida (*downcomer*): região paralela ao *riser* por onde o fluido escoar de forma descendente.
- Base (*bottom*): conexão entre o *riser* e *downcomer* pelo fundo do biorreator.
- Região de mistura (*degassing zone* ou *gas-liquid separator*): conexão entre o *riser* e *downcomer* pelo topo do biorreator, onde ocorre o desprendimento total ou parcial da fase gasosa retida na fase líquida.

Por meio da Figura 4 é possível visualizar as quatro zonas de escoamento em um biorreator *airlift*.

Figura 4 – Regiões de escoamento de um biorreator *airlift*.

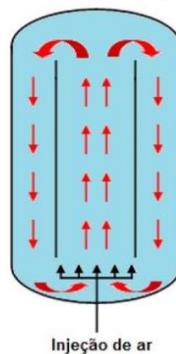


Fonte: Esperança (2018).

O princípio de funcionamento de biorreatores *airlift* se fundamenta na diferença de densidade entre a dispersão gás-líquido presente nas regiões do *riser* e *downcomer* (ESPERANÇA, 2018). O início do escoamento ocorre com a injeção de gás, através de aspersores localizados no início do *riser*, na fase líquida, o que causa uma diminuição de sua densidade e conseqüentemente promove a ascensão da mistura gás-líquido formada. Ao atingir o topo do biorreator, parte do gás presente na fase líquida se desprende, o que leva a mistura gás-líquido escoar de forma descendente pelo *downcomer*, devido ao aumento de densidade da mesma. Após escoar pelo *downcomer*, a dispersão atinge a base do biorreator, uma região caracterizada por elevada perda de carga, e inicia novamente a subida pelo *riser* reiniciando o circuito de circulação.

A Figura 5 ilustra o escoamento cíclico que ocorre em biorreatores do tipo *airlift*.

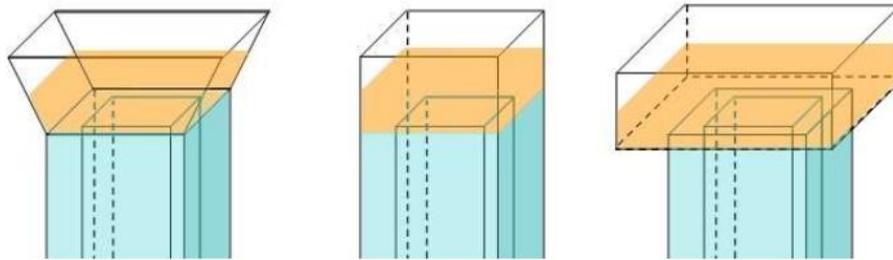
Figura 5 – Escoamento cíclico em biorreatores *airlift*.



Fonte: Esperança (2018).

É importante ressaltar que a depender do *design* utilizado na geometria da região de mistura, grande parte do gás proveniente do *riser* pode recircular pelo *downcomer* ou separar-se totalmente da fase líquida, controlando a força motriz para o escoamento do líquido. Logo, a geometria da região de mistura afeta toda a hidrodinâmica e transferência de oxigênio em biorreatores *airlift*, e o efeito sobre a performance do reator é uma combinação da capacidade de separar o gás do líquido e da sua resistência hidráulica. No projeto desta região, considera-se o vão livre de topo (distância entre a parte superior do biorreator e o nível de líquido estático) como parâmetro geométrico característico (ESPERANÇA, 2018). A Figura 6 apresenta alguns exemplos de geometrias que podem ser utilizadas no *design* da região de mistura de um biorreator.

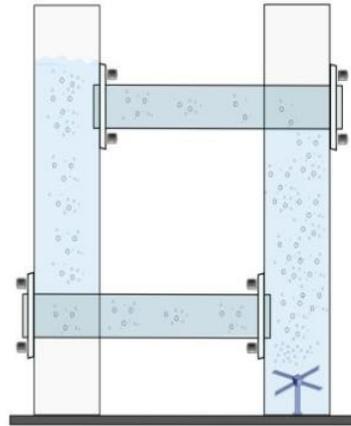
Figura 6 – Diferentes geometrias utilizadas na região de mistura.



Fonte: Esperança (2018).

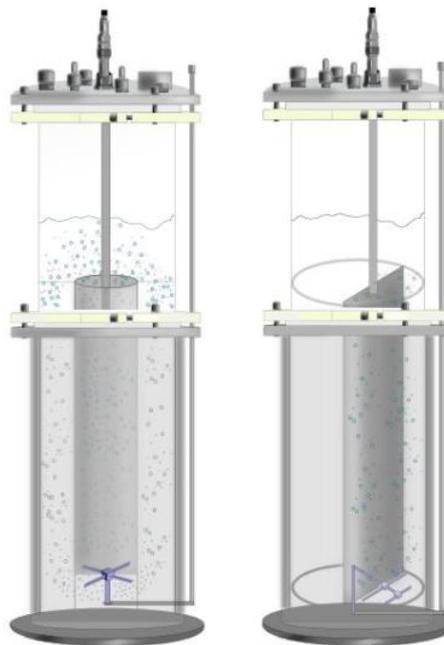
Os biorreatores *airlift* podem ser subdivididos ainda em duas categorias, de acordo com a posição relativa entre as regiões do *riser* e *downcomer*: *airlift* de circulação externa (ACE) e *airlift* de circulação interna (ACI). Na configuração ACE, ilustrada na Figura 7, as regiões de *riser* e *downcomer* estão separadas, sendo conectadas nas partes inferior e superior através de dutos horizontais, formando assim o circuito de circulação. Já na configuração ACI, ilustrada na Figura 8, as regiões de *riser* e *downcomer* se encontram juntas em um mesmo compartimento, sendo separadas apenas por anteparos que podem ser uma placa defletora (*airlift split*) ou um tubo concêntrico (*airlift* de tubos concêntricos).

Figura 7 – Biorreator *airlift* de circulação externa.



Fonte: Mendes (2016).

Figura 8 – Biorreatores *airlift* de circulação interna. a) *Airlift* de tubos concêntricos. b) *Airlift split*.



(a)

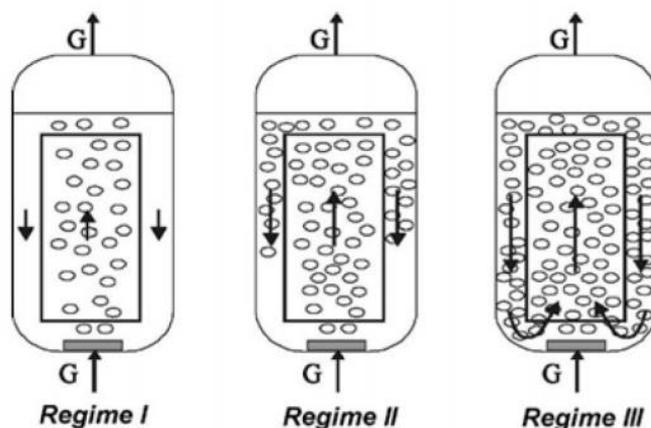
(b)

Fonte: Mendes (2016).

2.1.2.3. Regimes de circulação

Van Benthum et al. (1999) observaram e definiram três regimes de circulação em um biorreator *airlift* de circulação interna, com base na quantidade de gás presente na região do *downcomer*. A Figura 9 ilustra os regimes de circulação.

Figura 9 – Regimes de circulação em um biorreator *airlift* de circulação interna.



Fonte: Cerri (2005).

O Regime I é caracterizado pela ausência de bolhas na região do *downcomer*. Esse regime ocorre em condições de baixa vazão volumétrica de gás na alimentação, em que a velocidade de circulação de líquido no *downcomer* é menor que a velocidade de subida das bolhas, ou seja, não é suficiente para promover o arraste das mesmas na região de descida.

O Regime II é definido pela estagnação das bolhas na região do *downcomer*. Com o aumento no valor da vazão de alimentação de gás, a velocidade de líquido na região do *downcomer* se torna praticamente igual à velocidade de subida das bolhas no *riser*, levando a estagnação das mesmas.

O Regime III é estabelecido quando ocorre recirculação completa das bolhas em todo o biorreator. Com um pequeno aumento no valor da vazão de alimentação de gás, o equilíbrio do sistema é perturbado e a velocidade do líquido no *downcomer* supera a velocidade de subida das bolhas, que então passam a recircular por todo o biorreator. Este regime ocorre em altas vazões de alimentação do gás.

2.1.3. Parâmetros de desempenho em biorreatores *airlift*

Segundo Esperança (2018), o desempenho de um biorreator pode ser analisado sob duas abordagens. Na primeira, o biorreator é observado do ponto de vista clássico da Engenharia Bioquímica, ou seja, avalia-se o efeito de condições como temperatura, pH, agitação, morfologia e espécies de microrganismos, substrato, meio de cultivo, forma de operação do biorreator (batelada, batelada alimentada ou contínuo), na produção de um determinado produto de interesse. Na segunda abordagem, enxerga-se o biorreator como uma operação unitária, em que se avalia os efeitos de condições operacionais como o tipo de fluido, configuração e geometria do biorreator e parâmetros de desempenho relacionados à hidrodinâmica do

equipamento como velocidade de circulação do líquido, retenção gasosa, entre outros. Esta última abordagem é muito aplicada para auxiliar no projeto, operação e variação de escala de biorreatores pneumáticos.

Mendes (2016) afirma que a análise do comportamento hidrodinâmico de um processo fundamenta a compreensão do sistema estudado como um todo, visto que os fenômenos envolvidos na transferência de movimento influenciam diretamente na transferência de calor e massa entre as fases e no cisalhamento imposto pelo sistema. Portanto, no presente trabalho escolheu-se utilizar a segunda abordagem mencionada, visando estudar a hidrodinâmica de um biorreator *airlift* de circulação interna.

Embora existam diversos parâmetros de desempenho relacionados ao estudo da hidrodinâmica em biorreatores pneumáticos como retenção gasosa, velocidade de circulação de líquido, taxa de cisalhamento, coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (ESPERANÇA, 2018), serão apresentados a seguir apenas os parâmetros mais relevantes para o desenvolvimento do presente trabalho.

2.1.3.1. Velocidade superficial do gás

A velocidade superficial do gás na região de subida ou *riser* é a única variável independente na operação de biorreatores *airlift* e pode ser definida conforme a Equação 1 (CERRI, 2005):

$$U_G = \frac{Q_G}{A_R} \quad (1)$$

Em que Q_G é a vazão volumétrica de alimentação de gás e A_R é a área da seção transversal da região do *riser*.

2.1.3.2. Velocidade superficial de circulação do líquido

A velocidade superficial de circulação do líquido é definida conforme a Equação 2 (CERRI, 2005):

$$U_{CL} = \frac{x_L}{t_L} \quad (2)$$

Em que x_L é distância percorrida por um elemento de fluido ao longo do biorreator e t_L é o tempo gasto durante o percurso.

Essa variável está diretamente ligada à diferença de densidade entre as fases líquida presentes no *riser* e no *downcomer*. Portanto, quanto maior for essa diferença, maior será a velocidade de circulação do líquido.

2.1.3.3. Retenção Gasosa

A retenção gasosa pode ser definida como a fração volumétrica da fase gasosa presente na mistura gás-líquido, podendo esta variável ser dividida entre retenção gasosa global (ε_G), retenção gasosa no *riser* (ε_R) e retenção gasosa no *downcomer* (ε_D) (CHISTI, 1989). A retenção gasosa global, é definida conforme a Equação 3 (CERRI, 2005):

$$\varepsilon_G = \frac{V_G}{V_G + V_L} = \frac{A_R \cdot \varepsilon_R + A_D \cdot \varepsilon_D}{A_R + A_D} \quad (3)$$

Em que V_G é o volume de gás, V_L é o volume de líquido, A_R é a área da seção transversal do *riser* e A_D é a área da seção transversal da região do *downcomer*.

A determinação da retenção gasosa no *riser* e *downcomer* tem grande importância no projeto de biorreatores *airlift*, visto que, através desses parâmetros consegue-se determinar a força motriz para a circulação de líquido no sistema ($\varepsilon_R - \varepsilon_D$), o que permite uma melhor compreensão da hidrodinâmica desses equipamentos (MENDES, 2016).

2.2. Fluidodinâmica Computacional

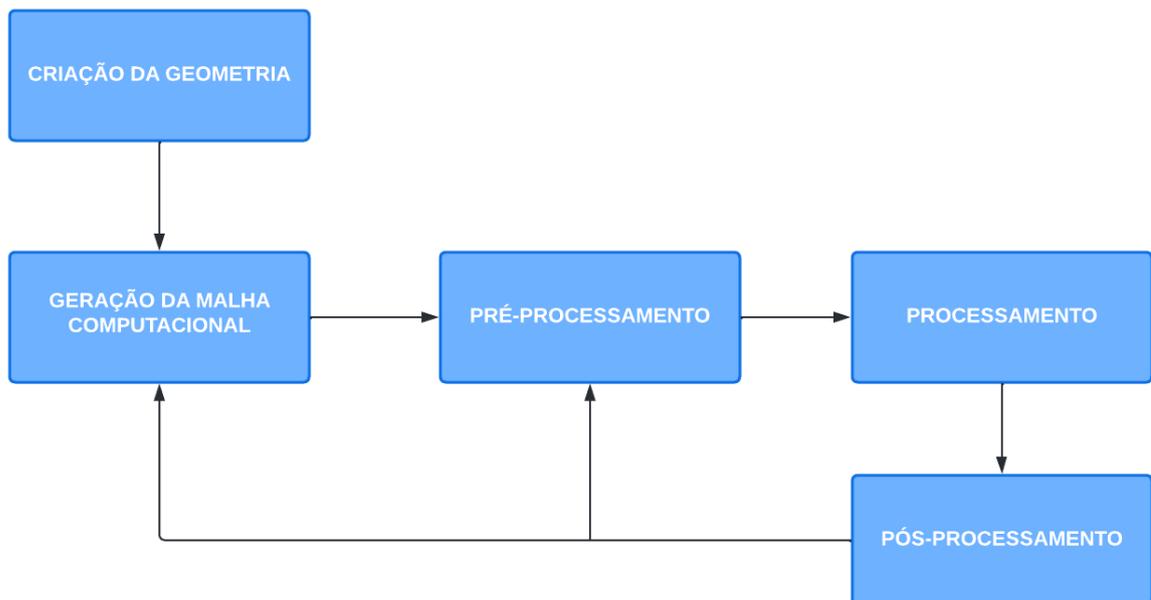
A Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics*) ou CFD pode ser definida como um conjunto de técnicas numéricas avançadas que permitem a simulação computacional de escoamentos de fluidos e a análise detalhada dos mesmos através da obtenção de perfis espaciais e transientes de variáveis de interesse como velocidade, pressão, fração volumétrica, temperatura, entre outras (RODRIGUEZ, 2015). Para a obtenção dos resultados, é necessária a resolução de equações diferenciais de balanços de quantidade de movimento, massa e energia que descrevem um determinado problema de interesse, sendo que essas equações podem se mostrar demasiadamente complexas em muitos casos, o que justifica a utilização de métodos numéricos robustos para resolvê-las.

Em simulações CFD, as equações diferenciais são resolvidas através da substituição das derivadas existentes por expressões algébricas que envolvem a função de interesse. Para isso é necessário integrar a equação diferencial e as diversas formas de fazê-lo é o que caracteriza um método numérico (SANTOS, 2008). Dentre os métodos numéricos existentes, o método dos volumes finitos é o mais utilizado em *softwares* de CFD, sendo caracterizado por apresentar equações aproximadas que satisfazem a conservação de determinada propriedade no nível de

volumes elementares. Desse modo, é necessário dividir a geometria que descreve o problema de interesse em pequenos volumes finitos, denominados células, para que as equações discretizadas sejam aplicadas em cada um dos volumes gerados. Especificadas as condições iniciais, de contorno, e as demais propriedades associadas ao escoamento, as equações discretizadas são resolvidas para cada célula de forma iterativa, sendo que a cada iteração a resposta obtida é melhorada. A simulação termina quando um critério numérico de parada é satisfeito, sendo a solução final retornada para o usuário. É importante ressaltar a necessidade de se verificar se os resultados obtidos através da simulação computacional são confiáveis, ou seja, se eles representam de forma coerente a realidade do problema estudado; nesse caso deve-se realizar a comparação entre os valores simulados e experimentais e, caso seja necessário, modificar alguma etapa da simulação visando uma melhor aproximação entre os valores.

A realização de uma simulação CFD compreende cinco etapas principais, as quais são indicadas na Figura 10. Estas etapas serão melhor descritas nas seções a seguir.

Figura 10 – Etapas de uma simulação CFD.



Fonte: adaptado de Esperança (2018).

2.2.1. Criação da geometria

A primeira etapa para realização de uma simulação utilizando-se a técnica de CFD é a criação da geometria que irá descrever o problema estudado, também chamada de domínio computacional. Para isso são utilizados *softwares* específicos contendo ferramentas de desenho que permitem a criação de uma representação virtual do domínio real do problema. A depender

das configurações da máquina e *software* utilizado é possível criar geometrias complexas, que não apresentam um padrão geométrico definido apenas pelas formas básicas, como triângulos, quadriláteros e círculos (RODRIGUEZ, 2015).

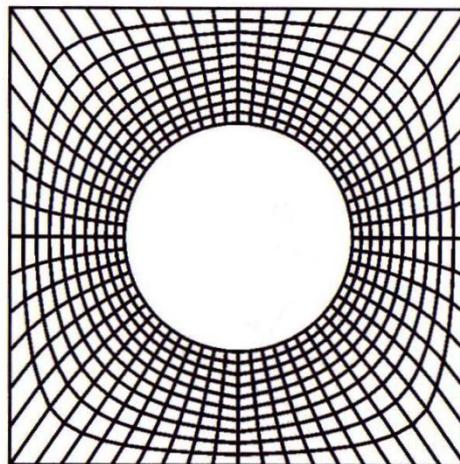
2.2.2. Geração da malha computacional

Após a criação da geometria é necessário gerar a malha computacional, que consiste em dividir o domínio em pequenos volumes finitos, denominadas células computacionais. As malhas computacionais podem ser divididas em três tipos: estruturadas, não-estruturadas e híbridas.

2.2.2.1. Tipos de malhas

As malhas do tipo estruturadas são malhas dispostas em um padrão regular repetido, denominado bloco, podendo estes serem quadriláteros em 2D ou elementos hexaédricos em 3D (DUARTE, 2006). Esse tipo de malhas possui um número constante de células vizinhas, o que permite que após a discretização das equações diferenciais seja gerado um sistema de equações algébricas com matriz de coeficientes diagonal. A depender do método de resolução do sistema linear gerado, somente os elementos não-nulos da matriz serão manuseados, o que irá influenciar fortemente na taxa de convergência e tempo de simulação (MALISKA, 2004). As desvantagens na utilização de malhas estruturadas residem no fato de que algumas geometrias possuem regiões complexas que muitas vezes exigem um tempo e estudo maiores para geração da malha ou até mesmo podem não comportar blocos estruturados. A Figura 11 exemplifica uma malha 2D do tipo estruturada.

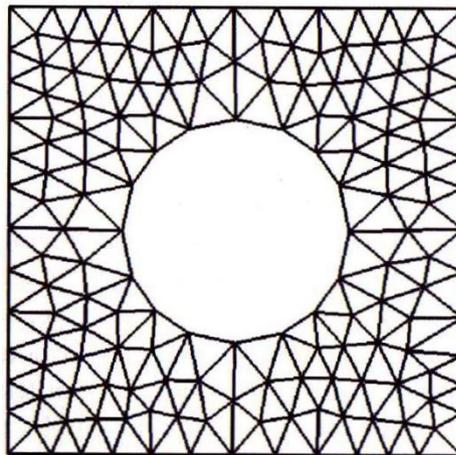
Figura 11 – Exemplo de malha estruturada.



Fonte: Maliska (2004).

Uma malha do tipo não estruturada agrupa os elementos de maneira aleatória, sem um padrão regular e repetido. Esse tipo de malha geralmente utiliza elementos triangulares em 2D e tetraédricos em 3D em sua composição, porém, também é possível gerar malhas não-estruturadas a partir de elementos hexaédricos em 3D (SANTOS, 2008). Em malhas não-estruturadas, pode-se ter um número variável de células vizinhas para cada volume computacional, o que contribui para a geração de matrizes com banda diagonal variável, exigindo métodos mais elaborados para a resolução dos sistemas lineares e conseqüentemente um maior tempo de simulação (MALISKA, 2004). Uma vantagem relacionada à utilização de malhas não-estruturadas é que elas são aplicáveis em muitas geometrias complexas, em que a geração de uma malha estruturada seria demasiadamente difícil e demorada. A Figura 12 apresenta um exemplo de uma malha 2D não-estruturada.

Figura 12 – Exemplo de malha não-estruturada.



Fonte: Maliska (2004).

As malhas do tipo híbridas são caracterizadas pela combinação de malhas estruturadas e não-estruturadas em um mesmo domínio computacional. Essa configuração é muito útil em geometrias com regiões com níveis variados de complexidade, em que pode-se utilizar um tipo ou o outro em determinada região visando a facilidade de aplicação.

2.2.2.2. Teste de independência de malhas

É importante ressaltar que quanto maior for o número de células em um domínio computacional, mais precisa será a solução, entretanto, maior será o tempo gasto na simulação visto que o esforço computacional é maior nesse caso. Desse modo, é importante encontrar um limite a partir do qual o aumento no número de células em uma malha não altera os resultados obtidos, sendo essa análise possível através da realização de um teste de independência de

malhas. Nesse teste são realizadas simulações com malhas contendo diferentes números de células, sendo analisado um mesmo parâmetro em todas as simulações (BICALHO, 2015).

2.2.3. Pré-processamento

Após a geração da malha, é necessário realizar a modelagem matemática que descreve o problema de interesse. Isso é feito a partir da seleção de modelos pré-definidos no *software* de CFD utilizado. Além dos modelos que melhor representam o escoamento, são definidas as condições iniciais e de contorno, propriedades dos fluidos utilizados, número de iterações, tempo de simulação, critério de convergência, entre outros.

Ao final da etapa de pré-processamento é gerado um arquivo de dados, denominado *case*, contendo todas as informações acerca do problema.

2.2.4. Processamento

Nessa etapa, o *solver* ou o *software* propriamente dito, resolve as equações diferenciais para cada volume de controle existente no domínio computacional, dando início a um processo iterativo que pode demorar conforme a complexidade do problema e capacidade de processamento do computador utilizado. A simulação termina quando os critérios de parada, como o número de iterações e critério de convergência, definidos pelo usuário são alcançados. Ao término da simulação é gerado um arquivo de dados, denominado *data*, contendo os resultados obtidos.

O tempo gasto durante a etapa de processamento irá variar conforme o poder de processamento do computador utilizado, sendo assim, é importante ao usuário conhecer a complexidade do problema de estudo e o poder de processamento disponível visando realizar possíveis simplificações na modelagem do problema para poupar tempo de simulação.

2.2.5. Pós-processamento

É na etapa de pós-processamento que os resultados obtidos são convertidos em informações visualmente interpretáveis. Propriedades de interesse podem ser visualizadas através de mapas de contorno, perfis vetoriais, gráficos, animações complexas, entre outros. Além das formas de visualização citadas anteriormente, existem inúmeras outras disponíveis, de acordo com o *software* utilizado, desse modo, cabe ao usuário decidir qual a melhor maneira de analisar e representar os resultados obtidos.

É importante destacar que a etapa de pós-processamento, em alguns casos, pode não representar o fim da simulação. Dependendo dos resultados obtidos, pode ser necessário retornar à alguma etapa anterior da simulação visando melhorar os resultados, como por

exemplo modificar a malha computacional, alterar modelos e condições de contorno definidos no pré-processamento, alterar critérios de convergência, entre outros.

2.3. Modelagem matemática

Nesta seção serão apresentados os principais aspectos relacionados à modelagem matemática do problema de interesse deste trabalho: o escoamento gás-líquido em um biorreator pneumático do tipo *airlift*.

2.3.1. Abordagem Fenomenológica

O escoamento de sistemas multifásicos pode ser modelado a partir de duas abordagens principais: Euleriana e Lagrangeana. A abordagem Euleriana considera um referencial espacial fixo e descreve a variação de uma variável (velocidade, fração volumétrica, etc.) em função deste referencial. Já a abordagem Lagrangeana considera um referencial espacial variável e descreve a trajetória individual de cada elemento de fluido (ESPERANÇA, 2018). Escoamentos do tipo bifásicos podem ser modelados através de apenas uma abordagem ou da combinação das duas: *Euler-Euler* ou *Euler-Lagrange*.

Na abordagem *Euler-Euler* as duas fases do sistema são tratadas matematicamente como contínuas e interpenetrantes, ou seja, o volume de uma fase não pode ser ocupado pela outra. Desse modo, é introduzido o conceito de fração volumétrica das fases, que são funções contínuas no espaço e no tempo sendo a soma delas igual a um. Nessa abordagem, as equações de conservação são resolvidas para cada fase do sistema, sendo assim, cada fase possui o seu próprio conjunto de soluções. É importante ressaltar que, para o caso de escoamentos gás-líquido, não é possível visualizar a forma e localização das bolhas de forma precisa, já que o perfil de fração volumétrica da fase gasosa retornado pela simulação é uma função contínua do espaço (RODRIGUEZ, 2015).

Na abordagem *Euler-Lagrange*, define-se uma fase fluida (abordagem Euleriana) e uma fase dispersa (abordagem Lagrangeana), sendo esta última resolvida através da aplicação de leis da mecânica clássica do corpo sólido, especialmente a 2ª Lei do Movimento de Newton, sendo possível assim obter a trajetória individual de cada partícula. Essa abordagem é recomendada para sistemas onde a fase dispersa possui baixa fração de volume. Entretanto, ainda que a abordagem Euler-Lagrange possibilite conhecer o escoamento da fase dispersa de modo mais detalhado, ela implica em um custo computacional muito mais elevado do que a abordagem *Euler-Euler*, sendo assim, esta última é a mais recomendada para o estudo de escoamentos gás-líquido em biorreatores pneumáticos.

No presente trabalho, a fase contínua corresponde à fase líquida presente no sistema e a fase dispersa corresponde à fase gasosa, mais especificamente às bolhas de ar.

2.3.2. Equações de Conservação da Massa e Quantidade de Movimento

O estudo do escoamento de fluidos é regido pelos princípios de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. A aplicação de tais princípios à um determinado problema de interesse resulta em equações diferenciais parciais que, quando solucionadas, permitem a obtenção de perfis espaciais e transientes de variáveis de interesse como velocidade, fração volumétrica de uma fase, pressão, temperatura, etc.

No estudo de escoamentos gás-líquido em biorreatores pneumáticos são utilizadas algumas hipóteses simplificadoras, dentre elas, a consideração de que o sistema é isotérmico e a ausência da transferência de massa entre as fases líquida e gasosa. É importante destacar que a última hipótese mencionada não condiz com a realidade do problema, entretanto, sua inclusão na modelagem matemática conduziria a um elevado esforço computacional.

Portanto, os dois princípios de conservação relevantes na modelagem do escoamento gás-líquido em biorreatores pneumáticos são o princípio de conservação da massa, designado usualmente por Equação da Continuidade (Equação 3) e o princípio de conservação da quantidade de movimento, também conhecido por Equação do Movimento (Equação 4).

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_i \cdot \rho_i + \nabla \cdot (\alpha_i \cdot \rho_i \cdot v_i) = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \cdot \rho_i \cdot v_i) + \nabla \cdot (\alpha_i (\rho_i \cdot v_i \otimes v_i)) = -\alpha_i \cdot \nabla P_i + \nabla \cdot (\alpha_i \cdot \mu_{ef,i} (\nabla v_i + (\nabla v_i)^T)) + M_i + S_i \quad (4)$$

Onde v_i , α_i , ρ_i , P_i e $\mu_{ef,i}$ denotam, respectivamente, as seguintes grandezas locais referentes à fase “i”: vetor velocidade, fração volumétrica, densidade, pressão e viscosidade efetiva. M_i e S_i denotam a transferência de quantidade de movimento resultante da ação de forças interfaciais e externas, respectivamente, e possuem grandeza de força por unidade de volume.

A força de empuxo corresponde à principal força externa de transferência de quantidade de movimento e surge em virtude da diferença de densidade entre as fases líquida e gasosa, sendo representada pela Equação 5.

$$S_i^E = (\rho_i - \rho_{ref}) \cdot g \quad (5)$$

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

O termo M_i corresponde ao somatório das forças interfaciais presentes no sistema gás-líquido. Segundo Silva (2011) as principais forças interfaciais presentes em escoamentos de bolhas em um líquido são a força de arraste (*drag*), sustentação (*lift*), dispersão turbulenta (*turbulent dispersion*) e massa virtual (*virtual mass*). A Equação 6 apresenta o somatório das forças interfaciais presentes em um escoamento gás-líquido.

$$M_i = M_{i,j}^D + M_{i,j}^L + M_{i,j}^{TD} + M_{i,j}^{VM} \quad (6)$$

Onde $M_{i,j}^D$, $M_{i,j}^L$, $M_{i,j}^{TD}$, e $M_{i,j}^{VM}$ correspondem aos vetores forças interfaciais de arraste, sustentação, dispersão turbulenta e massa virtual, respectivamente.

Apesar da diversidade de forças interfaciais existentes, muitos trabalhos envolvendo o estudo da hidrodinâmica em biorreatores pneumáticos apontam para a predominância do arraste sobre as demais forças, sendo uma prática comum a realização de simulações CFD de biorreatores pneumáticos considerando apenas a força de arraste (WADAUGSORN ET AL., 2016; GHASEMI e HOSSEINI, 2012; ZHANG ET AL., 2012; MAVADDAT ET AL., 2014).

2.3.3. Forças interfaciais

Em escoamentos multifásicos, as forças interfaciais desempenham um papel muito importante, influenciando fortemente a hidrodinâmica do sistema. Estas forças surgem devido à transferência de quantidade de movimento que ocorre através da interface que separa as fases do sistema. A seguir serão descritas as principais forças interfaciais presentes em um escoamento gás-líquido, sendo a força de arraste melhor detalhada visto que possui maior relevância no contexto do presente trabalho.

2.3.3.1. Arraste

A força de arraste atua paralelamente à direção do escoamento, porém, em sentido oposto, atuando como uma resistência ao movimento. Esta força é causada por dois fatores principais: o atrito entre o corpo e o fluido, devido à velocidade relativa entre os mesmos, e a distribuição de pressão na superfície do corpo (SILVA, 2011). A força de arraste que age na fase líquida como consequência do movimento da fase gasosa é calculada a partir da Equação 7.

$$M_{G,L}^D = \frac{3}{4} \alpha_G \cdot \rho_L \cdot \frac{C_D}{D_b} \cdot |v_G - v_L| \cdot (v_G - v_L) \quad (7)$$

Onde C_D é o coeficiente de arraste interfacial.

Existem muitas correlações disponíveis na literatura que estimam o coeficiente de arraste, mas serão apresentadas neste trabalho apenas as mais utilizadas na modelagem de sistemas multifásicos do tipo gás-líquido.

A correlação de Schiller e Naumann (1933), representada pela Equação 8, relaciona o coeficiente de arraste diretamente ao número de Reynolds da bolha, ou seja, considera esta como uma esfera rígida, desprezando possíveis deformações nas bolhas.

$$C_D = \max\left(0,44; \frac{24}{Re_b} (1 + 0,15 \cdot Re_b^{0,687})\right) \quad (8)$$

Onde Re_b pode ser calculado pela Equação 9.

$$Re_b = \frac{\rho_L \cdot |v_G - v_L| \cdot D_b}{\mu_L} \quad (9)$$

Uma correlação mais elaborada para o cálculo de C_D é a correlação de Grace et al. (1976), que considera diferentes formatos de bolhas (esfera, elipse e touca) de acordo com o regime de escoamento. Segundo Liew e Gimbum (2017), as deformações no formato das bolhas ocorrem geralmente para bolhas com diâmetro maior do que três milímetros.

Quando bolhas esféricas escoam, o coeficiente de arraste é calculado por meio da Equação 10.

$$C_D^{esf} = \frac{24}{Re_b} (1 + 0,15 Re_b^{0,687}) \quad (10)$$

Para bolhas com formato elipsoidal, o coeficiente de arraste é dado pela Equação 11.

$$C_D^{elip} = \frac{4}{3} \frac{g D_b |\rho_L - \rho_G|}{v_\infty^2 \rho_L} \quad (11)$$

Onde v_∞ é a velocidade terminal da bolha, calculada por meio da Equação 12.

$$v_\infty = \frac{\mu_L}{\rho_L D_b} M^{-0,149} (J - 0,857) \quad (12)$$

Onde J é dado pela Equação 13.

$$J = \begin{cases} 0,94 \lambda^{0,751} & \text{para } 2 < \lambda \leq 59,3 \\ 3,42 \lambda^{0,441} & \text{para } \lambda > 59,3 \end{cases} \quad \text{sendo } \lambda = \frac{4}{3} E \ddot{o} M^{-0,149} \left(\frac{\mu_L}{\mu_{ref}} \right)^{-0,14} \quad (13)$$

Onde μ_{ref} é a viscosidade de referência da fase líquida e $E\ddot{o}$ corresponde ao número de Eötvos, que pode ser calculado por meio da Equação 14.

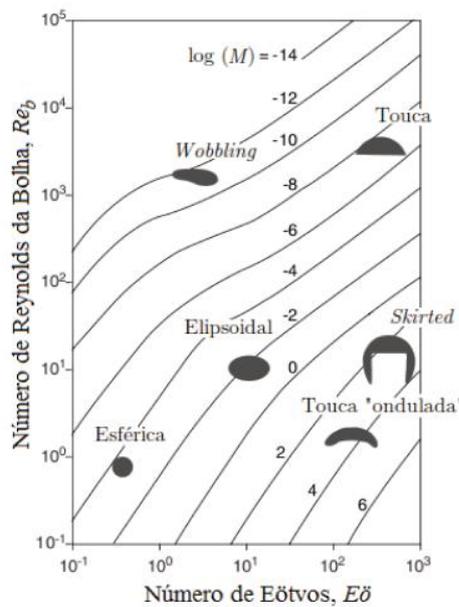
$$E\ddot{o} = \frac{g(\rho_L - \rho_G)D_b^2}{\sigma} \quad (14)$$

Para bolhas no formato touca, o coeficiente de arraste é constante, dado pela Equação 15.

$$C_D^{touca} = \frac{8}{3} \quad (15)$$

Por meio da representação gráfica ilustrada na Figura 13 é possível visualizar a relação entre o formato das bolhas e os números adimensionais Re_b e $E\ddot{o}$.

Figura 13 – Relação entre o formato das bolhas e os adimensionais Re_b e $E\ddot{o}$.



Fonte: Silva (2011).

O valor do coeficiente de arraste utilizado na resolução numérica é limitado de acordo com a Equação 16.

$$C_D = \max\left(C_D^{esf}, \min(C_D^{elip}; C_D^{touca})\right) \quad (16)$$

2.3.3.2. Sustentação

A força de sustentação atua perpendicularmente à direção do escoamento e promove o deslocamento lateral das bolhas. Em biorreatores pneumáticos, esta força é responsável por

“puxar” ou “empurrar” as bolhas na direção radial (RODRIGUEZ, 2015). Esta força surge devido aos efeitos da pressão e das tensões que atuam na superfície das bolhas (TABIB et al., 2008). Segundo Lucas et al. (2005), coeficientes positivos de sustentação (bolhas pequenas) estabilizam o escoamento, enquanto coeficientes negativos (bolhas grandes) conduzem à distribuições instáveis na fração volumétrica da fase gasosa, o que favorece a transição entre os regimes de escoamento.

2.3.3.3. Dispersão Turbulenta

A força de dispersão turbulenta está relacionada ao transporte da fase dispersa por meio de vórtices, formados pela turbulência na fase contínua. Esta força atua na estabilização do escoamento em colunas de bolhas, por meio da suavização do perfil de fração volumétrica da fase gasosa (THAKRE e JOSHI, 1999; LUCAS et al., 2005).

2.3.3.4. Massa virtual

A força de massa virtual, também denominada massa adicionada, está relacionada ao movimento relativo entre as fases. O deslocamento das bolhas provoca a aceleração do líquido nas regiões vizinhas a estas. O conceito de massa virtual pode ser melhor compreendido pela mudança de energia cinética no fluido nas regiões que sofrem aceleração das partículas que se movimentam (JOSHI, 2001).

2.3.4. Turbulência

O fenômeno da turbulência consiste de flutuações aleatórias temporais e espaciais que ocorrem no escoamento dos fluidos. Este fenômeno ocorre quando as forças inerciais que atuam no fluido se tornam maiores que as forças viscosas, fato que é caracterizado por elevados números de Reynolds. Dentre as principais características de escoamentos turbulentos, destacam-se (KUNDU e COHEN, 2002; DAVIDSON, 2003):

- Aleatoriedade: movimento irregular e caótico.
- Vorticidade e tridimensionalidade: elevado nível de flutuação e vorticidade (taxa de circulação do fluido por unidade de área), o que induz a formação de estruturas tridimensionais dos vórtices.
- Várias escalas estruturais: nos escoamentos turbulentos diferentes fenômenos como movimentos rotatórios, coalescência, divisão e alongamento dos vórtices contribuem para a formação de estruturas em várias escalas.
- Não-linearidade: fator chave no escoamento turbulento, que leva ao aparecimento de fenômenos como coalescência e alongamento dos turbilhões.

- Dissipação: transferência de energia que ocorre através de um processo em cascata, em que vórtices maiores transferem energia através de interações não-lineares aos vórtices menores, os quais são dissipados por forças viscosas.
- Difusividade: elevada taxa de difusão de calor e quantidade de movimento devido à mistura dos elementos de fluido à nível macroscópico.

A modelagem matemática da turbulência é muito complexa, pois se trata de um fenômeno tridimensional e transiente. Dentre as abordagens existentes, destaca-se o DNS (*Direct Numerical Simulation*), processo de resolução numérica no qual se consideram as Equações da Continuidade e do Movimento de forma a se resolverem os vórtices turbulentos e a abordagem RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) que modifica as equações de conservação introduzindo quantidades médias e flutuações de propriedades nas equações instantâneas. Entretanto, essas formas de se modelar a turbulência em um escoamento requerem um elevado tempo de simulação e esforço computacional, visto a complexidade envolvida na resolução das equações.

Dentre os diferentes modelos disponíveis, o modelo $k - \epsilon$ de turbulência é o mais recomendado em aplicações de engenharia pois fornece resultados suficientemente precisos e esforço computacional moderado. Ele faz parte de um conjunto de modelos denominados Modelos de Duas Equações e tem sido muito utilizado em estudos de simulação do escoamento gás-líquido em biorreatores pneumáticos (WADAUGSORN ET AL., 2016; GHASEMI e HOSSEINI, 2012; ZHANG ET AL., 2012; MAVADDAT ET AL., 2014; LIEW e GIMBUN, 2017; RAHIMI ET AL., 2018; STIRIBA ET AL., 2017).

No modelo $k - \epsilon$, a escala de velocidade turbulenta é calculada a partir da energia cinética turbulenta, representada pelo termo k , sendo a escala de comprimento turbulenta obtida a partir de k e de sua taxa de dissipação, representada pelo termo ϵ . Tem-se, então, duas equações de transporte adicionais no conjunto de equações que deverá ser resolvido pelo *solver*. Neste modelo assume-se a hipótese de que a turbulência é governada por uma viscosidade efetiva, que é uma propriedade do escoamento e não do fluido. O cálculo da viscosidade efetiva é feito pela soma entre as viscosidades dinâmica, turbulenta e a viscosidade induzida pela fase dispersa, conforme mostra a Equação 17.

$$\mu_{ef,i} = \mu_i + \mu_{turb,i} + \mu_{turb,disp} \quad (17)$$

A viscosidade dinâmica (μ_i) é característica do próprio fluido e definida pela Lei de Newton para escoamentos laminares.

A viscosidade turbulenta ($\mu_{turb,i}$) é associada à energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação, sendo calculada por meio da Equação 18.

$$\mu_{turb,i} = C_\mu \cdot \rho_i \cdot \left(\frac{k_i^2}{\epsilon_i} \right) \quad (18)$$

Onde C_μ é uma constante.

A viscosidade induzida pela fase dispersa ($\mu_{turb,disp}$) considera a turbulência promovida pela fase dispersa, sendo calculada por meio da Equação 19.

$$\mu_{turb,disp} = C_{\mu p} \cdot \rho_c \cdot \alpha_d \cdot D_b \cdot |v_d - v_c| \quad (19)$$

Onde ρ_c , α_d , v_d e v_c correspondem à densidade da fase contínua, fração volumétrica da fase dispersa, e velocidade das fases dispersa e contínua, respectivamente.

As Equações 20 e 21 definem o modelo $k - \epsilon$ padrão e representam, respectivamente a equação para o cálculo de k e ϵ .

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \cdot \rho_i \cdot k_i) + \nabla \cdot \left(\alpha_i \left(\rho_i \cdot v_i \cdot k_i - \left(\mu_i + \frac{\mu_{turb,i}}{\sigma_k} \right) \nabla k_i \right) \right) = \alpha_i \cdot (P_i - \rho_i \cdot \epsilon_i) \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \cdot \rho_i \cdot \epsilon_i) + \nabla \cdot \left(\alpha_i \cdot \rho_i \cdot v_i \cdot \epsilon_i - \left(\mu_i + \frac{\mu_{turb,i}}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon_i \right) = \alpha_i \cdot \frac{\epsilon_i}{k_i} \cdot (C_{\epsilon 1} \cdot P_i - C_{\epsilon 2} \cdot \rho_i \cdot \epsilon_i) \quad (21)$$

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

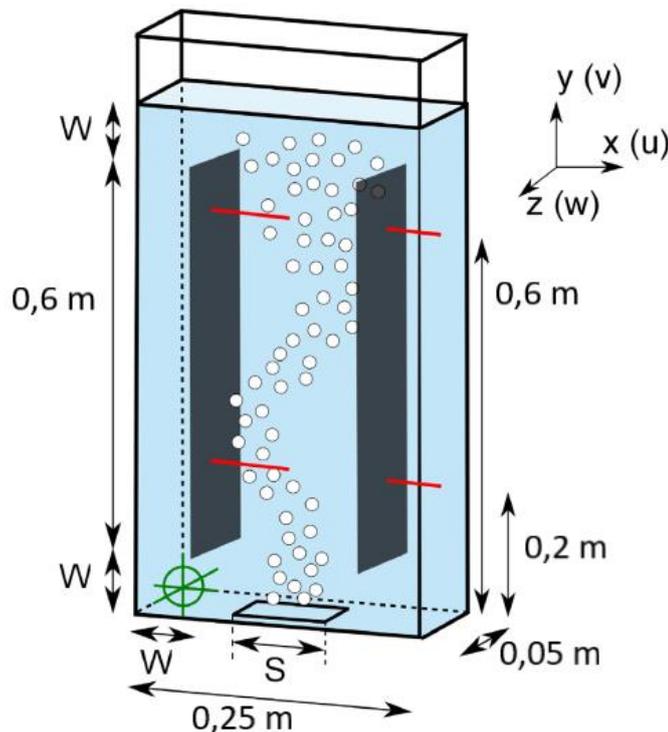
3. METODOLOGIA

Nesta seção será descrita a metodologia utilizada ao longo do desenvolvimento do presente trabalho. A geometria e condições de contorno utilizadas nas simulações CFD foram obtidas do trabalho de Ziegenhein et al. (2016), que estudaram o escoamento ar-água em um biorreator pneumático do tipo *airlift* para três vazões de entrada de ar diferentes: 3, 4,5 e 6 litros por minuto. No presente trabalho, foi escolhido simular apenas a condição experimental em que a vazão de entrada de ar é igual a 4,5 litros por minuto.

3.1. Criação da geometria e geração da malha

A geometria do problema de estudo consiste em um biorreator pneumático do tipo *airlift* de circulação interna, com seção transversal retangular, proposto por Ziegenhein et al. (2016), conforme mostra a Figura 14.

Figura 14 – Geometria do problema de estudo.

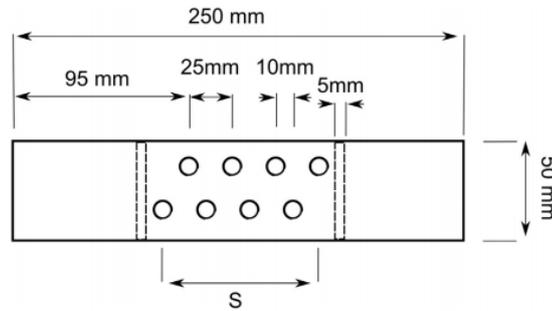


Fonte: adaptado de Ziegenhein et al. (2016).

A altura de líquido no biorreator é igual a 0,72 metros, sendo as regiões do *riser* e *downcomer* separadas por duas paredes internas com comprimento e largura iguais a 0,6 e 0,05 metros, respectivamente. A espessura das paredes é igual a 0,005 metros. As dimensões das letras W e S mostradas na Figura 13 são iguais a 0,06 e 0,12 metros, respectivamente.

A região de entrada de ar do biorreator utilizado no trabalho de Ziegenhein et al. (2016) constitui-se de uma placa perfurada com pequenos orifícios, a qual pode ser visualizada por meio da Figura 15.

Figura 15 – Região de entrada de ar do biorreator.

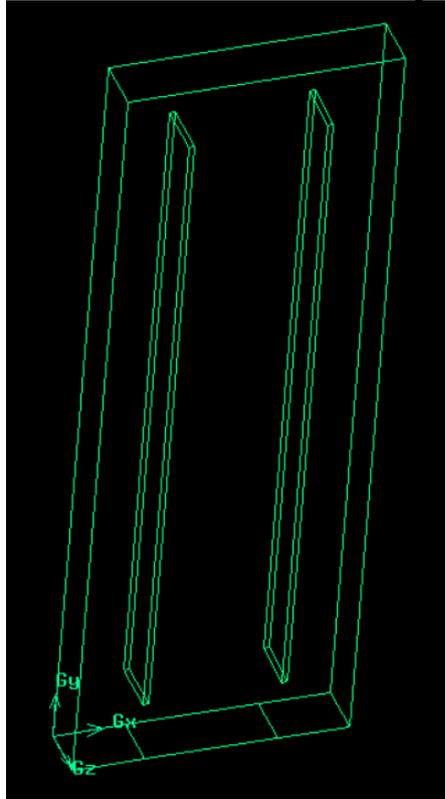


Fonte: Ziegenhein et al. (2016).

Visando facilitar a etapa de geração da malha computacional, optou-se por alterar a geometria da região de entrada de ar, sendo escolhido utilizar uma região de entrada uniforme no formato retangular, com as mesmas dimensões da placa perfurada. Essa escolha foi feita para que fosse possível gerar uma malha estruturada, contendo apenas elementos hexaédricos, o que influencia diretamente no tempo de convergência das simulações.

Para criar a geometria do problema e gerar a malha computacional foi utilizado o *software* ANSYS Gambit® 2.4. A Figura 16 apresenta a geometria criada para representar o domínio computacional.

Figura 16 – Geometria do domínio computacional.



Fonte: Da autora (2023).

As dimensões da geometria criada em x , y e z são iguais a 0,25, 0,72 e 0,05 metros, respectivamente. Com relação à altura da geometria, foi escolhido para essa dimensão o mesmo valor da altura de líquido do biorreator, ou seja 0,72 metros, visto que por meio da Figura 13 não é possível saber o valor da altura da região que é preenchida somente com ar, no topo do biorreator.

A região de entrada de ar pode ser visualizada de forma mais detalhada por meio da Figura 17, que mostra a geometria vista sob o plano xz .

Figura 17 – Região de entrada de ar vista sob o plano xz .

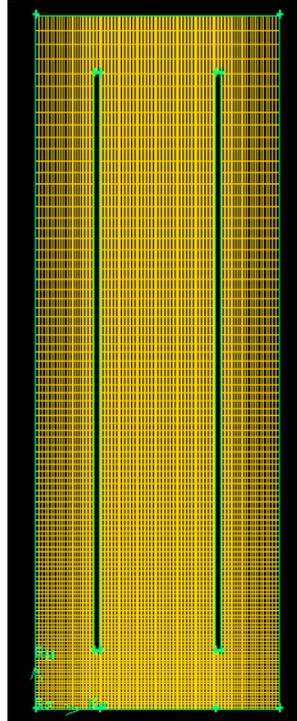


Fonte: Da autora (2023).

Após a criação da geometria do problema de estudo, foram geradas duas malhas computacionais, sendo uma menos refinada, contendo 100980 células, e outra mais refinada,

contendo 189360 células. Por meio da Figura 18, é possível visualizar a malha mais refinada aplicada ao domínio computacional visto sob o plano yz.

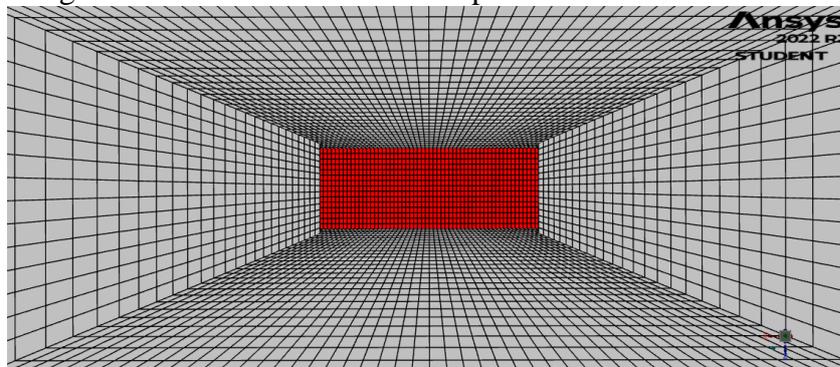
Figura 18 – Malha mais refinada aplicada ao domínio computacional.



Fonte: Da autora (2023).

As duas malhas geradas são do tipo estruturadas, contendo apenas elementos hexaédricos em 3D. A Figura 19 ilustra a vista interna da região do *riser* para a malha menos refinada e permite verificar que a malha possui apenas elementos hexaédricos, dispostos em um padrão regular, o que torna a malha estruturada.

Figura 19 – Vista interna do *riser* para malha menos refinada.



Fonte: Da Autora (2023).

Para as duas malhas criadas, foi escolhido gerar mais células na região do *riser*, visto que nessa região ocorrem as maiores trocas de momento entre as fases devido aos altos

gradientes de velocidade e fração volumétrica da fase ar. Dessa forma, pode-se dizer que a houve um maior refinamento na região do *riser* e um menor refinamento na região do *downcomer*.

O desempenho das malhas geradas foi comparado através do teste de independência de malhas, afim de se determinar qual das duas malhas seria utilizada no desenvolvimento das simulações. Mais detalhes acerca do teste de independência de malhas serão descritos na seção de Resultados e Discussão.

3.2. Pré-Processamento

Após a conclusão das etapas de criação da geometria e geração das malhas computacionais, prosseguiu-se para a etapa de pré-processamento, em que foram definidas as principais configurações da simulação como condições de contorno, modelos multifásicos e de turbulência, critério de convergência, entre outros. No presente trabalho, foram simuladas duas configurações de processamento diferentes, sendo que a única modificação de uma para a outra foi a alteração no modelo que representa a força de arraste. Os modelos de arraste testados foram o de Schiller e Naumann (1933) e Grace et al. (1976). As configurações da etapa de pré-processamento foram realizadas utilizando-se a versão acadêmica do *software* ANSYS Fluent® 2022 R2.

As condições de contorno de entrada e saída foram definidas como do tipo velocidade de entrada de ar (*velocity inlet*) e pressão de saída do ar no topo (*pressure outlet*). Visando simplificar as simulações, considerou-se um diâmetro uniforme para as bolhas de ar, ao invés de se considerar uma distribuição de bolhas de tamanho variável.

A velocidade de entrada de ar foi obtida a partir da equação 22, que relaciona a vazão volumétrica de ar que entra no biorreator, Q_{ent} , com a área da região de entrada de ar, A_{ent} .

$$v_{ent} = \frac{Q_{ent}}{A_{ent}} \quad (22)$$

$$\text{Sendo } Q_{ent} = 4,5 \frac{L}{min} = 7,5 \cdot 10^{-5} \frac{m^3}{s} \text{ e } A_{ent} = 0,12 m \times 0,05 m = 0,006 m^2$$

$$\text{Então } v_{ent} = \frac{7,5 \cdot 10^{-5}}{0,006} = 0,0125 \frac{m}{s}$$

A Tabela 2 apresenta um resumo das configurações definidas na etapa de pré-processamento.

Tabela 2 – Configurações definidas na etapa de pré-processamento

Fluidos	
Água (Fase contínua)	$\rho = 998,2 \text{ kg/m}^3$; $\mu = 1,003 \times 10^{-3} \text{ kg/(m.s)}$
Ar (Fase dispersa)	$D_b = 0,0075 \text{ m}$; $\rho = 1,225 \text{ kg/m}^3$; $\mu = 1,7894 \times 10^{-5} \text{ kg/(m.s)}$
Condições de Contorno	
Entrada (<i>Velocity inlet</i>)	Velocidade de entrada de ar = 0,0125 m/s
Saída (<i>Pressure outlet</i>)	Pressão de saída no topo = $P_{\text{atm}} = 101325 \text{ Pa}$
Paredes (<i>No slip</i>)	Não deslizamento para ambas as fases
Modelos	
Multifásico	Eulerian (<i>Euler-Euler</i>); 2 fases
Turbulência	k- ϵ padrão (<i>Standard</i>)
Força de Arraste	Schiller e Naumann (1933) e Grace et al. (1976)
Parâmetros do <i>Solver</i>	
Regime	Transiente
<i>Solver Type</i>	<i>Pressure-Based</i>
Formulação da velocidade	<i>Absolute</i>
Acoplamento Pressão-Velocidade	<i>Phase Coupled SIMPLE</i>
Discretização de Gradientes	<i>Least Squares Cell Based</i>
Discretização da Pressão	<i>PRESTO!</i>
Discretização do Momento	<i>First Order Upwind</i>
Discretização da Fração Volumétrica	<i>First Order Upwind</i>
Energia Cinética Turbulenta	<i>First Order Upwind</i>
Taxa de Dissipação Turbulenta	<i>First Order Upwind</i>
<i>Transient formulation</i>	<i>First Order Implicit</i>
Inicialização	<i>Standard</i>
Critério de Convergência	10^{-4}
<i>Time Step</i>	10^{-4} s
Número de <i>Time Steps</i>	1200000
Tempo de simulação	120 s

Fonte: Da Autora (2023).

Para realizar as simulações do teste de independência de malhas, utilizou-se as configurações mostradas na Tabela 2, sendo que o modelo de arraste utilizado nas duas simulações foi o de Schiller e Naumann (1933). Após a realização do teste de independência de malhas foi feita outra simulação, de posse da malha escolhida, utilizando-se as mesmas configurações mostradas na Tabela 2, sendo nesse caso utilizado o modelo de arraste de Grace et al. (1976).

3.3. Processamento

Após as definições das configurações das simulações, foi iniciada a etapa de processamento, sendo as simulações realizadas através da utilização da versão acadêmica do *software* ANSYS Fluent® 2022 R2. O *hardware* utilizado para realizar as simulações consistiu de um computador com processador Intel Core i7-8700 3.2 GHz e memória RAM de 16 GB.

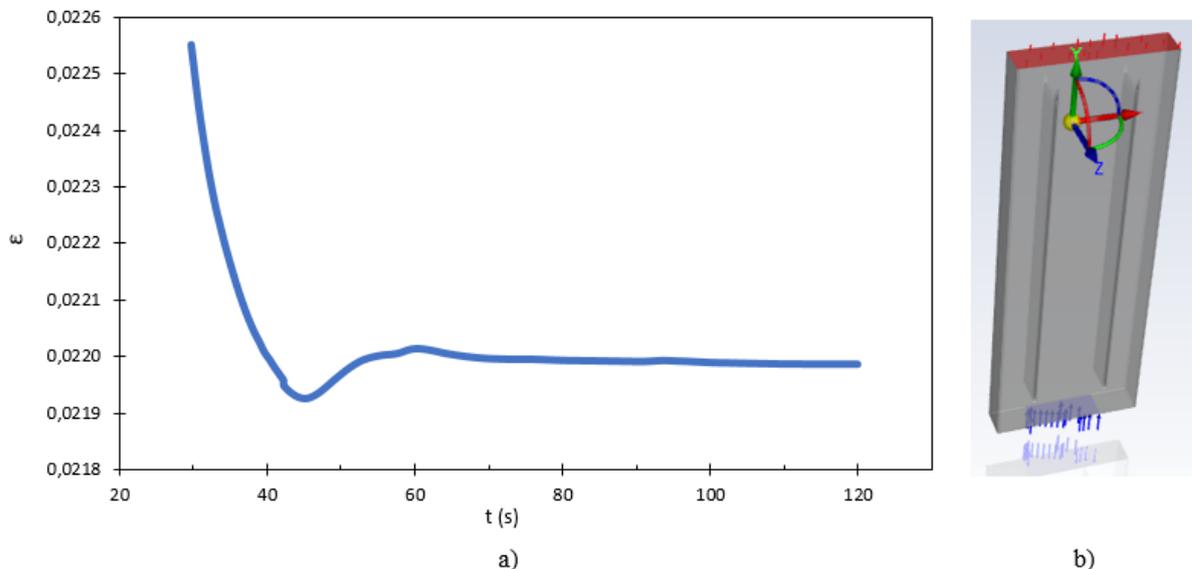
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1. Teste de Independência de Malhas

Afim de se obter um número de células ideal para a malha computacional que seria utilizada nas simulações do presente trabalho, foi realizado um teste de independência de malhas considerando duas malhas: uma menos refinada com 100980 células e outra mais refinada com 189360 células. Foi escolhida a retenção gasosa na região do *riser* como a variável a ser monitorada no teste e utilizou-se o modelo de arraste de Schiller e Naumann (1933) nas duas simulações. As demais configurações utilizadas nas duas simulações foram apresentadas na Tabela 2.

Para saber o instante de tempo em que a simulação atingiria o estado estacionário, foi escolhido monitorar a retenção gasosa em um ponto da geometria com coordenadas iguais a 0,106 metros em x, 0,6 metros em y e 0,025 metros em z (ponto aleatório situado na região do *riser*). Esse monitoramento foi feito durante a simulação com a malha menos refinada e pode ser visto por meio da Figura 20.

Figura 20 – a) Retenção gasosa ao longo do tempo monitorada no ponto escolhido; b) Localização na geometria do ponto monitorado.



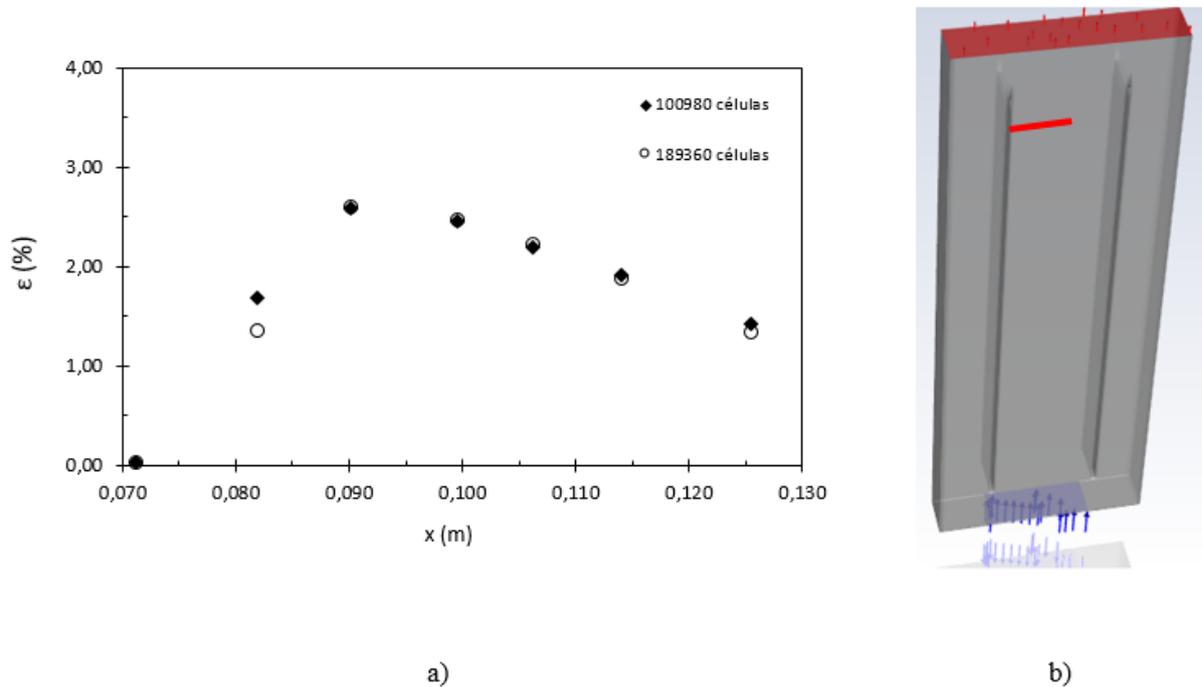
Fonte: Da Autora (2023).

Por meio da Figura 20 pode ser observada uma tendência de estabilização dos valores da variável analisada após aproximadamente 100 segundos de simulação, o que indica que próximo a esse instante a simulação alcançou o regime estacionário. Desse modo, foi escolhido um tempo igual a 120 segundos para todas as simulações realizadas durante o presente trabalho,

sendo que em cada simulação os resultados das variáveis de interesse foram obtidos a partir de uma média dos valores entre os tempos de 115 e 120 segundos.

A Figura 21 ilustra a variação da retenção gasosa no *riser* ao longo do eixo x, para $y = 0,6$ metros e $z = 0,025$ metros, obtida para as simulações com as malhas de 100980 e 189360 células.

Figura 21 – a) Variação da retenção gasosa no *riser* ao longo do eixo x para as duas malhas testadas; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.



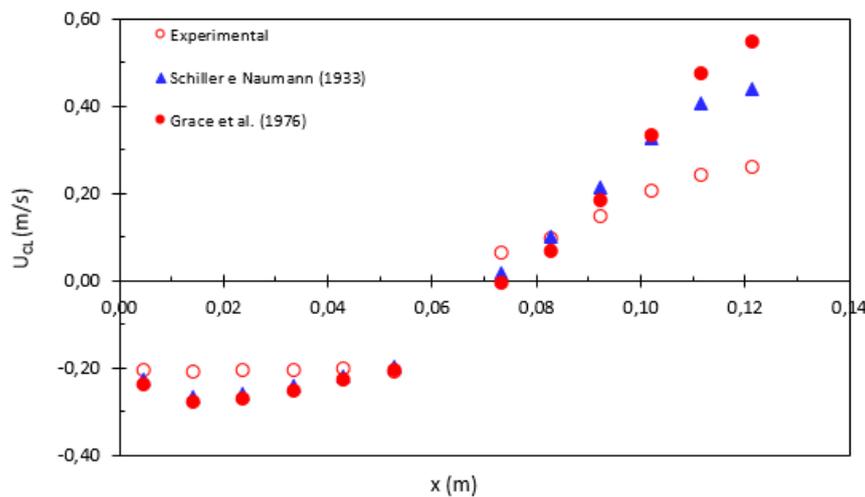
Fonte: Da Autora (2023).

Como pode ser observado por meio da Figura 21, os valores obtidos para a retenção gasosa utilizando-se a malha menos refinada praticamente se sobrepuseram aos valores obtidos utilizando-se a malha mais refinada, exceto em x igual a 0,082 metros em que houve um pequeno distanciamento entre os pontos. Portanto, foi possível concluir que o aumento no número de células acima de 100980 não alterou significativamente os resultados obtidos e sendo assim, escolheu-se a malha menos refinada para ser utilizada nas simulações do presente trabalho. Ressalta-se ainda que o tempo total gasto para simular 120 segundos foi de aproximadamente 20 dias para a malha com 100980 células e 48 dias para a malha com 189360 células, dados que reforçam a escolha pela malha menos refinada visto que o tempo gasto durante a simulação foi menor, o que facilitou a condução do trabalho.

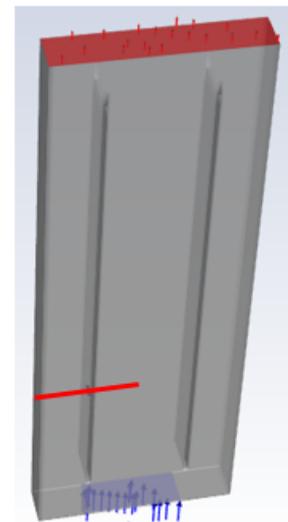
4.2. Influência dos modelos de arraste

Visando avaliar a influência do modelo utilizado para representar a força de arraste no escoamento ar-água em biorreatores *airlift*, foram realizadas duas simulações tendo sido utilizados os modelos de arraste de Schiller e Naumann (1933) e Grace et al. (1976). Exceto para o modelo de arraste, foram mantidas as mesmas configurações expostas na Tabela 2 para o processamento das simulações. As Figuras 22 e 23 mostram a variação da velocidade de circulação do líquido no biorreator ao longo da direção x para duas alturas diferentes, considerando z igual a 0,025 metros.

Figura 22 – a) Velocidade de circulação do líquido em $y = 0,2$ metros; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.



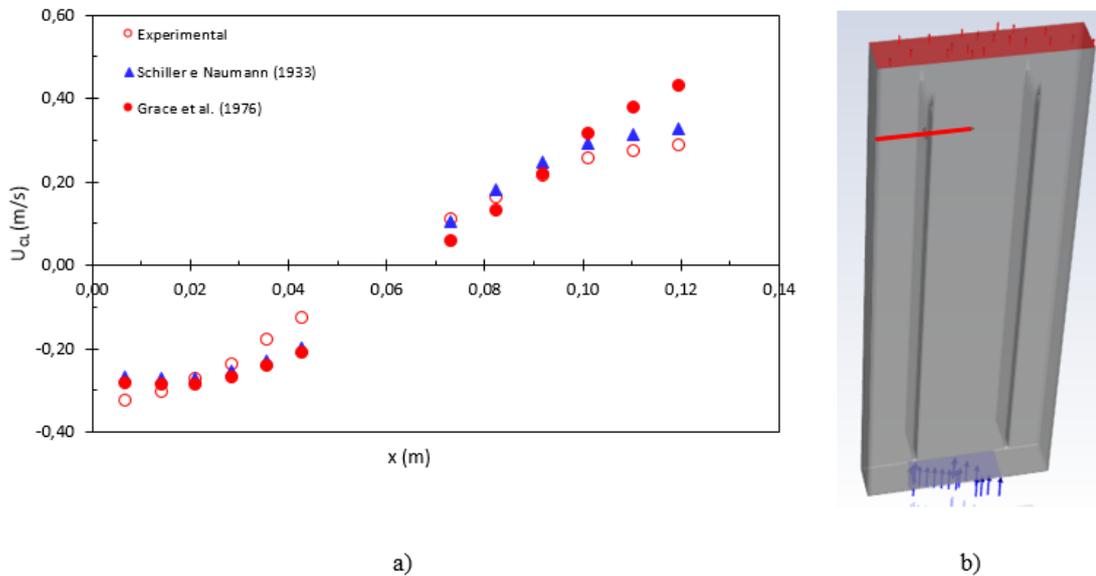
a)



b)

Fonte: Da Autora (2023).

Figura 23 – a) Velocidade de circulação do líquido em $y = 0,6$ metros; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.



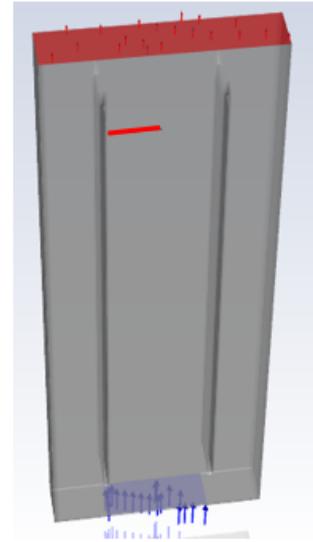
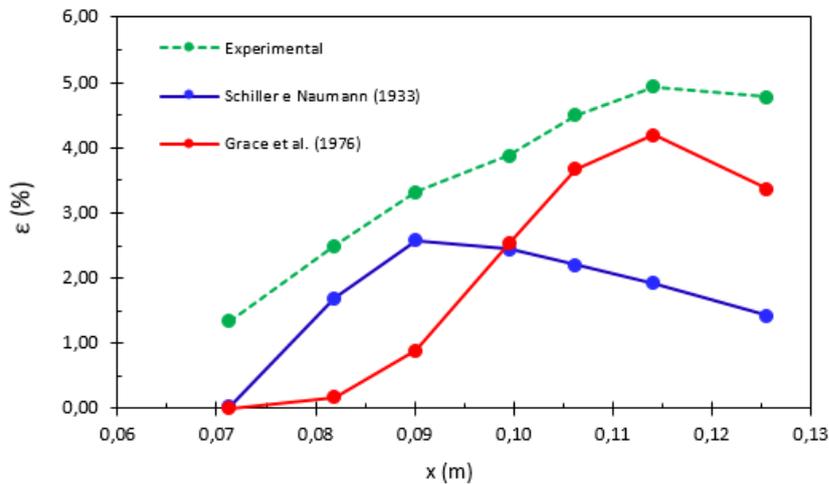
Fonte: Da Autora (2023).

Analisando as Figuras 22 e 23, observa-se que os resultados obtidos através das simulações indicam um comportamento semelhante ao dos dados experimentais, tanto para a simulação utilizando-se o modelo de Schiller e Naumann (1933) quanto para Grace et al. (1976). É possível observar que para x entre 0 e 0,06 metros, o que compreende a região do *downcomer*, tem-se valores negativos para velocidade de circulação do líquido, indicando a descida da mistura gás-líquido e já para x entre 0,06 e 0,12 metros, o que compreende metade da região do *riser*, tem-se valores positivos para a velocidade do líquido, o que indica a subida da mistura.

Discorrendo sobre a influência dos modelos de arraste, observa-se que na região do *downcomer* os valores obtidos através das duas simulações foram aproximadamente iguais e houve uma boa aproximação com os dados experimentais, tanto em $y = 0,2$ metros quanto em $y = 0,6$ metros. Já na região do *riser*, observa-se uma pequena diferença entre os valores obtidos através das duas simulações, sendo o modelo de arraste de Schiller e Naumann (1933) o que melhor aproximou os resultados simulados com os experimentais, sendo a melhor aproximação obtida para os valores da velocidade de circulação do líquido em $y = 0,6$ metros.

A Figura 24 apresenta a variação da retenção gasosa na região do *riser*, considerando $y = 0,6$ metros e $z = 0,025$ metros.

Figura 24 – a) Retenção gasosa na região do *riser* em $y = 0,6$ metros; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.



a)

b)

Fonte: Da Autora (2023).

Analisando a Figura 24, observa-se que para x entre 0,071 e 0,090 metros, o que compreende a primeira metade da região do *riser*, o modelo de Schiller e Naumann (1933) permitiu uma melhor aproximação dos resultados simulados com os experimentais, já a partir de $x = 0,09$ foi o modelo de Grace et al. (1976) que melhor aproximou os resultados. Ainda assim, observa-se que o comportamento da curva dos dados da simulação com o modelo de Grace et al. (1976) assemelha-se ao comportamento dos dados experimentais; o mesmo não ocorre para a curva de dados da simulação com o modelo de Schiller e Naumann (1933). É perceptível que os valores de retenção gasosa obtidos com o modelo de Grace et al. (1976) seguem uma tendência de crescimento assim como os valores experimentais, sendo que o decaimento dos valores ocorre a partir de um mesmo ponto para as duas curvas, em $x = 0,114$ metros. Já com relação à curva dos valores obtidos com o modelo de Schiller e Naumann (1933), inicialmente observa-se um crescimento, porém os valores começam a cair a partir de $x = 0,09$ metros, diferentemente da curva de dados experimentais em que isso só ocorre a partir de $x = 0,114$ metros.

A melhor aproximação dos valores simulados com os experimentais obtida com o modelo de Grace et al. (1976) pode ser explicada com base no fato de que este modelo considera os diferentes formatos das bolhas no cálculo do coeficiente de arraste e, segundo Gimbut et al. (2009), é esperado que ocorra deformação para bolhas com diâmetro maior que 3 mm, o que acontece no presente trabalho, visto que considerou-se um diâmetro igual a 7,5 mm. A Figura

25 apresenta uma imagem das bolhas no *riser* para uma altura de $y = 0,2$ metros no biorreator *airlift* usado no trabalho de Ziegenhein et al. (2016).

Figura 25 – Distribuição das bolhas no *riser* em $y = 0,2$ metros.

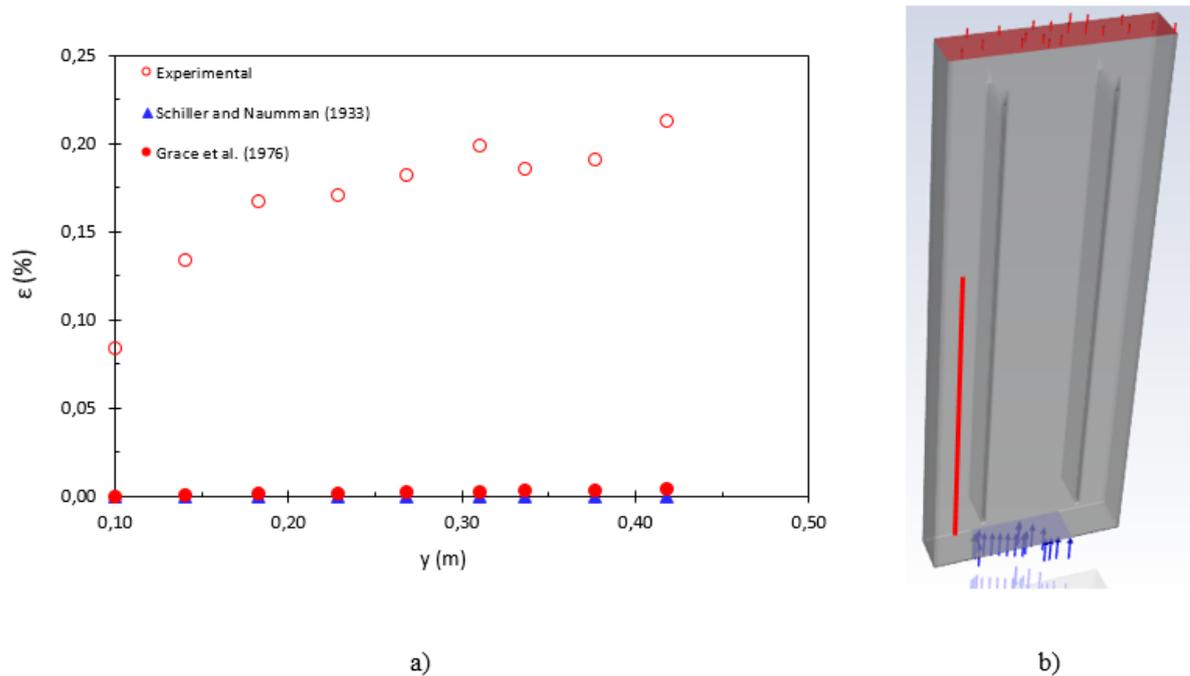


Fonte: Ziegenhein et al. (2016).

Por meio da Figura 25 é possível visualizar o aparecimento de bolhas amorfas, com geometria indefinida, na região do *riser*, o que justifica a utilização de um modelo que leve em consideração os diferentes formatos das bolhas para o cálculo do coeficiente de arraste. Como o modelo de arraste de Schiller e Naumann (1933) assume que as bolhas possuem apenas formatos esféricos, é compreensível que ele conduza a resultados mais distantes dos experimentais, no caso do presente trabalho, visto que algumas bolhas geradas no escoamento real possuem formato indefinido, como mostra a Figura 25. Já o modelo de Grace et al. (1976) aproximou melhor os valores simulados com os experimentais visto que conseguiu prever de maneira mais adequada o coeficiente de arraste para bolhas, já que leva em conta diferentes formatos como esfera, elipse e touca.

A Figura 26 apresenta a variação da retenção gasosa no *downcomer* para diferentes alturas, numa posição em $x = 0,03$ metros e $z = 0,025$ metros.

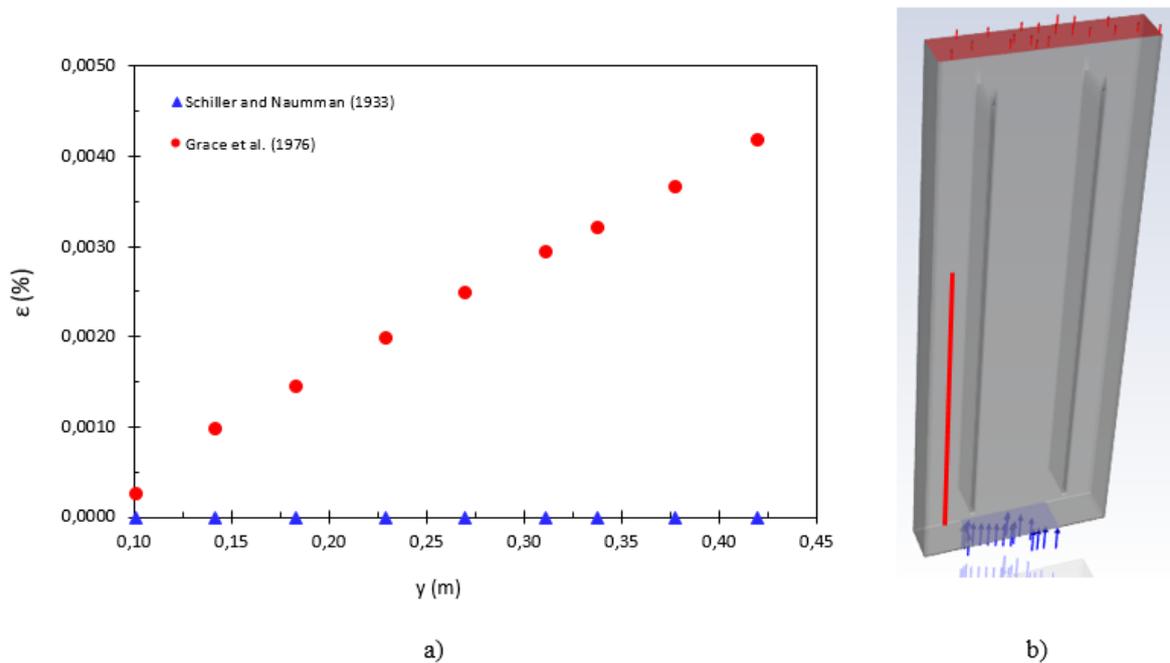
Figura 26 – a) Retenção gasosa na região do *downcomer* para diferentes alturas; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.



Fonte: Da Autora (2023).

Analisando a Figura 26 é possível observar que as simulações realizadas não conseguiram reproduzir de maneira satisfatória o escoamento gás-líquido real na região do *downcomer*, uma vez que os resultados obtidos através das simulações, segundo os dois modelos de arraste, são expressivamente inferiores aos resultados experimentais. Ainda que sejam esperados baixos valores para a retenção gasosa no *downcomer*, visto que uma parte da fase gasosa se desprende da mistura gás-líquido ao atingir a região do topo, os valores obtidos para as simulações se encontram próximos de zero enquanto os valores experimentais que representam o fenômeno real oscilam entre 0,08% e 0,21%. Ainda que não tenha sido observada uma boa concordância entre os resultados simulados e experimentais na região do *downcomer*, a influência do modelo de arraste nos resultados simulados é perceptível, e tal afirmação pode ser confirmada por meio da análise da Figura 27, que apresenta apenas os resultados de retenção gasosa simulados para uma escala que permite visualizar melhor a tendência dos resultados.

Figura 27 – a) Comparação entre valores simulados de retenção gasosa no *downcomer*; b) Localização na geometria dos pontos monitorados.



Fonte: Da Autora (2023).

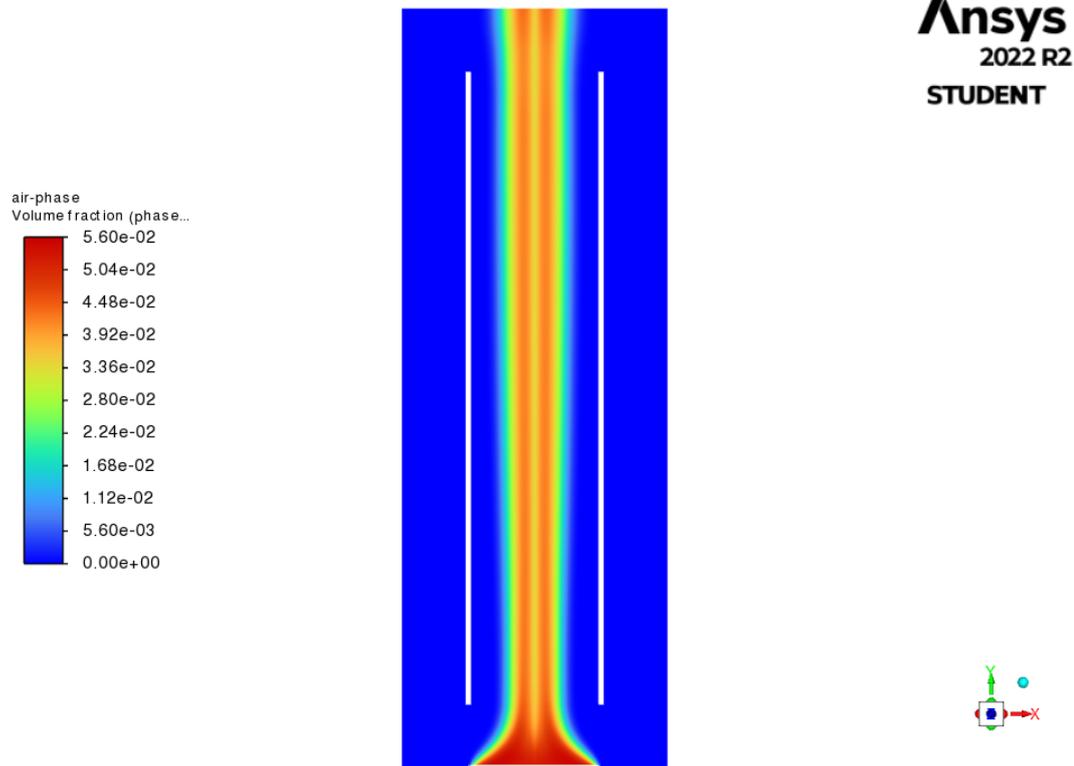
Como pode ser visto por meio da Figura 27, os valores de retenção gasosa obtidos para as duas simulações foram expressivamente diferentes. Enquanto os valores obtidos para a simulação com o modelo de arraste de Grace et al. (1976) aumentam conforme o aumento da altura do biorreator, alcançando um valor máximo de 0,0050 %, na simulação com o modelo de Schiller and Naumann (1933) os valores obtidos foram aproximadamente zero, da ordem de 10^{-10} , em todos os pontos. Desse modo, é notável que a mudança no modelo de arraste utilizado influenciou positivamente nos resultados gerados para a retenção gasosa no *downcomer*, ainda que a aproximação com os valores experimentais não tenha sido satisfatória.

4.3. Aspectos hidrodinâmicos

A seguir serão apresentadas algumas figuras que ilustram o fenômeno do escoamento gás-líquido no interior do biorreator simulado e permitem analisar a hidrodinâmica do sistema estudado. Todas as imagens foram obtidas por meio do *software* ANSYS Fluent® 2022 R2, tendo-se considerado a simulação em que utilizou-se o modelo de arraste de Grace et al. (1976) e o tempo sendo igual a 120 s.

A Figura 28 apresenta o perfil de contorno da fração volumétrica de ar, ou seja, a retenção gasosa, visto sob o plano xy para $z = 0,025$ metros.

Figura 28 – Perfil de contorno de fração volumétrica para a fase gasosa no plano xy.



Fonte: Da Autora (2023).

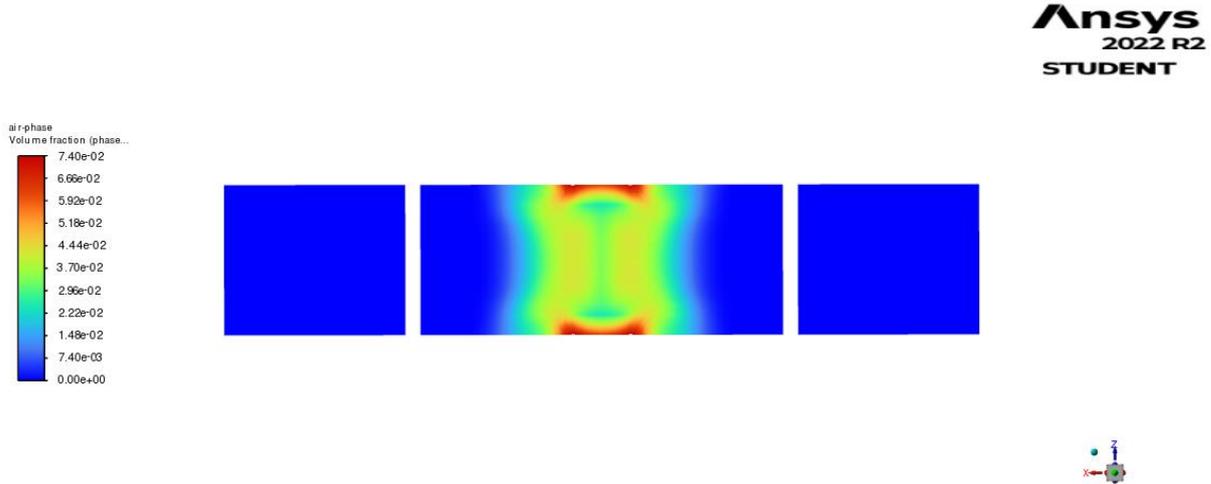
Por meio da Figura 28 observa-se que na região da base do biorreator, por onde ocorre a injeção de ar, há uma tendência de curvatura no perfil de escoamento da fase gasosa, o que é causado devido à movimentação do líquido que desce do *downcomer* para ocupar o espaço do líquido presente na base, que é arrastado com as bolhas durante a ascensão das mesmas. Devido à curvatura observada no perfil da fase gasosa na base do biorreator, as bolhas sobem pela região central do *riser* em um perfil estreito e contínuo, que se altera muito pouco com a altura do biorreator. Observa-se ainda que a fração volumétrica de ar aumenta em direção ao centro do *riser*, sendo praticamente zero nas regiões próximas às paredes internas do biorreator, que separam as regiões do *riser* e *downcomer*, o que condiz com os resultados apresentados na Figura 24.

Ainda que por meio da Figura 28 seja possível observar uma boa concordância entre os resultados experimentais e simulados para a região do *riser*, o mesmo não pode ser afirmado para a região do *downcomer*, visto que a retenção gasosa nessa região é praticamente nula, o que não condiz com o observado experimentalmente, em que é alcançado um valor máximo igual a 0,42% para essa variável. Além disso, é possível visualizar que o escoamento simulado se encontra no regime I de circulação, caracterizado pela ausência de bolhas na região do

downcomer, enquanto que no trabalho de Ziegenhein et al. (2016) é afirmado que o escoamento se encontra no regime II de circulação, onde existem bolhas estacionárias nessa região.

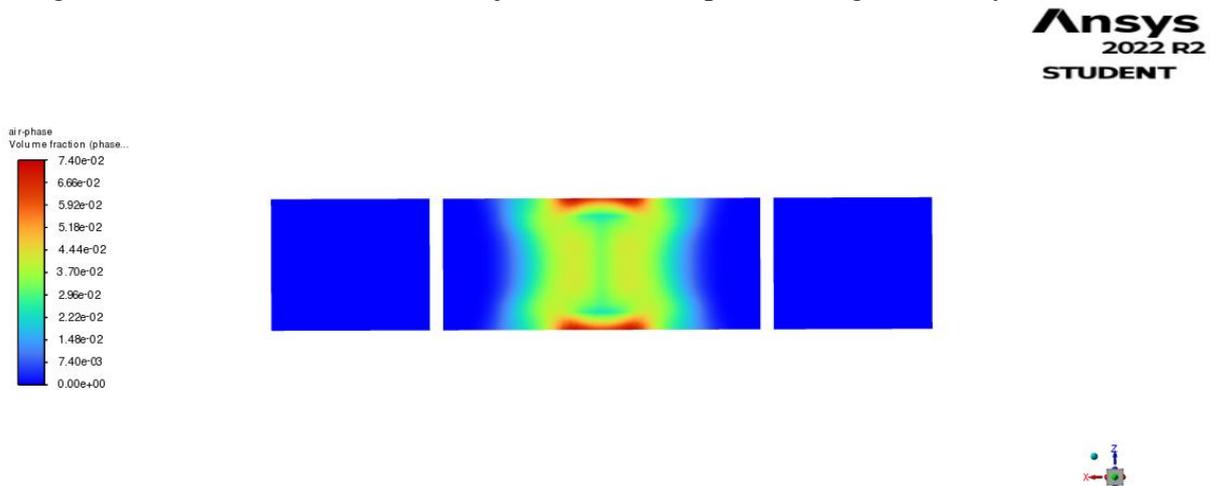
As Figuras 29 e 30 apresentam o perfil de contorno de fração volumétrica para a fase ar, ou seja, a retenção gasosa, no plano xz, considerando a altura do biorreator igual a 0,2 e 0,6 metros, respectivamente.

Figura 29 – Perfil de contorno de fração volumétrica para a fase gasosa em $y = 0,2$ metros.



Fonte: Da Autora (2023).

Figura 30 - Perfil de contorno de fração volumétrica para a fase gasosa em $y = 0,6$ metros.



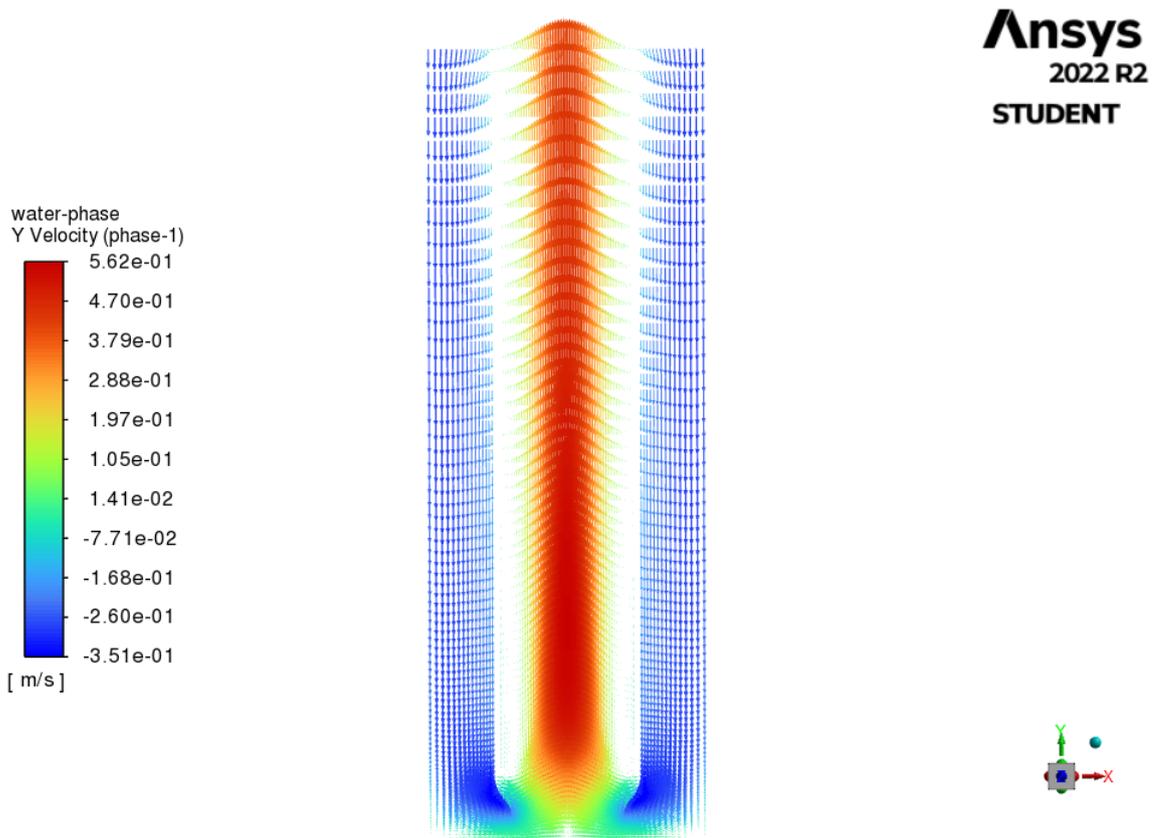
Fonte: Da Autora (2023).

Através das Figuras 29 e 30, é possível visualizar que a distribuição espacial de fração volumétrica da fase gasosa é aproximadamente a mesma para as duas alturas, o que confirma a análise já feita de que o perfil de escoamento da fase gasosa se altera muito pouco com a altura do biorreator. Além disso, observa-se que a maior concentração de bolhas se dá próxima aos limites inferior e superior do eixo z, indicando que a maior parte das bolhas escoam próxima às

paredes frontal e traseira da região do *riser*. E como já mencionado, verifica-se que a retenção gasosa aumenta em direção à região central do *riser*, ao longo do eixo x, não sendo observada a presença de bolhas próximas às paredes internas do biorreator, que separam as regiões do *riser* e *downcomer*.

A Figura 31 apresenta o perfil vetorial para a velocidade de circulação da fase líquida no plano xy, em $z = 0,025$ metros.

Figura 31 – Perfil vetorial da velocidade de circulação da fase líquida no plano xy.

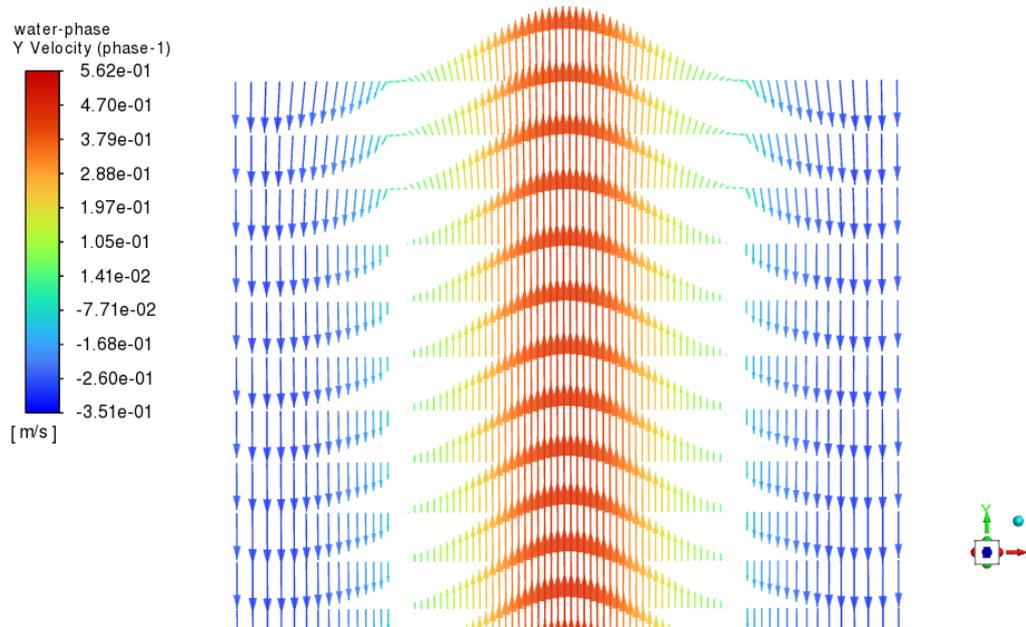


Fonte: Da Autora (2023).

Por meio da Figura 31, é possível verificar que após o líquido atingir metade da altura do biorreator, aproximadamente em $y = 0,36$ metros, o perfil de escoamento torna-se invariável com a altura, indicando que foi alcançado um perfil de escoamento completamente desenvolvido. Entretanto, observando-se a região de mistura, região de conexão entre *riser* e *downcomer* no topo do biorreator, não é possível visualizar a mudança de trajetória do líquido após o término de sua subida pelo *riser*. A Figura 32 permite analisar de forma mais detalhada o perfil vetorial de velocidade de circulação de líquido na região de mistura.

Figura 32 – Perfil vetorial de circulação de líquido no plano xy, com detalhe para a região de mistura do biorreator.

Ansys
2022 R2
STUDENT

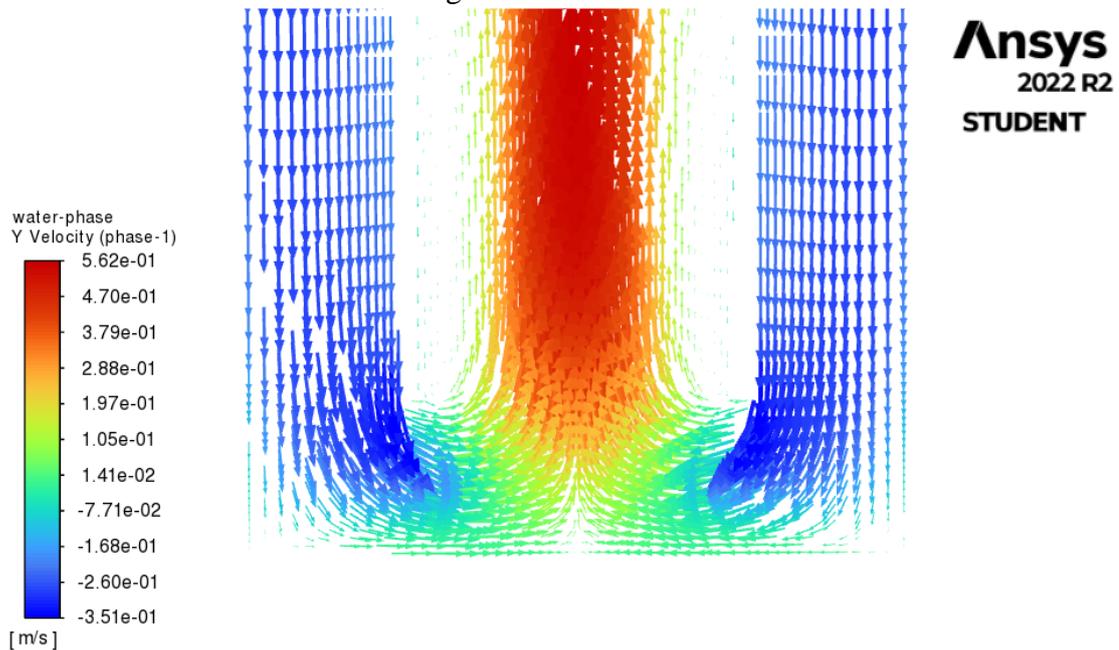


Fonte: Da Autora (2023).

Após uma análise detalhada do escoamento e geometria do biorreator, foi possível inferir que não houve recirculação da mistura gás-líquido pelo *downcomer* visto que na construção da geometria do biorreator não foi considerado o vão livre de topo, que é o próprio espaço preenchido somente por ar acima do nível de líquido. Dessa forma, o líquido que ascendeu pela região do *riser* não retornou para descer pelo *downcomer* visto que não houve altura suficiente da geometria para que esse movimento ocorresse, o que contribuiu para que a maior parte das bolhas em ascensão se desprendessem da mistura gás-líquido após atingirem o topo do biorreator, justificando assim a ausência de bolhas na região do *downcomer* conforme mostrado nas Figuras 26 e 28.

É importante ressaltar que o movimento descendente do líquido no *downcomer*, indicado pela orientação negativa dos vetores, é causado pela ascensão do líquido presente na base do biorreator, que é arrastado com as bolhas injetadas na entrada, deixando assim um espaço livre para ser ocupado pelo volume de líquido presente no *downcomer*. Esse fenômeno pode ser observado por meio da Figura 33, que permite visualizar de forma mais detalhada o perfil vetorial da velocidade de circulação da fase líquida na região da base do biorreator.

Figura 33 – Perfil vetorial de circulação de líquido no plano xy, com detalhe para a região da base do biorreator.



Fonte: Da Autora (2023).

Por meio da Figura 33 é possível visualizar o aumento considerável da velocidade da fase líquida após passar pela base do biorreator, sendo este aumento causado pela injeção das bolhas na região de entrada que escoam com velocidade suficiente para arrastar o líquido pelo *riser*. Também é possível observar que o movimento de descida do líquido do *downcomer* causa o estreitamento do perfil de escoamento da fase gasosa, conforme já mencionado e apresentado na Figura 28.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Através da realização do presente trabalho foi possível estudar o comportamento hidrodinâmico do sistema ar-água em um biorreator pneumático do tipo *airlift*, tendo como ferramenta para o estudo a fluidodinâmica computacional. De modo geral, é possível concluir que a modelagem computacional utilizada nas simulações CFD conseguiu reproduzir de maneira assertiva o fenômeno do escoamento ar-água na região do *riser* do biorreator estudado por Ziegenhein et al. (2016), enquanto que na região do *downcomer*, o mesmo não pode ser afirmado visto que não houve uma boa concordância entre os valores simulados e experimentais.

Na região do *riser*, o modelo de arraste de Grace et al. (1976) foi o que melhor aproximou os valores simulados dos experimentais, tanto para a retenção gasosa quanto para a velocidade de circulação de líquido. Do ponto de vista hidrodinâmico observou-se que a retenção gasosa é aproximadamente zero próxima às paredes internas do biorreator, aumentando ao longo do eixo x, em direção ao centro do *riser*. Ademais, verificou-se que na região da base do biorreator, as bolhas são empurradas pela movimentação do líquido que desce do *downcomer* causando uma curvatura no perfil da retenção gasosa nessa região e conseqüentemente um estreitamento no perfil de escoamento das bolhas, que apresenta pouca variação com a altura do biorreator. Com relação ao movimento ascendente da fase líquida no *riser*, observou-se que após atingir a metade da altura do biorreator, o regime de escoamento se torna completamente desenvolvido, indicando que a velocidade de circulação de líquido se torna constante com a altura do equipamento.

Na região do *downcomer*, houve uma boa aproximação entre os valores da velocidade de circulação de líquido obtidos através da simulação e os valores experimentais, porém para a retenção gasosa, os resultados simulados não foram satisfatórios, visto que, a presença da fase gasosa nessa região foi praticamente nula, ao contrário do que era esperado, considerando-se que os valores experimentais de retenção gasosa no *downcomer* variaram entre 0,08% e 0,21%. A ausência de bolhas nessa região foi causada pelo desprendimento das mesmas da fase líquida ao atingirem o topo do biorreator, visto que a mistura gás-líquido não retornou para descer pelo *downcomer* após subir pelo *riser*, em razão da altura da geometria do biorreator não ter sido suficiente para permitir tal movimento de retorno.

Portanto, considera-se que o presente trabalho trouxe contribuições positivas ao campo de estudo da hidrodinâmica de biorreatores pneumáticos, visto que foi possível validar uma metodologia para modelar o escoamento ar-água na região do *riser* em um biorreator *airlift*

através da técnica de CFD. Todavia, reitera-se a necessidade de um estudo mais detalhado acerca do comportamento hidrodinâmico da mistura ar-água na região do *downcomer*, para que seja possível modelar computacionalmente o escoamento real. Sugere-se que para trabalhos futuros, busque-se compreender melhor a influência do *design* utilizado na geometria da região de mistura, bem como alternativas de refinamento da malha na região do *downcomer* e possíveis modelos interfaciais que possam influenciar no fenômeno de escoamento estudado.

REFERÊNCIAS

- BADINO, A. C.; MENDES, C. E.; CERRI, M. O.; ESPERANÇA, M. N.; BETTEGA, R. Biorreatores pneumáticos: simples e eficientes. **Revista Brasileira de Engenharia Química**, v. 32, p. 24-33, 2016.
- BICALHO, I. C. **Estudo experimental e de simulação por CFD de escoamentos em seções anulares com excentricidade variável e obstrução parcial da coluna**. 2015. Tese (Doutorado em Engenharias) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2015. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/15087>. Acesso em: 5 set. 2022.
- CERRI, M. O. **Avaliação de transferência de calor e massa de um biorreator airlift de circulação interna de bancada para a produção de ácido clavulânico**. 2005. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2005. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/handle/ufscar/4165>. Acesso em: 3 ago. 2022.
- CHISTI, M. Y. **Air-lift bioreactors**. New York, Elsevier, 1989.
- DAVIDSON, L. **An Introduction to Turbulence Models**. Department of Thermo and Fluid Dynamics. Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, 2003. Disponível em: http://www.tfd.chalmers.se/~lada/postscript_files/kompendium_turb.pdf. Acesso em: 15 set. 2022.
- DUARTE, C. R. **Estudo experimental e de simulação da fluidodinâmica e recobrimento em leito de jorro**. 2006. Tese (Doutorado em Engenharias) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2006. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/15049>. Acesso em: 5 set. 2022.
- ESPERANÇA, M. N. **Contribuição ao estudo do desempenho de biorreatores airlift de circulação interna: análise das condições operacionais e da geometria do equipamento**. 2018. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2018. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/handle/ufscar/10107>. Acesso em: 3 ago. 2022.
- GHASEMI, H.; HOSSEINI, S. H. Investigation of hydrodynamics and transition regime in an internal loop airlift reactor using CFD. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 29, n. 4, p. 821-833, 2012.
- GIMBUM, J.; RIELLY C. D; NAGY, Z. K. Modelling of mass transfer in gas-liquid stirred tanks agitated by Rushton turbine and CD-6 impeller: A scale-up study. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 87, p. 437-451, 2009.
- GRACE, J. R.; WAIREGI, T.; NGUYEN, T. H. Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids. **Transactions of the Institution of Chemical Engineers**, v. 54, p. 167-173, 1976.
- JOSHI, J. B. Computational flow modelling and design of bubble column reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 56, p. 5893-5933, 2001.
- KUNDU, P.K.; COHEN I.M. **Fluid Mechanics**. 2 ed. San Diego, Academic Press, 2002.

LIEW, S. Y.; GIMBUN, J. CFD Simulation on the Hydrodynamics in Gas-Liquid Airlift Reactor. **Chemical Product and Process Modeling**, v. 12, n. 4, 2017.

LUCAS, D.; PRASSER, H.-M.; MANERA, A. Influence of the lift force on the stability of a bubble column. **Chemical Engineering Science**, v. 60, p. 3609-3619, 2005.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2 ed. Rio de Janeiro, LTC Editora, 2004.

MAVADDAT, P.; MOUSAVI, S.M.; AMINI, E.; AZARGOSHASB, H.; SHOJAOSADATI, S. A. Modeling and CFD-PBE simulation of an airlift bioreactor for PHB production. **Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering**, v. 9, n. 4, p. 562-573, 2014.

MENDES, Caroline Eliza. **Avaliação das condições hidrodinâmicas, de transferência de oxigênio e de cisalhamento em diferentes modelos e escalas de reatores pneumáticos**. 2016. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2016. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/handle/ufscar/7928>. Acesso em: 10 ago. 2022.

RODRIGUEZ, Guilherme Youssef. **Avaliação de parâmetros globais de desempenho de biorreatores pneumáticos através de fluidodinâmica computacional**. 2015. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2015. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/handle/ufscar/7814>. Acesso em: 3 ago. 2022.

RAHIMI, M. J.; SITARAMAN, H.; HUMBIRD, D.; STICKEL, J. J. Computational fluid dynamics study of full-scale aerobic bioreactors: Evaluation of gas-liquid mass transfer, oxygen uptake, and dynamic oxygen distribution. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 139, p. 283-295, 2018.

SANTOS, Kássia Graciele dos. **Estudo da fluidodinâmica do leito de jorro por CFD com malhas tridimensionais**. 2008. Dissertação (Mestrado em Engenharias) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2008. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/15109>. Acesso em: 10 set. 2022.

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

SILVA JÚNIOR, João Lameu da. **Investigação do escoamento bifásico gás-líquido em uma coluna de bolhas retangular por meio da técnica de CFD**. 2011. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2011. Disponível em: <https://hdl.handle.net/20.500.12733/1616868>. Acesso em: 10 ago. 2022.

STIRIBA, Y.; GOURICH, B.; VIAL, C. Numerical modeling of ferrous iron oxidation in a split-rectangular airlift reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 170, p. 705-719, 2017.

THOMASI, Sérgio Scherrer. **Avaliação de parâmetros de desempenho de três modelos de biorreatores**

pneumáticos de bancada. 2010. Dissertação (Mestrado em Ciências Exatas e da Terra) – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2010. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/handle/ufscar/6462>. Acesso em: 4 ago. 2022.

TABIB, M.V.; ROY, S.A.; JOSHI, J.B. CFD simulation of bubble column – An analysis of interphase forces and turbulence models. **Chemical Engineering Science**, v. 139, p. 589-614, 2008.

THAKRE, S.S.; JOSHI, J.B. CFD simulation of bubble column reactors: importance of drag force formulation. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 5055-5060, 1999.

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

WADAUGSORN, K., LIMTRAKUL, S., VATANATHAM, T., RAMACHANDRAN, P.A. Hydrodynamic behaviors and mixing characteristics in an internal loop airlift reactor based on CFD simulation. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 113, p. 125–139, 2016.

ZIEGENHEIN, T.; ZALUCKY, J.; RZEHAKE, R.; LUCAS, D. On the hydrodynamics of airlift reactors, Part I: Experiments. **Chemical Engineering Science**, v. 150, p. 54-65, 2016.

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