

ESTUDO EM FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL DOS VALORES DE COEFICIENTES DE TRANSPORTE DE OXIGÊNIO EM SISTEMA DE TANQUE AGITADO POR AGITADORES RUSHTON PARA CARACTERIZAÇÃO DE PROCESSOS BIOLÓGICOS

AMB PERALTA¹, JL de PAIVA¹, EM OTA² e RAM PICCOLI²

¹ Universidade do Estado de São Paulo, Escola Politécnica, Departamento de Engenharia Química

² Instituto de Pesquisa e Tecnologia da Universidade de São Paulo, Laboratório de Bionanotecnologia

E-mail para contato: andre.peralta@usp.br

RESUMO –Realizou-se, através da implementação do software CFX da Ansys Inc, a simulação de um sistema bifásico de ar e água com monodispersão de tamanhos de bolhas em sistema de tanque agitado por três turbinas Rushton e implementação de um modelo $k-\epsilon$ de turbulência para a verificação dos campos de velocidades e validação dos valores de coeficientes de transporte de oxigênio obtidos através do método de Cooper

1. INTRODUÇÃO

O principal objetivo na implementação de cultivos com o uso de microrganismos é o incremento da produtividade (Azargoshasb *et al.*, 2015) que é uma função de diversos fatores do processo produtivo, como eficiência de mistura e coeficiente de transporte de oxigênio (Zhang *et al.*, 2009).

O uso de ferramentas de fluidodinâmica computacional (CFD) tem como vantagens a possibilidade de avaliar localmente as características do processo assim como reduzir os custos experimentais (Zhang *et al.*, 2009). Devido à grande importância do transporte de oxigênio em cultivos aeróbicos, buscou-se avaliar, em uma condição específica de aeração e agitação, os valores de k_{La} para diferentes tamanhos de bolhas em um sistema de com as propriedades físicas do ar e água a 30 °C.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

Os trabalhos de simulação foram realizados com base em um reator de 8L de volume útil, com quatro chicanas posicionadas simetricamente ao longo do reator, agitado por três turbinas do tipo Rushton de 75mm de diâmetro, com espaçamento de um diâmetro entre si. A entrada de bolhas é realizada por um aspersor de 12mm de diâmetro, composto de dez entradas de gás, posicionado

entre o último agitador e o fundo do tanque. Implementou-se um modelo de simulação no software Ansys CFX 19.3 que contempla a interação entre a fase líquida, considerada com as propriedades da água, e gasosa, ar composto de uma mistura ideal entre oxigênio 21% e nitrogênio 79%.

Para a avaliação da turbulência do sistema foi implementado um modelo k- ϵ padrão, conforme sugerido por diversas literaturas (Azargoshasb *et al.*, 2015; Haringa *et al.*, 2018; Sarkar *et al.*, 2018), enquanto que a avaliação das fases foi feita de forma Euleriana conforme sugerido pelas mesmas literaturas. Considerou-se o modelo de arraste universal conforme indicado por Azargoshasb *et al.* (2015), Haringa *et al.* (2018), Sarkar *et al.* (2016), entre outras.

A malha para realização das simulações foi gerada pelo software Ansys Meshing, sendo composta de cerca de 8.10^5 elementos tetraédricos, em concordância com literaturas de sistemas com volumes similares ao trabalhado neste projeto (Azargoshasb *et al.*, 2016; Kerdouss *et al.*, 2007). Para melhor descrever as regiões próximas aos agitadores e às chicanas, implementou-se a ferramenta de captura de proximidade e de curvatura do software, o que eleva o custo computacional, mas garante que a qualidade ortogonal da maior parte dos elementos se encontre entre 0,5 e 1.

O cálculo do coeficiente de transporte de oxigênio é realizado com base na teoria de penetração de Higbie conforme sugerido por diversas literaturas (Azargoshasb *et al.*, 2016; Sarkar *et al.*, 2018; Zhang *et al.*, 2009). A Equação 2 enuncia o cálculo do $k_L a$.

$$k_L a = \left(\frac{2}{\pi} \sqrt{D_{O_2}} \left(\frac{\epsilon}{\nu_L} \right)^{\frac{1}{4}} \right) 6 \frac{r_g}{d_b} \quad (1)$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram simulados três tamanhos diferentes de diâmetro para a fase gasosa dispersa, de 0,8 mm, 1 mm e 1,5 mm. Para estes casos, foram avaliados os perfis de velocidades, a dispersão do gás no meio (“holdup”) e a média volumétrica do coeficiente de transporte de oxigênio.

3.1. Perfis de velocidades

A Figura 1 mostra os perfis de velocidade da fase contínua do sistema agitado a 400 RPM. Como pode-se notar na Figura 1 (A), o sistema monofásico apresenta formação de grandes vórtices na região abaixo do primeiro agitador, principalmente devido à geometria do aspersor próximo ao fundo do tanque. Na região acima do terceiro agitador encontram-se turbilhões de menor velocidade. Na área intermediária do tanque os vórtices se apresentam na região de influência dos fluxos ascendentes e descendentes gerados entre agitadores. Já na Figura 1 (B), nota-se a influência do fluxo de gás, principalmente na região do primeiro agitador, diminuindo a velocidade dos vórtices e deslocando-os para cima. Os resultados são condizentes com os trabalhos apresentados por Zhang *et al.* (2009) e Azargoshasb *et al.* (2015).

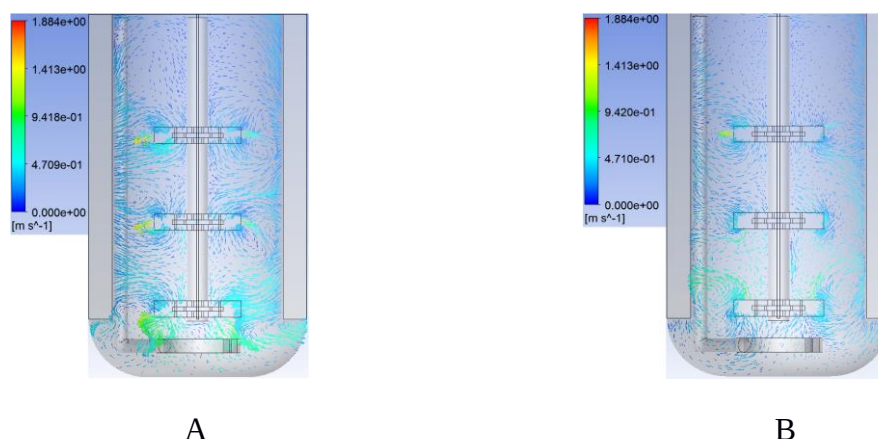


Figura 1 – Perfis de velocidade para o sistema agitado a 400 RPM (A) sem a presença de gás, (B) com a presença de gás a uma vazão de 1,25 VVM e bolhas de 1 mm.

3.2. Holdup e k_{La}

Conforme verificado na Figura 2 o aumento do tamanho das bolhas ocasiona em uma dispersão menos uniforme de gás no tanque. Nota-se que existe uma concentração de gás na região próxima à haste central dos agitadores. Esse fato é consistente com o perfil de velocidades, devido à formação da zona de influência dos fluxos ascendentes e descendentes dos agitadores adjacentes, formando zonas de baixas velocidades dificultando a dispersão.

A Tabela 1 mostra as médias volumétricas de k_{La} obtidas em cada simulação, assim como o valor calculado pelo método de Cooper. Nota-se que o sistema de bolhas de 0.8 mm apresentou o valor mais próximo ao esperado. A presença de um sistema com balanço populacional de tamanhos de bolhas pode ser capaz de prever os resultados de forma mais acurada e está sendo desenvolvido para que haja um maior incremento na capacidade preditiva do modelo.

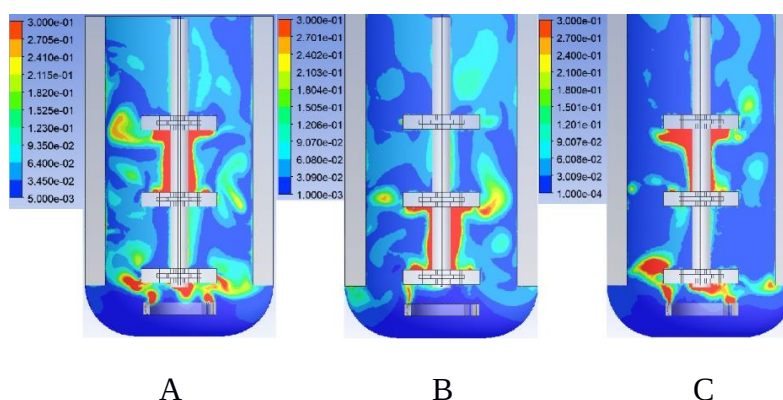


Figura 2 – Perfis de distribuição de gás instantâneos a 400 RPM e aeração de 1.25 VVM para (A) bolhas de 0,8 mm, (B) bolhas de 1 mm, (C) bolhas de 1,5 mm.

Tabela 1 – Valores de k_{La} para as diferentes condições simuladas

Diâmetro (mm)	K_{La} (h^{-1})	Diferença (%)	Cooper (h^{-1})
0.8	452	12,4	396
1	247	60,3	
1,5	151	162,2	

4. CONCLUSÃO

Verificou-se o caráter preditivo das simulações, obtendo valores de k_{La} atingindo uma diferença percentual para os valores previstos pelo método de Cooper de até 12.4%. Notou-se também a vantagem do modelo em fornecer um entendimento sobre o perfil de velocidades do sistema. Espera-se que um sistema trifásico e com a presença de balanço populacional de bolhas possa elevar ainda mais os entendimentos sobre os processos biológicos contemplados.

5. AGRADECIMENTOS

Agradeço à Escola Politécnica da USP, ao IPT e à Fapesp por possibilitarem a realização deste trabalho, dando condições e apoio para a realização do projeto.

6. NOMENCLATURA

d_b : Diâmetro da bolha (m); D_{O_2} : Difusividade do oxigênio (m^2/s); k_{La} : Coeficiente de transporte de oxigênio (h^{-1}); r_g : fração volumétrica de gás; ϵ : Dissipação de energia cinética turbulenta (m^2/s^3); ν_L : Viscosidade cinemática do líquido (m^2/s)

7. REFERÊNCIAS

- AZARGOSHASB, H, MOUSAVI, S.M, JAMIALAHMADI, O, SHOJAPSADATI, S.A, MOUSAIVI, S.B. Three-phase CFD simulation coupled with population balance equations of anaerobic syntrophic acidogenesis and methanogenesis reactions in a continuous stirred bioreactor. *Ind. Eng. Chem. J*, v. 94, p. 21-32, 2015.
- HARINGA, C. et al. Computational fluid dynamics simulation of an industrial *P. chrysogenum* fermentation with a coupled 9-pool metabolic model: Towards rational scale-down and design optimization. *Chem Eng Sci*. v. 175, p. 12–24, 2018.
- KERDOUSS, F. BANNARI, A. PROULX, P.; BANNARI, R. SKRGA, M. LABRECQUE, Y. Two-phase mass transfer coefficient prediction in stirred vessel with a CFD model. *Comp. Chem. Eng*, v. 32, p. 1943-1995, 2007.
- SARKAR, J. SHEKHAWAT, L.K. LOOMA, V. RATHORE, A.S. CFD of mixing of multi-phase flow in a bioreactor using population balance model. *Biotechnol Prog*. V. 32, 3, p. 628 – 613, 2016.
- ZHANG, H.; ZHANG, K.; FAN, S. CFD simulation coupled with population balance equations for aerated bioreactors. *Eng. Life Sci*, v. 9, p. 421–430, 2009