

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DO DIÂMETRO MÉDIO DA BOLHA NA TAXA DE CISALHAMENTO MÉDIA DE UMA COLUNA DE BOLHAS ATRAVÉS DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Data de aceite: 02/05/2023

Ana Carolina Borges Silva

Universidade Federal de São Carlos,
Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Química Departamento de
Engenharia Química

Mateus Nordi Esperança

Instituto Federal de Educação, Ciência
e Tecnologia de São Paulo, Campus
Capivari

Alberto C. Badino

Universidade Federal de São Carlos,
Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Química Departamento de
Engenharia Química

Rodrigo Béttega

Universidade Federal de São Carlos,
Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Química Departamento de
Engenharia Química

RESUMO: Biorreatores pneumáticos são equipamentos amplamente utilizados na indústria por proporcionarem adequada transferência de calor e massa, rápida mistura e boa suspensão de sólidos. Neste trabalho foram avaliados numericamente por fluidodinâmica computacional, os

efeitos do diâmetro das bolhas na taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) em um biorreator coluna de bolhas. Os resultados obtidos foram comparados com dados calculados por correlação semiempírica. O modelo Euleriano de dois fluidos foi aplicado nas simulações multifásicas gás-líquido para três diâmetros médios de bolha e vazões específicas de ar de 1,0 a 5,0 vvm. As simulações em que se considerou o menor diâmetro de bolha (4 mm) apresentaram os resultados com os maiores valores de $\dot{\gamma}_m$ encontrados para a maior vazão de ar específica aplicada neste estudo (5 vvm).

INTRODUÇÃO

Em bioprocessos submersos, o movimento do líquido no interior do reator, marcado por uma dada velocidade de circulação de líquido, gera turbulência no meio reacional. O diâmetro de bolha (d_b) é um parâmetro de extrema importância para a compreensão tanto dos fenômenos de transferência de massa, quanto de movimento. A formação de bolhas em sistemas gás-líquido sofre a influência das condições operacionais (vazão de gás,

temperatura e pressão), geometria do equipamento (geometria do aspersor e diâmetro dos orifícios), além das propriedades físicas dos fluidos (densidade, viscosidade, propriedades reológicas, tensão superficial e polaridade). Ainda, a quebra e/ou coalescência de bolhas, que refletem diretamente no tamanho da bolha, são fenômenos que apresentam alta sensibilidade a quaisquer alterações no processo (Kulkarni e Joshi, 2005).

O tamanho da bolha influencia na transferência de massa e nos parâmetros hidrodinâmicos, como a taxa de cisalhamento média. Em simulações de escoamento multifásico, as forças interfaciais podem desempenhar um papel importante devido à transferência de momento através da interface, e isso influencia fortemente os padrões dinâmicos dos fluidos. Em colunas de bolhas, destacam-se as forças de arrasto, sustentação, dispersão turbulenta e massa virtual (Tabib *et al.*, 2008). Por essas razões, a fluidodinâmica computacional (CFD) tem sido amplamente aplicada na modelagem e simulação desses sistemas de escoamento (Ziegenhein *et al.*, 2017; Yang *et al.*, 2018). Neste trabalho, a retenção gasosa global e a taxa de cisalhamento média de um biorreator coluna de bolhas de seção quadrada foram avaliadas por meio de simulações por CFD e comparadas aos resultados obtidos experimentalmente e por meio de correlações semiempíricas, a fim de se comprovar a validade do modelo matemático aplicado.

METODOLOGIA

Modelagem matemática e simulação CFD

Foi analisado um biorreator de coluna de bolhas de 10 L consistindo de uma coluna de seção transversal quadrada com lados medindo 142 mm, altura total de 755 mm e altura do líquido de 510 mm contendo um aspersor tipo cruzeta de 180 orifícios instalado na base. Simulações e experimentos foram realizados utilizando água como fase líquida e ar atmosférico como fase gasosa, alimentado com vazões específicas de ar variando de 1 a 5 vvm.

O modelo Euleriano de dois fluidos foi usado na modelagem, assumindo todos os fluidos com propriedades constantes, sendo a água considerada como fase contínua ($\rho_L=997 \text{ kg.m}^{-3}$, $\mu_L=8,49.10^{-4} \text{ Pa. S}$ e $\sigma=0,072 \text{ N.m}^{-1}$) e ar como fase dispersa ($\rho_G=1,2 \text{ kg.m}^{-3}$). Para expressar as forças de arrasto e sustentação, foram adotados os modelos propostos por Grace *et al.* (1976) e Tomiyama (1998), tomando como constante a tensão superficial (σ). A turbulência foi calculada com o modelo padrão κ - ϵ , sendo utilizados os valores das constantes de $C_\mu=0,09$, $C_{\epsilon_1}=1,44$, $C_{\epsilon_2}=1,92$, $\sigma_\kappa=1$ e $\sigma_\epsilon=1,3$. A condição de contorno para a injeção de ar foi definida como a velocidade prescrita na superfície que representa os orifícios do aspersor, com valores variando de 4,57 a 22,86 m/s em cada orifício, compreendendo as vazões de ar de 1 a 5 vvm. Além disso, foi considerada pressão de saída prescrita (1 atm) no topo do biorreator e condição de não-deslizamento nas

paredes, para ambas as fases.

Um tempo de 5 segundos foi simulado nos arranjos propostos com intervalo de tempo fixo de 10^{-4} s e 25 iterações por passo de tempo. O critério de convergência adotado foi $RMS < 10^{-4}$. A configuração geral da simulação por CFD está descrita na Tabela 1. O *software* Ansys Fluent® 14.5 foi usado para resolver as equações governantes. O *hardware* utilizado consistiu em um computador equipado com um processador AMD Ryzen 7 3700x de 8 núcleos (3,59 GHz, 32 GB de RAM).

Informação	Condição usada
Modelo multifásico	Euler
Modelo de turbulência	κ - ε standart
Gravidade	9,81 m/s ²
Tensão superficial	0,072 N/m
Interpolação para Eq. Momento	Second Order Implicit
Interpolação para Eq. Fração Volumétrica	First Order Upwind
Interpolação para Eq. Energia Cinética Turbulenta	Second Order Upwind
Interpolação para Eq. Taxa Dissipação Cinética	Second Order Upwind
Regime Transiente	25 iterações/time step, time step= 10^{-4} s, 50.000-time steps, tempo simulado=5 s
Fatores de Relaxação	entre 0.5 e 1.0

Tabela 1: Modelos e parâmetros numéricos das simulações realizadas.

O biorreator, as geometrias do aspensor e a malha computacional estão ilustrados na Figura 1 e foram gerados usando as ferramentas *Design Modeler* e *Meshing*, ambas da suíte *Workbench* incluída no pacote Ansys®. Uma malha estruturada composta por elementos hexaédricos foi gerada, na qual o espaçamento mínimo entre nós foi definido como 0,5 mm na região do aspensor e 4 mm ao longo do reator. A malha apresentou valores de assimetria inferiores a 0,5 e valores de qualidade ortogonal superiores a 0,8, indicando uma boa qualidade da malha. Ainda, os elementos da malha apresentaram valores de razão de aspecto inferiores a 1,9, o que confirmou a qualidade da malha utilizada.

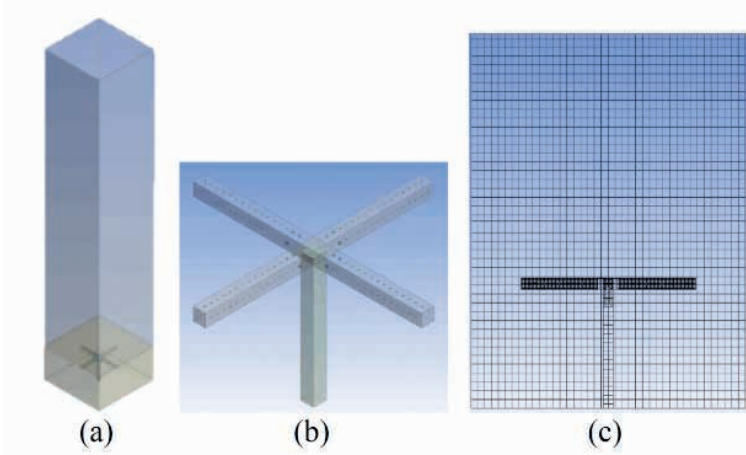


Figura 1: (a) Geometria computacional do biorreator de coluna de bolhas; (b) aspersor tipo cruzeta de 180 orifícios; (c) Detalhes da malha.

As conservações da massa e do momento para uma fase genérica i são representadas pelas Equações 1 e 2, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \cdot \rho_i) + (\alpha_i \cdot \rho_i \cdot v_i) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \cdot \rho_i \cdot v_i) + \nabla \cdot (\alpha_i (\rho_i \cdot v_i \otimes v_i)) = -\alpha_i \cdot \nabla P_i + \nabla \cdot (\alpha_i \cdot \mu_{\text{eff},i} (\nabla v_i + (\nabla v_i)^T)) + \alpha_i \cdot \rho_i \cdot g \cdot M_i \quad (2)$$

A turbulência foi modelada usando o modelo padrão k - ε , pois oferece resultados precisos e requer esforço computacional moderado, sendo um método estável e robusto (Rodriguez *et al.*, 2015). As equações de transporte para a energia cinética turbulenta (k) e sua taxa de dissipação (ε) são descritas pelas Equações 3 e 4:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \cdot \rho_i \cdot k_i) + \nabla \cdot (\alpha_i (\rho_i \cdot v_i \cdot k_i - (\mu_i + \frac{\mu_{t,i}}{\sigma_k}) \nabla k_i)) = \alpha_i \cdot (P_i - \rho_i \cdot \varepsilon_i) \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \cdot \rho_i \cdot \varepsilon_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \cdot \rho_i \cdot v_i \cdot \varepsilon_i - (\mu_i + \frac{\mu_{t,i}}{\sigma_\varepsilon}) \nabla \varepsilon_i) = \alpha_i \cdot \frac{\varepsilon_i}{k_i} (C_{\varepsilon 1} \cdot P_i - C_{\varepsilon 2} \cdot \rho_i \cdot \varepsilon_i) \quad (4)$$

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

Na modelagem matemática, as forças interfaciais de arrasto e sustentação foram representadas por correlações que estimam seus coeficientes. O coeficiente de arrasto (C_D) foi estimado de acordo com a Equação 5 (Grace *et al.* (1976), que considera as diferentes formas de bolhas, como esféricas (Equação 6), touca (Equação 7) e elipses (Equação 8).

$$C_D = \max(C_D^{\text{sphere}}, \min(C_D^{\text{ell}}, C_D^{\text{cap}})) \quad (5)$$

$$C_D^{\text{sphere}} = \frac{24}{Re_b} (1 + 0.15Re_b^{0.687}) \quad (6)$$

$$C_D^{\text{cap}} = \frac{8}{3} \quad (7)$$

$$C_D^{\text{ell}} = \frac{4}{3} \frac{gd_B (\rho_L - \rho_G)}{v_{\infty}^2 \rho_L} \quad (8)$$

A força de sustentação pode ser correlacionada com a velocidade relativa e a velocidade da fase líquida, sendo expressa pela Equação 9. Esta força age lateralmente ao escoamento em objetos assimétricos, sendo que no caso das bolhas presentes em um biorreator pneumático, a força de sustentação é uma das responsáveis por movimentar as bolhas na direção radial (Rodriguez, 2015).

$$F_L = C_L \alpha_l \rho_g (\vec{v}_l - \vec{v}_g) \cdot \nabla \cdot \vec{v}_g \quad (9)$$

O coeficiente de sustentação foi estimado por meio de correlações propostas na literatura. Neste estudo, foi utilizado o coeficiente descrito pela Equação 10 (Tomiya, 1998), pois se refere a sistemas ar-água, aplicando-se a bolhas deformáveis, sendo dependente do número de Eötvos (Equação 11).

$$C_L = \begin{cases} \min[0.288 \tanh(0.121 Re_b; f(E\ddot{o}))] \\ f(E\ddot{o}) & 4 < E\ddot{o} \leq 10 \\ -0,27 & 10 < E\ddot{o} \end{cases} \quad (10)$$

$$E\ddot{o} = \frac{(\rho_L - \rho_G) g d_b^2}{\sigma} \quad (11)$$

As condições simuladas foram descritas como estudos de caso e são apresentadas na Tabela 2. Para entender a nomenclatura, o estudo de caso LF5-1, por exemplo, considera as seguintes condições $d_b=5$ mm e $\phi_{ar}=1$ vvm, respectivamente.

Caso	Diâmetro da bolha (mm)	Vazão(vvm)
LF4-1		1
LF4-3	4	3
LF4-5		5
LF5-1		1
LF5-3	5	3
LF5-5		5
LF6-1		1
LF6-3	6	3
LF6-5		5

Tabela 2: Nomenclatura dos casos simulados utilizando a fluidodinâmica computacional

Taxa de Cisalhamento Média ($\dot{\gamma}_m$)

Os valores de $\dot{\gamma}_m$ foram estimados por meio da correlação semiempírica proposta por Pérez *et al.* (2006) na qual, para reatores colunas de bolhas, a única fonte de agitação é a entrada de energia pneumática fornecida pela expansão isotérmica do gás que entra pelo aspersor. Nesta correlação P_G , k e n referem-se ao consumo de potência e aos índices de consistência e escoamento do líquido, respectivamente. Para tais casos, a taxa de cisalhamento média depende exclusivamente da velocidade superficial do gás e das propriedades reológicas do fluido, considerando os dados experimentais de retenção gasosa ($\bar{\alpha}_G$), conforme Equação 12.

$$\dot{\gamma}_m = \left(\frac{1 P_G}{K V} \right)^{\left(\frac{1}{n+1} \right)} \quad (12)$$

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

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados das simulações em termos taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}) estão ilustrados na Figura 2 e comparados aos dados obtidos por meio da correlação semiempírica de Pérez *et al.* (2006)

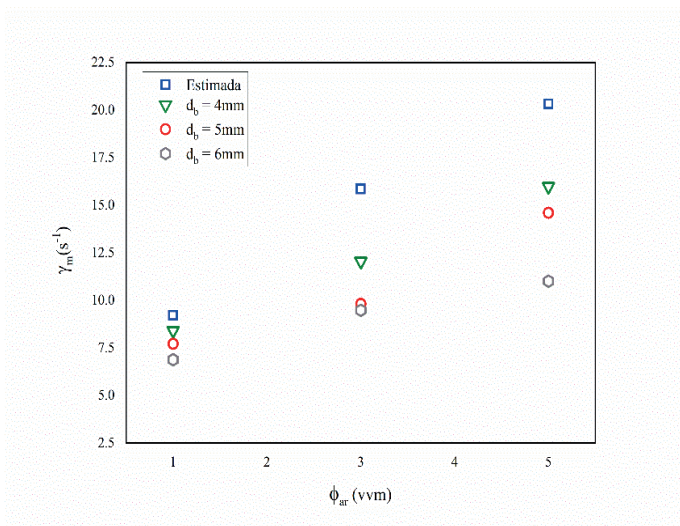


Figura 2 - Taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) em função da vazão específica de ar (ϕ_{ar}).

Nas maiores vazões de alimentação de ar (3 e 5 vvm), os valores de taxa de cisalhamento média obtidos por meio de simulação foram inferiores aos valores estimados

para todos os diâmetros de bolha (4, 5 e 6 mm). Além disso, observa-se que a taxa de cisalhamento média ($\dot{\gamma}_m$) exibiu menores valores para maiores diâmetros de bolha, sendo estes valores divergentes daqueles estimados pela Equação 12, função da vazão de ar, do consumo de potência e da retenção gasosa.

Os valores encontrados para $\dot{\gamma}_m$ variaram de 9,8 a 17,2 s⁻¹ para o diâmetro de 4 mm, 8,9 a 15,7 s⁻¹ para o diâmetro de 5 mm e 7,9 a 13,2 s⁻¹ para o maior diâmetro aplicado (6 mm). Apesar do erro de previsão deste parâmetro aumentar com o aumento da vazão de ar, uma vez que os resultados do CFD levam em conta todo o volume do biorreator, eles apresentaram a mesma ordem de grandeza dos valores obtidos por meio da correlação, a qual utilizou os valores experimentais de retenção gasosa global deste trabalho. Para $\dot{\gamma}_m$, as diferenças relativas encontradas para os diâmetros de 4, 5 e 6 mm, em termos percentuais, foram de 48,7; 33,1 e 25,0%, respectivamente, comprovando que o diâmetro de 4 mm demonstrou resultados mais próximos aos obtidos pela correlação, a qual utiliza dados experimentais deste trabalho. Os resultados encontrados também demonstram a importância da consideração da força de sustentação no modelo matemático utilizado.

Esperança *et al.* (2019) avaliaram a influência da geometria de biorreatores airlift na taxa de cisalhamento média utilizando diferentes fluidos Newtonianos e não-Newtonianos, considerando somente a força de arrasto. Os autores relataram que, para o sistema água-ar, as taxas de cisalhamento médias obtidas a partir de simulação por CFD divergiram dos valores previstos por correlações que utilizam os perfis de velocidade do líquido, porém os valores apresentaram a mesma ordem de grandeza e comportamento em relação à velocidade do líquido.

CONCLUSÃO

Na comparação entre os diâmetros de bolha médios e constantes utilizados neste estudo (4, 5 e 6 mm), a utilização do menor diâmetro (4 mm) gerou maior concordância entre os resultados estimados por fluidodinâmica computacional e calculados por correlação para a taxa de cisalhamento média, sendo os melhores ajustes para o diâmetro de 4 mm observados para a maior vazão específica de ar aplicada neste estudo (5 vvm).

NOMENCLATURA

C_D	Coeficiente de arrasto	-
C_D^{elip}	Coeficiente de arrasto para bolhas em formato de elipse	-
C_D^{esf}	Coeficiente de arrasto para bolhas em formato de esfera	-
C_D^{touca}	Coeficiente de arrasto para bolhas em formato de touca	-
$C_{\epsilon 1}$	Constante do modelo de turbulência $k - \epsilon$	-
$C_{\epsilon 2}$	Constante do modelo de turbulência $k - \epsilon$	-
C_μ	Constante do modelo de turbulência $k - \epsilon$	-

$C_{\mu p}$	Constante do modelo de turbulência $k - \epsilon$	-
d_B	Diâmetro das bolhas de ar	mm
κ	Energia cinética turbulenta	J/kg
α_G	Retenção gasosa global	-
ϵ	Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta	J/kg
$\dot{\gamma}_m$	Taxa de cisalhamento média	s^{-1}
μ_i	Viscosidade dinâmica da fase "i"	Pa.s
ρ_i	Densidade da fase "i"	$kg.m^{-3}$

REFERÊNCIAS

DENG, Z. *et al.* Mass-transfer behaviors in alcohol solutions in an internal-loop airlift reactor of 5-m height. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 50, n. 20, p. 11537–11543, 2011.

EKAMBARA, K.; DHOTRE, M.T. CFD simulation of bubble column. *Nuclear Engineering and Design*, 2010, 240: 936-969.

ESPERANÇA, M.N., MENDES, C.E, RODRIGUEZ, G.Y., CERRI, M.O., BÉTTEGA, R., BADINO, A.C. Average shear rate in airlift bioreactors: searching for the true value, *Bioprocess Biosyst. Eng*, 2019, 42: 995–1008.

FREITAS, C.; TEIXEIRA, J. A. Oxygen mass transfer in a high solids loading three-phase internal-loop airlift reactor. *Chemical Engineering Journal*, v. 84, n. 1, p. 57–61, set. 2001.

GRACE, J.R., WAIREGI, T., NGUYEN, T.H. Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids, *Process Saf. Environ. Prot.* 1976, 54:167–173.

KULKARNI, A. A; JOSHI, J. B. Bubble formation and bubble rise velocity in gas - liquid systems: A Review. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 44, p. 5873–5931, 2005.

LABORDE-BOUTET, C., LARACHI, FA., DROMARD, N., DELSART, O., SCHWEICH, D. CFD simulation of bubble column flows: Investigations on turbulence models in RANS approach. *Chemical Engineering Science*, 2009, 64: 4399-4413.

LI, W., ZHONG, W. CFD simulations of hydrodynamics of gas – liquid – solid three-phase bubble column. *Powder Technology*, 2015, 766-788.

PAINMANAKUL, P. *et al.* Effect of surfactants on liquid-side mass transfer coefficients. *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 22, p. 6480–6491, nov. 2005.

PEREZ, J. A. S. *et al.* Shear rate in stirred tank and bubble column bioreactors. *Chemical Engineering Journal*, v. 124, n. 1-3, p. 1-5, 2006.

RODRIGUEZ, G.Y., VALVERDE-RAMIREZ, M., MENDES, C.E., BETTEGA, R., BADINO, A.C. Global performance parameters for different pneumatic bioreactors operating with water and glycerol solution: experimental data and CFD simulation, *Bioprocess Biosyst. Eng.*, 2015, 38: 2063–2075.

TABIB, M. V., ROY, S. A., JOSHI, J. B. CFD simulation of Bubble column-an analysis of interphase forces and turbulence